.3 Bra-Ket Notasyonuyla Schrödinger Denklemi

$\hat{A}|0\rangle = 0$ ifadesinden başlarsak $\langle x|\hat{A}|0\rangle = 0$ olur.

$$\hat{A} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\,\hat{p}$$ olduğunu

hatırlarsak;

$$\langle x|\hat{A}|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x|\hat{x}|0\rangle + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\langle x|\hat{p}|0\rangle$$

olur.

$$\langle x|\hat{x}|0\rangle = x\langle x|0\rangle$$

$$\langle x|\hat{p}|0\rangle = \langle x|\hat{p}\,\hat{1}\,|0\rangle = \ldots$$

$$\boxed{\hat{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dp\,|p\rangle\langle p|} \Rightarrow$$

$$\ldots = \langle x|\hat{p}\int_{-\infty}^{\infty} dp\,|p\rangle\langle p|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\,\langle x|\hat{p}|p\rangle\langle p|0\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, p\langle x|p\rangle\langle p|0\rangle \Leftarrow \left[\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}\right]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, p\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}\langle p|0\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}\langle p|0\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x|p\rangle\langle p|0\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|\left(\int_{-\infty}^{\infty} dp\, |p\rangle\langle p|\right)|0\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|0\rangle$$

$$\left.\begin{aligned} \langle x|\hat{x}|0\rangle &= x\langle x|0\rangle \\ \langle x|\hat{p}|0\rangle &= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|0\rangle \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

ve;

$$\langle x|\hat{A}|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x|\hat{x}|0\rangle + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\langle x|\hat{p}|0\rangle = 0$$

Denklemi $\sqrt{2m\omega\hbar}$ ile genişletirsek

$$m\omega\langle x|\hat{x}|0\rangle + i\langle x|\hat{p}|0\rangle = 0$$

olur, Daha önce bulduklarımızı kullanırsak,

$$\boxed{m\omega x\langle x|0\rangle + \hbar\frac{d}{dx}\langle x|0\rangle = 0}$$

elde edilir

$$u_0(x) = \langle x|0\rangle$$

taban durum öz fonksiyonu $\Rightarrow$

$$\left(m\omega x + \hbar\frac{d}{dx}\right)u_0(x) = 0$$

diferansiyel denklemine ulaşırız.

Bu denklemin çözümü;

$$u_0(x) = C\, e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

dir. $u_0(x)$ normalize edilirse,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |u_0(x)|^2 = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-m\omega x^2/\hbar} = 1$$

$$\Rightarrow C^2 \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} = 1 \Rightarrow C = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \text{ olur.}$$

Böylece $u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

olarak bulunur.

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{A}^{+})^{n}\, u_0(x)$$

veya

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

olduğu hatırlanırsa ve

$$\hat{A}^{+} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} - i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\hat{p}\ ;\ \hat{x} \equiv x \text{ ve } \hat{p} \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

$$\Rightarrow u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\, \frac{d}{dx}\right)^{n} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

ile daha yüksek seviyeler hesaplanabilir.

Harmonik salınıcı yerine bir boyutlu herhangi bir potansiyelle sahip sistem için;

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})$$

$\Rightarrow$ ve

$$\langle x | \hat{V}(\hat{x}) | E \rangle = V(x) \langle x | E \rangle$$

ve

$$\langle x | \hat{p} | E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \langle x | \hat{p} | p \rangle \langle p | E \rangle$$

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

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \langle x | E \rangle$$

$$\Rightarrow \langle x | \hat{H} | E \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \langle x | E \rangle + V(x) \langle x | E \rangle$$

$$= E \langle x | E \rangle$$

Schrödinger denklemine ulaşılır.

6.4 İşlemciler ve Dalga Fonksiyonlarının Zamanla Değişimi

Bir sistemin zamanla gelişimini tanımlamak için üç farklı yöntem vardır. Bunlar Schrödinger, Heisenberg ve etkileşim (Dirac) resimleri (anlayışları) olarak adlandırılır. Bu kısımda bu üç bakış açısını inceleyeceğiz.

Zamanla Değişimin ~~Birim~~ Üniter İşlemcisi

zamana bağlı Sch. denkleminin

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{r},t)\rangle = \hat{H}_t |\psi(\vec{r},t)\rangle \quad (1)$$

olarak tanımlandığını hatırlayalım. burada $\hat{H}_t \equiv \hat{H}(\vec{r},t)$ 'dir.

Eğer, $\hat{H}_t = \hat{H}$ ise yani Hamiltonyen zamandan bağımsız ise (1) denkleminin çözümü

$$|\psi(\vec{r},t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} |\psi(\vec{r},t_0)\rangle$$

dur. Burada

$$\boxed{\hat{U}(t,t_0) \equiv e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}}$$

olarak tanımlanır.

$\hat{U}(t, t_0)$ bir sistemi t_0 anından t anına taşıyan ~~birim~~ işlemcidir.

$$\boxed{|\psi(\vec{r}, t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)\,|\psi(\vec{r}, t_0)\rangle}$$

Üniter ~~Birim~~ işlemci $\hat{U}\hat{U}^{+} = 1$ eşitliğini sağlamalıdır.

$$\hat{U}\hat{U}^{+} = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}\; e^{i\hat{H}^{+}(t-t_0)/\hbar}$$

$$= e^{-i(\hat{H}-\hat{H}^{+})(t-t_0)/\hbar}$$

$\boxed{\hat{H} = \hat{H}^{+} \text{ hermityen}} \Rightarrow$

$$= e^{-i(\hat{H}-\hat{H})(t-t_0)/\hbar}$$

$\boxed{\hat{U}\hat{U}^{+} = 1}$ $\boxed{\hat{U}\hat{U}^{-1} = 1 \Rightarrow \hat{U}^{-1}, \hat{U}\text{'nun tersidir.}}$

$$\hat{U}^{-1}(\hat{U}\hat{U}^{+}) = \hat{U}^{-1}1 \Rightarrow \boxed{\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1}}$$

$\hat{U}\hat{U}^{+} = 1$ veya $\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1}$ ise $\hat{U}$ işlemcisi üniterdir denir.

Ayrıca; $\hat{U}(t_0, t_0) = 1$ ve

$$\hat{U}(t, t_1)\,\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t, t_0)$$

özellikleri vardır.

Dalga fonksiyonlarının Üniter Dönüşümü

Öz fonksiyonlarını bildiğimiz bir $\hat{H}$ işlemcisi için bu öz fonksiyonları $|n\rangle$ ile gösterirsek; tamlık bağıntısı

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$ 'dir.

Böylece;

$$|\psi(\vec{r},t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(\vec{r},t_0)\rangle$$

$$= \sum_n \underbrace{\hat{U}(t,t_0)|n\rangle}\underbrace{\langle n|\psi(\vec{r},t_0)\rangle}$$

$$= \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|n\rangle c_n$$

olur.

$$\boxed{|\psi(\vec{r},t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|n\rangle}$$

şeklinde $|n\rangle$'lere açılabilir.

Böyle bir $|\psi(\vec{r},t)\rangle$ dalga fonksiyonunu (durum vektörünü) yeni bir durum vektörü olarak yazabiliriz. Üniter dönüşümle elde edilecek bu yeni durum vektörü zamandan bağımsız veya bir başka zamana bağlı olabilir.

$$\hat{U}^{\dagger}(t,t_0)|\psi(\vec{r},t)\rangle = |\psi(\vec{r},t)\rangle_T$$

Yeni $|\psi(\vec{r},t)\rangle_T$ dönüşmüş vektörün zamandan bağımsız olduğu kolayca gösterilebilir.

$$|\psi(\vec{r},t)\rangle_T = \hat{U}^\dagger |\psi(\vec{r},t)\rangle$$

$$= \sum_n c_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \hat{U}^\dagger |n\rangle$$

$$= \sum_n c_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} e^{iH(t-t_0)/\hbar} |n\rangle$$

$$= \sum_n c_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} e^{iE_n(t-t_0)/\hbar} |n\rangle$$

$$= \sum_n c_n |n\rangle$$

c_n'ler zamandan bağımsız olasılık katsayıları ve $|n\rangle$'ler zamandan bağımsız $\hat{H}$'nın zamandan bağımsız öz vektörleri olduğundan

$$\sum_n c_n |n\rangle = |\psi(\vec{r},t_0)\rangle$$

zamandan bağımsızdır.

$|\psi(\vec{r},t_0)\rangle = |\psi(\vec{r},t)\rangle_T$ yeni vektörün sistemin başlangıç durumudur.

Üniter dönüşüm Schrödinger denkleminin kendisine de uygulanabilir.

$$\boxed{\hat{U}^{+}|\psi\rangle = |\psi\rangle_T} \Rightarrow \boxed{|\psi\rangle = \hat{U}|\psi\rangle_T}$$

dir. Son ifadeyi zamana bağlı Sch. denkleminde kullanırsak,

$$H_t|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{U}|\psi\rangle_T) \quad \text{olur,} \Rightarrow$$

$$H_t|\psi\rangle = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}\right)|\psi\rangle_T + i\hbar\,\hat{U}\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_T$$

$$= i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{U}\hat{H}\right)|\psi\rangle_T + \hat{U}\,i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_T$$

$$\boxed{H_t|\psi\rangle = \hat{U}\hat{H}|\psi\rangle_T + \hat{U}H_t|\psi\rangle_T} \quad \text{olur.}$$

Eşitlik soldan $\hat{U}^{+}$ ile çarpılırsa,

$$\hat{U}^{+}H_t\underbrace{|\psi\rangle}_{} = \hat{A}|\psi\rangle_T + H_t|\psi\rangle_T \quad \text{olur.}$$

$|\psi\rangle = \hat{U}|\psi\rangle_T$ olduğundan

$$\hat{U}^{+}\hat{H}_t\hat{U}|\psi\rangle_T = \hat{A}|\psi\rangle_T + H_t|\psi\rangle_T$$

$$\Rightarrow H_t|\psi\rangle_T = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_T = (\hat{U}^{+}H_t\hat{U} - \hat{A})|\psi\rangle_T$$

yazılabilir.

Böylece zamana bağlı Schrödinger denklemini yeni efektif Hamiltonyen

$$\hat{U}^{+}H_t\hat{U} - \hat{H} \equiv \hat{H}_T$$

nin söylediği gösterilmiş olur. Tekrarlarsak;

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = (\hat{U}^{+}\hat{H}_t\hat{U} - \hat{H})|\psi\rangle = \hat{H}_T|\psi\rangle_T$$

İşlemcilerin Üniter Dönüşümleri

$\hat{A}(t)$ gibi açıkça zamana bağlı herhangi bir işlemcinin beklenen değeri

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \text{ ile}$$

hesaplanabilir.

$$\hat{U}\hat{U}^{+} = \hat{U}^{+}\hat{U} = 1$$

olduğuna göre.

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

$$= {}_T\langle\psi|\hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U}|\psi\rangle_T = {}_T\langle\psi|\hat{A}_T|\psi\rangle_T$$

$$= \langle\hat{A}_T\rangle \Rightarrow \boxed{\langle\hat{A}\rangle = \langle\hat{A}_T\rangle}$$

Böylece üniter dönüşüm altında bir işlemcinin beklenen değerinin değişmediği görülür.

$\hat{A}_T(t) \equiv \hat{U}^{+} \hat{A} \hat{U}$ ile tanımlanan $\hat{A}_T(t)$

üniter dönüşmüş işlemcinin zamanla değişimini inceleyelim.

$$\frac{d\hat{A}_T(t)}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^{+}\right)\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^{+}\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\right)\hat{U} + \hat{U}^{+}\hat{A}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^{+}\hat{H}\hat{A}\hat{U} + \underbrace{\hat{U}^{+}\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\hat{U}} - \frac{i}{\hbar}\hat{U}^{+}\hat{A}\hat{H}\hat{U}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^{+}\hat{H}\underbrace{\hat{U}\hat{U}^{+}}_{1}\hat{A}\hat{U} + (\ldots) - \frac{i}{\hbar}\hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{+}\hat{H}\hat{U}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\hat{H}'\hat{A}_T + (\ldots) - \frac{i}{\hbar}\hat{A}_T\hat{H}'$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\hat{A}_T}{dt} = \hat{U}^{+}\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{U} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}', \hat{A}_T\right]} \text{ olur.}$$

Burada $\hat{H}' = \hat{U}^{+}\hat{H}\hat{U}$

Bu yeni denkleme göre eğer $\partial\hat{A}/\partial t = 0$ olsa bile yani $\hat{A}(t)$ zamandan bağımsız olsa bile $\hat{A}_T(t)$ hala zamana bağlı olabilir.

$\frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} = 0 \Rightarrow \hat{A}(t)$ zamandan bağımsızdır. $\frac{d\hat{A}_I}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}', \hat{A}_I]$ olur. $\hat{A}_I$'nın zamandan bağımsız olabilmesi için $\hat{H}'$ ve $\hat{A}_I$ komüte etmelidir.

Zamana bağlılık dalga fonk. veya işlemcide ayrı ayrı da olabilir, her ikisinde de olabilir.

Schrödinger Resmi

$\hat{H}_t = \hat{H}$ zamandan bağımsız

$|\psi\rangle = |\psi(\vec{r}, t)\rangle$ zamana bağlıysa

Sch. resmidir. $\hat{H}_t = \hat{H}$ zamandan bağımsız olduğundan

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{|\psi_S\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|\psi_0\rangle}$$

$|\psi_S\rangle = |\psi(\vec{r}, t)\rangle$ ve $|\psi(\vec{r}, t_0)\rangle = |\psi_0\rangle$

→ Schrödinger resminde dalga fonksiyonunun zamanla değişimi.

Heisenberg Resmi

Bu sefer izlemciler açıkca zamana bağlı, dalga fonksiyonları zamandan bağımsızdır.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = 0 \quad \text{veya}$$

$$H_T |\psi\rangle_T = (\hat{U}^{+} \hat{H}_t \hat{U} - \hat{H}) |\psi\rangle_T$$

$$\boxed{\hat{H}_t = \hat{H}} \Rightarrow \boxed{H_T |\psi\rangle_T = 0}$$

olur. $|\psi\rangle$ açıkca zamandan bağımsızdır.

$\hat{A}_T = \hat{U}^{+} \hat{A} \hat{U}$ için eğer $\hat{A}(t)$ zamandan bağımsız ise
$$\frac{d \hat{A}_T(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}', \hat{A}_T]$$
old. göstermiştik. Heisenberg resminde $\hat{H}'$, $\hat{A}_T$ ve $|\psi\rangle_T$ yi sırasıyla $\hat{H}_H$, $\hat{A}_H$ ve $|\psi\rangle_H$ olarak adlandırabiliriz.

$$\boxed{\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H(t), \hat{A}_H(t)]}$$

Heisenber hareket denklemi olur.

Schrödinger den $\Leftrightarrow$ Heisenberg'e veya tersine geçişte işlemcilerin beklenen değeri değişmez.

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A}_H(t) \rangle$$

olacağını daha önce göstermiştik, aynı eşitlik halen geçerlidir.

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A}_H(t) \rangle}$$

olacaktır.

Etkileşim (Dirac) Resmi

Bu durumda hem ψ hem de $\hat{A}$ zamana bağlıdır. Bu resmin özelliklerini ileriye bırakıyoruz.