24/11/2019
Pazar - Antalya

5 Dalga Mekaniğinin Genel Yapısı

Bu bölümde 3. Bölümde çalıştığımız özel örnekleri tekrar hatırlatarak daha genel hale getireceğiz. Bu doğrultuda;

işlemcileri, hermityen işlemcileri,
açılım teoremi, dejenereliği ve
beklenen değerlerin zamana bağlılığını

tekrar çalışacağız.

5.1 Özfonksiyon ve Özdeğerler

Bir fiziksel sistemin durumunun bir dalga fonksiyonuyla tanımlana bileceğini kabul edeceğiz. Bu dalga fonksiyonunun sistem hakkında sahip olabileceğimiz bilgilerin tümünü içerdiğini de kabul edeceğiz.

Kolaylık olması açısından uzaysal olarak bir boyutlu ve tek bir parçacığın zamanla durumundaki değişimi ifade eden $\psi(x,t)$ dalga fonksiyonuyla tartışmaya başlayacağız.

Hamiltonyen İşlemcisi

Dalga fonksiyonunun zamana bağlı davranışı, hatırlanacağı üzere,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x,t) = \hat{H}\Psi(x,t) \qquad (1)$$

ile belirlenir. Burada $\hat{H}$ Hamiltonyen işlemcisi olarak adlandırılır ve $\Psi(x,t)$ ile durumları belirlenen parçacığın zamanla değişimini belirler. Kuantum mekaniğinde en sık kullanılan işlemcilerden birisidir. $\hat{V}(x)$ gibi bir potansiyel etkisindeki bir parçacık için $\hat{H}$ toplam enerji işlemcisi halini alır,

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

olarak yazılabilir. $\hat{p}$ momentum işlemcisidir ve

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \qquad (3)$$

olarak tanımlanır. Eğer $\hat{V}(x)$'in açıkça zamana bağlılığı söz konusu değilse Denk (1) için;

$$\Psi(x,t) = u_E(x)\, e^{-iEt/\hbar} \qquad (4)$$

kısmi çözümü ortaya çıkar.

Denk (4)'teki $u_E(x)$ Sch. Denkleminin zamandan bağımsız kısmı olan

$$\hat{H} u_E(x) = E\, u_E(x)$$

diferansiyel denkleminin çözümüdür. Denklemden anlaşılacağı üzere $\hat{H}$ $u_E(x)$ üzerine etki ettiğinde E sabit sayılarını üretir. Bu tür çözümler "öz çözümler" (eigen çözümleri) olarak adlandırılır ve gerekli "sınır şartlarını" sağlayan çözümlerin değerleri "öz değerler" olarak adlandırılır.

Özdeğer ve özfonksiyonların 3. Bölümden tanıdık gelebilecek bazı özellikleri:

1) Farklı $(E_i \neq E_j)$ öz değerlerin farklı özfonksiyonları birbirlerine (ortogonal) diktirler.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_{E_i}^* u_{E_j} = 0 \qquad (6)$$

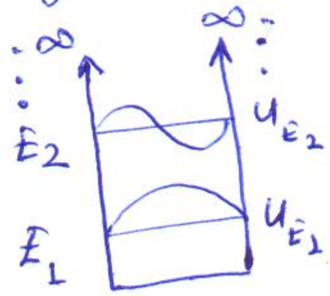
2) $\hat{H}$'nın özfonksiyonları tam bir settir. Bunun anlamı; karesi integrallenebilir olan her hangi bir keyfi fonksiyon (ψ),

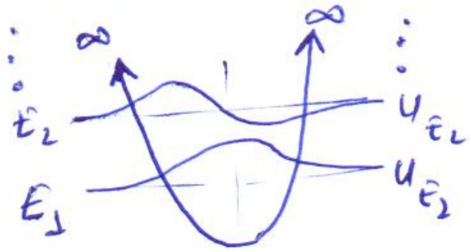
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 < \infty$$

şartını da sağlıyorsa, $\hat{H}$'nın öz fonksiyonları cinsinden;

$$\psi(x) = \sum_{E} c_E\, u_E(x) \qquad (7)$$

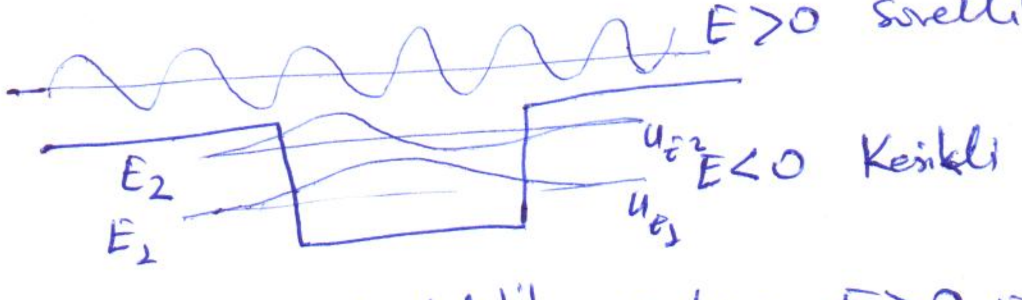
şeklinde bütün öz fonksiyonların toplamı olarak yazılabilir. Böyle bir açılım için, örneğin, sonsuz kuyunun veya harmonik salınıcının öz fonksiyonları (özvektörleri) kullanılabilir.





Şekillerden anlaşılacağı üzere enerji seviyeleri $(E_n,\ n=0,1,2,\ldots)$ kesiklidir.

Açılım için kullanılacak özvektörler daima kesikli bir spektruma ait olmayabilirler. Örneğin sonlu kuyuda;



$E<0$ durumunda kesiklilik varken, $E>0$ için sürekli bir spektrum oluşur. Bu durumda ortaya çıkan özvektörlerle $\psi(x)$ gibi bir fonksiyon;

$$\psi(x) = \underbrace{\sum_{n} c_n\, u_n(x)}_{\text{Kesikli}} + \underbrace{\int dE\, C(E)\, u_E(x)}_{\text{Sürekli}} \qquad (8)$$

$(E_n \rightarrow n)$

Denk 8. deki gibi açılabilir.

3) Öz fonksiyonlar (özvektörler) normalize değillerse, iç çarpımları "1" olmuyorsa, bir sabitle çarpılıp normalize edilebilirler. Normalizasyon katsayısı olarak adlandırılan sabit özvektörün kendi eşleniğiyle iç çarpımı sonucu hesaplanabilir.

u_n' : Normalize edilmemiş bir öz fonksiyon ise;

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_m'^{*} u_n' = N \delta_{nm} < \infty$$

şartını sağlıyorsa normalize edilebilir. N her iki öz fonksiyona;

$$u_n \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} u_n'$$

olacak şekilde dağıtılırsa;

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{1}{\sqrt{N}} u_m'^{*}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{N}} u_n'\right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_m^{*} u_n = \delta_{mn} \quad (9)$$

olur. Böylece "u_n" normalize edilmiş öz fonksiyonlardır.

4) Zamana bağlı Sch. Denk.nin herhangi bir $\psi(x,t)$ çözümü için, $t=0$ anındaki $\psi(x,0)$ halini kısaca $\psi(x)$ ile göstermiştik. Eğer $\psi(x)$ kesikli spektruma sahipse,

$$\psi(x) = \sum_E c_E u_E$$

olarak yazılabileceğini gördük. Eğer çalışılan sistemin potansiyel enerjisi $V(x)$ olacak şekilde zamandan bağımsızsa $\psi(x,t)$'yi

$$\psi(x,t) = \psi(x)\, T(t)$$

şeklinde kısmi çarpımlar olarak yazabileceğimizi biliyoruz. Böylece

$$\psi(x,t) = \sum_E c_E u_E(x)\, e^{-iEt/\hbar} \qquad (10)$$

açılımının yazılabileceği açıktır. $\psi(\cancel{x,t})$ Denklem (8) deki gibi sürekli bir kısımda sahipse;

$$\psi(x,t) = \sum_E c_E u_E e^{-iEt/\hbar} + \int dE\, C(E)\, u_E\, e^{-iEt/\hbar}$$

açılımı yapılabilir.

5.2 Diğer Gözlenebilirler

Gözlenebilir: Deneyle ölçülebilir fiziki niceliklerdir. Örneğin,

- Enerji
- Momentum
- Konum
- Açısal Momentum
- Parite
- Spin

Momentum işlemcisi (operatörü) için özdeğer denklemi,

$$\hat{p}\, u_p(x) = -i\hbar \frac{d\, u_p(x)}{dx} = p\, u_p(x) \quad (11)$$

olarak yazılır. Burada $\hat{p}$, u_p ve p ~~[illegible]~~ sırasıyla momentum işlemcisi, öz fonksiyonu ve özdeğeridir. Özdeğerler sürekli bir spektrum oluşturmaktadırlar, bu nedenle $-\infty < p < \infty$ aralığında herhangi bir değerler alabilirler. Özfonksiyonlar ise

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx/\hbar} \quad (12)$$

olarak ortaya çıkarlar. $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ normalizasyon katsayısıdır. Böylece u_p için ortonormalite (diklik ve normallik) şartı,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_{p_i}^{*}\, u_{p_j} = \delta(p_i - p_j) \quad (13)$$

olur. Böylece, $\psi(x)$ gibi bir fonksiyon $u_p(x)$ öz vektörleri cinsinden,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi(p)\, u_p(x) \quad (14)$$

şeklinde bir açılım olarak yazılabilir. Burada, "momentum uzayındaki dalga fonksiyonu" olarak adlandırdığımız $\phi(p)$'nin sadece bir açılım katsayısı gibi davrandığını belirtmek gerekir. Bu açılım katsayısının mutlak değerinin karesinin dp ile çarpımının $(|\Phi(p)|^2 dp)$, $\Psi(x)$ ile tanımlanan sistemin ölçülen momentumunun p ile p+dp aralığında olma olasılığının değerini belirlediğini söylemek (yorumlamak) mümkündür.

$\hat{p}$ işlemcisi $\hat{H}$ işlemcisi gibi reel öz değerlidir. Bu fiziksel nicelikleri temsil eden bütün işlemcilerden beklenen bir özelliktir. Bütün öz değerleri reel olan işlemciler "hermitgen" işlemciler olarak adlandırılırlar.

Bu durum şu şekilde genel bir ifade ile tanımlanabilir.

"Bütün fiziki niceliklerin (gözlenebilirlerin) reel özdeğerli olmaları gerekir, bu nedenle hermitgen işlemciler tarafından temsil edilmelidirler."

Hermitgen işlemcilerin bir karakteristik özelliği özfonksiyonlarının tam bir set oluşturmalarıdır. Bu tanımlamayı daha genel olarak aşağıdaki gibi ifade edebiliriz.

$\hat{A}$ gibi bir işlemci ile tanımlanan herhangi bir fiziki gözlenebilir için her bir özfonksiyonuna karşılık gelen reel özdeğerleri mevcuttur. Bu durum;

$$\hat{A}\, u_a(x) = a\, u_a(x) \qquad (15)$$

olarak formülize edilir. u_a özfonksiyonları ortogonal (dik) dirler ve normalize edilebilirler. Normalizasyon şartı; kesikli spektrumlar için

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_{a_i}^{*}\, u_{a_j} = \delta_{ij} \rightarrow \text{Kronecker Delta} \qquad (5.16a)$$

ile ve sürekliler için ise

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_{a_i}^{*}\, u_{a_j} = \delta(a_i - a_j) \rightarrow \text{Dirac Delta} \qquad (5.16b)$$

ile tanımlanır.

Böyle bir sistemin özfonksiyonları, tam bir set oluştururlar. Daha önce de ifade ettiğimiz üzere karesi integrallenebilir herhangi bir $\psi(x)$,

$$\psi(x) = \sum_a c_a\, u_a(x) \qquad (17)$$

şeklinde açılabilir. Burada c_a'lar ortonormaliteden yola çıkılarak $\rightarrow c_a = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_a^{*}\, \psi(x)$ (18) ile hesaplanırlar.

Eğer $\hat{A}$'nın spektrumu kesikli değilde sürekli olsaydı,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} da\ \phi(a)\, u_a(x)$$

açılımı yazılabilirdi. $\phi(a)$'lar ise,

$$\phi(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ u_a^*(x)\ \psi(x)$$

ortonormalitenin bir sonucu olan yukarıdaki integralle hesaplanırlar.

Açılım Katsayılarının Yorumu:

Açılım katsayısı C_a'nın yorumu aşağıdaki gibidir. Eğer $\hat{A}$ gözlenebiliri her biri $\psi(x)$ tarafından tanımlanan bir grup sistem için ölçülmüşse ve $\psi(x)$ normalizeyse,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\ \psi(x) = 1$$

olacaktır. Böylece;

1. $\hat{A}$'nın herhangi bir ölçümünün sonucu "a" özdeğerlerinden birisi olabilir.

2. "a" özdeğerinin gerçekleşme olasılığı veya öz değer olarak ölçüm yapılan sistemlerin ne kadarlık kısmının "a" özdeğerine sahip olacağının ölçüsü $|C_a|^2$ ile tanımlanır.

3. Ölçüm yapılan sistemlerden birisi a_i öz değerini üretiyorsa, bu özdeğeri üreten ölçüm, ölçüm yapılan sistemi u_{a_i} durumuna projekte etmelidir. Ancak bu şekilde $\hat{A}$ gözlenebilirleri için yapılan ölçümler tekrarlanabilir olur, aynı sonuçları verecek şekilde...

Bu yorumun bir sonucu, bir sistem için $\hat{A}$ gözlenebilirinin değerinin bu öz değerlerden ~~birine~~ herhangi birine sahip olma ihtimali "1" dir. Bunun anlamı:

$$\sum_a |C_a|^2 = 1 \text{ 'dir.} \quad (10)$$

Eğer $\psi(x)$ normalize ise yukarıdaki sonuca

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\, \psi(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\sum_a C_a^* u_a^*(x)\right) \psi(x)$$

$$= \sum_a C_a^* C_a \text{ 'dan ulaşılır.} \quad (11)$$

$$C_a = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_a^*(x)\, \psi(x) \Rightarrow$$

$$C_a^* = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, u_a(y)\, \psi^*(y)$$ olarak yazılabilir.

$$\sum_a C_a^* C_a = 1 \Rightarrow$$ bu ifadelerle yeniden

$$\sum_a C_a^* C_a = \sum_a \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_a^*(x)\, \psi(x) \int dy\, u_a(y)\, \psi^*(y)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,dy\, \psi^*(y)\, \psi(x) \sum_a u_a(y)\, u_a^*(x) = 1$$

olarak yazılabilir. Bu ifadenin doğru olabilmesi için

$$\boxed{\sum_a u_a(y)\, u_a^*(x) = \delta(x-y)} \quad (20)$$

olmalıdır. Bu eşitlik "tamlık (completeness) bağıntısı" olarak adlandırılır ve açılım teoremine eş değerdir.

Tamlık bağıntısına sıradan vektör benzetimi yaparsak; ($\hat{e}_1, \hat{e}_2$ ve $\hat{e}_3$) 3 boyutlu bir uzayın birim vektörleri (baz vektörleri) ise; $|\vec{A}| = 1$ (normalize ise)

$$\left.\begin{array}{l} \vec{A} = \sum_i \hat{e}_i A_i \\ \vec{A}^* = \sum_j \hat{e}_j^* A_j^* \end{array}\right\} \Rightarrow \vec{A}\cdot\vec{A}^* = \sum_{i,j} \hat{e}_i \cdot \hat{e}_j^* A_i A_j^*$$

$\hat{e}_i = \hat{e}_i^*$ ise $\hat{e}_i$'ler reeldir.

$$\vec{A}\cdot\vec{A}^* = \sum_{i,j} \delta_{ij} A_i A_j^*, \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

$$\vec{A}\cdot\vec{A}^* = \sum_i |A_i|^2 \;, \; |\vec{A}| = 1 \Rightarrow |\vec{A}|^2 = \vec{A}\cdot\vec{A}^* = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_i |A_i|^2 = 1}$$ 'dir. Bu durumda $\hat{e}_i$ 'ler tam bir set oluştururlar.

Tamlık bağıntısının bazı faydalı uygulamaları:

Uyg. 1 $u_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \dfrac{n\pi}{a} x \rightarrow$ Sonsuz kuyunun tek pariteli öz fonksiyonları,

Tamlık bağıntısına göre,

$$\sum_{n=1}^{\infty} u_n(y)\, u_n^*(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{a} \sin\frac{n\pi}{a} y \, \sin\frac{n\pi}{a} x$$

$$= \delta(x-y)$$

olur. Dirac Delta'nın

$$a\,\delta(x-y) = \delta\left(\frac{x}{a} - \frac{y}{a}\right)$$

olduğu özelliği ve $x/a = X$, $y/a = Y$ dönüşümleri kullanılırsa,

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin n\pi X \sin n\pi Y = \delta(X-Y) \qquad (21)$$

olduğu gösterilecektir.

Açıklama:

sin nπX ve sin nπY tek fonksiyonlardır fakat sin nπX sin nπY çift fonksiyon olur.

$$\sum_{n=1}^{\infty} 2 \sin n\pi X \sin n\pi Y = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin n\pi X \sin n\pi Y$$

olacağı açıktır. $n=0$ için ise $\sin n\pi X \sin n\pi Y = 0$'dır.

Böylece Denk. 21 daha iyi anlaşılabilir.

Uyg. 2) $$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

serbest bir parçacığın sürekli spektruma sahip momentum öz fonksiyonları olduğunu biliyoruz. Sürekli durumda

$$\delta(x-y) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, u_p^*(x)\, u_p(y) \qquad (22)$$

olur.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\, u_p^* u_p = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{ip(y-x)/\hbar}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(y-x)}$$

bulunur.

$$\boxed{\delta(x-y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(y-x)}}$$

olacağı gösterilmiş olur.

On the completeness relation in Quantum Mechanics

Asked 3 years, 8 months ago   Active 1 year, 5 months ago   Viewed 4k times

1

6

Why does

$$\sum_n \Phi_n^*(x)\Phi_n(r) = \delta(x-r)$$

represents a completeness relation? Or, put differently, why does it imply completeness?

Is there any way to see it intuitively? Maybe an intuition concerning vector analogy? It seems to me that we are summing up the product of the component of a vector along the x axis with its component along the r axis (roughly speaking) of n vectors but I can not quite see through the relation and I can not see why completeness holds through it.

quantum-mechanics   wavefunction   hilbert-space   dirac-delta-distributions

edited Mar 5 '16 at 23:17
Qmechanic ♦
117k 14 234 1397

asked Mar 5 '16 at 20:12
TheQuantumMan
5,198 3 21 56

@AccidentalFourierTransform thanks for helping, the formula is here : jpoffline.com/physics_docs/y3s6/mm_summary.pdf check equation (1.5) the second one. – TheQuantumMan Mar 5 '16 at 20:20

Related : Take a look how this useful relation is used for the derivation of the propagator $K(\mathbf{x},t\,;\,\mathbf{x}_0,t_0)$ in my answer here : Show that Propagator satisfies Schrödinger equation, equations from (sk-12) to (sk-18). Equation (sk-17) therein is identical to that of the question. – Frobenius Jun 25 '18 at 22:55

3 Answers

6

A "completeness relation" for a set of vectors $|\psi_n\rangle$ is that the sum of the projectors onto them is the identity since that assures use there is no basis vector "missing", i.e.

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \mathbf{1}$$

and your relation is this evaluated in position space: Apply $\langle x|$ from the left and $|x'\rangle$ from the right to obtain

$$\sum_n \langle x|\psi_n\rangle\langle\psi_n|x'\rangle = \langle x|x'\rangle$$

and since the wavefunction is defined by $\psi_n(x) := \langle x|\psi_n\rangle$ this gives

$$\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = \delta(x-x')$$

so your equation is the completeness relation for the kets $|\psi_n\rangle$ expressed in position space.

answered Mar 5 '16 at 20:26
ACuriousMind ♦
78.8k 18 144 372

Your answer, written at no-mathematical-rigor level, starts off with the assumption that the "kets" are genuine vectors in a Hilbert space (notice that the completeness relation you started with involves a sum, i.e. n takes values in a subset of $\mathbb{N}$), to end up with a discrete sum of functions in a realization of the Hilbert space you started with by a set of (classes of equivalence of) functions which will not longer add up to unit operator (number 1), but to a distribution. Therefore, there is a logical disconnection somewhere... – DanielC Nov 9 '17 at 22:31

1 @DanielC Yes, the "logical disconnection" is that position kets are terrible objects and if you want rigor you should avoid them at all costs ;) I can't say anything in defense of this answer, mathematically, this is undoubtedly nonsense: I start with an expression that lives in the

Hilbert space, then apply two bras/kets to it that are *not* in the Hilbert space, and end up with a sum over functions converging...somehow. But note that the question is the same kind of nonsense to begin with: The sense of convergence in which the sum is supposed to go to the distribution is not specified. – ACuriousMind ♦ Nov 9 '17 at 23:19

Thank you for your comment. Actually, it should be emphasized at all costs in an answer to a mathematically ill-posed (or perhaps incompletely stated) problem that this is the case and that your answer would not pass a rigor validation. This is my problem with „elementary" or typically textbook-level physics. It strays from mathematics without saying (a disclaimer) it specifically. Even "X Theory for Mathematicians" books fall in the same trap, I am afraid... I have not been able to wrap my head around the full mathematical treatment of Dirac's bra/ket formalism, so I avoid it completely. – DanielC Nov 9 '17 at 23:31

2

Let's do a finite example. Suppose we have a vector space V with a subset of vectors $E = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots\}$. Also assume that V has an inner product, and that this set of vectors is *orthonormal*. That is

$$\langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \delta_{ij}$$

If the span of these vectors is all of V (they form a basis for V) then we say that the set is a *complete orthonormal basis* for V. ("Complete" and "basis" pretty much mean the same thing here. There might be some nuance in the infinite dimensional case, but the intuition is the same)

Given E, we can construct a special linear operator that acts on V. We'll call it P_E and its action on an arbitrary vector $v \in V$ is given by

$$P_E(v) = \sum_n \langle \mathbf{e}_n, \mathbf{v} \rangle \mathbf{e}_n$$

$P_E(v)$ is a linear combination of $\mathbf{e}$'s, so it is a linear map that takes a vector from V and returns a vector in $\mathbf{span}(E)$.

What if $\mathbf{span}\, E = V$? Well, then we know we can write every vector $\mathbf{v}$ as $\sum_i v^i \mathbf{e}_i$, so

$$P_E(v) = \sum_{n,i} \langle \mathbf{e}_n, \mathbf{e}_i \rangle v^i \mathbf{e}_n = \sum_{n,i} \delta_{ni} v^i \mathbf{e}_n = \sum_i v^i \mathbf{e}_i = \mathbf{v}$$

Hence, if E is a complete, orthonormal basis for V, then $P_E = I$, the identity operator on V. If it is orthonormal but not complete, P_E sends V to a restricted subspace of V.

To address your question all we have to do is notice that $\sum |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|$ is just a convenient way of writing P_Φ and that $\delta(x - r)$ is the identity operator on the Hilbert space of square-integrable functions.

answered Mar 5 '16 at 20:37
Luke Pritchett
3,282 8 12

1

In the finite dimensional case completeness can be represented by

$$I = \sum_{i=0}^{n} |i\rangle\langle i|,$$

where the kets are typically orthogonal. The relation in the OP is for continuous variables, and establishes that counting everything, the entirety is present somewhere.

It's often called the resolution of the identity, and it means that the expression accounts for all of the elements of probability; thus probability is conserved.

edited Jun 25 '18 at 18:04
Leading-Order
3 2

answered Mar 5 '16 at 20:21
Peter Diehr
6,729 1 12 29

1 Hello and thanks for the answer, but why does your formula and my formula(which are the same) imply completeness? Is there a way to see through it and understand it? – TheQuantumMan Mar 5 '16 at 20:25

26/11/2019

5.3 Vektör Uzayları ve İşlemciler

Daha önce de belirtildiği üzere özfonksiyonların bir tam setinin bir vektör uzayının birim vektörlerinin tam ~~set~~ setine benzerliği açıktır. Böylece açılım teoreminin, herhangi bir vektörün bir başka vektör uzayının birim vektörleriyle ifade edilmesine benzerliği daha açık anlaşılmaktadır. Daha sonra öz fonksiyonların vektörlere olan benzerliklerinin daha da fazla olduğunu göreceğiz.

<u>Örneğin</u>: $\vec{A}$ ve $\vec{B}$ gibi herhangi iki vektörün toplamı da yine bir vektördür.

$$\vec{C} = \vec{A} + \vec{B}$$

Bunun öz fonksiyonlar için karşılığı: ψ_A ve ψ_B gibi iki dalga fonksiyonunun toplamı da bir dalga fonksiyonudur.

$$\psi_C = \psi_A + \psi_B$$

Bir başka örnek iç (skaler) çarpımdır.

Vektör uzayında: $C = \vec{A} \cdot \vec{B}$

Hilbert uzayında: $C = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_A^* \psi_B$

Benzetim yaptığımız ve öz fonksiyonların birim vektörleri olduğu bu uzayın adı "Hilbert Uzayı"dır. Hilbert uzayı genellikle karmaşık (kompleks) ve süreklilik içeren bir şekilde sonsuz boyutludur. Çünkü, $\psi(x)$ dalga fonksiyonları ve $\psi_k(x)$ gibi sürekli öz fonksiyonları içermektedir.

Şimdilik Hilbert uzayının derin matematik alt yapısına girmeyeceğiz. Hilbert uzayını benzettiğimiz vektör uzayları gibi kabul etmek bu aşamada işimizi görecektir.

İlgilendiğimiz haliyle bu uzayın bazı özellikleri şöyledir.

– Bir vektör uzayında (bunada Hilbert) bir işlemci bir vektörü başka bir vektöre dönüştürebilir. Şimdilik sadece çizgisel (lineer) işlemcilerle ilgileniyoruz.

$\hat{A}$: lineer işlemci, α_1 ve α_2 herhangi iki karmaşık sayı ve ψ_1 ve ψ_2 vektörler olmak üzere,

$$\hat{A}\left(\alpha_1 \psi_1(x) + \alpha_2 \psi_2(x)\right)$$
$$= \alpha_1 \hat{A}\psi_1(x) + \alpha_2 \hat{A}\psi_2(x) \qquad (24)$$

olur.

Her hangi bir çizgisel ve hermityen bir işlemci için bir hermityen eşlenik (konjugate) işlemci tanımlana bilir. $\hat{Q}$ bir lineer hermityen işlemci ve ψ karesi integrallenebilir bir dalga fonksiyonu ise $\hat{Q}^{\dagger}$ hermityen eşleniği

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \hat{Q}^{\dagger} \psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (\hat{Q}\psi)^* \psi} \qquad (25)$$

ile tanımlanır. Daha önce belirttiğimiz üzere beklenen değerleri reel olan lineer (çizgisel) işlemciler hermityen işlemciler olarak adlandırılırlar. Bu durum kısaca

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle^* \qquad (26)$$

ile ifade edilebilir. Bu ifadeyi integral şeklinde yazarsak;

$$(27) \qquad \langle \hat{A} \rangle = \int dx\, \psi^* \hat{A} \psi \qquad \langle \hat{A} \rangle^* = \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \hat{A} \psi \right]^*$$

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \hat{A} \psi \right]^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (\hat{A}\psi)^* (\psi^*)^*$$

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \hat{A}^{\dagger} \psi$$

[redacted] Denk. 25'ten

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle^* \Longrightarrow \int dx\, \psi^* \hat{A} \psi = \int dx\, \psi^* \hat{A}^{\dagger} \psi \Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A}^{\dagger} \rangle$$

$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A}^{+} \rangle \Rightarrow \boxed{\hat{A} = \hat{A}^{+}}$ (28)

Bu son eşitliğin anlamı kendi eşleniğine eşit olan işlemci hermitsel bir işlemcidir. Hermitsel işlemciler bazen "self-adjoint" işlemciler olarak da adlandırılır.

Self-adjoint: Hermitsel eşleniği kendisiyle aynı olan işlemci

İşlemcilerin Bazı diğer özellikleri:

1. Denk 27 ve 28'in bir sonucu olarak hermitsel işlemciler için;

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

yazılabilir. Burada ϕ ve ψ yine keyfi integrallenebilir dalga fonksiyonlarıdır.

2. Hermitsel işlemcilerin farklı öz değerlere karşılık gelen öz fonksiyonları diktir.

$$\hat{A} u_1 = a_1 u_1 \quad \text{ve} \quad \hat{A} u_2 = a_2 u_2 \quad (29)$$

$$\Rightarrow \text{ve } a_1 \neq a_2 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_1^* u_2 = 0 \quad (30)$$

dur.

(3) Herhangi iki $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ işlemcisi için

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, (\hat{A}\hat{B}\phi)^{*}\,\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^{*}\,(AB)^{\dagger}\,\psi$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^{*}\, B^{\dagger} A^{\dagger}\,\psi \quad \text{olur.}$$

Bu ifadenin doğruluğu aşağıdaki gibi gösterilebilir.

$$C(x) = \hat{B}\,\phi(x) \Rightarrow$$

$\phi(x)$ bir dalga fonk. $\Rightarrow$ $C(x)$'te bir dalga fonk. dur. Bu durumda;

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, (\hat{A}\,C(x))^{*}\,\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, C^{*}\,\hat{A}^{\dagger}\,\psi$$

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^{*}\,\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}\,\psi \quad \text{olur.}$$

Böylece; $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^{*}\,(\hat{A}\hat{B})^{\dagger}\,\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^{*}\,\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}\,\psi$

$$\Rightarrow \text{kısaca} \quad (\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger} A^{\dagger} \qquad (31)$$

yazılabilir. Bu ifade genelleştirilebilir:

$$(ABCD\ldots Z)^{\dagger} = Z^{\dagger}\ldots D^{\dagger}.C^{\dagger}B^{\dagger}A^{\dagger} \qquad (32)$$

(4) Herhangi bir $\hat{Q}$ işlemcisinin

$$\hat{Q}+\hat{Q}^{+},\ i(\hat{Q}-\hat{Q}^{+}) \text{ ve } \hat{Q}\hat{Q}^{+}$$

kombinasyonları hermitgen işlemcilerdir.

Örneğin; $(\hat{Q}+\hat{Q}^{+})^{*} = (\hat{Q})^{*} + (\hat{Q}^{+})^{*}$

$$= \hat{Q}^{+} + \hat{Q}$$

$$= \hat{Q} + \hat{Q}^{+}$$

(5). $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ gibi iki hermitgen işlemcinin çarpımları hermitgen olmak zorunda değildir.

$$(\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+} = \hat{B}\hat{A} \quad \text{(I)}$$

$$(\hat{B}\hat{A})^{+} = \hat{A}^{+}\hat{B}^{+} = \hat{A}\hat{B} \quad \text{(II)},$$

$$\Rightarrow \quad (\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}\hat{A}$$

$$- \quad \hat{A}\hat{B} = (\hat{B}\hat{A})^{+}$$

$$(\hat{A}\hat{B})^{+} - \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} - (\hat{B}\hat{A})^{+}$$

olur. Ancak; $(\hat{A}\hat{B})^{+} - \hat{A}\hat{B} = 0$ olursa $(\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{A}\hat{B}$ ve $\hat{A}\hat{B}$ çarpımı hermitgen olur

veya

(II) - (I) 'den, $\underbrace{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0}$ olursa $(\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{A}\hat{B}$ sağlanacak.

Kısaca $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ olarak yazılır.

$[\hat{A},\hat{B}] = 0$ ise $\hat{A}\hat{B}$ 'de hermitgendir. (6)

5.4 - Dejenerelik (Yozlaşma) ve Eşzamanlı Gözlenebilirler

Önceki izlediğimiz bazı örneklerde (serbest parçacık gibi) $\hat{H}$'nın öz fonksiyonlarının eşzamanlı olarak $\hat{p}$'nın de öz fonksiyonları olduğunu gördük. ($\hat{H} \to$ enerji, $\hat{p} \to$ momentum)

Böyle ortak öz fonksiyonlara sahip işlemciler için komüte edebilirler denir.

Komütasyon aşağıdaki örnekle açıklanabilir. $\hat{A}$ ve $\hat{B}$'nın u_a ortak öz fonksiyonudur.

$$\hat{A} u_a = a u_a \quad \text{ve} \quad \hat{B} u_a = b u_a$$

$$\Rightarrow \quad \hat{A}\hat{B} u_a = \hat{A} b u_a = b \hat{A} u_a = ba u_a \quad \text{ve,}$$

$$\hat{B}\hat{A} u_a = \hat{B} a u_a = a \hat{B} u_a = ab u_a$$

olur. Böylece,

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) u_a = (ba - ab) u_a$$

$$= 0$$

olacağı açıktır.

Sadece tek bir öz fonksiyon için bu ilişkinin varlığı yeterince kullanışlı olmayabilir.

$$\psi(x) = \sum_a c_a u_a$$

$\psi(x)$ ilgilenilen sistemin bütün bilgisini veren dalga fonksiyonu

$$\sum_a c_a u_a$$

$\psi(x)$'in u_a öz fonksiyonlarıyla açılımıdır. u_a'lar hem $\hat{A}$'nın hem de $\hat{B}$'nin öz fonksiyonlarıdır.

Böylece;

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}\hat{B}\sum_a c_a u_a = \hat{A}\sum_a c_a \hat{B} u_a$$

$$= \hat{A}\sum_a c_a b u_a = \sum_a c_a b \hat{A} u_a$$

$$= \sum_a c_a b a u_a$$

$$\hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}\hat{A}\sum_a c_a u_a$$

$$= \sum_a c_a a b u_a$$

$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = 0$ olur.

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \equiv [\hat{A}, \hat{B}]$$

$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ise $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ komüte ederler denir.

Eğer $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow$

$\hat{A}\hat{B}u_a = \hat{B}\hat{A}u_a$ 'dır.

$\hat{B}\hat{A}u_a = \hat{B}au_a = a\hat{B}u_a \Rightarrow$

$\Rightarrow \hat{A}(\hat{B}u_a) = a(\hat{B}u_a)$ olur.

- Buna göre; $(\hat{B}u_a)$ $\hat{A}$'nın a öz değerli bir öz fonksiyonudur.

Benzer şekilde

$\hat{B}\hat{A}u_a = b(\hat{A}u_a)$ olduğu gösterilebilir.

- Bu durumda da $(\hat{A}u_a)$ $\hat{B}$'nın b öz değerli öz fonksiyonudur.

- Aslında u_a hem $\hat{A}$'nın hem $\hat{B}$'nın öz fonksiyonu ise $[u_{ab}]$ ile temsil etmek daha açıklayıcı olacaktır.

- Böylece ortogonal bir u_a veya u_{ab} $\hat{A}$ ve $\hat{B}$'nın eşzamanlı öz fonksiyonudur.

Eşzamanlı öz fonksiyonların varlığı daima mümkün olmayabilir. Yukarıdaki durumda, $\hat{A}$'nın öz fonksiyon u_a'ların her biri için bir tek "a" öz değeri vardı.

Eğer; $\hat{A}\, u_a^{(1)}(x) = a\, u_a^{(1)}(x)$

$$\hat{A}\, u_a^{(2)}(x) = a\, u_a^{(2)}(x)$$

$\Rightarrow$ $u_a^{(1)}$ ve $u_a^{(2)}$ nin tek ve ortak öz değeri vardır. Bu durumda $u_a^{(1)}$ ve $u_a^{(2)}$ dejenere durumlardır denir.

- Burada çift katlı bir dejenerelik vardır.
- Fakat dejenerelik daha fazla da olabilir.

- Bu durumda artık $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ var olup, olmayacağından emin olamayız.
- Çünkü, $u_a^{(1)}$ ve $u_a^{(2)}$ $\hat{B}$ nın öz fonksiyonları olmayabilirler.

$$\boxed{\hat{B}\, u_a^{(1)}(x) = \alpha\, \phi(x)}$$ gibi tamamen farklı bir fonksiyona dönüşebilir.

Bu artık bir özdeğer denklemi değildir.

$$\hat{p}\, u_a^{(2)} = -i\hbar \frac{d}{dx} B\cos kx = i\hbar k B \sin kx \quad , \quad \sin kx = \frac{u_a^{(1)}}{A}$$

$$\boxed{\hat{p}\, u_a^{(2)} = i p \frac{B}{A} u_a^{(1)}} \quad (**)$$

$\hat{p}\, u_a^{(1)}$ ve $\hat{p}\, u_a^{(2)}$ den öz değer denklemleri çıkmadı. Dolayısıyla bu öz fonksiyonları kullanarak

$$[\hat{H}, \hat{p}]$$

komütasyonunu inceleyemeyiz.

$(*)$'den $\frac{i}{A}\hat{p}\, u_a^{(1)} = p\cos kx$ ve

$(**)$'den $\frac{1}{B}\hat{p}\, u_a^{(2)} = i p \sin kx$

eşitliklerinin çıkacağı açıktır. Bu iki eşitliği taraf tarafa toplar veya çıkarırsak

$$\hat{p}\left(\frac{i}{A}u_a^{(1)} \pm \frac{1}{B}u_a^{(2)}\right) = p(\cos kx \pm i\sin kx)$$

$$= p\, e^{\pm ikx}$$

olur. $\boxed{e^{+ikx} = V_+}$ ve $\boxed{e^{-ikx} = V_-}$ tanımlarını yaparsak.

$$V_+ = \frac{i}{A}u_a^{(1)} + \frac{1}{B}u_a^{(2)}$$

$$V_- = \frac{i}{A}u_a^{(1)} - \frac{1}{B}u_a^{(2)}$$

olurlar. $u_a^{(1)}$ ve $u_a^{(2)}$'nin çizgisel (lineer) kombinasyonu olan

v_+ ve v_- hem $\hat{H}$'nın hem de $\hat{p}$'nın öz fonksiyonudur. Test edelim.

$$\hat{H} v_+ = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}e^{ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} v_+ = E v_+$$

$$\hat{H} v_- = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}e^{-ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} v_- = E v_-$$

$$\hat{p} v_+ = -i\hbar\frac{d}{dx}e^{ikx} = \hbar k v_+ = p v_+$$

$$\hat{p} v_- = -i\hbar\frac{d}{dx}e^{-ikx} = -\hbar k v_- = -p v_-$$

Dikkat edilirse

$$\hat{H} v_\pm = E v_\pm \quad \text{iken} \quad \hat{p} v_\pm = \pm p v_\pm$$

$\hat{H}$ iki katlı dejenereyken, $\hat{p}$'de dejenerelik yoktur. $\hat{H}$'nın öz fonksiyonlarından elde edilen v_+ ve v_- $u_a^{(1)}$ ve $u_a^{(2)}$'nın lineer kombinasyonudur.

$$[\hat{H},\hat{p}]u_a^{(1)} \quad \text{veya} \quad [\hat{H},\hat{p}]u_a^{(2)}$$

ile $\hat{H}$ ve $\hat{p}$ nin komütasyonu incelemez çünkü $u_a^{(1)}$ ve $u_a^{(2)}$ $\hat{p}$'nın öz fonksiyonları değildir..

Fakat V_+ ve V_- her ikisinin öz fonk.

olduğundan

$$[\hat{H},\hat{p}]V_+ = \hat{H}\hat{p}V_+ - \hat{p}\hat{H}V_+$$

$$= \hat{H}pV_+ - \hat{p}EV_+$$

$$= p\hat{H}V_+ - E\hat{p}V_+$$

$$= (pE - Ep)V_+$$

$$= 0$$

olur. V_- içinde $[\hat{H},\hat{p}]V_- = 0$

olacağı kolayca gösterilebilir.

- Sonuç; $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ her ikisi de dejenere değilse ve öz fonksiyonları ortaksa komüte edebilirler.

- Fakat $\hat{A}$ veya $\hat{B}$'den birisi dejenereyse yukarıdaki örnekteki sonuçla karşılaşılabilir. Bu durumdan dejenere olanın öz fonksiyonlarının lineer kombinasyonları kullanılarak kurtulmak mümkün olabilir.

- Dejenereliğin kaç katlı olduğuna göre lineer kombinasyona girecek öz fonksiyon sayısı farklılık gösterecektir.

- Bütün çabalara rağmen halen dejenere durumlar var olabilir.

- Bu genellikle bir başka operatörün (dejenere öz değerleri olmayan) işaretidir.

- Dejenerediğin ortadan kaldırılmasıyla beraber ortaya çıkan bir dengeli

$$\hat{A}, \hat{B}, \ldots, \hat{Z}$$

gibi bir biriyle komüte eden işlemcilerin setine "bir birleriyle komüte eden gözlenirlerin tam seti" denir. Böyle bir setin öz değer setleri de

$$a, b, \ldots, z$$

ise bu bir sistem hakkında bir kere de (aynı anda) elde edilebilecek en fazla bilgidir. (eş zamanlı)

- Bunun nedeni; $\hat{A}, \hat{B}, \ldots, \hat{Z}$ komüte eden tam set işlemcileriyle komüte etmeyen bir başka $\hat{Q}$ işlemcisi varsa bu yeni işlemci ile kesin ölçüm yapılamaz ve Heisenberg'in belirsizlik ilkesi devreye girer.

– Örneğin daha önce incelediğimiz,
~~Sonsuz kuyunun~~ serbest parçacığın öz fonksiyonları,
için

$\hat{H}$ ve $\hat{P}$ [Serbest parçacık için $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$, çünkü $V(x)=0$]

eş zamanlı ölçülebilirler. Çünkü

$$u_1 = A\cos kx \quad u_2 = B\sin kx$$

için $Hu_1 = Eu_1$ ve $Hu_2 = Eu_2$

$$\hat{P}u_1 = +1\,u_1 \text{ ve } \hat{P}u_2 = -1\,u_2$$

iki. $[\hat{H},\hat{P}]u_1 = \hat{H}\hat{P}u_1 - \hat{P}\hat{H}u_1$

$$= +\hat{H}u_1 - (+\hat{H}u_1)$$

$$= Eu_1 - Eu_1 = 0$$

---

u_1 ve $u_2 \Rightarrow \hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$'in öz fonk.

değildir ve bu yüzden bu öz fonksiyonlar için $\hat{p}$ $\hat{H}$ ve $\hat{P}$ ile komüte etmez.

$$[\hat{H},\hat{p}] = 0 \text{ olurken, } [\hat{P},\hat{p}] \neq 0$$

olur.

$$[\hat{H},\hat{p}]u_1 = \hat{H}\hat{p}u_1 - \hat{p}\hat{H}u_1 = \hat{H}\hat{p}u_1 - \hat{p}Eu_1$$

$$= (\hat{H}-E)\hat{p}u_1$$

$$\hat{p}u_1 = -i\hbar\frac{d}{dx}A\cos kx = -i\hbar(-kA\sin kx) = i\hbar k A\sin kx$$

$$u_2 = B\sin kx \Rightarrow \sin kx = u_2/B$$

$\hat{p} u_1 = i\hbar k\, A \sin kx$, $p = \hbar k$, $\sin kx = u_2/B$

$\Rightarrow \hat{p} u_1 = ip \frac{A}{B} u_2 \Rightarrow$

$$[\hat{H}, \hat{p}] u_1 = (\hat{H} - E) ip \frac{A}{B} u_2$$

$$= ip \frac{A}{B} \hat{H} u_2 - ipE \frac{A}{B} u_2$$

$$= ip \frac{A}{B} E u_2 - ip \frac{A}{B} E u_2$$

$$= 0$$

iken;

$$[\hat{P}, \hat{p}] u_1 = \hat{P}\hat{p} u_1 - \hat{p}\hat{P} u_1 = \hat{P}\left(ip \frac{A}{B} u_2\right) - \hat{p}(+1 \cdot u_1)$$

$$= ip \frac{A}{B} \hat{P} u_2 - \hat{p} u_1$$

$$= ip \frac{A}{B}(-u_2) - ip \frac{A}{B} u_2$$

$$\boxed{[\hat{P}, \hat{p}] u_1 = -i2p \frac{A}{B} u_2}$$ olur.

$\hat{H}$ ile $\hat{P}$ ve $\hat{H}$ ile $\hat{p}$ komüte ederken $\hat{P}$ ile $\hat{p}$ komüte etmezler.

- Benzeri bir durum $\hat{p}$ ve $\hat{x}$ işlemcileri arasında vardır.

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

olduğu hatırlanırsa ve $\hat{B}$ gibi bir işlemci içinde aynısı için geçerliyse

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B] \rangle^2$$

eşitsizliği veya diğer adıyla Heisenberg belirsizlik ilkesi ortaya çıkar.

$$\hat{p}\, u_p = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{ipx/\hbar} = p\, u_p$$

$$\hat{x}\, u_p = x\, u_p$$

$$\Rightarrow [\hat{p},\hat{x}]u_p = (\hat{p}\hat{x}u_p - \hat{x}\hat{p}u_p) = \hat{p}(x u_p) - x p u_p$$

$$\hat{p}(x u_p) = -i\hbar \frac{d}{dx}(x u_p) = -i\hbar\left(\left(\frac{d}{dx}x\right)u_p + x\frac{d}{dx}u_p\right)$$

$$= -i\hbar u_p + x p u_p$$

$$\Rightarrow [\hat{p},\hat{x}]u_p = -i\hbar u_p + \cancel{xpu_p} - \cancel{xpu_p}$$

$$= -i\hbar u_p$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{p},\hat{x}] \equiv -i\hbar}$$

$$(\Delta p)^2 (\Delta x)^2 \geq \frac{1}{4}\langle i[\hat{p},\hat{x}]\rangle^2$$

$$\geq \frac{1}{4}\langle i(-i\hbar)\rangle^2 = \frac{1}{4}\hbar^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta p\, \Delta x \geq \hbar/2}$$ olur.

5.5 Zamana Bağımlılık ve Klasik Limit

Kuantum teorisinin klasik limit davranışını anlayabilmek için işlemcilerin beklenen değerlerinin zamana bağlı gelişimini (davranışını) çalışmak gerekir.

- İşlemcinin kendisinin zamana açık bir bağımlılığı olabilir veya
- $\Psi(x,t)$ zamana açıkça bağlı olabilir.
- Her ikisinden birisi varsa $\hat{A}$ gibi bir işlemcinin $\langle \hat{A} \rangle$ beklenen değeri zamana bağlı olabilir.

$\hat{A}$'nın beklenen değeri $\Psi(x,t)$ için

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dx\, \psi^* \hat{A} \psi$$

ise $d\langle \hat{A} \rangle/dt$ ile zamana bağlılık incelenebilir.

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\int dx\, \psi^* \hat{A} \psi = \int dx \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right) \hat{A} \psi +$$

$$+ \int dx\, \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \int dx\, \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$\underbrace{\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi}_{\text{Zamana bağlı Schrödinger}}$ olduğu hatırlanırsa $\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi}$ yazılabilir.

$$\frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt} = \int dx \left(\frac{1}{i\hbar} H\psi\right)^* \hat{A}\,\psi + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$

$$+ \int dx\, \psi^* \hat{A} \left(\frac{1}{i\hbar} H\psi\right)$$

$$= \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \int dx \Big[\psi^* \left(-\frac{1}{i\hbar} \hat{H}^\dagger \hat{A}\right)\psi$$

$$+ \psi^* \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{A}\hat{H}\right)\psi \Big]$$

olur. $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ olur çünkü $\hat{H}$ hermitiyendir.

$$\Rightarrow \frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\int dx \left[\psi^* \hat{H}\hat{A}\psi - \psi^* \hat{A}\hat{H}\psi\right]$$

$$= \dots + \frac{i}{\hbar}\int dx\, \psi^* \left[\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}\right]\psi$$

$$= \dots + \frac{i}{\hbar}\int dx\, \psi^* \left[\hat{H}, \hat{A}\right]\psi$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\left\langle [\hat{H}, \hat{A}]\right\rangle}$$ olur.

- Eğer ilgilenilen sistemde $\hat{A}$ açık olarak zamana bağlı değilse

$$\left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle = 0$$

olur.

Bu durumda böyle bir sistemin herhangi bir durumu (öz fonksiyonu, öz durumu) için

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{A}]\rangle$$

ile beklenen değerinin zamana bağlılığı belirlenir.

Buradan anlaşılıyor ki $\hat{A}$ gibi herhangi bir operatör $\hat{H}$ ile komüte ederse $\hat{A}$ gözlenebilir bir HAREKET SABİTİ'dir.

Eğer $\hat{H}$ komüte eden bir gözlenebilirler tam setine aitse, $\hat{H}$ ve diğer bütün gözlenebilirler (işlemciler) hareket sabitidirler.

$\hat{A}=\hat{x}$ ve $\hat{A}=\hat{p}$ örneklerini inceleyelim.

(1) $\frac{d}{d}\langle\hat{x}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{x}]\rangle \qquad \hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}(x)$

$\hat{V}(x)$ içinde türev v.b. işlemciler barındırmadığı sürece; $[\hat{V}(x),\hat{x}]=0$ olacaktır. Böylece,

$$[\hat{H},\hat{x}] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V},\hat{x}\right] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m},\hat{x}\right]$$

olur.

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}\right] = \frac{\hat{p}^2}{2m}\hat{x} - \hat{x}\frac{\hat{p}}{2m} \quad \text{olacağından}$$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2, \hat{x}\right] \quad \text{olur.}$$

$$\left[\hat{p}^2, \hat{x}\right] = \hat{p}\left[\hat{p}, \hat{x}\right] + \left[\hat{p}, \hat{x}\right]\hat{p}$$ eşitliği kolayca ispatlanabilir.

$$\left[\hat{p}, \hat{x}\right]u_p = \hat{p}\hat{x}e^{ipx/\hbar} - \hat{x}\hat{p}e^{ipx/\hbar}$$

$$= -i\hbar\frac{d}{dx}\left(xe^{ipx/\hbar}\right) - xpu_p$$

$$= -i\hbar u_p + xpu_p - xpu_p$$

$$\Rightarrow \boxed{\left[\hat{p}, \hat{x}\right] = -i\hbar} \Rightarrow$$

$$\left[\hat{p}^2, \hat{x}\right] = \hat{p}(-i\hbar) + (-i\hbar)\hat{p} = -i2\hbar\hat{p} = \frac{2\hbar}{i}\hat{p}$$

olur. Böylece;

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}\right]\right\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2, \hat{x}\right]\right\rangle$$

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle\frac{1}{2m}\frac{2\hbar}{i}\hat{p}\right\rangle \Rightarrow \boxed{\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \left\langle\frac{\hat{p}}{m}\right\rangle}$$

olur. $\hat{x}$ işlemcisi (gözlenebilir) bir hareket sabiti değildir.

(2) $\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H},\hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V},\hat{p}] \rangle$

$= \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{V},\hat{p}] \rangle$

olur. Çünkü $[\hat{p}^2,\hat{p}] = 0$ olacağı açıktır.

$[\hat{V},\hat{p}]\psi = \hat{V}\hat{p}\psi - \hat{p}\hat{V}\psi$

$= \hat{V}(-i\hbar\frac{d}{dx}\psi) + i\hbar\frac{d}{dx}(\hat{V}\psi)$

$= ./. + i\hbar\frac{d\hat{V}}{dx}\psi + \cancel{i\hbar\hat{V}\frac{d\psi}{dx}}$

$\boxed{[\hat{V},\hat{p}] = i\hbar\frac{d\hat{V}}{dx}} \Rightarrow$

$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle i\hbar\frac{d\hat{V}}{dx} \rangle \Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle = -\langle \frac{d\hat{V}}{dx} \rangle}$ (I)

olur. $\hat{p}$'nin de bir hareket sabiti olmadığı anlaşılıyor.

(II) $\boxed{\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \langle \frac{\hat{p}}{m} \rangle}$ olduğuna göre

(III) $\boxed{\frac{d^2\langle \hat{x} \rangle}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle}$ olur. (I) ve (III) birleştirilirse

$\boxed{m\frac{d^2\langle \hat{x} \rangle}{dt^2} = -\langle \frac{d\hat{V}}{dx} \rangle}$

olur.

$$m\frac{d^2\langle\hat{x}\rangle}{dt^2} = -\left\langle\frac{d\hat{V}}{dx}\right\rangle$$

ifadesi

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \quad \text{veya} \quad m\frac{d^2x_{kl}}{dt^2} = -\frac{dV(x_{kl})}{dx_{kl}}$$

klasik kuvvet ve potansiyel enerjisi ilişkisini veren denkleme çok benzemektedir.

$$x_{kl} \equiv x_{klasik}$$

$$x_{kl} = \langle\hat{x}\rangle$$

kabul etmekten alıkoyan durum

$$\underset{(\text{Kuantum})}{\left\langle\frac{d\hat{V}}{dx}\right\rangle} \neq \underset{(\text{Klasik},\ x_{kl}=\langle x\rangle \text{ alınırsa})}{\frac{dV(\langle x\rangle)}{d\langle x\rangle}}$$

olmasıdır.

Bu eşitsizliğin yaklaşık bir eşitliğe dönüşebileceğini ilk ortaya koyan Ehrenfest olmuştur. Bunun için $V(x)$ x'in çok yavaş değişen bir fonksiyonu olmalıdır. Bu durumda $F(x)$, $\langle\hat{x}\rangle$ civarında Taylor serisine açılırsa,

$$F(x) = F(\langle\hat{x}\rangle) + (x-\langle\hat{x}\rangle)F'(\langle\hat{x}\rangle) + \frac{(x-\langle\hat{x}\rangle)^2}{2!}F''(\langle\hat{x}\rangle) + \cdots$$

Eğer $(\Delta x)^2 = \langle(x-\langle\hat{x}\rangle)^2\rangle$ belirsizliği çok küçük $\Rightarrow$

$(\Delta x)^2$ ve üstündeki terimler atılırsa

$$F(x) \simeq F(\langle \hat{x} \rangle) + (x - \langle \hat{x} \rangle) F'(\langle \hat{x} \rangle)$$

ve

$$\langle F(x) \rangle \cong F(\langle \hat{x} \rangle) + \langle x - \langle \hat{x} \rangle \rangle F'(\langle \hat{x} \rangle)$$

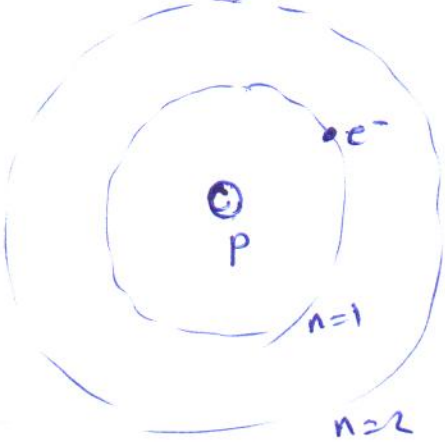
$$\boxed{\langle x - \langle \hat{x} \rangle \rangle = \langle x \rangle - \langle \hat{x} \rangle = x - x = 0 \quad \text{olur}}$$

Böylece

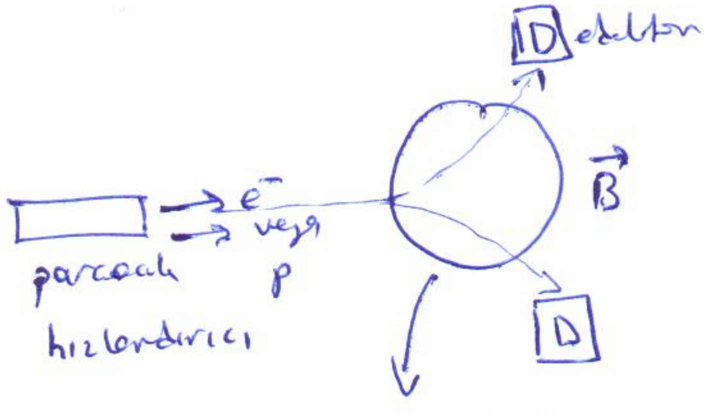
$$\langle F(x) \rangle \simeq F(\langle \hat{x} \rangle)$$

yazılabilir.

Bu sayede elektron ve proton gibi kuantum evreninin parçası olan nesneleri hızlandırıcı fiziğinin konusuna girdiklerinde klasik fizikle çalışabilmek mümkün olmaktadır.



Kuantum sistemi



$F = qvB$

klasik kuvvet

EK Momentum İşlemcisinin (5. Bölüm Eki)

Hermitsenliğinin İspatı

ψ ve ϕ karesi integrallenebilir dalga fonksiyonları ise, $\hat{p}$'nin beklenen değeri ve beklenen değerinin karmaşık eşleniği,

$$\langle \hat{p} \rangle = \int dx\, \phi^* \hat{p}\, \psi$$

ve

$$\langle \hat{p} \rangle^* = \left[\int dx\, \phi^* \hat{p}\, \psi \right]^*$$

ile hesaplanırlar. Eğer $\langle \hat{p} \rangle = \langle \hat{p} \rangle^*$ olursa $\hat{p}$ hermitsen işlemcidir.

$$\langle \hat{p} \rangle^* = \left[\int dx\, \phi^* \hat{p}\, \psi \right]^* = \int dx\, (\hat{p}\psi)^* \phi$$

$$= \int dx\, \psi^* \hat{p}^{\dagger} \phi$$

olur. Burada $\hat{p}^{\dagger}$, $\hat{p}$'nın hermitsen eşleniğidir. (Hermitsen eşlenik ve kompleks eşlenik farklı kavramlardır.)

$\hat{p}$ işlemcisi matris temsili ile temsil edilirse, hermitsen eşleniği $\hat{p}^{\dagger} \equiv (\hat{p}^*)^T$ olarak tanımlanır. Hermitsen eşleniğin bir diğer adı: kompleks eşleniğinin transpozudur.

EK:] Momentum işlemcisi Hermitşen midir?

ψ ve ϕ karesi integrallenebilir dalga fonksiyonları ise; $\hat{p}$'nin beklenen değeri

$$\langle \hat{p} \rangle = \int dx\, \psi^* \hat{p}\, \phi$$

ile $\hat{p}$'nın beklenen değerinin karmaşık eşleniği ise,

$$\langle \hat{p} \rangle^* = \left[\int dx\, \psi^* \hat{p}\, \phi \right]^*$$

ile hesaplanabilir. $\langle \hat{p} \rangle^*$ açarsak,

$$\langle \hat{p} \rangle^* = \int dx (\hat{p}\phi)^* \psi = \int dx\, \phi^* \hat{p}^\dagger \psi \equiv \langle \hat{p}^\dagger \rangle$$

olur. $\hat{p}^\dagger$, $\hat{p}$'nın Hermitşen eşleniğidir. Yukarıdaki işlemin sonucu olarak $\hat{p}^\dagger$ (yani herhangi bir lineer işlemcinin hermitşen eşleniği)

$$\boxed{\langle \hat{p}^\dagger \rangle = \int dx\, \phi^* \hat{p}^\dagger \psi = \int dx\, (\hat{p}\phi)^* \psi}$$

ile tanımlanır. Eğer $\hat{p}$ işlemcisi matris temsili ile tanımlansaydı hermitşen eşleniği

$$\boxed{\hat{p}^\dagger = (\hat{p}^*)^T}$$

olarak tanımlanırdı. Bu yeni tanıma göre $\hat{p}$ matris işlemcisinin "Hermitşen Eşleniği"

$(\hat{p}^*)$ karmaşık eşleniğinin $(\hat{p}^*)^T$ transpozudur.

Dirac notasyonunda ise;

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

ile $\hat{p}$'nın Hermityen eşleniği tanımlanır.

Asıl sorumuza dönelim: $\hat{p}$ hermityen işlemci midir? Bu ancak;

$$\langle \hat{p} \rangle = \langle \hat{p}^{+} \rangle \qquad \text{I}$$

veya

$$\langle \hat{p} \rangle = \langle \hat{p} \rangle^{*} \qquad \text{II}$$

ise mümkündür. Hermityen işlemciler beklenen değerleri reel olan işlemcilerdir. Yukarıdaki iki eşitlik Hermityen işlemci tanımının iki farklı ifadesidir.

I $\hat{p}$'nın beklenen değeri hermitik eşleniği $\hat{p}^{+}$ eşitse $\hat{p}$ hermityendir.

II $\hat{p}$'nın beklenen değerinin ~~eşleni~~ karmaşık eşleniği kendi beklenen değerine eşitse $\hat{p}$ hermityendir.

Eğer $\hat{p}$ hermityen ise Hermityen eşleniği kendisine eşittir. $\hat{p} = \hat{p}^{+}$

Peki $\hat{p} = \hat{p}^{+}$ sağlanıyor mu inceleyelim.

$\langle \hat{p} \rangle = \int dx \, \psi^{*} \hat{p} \, \phi$ ve

$\langle \hat{p}^{+} \rangle = \int dx \, (\hat{p}\psi)^{*} \phi$ 'dir. (Hermitsel eşleniğin beklenen değeri)

$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \Rightarrow$

$$\langle \hat{p}^{+} \rangle = \int dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi \right)^{*} \phi$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \int dx \left(\frac{d}{dx} \psi^{*} \right) \phi \quad \text{olur.}$$

$$\frac{d}{dx}(\psi^{*}\phi) = \frac{d\psi^{*}}{dx}\phi + \psi^{*}\frac{d\phi}{dx} \Rightarrow \frac{d\psi^{*}}{dx}\phi = \frac{d}{dx}(\psi^{*}\phi) - \psi^{*}\frac{d}{dx}\phi$$

$$\Rightarrow \langle p^{+} \rangle = -\frac{\hbar}{i} \int dx \left[\frac{d}{dx}(\psi^{*}\phi) - \psi^{*}\frac{d}{dx}\phi \right]$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \psi^{*}\phi \Big|_{x \text{ uzağı}} + \int_{x \text{ uzağı}} \psi^{*} \left[\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\left(-\frac{d}{dx}\right)\phi \right] dx$$

$\psi^{*}\phi \Big|_{x \text{ uzağı}} = 0$ olur. Çünkü ψ ve ϕ sınırlarda kaybolur (sıfır olur) veya kareleri integrallene-bilirdir. Böylece;

$$\langle \hat{p}^{+} \rangle = \int dx \, \psi^{*} \left[\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\left(-\frac{d}{dx}\right) \right] \phi \quad \text{olur.}$$

$$\hat{p}^{+} = \left(-\frac{\hbar}{i}\right)\left(-\frac{d}{dx}\right) \text{ veya}$$

$$\boxed{\hat{p}^{+} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}} \text{ olur. } \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

olduğu hatırlanırsa; $\boxed{\hat{p} = \hat{p}^{+}}$ ve böylece

$$\langle \hat{p} \rangle = \langle \hat{p}^{+} \rangle$$

olur. $\hat{p}$ kendisinin hermityen eşleniğine eşit olduğundan $\hat{p}$ hermityen işlemcidir.

Kaynaklar:

1- Quantum Physics for Beginners, Zbigniew Ficek, Pan Stanford Publishing, page 162-163.

2- https://physics.stackexchange.com/q/46380 "Is $H = H^{*}$ sloppy notation ...?"

3- https://math.stackexchange.com/q/232854 "Transpose of the differential operator"

4- http://mathworld.wolfram.com/ConjugateTranspose.html

5- http://mathworld.wolfram.com/HermitianOperator.html