6. Kuantum Mekaniğinde İşlemci Metodları

Önceki bölümde (5. bölüm) dalga fonksiyonları ve vektörler ve bunların ait oldukları uzaylar arasındaki benzerlikler üzerinde durulmuştur. Bu bölümde daha da soyutlaştırılmış olarak bu benzerlikleri yeniden ele alacağız. Bu soyutlamayla dalga mekaniğinin ve Schrödinger denkleminin ötesine geçilmiş olacaktır.

Bu yeni yöntemi harmonik salınıcı örneği üzerinden yeni bir notasyonla (Dirac Notasyonu) çalışacağız.

6.1 Kuantum Mekaniğinin Daha Soyut Dirac Notasyonu ile Yeniden İfadesi

İncelediğimiz bütün kuantum sistemlerinde "durumlardan" bahsettik. Bu sonsuz kuyunun kesikli spektrumundaki n. bir özdurum(eigenstate) sahip bir ~~durum~~ parçacığın durumu veya $x=-\infty$'dan bir bariyere gelen serbest parçacığın momentum durumu olabilir. Bütün örneklerdeki öz durumlar aslında lineer bir uzayın vektörleridir.

Dirac notasyonunda bu vektörler "ket"ler olarak adlandırılırlar ve $|n\rangle$ veya $|p\rangle$ şeklinde gösterilirler. Eğer bir ket $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ nin eşzamanlı durumuysa $|a,b\rangle$ şeklinde yazılabilir. ($\hat{A} \rightarrow a$'nın, $\hat{B}$, b'nin özdeğeridir.)

$$\hat{A}|a,b\rangle = a|a,b\rangle$$
$$\hat{B}|a,b\rangle = b\,|a,b\rangle$$

olur. Eğer ilgili vektör bir özdeğerler ~~ailesinin~~ setinin süperpozisyonu (üst üste binmesi) sonucu oluşmuşsa $|\psi\rangle$ ile ifade edilebilir. Ket notasyonuyla gösterdiğimiz bu ifadelerde birer vektördür. Bu gözden vektörlerin sahip olduğu özellikleri taşırlar.

Örneğin; $\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle = |\Psi\rangle$, α ve β birer reel veya karmaşık sayı.

$|\psi\rangle$ → ket, $|\phi\rangle$ → ket, $|\Psi\rangle$ → ket

ketlerin toplamı da yine bir kettir.

Her bir "ket" karşılık onun karmaşık eşleniği olan ve "bra" olarak adlandırılan eşlenik vektörler vardır. Bunlar ise

$$\langle a| \;,\; \langle b| \text{ veya } \langle a,b| \;,\; \langle\psi|$$

ile gösterilebilirler.

Dejenerelik içermeyen ve kesikli bir spektruma sahip bir kuantum sisteminin öz durumları için,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_m^* u_n = \delta_{mn}$$

diklik bağıntısının varlığını biliyoruz. Bu özfonksiyonların tanımlı olduğu uzaya has olarak iç çarpımdır. İç çarpımın Dirac notasyonunda temsili ise

$$\underset{(\text{ket})}{u_n \longrightarrow |n\rangle} \quad \text{ve} \quad \underset{(\text{bra})}{u_m^* \longrightarrow \langle m|}$$

ile temsil edilmek üzere;

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_m^*(x)\, u_n(x) = \langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

olur. Öz fonksiyon değilde her hangi iki dalga fonksiyonu seçseydik (ϕ ve ψ gibi karesi integrallenebilir); iç çarpımları

$$\langle \phi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^*(x)\, \psi(x)$$

olarak yazılabilir.

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^* \psi\right)^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \phi$$

olduğuna göre, yeni notasyonla

$$\langle\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle$$

olacaktır. Üst üste binme durumunda da iç çarpım toplamanın üzerine dağılabilir,

$$\langle\phi|\alpha\psi_1 + \beta\psi_2\rangle = \alpha\langle\phi|\psi_1\rangle + \beta\langle\phi|\psi_2\rangle.$$

Bir işlemci $(\hat{A})$ bir ket (vektöre) etki ederse yeni bir vektör oluşur.

$$\hat{A}\underbrace{|\psi\rangle}_{\text{ilk vektör}} = \underbrace{|\hat{A}\psi\rangle}_{\text{yeni vektör.}}$$

Bu yeni vektör $\langle\phi|$ ile iç çarpılırsa

$$\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$$

olacaktır. Eski notasyondaki karşılığı

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^* \hat{A}\, \psi$$

olur.

Dalga mekaniği notasyonunda, $\hat{A}^{+}$ hermityen eşleniğini,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,(A\phi)^{*}\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\phi^{*}A^{+}\psi$$

ile tanımlamıştık. Dirac notasyonunda

$$\langle \hat{A}\phi | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A}^{+} | \psi \rangle$$

olacaktır. Buradan

$$\langle \phi | \hat{A}^{+} | \psi \rangle^{*} = \langle \hat{A}\phi | \psi \rangle^{*} = \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle$$

olacağı kolayca gösterilebilir.

$$\boxed{\langle \phi | \psi \rangle^{*} = \langle \psi | \phi \rangle}$$

Açılım teoremi için ise bu yeni notasyonla

$$| \psi \rangle = \sum_{n} c_n | n \rangle$$

yazabiliriz. Dalga mekaniği notasyonunda

$$\psi = \sum_{n} c_n u_n$$

olduğunu hatırlamakta fayda vardır.

$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ olduğunu hatırlarsak,

$$c_n = \langle n|\psi\rangle = \sum_m c_m \langle n|m\rangle$$

$$= \sum_m c_m \delta_{mn}$$

$$= c_n$$

olacağı açıktır. $\boxed{c_n = \langle n|\psi\rangle}$

ifadesini; $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle = \sum_n |n\rangle c_n$

açılımında yerine koyarsak;

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

olur. Bu toplam $|n\rangle$ öz durumların tam bir seti üzerinden gerçekleştirildiğinden,

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$$

olmalıdır. Burada $\hat{1}$ birim işlemcidir.

$$\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

her $|\psi\rangle$ için geçerli olacaktır. Böylece ortaya çıkan $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ tamlık bağıntısının yeniden ifade edilişidir

Bu yeni notasyonla bir örnek inceleyelim. Daha önce de çalıştığımız üzere herhangi bir hermityen işlemcinin ~~ket~~ bütün öz ketleri tek özdeğerli ise (diğer bir deyişle dejenerelik yoksa) özketler birbirine diktir.

$$\hat{H}|a\rangle = a|a\rangle \text{ ve } \hat{H}|b\rangle = b|b\rangle$$

a, b öz değerler, $|a\rangle$, $|b\rangle$ öz ketler ve $\hat{H}$ hermityen bir işlemci ile,

(*) $$\langle b|\hat{H}|a\rangle = \langle b|\,a|a\rangle = a\langle b|a\rangle$$

$$\langle a|\hat{H}|b\rangle = \langle a|\underbrace{b}_{\text{öz değer}}\,\underbrace{|b\rangle}_{\text{öz ket}} = b\langle a|b\rangle$$

Karmaşık eşlenik için ise; bu

$$\langle a|\hat{H}|b\rangle^* = \langle \hat{H}b|a\rangle = \langle b|\hat{H}^+|a\rangle$$

$$\langle a|\hat{H}|b\rangle^* = \langle a|b|b\rangle^* = b^*\langle a|b\rangle^* = b^*\langle b|a\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle b|\hat{H}^+|a\rangle = b^*\langle b|a\rangle}$$

$\hat{H} = \hat{H}^+$ ve $b = b^*$ 'dır. Çünkü $\hat{H}$ hermityendir.

$\Rightarrow$ (**) $\langle b|\hat{H}^+|a\rangle = \langle b|\hat{H}|a\rangle = b\langle b|a\rangle$ olur.

(*) ve (**) 'dan $\quad b\langle b|a\rangle = a\langle b|a\rangle$

$\Rightarrow (a-b)\langle b|a\rangle = 0$ olur. $a \neq b$ old. göre $\langle b|a\rangle = 0$ veya $\langle a|b\rangle = 0$ olur.

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \qquad \langle\psi| = \sum_n c_n^* \langle n|$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2 = 1$$

veya

$c_n = \langle n|\psi\rangle$ olduğuna göre ve $c_n^* = \langle\psi|n\rangle$

$$\Rightarrow c_n^* c_n = \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle\, |n\rangle\langle n|$$

$$c_n c_n^* = |n\rangle\langle n| \quad \text{veya} \quad \boxed{|c_n|^2 = |n\rangle\langle n|}$$

$|c_n|^2$ n. ~~öz~~ durumun gerçekleşme olasılığıdır.

Burada göre kesikli spektrum için örneklendirdik. Fakat spektrum sürekli de olabilirdi, örneğin bir boyutta konum böyle sürekli bir gözlenebilir olabilir.

$|\psi\rangle$ ile temsil edilen sistemin $|x\rangle$ konum öz ketleri ise ve $\hat{X}$ gözlenebilirini verecek olan hermitsel işlemciyse,

$$\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$$

yazılabilir. Bu özdeğer denklemine uyan öz ketlerle,

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, C(x)\,|x\rangle$$

yazılabilir.

"x" sürekli olduğundan $\sum\limits_n \to \int dx$'e geçildiği açıktır. $|x\rangle$ için ortonormallik

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$$

ile tanımlanır. Böylece; $C(x')$

$$C_n = \langle n | \psi \rangle$$ 'a

benzer şekilde

$$C(x') = \langle x' | \psi \rangle$$

ile hesaplanabilir. Böylece anlıyoruz ki;

$|C(x)|^2$ $|\psi\rangle$'ın $|x\rangle$'te bulunma olasılığıdır.

dalga mekaniğinde bunu $|\psi(x)|^2$ ile ifade ediyorduk. Eski ve yeni notasyonu

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$$

veya benzeri şekilde,

$$\phi(p) = \langle p | \psi \rangle$$

olarak birleştirebiliriz. $\langle p | \psi \rangle$ ifadesini $\phi(p)$ ile temsil etmemizin nedeni daha önce momentum uzayındaki dalga fonksiyonu için $\phi(p)$ kullanmış olmamızdır.

Sürekli spektrum için

a) Özketler cinsinden tamlık bağıntısı

$$\sum_n |n\rangle\langle n| \longrightarrow \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x| = \hat{1}}$$

$\hat{1}$ işlemcisi;

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)$$

olacağını göstermek için kullanılabilir

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{1}|\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \langle\psi_1|x\rangle\langle x|\psi_2\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)$$

---

b) $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ için $\int_{-\infty}^{\infty} dp\, |p\rangle\langle p| = \hat{1}$

$\hat{1}$ birim işlemci

$\psi(x) = \langle x|\hat{1}|\psi\rangle$ olarak kullanalım

Bu durumda

$$\psi(x) = \langle x|\hat{1}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \langle x|p\rangle\, \phi(p)$$

olur. Bu integrali $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi(p)\, e^{ipx/\hbar}$

ile karşılaştırırsak;

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

olacaktır. Hatırlarsak bu serbest parçacığın momentum öz durumu $u_p(x)$'dir.

İzdüşüm (Projeksiyon) İşlemcileri

Sonsuz kuyudaki gibi kesikli özdeğerler içeren bir spektrumun dalga fonksiyonu (keti)

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi$$

olarak yazılabilir. Burada

$$|n\rangle\langle n| \equiv \hat{P}_n$$

izdüşüm işlemcisi olarak tanımlanır. Bunlar $|\psi\rangle$'a uygulandığında $|\psi\rangle$ durumundan $|n\rangle$, $C_n = \langle n|\psi\rangle$ genliğiyle seçer.

$$\boxed{\hat{P}_n |\psi\rangle = |n\rangle\langle n|\psi\rangle = |n\rangle C_n = C_n|n\rangle}$$

Bu süreç $|\psi\rangle$ durumlarından $|n\rangle$ durumuna $\hat{P}_n$ ile izdüşüm yapılması olarak adlandırılır. $|\psi\rangle$ sistemin bütün durumlarını (bilgisini) içeren dalga fonksiyonu iken $|n\rangle$ bu durumlardan birisi (özdurumudur) dır. $\hat{P}_n$ $|\psi\rangle$ hangi $|n\rangle$ durumuna hangi olasılıkla düşeceğini belirler.

$\hat{P}_n$'nin özellikleri şunlardır.

(1) $\hat{P}_m \hat{P}_n = |m\rangle\langle m|n\rangle\langle n| = |m\rangle \delta_{mn} \langle n|$

$= \delta_{mn} |m\rangle\langle n|$

(2) $\sum_n \hat{P}_n = \hat{1}$

(3) $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n \hat{P}_n = |n\rangle\langle n|n\rangle\langle n| = |n\rangle 1 \langle n|$

$= |n\rangle\langle n|$

$= \hat{P}_n$

Kısaca $\boxed{\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n}$

(3). özelliğin anlamı: bir kere $|n\rangle$ ~~seviyesine~~ durumuna geçerse bir sistem tekrar bir başka duruma geçemez.

$\hat{P}_n^2|\psi\rangle = \hat{P}_n(\hat{P}_n|\psi\rangle) = \cancel{\hat{P}_n |n\rangle = |n\rangle\langle n|A\rangle}$

$= \hat{P}_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$

$= \hat{P}_n |n\rangle C_n = |n\rangle\langle n|n\rangle C_n$

$\boxed{\hat{P}_n^2|\psi\rangle = C_n|n\rangle}$

Yapılan bir deney sırasında spektrumun farklı $|n\rangle$ durumları farklı $|C_n|^2$ olasılıklarıyla ölçülebilir. Bu ortalama; $\hat{H}$ işlemcisine uygun bir sistem için enerji ortalaması olur.

$\langle\psi|\psi\rangle = 1$ (normalizeyse $\hat{H}$'nın ortalaması

$$\langle\hat{H}\rangle = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$$ ile hesaplanır.

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$$ olduğundan.

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{H}\sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_n \hat{H}|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|\sum_n E_n|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|n\rangle E_n\langle n|\psi\rangle \quad , \langle\psi|n\rangle = \langle n|\psi\rangle^*$$

$$\Rightarrow \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle^* E_n\langle n|\psi\rangle$$

$$\boxed{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 E_n}$$ olur.

$|C_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2$

$\langle\hat{H}\rangle = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ ile $\hat{H}$'nın ortalaması böylece bulunmuş olur.

olduğundan

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_n \hat{H}|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \cancel{\langle\psi|\left(\sum_n E_n|n\rangle\langle n|\right)}|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|\left(\sum_n E_n|n\rangle\langle n|\right)|\psi\rangle$$ olarak da

yazılabilir. Böylece $\hat{H}$ işlemcisi kendi özdeğerlerinin toplamı cinsinden

$$\boxed{\hat{H} = \sum_n |n\rangle\langle n| E_n} \text{ veya } \boxed{\hat{H} = \sum_n P_n E_n}$$

olarak yazılabilir.

6.2 Harmonik Salınıcının Enerji Spektrumu

Bir boyutlu bir harmonik salınıcı için Hamiltonyen işlemcisi

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m w^2 \hat{x}^2 ,$$

ile tanımlanır. Burada $\hat{x}$ konum ve $\hat{p}$ momentum işlemcisidir. Hem $\hat{x}$ hem de $\hat{p}$ hermityen işlemcilerdir ve

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$$

komütasyon ilişkisine sahiptirler. $\hat{H}$ işlemcisi $\hat{x}$ ve $\hat{p}$ cinsinden

$$\hat{H} = w \left(\sqrt{\frac{mw}{2}}\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2mw}} \right) \left(\sqrt{\frac{mw}{2}}\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2mw}} \right) + \frac{\hbar w}{2}$$

olarak çarpanlarına ayrılabilir. $\hbar w/2$ fazlalığı $\hat{p}$ ve $\hat{x}$ komüte etmediklerinden vardır. Eğer bu çarpanları

$$\hat{A} \equiv \sqrt{\frac{mw}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2mw\hbar}}$$

$$\hat{A}^{+} \equiv \sqrt{\frac{mw}{2\hbar}}\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2mw\hbar}}$$

$\left[\hat{x} = \hat{x}^{+} \text{ ve } \hat{p} = \hat{p}^{+} \right]$ hermityen oldukları için.

şeklinde iki hermityen eşlenik işlemci olarak tanımlarsak,

1

$$\hbar\omega \hat{A}^+\hat{A} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 - \frac{i\omega}{2}[\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}]$$

$$= \hat{H} - \frac{\hbar\omega}{2} \quad \text{olur.}$$

Eğer $\hat{p}$ ve $\hat{x}$ klasik momentum ve konum olsaydı. $\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = 0$ olurdu. Fakat kuantum sisteminde $[\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}] = [\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$

olduğundan;

$$\hbar\omega \hat{A}^+\hat{A} = \hat{H} - \frac{\hbar\omega}{2}$$

olmuştur.

$$\hbar\omega \hat{A}^+\hat{A} = \hat{H} - \frac{\hbar\omega}{2} \Longrightarrow \boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{A}^+\hat{A} + \frac{1}{2}\right)} \text{ olur.}$$

$\hat{H}$ (Hamiltonyen) ve $\hbar\omega$ enerji boyutlarında olduklarından $\hat{A}^+\hat{A}$ ve $\hat{A}$ ve $\hat{A}^+$ boyutsuz işlemcilerdir. $\hat{A}$ ve $\hat{A}^+$'nın komutatörünü,

$[\hat{A}, \hat{A}^+] = 1$ olacaktır. Bunu kolayca gösterebiliriz.

$$\hat{A} \equiv \hat{X} + i\hat{P} \Rightarrow \hat{A} \equiv \hat{X} - i\hat{P} \text{ 'dir.}$$

Burada, $\hat{X} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x}$ ve $\hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$ seçilmiştir.

$$[\hat{A},\hat{A}^{+}] = [\hat{x}+i\hat{p},\ \hat{x}-i\hat{p}]$$

$$= [\hat{x},\ \hat{x}-i\hat{p}] + [i\hat{p},\ \hat{x}-i\hat{p}]$$

$$= [\hat{x},\hat{x}] + [\hat{x},-i\hat{p}] + [i\hat{p},\hat{x}] + [i\hat{p},-i\hat{p}]$$

$$= 0 - i[\hat{x},\hat{p}] + i[\hat{p},\hat{x}] + (i)(-i)[\hat{p},\hat{p}]$$

$$= i[\hat{p},\hat{x}] + i[\hat{p},\hat{x}] + 0$$

$$= 2i[\hat{p},\hat{x}]$$

$$= 2i\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}},\ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x}\right]$$

$$= 2i\,\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,[\hat{p},\hat{x}]$$

$$= \frac{i}{\hbar}[\hat{p},\hat{x}] = \frac{i}{\hbar}(-i\hbar) = +1$$

Yeni tanımlanan $\hat{A}$ ve $\hat{A}^{+}$ işlemcileri ile $\hat{H}$ işlemcisi arasında,

$$[\hat{H},\hat{A}] = \hbar\omega[\hat{A}^{+}\hat{A},\hat{A}] = \hbar\omega\left(\hat{A}^{+}\overbrace{\cancel{[\hat{A},\hat{A}]}}^{0} + [\hat{A}^{+},\hat{A}]\hat{A}\right)$$

$$= \hbar\omega[\hat{A}^{+},\hat{A}]\hat{A} = -\hbar\omega\hat{A}$$

benzer şekilde

$$[\hat{H},\hat{A}^{+}] = \hbar\omega\hat{A}^{+}[\hat{A},\hat{A}^{+}] = \hbar\omega\hat{A}^{+}$$

komutasyon bağıntıları bulunur. Dirac notasyonundan enerji özdeğer denklemi

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$$

olarak yazılabilir. $[\hat{H},\hat{A}]$ komutasyon işlemcisini $|E\rangle$'ye uygularsak;

$$[\hat{H},\hat{A}]|E\rangle = \hat{H}\hat{A}|E\rangle - \hat{A}\hat{H}|E\rangle$$

$$[\hat{H},\hat{A}]|E\rangle = -\hbar\omega\hat{A}|E\rangle$$

eşitlikleri elde edilir. Bu eşitliklerin sağ tarafları birbirine eşit olacağından

$$\hat{H}\hat{A}|E\rangle - \hat{A}\hat{H}|E\rangle = -\hbar\omega\hat{A}|E\rangle$$

olur. Bu eşitlik yeniden düzenlenirse

$$\hat{H}\hat{A}|E\rangle = \hat{A}E|E\rangle - \hbar\omega\hat{A}|E\rangle$$

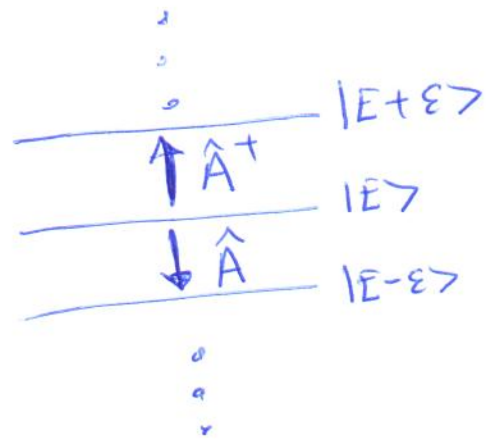
böylece de; $\hat{H}\hat{A}|E\rangle = (E-\hbar\omega)\hat{A}|E\rangle$

elde edilir. Bu yeni denklem de bir özdeğer denklemidir.

$\hat{A}|E\rangle$ $\hat{H}$'nin bir öz fonksiyonu ve $(E-\hbar\omega)$'de bu özfonksiyonun özdeğeridir.

$\hat{A}|E\rangle$'nin enerji $E-\hbar\omega$
$|E\rangle$'nın enerjisi E'den
$\hbar\omega$ kadar daha azdır.

$\hat{A}$, $\hat{A}|E\rangle$'ye uygulanırsa $\hbar\omega$ kadar daha az enerji değeri elde edilir. Bu durumda aşağıdaki şekildeki gibi bir merdiven yapısı oluşur. $\hat{A}$ ler uygulandığından spektrumun altına doğru, $\hat{A}^\dagger|E\rangle$ durumundan ise yukarı doğru çıkılır,



$$\hat{H}\hat{A}^\dagger|E\rangle = (E+\hbar\omega)\hat{A}^\dagger|E\rangle \text{ olur.}$$

Harmonik salınıcı için $\hat{A}$ ile sonsuza kadar aşağıya inilemez. Çünkü $\hat{H}$'nın bütün beklenen değerleri pozitiftir ve negatif olamaz.

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{1}{2m}\langle\hat{p}^2\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\langle\hat{x}^2\rangle$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle = \langle\psi|\hat{p}^2|\psi\rangle = \langle\hat{p}\psi|\hat{p}\psi\rangle \geq 0$$

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle = \langle\hat{x}\psi|\hat{x}\psi\rangle \geq 0$$

($\hat{x}$ ve $\hat{p}$ hermitsel oldukları için)

$$\Rightarrow \langle\hat{H}\rangle \geq 0$$

Bunun anlamı bir "taban değer" (minimum) enerjinin var olmasıdır. Bu durumu

$$|0\rangle$$

olarak adlandırabiliriz. Taban durumu enerjisinin "0" olduğu anlamına gelmez.

Fakat;

$$\hat{A}|0\rangle = 0$$

olmalıdır. Çünkü $|0\rangle$'dan daha düşük seviye varolamaz. $|0\rangle$ seviyesinin enerjisi

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega\left(\hat{A}^{+}\hat{A} + \frac{1}{2}\right)|0\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle$$

olacağından $\hbar\omega/2$ dir.

"Sıfır-nokta" enerjisi olarak adlandırılan bu enerji belirsizlik bağıntısının zorunlu kıldığı da bir durumdur.

$\langle\hat{p}\rangle = 0$ ve $\langle\hat{x}\rangle = 0$ olan herhangi bir ~~bir durum sistem için~~ durum için, $\hat{H}$'nın beklenen değeri

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{1}{2m}\langle\hat{p}^2\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\langle\hat{x}^2\rangle$$

ve $(\Delta p)^2 = \langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2 = \langle\hat{p}^2\rangle$, $\langle\hat{p}\rangle = 0$

ve $(\Delta x)^2 = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2 = \langle\hat{x}^2\rangle$, $\langle\hat{x}\rangle = 0$

$$\Rightarrow \langle\hat{H}\rangle = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

olur. $\Delta p\,\Delta x \geq \hbar/2$ olduğundan $(\Delta p)^2 \neq 0$ ve $(\Delta x)^2 \neq 0$ olmalıdır.

$\hat{A}^{+}|0\rangle$ durumunda enerji ne olur?

$$[\hat{H},\hat{A}^{+}]|0\rangle = \hat{H}\hat{A}^{+}|0\rangle - \hat{A}^{+}\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega\hat{A}^{+}|0\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{H}\hat{A}^{+}|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\hat{A}^{+}|0\rangle + \hbar\omega\hat{A}|0\rangle$$

$$\hat{H}\hat{A}^{+}|0\rangle = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}+1\right)\hat{A}^{+}|0\rangle$$

olur. $\hat{A}^{+}$ bir kere daha uygulanırsa enerji $\hbar\omega$ kadar artar ve bir üst duruma çıkılır. Böylece enerji öz değer spektrumunun

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

olacağı açıktır.

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

öz değer denkleminin normalize keti

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(A^{+})^{n}|0\rangle$$

olarak yazılabilir. Bu keti elde edebilmek için

$$\hat{A}\hat{A}^{+}\ldots\hat{A}^{+}|0\rangle$$

çarpımını ve $[\hat{A},\hat{A}^{+}]=1$ komütasyonunu kullanmalıyız. Bu iki ifadeye göre,

$$\hat{A}\hat{A}^{+}\ldots\hat{A}^{+}|0\rangle = \hat{A}(\hat{A}^{+})^{n}|0\rangle \quad \text{ve}$$

$$[\hat{A},\hat{A}^{+}] = \hat{A}\hat{A}^{+} - \hat{A}^{+}\hat{A} \Rightarrow \hat{A}\hat{A}^{+} = [\hat{A},\hat{A}^{+}] + \hat{A}^{+}\hat{A}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{A}\hat{A}^{+} = 1 + \hat{A}^{+}\hat{A}}$$

$$\Rightarrow \hat{A}(\hat{A}^{+})^{n}|0\rangle = \hat{A}\hat{A}^{+}(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle$$

$$= (1+\hat{A}^{+}\hat{A})(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle$$

$$= (\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + \hat{A}^{+}(\hat{A}\hat{A}^{+})(\hat{A}^{+})^{n-2}|0\rangle$$

$$= (\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + \hat{A}^{+}(1+\hat{A}^{+}\hat{A})(\hat{A}^{+})^{n-2}|0\rangle$$

$$= \ldots + (\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + (\hat{A}^{+})^{2}(\hat{A}\hat{A}^{+})(\hat{A}^{+})^{n-3}|0\rangle$$

$$= 2(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + (\hat{A}^{+})^{2}\hat{A}(\hat{A}^{+})^{n-2}|0\rangle$$

$$\vdots$$

$$= i(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + (\hat{A}^{+})^{i}\hat{A}(\hat{A}^{+})^{n-i}|0\rangle$$

$$\vdots$$

$$i=n \Rightarrow \quad = n(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + (\hat{A}^{+})^{n}\underbrace{\hat{A}|0\rangle}_{0}$$

$$\Rightarrow \hat{A}(\hat{A}^{+})^{n}|0\rangle = n(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle$$

$$\hat{A}^{2}(\hat{A}^{+})^{n}|0\rangle = n(n-1)(\hat{A}^{+})^{n-2}|0\rangle$$

$$\vdots$$

$$n>m \Rightarrow \hat{A}^{m}(\hat{A})^{+n}|0\rangle = n(n-1)(n-2)\ldots(n-m)(\hat{A}^{+})^{n-m}|0\rangle = \frac{n!}{m!}\hat{A}^{+n-m}|0\rangle$$

$$n<m \Rightarrow \ldots \quad = n(n-1)(n-2)\ldots 2.1\,\hat{A}^{m-n}|0\rangle = n!\,\hat{A}^{m-n}$$

$$n=m \Rightarrow \ldots \quad = n(n-1)(n-2)\ldots 2.1|0\rangle = n!|0\rangle$$

8

$$\boxed{\langle 0|A^m(\hat{A}^+)^n|0\rangle = n!\,\delta_{mn} \text{ dır.}}$$

Gerçekten,

$$\boxed{n>m} \Rightarrow \hat{A}^m(\hat{A}^+)^n|0\rangle = \frac{n!}{m!}(\hat{A}^+)^{n-m}|0\rangle$$

$$\Rightarrow \langle 0|\hat{A}^m(\hat{A}^+)^n|0\rangle = \frac{n!}{m!}\langle 0|(\hat{A}^+)^{n-m}|0\rangle$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{A}^+)^n|0\rangle \Rightarrow |n-m\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-m)!}}(\hat{A}^+)^{n-m}|0\rangle$$

$$\Rightarrow (\hat{A}^+)^{n-m}|0\rangle = \sqrt{(n-m)!}\,|n-m\rangle \Rightarrow$$

$$\langle 0|\hat{A}^m(\hat{A}^+)^n|0\rangle = \frac{n!}{m!}\langle 0|\sqrt{(n-m)!}\,|n-m\rangle$$

$$= \frac{n!}{m!}\sqrt{(n-m)!}\,\langle 0|n-m\rangle$$

$n>m$ olduğuna göre $n-m\neq 0$ 'dır ve $\langle 0|$ ve $|n-m\rangle$ $\hat{H}$'nın özvektörleri oldukları için diktirler.

Böylece

$$\langle 0|\hat{A}^m(\hat{A}^+)^n|0\rangle = 0$$

olur.

$$\boxed{n<m} \Rightarrow \langle 0|\hat{A}^m(\hat{A}^+)^n|0\rangle = \langle 0|n!\,\hat{A}^{m-n}|0\rangle$$

$$= n!\,\langle 0|\hat{A}^{m-n-1}\,\hat{A}|0\rangle$$

$\hat{A}|0\rangle = 0$ olduğuna göre $= 0$ olur.

$\boxed{n=m} \Rightarrow \langle 0|\hat{A}^m (\hat{A}^+)^n|0\rangle = \langle 0|n!|0\rangle$

$= n!\langle 0|0\rangle$

$|0\rangle$ ve $\langle 0|$ normalize oldukluklarından $\langle 0|0\rangle = 1$ $\longrightarrow$ $= n!$ olur.

$$\langle 0|\frac{\hat{A}^m}{\sqrt{m!}}\frac{(\hat{A}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \delta_{mn}$$

$$\langle m| \equiv \langle 0|\frac{\hat{A}^m}{\sqrt{m!}} \quad \text{ve} \quad |n\rangle \equiv \frac{(\hat{A}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

tanımları yapılabilir. Böylece

$$\langle 0|\frac{\hat{A}^m}{\sqrt{m!}}\frac{(\hat{A}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \langle m|n\rangle = \delta_{mn} \text{ olur.}$$

$\hat{A}$ ve $\hat{A}^+$ genel olarak merdiven (ladder) işlemcileri (operators) olarak adlandırılırlar.

$\hat{A}$: alçaltma (eksiltme) (yok etme)

$\hat{A}^+$: yükseltme (artırma) (yaratma) olarak da tanımlanırlar.

$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{A}^+\hat{A} + \frac{1}{2}\right) \text{ ve } [\hat{A},\hat{A}^+]=1}$ ifadelerini elde etmiştik.

İki ifade kullanılarak $\hat{H}$ aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir.

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{A}\hat{A}^+ - \frac{1}{2}\right), \quad \hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{A}^+\hat{A} + \hat{A}\hat{A}^+\right)$$

$$|n\rangle = \frac{(\hat{A}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \Rightarrow |n+1\rangle = \frac{(\hat{A}^+)^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}|0\rangle$$

$$\Rightarrow |n+1\rangle = \frac{\hat{A}^+}{\sqrt{n+1}}\frac{(\hat{A}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \frac{\hat{A}^+}{\sqrt{n+1}}|n\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{A}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle}$$

Benzer şekilde;

$$|n-1\rangle = \frac{(A^+)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}}|0\rangle \Rightarrow \hat{A}|n\rangle = \hat{A}\frac{(\hat{A}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

$$= n\frac{(\hat{A}^+)^{n-1}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

$$= \sqrt{n}\frac{(A^+)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}}|0\rangle$$

$$\boxed{\hat{A}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle}$$

$|n\rangle$ normalize edilirse

$\langle n|n\rangle = 1$

olacaktır.

$$\langle n|\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})\langle n|n\rangle$$
$$= \hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})$$

$$\Rightarrow \langle n|\hat{A}\hat{A}^+|n\rangle = \langle n|\hat{A}\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\,\langle n|\hat{A}\,|n+1\rangle$$
$$= \sqrt{n+1}\,\langle n|\sqrt{n+1}\,|n\rangle = (n+1)\,\langle n|n\rangle$$

$$\langle n|\hat{A}^+\hat{A}|n\rangle = \langle n|\hat{A}^+\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \sqrt{n}\,\langle n|\hat{A}^+|n-1\rangle$$
$$= \sqrt{n}\,\langle n|\sqrt{n}\,|n\rangle = n\langle n|n\rangle$$

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{A}^+\hat{A}+\tfrac{1}{2}) \Rightarrow \langle n|\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(\langle n|\hat{A}^+\hat{A}|n\rangle + \langle n|\tfrac{1}{2}|n\rangle\right)$$
$$= \hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})\,\langle n|n\rangle$$

(11)