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 özduruma(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 $\hat{B}$ nın eş zamanlı durumuysa $|a,b\rangle$ şeklinde yazılabilir. ($\hat{A} \to a$'nın, $\hat{B}$, b'nın 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 setinin ~~ailesinin~~ 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.

$\underset{\text{ket}}{|\psi\rangle}$, $\underset{\text{ket}}{|\phi\rangle}$, $\underset{\text{ket}}{|\Psi\rangle}$

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;

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

dır. 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 öte bir nqe 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, $\hat{A}^{+}$ hermitsel 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.

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

a, b öz değerler, $|a\rangle, |b\rangle$ öz ketler ve

$\hat{H}$ hermityen bir işlemci ile,

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

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

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.

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

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

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

göre $\quad \langle b|a\rangle = 0$ veya $\langle a|b\rangle = 0$ olur.

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

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

yoksa

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

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

$c_n c_n^* = |n\rangle\langle n|$ yoksa $\boxed{|c_n|^2 = |n\rangle\langle n|}$

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

Buraya 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 özketleri ise ve $\hat{X}$ gözlenebilirini verecek olan hermityen 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 $\sum_n \to \int dx$ '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;

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

olduğunu 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. Hatırlarsanız 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 $|n\rangle$ durumuna ~~seviyesine~~ geçerse bir daha 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

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

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

şeklinde iki hermityen eşlenik işlemci olarak tanımlarsak,

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

①

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

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

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.

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

$\hat{H}$ (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 komütasyonu,

$[\hat{A}, \hat{A}^{+}] = 1$ 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,

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

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

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

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

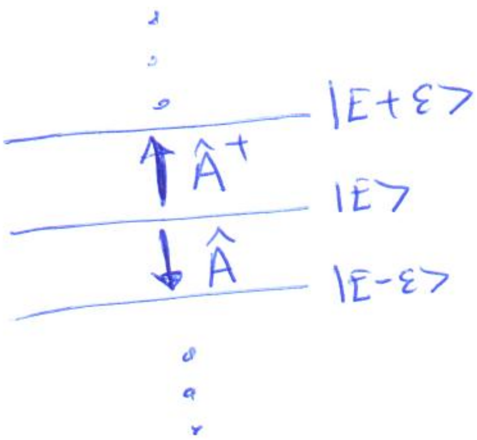
böylece de; $\hat{H}\hat{A}|E\rangle = (E-\hbar\omega)\hat{A}|E\rangle$

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.

$\hat{A}|E\rangle$'nın 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.

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

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

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

$$\Rightarrow \langle \hat{H} \rangle \geq 0 \qquad \left(\hat{x} \text{ ve } \hat{p} \text{ hermitsel olduklarından} \right)$$

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

$$|0\rangle$$

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

Fakat,

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

olmalıdır. Çünkü $|0\rangle$'dan daha düşük seviye var olamaz. $|0\rangle$ 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 beklenenen 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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \hat{A}(\hat{A}^{+})^{n}|0\rangle &= \hat{A}\hat{A}^{+}(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle \\
&= (1+\hat{A}^{+}\hat{A})(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle \\
&= (\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + \hat{A}^{+}(\hat{A}\hat{A}^{+})(\hat{A}^{+})^{n-2}|0\rangle \\
&= (\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + \hat{A}^{+}(1+\hat{A}^{+}\hat{A})(\hat{A}^{+})^{n-2}|0\rangle \\
&= \dots + (\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + (\hat{A}^{+})^{2}(\hat{A}\hat{A}^{+})(\hat{A}^{+})^{n-3}|0\rangle \\
&= 2(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + (\hat{A}^{+})^{2}\hat{A}(\hat{A}^{+})^{n-2}|0\rangle \\
&\vdots \\
&= i(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + (\hat{A}^{+})^{i}\hat{A}(\hat{A}^{+})^{n-i}|0\rangle \\
&\vdots \\
i=n \Rightarrow \quad &= n(\hat{A}^{+})^{n-1}|0\rangle + (\hat{A}^{+})^{n}\underbrace{\hat{A}|0\rangle}_{0}
\end{aligned}$$

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

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

$$\vdots$$

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

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

$$n=m \Rightarrow \dots = n(n-1)(n-2)\dots 2.1|0\rangle = n!|0\rangle \quad (8)$$

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

Çünkü;

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

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

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

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

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

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

$n>m$ 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 oldukları için $\langle 0|0\rangle = 1$ $\longrightarrow$ $= n!$ dır.

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

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

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.

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

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

$$= \sqrt{n+1}\,\langle n|\sqrt{n+1}\,|n\rangle = (n+1)\,\langle n|n\rangle$$

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

$$= \sqrt{n}\,\langle n|\sqrt{n}\,|n\rangle = n\langle n|n\rangle$$

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

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

.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.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

tabandurum öz fonksiyonu $\Rightarrow$

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

diferansiyel denklemine ulaşırız.

Bu denklemin çözümü;

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

dır. $u_0(x)$ 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

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

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

ile daha yüksek seviyeler hesaplanabilir. 3

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 İşlemci 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.

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

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

$$\boxed{\begin{array}{c}\hat{H}=\hat{H}^{+}\\ \text{hermityen}\end{array}} \Rightarrow$$

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

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

$\hat{U}\hat{U}^{-1} = 1 \Rightarrow \hat{U}^{-1}$, $\hat{U}$'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

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

Böylece;

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

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

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

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.

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

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

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

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

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

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.

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

dır. Son ifadeyi zamana bağlı Sch. denkleminde kullanırsak,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

yazılabilir.

Böylece zamana bağlı Schrödinger denklemini yeni efektif Hamiltonyen

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

nin sağladığı gösterilmiş olur. Tekrarlarsak,

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

<u>İşlemcilerin Üniter Dönüşümleri</u>

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

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

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.

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

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

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

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

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

$\dfrac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} = 0 \Rightarrow \hat{A}(t)$ zamandan bağımsızdır. $\dfrac{d\hat{A}_I}{dt} = \dfrac{i}{\hbar}[\hat{H}', \hat{A}_I]$

olur. $\hat{A}_I$'nın zamandan bağımsız olabilmesi için $\hat{H}'$ ve $\hat{A}_I$ komute 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 $|\psi(\vec{r}, t_0)\rangle = |\psi_0\rangle$

$\hookrightarrow$ Schrödinger resminde dalga fonksiyonunun zamanla değişimi.

Heisenberg Resmi

Bu sefer izlenciler 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.

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

Heisenberg hareket denklemi olur.

Schrödinger'den ⟺ 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.