FZM 305: Kuantum Mekaniği I

8. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

Kuantum Mekaniği ve Atom Fiziği Ders Notları
Z. Zekeriya AYDIN
Ankara Üniversitesi

İŞLEMCİLER

Schrödinger denklemi doğrusal (çizgisel) bir diferensiyel denklem olup, fiziksel sistemin çözümleri doğrusal bir şekilde üstüste eklenebilir. Bu nedenle dalga fonksiyonlarını birbirine dönüştüren işlemciler de doğrusal olmalıdır.

Doğrusal bir işlemci şöyle tanımlanır: ψ_1 ve ψ_2 gelişigüzel iki fonksiyon ve c bir karmal sabit olmak üzere,

$$A(\psi_1 + \psi_2) = A\psi_1 + A\psi_2$$

$$A(c\psi_1) = \mathrm{c}A\psi_1$$

kurallarını gerçekleyen A işlemcisi doğrusal bir işlemcidir.

İşlemcilerin sıradeğiştirme (komütasyon) bağıntısı

Alışılmış sayılardan farklı olarak, iki işlemcinin bir fonksiyona hangi sırada uygulandıkları önemlidir.

Örneğin $A=x$, $B=d/dx$ olmak üzere

$$AB\psi(x)=x(d\psi(x)/dx)$$

$$BA\psi(x)=d/dx\ (x\psi(x))= \psi(x)+x(d\psi(x)/dx)$$

$$AB\psi(x)\neq BA\psi(x)$$

olduğu kolayca görülür.

İki işlemcinin sıra değiştirip değiştirmediğini belirtmek için, AB-BA farkına bakılır; bu fark

$$[A\ ,\ B] = AB - BA$$

biçiminde **komütatör** olarak adlandırılır.

Konum ve momentum işlemcilerinin komütasyonuna bakalım:

$$[x\ ,\ p_x]\psi(x,y,z)=(xp_x-p_xx)\psi(x,y,z)$$

$$=-i\hbar\ (\ x d\psi(x,y,z)/dx - d(x\psi(x,y,z))/dx\ )$$

$$= i\hbar\ \psi(x,y,z)$$

Böylece $[x\ ,\ p_x]$ komütasyonu için

$$[x\ ,\ p_x] = i\hbar$$

yazabiliriz. Diğer bileşenler için de, benzer şekilde sıradeğiştirme bağıntıları kurulur:

$$[y\ ,\ p_y] = i\hbar \qquad\qquad [z\ ,\ p_z] = i\hbar$$

Keyfi *A, B, C* işlemcileri için varolan

$$[AB\ ,C\ ] = A[B\ ,C\ ] +[A\ ,C\ ]B \qquad\qquad [A,\ BC\ ] = B[A\ ,C\ ] +[A\ ,B\ ]C$$

özdeşlikleri kullanılabilir.

Hermitik İşlemciler

Ölçülen dinamik değişkenlerin beklenen değerleri gerçel olmalıdır. Beklenen değerleri gerçel olan doğrusal işlemcilere **hermitik işlemci** denir.

Momentum işlemcisinin beklenen değeri gerçeldir:

$$\langle p_x \rangle - \langle p_x \rangle^{*} = \int dx\, \psi^{*} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \left(dx \psi^{*} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right)^{*}$$

$$= -i\hbar \int dx \left(\psi^{*} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi^{*}}{\partial x} \psi \right)$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^{*} \psi \right)$$

$$= -i\hbar \left(\psi^{*} \psi \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \langle p_x \rangle = \langle p_x \rangle^{*}$$

Ortalama kare-kök sapması

Bir işlemcinin ortalaması *A*-<*A*> şeklinde tanımlanır. Fakat bu farkın ortalama değeri daima sıfırdır. Dolayısıyla ortalama kare sapması denebilecek

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$$

ortalaması tanımlanır. Ortalamanın içindeki ifadenin karesi alınırsa

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

bulunur. Özel olarak konum ve momentum işlemcileri için ortalama kare-kök sapmaları

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \qquad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$$

olup, bunlar aslında konum ve momentumdaki kesinsizliklerden başka bir şey değildir.

Bir işlemci için özdeğer denklemi

Bir A dinamik değişkeninin (gözlenebilirinin) değeri hatasız ölçülebiliyor ve bir "*a*" sayısına eşit bulunuyorsa, açıkca

$$\langle A \rangle = a$$

demektir. Yani,

$$\langle A \rangle = \int \psi^{¿} A_{op} \psi d^3 r = a \int \psi^{¿} \psi d^3 r = a$$

olması

$$A\psi = a\psi$$

bağıntısını gerektirir. Bu ifadeye *A* işlemcisi için özdeğer denklemi denir. Denklemi sağlayan ψ fonksiyonları ve "*a*" sayıları, *A* işlemcisinin sırasıyla **özfonksiyonları** ve **özdeğerleri** adını alır.

Bir işlemcinin olası tüm özfonksiyonlarını özdeğerlerini bulma problemine **özdeğer problemi** denir.

PROBLEMLER

1) Relativistik enerji-momentum bağıntısında işlemcileri kullanarak Klein-Gordon denklemini elde ediniz.

2) Schrödinger denkleminde $V(x)=V_R(x)+iV_I$ şeklinde karmal potansiyelin, $V_I>0$ ise parçacık olasılığı yaratılmasına ve $V_I<0$ ise parçacık olasılığı yok olmasına yol açacağını gösteriniz. Ancak gerçel potansiyel ($V_I = 0$) olması halinde, olasılık korunumunun var olduğunu gösteriniz.

3) Tek boyutta hareket eden bir parçacığın dalga fonksiyonu $\psi(x) = A/(x+ia)^2$ şeklinde verilmektedir.

a) Dalga fonksiyonunu 1' e boylandıracak A değerini bulunuz.

b) $\langle x\rangle$ ve $\langle x^2\rangle$ beklenen değerlerini bulunuz.

PROBLEMLER

4) *$[xp, p^2]$* komütasyon bağıntısını *x*- ve *p*-uzayında hesaplayarak sonucun aynı olduğunu gösteriniz.

5) *$[x^n, p]$* ve *$[x, p^n]$* yerdeğiştirme bağıntılarını, *x*-uzayında ya da *p*-uzayında keyfi bir fonksiyona uygulayarak hesaplayınız.

6) *$AU(x)=aU(x)$* ve *$BU(x)=bU(x)$* olmak üzere, *$U(x)$* fonksiyonu hem *A*, hem de *B* işlemcisinin ortak özfonksiyonudur. Bu durumda *A* ve *B* işlemcilerinin yerdeğiştirdiklerini gösteriniz.

7) *$A^4=I$* özelliğini taşıyan *A* işlemcisinin *$AU(x)=aU(x)$* özdeğer denklemini çözerek "*a*" özdeğerlerini bulunuz. *A* işlemcisi ayrıca hermitik ise, özdeğerleri nelerdir?