FZM 305: Kuantum Mekaniği I

14. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

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

KUANTUM MEKANİĞİNİN GENEL YAPISI; Hilbert Uzayı

Kareleri integre edilebilen dalga fonksiyonlarının oluşturduğu sonsuz boyutlu çizgisel vektör uzayına **Hilbert uzayı** denir.

Schrödinger denkleminin çözümleri, fiziksel sistemimizin olası durumlarını gösterir. Denklem çizgisel olduğu için, bu çözümlerin bir çizgisel karışımı da gene bir çözümdür ve sistemin yeni bir durumuna karşı gelir. Bu özellik **üstüste gelme ilkesi** olarak adlandırılır.

Schrödinger denkleminin çözümleri olan $\psi(\mathbf{r})$, $\varphi(\mathbf{r})$, … karmal dalga fonksiyonları **çizgisel bir fonksiyon-vektör uzayı** oluştururlar. Çünkü α ve β iki keyfi karmal sayı olmak üzere, $\alpha\,\psi(\mathbf{r})+\beta\,\varphi(\mathbf{r})$ çizgisel karışımı da gene başka bir dalga fonksiyonudur. Hilbert uzayında iki fonksiyonun skaler çarpımı

$$(\psi\,,\varphi\,) = \int \psi^{*}(\mathbf{r})\,\varphi(\mathbf{r})\,d^{3}r = \text{bir skaler}$$

çizgisel karışımı da gene başka bir dalga fonksiyonudur.

Bu tanım uyarınca, bir ψ fonksiyonun kendisiyle skaler çarpımı,

$$\int \psi^* A \psi \, d^3r = N$$

gibi gerçel bir sayıdır; bu da bize dalga fonksiyonlarının 1'e boylandırma olanağını verir.

Hamilton işlemcisinin E_i enerji özdeğerlerine karşı gelen $U_i(x)$ özfonksiyonlarını bulduktan sonra, keyfi bir $\psi(x)$ fonksiyonunu bu birim boylu dik özfonksiyonların serisine açabiliriz:

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i U_i(x)$$

Dolayısıyla, $U_i(x)$ özfonksiyonları, sonsuz boyutlu fonksiyon uzayını geren baz fonksiyonlarıdır.

Üç boyutlu vektör uzayı ile Hilbert uzayının karşılaştırılması:

	Üç boyutlu çizgisel vektör uzayı	Sonsuz boyutlu çizgisel fonksiyon uzayı
Elemanlar	$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \ldots, a\mathbf{A} + b\mathbf{B}$	$\psi(x), \Phi(x), \ldots, \alpha\psi(x)+\beta\Phi(x)$
Skaler çarpım	$\mathbf{A.B}= AB\cos\theta$	$(\psi(x), \Phi(x))=\int\psi^*(x)\,\Phi(x)dx$
Baz elemanları	$\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$	$U_1(x), U_2(x), \ldots$
Açılım	$\mathbf{A}= \sum A_i\,\mathbf{e}_i \qquad i=1, 2, 3$	$\psi(x)=\sum C_i\,U_i(x) \qquad i=1,2, \ldots, \infty$
Diklik	$\mathbf{e}_i\,.\,\mathbf{e}_j = \delta_{ij}$	$(U_i(x), U_j(x)) = \int U^*_i(x)\,U_j(x)\,dx =\delta_{ij}$
Bileşenler	$A_i = \mathbf{A}\,.\,\mathbf{e}_i$	$C_i= \int\psi(x)U^*_i(x)\,dx$
Skaler çarpım	$\mathbf{A.B} =\sum A_i\,B_i \qquad i=1, 2, 3$	$(\psi(x), \Phi(x))=\sum C^*_i\,D_i \qquad i=1,2, \ldots, \infty$
	İşlemci, vektörü vektöre dönüştürür	İşlemci, fonksiyonu fonksiyona dönüştürür

Hermitik İşlemciler

Beklenen değerleri gerçel olan işlemcilere **Hermitik işlemciler** denir. Bir A işlemcisinin beklenen değeri $\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$ ise, yani her keyfi ψ dalga fonksiyonu için

$$\int \psi^* A \psi \, d^3r = \int (A\psi)^* \psi \, d^3r$$

bağıntısı sağlanıyorsa, A işlemcisi **hermitiktir** denir. Herhangi bir A işlemcisinin hermitik eşleniği $A^\dagger$ ile gösterilir ve

$$\int \psi^* A^\dagger \psi \, d^3r = \int (A\psi)^* \psi \, d^3r$$

olarak tanımlanır. Hermitik eşleniği kendisine eşit olan, yani

$$A^\dagger = A$$

olan bir işlemcinin hermitik olduğu hemen anlaşılır.

Hermitik eşlenik alma ile ilgili bazı bağıntılar şöyledir:

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$$

$$(A^\dagger)^\dagger = A$$

$$(cA)^\dagger = c^* A^\dagger$$

$$(ABC)^\dagger = C^\dagger B^\dagger A^\dagger$$

Dirac' ın Bra-Ket Gösterimi

“Bra” ve “Ket” deyimleri, İngilizce' de parantez anlamına bra-c-ket sözcüğünün <bra|ket> şeklinde parçalanmasından türetilmiştir:

$$\psi(x) \rightarrow |\psi(x)>$$

$$\psi^{*}(x) \rightarrow |\psi(x)>$$

Skaler çarpım Dirac gösteriminde

$$<\psi|\ \varphi> = \int \psi^{*} A\varphi \ d^{3}r$$

şeklinde yazılır. İşlemcileri de içine alan skaler çarpım bağıntısı

$$<\psi|A|\ \varphi> = \int \psi^{*} A\varphi \ d^{3}r$$

olarak yazılır.

Bu gösterimde birim boylu dik özfonksiyonların serisine açılan ψ(x) dalga fonksiyonunu

$$|\psi \geq \sum_{i=1}^{\infty} c_i |U_i>$$

gibi yazabiliriz. Açılım katsayıları ise

$$< U_i | U_j > = \delta_{ij}$$

diklik bağıntısı yardımıyla

$$c_i = < U_i | \psi >$$

olarak bulunur. Hermitik eşleniklik tanımı da Dirac gösteriminde aşağıdaki gibi yazılır:

$$<\psi|A^{\dagger}|\varphi> = <\varphi|A|\psi>^{*}$$

Kuantum Teorisinin Klasik Sınırı

Klasik mekanikte bir parçacığın yeri ve momentumu tam olarak belirtilir; hareket denklemleri, konumun ve momentumun gelecekteki değerlerini zamanın fonksiyonu olarak verir. Kuantum mekaniğinde ise, bilinen hiçbir fiziksel ölçümle bir parçacığın yerini ve momentumunu aynı kesinlikle saptamak olası değildir:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

Dolayısıyla bir sistemin eylem boyutundaki nicelikleri ħ basamağındaysa, kuantum mekaniksel olarak incelenmeli.

Belirsizlik bağıntısı dalga fonksiyonunun belirli bir uzaysal genişliğe sahip bir dalga paketi biçiminde olmasını gerektirir. Parçacığın momentumu da momentum uzayında belirli bir genişliğe sahiptir. Sonuçta konum ve momentum gözlenebilirlerinin ortalama ya da beklenen değerlerinden sözedilebilir ve bu beklenen değerlerin zamanla değişimleri incelenebilir.

Genel olarak herhangi bir işlemcinin beklenen değerinin zamanla değişimini ele alalım. A(x,p;t) işlemcisinin beklenen değerini yazalım:

$$<A> = \int \psi^{*}(x,t)A\,(x,p;t)\,\psi^{*}(x,t)\,dx$$

Bu ifadenin zamana göre türevini alalım ve zamana bağlı Schrödinger denklemini kullanarak

$$\frac{d}{dt} < A \geq \int \frac{\partial}{\partial t}\left\{\psi^{\text{¿}} A\psi\right\} dx$$

ifadesini geliştirirsek

$$\frac{d}{dt} < A \geq < \frac{\partial A}{\partial t} > + \frac{i}{\hbar} <[H,A]>$$

hareket denklemini elde etmiş oluruz. A işlemcisi açıkca zamana bağlı değilse bu denklem şu hale indirgenir:

$$\frac{d}{dt} < A \geq \frac{i}{\hbar} <[H,A]>$$

PROBLEMLER

1) $<\Phi|\psi>$ çarpımının

$$<\Phi|\psi>=\sum<\Phi|U_i><U_i|\psi>$$

biçiminde yazılacağını gösteriniz. Buna göre, tam küme üzerinden $\sum|U_i><U_i$ toplamı birim işlemciye eşittir.

2) Schmidt dikleştirme yöntemi: Verilen birim boylu çizgisel bağımsız $\Phi_1, \Phi_2, \ldots, \Phi_r(x)$ fonksiyonlarından $U_1, U_2, \ldots, U_r(x)$ birim boylu dik fonksiyonlar kümesini kurunuz.

3) $H=P^2/2m + mw^2x^2/2 + \lambda x$ Hamiltoniyeni verildiğine göre, $<x>$ ve $<p>$' nin zamana göre değişimlerini veren denklemleri kurunuz ve sonra bu denklem çiftini çözünüz.