KARAMANOĞLU MEHMETBEY ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM FİZİĞİNDE REEL SPEKTRUMLU, HERMİTYEN OLMAYAN OPERATÖRLER

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tuncay KIZILASLAN

Matematik Anabilim Dalı
Matematik Programı

OCAK 2022

KARAMANOĞLU MEHMETBEY ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM FİZİĞİNDE REEL SPEKTRUMLU HERMİTYEN OLMAYAN OPERATÖRLER

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tuncay KIZILASLAN
(180831202)

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Nihal YOKUŞ
Eş Danışman: Dr. Öğr. Üyesi Emel ALTAŞ

OCAK 2022

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK

Bu çalışmadaki tüm bilgilerin, akademik ve etik kurallara uygun bir şekilde elde edildiğini beyan ederim. Aynı zamanda bu kural ve davranışların gerektirdiği gibi, bu çalışmanın özünde olmayan tüm materyal ve sonuçları tam olarak aktardığımı ve referans gösterdiğimi belirtirim.

Tuncay Kızılaslan

Eşime ve biricik aileme,

ÖNSÖZ

Yüksek lisans eğitimim boyunca beni yönlendiren, akademik çalışma hayatımda ufkumun genişlemesine katkı sağlayan danışman hocam Sayın Prof. Dr. Nihal YOKUŞ'a, destek ve yardımlarından dolayı Sayın Dr.Öğr.Üyesi Emel ALTAŞ'a ve beni bugünlere getiren, maddi manevi desteğini esirgemeyen aileme en içten teşekkürlerimi sunarım.

Ocak 2022 Tuncay KIZILASLAN

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖNSÖZ.....vii
İÇİNDEKİLER.....ix
ÖZET.....xi
ABSTRACT.....xiii
1. GİRİŞ.....1
2. OPERATÖRLER (İŞLEMCİLER) VE ÖZDEĞER DENKLEMLERİ.....7
2.1. Lineer Operatörler ve Özellikleri.....8
2.2. Operatörlerin Özdeğerleri ve Özfonksiyonları.....9
2.3. 3 Boyutta Momentum Operatörleri.....11
2.4. Hilbert Uzayı ve Operatörün Eşleniği.....13
2.5. İşlemcilerin Yer Değiştirme İlişkileri.....14
2.5. Hermite-sel Eşlenik ve Hermite-Sel Operatörler.....16
3. KUANTUM FİZİĞİ VARSAYIMLARI.....19
3.1. Heisenberg Belirsizlik İlkesi.....19
3.2. Schrödinger Denklemi.....20
3.3. Dalga Fonksiyonunun Olasılık Yorumu.....24
3.4. Ortonormal Fonksiyon Kümeleri ve Dirac Denklemi.....27
3.5. Ehrenfest İlkesi.....28
3.6. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi.....28
3.7. Olasılık Korunması.....29
3.8. Sonsuz Potansiyel Kuyusu.....32
3.9. Harmonik Salınıcı.....33
3.10. Üç Boyutlu Problemler.....34
3.11. Küresel Simetrik Potansiyel.....34
3.12. Klein-Gordon Denklemi.....35
3.13. Dört Boyutlu Vektörler.....37
3.14. Dirac Denklemi ve Çözümleri.....38
3.15. Olasılık Yoğunluğu.....38
4. HERMİTE POLİNOMLARIN ÖZELLİKLERİ.....41
4.1. Rodrigues Formülü.....45
4.2. Tekrarlama Bağıntısı.....46
4.3. Diklik Bağıntısı.....48
5. YÜKSELTME-ALÇALTMA (ARTIRAN-EKSİLTEN) İŞLEMCİLERİ.....49
6. SÜREKLİLİK DENKLEMİ.....51
7. PSEUDO-HERMİTYEN KUANTUM MEKANİĞİ VE VARSAYIMLARI...53
7.1. Bir Gözlemlenebilirin Hermiteliği.....54
8. HILBERT UZAYLARI VE RIESZ ÜSLERİ.....57
9. SINIRLI, TERSİNİR VE HERMİTE OPERATÖRLER.....59
10. SONUÇ.....61
KAYNAKLAR.....63

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

KUANTUM FİZİĞİNDE
REEL SPEKTRUMLU HERMİTYEN OLMAYAN OPERATÖRLER

Tuncay Kızılaslan

Karamanoğlu Mehmetbey Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Matematik Ana Bilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Nihal YOKUŞ
İkinci Danışman: Dr. Öğr. Üyesi Emel ALTAŞ

Ocak, 2022, 65 Sayfa

Kuantum teorisinin küresel çerçevesinde, bireysel kuantum sistemleri, Hamiltoniyenlerinin ilgili açık Hermit ve gizli Hermit operatörleri ile açıkça iki aileye ayrılmış görünmektedir. Bazı ön çalışmalar ışığında, bu iki ailenin kesişiminin boş olduğu görülmektedir. Bu yazıda, etkileşim potansiyelleri zayıf bir şekilde yerel olmayan olarak seçildiğinde, iki ailenin ayrılmasının ortadan kalkabileceğini göstereceğiz. Söz konusu üniter olarak gelişen bir kuantum sisteminin Hermityen ve Hermityen olmayan açıklamaları arasındaki örtüşen takma ad arayüzleri boş olmayabilir. Bu iddia, analitik olarak çözülebilir birkaç temel model aracılığıyla gösterilecektir.

Anahtar Kelimeler: Kuantum fiziği, operatörler, hamiltonyen, hermityen, hermityen olmayan

ABSTRACT

MsThesis

NON-HERMİTYEN OPERATORS WITH REAL SPECTRUM IN QUANTUM PHYSICS

Tuncay Kızılaslan

Karamanoğlu Mehmetbey University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Mathematics

Supervisor: Prof.Dr. Nihal YOKUŞ
Co-Supervisor: Dr. Öğr. Üyesi Emel ALTAŞ

January, 2022, 65 pages

In the global framework of quantum theory, the individual quantum systems seem clearly separated into two families with the respective manifestly Hermityen and hiddenly Hermityen operators of their Hamiltonyen. In the light of certain preliminary studies, these two families seem to have an empty overlap. In this paper, we will show that whenever the interaction potentials are chosen to be weakly nonlocal, the separation of the two families may disappear. The overlaps alias interfaces between the Hermityen and non-Hermityen descriptions of a unitarily evolving quantum system in question may become nonempty. This assertion will be illustrated via a few analytically solvable elementary models.

Keywords: Quantum physics, operators, hamiltonyen, hermityen, non-hermityen

1. GİRİŞ

Maxwell'in klasik elektrodinamiği, ışığın parçacık ve dalga teorileri arasındaki klasik tartışmada, dalga teorisinin zaferini o kadar kesin bir şekilde doğruladı ki, parçacık teorisi neredeyse tamamen unutuldu. Ancak 19. ve 20. yüzyılların başında, dalga teorisinin konumunu sarsan birtakım keşifler yapıldı. Bu yöndeki ilk adımlar, hidrojen atomunun spektral çizgilerinin pozisyonundaki düzenlilikleri keşfeden Balmer ve Rydberg tarafından atıldı (1885 ve 1888). Daha sonra klasik elektromanyetik teori yasalarının "kara cisim" radyasyonu sorununa uygulanmasının hatalı sonuçlara yol açtığı gösterildi. Planck, radyasyonun kesinlikle tanımlanmış kısımlar tarafından yayıldığını ve emildiğini varsayarsak, radyasyon enerjisinin spektral dağılımı yasasının deneyle tam olarak çakıştığını gösterdi (1900). Bir enerji "kuantumu" kavramını tanıttı. Daha sonra Einstein, Planck'ın düşüncelerinden faydalanıp fotoelektrik etki yasalarını inceledi (1905).

Bir sonraki adım, atomun yapısı sorununa niceleme ilkesini uygulayan Bohr tarafından atıldı. Bohr'un çalışmaları ile atomların, moleküller ve kristaller düzeyinde, sistemin bir durumdan diğerine bir sıçrama ile geçtiği anlaşıldı. Bu tür geçişlere kuantum geçişleri denildi. Bunları inceleyen Einstein, ışınımsal kuantum geçişlerinin olasılıklarını karakterize eden katsayıları tanıttı (1916). 1924'te Louis de Broglie, fotonlarda bulunan dalga-parçacık ikiliğinin diğer temel parçacıkların da doğasında olduğunu varsaymıştı. Bu hipotezin pratik doğrulaması, kuantum mekaniğinin ortaya çıkmasından sonra 1927'de elektron kırınımı deneylerinde elde edildi.

Modern kuantum mekaniği, 1925'te Werner Heisenberg'in "Kinematik ve mekanik ilişkilerin kuantum teorik yorumu üzerine" adlı çalışmasını yayınladığı zaman doğdu. Yaklaşımı, mikropartikülleri parçacıklar olarak kabul etme ve yalnızca deneysel ölçümleri için bir prosedürün belirlenebileceği kavramları kullanarak aralarındaki etkileşim süreçlerini tanımlama fikriyle ilişkilendirildi. Bu durumda, mikrosistemin başlangıç durumundan son duruma geçişinin gizemli bir kuantum sıçraması ile gerçekleştiği varsayılmış ve geçiş anındaki sistemin durumuyla ilgili soruların fiziksel

bir anlamı olmadığı beyan edilmiştir, çünkü böyle bir durum, önemli bir değişikliği olmadan, geçiş anında herhangi bir fiziksel cihaz tarafından ölçülemez. Çalışmasında, deneysel olarak gözlemlenen fiziksel niceliklere karşılık gelmesi gereken matematiksel niceliklerin, genel durumda birbirleriyle değişmediğini gösterdi; $[\hat{x}\,, \widehat{P_x}] = -i\hbar$.

Aynı yıl, Heisenberg'in teorik yaklaşımı, matrislerin cebiri kullanılarak M. Born ve P. Jordan'ın "Kuantum Mekaniği Üzerine" makalesinde geliştirildi. Heisenberg tarafından tanıtılan atamalar, Hermit matrisleri ile tanımlandı ve kuantum enerji seviyeleri, sistemin Hamiltonyen'inin Hermit matrisinin özdeğerlerine karşılık gelmeye başladığı belirtildi. Heisenberg, Born ve Jordan tarafından yeni mekaniğin problemlerinin çözümüne uyarlanan lineer cebir, "matris" olarak adlandırıldı.

1926'da E. Schrödinger, ilki "özdeğer problemi olarak niceleme" olan ve daha sonra Born'dan net bir fiziksel yorum alan "dalga fonksiyonu ψ" kavramını tanıttığı bir dizi makale yayınladı. Bir parçacığı tespit etme olasılığı ψ^2 ile orantılı. Dalga fonksiyonu, Schrödinger'in potansiyel alanlardaki maddi parçacıkların yörüngeleri ile 1831'de keşfedilen ışık ışınlarının yörüngeleri arasındaki Hamilton benzetmesini kullandığı bir denkleme uyuyordu. Schrödinger ayrıca de Broglie tarafından önerilen parçacık dalga boyu kavramını kullandı. Born ve Jordan "olasılık" kavramını, Schrödinger'in bir dalga fonksiyonu kavramını tanıtmasından birkaç ay önce ortaya koymuştu.

Atomu tanımlayan iki sistem böyle şekillendi: Heisenberg'in matris mekaniği ve Schrödinger'in dalga mekaniği. Birincisi elektronu bir parçacık, ikincisi bir dalga olarak tanımladı. Ayrıca, Schrödinger tarafından "Heisenberg-Born-Jordan kuantum mekaniğinin benimkiyle ilişkisi üzerine" makalesinde gösterildiği gibi, her ikisi de matematiksel olarak eşdeğerdi. Bununla birlikte, matris mekaniği yöntemlerinin, serbest parçacıkların davranışını tartışmak için dalga mekaniği yöntemlerine göre daha az uygun olduğuna inanılmaktadır. Daha sonra, Pauli ve Dirac'ın yaklaşımları, spin ve relativistik etkileri açıklamak için oluşturuldu. Schrödinger, Pauli, Dirac denklemleri ve Heisenberg matrisleri (çoğunlukla sadece durağan durumlar bulunur) yardımıyla her problemi çözmek mümkün değildir, bu nedenle yaklaşık yöntemler de oluşturulmuştur.

Kuantum mekaniğinin müfredattaki yeri hakkında konuşurken, hemen hemen tüm fotonik ve optoelektroniklerin ışığın kuantum özelliklerine dayandığı söylenmelidir. Bunlar lazerler, ışık yayan diyotlar, fotodedektörler, kuantum bilgisayarlar vb. Ayrıca, kuantum mekaniği kavramlarına aşinalık, hem modern fiziğin niteliksel olarak anlaşılması için hem de metodolojik bir bakış açısından gereklidir, çünkü kuantum mekaniğinde olayların değerlendirilmesi, genellikle günlük deneyime dayalı değerlendirmeden çok farklıdır. Modern deneyler kurarken ve bunları yorumlarken dikkate alınmalıdır.

Kuantum mekaniği, eylemin büyüklük olarak Planck sabiti ile karşılaştırılabilir olduğu fiziksel olayları tanımlayan teorik fiziğin bir dalıdır. Kuantum mekaniğinin tahminleri, klasik mekaniğin tahminlerinden önemli ölçüde farklı olabilir. Planck sabiti, nesnelerin makroskopik hareketindeki hareketleriyle karşılaştırıldığında son derece küçük olduğundan, kuantum etkileri esas olarak mikroskobik ölçekte kendini gösterir. Sistemin fiziksel hareketi Planck sabitinden çok daha büyükse, kuantum mekaniği organik olarak klasik mekaniğe dönüşür. Buna karşılık, kuantum mekaniği, kuantum alan teorisinin göreli olmayan bir yaklaşımıdır (yani, sistemin büyük parçacıklarının geri kalan enerjisine kıyasla düşük enerjilerin yaklaşıklığı).

Sistemleri makroskopik ölçekte tanımlamada iyi olan klasik mekanik, tüm fiziksel olayları moleküller, atomlar, elektronlar ve fotonlar düzeyinde açıklayamaz. Kuantum mekaniği, atomların, iyonların, moleküllerin, yoğun maddelerin ve elektron-nükleer yapıya sahip diğer sistemlerin temel özelliklerini ve davranışlarını yeterince tanımlar. Kuantum mekaniği ayrıca şunları da tanımlayabilir: Elektronların, fotonların ve diğer temel parçacıkların davranışı, ancak temel parçacıkların dönüşümleri kuantum alan teorisi çerçevesinde açıklanır. Deneyler, kuantum mekaniği kullanılarak elde edilen sonuçları doğrulamaktadır. Kuantum kinematiğinin temel kavramları gözlenebilir ve durum kavramlarıdır.

Kuantum dinamiğinin temel denklemleri Schrödinger denklemi, von Neumann denklemi, Lindblad denklemi, Heisenberg denklemi ve Pauli denklemidir.
Kuantum mekaniğinin denklemleri, operatör teorisi, olasılık teorisi, fonksiyonel analiz, operatör cebirleri, grup teorisi dahil olmak üzere matematiğin birçok dalı ile yakından ilişkilidir.

Alman Fizik Derneği'nin bir toplantısında Max Planck, evrensel bir sabiti tanıttığı "Normal spektrumda radyasyon enerjisi dağılımı teorisi üzerine" tarihsel makalesini okudu. Bu olayın tarihi olan 14 Aralık 1900, genellikle kuantum teorisinin doğum günü olarak kabul edilir.

Planck'ın kuantum hipotezi, temel parçacıklar için bir enerjinin yalnızca belirli katları şeklinde (kuanta) emildiği veya yayıldığıydı. Enerji, formül tarafından belirlenen orantı katsayısı ile frekans ν ile orantılı olarak:

$$\mathcal{E} = h \cdot \nu = \hbar \cdot \omega \tag{1.1}$$

şeklinde gösterilir.

Burada h- Planck Sabiti, $\hbar = \frac{h}{2 \cdot \pi}$ ve $\mathcal{E}$ ise enerjiyi göstermektedir.

Ayrıca aşağıda verilen eşitlikler yazılabilir:

$$\hat{x}\,|fiziksel\ durum> = x\,|fiziksel\ durum> \tag{1.2}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] \coloneqq \hat{x} \cdot \hat{p} - \hat{p} \cdot \hat{x} = i \cdot \hbar \tag{1.3}$$

Burada; $\hat{x}$ −konum operatöri, $\hat{p}$ −momentum operatörüdür.

1905'te Albert Einstein, fotoelektrik etki fenomenini açıklamak için Planck'ın kuantum hipotezini kullanarak ışığın kuantalardan oluştuğunu öne sürdü. Daha sonra, ışığın "kuantası" fotonlar olarak adlandırıldı.

Atomun yapısını açıklamak için Niels Bohr, 1913'te, enerjinin yalnızca kesikli(sürekli olmayan) değerler alabildiği elektronun durağan durumlarının varlığını önerdi. Arnold Sommerfeld ve diğer fizikçiler tarafından geliştirilen bu yaklaşım, genellikle eski kuantum teorisi (1900-1924) olarak anılır. Eski kuantum teorisinin ayırt edici özelliği, klasik teori ile çelişen ek varsayımların birleşimidir.

1923'te Louis de Broglie, madde parçacıklarının da kütle ve enerji ile ayrılmaz bir şekilde bağlantılı olan dalga özelliklerine sahip olduğu varsayımına dayanarak maddenin ikili doğası fikrini ortaya koydu. L. de Broglie, 1927'de kristallerdeki elektronların kırınımını inceleyerek deneysel olarak doğrulanan bir parçacığın hareketini bir dalganın yayılmasıyla karşılaştırdı.

1924'te ifade edilen dalga-parçacık ikiliği fikirleri, dalga mekaniğini temel alarak geliştiren E. Schrödinger tarafından 1926'da ele alındı.

1925-1926'da, yeni temel kinematik ve dinamik yasalarını içeren kuantum mekaniği biçiminde tutarlı bir kuantum teorisinin temelleri atıldı. Kuantum mekaniğinin ilk formülasyonu, Werner Heisenberg'in 29 Temmuz 1925 tarihli bir makalesinde bulunur. Bu tarih, göreli olmayan kuantum mekaniğinin doğum günü olarak kabul edilebilir.

Kuantum mekaniğinin temellerinin gelişimi devam etmektedir. Gelişmeler, açık ve enerji tüketen kuantum sistemleri, kuantum bilişimi, kuantum kaosu vb. çalışmalarla ilişkilidir. Kuantum mekaniğine ek olarak, kuantum teorisinin en önemli kısmı kuantum alan teorisidir.

1927'de Bell Labs araştırma merkezindeki K. Davisson ve L. Germer, nikel kristalleri tarafından (J. Thomson'dan bağımsız olarak) yavaş elektronların kırınımını gösterdiler. Yansıyan elektron ışınının yoğunluğunun açısal bağımlılığını değerlendirirken, bunun de Broglie uzunluğuna sahip dalgalar için Wolfe - Bragg koşulu temelinde tahmin edilene karşılık geldiği gösterildi (bkz. de Broglie dalgaları). De Broglie'nin hipotezinin benimsenmesinden önce, kırınım ve herhangi bir kırınım etkisi de yalnızca bir dalga fenomeni olarak kabul edildi. De Broglie dalga boyu, Wolfe-Bragg koşuluyla karşılaştırıldığında, parçacıklar için benzer bir kırınım modeli gözlemleme olasılığı olarak tahmin edildi. Böylece de Broglie'nin elektron hipotezi deneysel olarak doğrulamış oldu.

De Broglie'nin hipotezinin doğrulanması, kuantum mekaniğinin gelişiminde bir dönüm noktasıydı. Compton etkisinin ışığın cisimsel yapısını göstermesi gibi, Davisson-Jermer deneyi de parçacık maddesinin aynı zamanda dalga doğasının varlığını doğruladı. Bu, parçacık-dalga ikiliği fikirlerini formüle etmeye hizmet etti. Bu fikrin fizik için doğrulanması önemli bir aşama haline geldi. Herhangi bir parçacığı yalnızca belirli bir dalga boyu atayarak karakterize etmek değil, aynı zamanda fiziksel olayları tanımlarken onun belirli bir biçimde kullanılması amaçlandı.

2. OPERATÖRLER (İŞLEMCİLER) VE ÖZDEĞER DENKLEMLERİ

Klasik fizikte biz yer vektörünü, lineer momentumu, açısal momentumu, hızı ve enerjiyi doğrudan doğruya ölçeriz ve sonsuz doğrulukta ölçtüğümüzü kabul ederiz. Kuantum mekaniğinde durum böyle değildir. Öncelikle nicelikler arasında bir karşılık gelme ilkesi vardır. Bu ilkeye göre, klasik fizikte niceliklere kuantum fiziğinde operatör karşılık gelir. Bu durum;

Klasik Fizik	Kuantum Fiziği
x	$\hat{x}$
p	$\hat{p}$
L	$\hat{L}$
v	$\hat{v}$
E	$\hat{H}$

şeklinde yazılır.

H bir Hilbert Uzayı olmak üzere, normlu uzaylarda H'da tanımlı sürekli lineer dönüşümlere operatör denir ve operatörleri ifade ederken yukarıda belirttiğimiz gibi kullanacağımız harflerin üzerine ˆ işareti koyarak temsil edilir. Operatör bir duruma uygulanınca onu başka bir duruma dönüştürür. Örneğin bunu bir $\hat{A}$ operatörü için gösterelim.

$$\hat{A}|\psi> = |\hat{\psi}> \tag{2.1}$$

$\hat{A}$ operatörü bir durumu başka bir duruma götürmüştür. Operatörler bazen de durumu değiştirmeyebilirler. Örneğin, denklemdeki $\hat{H}$ operatörü ψ üzerinde uygulanınca $\hat{H}|\psi> = E|\psi>$ olur. Yani operatör durumu aynı bırakır.

Biz, kuantum fiziğinin $\hat{H}$ operatörünün özdeğerlerinden hareketle kurulabileceğini, denklemlerden ve daha önce verdiğimiz açıklamalardan biliyoruz. $\hat{H}$ operatörünün özdeğerlerinden kurulan uzaya X uzayı denir. Mademki $\hat{x}, \hat{p}, \hat{L}, \hat{H}$ gibi birçok fiziksel

operatör vardır, kuantum fiziğini başka operatörlerin öz fonksiyonlarından da elde edebiliriz. Örneğin, $\hat{p}$ operatörünün öz fonksiyonları P uzayını kurar.

$$\hat{p}|U_p > = p|U_p > \tag{2.2}$$

yazabiliriz. Bu durumda genel dalga fonksiyonu;

$$|\phi > = a_1|Up_1 > +a_2|Up_2 > +a_3|Up_3 > + \cdots \ldots \ldots \ldots a_n|Up_n > \tag{2.3}$$

şeklindedir. Aslında p'nin sürekli değerler aldığını ve U_p'nin (baz vektörlerin) de sürekli olduğunu önemle not edelim. Örneğin açısal momentum operatörü ya da parite operatörü kullanılarak da kuantum mekaniği inşa edilebilir.

2.1. Lineer Operatörler ve Özellikleri

Matematikte operatör, bir fonksiyonun diğerine dönüştürüldüğü bir kuraldır. Kuantum fiziğinde, bir parçacığı veya bir sistemi karakterize eden herhangi bir fiziksel nicelik A, lineer bir öz-eşlenik veya Hermityen (Charles Hermite, 19. yüzyılın Fransız matematikçisidir), operatör $\hat{A}$ ile ilişkilidir. Operatörler, hem ölçüm süreçlerine hem de bir kuantum sistemini etkileme süreçlerine eşlenir.

$\hat{A}$ operatörü, ψ_1 (veya durum) üzerinde etki ederek yeni bir fonksiyon ψ_2 (veya yeni bir durum) yaratır. Notasyon kurallarına göre, operatör sağındaki fonksiyona göre etki eder, yani $\hat{A}\psi_1 = \psi_2$ şeklindedir.

Bir operatörün doğrusallığı, argümanlarının toplamına terim terim uygulanabileceği anlamına gelir;

$$\hat{A}\,(\psi_1 + \psi_2) = \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2 \tag{2.4}$$

ve sabit değer operatör işaretinin dışına taşınabilir, yani;

$$\hat{A}\,(c.\psi) = c.\hat{A}\psi \tag{2.5}$$

Kuantum mekaniğindeki bir operatör, bir sistemin durumunun en eksiksiz tanımını veren karmaşık değerli bir fonksiyon olan bir dalga fonksiyonu üzerine etki eden

doğrusal bir işlemcidir. Operatörler, üstte bir inceltme işareti olacak şekilde büyük Latin harfleriyle belirtilir. Örneğin: $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$

Kuantum mekaniğinde, lineer öz-eşlenik (Hermityen) operatörlerin matematiksel özelliği kullanılır, yani her birinin özvektörleri ve özdeğerleri vardır. Belirli bir operatöre karşılık gelen özdeğer ölçülebilir fiziksel nicelikleri gösterir.

Aritmetik operatörler

Eğer üç operatörün etki ettiği herhangi bir ψ fonksiyonu için aşağıdaki koşul sağlanırsa:

$$\hat{C} \cdot \psi = \hat{A} \cdot \psi \pm \hat{B} \cdot \psi \tag{2.6}$$

$\hat{C}$ operatörüne $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ operatörlerinin toplamı (veya farkı) denir.Herhangi bir ψ fonksiyonu için aşağıdaki koşul sağlanırsa da, $\hat{C}$ operatörüne $\hat{A}$, $\hat{B}$ operatörlerinin çarpımı denir:

$$\hat{C} \cdot \psi = \hat{A}\left(\hat{B} \cdot \psi\right) \tag{2.7}$$

Genel olarak operatörlerin çarpımı için;

$$\hat{A} \cdot \hat{B} \neq \hat{B} \cdot \hat{A} \tag{2.8}$$

Eğer $\hat{A} \cdot \hat{B} = \hat{B} \cdot \hat{A}$ ise $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ operatörlerinin yer değiştirdiği söylenir. Operatör komütatörü şu şekilde tanımlanır:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A} \tag{2.9}$$

2.2. Operatörlerin Özdeğerleri ve Özfonksiyonları

Belirli bir fiziksel niceliğin alabileceği değerlere kuantum mekaniğinde özdeğerleri denir. Bu tür değerleri bulmak, operatörün özfonksiyonlarını ve bunlara karşılık gelen özdeğerlerini belirleme matematiksel problemi ile yakından ilgilidir.

Operatör bir fonksiyon üzerinde işlem yaptığında, aynı fonksiyon bir sayı ile çarpılarak elde edilirse, yani;

$$\hat{A}\psi = a \cdot \psi, \tag{2.10}$$

yazılıyorsa ψ operatörün özfonksiyonu, a da özdeğeridir.

Kuantum mekaniği operatörlerin bir değil, birçok özfonksiyonu ve karşılık gelen özdeğerleri vardır. Bu durumda özdeğerler kümesine operatörün spektrumu denir.

Bir operatörün spektrumu, formun bir denkleminin düzenli çözümlerine karşılık gelen özfonksiyonlar kümesi için sayılabilir bir değer kümesinden oluşuyorsa ayrık olarak kabul edilir.

$$\hat{A} \cdot \psi_n = a_n \cdot \psi_n, \qquad n = 1, 2, \ldots \tag{2.11}$$

Operatörün özdeğerlerinin spektrumu, (2.11)'deki tüm değerler mümkün olduğunda da sürekli olabilir veya olası değerler bir dizi aralıkta olacak şekilde ayrı bantlardan oluşabilir.

Bazı durumlarda, bir operatörün bir özdeğerine karşılık gelen birkaç özfonksiyon bulunur. Bu tür durumlara dejenere durumlar denir ve bu tür fonksiyonların sayısına dejenerelik çokluğu denir.

(2.11)'den, genel olarak özfonksiyonların, değeri genellikle özfonksiyonlar için normalizasyon koşulundan seçilen belirli bir sabite kadar tanımlandığı sonucu çıkar. Kuantum mekaniğinde önemli rol oynayan operatörlerden biri de Hermityen operatörlerdir. $f, g \in \boldsymbol{\varkappa}$, $\hat{A}$ ve $\hat{A}^{\dagger}$ şeklinde belirtilen operatörler için $\hat{A}^{\dagger}$ operatörüne $\hat{A}$ operatörünün Hermityen eşleniği denir. Bu durumda aşağıdaki eşitliği yazabiliriz:

$$< f \mid \hat{A}^{\dagger} \mid g > = < \hat{A} f \mid g > \tag{2.12}$$

İç çarpım tanımını kullanarak da:

$$\int_{tüm\ uzay} f^* \hat{A}^{\dagger} g \, d^3 r = \int_{tüm\ uzay} (\hat{A} f)^* g \, d^3 r \tag{2.13}$$

eşitliğini yazabiliriz.

Genel olarak $\hat{A}^{\dagger} \neq \hat{A}$ şeklindedir. Yani bir operatörün Hermityen eşleniği kendisine eşit olmayabilir. Fakat Hermityen eşleniği kendilerine eşit olan özel operatörler vardır ki bunlara da Hermityen operatör denir.

$\hat{A}$ eğer kendine Hermityen operatör ise, yani;

$$< f \mid \hat{A} \mid g > = < f \mid \hat{A}^{\dagger} \mid g > = < \hat{A} f \mid g > \tag{2.14}$$

eşitliğini sağlar.

Matematikte, bir operatör için özfonksiyonların varlığı bir istisnadır. Kuantum fiziğinde bu temel kavramlardan biridir - özdeğerler, bir sistem üzerinde yapılan bir deney sonucunda elde edilebilecek gözlemlenebilir niceliklere karşılık gelir. Fiziksel

operatörlerin Hermityen doğası nedeniyle, özdeğerleri her zaman gerçektir ve tüm özfonksiyonlar kümesi tam bir ortogonal fonksiyonlar kümesi oluşturur.

Kuantum mekanik operatörleri, kural olarak, bir tane değil, bir dizi özfonksiyona sahiptir $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_n$ ve ayrık veya sürekli bir spektrum oluşturan ilgili özdeğerler $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ şeklindedir. Ayrık bir spektrum durumunu düşünelim. Hermityen operatörlerin özfonksiyonları seti, tam bir ortogonal fonksiyonlar seti oluşturduğundan, operatörün özfonksiyonlarının lineer bir süperpozisyonu olarak ifade edilebilir. Burada genişleme katsayıları, c_n Fourier serisi teorisinden bilinir:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \quad , \quad c_n = \int \psi_n^* \, \psi \, d\xi \tag{2.15}$$

$\hat{A}$ operatörüne karşılık gelen fiziksel bir niceliği ölçerken, ayrık spektrumdan belirli bir özdeğer a_n elde edilecek olma olasılığı, Ψ fonksiyonunun açısal olarak açılımında karşılık gelen katsayının kare modülüne eşittir, yani $|c_n|^2$'dir.

Eğer $\int \psi_m^* \, \psi_n \, d\xi$ integralleri sıfıra eşitse, fonksiyonların ortogonal olduğunu söyleriz. Eğer fonksiyon normalleştirilmiş ortogonal fonksiyonlar kümesine aitse, o zaman fonksiyona ortonormal denir. Bu tür fonksiyonların tanımı şu şekilde yazılır:

$$\int \psi_m^* \, \psi_n \, d\xi = \delta_{mn} \tag{2.16}$$

Bazı durumlarda, birkaç özfonksiyon bir operatörün bir özdeğerine aittir, o zaman bunlara dejenere fonksiyonlar denir. Burada aynı dejenere değere sahip özfonksiyonların mutlaka ortogonal olmadığı unutulmamalıdır.

Yukarıdaki ilişkiler sürekli bir spektrum durumunda genelleştirilebilir, daha sonra dalga fonksiyonu ψ, sürekli bir spektrum ile a miktarının tüm özfonksiyonları ψ_a sistemi üzerinde bir integrale genişletilecektir.

$$\psi(\xi) = \int c_a \, \psi_a(\xi) \, da \, , \; c_a = \int \psi_a^*(\xi) \, \psi(\xi) \, da \tag{2.17}$$

Buradaki işlem, a değerinin alabileceği tüm değerler aralığı üzerinden gerçekleştirilir. Sürekli spektrumun özfonksiyonlarının ortonormal olması koşulu Dirac delta fonksiyonu kullanılarak yazılabilir.

$$\int \psi_a^* \, \psi_{a'} da = \delta(a - a') \tag{2.18}$$

Sürekli spektrumun özfonksiyonları sonsuzda kaybolmaz ve bu nedenle kare integral alınamaz. Bu nedenle normalizasyon koşulu artık biçiminde yazılamaz.

Bunun yerine, fonksiyonlar $|c_n|^2$'de dikkate alınan fiziksel niceliğin, dalga fonksiyonu ψ tarafından tanımlanan durumda belirli bir a ve a^+'da aralığında bir değere sahip olma olasılığı olacak şekilde normalleştirilir. Bunun için Dirac δ-fonksiyonuna normalize etmek uygundur. Bu durumda normalizasyon koşulu, ortogonallik koşuluna benzer şekilde ifade edilebilmektedir.

2.3. 3 Boyutta Momentum Operatörleri

Momentum operatörü, momentumu tanımlamak için kullanılan bir kuantum mekanik operatörüdür. Enerji ve momentum operatörleri şu şekilde oluşturulabilir:

i) Tek Boyutlu Durum

Düzlem dalga biçimindeki tek boyutlu Schrödinger denkleminin çözümü şu şekildedir:

$$\psi = e^{i(kx-\omega t)} \tag{2.19}$$

Koordinata göre birinci dereceden türev:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ike^{i(kx-\omega t)} = ik\psi \tag{2.20}$$

bulunur.

k'yi de Broglie'nin bağıntısından ifade edersek:

$$p = \hbar \cdot k \tag{2.21}$$

yazarız. Bu durumda;

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}\psi \tag{2.22}$$

Böylece momentum operatörü için:

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{2.23}$$

eşitliğine ulaşırız. Deneyde ölçülen miktarlar, verilen operatörün özdeğerleridir. Kısmi türev lineer bir operatör olduğundan, momentum operatörü de lineerdir. Her dalga fonksiyonu durumların kuantum süperpozisyonu olarak ifade edilebildiğinden, bu momentum operatörü tüm dalga süperpozisyonu üzerinde etki ettiğinde, toplamı dalga süperpozisyonunun ortaya çıkan momentumu olan her bir düzlem dalga için özdeğerler verir.

ii) Üç Boyut

Koordinatlara göre kısmi türevleri içeren gradyen operatörü dışında üç boyutlu denklem aynı şekilde yazılır. Üç boyutlu durumda, Schrödinger denkleminin düzlem dalgalar biçimindeki çözümü aşağıdaki gibi olacaktır:

$$\psi = e^{i(kr-\omega t)} \tag{2.24}$$

Burada gradyen;

$$\nabla\psi = e_x\frac{\partial\psi}{\partial x} + e_y\frac{\partial\psi}{\partial y} + e_z\frac{\partial\psi}{\partial z}$$

$$= ik_x\psi e_x + ik_y\psi e_y + ik_z\psi e_z$$

$$= \frac{i}{\hbar}(p_x e_x + p_y e_y + p_z e_z)\psi$$

$$= \frac{i}{\hbar}\hat{p}\psi \tag{2.25}$$

olmak üzere, e_x, e_y, e_z üç boyut için birim vektörlerdir. Dolayısıyla;

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \tag{2.26}$$

Bu, koordinat gösteriminde bir momentum operatörüdür. Burada uzamsal değişkenlere göre kısmi türevler alınır.

2.4. Hilbert Uzayı ve Operatörün Eşleniği

Hilbert uzayı, Öklid uzayının bir genellemesidir, sonsuz boyutu kabul eder ve skaler çarpım tarafından üretilen metrikte tamamlanır. Adını David Hilbert'ten almıştır.

Hilbert uzayındaki en önemli araştırma nesnesi lineer operatörlerdir. Hilbert uzayı kavramı, Hilbert ve Schmidt'in integral denklemler teorisi üzerine çalışmalarında oluşturuldu ve von Neumann, Rees ve Stone'un Hermityen operatörler teorisi üzerine çalışmalarında soyut bir tanım verildi.

$F = \{f \mid f \in \mathbb{R} \ veya \ f \in \mathbb{C}\}$ ile gösterilen fonksiyonlar kümesi için $f, g, h \in F, \quad a \in \mathbb{C}$ olmak üzere;

i) $f + g = g + f$

ii) $f + (g + h) = (f + g) + h$

iii) $-1.f = -f$

iv) $0.f = 0$

v) $a.(f + g) = a.f + a.g$

şeklinde bilinen kurallarla tanımlayalım. Bu kurallar altında F kümesi sonsuz boyutlu bir lineer uzay (vektör uzayı) yapısı kazanmış olur. Bu uzayda sonlu boyutlu alt vektör uzayları da tanımlanabilir.

Bu fonksiyon uzayında sonuç bir kompleks skaler olmak üzere herhangi iki $f$ve g fonksiyonları arasında;

$$< f \mid g > = \int_{tüm\ uzay} f^*(r) g(r) d^3r \quad \epsilon\, \mathbb{C} \tag{2.27}$$

şeklinde iç çarpım tanımlamış olalım.

$< f \mid g >$ iç çarpım gösterimi Dirac'ın (1902-1984) braket(parantez) yazımı olarak adlandırılır. Bu iç çarpımda $< f \mid$ ifadesi bra, $\mid g >$ ifadesi de ket'i temsil eder.

Bu iç çarpımın özellikleri:

$f, g \epsilon F, \quad a, b \epsilon\, \mathbb{C}$ olmak üzere;

i) $< f \mid g >^* = < g \mid f >$

ii) $< f \mid a.g_1 + b.g_2 > = a < f \mid g_1 > + b < f \mid g_2 >$

(Bu iç çarpım sağdan lineerdir.)

iii) $< a.f_1 + b.f_2 \mid g > = a^* < f_1 \mid g > + b^* < f_2 \mid g >$

(Bu iç çarpım soldan lineer değildir.)

iv) İç çarpımın sonucu gerçel sayı olmayabilir. Dolayısıyla burada açı kavramı tanımlanamaz fakat boy ve diklik kavramı tanımlanabilir.

$$\|f\|^2 := < f \mid f > \tag{2.28}$$

olarak tanımlanır.

$$\|f\|^2 = < f \mid f > \geq 0 \tag{2.29}$$

ve

$$\|f\| = 0 \iff f = 0 \tag{2.30}$$

şeklinde olup $\|f\|^2 = 1$ koşulunu sağlayan fonksiyonlara boyu bir olan fonksiyonlar denir.

$$< f \mid g > = 0 \tag{2.31}$$

koşulunu sağlayan f, g fonksiyonlarına birbirine diktirler denir ve $f \perp g$ veya $\mid f > \perp \mid g >$ ile gösterilir.

$f = 0$ fonksiyonu bu uzayda 0 vektörüdür, boyu sıfırdır ve her fonksiyona diktir.

Boyu sonlu, yani

$$\|f\|^2 = \int_{tüm\ uzay} |f(x)|^2\, d^3r < \infty \tag{2.32}$$

özelliğine sahip fonksiyonlara karesi integrallenebilir fonksiyonlar denir.

Boyu sonlu ve koordinatlar $\pm\infty$ limitine giderken "yeteri kadar hızlı" sıfıra giden fonksiyonların iç çarpım uzayına

$$\varkappa = \left\{ f \in F \mid \ \|f\|^2 < \infty, \lim_{|x|\to\infty} f(x) \to 0 \right\} \tag{2.33}$$

Hilbert uzayı gerçek ya da karmaşık sayıların alanı üzerinde doğrusal (vektör) bir uzaydır.

2.5. İşlemcilerin Yerdeğiştirme İlişkileri

Bir fizik deneyinde, sistem üzerinde birden fazla ölçüm alınmak istenebilir. Her bir ölçüm için farklı işlemciler kullanılabilir.

Klasik mekanikten farklı olarak, kuantum mekaniğinde bazı işlemci grupları için, önce ya da sonra ölçüm almak önemlidir. Kuantum mekaniğindeki bu işlemcilerin, dalga fonksiyonuna farklı sıralarda uygulanmaları, farklı sonuçlar doğurur ve bu özellik

$$[\hat{A},\ \hat{B}]\psi(x) = (\hat{A}\cdot\hat{B})\psi(x) - (\hat{B}\cdot\hat{A})\psi(x) \neq 0 \tag{2.34}$$

şeklinde gösterilebilir. Böyle işlemciler, birbirleriyle "sıra değiştiremez işlemciler" olarak isimlendirilirler. Bunun yanında, çarpım sırasının öneminin olmadığı, başka bir ifade ile

$$[\hat{A},\ \hat{B}]\psi(x) = (\hat{A}\cdot\hat{B})\psi(x) - (\hat{B}\cdot\hat{A})\psi(x) \neq 0 \tag{2.35}$$

koşulunu sağlayan işlemciler ise, birbirleri ile sıra değiştiren işlemciler olarak tanımlanırlar. Bu işlemcilerin dalga fonksiyonuna farklı sıralarda uygulanmaları, aynı sonucun elde edilmesi ile sonuçlanır.

Sıra değiştirme bağıntıları, makroskobik dünyadan şu şekilde örneklenebilir: Birbirine dik iki eksen üzerinde herhangi bir (a,b) koordinatında bulunan bir cismin, ardı ardına iki farklı yönde ötelenmesiyle (c,d) noktasına ulaşması, ötelemelerin uygulanma sırasından bağımsızdır. Dolayısıyla bu farklı ötelemeler "sıra değiştirebilir" denir. Buna karşılık, cismin bu iki farklı eksen etrafında ardı ardına döndürülmesi ise, döndürme eksenlerin sırasına bağlıdır ve bu döndürmeler "sıra değiştiremez" denir. Sıra değiştirme bağıntıları ile yukarıda belirtilen Heisenberg belirsizlik ilkesi arasında, doğrudan bir ilişki vardır. Bu ilişki matematiksel olarak aşağıdaki denklem ile gösterilebilir.

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle \cdot \langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \tfrac{1}{4}\left|\langle\hat{A}\cdot\hat{B} - \hat{B}\cdot\hat{A}\rangle\right|^2. \tag{2.36}$$

Bu ifadeye göre, iki işlemcinin belirsizlikleri çarpımının alt sınırı, işlemcilerin sıra değiştirip değiştirmeyeceği ile ilişkilidir. Birbiriyle sıra değiştiren işlemciler, aynı anda ve kesin bir doğrulukla ölçülebilirken, birbiriyle sıra değiştiremeyen işlemciler, aynı anda ve kesin bir doğrulukla ölçülemez.

2.6. Hermite-sel Eşlenik ve Hermite-Sel Operatörler

$f, g \in \varkappa$, $\hat{A}$ ve $\hat{A}^{\dagger}$ şeklinde belirtilen operatörler için $\hat{A}^{\dagger}$ operatörüne $\hat{A}$ operatörünün Hermite-sel Eşleniği denir.

$$< f \mid \hat{A}^{\dagger} \mid g > = < \hat{A} f \mid g > \tag{2.37}$$

$$\int_{tüm\ uzay} f^{*}\, \hat{A}^{\dagger} g\, d^{3}r = \int_{tüm\ uzay} (\hat{A}\, f)^{*} g\, d^{3}\, r \tag{2.38}$$

Hermite-sel Eşlenik Özellikleri:

i) $(\hat{A}^{\dagger})^{\dagger} = \hat{A}$

ii) $(\hat{A}\,\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$

iii) $(a_1.\hat{A}_1 + a_2\hat{A}_2)^{\dagger} = a_1^{*}.\hat{A}_1{}^{\dagger} + a_2^{*}.\hat{A}_2{}^{\dagger}$

Genel olarak $\hat{A}^{\dagger} \neq \hat{A}$ şeklindedir. Fakat Hermite-sel eşleniği kendilerine eşit olan özel operatörler vardır ki bunlara da Hermite-sel operatör denir.

$\hat{A}$ kendine Hermite-sel operatör ise, yani;

$$< f \mid \hat{A} \mid g > = < f \mid \hat{A}^{\dagger} \mid g > = < \hat{A} f \mid g > \tag{2.39}$$

ise bu kısaca $\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$ ile gösterilir.

$\hat{A}$ ve $\hat{B}$ Hermite-sel iki operatör ise çarpımlarının da Hermite-sel olabilmesi için gerek ve yeter koşul $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ olmasıdır.

Hermite-sel bir operatörün öz değerleri gerçektir ve farklı öz değerlere karşılık gelen fonksiyonları birbirine diktir. Bunun ispatını şu şekilde yapabiliriz:

$\hat{A}$ operatörü Hermite-sel operatör olsun. $|u_a >, |u_b >$; $\hat{A}$ operatörünün iki öz fonksiyonu olsun. a ve b de bu öz fonksiyonlara karşılık gelen öz değerler olsun.

$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$

$\hat{A}\,|u_a> = a.|u_a> \rightarrow <u_a|\hat{A} = <u_a|\,a^*$

$\hat{A}\,|u_b> = b.|u_b> \rightarrow <u_b|\hat{A} = <u_b|\,b^*$

$<u_a|\,\hat{A}\,|u_b>$ ifadesinde $\hat{A}$ operatörünü sağdan ve soldan işleme alırsak;

Sağdan; $<u_a|\,\hat{A}\,|u_b> = <u_a|\,b\,|u_b> = b.<u_a|\,u_b>$

Soldan; $<u_a|\,\hat{A}\,|u_b> = <u_a|\,a^*\,|u_b> = a^*.<u_a|\,u_b>$

Bu durumda $a^*.<u_a|\,u_b> = b.<u_a|\,u_b>$ elde edilir.

Yani $(a^* - b)\,.<u_a|\,u_b> = 0$ elde edilir.

i) $a = b$ olsun.

$(a^* - a)\,.<u_a|\,u_a> = 0$

$(a^* - a)\,.\|u_a\|^2 = 0$

$\|u_a\| \neq 0$ olduğundan $(a^* - a) = 0$ olur ki $a^* = a$ elde edilir. O hâlde a gerçektir.

$a = b$ seçildiğinden b de gerçektir.

ii) $a \neq b$ olsun.

$(a^* - b)\,.<u_a|\,u_b> = 0$

$<u_a|\,u_b> = 0$

Böylelikle $|u_a> \perp |u_b>$ elde edilir.

3. KUANTUM FİZİĞİ VARSAYIMLARI

3.1. Heisenberg Belirsizlik İlkesi

Kuantum mekaniğinde, sıra değiştirmeyen operatörler tarafından tanımlanan herhangi bir durum değişkeni arasında bir belirsizlik ilişkisi ortaya çıkar. Ayrıca parçacık-dalga ikiliğinin parçacıklar için en azından kısmen doğru olduğu varsayılır. Bu yaklaşımda, parçacığın konumu, parçacığa karşılık gelen dalganın konsantrasyon yeri tarafından belirlenir. Parçacığın momentumu dalga boyu ile ilişkilidir ve belirsizlik ilişkileri ile dalgaların özellikleri arasında açık bir analoji ortaya çıkar. Dalga uzayda dağıldığı sürece konum belirsizdir ve momentumun belirsizliği, zaman içinde farklı noktalarda ölçüldüğünde dalga boyunun belirsizliğinden türetilir. Bir dalga nokta benzeri bir bölgedeyse, konumu iyi bir doğrulukla belirlenir. Ancak kısa dalga dizisi şeklindeki böyle bir dalga, sonsuz monokromatik dalganın belirli bir dalga boyu özelliğine sahip değildir.

Dalga fonksiyonu, parçacığa karşılık gelen dalga olarak alınabilir. Kuantum mekaniğinin çok-dünyalı yorumunda, bir parçacığın konumunun her ölçümünde uyumsuzluk meydana gelir. Buna karşılık, kuantum mekaniğinin Kopenhag yorumunda, bir parçacığın konumunun her ölçümünde, dalga fonksiyonunun parçacığın bulunduğu küçük bir bölgeye çöktüğü ve bu bölgenin dışında dalga fonksiyonunun çöktüğü söylenir. Dalga fonksiyonunun gerçek fiziksel niceliklerle yalnızca dolaylı olarak ilişkili olması nedeniyle, bir parçacığın bir özelliği olarak dalga fonksiyonunun davranışını eşleştirmek için bu açıklamanın olası bir yöntem olduğu varsayılır. Bu yorum, dalga fonksiyonunun karesinin uzayda bir parçacık bulma olasılığını gösterdiği gerçeğinden kaynaklanmaktadır. Küçük bir alan için, bir parçacığın momentumu, momentumu ölçme prosedürü nedeniyle her boyutta doğru bir şekilde ölçülemez. Pozisyonu ölçerken, parçacık, dalga fonksiyonunun maksimum olduğu yerde daha sık tespit edilecek ve bir dizi özdeş ölçümde, en olası pozisyon $\langle X \rangle$ görünecek ve ondan standart sapma belirlenecektir:

$$\Delta X = \sqrt{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle} \tag{3.1}$$

Benzer şekilde, bir dizi özdeş ölçümde, olasılık dağılımı gerçekleştirilir, istatistiksel varyans ve parçacığın ortalama momentumundan standart sapma belirlenir:

$$\Delta P = \sqrt{\langle (P - \langle P \rangle)^2 \rangle} \tag{3.2}$$

Bu miktarların çarpımı, belirsizlik ilkesi ile ilişkilidir:

$$\Delta P \Delta X \geq \frac{\hbar}{2} \tag{3.3}$$

Bazı durumlarda, bir değişkenin "belirsizliği", değerlerin %50'sini içeren aralığın en küçük genişliği olarak tanımlanır. Bu, değişkenlerin normal dağılımı durumunda, belirsizliklerin çarpımının daha büyük bir düşüklüğe yol açmasına neden olur. Belirsizlik ilişkisine göre, durum öyle olabilir ki, x yüksek doğrulukla ölçülebilir, ancak o zaman p yalnızca yaklaşık olarak bilinebilir veya tam tersi, x tam olarak belirlenemezken p tam olarak belirlenebilir. Diğer tüm durumlarda hem x hem de p, "makul" ancak keyfi olarak yüksek hassasiyetle ölçülebilir.

Belirsizlik ilişkileri, herhangi bir ölçümün doğruluğunun teorik sınırına kısıtlamalar getirir. Bunlar, bazen John von Neumann ölçümleri olarak adlandırılan ideal ölçümler için geçerlidir. Lev Davidovich Landau'ya göre kusurlu ölçümler veya ölçümler için hepsi daha doğrudur. Günlük yaşamda genellikle belirsizliği görmeyiz çünkü $\hbar$ 'ın değeri son derece küçüktür.

Kural olarak, herhangi bir parçacık aynı anda hem "klasik nokta parçacık" hem de dalga olarak tanımlanamaz. Başlangıçta Heisenberg tarafından önerildiği gibi belirsizlik ilkesi, bu iki tanımdan hiçbiri tamamen ve münhasıran uygun olmadığında geçerlidir. Bir örnek, bir kutuda belirli bir enerji değerine sahip bir parçacıktır. Böyle bir parçacık, belirli bir "konum" (potansiyel duvardan uzaklığın herhangi bir belirli değeri) veya belirli bir momentum değeri (yönü dahil) ile karakterize edilmeyen bir sistemdir.

3.2. Schrödinger Denklemi

Schrödinger, dalga fonksiyonunun klasik diferansiyel denklemini olasılık dalgaları kavramına uyguladı ve adını taşıyan ünlü denklemi elde etti. Dalga fonksiyonunun olağan denkleminin, dalgalanmaların yayılmasını tanımlaması gibi, Schrödinger denklemi de uzayda belirli bir noktada bir parçacık bulma olasılığı olan bir dalganın yayılmasını tanımlar. Bu dalganın tepe noktaları (maksimum olasılık noktaları),

parçacığın uzayda olma olasılığının en yüksek olduğu yeri gösterir. Schrödinger denkleminin matematiksel olarak önemli olmasının yanı sıra modern fiziği anlamak için de bir o kadar önemlidir. Schrödinger denklemini tek boyut için sunacağım. Yunanca ψ ("psi") harfi ile gösterilen yukarıda bahsedilen olasılık dağılımı dalga fonksiyonu, aşağıdaki diferansiyel denklemin çözümüdür. Bu olasılık bir dalga gibi davranır:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - U)\psi = 0 \tag{3.4}$$

Burada m, E ve U sırasıyla parçacığın kütlesi, toplam enerjisi ve potansiyel enerjisidir. Schrödinger denkleminin bize verdiği kuantum olaylarının resmi, elektronların ve diğer temel parçacıkların okyanus yüzeyinde dalgalar gibi davranmasıdır. Zamanla, dalganın tepe noktası (elektronun bulunma olasılığının en yüksek olduğu yere karşılık gelir), bu dalgayı tanımlayan denkleme göre uzayda kayar. Yani, kuantum dünyasında geleneksel olarak bir parçacık olarak kabul ettiğimiz şey, bir dalga gibi davranır.

Schrödinger sonuçlarını ilk yayınladığı zaman, teorik fizik dünyasında bir fırtına patlak verdi. Gerçek şu ki, daha önce, Schrödinger'in çağdaşı Werner Heisenberg tarafından gözlenebilir nicelikler üzerine kurulu matris denklemi verilmişti. Kargaşa, bilim adamlarının mikro dünyanın tanımına eşit derecede ikna edici iki yaklaşımın birbiriyle çelişmesinden korkmalarından kaynaklandı. Heyecan boşunaydı. Aynı yıl Schrödinger'in kendisi iki teorinin tam denkliğini kanıtladı. Yani matris denklemi dalga denkleminden çıkar ve bunun tersi de geçerlidir; sonuçlar aynıdır. Bugün Schrödinger'in versiyonu daha yaygın olarak kullanılmaktadır. Bunun sebebi ise Schrödinger denkleminin matrislere göre fizikçiler tarafından daha çok kullanılan diferansiyel denklem olmasıydı.

Ancak elektron gibi bir şeyin dalga gibi davrandığını hayal etmek ve kabul etmek o kadar kolay değildir. Günlük yaşamda ya bir parçacık ya da bir dalga ile karşı karşıyayız. Top bir parçacıktır, ses bir dalgadır ve hepsi bu kadar. Kuantum mekaniği dünyasında işler o kadar basit değil. Aslında kuantum dünyasında varlıklar alışık olduğumuz nesnelerden farklıdır ve farklı özelliklere sahiptir. Eskiden bir dalga olarak düşündüğümüz ışık, bazen bir parçacık (foton olarak adlandırılır) gibi davranır ve elektron ve proton gibi parçacıklar da dalgalar gibi davranabilir.

Bu problem genellikle kuantum parçacıklarının ikili doğası veya dalga-parçacık doğası olarak adlandırılır. Atom altı dünyanın tüm nesnelerinin doğasında var gibi görünmektedir. Mikro kozmosta, maddenin hangi formları alabileceği ve nasıl davranabileceğine dair günlük sezgisel fikirlerimizin basitçe uygulanamaz olduğunu anlamalıyız. Eskiden parçacık olarak düşündüğümüz şeyin hareketini tanımlamak için dalga denklemini kullandığımız gerçeği, bunun çarpıcı bir kanıtıdır. Giriş bölümünde belirtildiği gibi, bunda özel bir çelişki yoktur. Ne de olsa, makro kozmosta gözlemlediğimiz şeyin mikro kozmos düzeyinde doğru bir şekilde yeniden üretilmesi gerektiğine inanmak için hiçbir nedenimiz yok. Bununla birlikte, temel parçacıkların ikili doğası, birçok insan için kuantum mekaniğinin en anlaşılmaz ve rahatsız edici yönlerinden biri olmaya devam ediyor ve tüm sorunların Erwin Schrödinger ile başladığını söylemek abartı olmaz.

Başka bir özellik, diferansiyel denklemin matematiksel özelliklerinden kaynaklanmaktadır. Yani, Schrödinger denkleminin dalga fonksiyonları şeklinde iki çözümü varsa, bu dalga fonksiyonlarının toplamı da Schrödinger denkleminin bir çözümü olacaktır. Bu özellik, kuantum süperpozisyonunun kalbinde yer alır.

Yalıtılmış bir sistemin (ve sabit bir dış alandaki bir sistemin) toplam enerjisi zamana bağlı değildir. Bu nedenle, belirli bir durumda enerji belirli bir değere sahipse, bu değer zaman içinde sabit kalır. Enerjinin belirli değerlere sahip olduğu ve zamana bağlı olmadığı bu tür durumlara durağan durumlar denir. Hamiltonyen ψ_n'in özfonksiyonları ile tanımlanırlar ve sistemin enerjisi Hamiltonyen operatörünün özdeğeridir:

$$\hat{H}\psi_n(\xi,t) = E_n\psi_n(\xi,t) \tag{3.5}$$

Durağan bir durum için, $\psi_n(\xi,t) = \psi_n(\xi)\varphi\,(\mathrm{t})$ değişkenleri ayrılabilir, burada ψ_n yalnızca koordinatların bir fonksiyonudur. Şimdi, değişkenlerin ayrılmasını dikkate alarak, formüle Hamiltonyeni yazalım:

$$i\hbar\psi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{dt}} = \frac{-\hbar^2}{2m}\varphi\nabla^2\psi + U\psi\varphi \tag{3.6}$$

Bu denklemi $\frac{1}{\psi\varphi}$ ile çarpar isek:

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{dt}} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi + U \tag{3.7}$$

elde ederiz.

Denklemin sol tarafı zamana bağlıdır, sağ taraftaki ilk terim sadece koordinatlara bağlıdır ve son terime göre enerji boyutuna sahiptir. Sağ tarafı E enerjisi ile gösterelim ve elde edilen diferansiyel denklemi integrasyon yöntemiyle çözelim.

$$i\hbar \frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{dt}} = E$$

$$\int \frac{d\varphi}{\varphi} = \int \frac{E}{i\hbar}\mathrm{dt}$$

$$ln\,\varphi = \frac{E}{i\hbar}t + cosnt$$

$$\varphi = \mathrm{ce}^{-\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}t} \tag{3.8}$$

elde etmiş oluruz.

Şimdi, Schrödinger denklemi − i E t'nin çözümünün zaman kısmının periyodik fonksiyon $\varphi = \mathrm{ce}^{-\mathrm{iE_n}t}$ olduğu ve durağan durum için toplam zamana bağlı dalga fonksiyonu $\psi_n(\xi, t)$ olduğu görülebilir. Bu durumda:

$$\psi_n(\xi, t) = \psi_n(\xi).\,\mathrm{e}^{-\mathrm{iE_n}t/\hbar} \tag{3.9}$$

elde ederiz.

ψ, zaman faktörü olmadan durağan durumların dalga fonksiyonlarını belirtir, bunlar denklem tarafından verilir.

$$\widehat{H}\psi(\xi) = E\psi(\xi). \tag{3.10}$$

Bu, Hamiltoniyenin özdeğerleri ve fonksiyonları için bir denklem olarak yorumlanabilen durağan Schrödinger denklemidir. Sistemin Hamiltoniyeninin özdeğerlerinin fiziksel anlamını gösterelim. Sistem ψ_n durumundaysa, ortalama enerji;

$$< E_n > = \int \psi_n^* \widehat{H}\psi_n d\xi$$

$$= \int \psi_n^* E_n \psi_n d\xi$$

$$= E_n \int \psi_n^* \psi_n d\xi$$

$$= E_n \tag{3.11}$$

ile hesaplanır.

Özdeğerler böylece sistemin enerjisini temsil eder. Şimdi formül kullanılarak denklem ile açıklanan durağan durumun enerjisinin dağılımını bulalım:

$$< E_n^2 > = \int \psi_n^* \hat{H}^2 \psi_n d\xi$$

$$= \int \psi_n^* \hat{H}(E_n \psi_n) d\xi$$

$$= E_n \int \psi_n^* \hat{H} \psi_n d\xi$$

$$= E_n^2 \tag{3.12}$$

sonucunu kullanarak

$$\sigma_{E_n}^2 = < E_n^2 > - < E_n >^2$$

$$= E_n^2 - E_n^2$$

$$= 0 \tag{3.13}$$

elde ederiz. Böylece, dalga fonksiyonu Hamiltonyen'in özfonksiyonu olan bir sistem için, enerji kesinlikle belirli bir niceliktir ve bu fonksiyona karşılık gelen özdeğer ile çakışır.

Toplam dalga fonksiyonu formülünden, durağan durumda, E'ye ek olarak, bir parçacığın tespit edilme olasılığının uzamsal dağılımının zamana bağlı olmadığı görülebilir:

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = \psi^2(\xi) e^{-\frac{Et}{\hbar}} e^{+\frac{Et}{\hbar}} = \psi^2(\xi). \tag{3.14}$$

3.3. Dalga Fonksiyonunun Olasılık Yorumu

Kuantum fiziği, bir kuantum parçacığı veya bir parçacık sistemi ile karşılaştırılabilir olan gözlemlenebilir fiziksel niceliklerin değerlerini hesaplamayı mümkün kılar.

Bir kuantum sisteminin bulunduğu durum, bir dizi sayısal değişkenle tanımlanır. Sistemi mümkün olduğunca tam olarak tanımlayan değişkenler kümesini biliyorsak, böyle bir sistemin durumuna "temiz" denir. "Saf" durumlar için her zaman, genellikle istatistiksel olmak üzere belirli sonuçlara kesinlikle yol açan eksiksiz bir ölçüm süreçleri sistemi vardır. Bu nedenle, örneğin t = 0 gibi bir andaki böyle bir sistemin durumunun bilgisi ve dinamik özellikleri, sistemin sonraki zamandaki durumunu tahmin etmemizi sağlar.

Sistemin bazı parametreleri bilinmiyorsa, durum bir dizi saf durumun istatistiksel bir karışımı olarak temsil edilebilir. Bu tür koşullara "karışık" denir. Parçacıklardan oluşan bir sisteme uygulandığında, sistemin saf durumda olduğu ek bir "dolaşık" durum ayırt edilir, ancak sistemin tek tek parçaları için saf durumlar ayırt edilemez. Bu nedenle, sistem tek bir saf durum olarak tanımlanır.

Fiziksel parçacıkların veya sistemlerin saf durumları ve dinamik özellikleri, karmaşık dalga fonksiyonları $\psi\,(\xi, t)$ ile tam olarak tanımlanabilir, burada ξ genelleştirilmiş koordinatlardır (bazı uzaydaki konumu belirlemek için gerekli bir dizi bağımsız değişken) ve t zamandır. Born tarafından önerilen olasılık yorumuna göre, dalga fonksiyonunun modülünün karesi $|\psi|^2$, uzayda seçilen bir noktada bir parçacığın tespit edilme olasılığı ile orantılıdır ve olasılık yoğunluğu ρ'dur.

Sistemin tüm olası koordinatlarının değerlerinin olasılıklarının toplamı bire eşit olmalıdır, bu nedenle tüm uzay üzerinde $|\psi|^2$ integralinin sonucu da bire eşit olmalıdır.

20. yüzyılın başlangıcı, kuantum fiziğinin gelişiminde yeni bir aşamaya yol açtı. Dalga özelliklerini dikkate alarak mikropartiküllerin hareket ve etkileşim yasalarını tanımlayan kuantum mekaniğinin yaratılması. Yaratılışı ve gelişimi 1900'den (Planck tarafından kuantum hipotezinin formülasyonu) 1920'lere kadar olan dönemi kapsar ve her şeyden önce Avusturyalı fizikçi E. Schrödinger, Alman fizikçi W. Heisenberg ve İngiliz fizikçi P. Dirac'ın çalışmaları ile ilişkilidir.

Mikropartiküllerin tanımına olasılıksal bir yaklaşıma duyulan ihtiyaç, kuantum teorisinin en önemli ayırt edici özelliğidir. De Broglie dalgaları olasılık dalgaları olarak yorumlanabilir mi? Uzayda farklı noktalarda bir mikropartikül tespit etme olasılığının dalga yasasına göre değiştiği düşünülebilir mi? De Broglie dalgalarının yorumu zaten yanlıştır, çünkü o zaman uzayın bazı noktalarında bir parçacığı tespit etme olasılığı negatif olabilir ve bu mantıklı değildir.

Bir mikro nesnenin durumunun bir dalga fonksiyonu kullanılarak tanımlanması istatistiksel, olasılıksal bir yapıya sahiptir: Dalga fonksiyonunun modülünün karesi, parçacığın bir bölgede bulunma olasılığını belirler.

Bu nedenle, kuantum mekaniğinde, bir parçacığın durumu temelde yeni bir şekilde tanımlanır; onlar hakkında ana bilgi taşıyıcısı olan bir dalga fonksiyonunun yardımıyla.

$|\psi|^2 = dW/dV$ olasılık yoğunluğu anlamına gelir. Yani koordinatları x, y, z olan bir noktanın yakınında birim hacim başına bir parçacık bulma olasılığını belirler. Bu nedenle, fiziksel anlamı olan Ψ fonksiyonunun kendisi değil, de Broglie dalgalarının yoğunluğunu belirleyen modülünün karesidir.

Olasılık toplama teoremine göre, sonlu bir V hacminde t zamanında bir parçacık bulma olasılığı:

$$W = \int_V dW = \int_V |\psi|^2 \, dV \tag{3.15}$$

Çünkü, $|\psi|^2 dV$ olasılık olarak tanımlanırsa, tüm uzayın sonsuz hacmi; V hacmi olarak alınırsa, güvenilir bir olayın olasılığının bire dönüşmesi için dalga fonksiyonunu temsil etmek gerekir. Bu, bu koşul altında parçacığın uzayda bir yerde olması gerektiği anlamına gelir. Bu nedenle, olasılıkları normalleştirme koşulu:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dV = 1 \tag{3.16}$$

şeklinde yazılır.

Bu integral sonsuz uzayın tamamı üzerinden hesaplanmaktadır. Böylece, normalleştirme koşulu, bir parçacığın zaman ve uzayda nesnel varlığından bahseder.

Dalga fonksiyonunun bir mikroparçacığın durumunun nesnel bir özelliği olması için, bir dizi sınırlayıcı koşulu karşılaması gerekir. Bir hacim elemanında bir mikropartikül tespit etme olasılığını karakterize eden fonksiyon ψ şu özelliklere sahip olmalıdır:

- Final (olasılık birden fazla olamaz);
- Belirli (olasılık belirsiz bir değer olamaz);
- Sürekli (olasılık aniden değişemez).

Dalga fonksiyonu süperpozisyon ilkesini karşılar: Eğer sistem dalga fonksiyonları tarafından tanımlanan çeşitli durumlarda olabilir ise o zaman bu fonksiyonların lineer bir kombinasyonu ile tanımlanan bir durumda olabilir:

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n \quad ; \quad n = 1, 2, 3 \, . \tag{3.17}$$

Dalga fonksiyonlarının eklenmesi temel olarak kuantum teorisini, olasılık toplama teoreminin bağımsız olaylar için geçerli olduğu klasik istatistiksel teoriden ayırır.

Dalga fonksiyonu ψ, mikro nesnelerin durumunun ana özelliğidir. Örneğin, bir elektronun bir çekirdeğe olan ortalama uzaklığı aşağıdaki formülle hesaplanır.

$$< r > = \int_{-\infty}^{\infty} r \cdot |\psi|^2 \, dV \, . \tag{3.18}$$

3.4. Ortonormal Fonksiyon Kümeleri ve Dirac Denklemi

Dirac'ın denklemi, bir elektronun bispinor klasik alanı için göreli olarak değişmez bir hareket denklemidir ve aynı zamanda spin 1/2 ile diğer nokta fermiyonlarını tanımlamak için de geçerlidir; 1928 yılında P. Dirac tarafından kurulmuştur.

Dirac denklemi, Maxwell denklemleriyle birlikte, bir elektromanyetik alanla elektron akışını, bir elektron tarafından ışığın saçılmasını (Compton etkisi), bir foton tarafından bir elektron-pozitron çiftinin üretilmesini vb. kullanmayı mümkün kılar.

Bu denklemin keşfi için P. Dirac 1933'te Nobel Fizik Ödülü'nü almıştır.

Dirac denklemi şu şekilde yazılır:

$$\left(mc^2\alpha_0 + c\sum_{j=1}^{3} a_j p_j \right)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t), \tag{3.19}$$

Burada; m-elektronun kütlesi, c-ışık hızı, $p_j = -i\hbar\partial_j$ 3 boyutlu momentum operatörü (x, y, z cinsinden), $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h- planck sabiti, x- koordinat, t-zaman, $\psi(x,t)$- dört bileşenli kompleks dalga fonksiyonudur.

$\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ dalga fonksiyonu (Pauli matrisleri) üzerinde etki eden bispinor uzayı üzerinde lineer operatörlerdir. Bu operatörler, bu tür operatörlerin her bir çifti ters yönde etki edecek ve her birinin karesi bire eşit olacak şekilde seçilir:
$\alpha_i\alpha_j = -\alpha_j\alpha_i$ Burada; $i \neq j$ ve i, j endeksleri 0 ile 3 arasında değişir ve
${\alpha_i}^2 = 1\,;\;\; i = 0,1,2,3.$

Tartışılan gösterimde, bu operatörler Dirac alfa matrisleri olarak adlandırılan 4 × 4 matrislerle temsil edilir (bu, antikomütasyon koşullarının karşılandığı minimum matris boyutudur).

Denklemin sol tarafındaki parantez içindeki tüm operatöre Dirac operatörü denir (daha kesin olarak, modern terminolojide Dirac Hamiltonyen olarak adlandırılmalıdır, çünkü

Dirac operatörü artık genellikle Dirac denkleminin kullanıldığı kovaryant operatörü D olarak adlandırılır. Aşağıda açıklandığı gibi $D\psi = 0$ biçiminde yazılır).

Modern fizikte, Dirac denkleminin kovaryant gösterimi sıklıkla kullanılır:

$$\left(i\hbar c\Upsilon^{\mu}\partial_{\mu} - mc^{2}\right)\psi = 0. \tag{3.20}$$

3.5. Ehrenfest İlkesi

Ehrenfest teoremi (Ehrenfest denklemleri), gözlemlenebilir bir niceliğin beklenen değerleri için ifade edilmiş kuantum mekaniği denklemleridir. Bu denklemler ilk olarak 1927'de Paul Ehrenfest tarafından elde edildi.

Ehrenfest denklemi şu şekildedir:

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle \tag{3.21}$$

A bir kuantum gözlemlenebilir olduğunda, $\hat{H}$ sistemin Hamilton operatörüdür, açılı parantezler beklenen değeri ve köşeli parantezler komütatörü gösterir. Bu denklem Heisenberg denkleminden türetilebilir.

Belirli bir durumda, bir parçacığın q koordinatının ve p momentumunun beklenen değerlerinin zamanla değişimi aşağıdaki denklemlerle tanımlanır:

$$\frac{d}{dt}\langle q\rangle = \frac{1}{m}\langle p\rangle \tag{3.22}$$

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\langle\frac{\partial U}{\partial q}\rangle \tag{3.23}$$

Burada m parçacığın kütlesidir, U(q) parçacığın potansiyel enerjisinin operatörüdür. Ortalama koordinatlar ve momentum için Ehrenfest denklemleri, Hamilton'un kanonik denklemler sisteminin kuantum analoglarıdır ve Newton'un ikinci yasasının kuantum genelleştirmesini sağlar.

3.6. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi

Zaman-bağımsız Schrödinger denkleminin tahmin edilen dalga fonksiyonları durgun dalgalar formunda olabilir. Bu çözümlere durağan durumlar denir. Zaman-bağımlı Schrödinger denklemi durağan durumları içeren denklemdir. (Bu yalnız kullanılıyor ise Hamiltonyenin kendisi zamana bağımlı değildir. Genel olarak, dalga fonksiyonuna hala bir zamana bağımlılık vardır.)

Denklem-1

Zaman-bağımsız Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$E\psi = \hat{H}\psi \tag{3.24}$$

Durum denkleminin sözel ifadesi: Belli bir ψ dalga fonksiyonu üzerinde Hamiltonyen operatörü etki ediyor ise ve sonuç aynı ψ dalga fonksiyonuna orantılı ise ψ bir durağan durumdur, E parametresi ψ durumunun enerjisidir.

Zaman-bağımlı Schrödinger denklemini ise aşağıda daha detaylı açıklamış olarak bulabiliriz. Bu denklem bir özdeğer denklemidir.

Daha önce olduğu gibi, göreli-olmayan Schrödinger denklemi için en ünlü bulgu bir tek parçacık bir elektrik alanı içeren problemdir.

Denklem-2

Zaman-bağımsız Schrödinger denklemi tek bir parçacık için aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$E\psi(r) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r). \tag{3.25}$$

3.7. Olasılık Korunması

Kuantum mekaniğinde olasılık olağan anlamını kaybeder. Sıradan mekanikte, matematiksel tanımında, olayların gerçekleşme sıklığı olarak olasılığı kullanırız. Bir yazı tura atarsak, %50 olasılıkla bir tarafa, %50 olasılıkla diğer tarafa düşecektir. Elbette bu durumda madeni paranın simetrik olduğunu, etrafta karga olmadığını varsayıyoruz ve eğer kargalar uçuyorsa, o zaman sadece karganın parayı aldığı durumu ihmal ediyoruz, bu durumun önemsiz olduğuna inanıyoruz. Kuantum mekaniğinde bu yaklaşım yeterli değildir. Tüm olaylar olasılıklı bir şekilde tanımlanır, ancak yine de bu olasılık sıradan dünyadan çok daha olasıdır. Bu kural, kuantum girişimi kullanılarak hesaplanır. Olasılığı kullanmak yerine, olasılığın genliğini kullanırız ve bu genlikler birbirine eklenebilirler. İki ışık huzmesinin kıvrılarak ekrandaki bir girişim resmine dönüşebilmesi gibi, herhangi iki parçacığın etkileşimi, olasılık yasalarının eklenmesiyle gerçekleşir.

Örneğin: İki parçacığımız olsun ve bir parçacığın kırmızı olma olasılığını belirleyelim. Klasik dünyada bu parçacıkların biri kırmızı, biri beyaz parçacıklar içeren iki kovadan

alındığını bilirsek, diyeceğiz ki: “Çok basit: biri kırmızı, biri beyaz; belki iki kırmızı belki iki beyaz veya bir kırmızı, bir beyaz; toplamda dört seçenek var”. Bu, birinin kırmızı olma olasılığının dörtte üç olduğu anlamına gelir. Kuantum dünyasında ise: “Bir beyaz, bir kırmızı olabilir ve aralarında süperpozisyonlar da olabilir. Bir beyaz artı bir kırmızı veya bir beyaz, bir beyaz ve bir kırmızı artı bir kırmızı ve bir beyaz vb.” Bu, cevabı önemli ölçüde değiştirecek mi? “Kırmızı olma olasılığı nedir?” sorusunu sorarsak, o zaman değişmeyecektir, ancak parçacığın kırmızı eksi beyaz veya beyaz artı kırmızı olduğu durumları ölçebilirsek, o zaman bunun için bir temelde cevap farklı olacaktır.

Sıradan dünyada belirli anlamlara sahip bazı durumlarımız varsa (örneğin, bir kişi uyuyor veya bir kişi uyanık), o zaman bir kişiyi ölçebilir, ona bakabilir ve karar verebiliriz: O uyuyor veya uyanık denebilir. Bazen söylemek zordur, arada bir durum ortaya çıkar ve bir süperpozisyon durumuna geliriz. “Uykuda” ve “uyanık” durumları arasındaki bir kişi, bir olasılıkla uyuyor, bir olasılıkla uyanık. Ama böyle bir durumu yazarsak; onun durumu “uykuda” artı durumu “uyanıktır”. Aralarına nasıl eksi koyabiliriz? Klasik dünyada bunun bir anlamı yoktur. Ya uykuda ya da uyanık, belki arada bir yerde, ama “uyku eksi uyanık” ne anlama geliyor? Bir anlamı yoktur.

Fakat kuantum mekaniğinde bir anlam olduğu ortaya çıktı. Herhangi iki durum için, tam bir temel oluşturabilir ve durumları iki parçacık arasına artı ve eksi ile koyabilirsiniz. Bu durumlara süperpozisyonel durumlar denir ve olasılığın genliğinin olasılıklardan daha önemli olmasından İki parçacık klasik dünyadan biraz daha katıdır. Schrödinger, kuantum ve klasik mekanik arasındaki ilişkiyi göstermesi istendiğinde, Schrödinger kedisi olarak bilinen bir örnek verdi. Kuantum mekaniğinde klasik dünyada bir anlam ifade etmeyen süperpozisyon durumları olduğunu söyledi. Bu durumu anlayabilmek adına da bir örnekte bulundu. Bir kutuya bir kedi, bir şişe zehir ve zehri kıracak çok akıllı bir algoritma kurulmuş olsun. Bu algoritmada kimsenin ne zaman olduğunu bilmediği, bazı radyoaktif elementlerin bozunmasının şişeyi kırmak üzerine bu mekanizma ile ilişkilendirilsin. Bilinmeyen bir anda radyoaktif elementler bozunacaktır. Olasılık süreci ise şu şekildedir: Şişenin ne zaman kırılacağı bilinmemektedir, kutuyu açana kadar kedinin ölü mü canlı mı olduğunu bilinemez. Bu, kuantum mekaniğinin ne kadar anlaşılmaz olduğunu gösteren bir durumdur.

Aslında bu durum hiç de absürt değil. Ayrıca, kesinlikle klasiktir, çünkü bu sorunu düşünürseniz, kedinin canlı mı yoksa ölü mü olduğunu olağan olasılıkla kolayca tanımlayabilirsiniz. Zehrin çökme olasılığının zamanın bir işlevi, klasik bir anlamı olduğunu söyleyebilirsiniz. Herhangi bir zamanda, şişenin kırılma olasılığını ve buna göre kedinin canlı veya ölü olma olasılığını hesaplayabilirsiniz. Ve burada bir mucize yok çünkü "kedi yaşıyor eksi ölü" durumunu yazamazsınız. Kedinin ne canlı ne de ölü olduğu böyle bir temele sahip değilsiniz. Ama "canlı kedi eksi ölü" nedir? Hayal gücümüzde bile böyle bir şey yok. Klasik mekanikte, olasılıkları kullandığımızda, iki durum arasındaki bir faz, bir işaret kavramına sahip değiliz. Sadece bir olasılık değeri var. Kuantum mekaniğinde işaret, faz kavramı ortaya çıkıyor ve olasılığın kendisi yerine genliği kullanmak zorundayız. Bu genellikle cevapları biraz değiştirir. Klasik fizikte, iki artı ikinin dört ettiğini biliyoruz ve kuantum fiziğinde, sekiz cevaba yol açacak olan girişim terimini de hesaba katmamız gerektiğini anlıyoruz, çünkü iki katı olmalıdır.

Gerçekten de bazı durumlarda, kuantum müdahalesi nedeniyle cevap, klasik mekaniktekinin iki katı olabilir. En basit durum, klasik olarak da oldukça iyi tanımlanan ışığın girişimidir ancak tek parçacıklar düzeyine indiğimizde kuantum mekaniğini kullanmamız gerekir. Burada girişim olayları nedeniyle yanıtın büyüklüğünün değişebileceğini, iki kat daha büyük olabileceğini veya mutlak sıfır olabileceğini görüyoruz. Birçok ilginç kuantum mekaniksel etki, kuantum girişimi nedeniyle bir şeyin mutlak sıfır olacak şekilde çıkarılması gerçeğinden kaynaklanmaktadır. Kuantum hesaplama fikri ve algoritmalarının çoğu buna dayanmaktadır: Tüm olası cevaplardan gereksiz tüm cevapları çıkarmak için kuantum girişimini kullanırsınız, kuantum girişimi nedeniyle bunları sıfır çıkarırız.

Görünen o ki, birçok problemde onları klasik olasılıklarla açıklamaya çalışırsanız gerçeğe yeterince yakın bir cevap alırsınız. Yani, bu tür çıkarmalar her zaman olmaz, bazen sistemde bulunmazlar ve rolleri her zaman o kadar önemli değildir. Nasıl ölçtüğünüze çok bağlıdır. Ölçümleri kendi temelinize göre yaparsanız, yani durumların belirli enerji değerlerine sahip olduğu temelinde, o zaman çoğu durumda böyle bir temelde görmezsiniz. Parçacıkların olasılıkla tanımlandığını görebilmekteyiz.

Ama bir deney daha akıllıca yürütülürse, artı veya eksi iki enerjili durumlar oluşturmaya çalışılırsa, kuantum dünyasında bunun yapılabileceği ortaya çıkar. Aynı atoma kendi enerjisi açısından değil, artı veya eksi olan bir durum açısından bakmak için bu tür işlemlerin nasıl yapıldığı bilinmektedir.

3.8. Sonsuz Potansiyel Kuyusu

Kuantum hapsi, bir malzemenin çapı elektron dalga fonksiyonunun de Broglie dalga boyu ile aynı büyüklükte olduğunda gözlemlenebilir. Malzemeler bu kadar küçük olduğunda, elektronik ve optik özellikleri büyük malzemelerinkinden önemli ölçüde sapar.

Bir parçacık, sınırlayıcı boyut parçacığın dalga boyuna kıyasla büyük olduğunda serbestmiş gibi davranır. Bu durum sırasında, bant aralığı, sürekli bir enerji durumu nedeniyle orijinal enerjisinde kalır. Bununla birlikte, sınırlayıcı boyut azaldıkça ve belirli bir sınıra ulaştığında, tipik olarak nano ölçekte, enerji spektrumu ayrık hale gelir. Sonuç olarak, bant aralığı boyuta bağlı hale gelir. Parçacıkların boyutu küçüldükçe elektronlar ve elektron delikleri birbirine yaklaşır ve onları harekete geçirmek için gereken enerji artar, bu da sonuçta ışık emisyonunda bir maviye kayma ile sonuçlanır.

Spesifik olarak, etki, elektronların ve elektron deliklerinin, eksiton Bohr yarıçapı olarak adlandırılan kritik bir kuantum ölçümüne yaklaşan bir boyuta sıkıştırılmasından kaynaklanan olayı tanımlar. Mevcut uygulamada, küçük bir küre gibi bir kuantum noktası üç boyutta, bir kuantum teli iki boyutta ve bir kuantum kuyusu yalnızca bir boyutta sınırlandırılır. Bunlar sırasıyla sıfır, bir ve iki boyutlu potansiyel kuyuları olarak da bilinir. Bu durumlarda, sınırlandırılmış bir parçacığın serbest taşıyıcı olarak hareket edebileceği boyutların sayısına atıfta bulunurlar.

Aşağıdaki denklem, enerji seviyesi ve boyut aralığı arasındaki ilişkiyi gösterir:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z} = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi x}{L_y}\right) sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \tag{3.26}$$

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2\right] \tag{3.27}$$

3.9. Harmonik Salınıcı

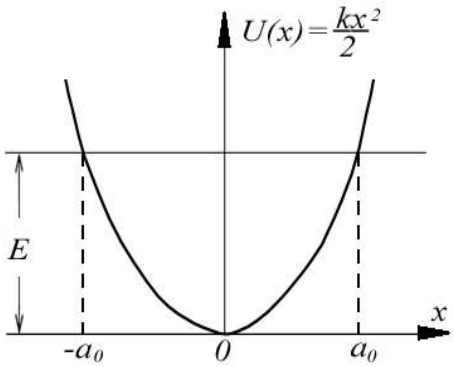
Harmonik osilatör, harmonik salınımlar yapabilen bir sistemdir. Fizikte, harmonik osilatör modeli, özellikle kararlı bir denge pozisyonu etrafındaki sistemlerin küçük salınımlarının incelenmesinde önemli bir rol oynar. Kuantum mekaniğindeki bu tür titreşimlere bir örnek, katılardaki, moleküllerdeki vb. atomların titreşimleridir.

Geri çağırıcı yarı elastik bir kuvvetin etkisi altında bir eksen boyunca salınan tek boyutlu bir harmonik osilatör düşünün. Böyle bir osilatörün potansiyel enerjisi şu şekildedir:

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m_0\omega_0^2x^2}{2} \tag{3.28}$$

Burada, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$, klasik harmonik osilatörün doğal frekansıdır. Böylece, bir harmonik osilatörün kuantum-mekanik problemi, bir parabolik potansiyel kuyusunda bir parçacığın hareketi problemine indirgenir.

Önce klasik bir harmonik osilatörün davranışını ele alalım. Toplam E enerjili bir parçacığın bir kuvvet alanında salınmasına izin verilsin (Şekil l). Parçacığın toplam enerjisinin potansiyel enerjisine eşit olduğu anlar, parçacık için dönüm noktalarıdır. Parçacık, segmentin içindeki potansiyel kuyusunun duvarları arasında, ötesine geçemeyeceği salınım hareketleri yapar.



Şekil 1: Toplam E enerjili bir parçacığın bir kuvvet alanında salınması

Kuantum mekaniğinde harmonik osilatör problemini çözmek için Schrödinger denklemini, verilen potansiyel enerji için çözmek gerekir. Bu durumda denklem;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{m_0\omega_0^2x^2}{2}\right)\psi = 0 \ , \qquad -\infty < x < +\infty \tag{3.29}$$

haline gelir.

Bir yaya bağlı m kütleli bir parçacığın olduğu bir örnek düşünelim. Hooke yasasına göre, böyle bir parçacık üzerine F = −kx geri çağırıcı kuvvet etki eder. Böyle bir parçacığın potansiyeli şu şekilde tarif edilecektir:

Bir harmonik osilatörün enerji spektrumunun üç ayırt edici özelliği vardır: enerji kesiklidir, seviyeler birbirinden aynı uzaklıkta ve en düşük seviye kuyu dibinin potansiyel enerjisine eşit değildir.

3.10. Üç Boyutlu Problemler

$$\hat{H}\psi(r) = E\psi(r) \tag{3.30}$$

denklemi üç boyutta Schrödinger denklemi olmak üzere;

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \tag{3.31}$$

$$\hat{p} = \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{3.32}$$

olacak şekilde konum temsilinde Schrödinger denklemi yazılırsa;

$$\left(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \tag{3.33}$$

olmak üzere:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r) = W\psi(r) \tag{3.34}$$

elde ederiz.

3.11. Küresel Simetrik Potansiyel

Eğer potansiyel küresel simetriye sahipse, küresel koordinatlarda çalışmak uygundur. Bu durumda:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + cot\alpha\frac{\partial}{\partial \alpha} + \frac{1}{sin^2\alpha}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right) \tag{3.35}$$

olur. Bir işlemciyi şunu kullanarak tanımlarsak:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + cot\alpha\frac{\partial}{\partial \alpha} + \frac{1}{sin^2\alpha}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right) \tag{3.36}$$

yazılır.

$\hat{L}$ operatörü açısal momentumla ilgili bir operatördür.

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \tag{3.37}$$

elde etmiş oluruz.

V(r), α ve ϕ'ye bağlı olmadığından:

$$\psi(r) = R(r)Y(\alpha, \phi) \tag{3.38}$$

yazılır. O halde:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r)$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r) + \frac{L^2}{2\mathrm{m}r^2}\right] R(r)Y(\alpha, \phi)$$

$$= ER(r)Y(\alpha, \phi) \tag{3.39}$$

elde edilir. Daha önceki gibi, zamandan bağımsız Schrödinger denklemini türetirken, R(r)Y(α, ϕ) ≠ 0 ile bölelim:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r) + \frac{L^2}{2\mathrm{m}r^2}\right] = E \tag{3.40}$$

Eğer ikinci terim α, φ değişkenlerine bağımlı değilse, denklemin sol tarafı tüm α, ϕ'ler için yalnızca bir sabit olur. Böylece aşağıdaki denklemlere ulaşırız:

$$\frac{L^2}{2\mathrm{m}r^2}Y(\alpha, \phi) = E_L(r)Y(\alpha, \phi), \tag{3.41}$$

$$\frac{1}{R(r)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r)\right]R(r) + \frac{L^2}{2\mathrm{m}r^2} = E, \tag{3.42}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r)\right]R(r) = ER(r) \tag{3.43}$$

Burada $E_L = \frac{sbt}{2\mathrm{m}r^2}$, dalga fonksiyonunun açısal bağımlılığı ile ilgili enerjidir.

3.12. Klein-Gordon Denklemi

Çok parçacıklı bir sisteme hiçbir dış kuvvet uygulanmazsa (yani sadece karşılıklı iç kuvvetler varsa), sistemin kütle merkezi sabit bir hızla (VKM) hareket eder. Bu sabit VKM hızıyla giden bir gözlem çerçevesinden bakıldığında, parçacıklar sisteminin kütle merkezi (KM) durgun görünür. Bu gözlem çerçevesine KM çerçevesi denir.

KM çerçevesinde parçacıklar KM etrafında hareket ederler ve birinin herhangi bir andaki konumunun belirtilmesi, diğerininkini tam olarak belirtir. Dolayısıyla iki-parçacık problemi tek parçacık problemine indirgenmiş olur. Daha önce tek boyutta yapılan indirgeme bu şekilde üç boyutta yapılabilmektedir.

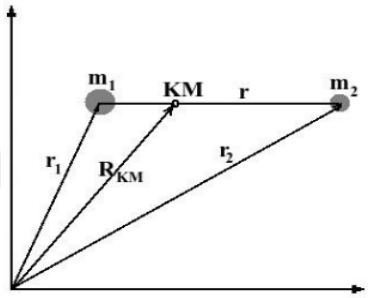
m_1 kütleli parçacığın konumu r_1 ve momentumu p_1, m_2 kütleli parçacığın konumu r_2 ve momentumu p_2 olsun. $r_2 - r_1$ farkına bağlı Coulomb potansiyeline bağlı bu iki parçacıklı sistemin Hamiltonyeni

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(r_2 - r_1) \tag{3.44}$$

biçimindedir. Schrödinger denklemi de

$$-\hbar^2 \left(\frac{1}{2m_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{2m_2} \nabla_2^2 + V(r_2 - r_1) \right) \psi(r_1, r_2) = E\psi(r_1, r_2) \tag{3.45}$$

olarak yazılır. Bu denklem r_1 ve r_2 koordinatlarına göre değişkenlerine ayrılamaz fakat KM korrdinatlarına göre değişkenlerine ayrılabilir.



$$R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}$$

$$r = r_2 - r_1$$

Kütle merkezi koordinatı R ve bağıl koordinat r cinsinden Schrödinger denklemi;

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right) \psi(R, r) = E\psi(R, r) \tag{3.46}$$

şekline indirgenir. Kütle merkezi koordinatlarında yazılan Schrödinger denkleminin;

$$\psi(R, r) = \phi(R) U(r) \tag{3.47}$$

şeklinde çözümü aranırsa;

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \phi(R) = E_{KM} \phi(R) \tag{3.48}$$

ve

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right) U(r) = \epsilon\, U(r) \tag{3.49}$$

gibi iki denklem elde edilir. Burada $E = E_{KM} + \epsilon$ ve $K^2 = \frac{2M}{\hbar^2} E_{KM}$ şeklindedir.

Kütle merkezinin, dolayısıyla tüm sistemin topluca hareketiyle ilgili olan denklemin çözümü;

$$\phi(R) = Ce^{iK.R} \tag{3.50}$$

Bu çözüm, klasik mekanikte kütle merkezinin VKM sabit hızıyla ötelenmesine karşı gelir. KM çerçevesinde

$$\hbar K = P = M\dot{R} \tag{3.51}$$

toplam momentumu sıfırdır. Dolayısıyla bu çerçevede iki parçacığın sadece KM dolayındaki bağıl hareketi kalır.

Klein - Gordon denklemi, Schrödinger denkleminin göreli bir versiyonudur:

$$\partial_x^2\psi + \partial_y^2\psi + \partial_z^2\psi - \frac{1}{c^2}\,\partial_t^2\psi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi = 0, \tag{3.52}$$

Diğer denklemlerin yanı sıra, denklemin kütlesiz skaler ve vektör alanlarını tanımlamaya uygun dalga denkleminin bir genellemesi olduğu açıktır.

3.13. Dört Boyutlu Vektörler

Dört boyutlu uzay, üç boyutlu uzayın özelliklerini genelleştiren matematiksel bir nesnedir. Görelilik teorisinin dört boyutlu uzay-zamanı ile karıştırılmamalıdır. Cebirsel olarak dört boyutlu uzay, dört elemanlı bir vektörler kümesi olarak oluşturulabilir. Daha genel bir değerlendirmede Öklidyen olmayan bir metriğe sahiptir, noktadan noktaya değişkendir. Dört boyutlu uzay, aynı zamanda, üçüncü eksen boyunca yer alan sonsuz sayıda iki boyutlu düzlemden oluşan üç boyutlu bir dünya gibi, dördüncü koordinat ekseni boyunca yer alan sonsuz sayıda üç boyutlu uzay olarak da temsil edilebilir. Ayrıca, 3D kısaltmasının üç boyutlu uzay anlamına geldiği gibi “4-” onu takip eden kavramın dört boyutluluğunu belirtir.

Belirli bir koordinat sistemine sahip üç boyutlu uzayda noktalar ve vektörler üç koordinatla tanımlanır; benzer şekilde 4B’deki noktalar ve vektörlerin dört koordinatı vardır. Örnek 4 boyutlu vektör:

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}. \tag{3.53}$$

şeklindedir. Vektörlerin toplanması ve çıkarılması, üç boyutta olduğu gibi bileşen bazında gerçekleşir. 4B vektörün skaler çarpımı aşağıdaki formülle tanımlanır:

$$a.b = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 + a_4b_4 \tag{3.54}$$

$$\theta = \arccos \frac{a.b}{\|a\|.\|b\|}. \tag{3.55}$$

3.14. Dirac Denklemi ve Çözümleri

Dirac denklemine enerjili serbest bir parçacık için bir çözüm oluşturalım. Yani durağan denklemi çözeriz:

$$(c\alpha\hat{p} + \beta mc^2)\psi E(r) = E\psi E(r) \tag{3.56}$$

$$[c\alpha\hat{p} + \beta mc^2, \hat{p}] = 0, \tag{3.57}$$

$$\psi E(r) = u \exp\left(i\frac{pr}{\hbar}\right) \tag{3.58}$$

$\mathrm{u} = \{\mathrm{u}_1, u_2, u_3, u_4\} = \{\varphi, x\}$, $\varphi = \{u_1, u_2\}$ ve $x = \{u_3, u_4\}$ olmak üzere;

$$(c\alpha\hat{p} + \beta mc^2)u \exp\left(i\frac{pr}{\hbar}\right) = Eu \exp\left(i\frac{pr}{\hbar}\right) \tag{3.59}$$

$$cp\begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \varphi \\ x \end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix} I & \sigma \\ \sigma & -I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \varphi \\ x \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} \varphi \\ x \end{pmatrix} \tag{3.60}$$

$$\begin{cases} cp\sigma x + mc^2\varphi = E\varphi, \\ cp\sigma x - mc^2 x = Ex. \end{cases} \tag{3.61}$$

ifadesini düzenlersek:

$$\begin{cases} cp\sigma x + (mc^2 - E)\varphi = 0, \\ -cp\sigma x + (mc^2 + E)x = 0. \end{cases} \tag{3.62}$$

elde ederiz ve:

$$\begin{vmatrix} mc^2 - E & cp\sigma \\ -cp\sigma & mc^2 + E \end{vmatrix} = 0 \tag{3.63}$$

$$(\sigma p)(\sigma p) = \sigma_i\, \sigma_j\, p_i\, p_j = \left(\delta_{ij} + ie^{ijk}\sigma_k\right)p_i\, p_j = p^2 + i\sigma_k e_{ikj}\, p_i\, p_j. \tag{3.64}$$

$$E = \pm\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}. \tag{3.65}$$

3.15. Olasılık Yoğunluğu

Üç boyutlu koordinat uzayında olasılık akım yoğunluğunun açık bir formunu bulalım. Hamilton operatörü aşağıdaki forma sahiptir.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r). \tag{3.66}$$

Schrödinger denklemi ise şu şekilde yazılmış olur:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial \mathrm{t}} = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\Delta\psi(r,t) + U(r)\,\psi(r,t), \tag{3.67}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*(r,t)}{\partial \mathrm{t}} = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\Delta\psi^*(r,t) + U(r)\,\psi^*(r,t), \tag{3.68}$$

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial \mathrm{t}} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial \mathrm{t}}\right) = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*). \tag{3.69}$$

4. HERMİTE POLİNOMLARIN ÖZELLİKLERİ

n. dereceden Hermite polinomu, n dereceli bir polinomdur. Bu polinomların özelliklerini aşağıdaki gibi inceleyebiliriz:

a) Ortogonallik

H_n(x) ve He_n(x) n = 0, 1, 2, 3, ... için n'inci dereceden polinomlardır. Bu polinomlar ağırlık fonksiyonuna (ölçü) göre ortogonaldir.

$$w(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}, \text{(He için)} \tag{4.1}$$

ya da

$$w(x) = e^{-x^2}, \text{(H için)} \tag{4.2}$$

Bu durumda;

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x)H_n(x)w(x)dx = 0\,, bütün\ m \neq n\ için \tag{4.3}$$

Ayrıca,

$$\int_{-\infty}^{\infty} He_m(x)He_n(x)e^{-\frac{x^2}{2}}dx = \sqrt{2\pi}\, n!\, \delta_{nm}, \tag{4.4}$$

ya da

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x)H_n(x)e^{-x^2}dx = \sqrt{2\pi}\, n!\, \delta_{nm} \tag{4.5}$$

Burada, δ_{nm}, Kroncker deltası'dır.

b) Eksiksizlik

Hermite polinomları, Hilbert uzayının ortogonal bir temelini oluşturur.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 w(x)dx < \infty \tag{4.6}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\overline{g(x)}w(x)dx \tag{4.7}$$

Gauss ağırlık fonksiyonu w(x) dahil $L^2(R, x(x)dx)$ için bir ortogonal taban, tam bir ortogonal sistemdir. Ortogonal bir sistem için tamlık, 0 fonksiyonunun sistemdeki tüm fonksiyonlara ortogonal olan tek $f \in L^2(R, x(x)dx)$ fonksiyonu olduğu gerçeğine eşdeğerdir.

Hermite polinomlarının lineer yayılımı tüm polinomların uzayı olduğundan;

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)x^n e^{-x^2} dx = 0 \tag{4.8}$$

Burada her n ≥ 0 için f = 0.

Bunu yapmanın bir yolu;

$$F(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{zx-x^2} dx = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int f(x)\, x^n e^{-x^2} dx = 0 \tag{4.9}$$

şeklinde elde edilir. O halde her gerçek t için F(it) = 0 olması, $f(x)e^{-x^2}$'nin Fourier dönüşümünün 0 olduğu anlamına gelir, dolayısıyla f hemen hemen her yerde 0'dır. Hermite durumunda, eksiksizliği ima eden açık bir özdeşliği kanıtlamak da mümkündür.

Hermite polinomlarının $L^2(R, x(x)dx)$ için ortogonal bir temel olduğu gerçeğinin eşdeğer bir formülasyonu, Hermite fonksiyonlarının tanıtılmasından ve Hermite fonksiyonlarının $L^2(R)$ için ortonormal bir temel olduğunu söylemekten ibarettir.

c) Hermite diferansiyel denklemi

Hermite polinomları, diferansiyel denklemin çözümlerindendir.

$$\left(e^{-\frac{1}{2}x^2} u'\right)' + \lambda e^{-\frac{1}{2}x^2} u = 0 \tag{4.10}$$

burada λ bir sabittir. u 'nun polinomsal olarak sonsuzda sınırlandırılması gerektiği sınır koşulunu empoze eden denklem; yalnızca λ negatif olmayan bir tam sayıysa çözümlere sahiptir ve çözüm $u(x) = C_1 He_\lambda(x)$ olarak verilir. Burada C_1 bir sabiti ifade eder.

Diferansiyel denklemi bir özdeğer problemi olarak yeniden yazarsak,

$$L[u] = u'' - xu' = -\lambda u \tag{4.11}$$

elde etmiş oluruz.

Hermit polinomları $He_\lambda(x)$, $L[u]$'nin özfonksiyonları olarak belirtilebilir. Bu özdeğer problemine Hermite denklemi denir.

$$u'' - 2xu' = -2\lambda u \tag{4.12}$$

denkleminin çözümü Hermite polinomları cinsinden $u(x) = C_1 He_\lambda(x)$ şeklinde verilen u fonksiyonudur. Burada C_1, u'nun polinom olarak olması gereken sınır koşulunu uyguladıktan sonra bir sabiti belirtir ve sınırlıdır.

Yukarıdaki ikinci mertebeden diferansiyel denklemlerin genel çözümleri aslında hem Hermite polinomlarının hem de birinci türden birleşik hipergeometrik fonksiyonların lineer kombinasyonlarıdır. Hermite denklemi için:

$$u'' - 2xu' + 2\lambda u = 0 \tag{4.13}$$

genel çözüm şeklini alır,

$$u(x) = C_1 H_\lambda(x) + C_2 h_\lambda(x) \tag{4.14}$$

şeklinde çözümleri vardır. Burada C_1 ve C_2 sabitlerdir, $H_\lambda(x)$ Hermite polinomlardır ve $h_\lambda(x)$ Hermite fonksiyonlarıdır.

Daha genel sınır koşullarıyla, Hermite polinomları, karmaşık değerli λ için daha genel analitik fonksiyonlar elde etmek üzere genelleştirilebilir.

d) Açık İfade

Hermite polinomları açıkça şu şekilde yazılabilir:

Bu iki denklem, tek bir denklemde birleştirilebilir:

$$H_n(x) = \begin{cases} n! \displaystyle\sum_{l=0}^{\frac{n}{2}} \frac{(-1)^{\frac{n}{2}-l}}{(2l)!\left(\frac{n}{2}-l\right)!}(2x)^{2l} & n\ çift\ sayısı\ için \\ n! \displaystyle\sum_{l=0}^{\frac{n-1}{2}} \frac{(-1)^{\frac{n-1}{2}-l}}{(2l+1)!\left(\frac{n-1}{2}-l\right)!}(2x)^{2l+1} & n\ tek\ sayısı\ için \end{cases} \tag{4.15}$$

$$H_n(x) = n! \sum_{m=0}^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor} \frac{(-1)^m}{m!\,(n-2m)!}(2x)^{n-2m} \tag{4.16}$$

e) Ters Açık İfade

Yukarıdaki açık ifadelerin tersi, yani Hermite polinomları cinsinden tek terimliler için olanlar;

$$x^n = n! \sum_{m=0}^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor} \frac{1}{2^m m!\,(n-2m)!} He_{n-2m}(x) \tag{4.17}$$

Hermite polinomları H için karşılık gelen ifadeler, aşağıdaki şekilde düzenlenebilir:

$$x^n = \frac{n!}{2^n} \sum_{m=0}^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor} \frac{1}{m!\,(n-2m)!} H_{n-2m}(x) \tag{4.18}$$

f) Oluşturma İşlemi

Hermite polinomları, üstel fonksiyon kullanılarak da ifade edilebilir.

$$e^{xt-\frac{1}{2}t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} He_n(x) \frac{t^n}{n!} \tag{4.19}$$

$$e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} \tag{4.20}$$

Bu eşitlik, $x\ ve\ t$'nin tüm karmaşık değerleri için geçerlidir ve x'teki Taylor açılımı yazılarak elde edilebilir. Hermite polinomlarını şu şekilde yazmak için Cauchy'nin integral formülünü kullanarak da türetilebilir.

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

$$= (-1)^n e^{x^2} \frac{n!}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{e^{-x^2}}{(z-x)^{n+1}} dx \tag{4.21}$$

Bunu denklemi toplam ile ifade edersek,

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} \tag{4.22}$$

elde ederiz.

g) Beklenen Değerler

X, standart sapması 1 ve beklenen değeri μ ile normal dağılıma sahip rastgele bir değişkendir;

$$\mathbb{E}[He_n(X)] = \mu^n \tag{4.23}$$

Standart normalin momentleri (beklenen sıfır değeri ile) çift indeksler için doğrudan ilişkiden okunabilir:

$$\mathbb{E}[X^{2n}] = (-1)^n He_{2n}(0) = (2n-1)!! \tag{4.24}$$

Burada $(2n-1)!!$ ifadesi çift faktöriyeldir. Yukarıdaki ifadenin, Hermite polinomlarının momentler olarak temsilinin özel bir durumu olduğuna dikkat edelim:

$$He_{2n}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x+iy)^n \, e^{-\frac{y^2}{2}} dy \tag{4.25}$$

h) Özel Değerler

Sıfır bağımsız değişkeni $H_n(0)$'da değerlendirilen Hermite polinomlarına, Hermite sayıları denir.

$$H_n(0) = \begin{cases} 0 & n\ çift\ sayısı\ için \\ (-2)^{\frac{n}{2}}(n-1)!! & n\ tek\ sayısı\ için \end{cases} \tag{4.26}$$

$$H_n(0) = -2(n-1)H_{n-2}(0) \tag{4.27}$$

Buradaki ifadeler Hermite polinomları açısından şu anlama gelir:

$$He_n(0) = \begin{cases} 0 & n\ çift\ sayısı\ için \\ (-2)^{\frac{n}{2}}(n-1)!! & n\ tek\ sayısı\ için \end{cases} \tag{4.28}$$

4.1. Rodrigues Formülü

$\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$, ortogonallik koşulunu sağlayan bir ortogonal polinom dizisi olsun;

$$\int_a^b P_m(x)P_n(x)w(x)dx = K_{m,n}\delta_{m,n} \tag{4.29}$$

$$\frac{w'(x)}{w(x)} = \frac{A(x)}{B(x)}, \tag{4.30}$$

Burada A(x) derecesi en fazla 1 olan bir polinom ve B(x) derecesi en fazla 2 olan bir polinomdur ve ayrıca limitleri;

$$\lim_{x\to a} w(x)B(x) = 0, \tag{4.31}$$

$$\lim_{x\to b} w(x)B(x) = 0, \tag{4.32}$$

$$P_n(x) = \frac{c_n}{w(x)} \frac{d^n}{dx^n} [B(x)^n w(x)] \tag{4.33}$$

Bu ifadelere Rodrigues tipi formül veya sadece Rodrigues formülü denir.

Rodrigues tipi formüllerin en bilinen uygulamaları Legendre, Laguerre ve Hermite polinomları için formüllerdir.

Legendre polinomları P_n için Rodrigues formülü:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n] \tag{4.34}$$

Laguerre polinomları genellikle $L_0, L_1, L_2, \ldots$ olarak gösterilir ve Rodrigues formülü şu şekilde yazılabilir:

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n) = \frac{1}{n!}\left(\frac{d}{dx}-1\right)^n x^n \tag{4.35}$$

Hermite polinomu için Rodrigues formülü şu şekilde yazılabilir:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} = \left(2x - \frac{d}{dx}\right)^n \tag{4.36}$$

4.2. Tekrarlama Bağıntısı

Hermite polinomlarının dizisi de yineleme bağıntısını karşılar.

$$He_{n+1}(x) = xHe_n(x) - He_n'(x) \tag{4.37}$$

Katsayılar aşağıdaki özyineleme formülü ile ilişkilidir:

$$a_{n+1,k} = \begin{cases} -na_{n-1,k}\,, & k=0 \\ a_{n,k-1} - na_{n-1,k}\,, & k>0, \end{cases} \tag{4.38}$$

Ve $a_{0,0} = 1,\ a_{1,0} = 0,\ a_{1,1} = 1$ şeklindedir. Hermite polinomlar için,

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_{n,k}x^k \tag{4.39}$$

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H'_n \tag{4.40}$$

Katsayılar aşağıdaki özyineleme formülü ile ilişkilidir:

$$a_{n+1,k} = \begin{cases} -a_{n,k+1}\,, & k=0 \\ 2a_{n,k-1} - (k+1)a_{n,k+1}\,, & k>0, \end{cases} \tag{4.41}$$

Ve $a_{0,0} = 1,\ a_{1,0} = 0,\ a_{1,1} = 2.$

Hermite polinomları aşağıdaki özdeşlikleri sağlayan bir polinom dizisidir.

$$He_n'(x) = nHe_{n-1}(x), \tag{4.42}$$

$$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x). \tag{4.43}$$

Eşdeğer olarak, Taylor açılımına göre,

$$He_n(x+y) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^{n-k}\, He_k(y)$$

$$= 2^{-\frac{n}{2}} \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} He_{n-k}(x\sqrt{2}) He_k(y\sqrt{2}) \tag{4.44}$$

$$H_n(x+y) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} 2y^{n-k}\, H_k(x)$$

$$= 2^{-\frac{n}{2}} \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} H_{n-k}(x\sqrt{2}) H_k(y\sqrt{2}) \tag{4.45}$$

Bu genel ifadeler aşikardır ve aşağıda ayrıntıları verilen diferansiyel operatör temsiline dahil edilmiştir,

$$He_n(x) = e^{-\frac{D^2}{2}} x^n, \tag{4.46}$$

$$H_n(x) = 2^n e^{-\frac{D^2}{4}} x^n. \tag{4.47}$$

Sonuç olarak, m' türevleri için aşağıdaki ilişkiler geçerlidir:

$$He_n^{(m)}(x) = \frac{n!}{(n-m)!} He_{n-m}(x) = m! \binom{n}{m} He_{n-m}(x), \tag{4.48}$$

$$H_n^{(m)}(x) = 2^m \frac{n!}{(n-m)!} H_{n-m}(x) = 2^m m! \binom{n}{m} H_{n-m}(x). \tag{4.49}$$

Hermite polinomlarının yineleme bağıntısını da sağladığı sonucu çıkar.

$$He_{n+1}(x) = xHe_n(x) - nHe_{n-1}(x), \tag{4.50}$$

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x). \tag{4.51}$$

Bu son ilişkiler, $H_0(x)\ ve\ H_1(x)$ polinomları ile birlikte, pratikte polinomları hızlı bir şekilde hesaplamak için kullanılabilir. Ayrıca, aşağıdaki çarpma teoremi geçerlidir:

$$H_n(\gamma x) = \sum_{i=0}^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor} \gamma^{n-2i} (\gamma^2 - 1) \binom{n}{2i} \frac{(2i)!}{i!} H_{n-2i}(x) \tag{4.52}$$

$$He_n(\gamma x) = \sum_{i=0}^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor} \gamma^{n-2i} (\gamma^2 - 1) \binom{n}{2i} \frac{(2i)!}{i!} He_{n-2i}(x) \tag{4.53}$$

4.3. Diklik Bağıntısı

$H_n(x)$ ve $He_n(x)$, n $= 0, 1, 2, 3, \ldots$ için n'inci dereceden polinomlardır. Bu polinomlar ağırlık fonksiyonuna göre ortogonaldir.

$$w(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}, \text{(He için)} \tag{4.54}$$

ya da

$$w(x) = e^{-x^2} \tag{4.55}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^n n!\, \delta_{nm}. \tag{4.56}$$

5. YÜKSELTME-ALÇALTMA (ARTIRAN-EKSİLTEN) İŞLEMCİLERİ

Merdiven operatörü kavramının özel bir uygulaması, açısal momentumun kuantum mekaniksel çözümlerinde bulunur. J_x, J_y ve J_z bileşenlerine sahip genel bir açısal momentum vektörü J için, J_+ ve J_- olmak üzere iki merdiven operatörü tanımlanır.

$$J_+ = J_x + iJ_y, \tag{5.1}$$

$$J_- = J_x + iJ_y. \tag{5.2}$$

Herhangi bir açısal momentum operatörünün kartezyen bileşenleri arasındaki komütasyon ilişkisi şu şekilde verilir:

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} J_k. \tag{5.3}$$

Buradan, merdiven operatörleri ve Jz arasındaki komütasyon ilişkileri elde edilir,

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \tag{5.4}$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \tag{5.5}$$

Merdiven operatörlerinin özellikleri, belirli bir durumda J_z operatörünün eylemini nasıl değiştirdiklerini gözlemleyerek belirlenebilir,

$$\begin{aligned} J_z J_\pm |jm\rangle &= \left(J_\pm J_z + [J_z, J_\pm]\right)|jm\rangle \\ &= (J_\pm J_z \pm \hbar J_\pm)|jm\rangle \\ &= \hbar(m \pm 1) J_\pm |jm\rangle \end{aligned} \tag{5.6}$$

Daha sonra aşağıdaki ifadeler yazılmış olur:

$$\begin{aligned} J_\pm \left|j, m\right\rangle &= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle \\ &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}|j, m+1\rangle, \end{aligned} \tag{5.7}$$

$$\begin{aligned} J_- \left|j, m\right\rangle &= \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle \\ &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j, m-1\rangle. \end{aligned} \tag{5.8}$$

6. SÜREKLİLİK DENKLEMİ

Tek bir parçacık için Schrödinger denkleminin önemli bir yönü, bir yerde bir parçacık bulma olasılığının dalga fonksiyonunun mutlak değerinin karesi tarafından belirlendiği fikridir. Olasılığın yerel olarak (yani her bir farklı konumda) saklanması da kuantum mekaniğinin özelliğidir. Elektronun herhangi bir yerde bulunma ihtimali azalıp başka bir yerde bulunma ihtimali arttığında (ki toplam ihtimal değişmiyorsa) bu yerler arasındaki aralıkta bir şey gerçekleşmiş olmalıdır. Başka bir deyişle, bir yerde olasılık azalır ve başka bir yerde artarsa, bu yerler arasında bir şeyin değişmesi gerektiği anlamında elektronun sürekliliği vardır. Yani eğer aralarına bir duvar koyarsanız, bu olasılıkları etkiler ve eskisi gibi olmazlar. Sonuç olarak, tek başına enerjinin korunumu böyle bir derinliğe sahip olmadığı ve enerjinin yerel korunumu kadar önemli olmadığı gibi, tek başına olasılığın korunumu da koruma yasasının tam bir formülasyonu değildir. Enerji kaybolursa, bu yerden enerji çıkışının mutlaka gerçekleşmesi gerekir. Böylece, olasılık yoğunluğu bir yerde değişirse (orada bir birim hacimde böyle bir şey bulma olasılığı), olasılığın buradan bir yerden aktarıldığı varsayılabilir. Böyle bir akım, aşağıdaki gibi yorumlanabilecek bir vektör olacaktır. $-$ bileşeni, parçacığın düzleme paralel bir düzlemden bir yönde geçmesinin net olasılığı (saniyede ve birim hacim başına) olacaktır. Yönlü geçiş pozitif akış, ters yönde geçiş ise negatif akış olarak kabul edilir.

Olasılık yoğunluğunun dalga fonksiyonu cinsinden ifade edildiğini biliyoruz.

$$P(r,t) = \psi^*(r,t)\psi(r,t) \tag{6.1}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla J \tag{6.2}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \tag{6.3}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[\psi^* \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - qA\right)\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - qA\right)\psi + q\varphi\psi^*\psi$$
$$- \psi \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla + qA\right)\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla + qA\right)\psi^* - q\varphi\psi\psi^* \tag{6.4}$$

ve buradan da;

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla \frac{1}{2m}\left\{\psi^*\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - qA\right)\psi + \psi\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - qA\right)\psi^*\right\} \tag{6.5}$$

elde edilir.

Bir parçacık bir alandan kaybolursa, alanlar arasında bir değişim olmadan başka bir alana geçemez. Birinci bölgenin, üzerinde elektron bulunma olasılığı sıfır olacak şekilde çizilmiş kapalı bir yüzeyle çevrili olduğunu hayal edin. Yüzeyin içinde bir yerde bir elektron bulmanın toplam olasılığı, hacim integraline eşittir.

Ancak Gauss teoremine göre, diverjansın hacim integrali, yüzey integraline eşittir. Yüzeyde ise sıfır olduğunu ileri sürer; bu nedenle, yüzeyin içinde bir parçacık bulmanın toplam olasılığı değişemez. Sadece olasılığın bir kısmı sınıra ulaştığında, bir kısmı dışarı geçebilir.

7. PSEUDO-HERMİTYEN KUANTUM MEKANİĞİ VE VARSAYIMLARI

1- Bir kuantum sistemi S; bir üçlü (H, H, < ·,· >) ile belirlenir. Burada H, iç çarpımı h·|·i, H : H → H (yoğun olarak tanımlanmış) bir Hilbert uzayıdır. Hamiltonyen olarak adlandırılan lineer operatör ve <· , ·>, H üzerinde h·|·i'den farklı olabilen (pozitif-belirli) bir iç çarpımdır.

2- S'nin durumları, H'nin tek boyutlu alt uzayları ile tanımlanır.

3- Sistemin gözlenebilirleri, lineer operatörler sınıfı ile tanımlanır O : H → H. Sistem bir durumdayken gözlemlenebilir bir O ölçüldüğünde bir ω ∈ R okuması elde edilir ve ölçümden önce hazırlanan durum, özdeğeri ω olan O'nun bir öz durumuna ani bir değişime uğrar.

4- Gözlenebilir bir O'nun tüm özdeğerleri ve özvektörleri, bir O ölçümünün olası sonuçları arasındadır. Özellikle, O'nun her özvektörü bu şekilde hazırlanabilir.

5- Bir ölçümün sonucu doğası gereği olasılıksaldır ve bir durumda O'nun ölçülmesi üzerine dejenere olmayan bir özdeğer ω ölçme olasılığı P ile verilir.

$$P_\omega(\Lambda) = \frac{|< \psi, \psi_\omega >|^2}{\sqrt{< \psi, \psi >< \psi_\omega, \psi_\omega >}} \tag{7.1}$$

Burada, $\psi \in \Lambda$ ve $\psi_\omega \in \Lambda_\omega$'dir. Ayrıca, sonuçların beklenen değeri bir anda O ölçülerek elde edilen forma sahiptir;

$$\langle O_\alpha \rangle_\Lambda = \frac{< \psi, O_\alpha \psi >}{< \psi, \psi >} \tag{7.2}$$

6- Λ_0 başlangıç durumunun zaman evrimi, Schrödinger denklemi tarafından temsil edilir;

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t), \qquad t \geq t_0 \tag{7.3}$$

7- Hamiltonyen H gözlemlenebilir bir değerdir.

A- Gözlenebilir bir O_α içeren herhangi bir fiziksel ölçüm için hazırlanabilecek yoğun bir durum vektörleri seti vardır. Bu, (2)'den ve gözlemlenebilirlerin yoğun olarak tanımlandığı varsayımından, yani (3)'ten çıkar.

B- Gözlenebilirlerin gerçek bir spektrumu olmalıdır. Bu, (4)'ten gelir.

C- Gözlenebilirler tam bir özvektör setine sahip olmalıdır. [7]'de tartışıldığı gibi, bu (3) – (5) ve (B)'den kaynaklanmaktadır.

D- O gözlenebilirleri $<\cdot\ ,\ \cdot>$ iç çarpımına göre Hermityen olmalıdır. Bu, her durumda O'nun beklenen değerlerinin gerçekliğinin $<\cdot\ ,\ \cdot>$'ye göre O_α 'nın Hermitikliğine eşdeğer olduğunu söyleyen iyi bilinen bir lineer cebir teoreminden çıkar.

E- Zaman evrimi ($e^{-i(t-t_0)H/\hbar}$ operatörü), $<\cdot,\ \cdot>$ iç çarpımına göre üniterdir. Bu, (7) ve (D)'ten kaynaklanmaktadır.

7.1. Bir Gözlemlenebilirin Hermiteliği

Eğer $<\cdot\ ,\ \cdot>$ ve h·|·i'nin özdeş olmasını talep edersek, pseudo-Hermit kuantum mekaniğinin (1) – (7) postülaları geleneksel (Hermityen) kuantum mekaniğinin postülalarına indirgenir. Sözde Hermit kuantum mekaniğinin avantajı, bir serbestlik derecesi olarak $<\cdot\ ,\ \cdot>$ seçimini içermesidir. Sözde Hermityen kuantum mekaniğinde, bir kuantum sisteminin fiziksel Hilbert uzayı Hphys, H'nin özvektörlerinin açıklığına $<\cdot\ ,\ \cdot>$ iç çarpımı ve Cauchy'nin elde edilen iç çarpım uzayını bir Hilbert uzayına tamamlamasıyla donatılarak elde edilir.

Hilbert uzayının Öklidyen iç çarpımla donatılan standart iki seviyeli sistemi göz önünde bulundurup sistemin Hamiltonyenini şu şekilde verebiliriz:

$$H \coloneqq \begin{pmatrix} E & \alpha \\ 0 & E \end{pmatrix}. \tag{7.4}$$

Burada, E, $\alpha \in \mathbb{R}$ sabitlerdir. Ayrıca, $\Lambda_0 = \Lambda(0)$, $\psi_0 \coloneqq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ için:

$$\psi(t) \coloneqq e^{i\varphi(t)} \begin{pmatrix} i\left(1 + \frac{\alpha^2 t^2}{\hbar^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \\ \left(1 + \frac{\alpha^2 t^2}{\hbar^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \tag{7.5}$$

Burada $\varphi(t)$, t'nin keyfi reel değerli bir| fonksiyonudur. Şimdi, t'nin herhangi bir pozitif gerçek sayı olduğunu varsayalım. $\epsilon \coloneqq \frac{\hbar}{|\alpha|t} \ll 1$ olur ki o zaman;

$$\psi(t) \coloneqq e^{i\varphi(t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\epsilon) \tag{7.6}$$

Başka bir deyişle, $|\alpha| \gg \frac{\hbar}{t}$. Ancak bu yeni iç çarpımı kullanarak Hilbert uzayı tanımlanırsa $S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ artık gözlemlenebilir değildir ve özvektörleri $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ve $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ spin durumlarını temsil etmez.

Prensipte, bir eşlenik sınıfı birden fazla Hermityen operatörü içerebilir. Daha ciddi bir problem, eğer ölçüm süreci sadece Hermityen operatörlere duyarlıysa, o zaman onların eşlenik sınıflarını gözlemlenebilir olarak düşünmek zorunda mıyız sorusu sorulabilmektedir. Muhtemel bir cevap, dinamiklerin Hermityen olmayan Hamiltonyen H tarafından üretildiğini belirtmek olacaktır. Bir problem olarak Hamiltonyen H zamanla gelişmeyecektir, ancak H'nin eşlenik sınıfında, zamanla değişecek olan Hermityen Hamiltonyen h gibi başka operatörler olacaktır.

Açıkça, bir dizi operatör olarak, H'nin eşlenik sınıfı zamana bağlı olacaktır. Şimdi biri enerjinin korunduğunu söylenebilir mi sorusunu sorarsak da cevap olarak şunu söyleriz: Enerji ölçümlerinin h kullanılarak yapılması gerektiği göz önüne alındığında, enerji korunumu kaybolacaktır. Ardından, bir enerji ölçümünün sonucunu düşünün. Dinamikler H kullanılarak tanımlanırsa, h ve H genellikle değişmediği için, tekrarlanan enerji ölçümleri, iki ardışık ölçüm arasındaki zaman aralığının ne kadar kısa olduğuna bakılmaksızın tamamen farklı değerler verecektir. Bu durum kabul edilemez, çünkü teorinin öngörücü gücünü yok etmektedir.

Öte yandan, dinamikler h kullanılarak tanımlanırsa, geleneksel kuantum mekaniğinden başka bir şey yoktur, çünkü ölçüm Hermityen operatörler kullanılarak yapılır ve dinamikler bir Hermityen Hamiltonyen tarafından üretilir.

Hermityen olan gözlenebilirlerin, Hermityen olmayan bir Hamiltoniyen ile birlikte kullanılması, PT simetrik kuantum mekaniğindeki gözlenebilirlerin gerçek spektrumlu CPT simetrik operatörleri ile tanımlanmasından kaynaklanan tutarsızlığı anımsatan dinamik bir tutarsızlığa yol açar.

8. HILBERT UZAYLARI VE RIESZ ÜSLERİ

Karmaşık bir V vektör uzayı ve V'nin herhangi bir ψ, φ çiftine karmaşık bir hψ|φi sayısı atayan h·|·i : V × V → C fonksiyonunu düşünelim. h·|·i'nin aşağıdaki özelliklere sahip olduğunu varsayalım.

(i) Pozitif tanımlıdır, yani V'nin tüm sıfır olmayan elemanları ψ için, h ψ | ψ i pozitif bir gerçek sayıdır ve sadece ve sadece ψ = 0 ise kaybolur, burada 0'ı sıfır vektörü için de kullanırız.

(ii) V, h ψ |φi∗ = hφ| ψ i öğelerinin herhangi bir ψ, φ çifti için Hermityendir.

(iii) Tüm ψ, φ, χ ∈ V ve tüm a, b ∈ C, hψ|aφ + bχi = ahφ|ψi + bhψ|χi için doğrusaldır.

O halde h·|·i, V üzerinde bir iç çarpım olarak adlandırılır ve (V, h·|·i) çiftine de bir iç çarpım uzayı denir. V üzerindeki bir h·|·i iç çarpımı, V'nin her ψ öğesine negatif olmayan bir gerçek sayı atar, k ψ k:= p hψ|ψi, buna ψ normu denir. V'nin elemanları arasındaki uzaklık kavramını tanımlamak için normu kullanabiliriz.

Bir Hilbert uzayı H, ek bir teknik koşulu yerine getiren bir iç çarpım uzayıdır, yani normunun tam bir metrik uzayı tanımlaması, H'nin ψ k öğelerinin herhangi bir sonsuz dizisi {ψk} için, şu koşuldur:

$\lim_{j,k\to\infty}$ kψj − ψk k = 0, {ψk}'nin H'nin bir ψ elemanına yakınsadığı anlamına gelir;

$\lim_{k\to\infty}$ kψ − ψkk = 0, başka bir deyişle, Hilbert uzayı tam bir iç çarpım uzayıdır.

Hilbert uzayının bir S alt kümesinin, H'nin her elemanı bir a'nın limiti olarak elde edilebiliyorsa, yoğun olduğu söylenir. S'nin elemanları dizisi, sayılabilir yoğun bir altkümeye sahipse, bir Hilbert uzayının ayrılabilir olduğu söylenir.

9. SINIRLI, TERSİNİR VE HERMİTE OPERATÖRLER

H_1 ve H_2 iç çarpımları sırasıyla h·|·i_1 ve h·|·i_2 olan iki Hilbert uzayını ve H_1 ile H_2'yi eşleyen doğrusal bir $\hat{A}$ operatörünü ele alalım. $\hat{A}$'nın D(A) alanı, H_1'in alt kümesidir, öyle ki, $\hat{A}$'nın D(A)'nın herhangi bir elemanı üzerindeki etkisi, H_2'nin özel bir elemanını verir. $\hat{A}$'nın R(A) aralığı, ψ_1'in D(A)'ya ait olduğu $\hat{A}\psi_1$ biçimindeki öğelerden oluşan H_2'nin alt kümesidir. D(A) = H_1 ise, $\hat{A}$'nın tam etki alanına sahip olduğu veya her yerde tanımlı olduğu söylenir. R(A) = H_2 ise, A'nın tam aralığa sahip olduğu, yani bir on işlevi olduğu söylenir. O halde D(p), türevi olan kare integrallenebilir fonksiyonlardan oluşur. Özellikle p her yerde tanımlı değildir, ancak etki alanı L_2(R)'nin yoğun bir alt kümesidir. Böyle bir operatörün yoğun tanımlı olduğu söylenir.

$\hat{A} : H_1 \rightarrow H_2$, aşağıdaki koşulların her ikisini de sağlıyorsa, tersine çevrilebilir bir operatör olarak adlandırılır.

1. $\hat{A}$ bire bir ve üzerinedir, dolayısıyla $\hat{A}^{-1} : H_2 \rightarrow H_1$ vardır ve tam etki alanına sahiptir;

2. $\hat{A}^{-1}$ sınırlı bir operatördür.

$\hat{A}$, bire bir ve üzerine sınırlıysa, Banach'tan kaynaklanan bir teoreme göre bunun tersi de sınırlıdır; tersine çevrilebilir. Kuantum mekaniğinde temel bir rol oynayan önemli bir sınırlı ters çevrilebilir operatör sınıfı, üniter operatörlerdir.

$$\langle \psi_1 \mid A^{\dagger}\psi_2\rangle_1 = \langle A\psi_1 \mid \psi_2\rangle_2, \;\; her\; \psi_1 \in \mathcal{D}(A)\; ve\;\; \psi_2 \in \mathcal{D}'. \tag{9.1}$$

$$\langle \psi_1 \mid A\psi_2\rangle = \langle A\psi_1 \mid \psi_2\rangle, \qquad her\; \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{D}(A). \tag{9.2}$$

$$I = \sum_{n=1}^{N} |a_n\rangle\langle a_n|, \tag{9.3}$$

$$A = \sum_{n=1}^{N} a_n |a_n\rangle\langle a_n|. \tag{9.4}$$

Hermit operatörlerini kuantum mekaniğinde vazgeçilmez kılan önemli bir özellik, D(A) = D($A^{\dagger}$) ile belirli bir yoğun tanımlı lineer operatör $\hat{A}$ için, hψ|Aψi beklenen

değerinin tüm birim durum vektörleri ψ için gerçek değerli olmasıdır. Bu, von Neumann'ın ölçüm aksiyomuna uyan kuantum teorisinde, gözlenebilirlerin Hermityen olmayan operatörler arasından gerçek bir spektruma sahip olsalar bile seçilemeyeceğini gösterir.

Aynı sonuca, ölçüm aksiyomunun aynı zamanda farklı özdeğerleri olan bir gözlenebilirin özvektörlerinin dik olmasını gerektirdiğinin farkına varılarak da ulaşılabilir. Çünkü aksi takdirde gözlenebilirin bir öz değeri ile tanımlanacak bir ölçüm cihazının okuması yeterli olmayacaktır. Ölçümden hemen sonra sistemin durumunu belirler. Bunun nedeni, ölçümün çıktısı olan bir özvektörün, bir özvektör boyunca sıfır olmayan bir bileşene sahip olabilmesidir.

Bu, sistemin iki farklı fiziksel durumda olması için sıfır olmayan olasılıklar verir, ancak bunlardan yalnızca birinin özdeğeri ölçülür. $\{\xi n\}$, H'nin bir ortonormal tabanı olsun ve $\hat{A}$, H'de etki eden bir Hermit operatörü olsun, o zaman iç çarpımın özelliğine ve Hermitiklik koşuluna göre elde ederiz:

$$A = \sum_{n=1}^{N} A_{mn} |\xi_m\rangle\langle\xi_n|. \tag{9.5}$$

Bir Hermityen operatörün, ortonormal olmayan bir temelde Hermityen olmayan bir matrisle temsil edilebileceğini anlamak önemlidir. Bu, bir operatörün matris gösterimi için ifadeye sahip olmanın ve bu gösterim için kullanılan temeli bilmenin, operatörün Hermityen olup olmadığına karar vermek için yeterli olmadığı anlamına gelir. Ayrıca iç çarpımı bilmeli ve tabanın ortonormal olup olmadığı belirlenebilmelidir. Bir operatörden, içinde hareket ettiği uzayın iç çarpımına dikkat etmeden (matris temsilini kullanarak) Hermityen veya Hermityen olmayan olarak bahsetmek doğru olmaz.

10. SONUÇ

Bu çalışmada kuantum fiziğine genel bakış üzerinden operatörler ve özellikleri incelenmiş olup bununla birlikte Hermityen operatörlerin genel özellikleri ile Hermityen olmayan operatörlerin kuantum fiziğindeki kullanım durumları incelenmiştir. Ek olarak Hamiltoniyen modellerinin diferansiyel operatörler ile de temsil edildiği gösterilerek Hermitik eşlenikleri benzerlik dönüşümü yardımı ile ortaya konulmuştur. Fiziksel uzayda Hermityen operatörlerle çalışma imkanının fiziksel olmayan uzayda kullanılamadığı ve bunun sonucunda Hermityen olmayan operatörlere duyulan ihtiyaç nedeniyle bu operatörlerin kullanımı belirtilmiştir.

Genel olarak kuantum fiziğinin tarihsel sürecinde hangi aşamalardan geçildiği ve hangi önemli denklemlerin göz önünde bulundurulduğu incelenmiş olup bu denklemlerle Hermityen – Hermityen olmayan operatörlerin birlikteliği önem arz etmektedir. PT simetrik Hamiltoniyen sistemlerinin genel fikirleri günümüz bilimsel çalışmaları ve teknolojilerinde; örneğin radyoloji ve radyoterapi üzerine kuantum hesaplamalarında kullanılmaktadır. Gelecekteki teknolojiler üzerinde de etkisinin artıp büyüyeceği yadsınamamaktadır.

KAYNAKLAR

Atkins P. (1977). *Quants Kavramların Referans Kitabı. M: Mir, 496 s*.

Balashov V., Dolinov V. (2001). Kuantum Mekaniği dersi. *Izhevsk: "Düzenli ve Kaotik Dinamikler" Araştırma Merkezi, 336 s.*

Basdevant J.-L., Dalibard J. (2006). Kuantum Mekaniği Çözücü. *Kuantum Teorisi Modern Fiziğe Nasıl Uygulanır? Springer, 292 s.*

Dwight GB. (1973) İntegral tabloları ve diğer matematiksel formüller: *Per. İngilizceden, Ed. K. Semendyaeva. Moskova: Nauka, 228 s.*

Fedorov A.V., Rukhlenko I.D., Baranov A.V., Kruchinin S. Yu. (2011). Optik Yarı İletken Kuantum Noktalarının Özellikleri. *SPb: Nauka, 188 s.*

Feynman RF, Leighton RB, Matthew S. (1966) Feynman Fizik Dersleri. *5-9. sorunlar için cevaplar ve çözümler içeren problemler ve alıştırmalar. Moskova: Mir, 625 s.*

Feynman R., Leighton R., Sands M. (1966) Feynman Fizik Üzerine Dersler. *Cilt 8. Kuantum Mekaniği (1). Moskova: Mir, 272 s.*

Griffiths D. J. (2005). Kuantum Mekaniğine Giriş. *Pearson Education, Inc., 470 s.*

de Broglie L. (1986). Heisenberg Belirsizlik İlişkileri ve Dalga Mekaniğinin Olasılıksal yorumu. *Moskova: Mir, 344 s.*

Klauder D., Sudarshan E. (1970) Kuantum Optiğinin Temelleri. *İngilizceden, Ed. A. A. Ahmanova. Moskova: Mir, 428 s.*

Landau LD. (2008). Livshits EM Teorik Fizik Kursu. *10 ciltte V. 3. Kuantum mekaniği (rölativistik olmayan teori). 6. baskı. Moskova: Fizmatlit, 800 s.*

Liboff R. L. (2003). Kuantum Mekaniğine Giriş. *New York: Addison-Wesley, 878 s.*

Lundeen J.S., Sutherland B., Patel A. ve diğerleri. (2011). Kuantumun Doğrudan ölçümü, Dalga Fonksiyonu // *Doğa. V. 474. S. 188-191.*

Mostafazadeh A. (2010*). Kuantum Mekaniğinin Pseudo-Hermityen Temsili, Int. J. Geom. Met. Mod. Fizik 7, 1191-1306.*

Mostafazadeh A. (2014). *PT-simetrik Saçılma Potansiyelleri için Genelleştirilmiş Üniterlik ve Karşılıklılık İlişkileri, J. Phys. C: Matematik. Teori. 47, 505303.*

Mostafazadeh A. (2018). *Dinamik Hilbert Uzayı ve Kuantum Teorisinin Küresel Geometrik Uzantısı Olan Bir Kuantum Sistemi İçin Gözlenebilir Enerji, Phys. Rev. D 98, 046022.*

Maitland A., Dunn M. (1978). Lazer Fiziğine Giriş. *İngilizceden, Ed. S.I. Anisimova. Moskova: Nauka, 407 s.*

Martinson LK. (2012). Smirnov EV Kuantum Fiziği ders kitabı. *M.: MGTU im. N.E. Bauman, 527 s.*

Omata T., Tani Y., Kobayashi S., Otsuka-Yao-Matsuo S. (2012). Kuantum Nokta Fosforları ve İnorganik Elektrolüminesans Cihazına Uygulanması // *İnce Katı Filmler. V. 520, No. 10. S. 3829 - 3834.*

Vorobiev L., Ivchenko E., Firsov D., Shalygin V. (2001). Optik Özellikler Nanoyapılar. *SPb: Nauka, 188 s.*