C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe

Quantum Mechanics

B. "Madde" parçacıklar ve "madde" dalgalar.

"Ya da Kuantum Mekaniğinin kısa tarihi"

1. de Broglie: Fotonun keşfine paralel olarak, atomik emisyon ve absorpsiyon (yayınım ve soğurulma) deneylerinden elde edilen spektrum klasik fiziğin açıklayamadığı bir takım ince çizgilerden oluşuyordu. Başka bir ifadeyle, atomlar sadece belli frekanslarda foton yayımlıyor ya da soğuruyor. Bu gözlem, atomun enerjisinin kuantize olduğu kabulüyle kolayca açıklanabilir. Tüm yapılması gereken atomun enerjisinin kesikli E_i $(i=1,2,\ldots n,\ldots)$ değerleri olduğunu kabul etmek, fotonun yayınımı ve ya soğurulması atomun bu kesikli enerji değerlerinden birine geçmesiyle mümkündür demekle eşdeğer olacak. Enerjinin korunumu gereği fotonun frekansı ν_{ij}

$$h\nu_{ij} = |E_i - E_j| \qquad \text{(B-1)}$$ eşitliğini sağlamalı.

Sadece (B-1) eşitliğini sağlayan frekanslarda fotonlar yayınlanabilir, soğurulabilir.

Bu tür kesikli enerji seviyelerinin varlığı Frank-Hertz deneyleriyle de onaylandı. Bohr ve Sommerfeld bu deneylerin sonuçlarını, atomların bir takım orbitlerde (yörünge) dolaşan elektronlardan oluştuğu yorumuyla, bu yörüngeleri, hidrojen atomu için hesaplamaya yarayan deneysel bir kural önerdi. Fakat, kuantizasyonun temel prensipleri bu kural ile açıklanamıyordu.

1923 yılında de Broglie madde parçacıkların, aynı fotonlar gibi dalga benzeri özelliklere sahip olabileceği hipotezini öne sürdü. Daha sonra kendi hipotezini kullanarak Bohr-Sommerfeld kuantizasyon kuralını yeniden türetti. 1927 yılında Davisson ve Germer elektronlarla gerçekleştirdiği difraksiyon deneyleriyle maddenin dalga benzeri karakteri olabileceğini gösterdiler. Bu deneylerde elektronlar (madde parçacıkları) kullanıldığı halde interferans deseni elde edilmiştir.

Enerjisi E, momentumu $\vec{p}$ olan bu madde parçacıklar, açısal frekansı $\omega = 2\pi\nu$ ve dalga vektörü $\vec{k}$ olan dalga ile ilişkilendirilebilir

$$\begin{Bmatrix} E = h\nu = \hbar\omega \\ \vec{p} = \hbar\vec{k} \end{Bmatrix} \quad (B\text{-}2)$$

Başka bir ifadeyle bu madde parçacığa tekabül eden dalga boyu $\left\{ \lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} = \frac{h}{|\vec{p}|} \right\}$ (B-3)

2. Dalga Fonksiyonları – Schrödinger Denklemi

Kuantum davranışın genel formülasyonu:

ⓐ Yörünge gibi klasik fiziğin temel kavramı yerine, zamanla değişen DURUM kavramını kullanmalıyız. Elektron gibi bir parçacığın kuantum durumu için $\psi(\vec{r},t)$ gibi, bu parçacık hakkında elde edebileceğimiz tüm bilgileri taşıyan, bir dalga fonksiyonuyla karakterize edilmelidir.

ⓑ $\psi(\vec{r},t)$ parçacığın varlığının olasılık genliği olarak yorumlanır. t anında $\vec{r}$ de konumlanmış $d^3r = dx\,dy\,dz$ hacim elemanında bulunma ihtimali

$$dP(\vec{r},t) = C\,|\psi(\vec{r},t)|^2\, d^3r \quad (B\text{-}4)$$ ile verilir.

Burada C normalizasyon sabitidir.

ⓒ S-G aparatıyla yapılan deneylerde elde edilen sonuçlar, herhangi fiziksel bir büyüklüğün ölçümü içinde geçerlidir. Ölçüm sonunda bulunan, bulunabilecek durumlar $\left(\left\{\begin{smallmatrix}+\\0\\-\end{smallmatrix}\right\}\right)$ sistemin öz durumlarıdır. ve her bir öz duruma bir özdeğer tekabül eder. Bu özdeğerler $\{a\}$ gibi bir set oluştururlar. Mesela $H|\psi_{II}\rangle = E_{II}|\psi_{II}\rangle$ ve $H|\psi_{I}\rangle = E_{I}|\psi_{I}\rangle$ denklemleri (amonyak) $\{E_I, E_{II}\}$ özdeğer setini verirken $\{|\psi_I\rangle, |\psi_{II}\rangle\}$ özvektör seti sistemi tanımlamaya yeterli olur. Her özdeğer seti için bulunan özvektörlerin herbirine bir özfonksiyon tekabül eder. Eğer t_0 anı ölçümün yapıldığı an ise $\psi(\vec{r},t_0) = \psi_a(\vec{r})$ olduğunda, benzer ölçümlerin tümü $\psi_a(\vec{r})$'yi verecektir.

Durağan durumlarda bunu çeşitli kereler gördük. Burada ifadeler ket'ler üzerinden değil, sistemi tasvir eden ve bu ket'lerin belli bir tasviri olan dalga fonksiyonları cinsinden ifade edilmektedir. İlerleyen derslerimizde de göreceğimiz gibi dalga fonksiyonu kavramı bizi tek bir tasvire sınırlar, ket notasyonu çok daha geniş bir uzayın ~~ele~~ alınmasıyla ortaya çıkar.

Herhangi $\psi(\vec r,t)$ için, t_0 anında yapılan bir deneyde a özdeğerini bulma olasılığı P_a, $\psi(\vec r,t_0)$'ı ψ_a'ların süperpozisyonu olarak yazarak buluruz.

$$\psi(\vec r,t_0)=\sum_a c_a\psi_a(\vec r) \quad (B-5) \rightarrow P_a=\frac{|c_a|^2}{\sum_a' |c_a|^2} \quad (B-6)$$

($\sum_a' |c_a|^2$ ifadesi normalizasyonu sağlamak için (B-6)'da kullanılmıştır, yani $\sum_a P_a=1$)

"Burada olasılıkla ilgili ifadeleri armonya molekülünün formülasyonundan elde ettiğimiz sonuçlarla kıyaslayın"

Eğer ölçüm sonucu gerçekten a değerini vermişse, parçacığın dalga fonksiyonu ölçümden hemen sonra

$$\psi(\vec r,t_0)=\psi_a(\vec r) \text{ olur.}$$

(d) Kuantum mekaniğinin işleyişiyle ilgili burada ifade ettiğimiz her kural'ın bir başka ifadesini derslerde gördük. Size tek vermediğimiz, en açık haliyle $\psi(\vec r,t)$ fonksiyonunun zamanla devinimini veren denklem idi. Bu denklemi Planck ve de-Broglie eşitliklerini kullanarak yazmak mümkündür. (Bu işi yapmayı siz meraklı öğrencilere bırakıyorum). Fakat bu denklemi ispat etmek gibi bir derdim olmadığından, tüm yapacağım iş denklemi en genel haliyle yazmak olacak. Bu denkleme Schrödinger denklemi adı verilir, onu ilk yazan bilim insanına hürmeten. Buyrun: Kütlesi m olan bir parçacık, $V(\vec r,t)$ potansiyeline maruz kalmışsa Schrödinger denklemi

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec r,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec r,t)+V(\vec r,t)\psi(\vec r,t) \quad (B-8)$$

formunda yazılır. Bu denklem hem lineer, hem de homojendir (ψ'ye göre tabi). Sonuç olarak madde parçacıklar için süperpozisyon prensibi geçerlidir deriz. Buna ilave olarak ψ'nin olasılık genliği olduğu hipotezini de gözönüne alırsak, maddesel parçacıkların dalga benzeri davranışını anlayabiliriz.

Bu denklem zamana göre 1. dereceden olduğundan; parçacığın t_0 anında $\psi(\vec{r},t_0)$ tasviri, ilerleyen zamanlarda parçacığın $\psi(\vec{r},t)$ tasvirinin belirlenmesini sağlar. Yani bu anlamda Sch. denklemi aslında deterministtir.

Dalga Paketi

Sch. denklemini $V(\vec{r},t)=0$ ve m kütleli bir parçacık için yazalım.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{r},t) \qquad (C-1)$$

$\psi(\vec{r},t) = A e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ (C-1) denkleminin bir çözümüdür. A bir sabit ve $\vec{k}$ ile ω, $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ ile birbirine bağlı

(Ödev: (C-1) denklemini çözünüz.)

$|\psi(\vec{r},t)|^2 = A^2$ olur.: Düzlem dalgayla tasvir edilen parçacığın tüm uzayda bulunma olasılığı uzayın her noktasında aynıdır. Daha doğrusu parçacığın nerede olduğunu bilmiyoruz.

Süperpozisyon prensibine göre $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ ilişkisini sağlayan düzlem dalgaların her türlü lineer kombinasyonu, (C-1) denkleminin bir çözümüdür. Böyle bir süperpozisyon

$$\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int g(\vec{k})\, e^{+i[\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(k)t]}\, d^3k \qquad (C-6)$$

olarak yazılır. $g(\vec{k})$ kompleks ve regüler bir fonksiyon, d^3k k uzayının sonsuz küçük hacim elemanını tasvir eder.

[Not: Karesinin integrali sonlu olan her fonksiyon (C-6) da verilen ifadeyle yazılabilir.]

(C-6)'da verilen dalga fonksiyonuna 3-boyutlu dalga paketi denilir. İşlemlerin daha kolay olduğu durumları tercih edeceğimizden, 3-boyut yerine tek boyutlu durumları ele alacağız. (C-6) ifadesi tek boyutta yazılırsa

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, e^{+i[kx-\omega(k)t]}\, dk \qquad (C-7)$$

formunda olur.

$t=0$'da dalga paketi

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int g(k)e^{ikx}dk \qquad (C-8)$$

olur. Buradan $g(k)$'nın Fourier transformu olduğunu kolayca görürüz:

$$g(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)e^{-ikx}dx \qquad (C-9)$$

Aslında (C-8) denklemi her potensiyel için geçerlidir, $V(\vec{r}t)=0$ almaya gerek yok.

(C-2)'yle verilen düzlem dalga, karesi-integrallenebilir bir fonksiyon değildir, sonuç olarak parçacığın durumunu tasvir edemez. (C-7)'yle verilen dalgaların toplamıyla oluşturulan superpoze çözümün ise karesi integrallenebilir, dolayısıyla parçacığın durumunu tasvir edebilir.

— o —

2. Dalga paketinin şekli, Heisenberg belirsizlik ifadesi, Dalga paketinin zamana bağlılığı. Ödev E-Çatak.

— o —

Zamandan Bağımsız skaler potensiyelde bir parçacık.

1. Değişkenlere ayırma - Durağan durumlar.

$V(\vec{r},t)=V(\vec{r})$ olsun. Bu potensiyel için Sch. denklemi

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)+V(\vec{r})\psi(\vec{r},t) \qquad (D-1)$$

$\psi(\vec{r},t)=\varphi(\vec{r})\chi(t)$ (D-1)'in çözümü olsun.

$$i\hbar\varphi(\vec{r})\frac{d\chi(t)}{dt}=\chi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\vec{r})\right]+\chi(t)V(r)\varphi(r) \qquad (D-3)$$

buradan

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)}\frac{d\chi(t)}{dt}=\frac{1}{\varphi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\vec{r})\right]+V(r) \qquad (D-4)$$

elde ederiz.

Bu eşitliğin doğru olabilmesi için, eşitliğin her iki tarafının da bir sabite eşit olmasıyla mümkündür hayatı kolaylaştırma için biz bu sabit $\hbar\omega$ olarak seçeceğiz

$$\chi(t) = A e^{-i\omega t} \quad (D-5) \quad \text{ve} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\vec r) + V(\vec r)\varphi(\vec r) = \hbar\omega\varphi(\vec r) \quad (D-6)$$

$$A = 1 \Rightarrow \underline{\Psi(\vec r, t) = \varphi(\vec r) e^{-i\omega t}} \quad (D-7) \text{ olur.}$$

(D-7)' deki formdaki dalga fonksiyonu, eğer $\varphi(\vec r)$ (D-6) denkleminin çözümü ise, Sch. denkleminin stasyoner (durağan) çözümleri olarak adlandırılır: Neden? Çünkü bu çözümler zamandan bağımsız olasılık yoğunlukları verir yani $|\Psi(\vec r,t)|^2 = |\varphi(\vec r)|^2$. [Bir şeylere benziyor mu burada yaptıklarımız?] Durağan bir fonksiyonda, sadece bir açısal frekans vardır, dolayısıyla bir tek te enerji; sonuç olarak stasyoner durumların enerjileri tam-belirlidir. Klasik mekanikte, potansiyel enerji zamandan bağımsızsa, sistemin toplam enerjisi korunur, kuantum mekaniğinde ise tam-belirli enerji durumları vardır. (D-6) denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec r)\right]\varphi(\vec r) = E\varphi(\vec r) \quad (D-8) \text{ olarak yazılabilir}$$

ya da $$\underline{H\varphi(\vec r) = E\varphi(\vec r)} \quad (D-9)$$ burada $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec r)$ (D-10)

lineer bir operatördür. (D-9) denklemine özdeğer denklemi adı verilir. H'in $\varphi(\vec r)$ özfonksiyonuna uygulanması aynı fonksiyonun bu fonksiyona tekabül eden E özdeğeriyle çarpımına eşit bir sonuç verir. Böylece mümkün enerjiler H operatörünün özdeğerleri olarak adlandırılır. Daha sonra denklem (D-9)'un karesi integrallenebilir $\varphi(\vec r)$ çözümlerinin sadece belli E değerleri için mümkün olduğunu göreceğiz. İşte bu enerji kuantizasyonunun ~~onu~~ ~~kuan~~ temelini oluşturur.

b. Durağan durumların süperpozisyonu.

Birbirlerinden farklı E ve ψ durumlarını ayırtetmek için bunları n indisiyle işaretleriz genelde. Yani

$H\psi_n(\vec{r}) = E_n\psi_n(\vec{r})$ (D-12) ve de parçacığın durağan durumlarının dalga fonksiyonları

$\Psi_n(\vec{r},t) = \psi_n(\vec{r})\, e^{-iE_nt/\hbar}$ (D-13) olur.

$\Psi_n(\vec{r},t)$ Sch. denkleminin bir çözümüdür. Denklem lineer olduğundan,

$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n\psi_n(\vec{r})\, e^{-iE_nt/\hbar}$ (D-14) formunda

bir çok çözümü verir. Buradaki c_n ler complex sayılardır

[Neye benziyor buradaki işlemlerin sonuçları ?]

$t = 0$'da $\Rightarrow \Psi(\vec{r}) = \sum_n c_n\psi_n(r)$ olur. Şimdi varsayalım ki $\Psi(\vec{r},0)$'ı biliyoruz. $\Psi(\vec{r})$ her zaman H'in öz fonksiyonları cinsinden yazılabilir. Sonuç olarak c_n sabitleri $\Psi(r,0)$ tarafından belirlenirler. Yani c_n'leri $\Psi(r,0)$ olduğun da belirlesek tüm yapmamız gereken (D-14)'te bunları yerine yazmaktır böylece Sch denkleminin en genel çözümünü bulmuş oluruz.

Kütlesi 10^{-15} kg çapı 10^{-6}m olan bir toz parçacığının $v = 10^{-3}$ m/s hızında hareket ettiğini varsayın. Bu parçacığa tekabül eden dalga boyunu bulunuz.

Thermal nötronlar: $m_n \approx 1.67\times10^{-27}$ kg ~~...~~ hızı 300K'de $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \approx \frac{3}{2}k_BT$'den hesaplayarak, bu parçacığa tekabül eden λ' dalga boyunu bulun. İki dalga boyunu karşılaştırın resonunu tartışın.

Belirsizlik ilkesinin çalışma prensibini gösteren bir deney. E-çatal yapacak. (Sayfa 50)

Kuantum Mekaniğinin Matematiksel Araçları

Bir önceki bölümde Sch. denklemini yazarak genel olarak çözümün nasıl bulunacağını $\Psi(\vec{r},t)$'yi elde etmenin formal yöntemini ele aldık, tabi kısaca. Daha önceki derslerde, bra ve ket notasyonunu kullanarak çeşitli kuantum sistemlerinde bu notasyonun yardımıyla çözümlerin kolaylıkla elde edilebildiği örnekleri ele aldık. Bir tarafta elimizde $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$ gibi semboller, diğer tarafta $\varphi_n(x)$ $\Psi(x,t)$ gibi fonksiyonlar var. Her iki durumda da kuantum mekaniksel fiziksel bir sistemi tasvir ediyoruz — Bu durumlar arasındaki ilişkiyi anlamak için ve belki daha değişik, elimizdeki sistemi başka yollarla anlamamızı, ele almamızı sağlayabilecek yöntemlerin geliştirilebileceği, matematiksel araçları ele almak istiyoruz. Matematiksel formalizmi tartışırken ele ilk alacağımız matematiksel kavram dalga-fonksiyonu-uzayı $\mathcal{F}$. Bu uzay soyut bir vektör uzayıdır. Dolayısıyla, elimizde vektör cebrinden tanıdık kavramlara uygun ~~işlemleri~~ adlarla anılan işlemlerden bahsedeceğiz: skaler çarpım, lineer operatörler, baz--- . Bu tanımların ardından, sistemin durumunu, durum uzayından $\mathcal{E}$ bir durum vektörüyle tanımladığımız formalizmi ele alacağız. Hemen ardından tüm bu hesapları kolaylaştıran Dirac notasyonunu ele alacağız. Bu noktadan itibaren adını çokça duyduğunuz ve hatta kullandığınız durum vektörlerinin tasvirlerinden bahsedeceğiz. Özellikle önemli ~~bir~~ tasvir bize $\varphi_n(x)$ ile $|\varphi_n\rangle$ arasındaki ilişkiyi gösterecek mesela.

A. Bir-parçacık Dalga-Fonksiyon Uzayı.

Dalga fonksiyonu $\Psi(\vec{r},t)$'nin olasılıksal bir yorumu var. $|\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3r$ parçacığı t anında $\vec{r}$ noktası civarında $d^3r = dx\,dy\,dz$ hacim elemanında bulma olasılığıdır —

Bu demektir ki parçacığı uzayda bir yerlerde bulma olasılıklarının toplamı "1"e eşit olmalıdır, dolayısıyla

$$\int d^3r\,|\psi(\vec{r},t)|^2 = 1 \quad (A\text{-}1)$$ olmak zorunda.

Böylece, otomatik olarak karesi-integrallenebilir fonksiyonları çalışmaya itilmiş oluyoruz. Bu fonksiyonlar (A-1)'deki integralin sonlu olduğu integrallerdir. Matematikçiler bu set'e L^2 derler ve yapısı Hilbert Uzayı denilen uzayla aynıdır. Fiziksel bakış açısıyla L^2'nin çok geniş bir uzay, özellikle $|\psi(\vec{r},t)|^2$'ye verilen anlam düşünülürse, dalga fonksiyonları ~~bazı~~ bazı özelliklere sahiptir. İşimize yarayacak fonksiyonlar her yerde tanımlı olmalı, sürekli olmalı, sonsuz kere türevi alınabilir olmalı. Örneğin, uzayın herhangi bir noktasında sürekli olmayan bir fonksiyonun fiziksel olarak hiç bir anlamı olamaz çünkü hiç bir deney bize olmayan bir şeyin bilgisini veremez. Kimi durumlarda dalga fonksiyonlarının bir bölgede sınırlanmış bir setini de kullanabiliriz. Mesela kutu içinde hapsolmuş bir parçacık için tüm uzayı kullanmanın hiç bir anlamı yoktur. Daha bir çok örnek verilebilir, ve L^2 nin üzerine şartlar getirip çalışacağımız uzayın sınırlarını belirleyebiliriz, sadece bura pek yok. Bu sınırlanmış set'i $\mathcal{F}$ ile göstereceğiz ve yeterince regüler fonksiyonlardan oluştuğunu söyleyeceğiz. Kısaca $\mathcal{F}$, L^2 nin bir alt uzayı olacak.

1. Dalga Fonksiyon Uzayı $\mathcal{F}$'in Yapısı

a. Vektör uzayı olarak $\mathcal{F}$

$\mathcal{F}$ vektör uzayının tüm kriterlerine uyar. Bir örnek eğer $\psi_1(\vec{r})$ ve $\psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ ise

$$\psi(\vec{r}) = \lambda_1 \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{F} \qquad (A\text{-}2)$$

λ_1 ve λ_2 rasgele kompleks sayılar.

Tüm yapılması gereken $\psi(r)$'ın karesinin integralinin sonlu olduğunun göstermek.

$$|\psi(\vec r)|^2 = |\lambda_1|^2|\psi_1(\vec r)|^2 + |\lambda_2|^2|\psi_2(\vec r)|^2 + \lambda_1^*\lambda_2\psi_1^*(\vec r)\psi_2(\vec r) + \lambda_1\lambda_2^*\psi_1(\vec r)\psi_2^*(\vec r) \quad (A-3)$$

A-3' ün son iki ifadesi aynı modü'a sahip, ki bu bir üst limite sahip; $|\lambda_1||\lambda_2|\left[|\psi_1(r)|^2+|\psi_2(\vec r)|^2\right]$, sonuç olarak $|\psi(r)|^2$ karesi integrali yakınsayan bir fonksiyondan küçüktür,

b. skaler çarpım

α) Tanım; $\varphi(\vec r), \psi(\vec r) \in F$ sırasını değiştirmeden her çift element için (φ,ψ) gibi bir kompleks sayı tanımlarız. Bu kompleks sayı tanım gereği

$$(\varphi,\psi) = \int d^3r\, \varphi^*(r)\psi(r) \qquad (A-4)$$

(φ,ψ) $\psi(r)$ ın $\varphi(r)$ la skaler çarpımı olarak adlandırılır.
Eğer φ ve $\psi \in F$ ise bu integral daima yakınsar.

β). Özellikler: A-4 tanımından.

$$(\varphi,\psi) = (\psi,\varphi)^* \qquad (A-5)$$

$$(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi,\psi_1) + \lambda_2(\varphi,\psi_2) \qquad (A-6)$$

$$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1,\psi) + \lambda_2^*(\varphi_2,\psi) \qquad (A-7)$$

Skaler çarpım çiftin ikinci fonksiyonuna göre lineer, birincisine göre anti-lineer denilir. Eğer $(\varphi,\psi)=0 \Rightarrow \varphi(\vec r)$ ve $\psi(\vec r)$ ortogonaldir denilir.

$$(\psi,\psi) = \int d^3r\, |\psi(r)|^2 \qquad A-8$$

gerçek, pozitif bir sayıdır. Sadece (ancak ve ancak) $\psi(\vec r)=0$ ise sıfırdır. $\sqrt{(\psi,\psi)}$ $\psi(r)$'ın norm'u olarak adlandırılır. Böylece skaler çarpım sayesinde F'i içinde norm'un tanımını yapmış oluruz.

Schwarz eşitsizliği: $|(\psi_1,\psi_2)| \leq \sqrt{(\psi_1,\psi_1)}\cdot\sqrt{(\psi_2,\psi_2)}$ A-9

c. Lineer Operatörler

α. Tanım: A gibi bir lineer operatör F'in her $\psi(\vec{r})$ fonksiyonuna gene F'in başka bir $\psi'(\vec{r})$ fonksiyonuna ilintilendirir, bu ilintilendirme lineerdir.

$$\psi'(\vec{r}) = A\psi(\vec{r}) \qquad (A-10-a)$$

$$A\left[\lambda_1\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2\psi_2(\vec{r})\right] = \lambda_1 A\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 A\psi_2(\vec{r}) \qquad (A-10-b)$$

Örnekler: parite operatörü Π

$$\Pi\psi(x,y,z) = \psi(-x,-y,-z) \qquad (A-11)$$

x'ile çarpımı sağlayan X operatörü

$$X\psi(x,y,z) = x\psi(x,y,z) \qquad (A-12)$$

x'e göre türev alan D_x operatörü

$$D_x\psi(x,y,z) = \frac{\partial\psi(x,y,z)}{\partial x} \qquad (A-13)$$

F'in bir elemanı olan $\psi(\vec{r})$ a uygulanan X ve D_x operatörleri, F'e ait olmayan fonksiyonlar üretebilir.

β. Operatörlerin Çarpımı.

A ve B iki lineer operatör olsunlar, Bu operatörlerin AB çarpımı $(AB)\psi(r) = A[B\psi(r)]$ olarak tanımlanır.

$B\psi(r) = \varphi(r) \Rightarrow (AB)\psi(\vec{r}) = A\varphi(r)$ olur.

Genel olarak $AB \neq BA$. $[A,B]$ operatörüne komutatör adını veririz ve $[A,B] = AB - BA$ olarak tanımlarız.

Bir örnek olarak $[X, D_x]$ operatörünü hesaplayalım. Bunu yapmak için F'in rastgele bir $\psi(\vec{r})$ fonksiyonunu ele alalım:

$$[X, D_x]\psi(r) = \left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right)\psi(r)$$

$$= x\frac{\partial}{\partial x}\psi(r) - \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(r))$$

$$= \cancel{x\frac{\partial\psi(r)}{\partial x}} - \psi(r) - \cancel{x\frac{\partial\psi(r)}{\partial x}} = -\psi(r)$$

$[X, D_x]\psi(r) = -\psi(r)$ olduğuna göre ve bu denklem herhangi $\psi(r)$ için doğru olduğundan

$$\underline{[X, D_x] = -1} \quad \text{dir.}$$

2. $\{u_i(\vec{r})\}$ Kesikli ortonormal Bazlar.

a. Tanım: F'in i indisiyle işaretlediğimiz ($i=1, \ldots n, \ldots$) sayılabilir fonksiyonlarının bir setini ele alalım:

$$u_1(r) \in F, \; u_2(\vec{r}) \in F, \; \ldots \; u_i(\vec{r}) \in F, \; \ldots$$

$$(u_i, u_j) = \int d^3r \, u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) = \delta_{ij} \qquad (A-18)$$

ise $\{u_i(\vec{r})\}$ ortonormaldir denilir.

Eğer F'in her $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu bir ve sadece bir şekilde $u_i(\vec{r})$ ler cinsinden seriye açılabiliyorsa $\{u_i(\vec{r})\}$ seti bir baz oluşturur denilir.

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \qquad (A-19)$$

b. $\{u_i(\vec{r})\}$ bazında bir dalga fonksiyonunun bileşenleri (A.19)un her iki tarafını $u_j^*(r)$ ile çarpıp tüm uzay üzerinden integral alınarak bulunur.

$$\underbrace{\int u_j^* \psi(r) d^3r}_{(u_j,\psi)} \pm \sum_i{}' c_i \underbrace{\int u_j^* u_i d^3r}_{\delta_{ij}}$$

(A.21) $$(u_j,\psi) = \sum_i{}' c_i \delta_{ij} \Rightarrow \boxed{c_j = (u_j,\psi) = \int d^3r\, u_j^*(\vec{r})\psi(\vec{r})}$$

$\psi(\vec{r})$'nin $u_i(\vec{r})$ üzerindeki c_i bileşeni $\psi(\vec{r})$ nin $u_i(\vec{r})$ ile skaler çarpımıdır. $\{u_i(\vec{r})\}$ baz seçildiğinde $\psi(\vec{r})$'yi ya da $\psi(\vec{r})$'nin c_i bileşenlerinin setini bu baz fonksiyonları cinsinden tanımlamışız, tasvir etmişiz demektir. c_i sayılarının bu set'i $\psi(\vec{r})$'yi $\{u_i(\vec{r})\}$ bazında tasvir eder denilir.

<u>Tüm bunları aslında gördünüz. Şimdi matematikçinin diliyle tanımlıyoruz her kavramı.</u>

Aklınızda tutun: $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu iki farklı bazda farklı bileşenlere sahip olacaktır. Baz değiştirme problemleriyle daha sonra uğraşacağız, ama siz bunun bir örneği çoktan gördünüz.

Gördüğünüz başka bir konu da A gibi lineer bir operatörün $\{u_i(\vec{r})\}$ gibi bir bazda tasviriydi. Hatırlayın! bu tasvir bize bir matris veriyordu. Bu konuya tekrar döneceğiz.

<u>C. Skalar çarpımın bileşenler cinsinden ifadeleri</u>

$\varphi(\vec{r}) = \sum_i{}' b_i u_i(r)$, $\psi(\vec{r}) = \sum_j{}' c_j u_j(\vec{r})$ iki dalga fonksiyonu olsun. Bunların skaler çarpımları

$$(\varphi,\psi) = \left(\sum_i b_i u_i, \sum_j{}' c_j u_j\right) = \sum_{i,j}{}' b_i^* c_j (u_i, u_j) = \sum_{ij}{}' b_i^* c_j \delta_{ij}$$

yani $(\varphi,\psi) = \sum_i b_i^* c_i$ (A.26)

$\varphi=\psi \Rightarrow$ $(\psi,\psi) = \sum_i{}' |c_i|^2$ (A.27)

d. Kapalılık bağıntısı.

$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ ifadesi $\{u_i(\vec{r})\}$ setindeki fonksiyonların 1'e normalize edildiğini, birbirlerine karşılıklı olarak dik olduklarını söylerler.. Şimdi kapalılık bağıntısı adını verdiğimiz yeni bir ifade türeteceğiz. Bu bağıntı da u_i'lerin bir baz oluşturduğunu ifade edecek.

$\{u_i(\vec{r})\}$ F'in bir bazı ise, F'in her $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu için (A-19) gibi bir açılımı vardır.

(A-19)'u (A-21)'i yazalım

$$\text{(A-19)} \quad \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \qquad c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r\, u_i^*(r)\psi(\vec{r}) \quad \text{(A.21)}$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) = \sum_i \underbrace{(u_i, \psi)}\, u_i(\vec{r})$$

↳ integrasyon değişkenini $\vec{r}\,'$ alalım, karışmasın.

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i \left[\int d^3r'\, u_i^*(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,') \right] u_i(\vec{r}) \qquad \text{(A-29)}$$

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r'\, \psi(r') \left[\sum_i u_i(r) u_i^*(r') \right]. \qquad \text{(A-30)}$$

Kısaca, $\sum_i u_i(\vec{r}) u_i^*(r')$ $\vec{r}$ ve $\vec{r}\,'$'nün bi fonksiyonu, öyleki her $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu için

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r'\, \psi(r') F(\vec{r}, \vec{r}\,') \qquad \text{(A-31)}$$

verir. Burada $F(\vec{r}, \vec{r}\,')$ tıpkı $\delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$ fonksiyonu gibi davranır.

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r'\, \psi(\vec{r}\,') \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \qquad \text{(A.33)}$$

$$\sum_i u_i(\vec{r}) u_i^*(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \qquad \text{(A.32)}$$

Sizce (A-32) ne anlama geliyor?

Eğer $\{u_i(\vec{r})\}$ gibi bir set (A-32) kapanış bağıntısına sahipse, bu set bir baz oluşturur. Ver her $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu $\psi(\vec{r}) = \int d^3r' \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r}-\vec{r}')$ olarak yazılabilir. Yani tersine yol alarak. $\delta(\vec{r}-\vec{r}')$ yerine kapanış bağıntısını koyarsak $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$ ifadesine ulaşabiliriz.

3. F'e ait olmayan BAZ'lar.

$\{u_i(\vec{r})\}$ bazı karesi integrallenebilen fonksiyonlardan oluşuyor, Fakat bazen, (hemen her zaman, bazıları için tabii) F'ya da L^2'ye ait olmayan bazları kullanmak oldukça kullanışlıdır. F'ya da L^2 ye ait olmasalarda bu bazlar cinsinden her $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu ifade, tasvir edilebilir. Zaten şu bu yüzden bu tür bazları ele alıyoruz.

a. Düzlem Dalgalar.

Hesapları kolaylaştırmak için bir boyutlu durumu ele alacağız. $\psi(x)$ gibi karesi integrallenebilir fonksiyonları ele alacağız, yani sadece x değişkenine bağlı olanları. Şimdi bu $\psi(x)$ fonksiyonunun Fourier transformu $\bar{\psi}(p)$'yi yazalım

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \bar{\psi}(p) e^{ipx/\hbar} \qquad (A\text{-}34\text{-}a)$$

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \qquad (A\text{-}34\text{-}b)$$

Şimdi $v_p(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ (A-35) fonksiyonunu tanımlayalım. Bu fonksiyon dalga vektörü $k = p/\hbar$ olan bir düzlem dalgadan başka bir şey değil. $|v_p(x)|^2 = \dfrac{1}{2\pi\hbar}$ nin tüm x-ekseni üzerinden integrali ıraksar, dolayısıyla $v_p(x) \notin F$.

$\{v_p(x)\}$ tüm düzlem dalgaların seti, p değerleri $-\infty$ den $+\infty$ sürekli, p'yi sürekli değişen bir indis gibi ele alacağız. i indisi 1, 2, 3 --- gibi değerler alarak $\{u_i(x)\}$ baz elemanlarını işaretlediği gibi p indisi sürekli değerler alarak $\{v_p(x)\}$ setinin fonksiyonlarını işaretleyecek.

Şimdi A-34 denklemleri, Fourier transformları, (A-35) $\left[v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}\right]$, i kullanarak yeniden yazarsak,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \bar{\psi}(p)\, v_p(x) \qquad (A.36)$$

$$\bar{\psi}(p) = (v_p, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, v_p^*(x)\, \psi(x) \qquad (A\text{-}37)$$

$$\boxed{v_p^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}}$$

Hatırlatma: (A-19) $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$

(A-21) $c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r\, u_i^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r})$

(A.36) $\Rightarrow \forall \psi(x) \in F$ $v_p(x)$ düzlem dalgaları cinsinden bir ve önce bir şekilde seriye açılabilir. Aynı (A-19) gibi. Fakat burada p indisi sürekli değiştiği için A-19 daki

$\sum_i \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dp$ olarak yazılmak zorunda. $\bar{\psi}(p) \leftarrow c_i$

sürekli kesikli

(A.37) $\bar{\psi}(p) = (v_p\, \psi)$ ise $\bar{\psi}(p)$ katsayılarını verir, aynı A-21 gibi.

Burada $\overline{\Psi}(p)$ c_i lerin analoğudur.
Bu iki kompleks sayı, $\psi(x)$ dalga fonksiyonunun bileşenlerini tasvir eder, tabi ki iki farklı bazda $\{ v_p(x) \}$ ve $\{ u_i(x) \}$.

ÖDEV: Perseval Formülü $\underbrace{(\psi,\psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, |\overline{\psi}(p)|^2}_{\text{ispatlayını}}$

$\{ u_i(x) \}$ bazında $(\psi, \psi) = \sum_i' |c_i|^2$ (A.27)

Perseval formülü (A.27)nin analoğu. (benzeri)

$v_p(x)$ kapalılık şartını sağlar:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, v_p(x) v_p^*(x') = \frac{1}{2\pi} \int \frac{dp}{\hbar} e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')}$$

delta fonksiyonunun özelliklerinden

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, e^{iku} = \delta(u) \rightarrow \text{(A-39)}$$

bağıntısına göre, $\frac{1}{2\pi} \int \frac{dp}{\hbar} e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} = \delta(x-x')$ (A-40)

Bu bağıntı da (A-32) ile benzeşir tek fark $\sum_i' \longrightarrow \int dp$.

Son olarak $(v_p, v_{p'})$ skaler çarpımını hesaplayıp, bu fonksiyonların ortonormal olup olmadıklarına bakalım. (A-39)'u kullanırsak bu sonuç açıkça görülür.

$$(v_p, v_{p'}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, v_p^*(x) v_{p'}(x) \quad \text{yani}$$

$$(v_p, v_{p'}) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{dx}{\hbar} e^{-i\frac{x}{\hbar}(p'-p)} = \delta(p-p') \quad \text{(A-41)}$$

A-41'le A-18 karşılaştıralım. İki farklı i, j indisi yerine (δ_{ij}) şimdi elimizde sürekli değişen p ve p' ve de bu iki indisin farkının bir fonksiyonu olan delta fonksiyonu var $\delta(p-p')$. Eğer $p=p'$ yaparsak $(v_p, v_{p'})$ skaler çarpımı ıraksar; yani $v_p \notin F_x$.

Fakat biz A-41'i gerede ortonormalize ilişkisi olarak adlandırıyoruz. Bazen buradaki ifadeye Dirac anlamında ortonormalize adı verilir.

3 boyutlu duruma genelleştirme, buradaki ifadelerde

$x \to \vec{r}$ $\quad p \to \vec{p}$ yerleştirerek elde edilir.

$$v_p(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \quad (A-42)$$

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3p\, \overline{\psi}(\vec{p})\, v_{\vec{p}}(\vec{r}) \quad (A-43)$$

$$\overline{\psi}(\vec{p}) = (v_{\vec{p}}, \psi) = \int d^3r\, v^*_{\vec{p}}(\vec{r})\, \psi(\vec{r}) \quad (A-44)$$

$$(\varphi, \psi) = \int d^3p\, \overline{\varphi}^*(\vec{p})\, \overline{\psi}(\vec{p}) \quad (A-45)$$

$$\int d^3p\, v_{\vec{p}}(\vec{r})\, v^*_{\vec{p}}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \quad (A-46)$$

$$(v_{\vec{p}}, v_{\vec{p}\,'}) = \delta(\vec{p}-\vec{p}\,') \quad (A-47)$$

b. Delta "Fonksiyonları"

Şimdi de $\vec{r}$'nin fonksiyonlarının bir set'ini ele alalım $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$ $\vec{r}_0$ sürekli indisiyle işaretleyelim her fonksiyonu.

$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$, $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$ uzayın değişik $\vec{r}_0$ noktalarında bakarak tanımlı delta fonksiyonlarının setini tasvir eder

$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \notin F$

Aşağıdaki ifadeler F'in her $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu için geçerlidir.

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r_0\, \psi(\vec{r}_0)\, \delta(\vec{r}-\vec{r}_0) \qquad (A-49)$$

$$\psi(\vec{r}_0) = \int d^3r\, \delta(\vec{r}_0-\vec{r})\, \psi(\vec{r}) \qquad (A-50)$$

ya da daha kapalı olarak:

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r_0\, \psi(\vec{r}_0)\, \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \qquad (A-51)$$

$$\psi(\vec{r}_0) = (\xi_{\vec{r}_0}, \psi) = \int d^3r\, \xi^*_{\vec{r}_0}(\vec{r})\, \psi(\vec{r}) \qquad (A-52)$$

(A-51): Her $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu bir ve yalnız bir şekilde $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$'ler cinsinden yazılabilir ifadesini verir. Benzer şekilde (A-52)'de $\psi(\vec{r})$'nin $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$'deki bileşenlerini verir. Başka bir deyişle de, (A-52) $\psi(\vec{r})$'nin $\vec{r}_0$'da aldığı değer için bir ifadedir.

Benzer şekilde, bu bazda

$$(\varphi, \psi) = \int d^3r_0\, \varphi^*(\vec{r}_0)\, \psi(\vec{r}_0) \qquad (A-53)$$

$$\int d^3r_0\, \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\, \xi^*_{\vec{r}_0}(\vec{r}\,') = \int d^3r_0\, \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\, \delta(\vec{r}\,'-\vec{r}_0) = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \qquad (A-54)$$

Kapalılık bağıntısı ve

$$(\xi_{\vec{r}_0}, \xi_{\vec{r}_0\,'}) = \int d^3r\, \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\, \delta(\vec{r}-\vec{r}_0\,') = \delta(\vec{r}_0-\vec{r}_0\,') \qquad (A-55)$$

diklik bağıntısının ifadeleridir.

B. DURUM UZAYI – DIRAC NOTASYONU

Parçacığın her kuantum durumunu bir durum vektörüyle tasvir edeceğiz. Bu durum vektörleri $\mathcal{E}_r$ diyeceğimiz soyut bir durum uzayının elemanları olacak. Nasıl F, L^2'nin bir alt uzayı olarak ele alındıysa, $\mathcal{E}_r$'de Hilbert uzayının bir alt uzayı olacak. Burada $\mathcal{E}_r$ uzayında kullanacağımız notasyonu ki bir çoğunu biliyorsunuz, ve vektör hesabın kurallarını tanımlayacağız.