DAVID J. GRIFFITHS

INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS

KUANTUM MEKANİĞİNE GİRİŞ

HALUK ÖZBEK - SONDAN DURUKANOĞLU FEYİZ

David J. Griffiths'in diğer iki kitabı ("Introduction to Elementary Particles" ve "Introduction to Electrodynamics") gibi "Introduction to Quantum Mechanics" gerek ülkemizde gerekse yurtdışında birçok üniversitede ders kitabı olarak kullanılmaktadır. Ülkemizdeki çoğu üniversitede eğitim dili Türkçe olmasına rağmen az sayıda Türkçe kaynak kitap bulunmaktadır. Öğrencilerimiz için kavramsal olarak anlaşılması zor olan Kuantum Mekaniği dalında David J. Griffiths'in artık klasik haline gelmiş lisans seviyesindeki kitabının çevrisi ile bu alandaki ihtiyacı gidermeye çalıştık. Bu çevirinin sadece Fizik ve Fizik Mühendisliği öğrencileri için değil, diğer mühendislik bölümlerinde Kuantum Mekaniğine ilgi duyan öğrenciler için de iyi bir kaynak oluşturacağını ve öğrencilere farklı bir bakış açısı kazandıracağını umuyoruz.



PEARSON Prentice Hall

www.prenhall.com

NOBEL YAYIN DAĞITIM TİC. LTD. ŞTİ.
Mithatpaşa Caddesi Nu: 74 Kocatepe Kültür Merkezi Kızılay - Ankara
Telefon: +90 312 418 20 10 Belgeç: +90 312 418 30 20
Web: www.nobelyayin.com e-posta: nobel@nobelyayin.com

NOBEL KİTAP DAĞITIM A.Ş.
İstanbul: Molla Fenari Sokak Nu: 8 Cağaloğlu-İstanbul
Telefon: +90 212 511 61 44 Belgeç: +90 212 511 61 49
Web: http://www.nobelkitap.com e-posta: info@nobelkitap.com

www.nobelkitap.com

ISBN 978-605-395-361-6

ÖZBEK-FEYİZ GRIFFITHS

KUANTUM MEKANİĞİNE GİRİŞ

PEARSON Prentice Hall

nobel YAYIN DAĞITIM

INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS

KUANTUM MEKANİĞİNE GİRİŞ

İKİNCİ BASKIDAN ÇEVİRİ



HALUK ÖZBEK - SONDAN DURUKANOĞLU FEYİZ

DAVID J. GRIFFITHS

nobel YAYIN DAĞITIM

Temel Denklemler

Schrödinger denklemi:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$$

Zamandan Bağımsız Schrödinger denklemi:

$$H\psi = E\psi, \qquad \Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}$$

Hamiltonyen operatörü:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

Momentum operatörü:

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$$

Beklenen değerin zamanla değişimi:

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[H, Q]\rangle + \left\langle\frac{\partial Q}{\partial t}\right\rangle$$

Genelleştirilmiş belirsizlik ilkesi:

$$\sigma_A\sigma_B \geq \left|\frac{1}{2i}\langle[A, B]\rangle\right|$$

Heisenberg belirsizlik ilkesi:

$$\sigma_x\sigma_p \geq \hbar/2$$

Kanonik komütatör:

$$[x, p] = i\hbar$$

Açısal momentum:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \qquad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \qquad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

Pauli matrisleri:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Temel Sabitler

Planck sabiti:	$\hbar$	$=$	1.05457×10^{-34} J s
Işık hızı:	c	$=$	2.99792×10^{8} m/s
Elektron kütlesi:	m_e	$=$	9.10938×10^{-31} kg
Proton kütlesi:	m_p	$=$	1.67262×10^{-27} kg
Proton yükü:	e	$=$	1.60218×10^{-19} C
Elektron yükü:	$-e$	$=$	-1.60218×10^{-19} C
Uzayın elektrisel geçirgenliği:	ϵ_0	$=$	8.85419×10^{-12} C^2/J m
Boltzmann sabiti:	k_B	$=$	1.38065×10^{-23} J/K

Hidrojen Atomu

İnce yapı sabiti:	α	$=$	$\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$	$=$	$1/137.036$
Bohr yarıçapı:	a	$=$	$\dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \dfrac{\hbar}{\alpha m_e c}$	$=$	5.29177×10^{-11} m
Bohr enerjileri:	E_n	$=$	$-\dfrac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2 n^2}$	$=$	$\dfrac{E_1}{n^2}$ $(n = 1, 2, 3, \ldots)$
Bağlanma enerjisi:	$-E_1$	$=$	$\dfrac{\hbar^2}{2m_e a^2} = \dfrac{\alpha^2 m_e c^2}{2}$	$=$	13.6057 eV
Taban durumu:	ψ_0	$=$	$\dfrac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}$		
Rydberg formülü:	$\dfrac{1}{\lambda}$	$=$	$R\left(\dfrac{1}{n_f^2} - \dfrac{1}{n_i^2}\right)$		
Rydberg sabiti:	R	$=$	$-\dfrac{E_1}{2\pi\hbar c}$	$=$	1.09737×10^{7} /m

David J. Griffiths

Çevirenler: Haluk Özbek - Sondan Durukanoğlu Feyiz

INTRODUCTION TO
QUANTUM MECHANICS

KUANTUM MEKANİĞİNE
Giriş

2. BASKIDAN ÇEVİRİ

EARSON
rentice Hall
Upper Saddle River, NJ 07458

nobel
YAYIN DAĞITIM
ANKARA, EKİM 2010

Nobel Yayın No : 1551
Teknik Bilimler : 114
ISBN 978-605-395-361-6

© 2. Baskıdan Çeviri, Ekim 2010

KUANTUM MEKANİĞİNE GİRİŞ
Haluk Özbek
İstanbul Teknik Üniversitesi, Fizik Bölümü
hozbek@itu.edu.tr
Sondan Durukanoğlu Feyiz
Sabancı Üniversitesi
sondan.feyiz@gmail.com
INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS
David J. Griffiths
Reed Koleji

© **Copyright 2010, NOBEL YAYIN DAĞITIM TİC. LTD. ŞTİ.**
SERTİFİKA NO 13143
Bu baskının bütün hakları Nobel Yayın Dağıtım Ltd. Şti'ne alttir. Yayınevinin yazılı izni olmaksızın, kitabın tümünün veya bir kısmının elektronik, mekanik ya da fotokopi yoluyla basımı, yayımı, çoğaltımı ve dağıtımı yapılamaz.

© 2005, 1995 Pearson Education Inc. Pearson Prentice Hall Pearson Education, Inc. Upper Saddle River, NJ 07458

Yayın Yönetmeni : Pınar Gülter
Sayfa Tasarım : Zehra Çidam
Kapak Tasarım : Mehtap Yürümez *-dizgi@nobelyayin.com-*

KÜTÜPHANE BİLGİ KARTI

Özbek, Haluk., Durukanoğlu Feyiz, Sondan.
İntroduction to Quantum Mechanics Kuantum Mekaniğine Giriş / David J. Griffiths
Çevirenler: Haluk Özbek - Sondan Durukanoğlu Feyiz
2. Baskıdan Çeviri, XII + 468 s., 195x235 mm
Kaynakça ve indeks var.
ISBN 978-605-395-361-6
1. Kuantum Teorisi

NOBEL YAYIN DAĞITIM TİC. LTD. ŞTİ.
Mithatpaşa Caddesi Nu: 74 Kocatepe Kültür Merkezi Kızılırmak Sokak Girişi Kızılay - Ankara
Telefon: +90 312 418 20 10 Belgeç: +90 312 418 30 20
Web: www.nobelyayin.com e-posta: nobel@nobelyayin.com

NOBEL KİTAP DAĞITIM A.Ş.
İstanbul: Molla Fenari Sokak Nu: 8 Cağaloğlu-İstanbul
Telefon: +90 212 511 61 44 Belgeç: +90 212 511 61 49
Web: http://www.nobelkitap.com e-posta: info@nobelkitap.com

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ vii

I. KISIM TEORİ

1 DALGA FONKSİYONU 1
1.1 Schrödinger Denklemi 1
1.2 İstatistiksel Yorum 2
1.3 Olasılık 5
1.4 Normlama 12
1.5 Momentum 15
1.6 Belirsizlik İlkesi 18

2 ZAMANDAN BAĞIMSIZ SCHRÖDINGER DENKLEMİ 24
2.1 Kararlı Durumlar 24
2.2. Sonsuz Kare Kuyu 30
2.3 Harmonik Salınıcı 40
2.4 Serbest Parçacık 59
2.5 Delta Fonksiyonu Potansiyeli 68
2.6 Sonlu Kare Kuyu 78

3 FORMÜLASYON 93
3.1 Hilbert Uzayı 93
3.2 Gözlenebilirler 96
3.3 Hermitsel Bir Operatörün Özfonksiyonları 100

3.4 Genelleştirilmiş İstatistiksel Yorum 106
3.5 Belirsizlik İlkesi 110
3.6 Dirac Notasyonu 118

4 ÜÇ BOYUTTA KUANTUM MEKANİĞİ 131
4.1 Küresel Koordinatlarda Schrödinger Denklemi 131
4.2 Hidrojen Atomu 145
4.3 Açısal Momentum 160
4.4 Spin 171

5 ÖZDEŞ PARÇACIKLAR 201
5.1 İki Parçacıklı Sistemler 201
5.2 Atomlar 210
5.3 Katılar 218
5.4 Kauntum İstatistiksel Mekaniği 230

II. KISIM UYGULAMALAR

6 ZAMANDAN BAĞIMSIZ TEDİRGEME TEORİSİ 249
6.1 Katlı Olmayan Tedirgeme Teorisi 249
6.2 Katlı Durumların Tedirgeme Teorisi 257
6.3 Hidrojen Atomunun İnce Yapısı 266
6.4 Zeeman Etkisi 277
6.5 Çok İnce Yarılma 283

7 VARYASYON İLKESİ 293
7.1 Teori 293
7.2 Helyum Atomunun Taban Durumu 299
7.3 Hidrojen Molekülü İyonu 304

8 WKB YAKLAŞIKLIĞI 315
8.1 "Klasik" Bölge 316
8.2 Tünelleme 320
8.3 Bağlantı Formülleri 325

9 ZAMANA BAĞLI TEDİRGEME TEORİSİ 340
9.1 İki Düzeyli Sistemler 341
9.2 Işımanın Salınması ve Soğurulması 348
9.3 Kendiliğinden Salınma 355

10 ADYABATİK YAKLAŞIM 368
10.1 Adyabatik Teorem 368
10.2 Berry Fazı 376

11 SAÇILMA 394
11.1 Giriş 394
11.2 Kısmi Dalga Analizi 399
11.3 Faz Kaymaları 405
11.4 Born Yaklaşımı 408

12 SONSÖZ 420
12.1 EPR Çelişkisi 421
12.2 Bell Teoremi 423
12.3 "Kopya Yok" Teoremi 428
12.4 Schrödinger Kedisi 430
12.5 Kuantum Zeno Çelişkisi 431

EK LİNEER CEBİR 435
E.1 Vektörler 435
E.2 İç Çarpım 438
E.3 Matrisler 441
E.4 Baz Değişimi 446
E.5 Özdeğerler ve Özvektörler 449
E.6 Hermitsel Dönüşümler 455

DİZİN 459

ÖN SÖZ

Kuantum teorisi; Newton mekaniği, Maxwell elektrodinamiği ve Einstein'nın relativite teorisinden farklı olarak tek bir kişi tarafından oluşturulmamış ya da son şekline getirilmemiştir. Bu teori günümüzde de canlandırıcı ve sarsıcı gençliğinin izlerini taşımaktadır. Kuantum teorisinin temel ilkelerinin ne olduğu, nasıl öğretilmesi gerektiği ya da gerçekte "anlamının" ne olduğu konusunda ortak bir görüş yoktur. Her usta fizikçi kuantum mekaniği yapabilir, ancak ne yaptığımız hakkında kendi kendimize anlattığımız hikâyeler, Scheherazade'nin masalları kadar çeşitli ve hemen hemen inanılmazdır. Niels Bohr, "Kuantum fiziği kafanızı karıştırmıyorsa onu gerçekten anlamamışsınızdır" demiştir. Richard Feynman da, "Hiç kimsenin kuantum mekaniğini anlamadığını söyleyebilirim" demiştir.

Bu kitabın amacı kuantum mekaniğinin nasıl yapılacağını öğretmektir. 1. Bölüm'de gerekli olan bir genel tekrar dışında, daha derin, sözde filozofik sorular sona saklanmıştır. Herhangi bir kişinin kuantum mekaniğinin ne yaptığı hakkında sağlam bir anlayışa sahip oluncaya kadar, kuantum mekaniğinin *ne anlama geldiğini* akıllıca tartışabileceğine inanmıyorum. Ama kesinlikle bekleyemem diyorsanız, kuşkusuz, 1. Bölüm'ün ardından sonsözü okuyabilirsiniz.

Kuantum teorisi, kavramsal olarak zengin olmakla birlikte teknik olarak zordur ve birçok ders kitabındaki yapay örnekler de dahil olmak üzere kesin çözümler sayılıdır. Bu yüzden, daha gerçekçi problemlere girişmek için özel yöntemler geliştirmek gereklidir.

İşte bu nedenle, elinizdeki kitap iki kısma bölünmüştür;[1] I. Kısım temel teoriyi kapsamakta, II. Kısım tamamlayıcı uygulamalarla birlikte yaklaşım planlarının cephaneliğini bir araya getirmektedir. Bu iki kısmın mantıksal olarak birbirinden ayrılması önemli olmakla birlikte konuları sunuldukları sırayla çalışma zorunluluğu yoktur.

Örneğin, bazı öğretim üyeleri zamandan bağımsız tedirgeme teorisini 2. Bölüm'ün hemen ardından anlatmak isteyebilir.

[1] Bu yapılanmada David Park'ın klasik kitabı, Introduction to Quantum Theory, 3rd ed. , Mc Graw-Hill, New York (1992)'den esinlenildi.

Bu kitap, üçüncü sınıf öğrencileri için bir yarıyıllık ya da dördüncü sınıf öğrencileri için bir yıllık ders içeriğini kapsayacak şekilde tasarlanmıştır. Bir yarıyıllık ders esas olarak I. Kısım üzerinde yoğunlaşmalıdır; bir yıllık ders için II. Kısmın ötesinde bütünleyici konulara da yer verilmelidir. Okuyucu ek kısımda özetlendiği kadarıyla lineer cebirin temelleri, kompleks sayılar, kısmi türev de dahil olmak üzere matematik analiz ve Fourier analizi konularında bilgi sahibi olmalıdır. Dirac delta fonksiyonuna aşina olmak da yararlı olacaktır. Kuşkusuz temel düzeyde klasik mekanik gereklidir ve az da olsa elektrodinamik yeri geldikçe faydalı olacaktır. Her zaman olduğu gibi ne kadar çok fizik ve matematik bilirseniz her şey o kadar kolaylaşır ve çalışmalarınız daha verimli olur. Ancak, kuantum mekaniğinin, önceki teorilerden doğal olarak çıkan ve düzgün olarak akıp giden bir şey olmadığını vurgulamak isterim. Aksine kuantum mekaniği, dünya hakkında tamamıyla yeni, radikal bir tarzda sezgilere aykırı düşünce tarzı olarak adlandırabileceğimiz, klasik fikirlerden keskin ve devrimci sapmaları temsil etmektedir. Zaten onu çekici kılan da aslında bu sapmalardır.

İlk bakışta kitap, içindeki son derece zor matematiğiyle sizi düşündürebilir. Kitapta, Legendre, Hermite ve Laguerre polinomları, küresel harmonikler, Bessel, Neumann ve Hankel fonksiyonları, Airy fonksiyonları ve hatta Riemann zeta fonksiyonuyla karşılaşacağız. Fourier dönüşümleri, Hilbert uzayları, hermitsel operatörler, Clebsch-Gordon katsayıları ve Lagrange çarpanlarından bahsetmedim bile. Gerçekten de bunların hepsi bize gerekli mi? Belki de değil, ama fizik marangozluk gibidir: Doğru aleti kullanmak işi kolaylaştırır, zorlaştırmaz. Uygun matematik donanım olmadan kuantum mekaniğini öğretmek, bir öğrenciden bir temeli tornavidayla kazmasını istemek gibidir (Öte yandan, öğretim üyesi kendisini her bir aletin doğru kullanımı üzerine ayrıntılı dersler vermek zorunda hissederse bu da son derece oyalayıcı ve sıkıcı olabilir. Kendi düşüncem öğrencilere kürekleri uzatıp, "Kazmaya başlayın" demek. İlk başta elleri su toplayabilir, ama hâlâ bunun öğrenmek için en verimli ve heyecan verici yol olduğunu düşünüyorum). Öyle ya da böyle, bu kitapta derin matematik olmadığını garanti ediyorum. Size tanıdık gelmeyen bir şeyle karşılaşırsanız ya da açıklamalarım yeterli olmazsa kuşkusuz başkasına sorabilir ya da araştırabilirsiniz. Matematiksel yöntemler üzerine çok sayıda iyi kitap mevcut. Özellikle, Mary Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, 2nd ed., Wiley, New York (1983) ve George Arfken and Hans-Jurgen Weber, *Mathematical Methods for Physicist*, 5th ed., Academic Press, Orlando (2000) kitaplarını tavsiye ederim. Ancak ne yaparsanız yapın, matematiğin bizim için bir araç olduğunu unutmayın ve fiziğe burnunu sokmasına izin vermeyin.

Bazı okurlar, kitapta alışılmıştan daha az çözümlü örnek olduğunu ve birçok önemli konunun problemlere bırakıldığını fark etmiştir. Bu bir rastlantı değildir. Kendi başınıza çok fazla alıştırma yapmadan kuantum mekaniğini öğrenebileceğinizi sanmıyorum. Öğretim üyeleri, kuşkusuz, sınıfta zaman buldukça çok sayıda problem çözmeli, ama öğrencileri, kuantum mekaniğinin herhangi bir kişinin doğal önsezileri hakkında bir ders olmadığı konusunda uyarmalıdır. Burada yeni bir kas kümesini geliştiriyorsunuz ve bu da kolay değil.

Problemlerin zorluk ve önem düzeyini göstermek için değişik sayıda yıldızlar kullanarak bir "Michelin Kılavuzu" sunma fikrini Mark Semon vermiştir. Bu güzel bir fikir gibi göründü (Tıpkı bir lokantanın kalitesi gibi, bir problemin önemi bir dereceye kadar bir tat meselesi gibi düşünülebilir); ben de aşağıdaki sınıflandırma cetvelini kullandım:

* her okurun çalışması gereken esas problem

** biraz daha zor ya da ikincil önemdeki problem

*** bir saatten fazla zaman alan, aşırı derecede zor problem

(Eğer problemde hiç yıldız yoksa bu ayaküstü yemek demektir: Açsanız tamam, işe yarar ama besleyici değildir.) Tek yıldızlı problemlerin çoğu ilgili kesimin sonunda, üç yıldızlı problemler de bölüm sonunda yer almaktadır. Çözüm kılavuzu (yalnızca öğretim üyeleri için) yayımcıdan temin edilebilir.

İkinci basımı hazırlarken, mümkün olabildiğince ilk basımın özünü korumaya çalıştım. Toplu değişiklik yalnızca, çok uzun ve oyalayıcı olan 3. Bölüm'de yapılmıştır. Bu bölüm tamamıyla yeniden yazıldı. Bu düzeyde çoğu öğrencinin zaten bildiği sonlu boyutlu vektör uzayları konusu Ek kısmına bırakılmıştır. 2. Bölüm'e birkaç örnek ekledim, harmonik salınıcı için kaldırma ve indirme operatörlerinin kullanımı zor olan tanımlarını düzenledim. Daha sonraki bölümlerde, mümkün olduğunca problemlerin ve denklemlerin sayısını koruyarak becerebildiğim birkaç değişiklik yaptım. Konuların ele alınış tarzı yerlerine göre oldukça düzgündür (örneğin; 4. Bölüm'de açısal momentuma daha iyi bir giriş, 10. Bölüm'de adyabatik teoremin daha basit bir kanıtı ve 11. Bölüm'de kısmi dalga faz kaymaları üzerine yeni bir kesim gibi). Pişman olsam da, kaçınılmaz bir şekilde, ikinci basım birinciden biraz daha uzun oldu, ama daha açık ve anlaşılabilir olduğunu umuyorum.

Orijinal metni okuyarak birinci basımdaki hataları veya zaafları gösteren, elinizdeki sunuşun gelişimi için yeni öneriler getiren ve ilginç problemler sağlayan birçok meslektaşımın yorum ve tavsiyelerinden çok yararlandım. Özellikle, P.K. Aravind (Worcester Polytech), Greg Benesh (Baylor), David Boness (Seatle), Buat Brody (Bard), Ash Carter (Drew), Edward Chang (Massachusettes), Peter Collings (Swartmore), Richard Crandall (Reed), Jeff Dunham (Middlebury), Greg Elliot (Puget Sound), John Essick (Reed), Gregg Franklin (Cornegie Mellon), Henry Grenside (Duka), Paul Haines (Dartmouth), J.R. Huddle (Donanma), Larry Hunter (Amherst), David Kaplan (Washington), Alex Kuzmich (Georgia Tech), Peter Leung (Portland State), Tony Liss (Illinois), Jeffry Mallow (Chicago Loyola), James Mc Tavish (Liverpool), James Nearing (Miami), Johnny Powell (Reed), Krishna Rajagopal (MIT), Birian Raue (Florida International), Robert Reynolds (Reed), Kath Riles (Michigan), Mark Semon (Bates), Herschel Snodgrass (Lewis and Clark), John Taylor (Colorado), Stovros Theodorakis (Cyprus), A.S. Tremsin (Berkeley), Dan Velleman (Amherst) Nicholas Wheeler (Reed), Scott Willenbrock (Illinonis), William Wootters (Williams), Sam Wurzel (Brown) ve Jens Zorn (Michigan)'a özellikle teşekkür etmek istiyorum.

ÇEVİRENLERİN ÖN SÖZÜ

David J. Griffiths'in diğer iki kitabı ("Introduction to Elementary Particles" ve "Introduction to Electrodynamics") gibi "Introduction to Quantum Mechanics" gerek ülkemizde gerekse yurtdışında birçok üniversitede ders kitabı olarak kullanılmaktadır. Ülkemizdeki çoğu üniversitede eğitim dili Türkçe olmasına rağmen az sayıda Türkçe kaynak kitap bulunmaktadır. Öğrencilerimiz için kavramsal olarak anlaşılması zor olan Kuantum Mekaniği dalında David J. Griffiths'in artık klasik haline gelmiş lisans seviyesindeki kitabının çevrisi ile bu alandaki ihtiyacı gidermeye çalıştık. Bu çevirinin sadece Fizik ve Fizik Mühendisliği öğrencileri için değil, diğer mühendislik bölümlerinde Kuantum Mekaniğine ilgi duyan öğrenciler için de iyi bir kaynak oluşturacağını ve öğrencilere farklı bir bakış açısı kazandıracağını umuyoruz.

Kuşkusuz bir ders kitabının yararlı olabilmesi için öncelikle dili anlaşılabilir olmalı. Çeviri sırasında yazarın kendine has üslubunu bozmamak için çok uğraştık. Diğer bir sorun da iki ayrı kişinin ifadeleri arasındaki farkları gidermekti. Bu farkları mümkün olduğu kadar en aza indirmeye çalıştık. Terimlerde elimizden geldiğince Türkçe kullanmaya çalıştık. Seçtiğimiz Türkçe karşılıkların çoğu Türkçe yazılmış Kuantum Mekaniği kitaplarındaki terimlerle uyumludur. Ancak araya bir iki yeni terim de katıştırdık. Gerek kullanılan terimlere gerekse çevirinin tümüne ait görüş ve önerilerinizi yayınevine ya da bizlere iletirseniz bundan sonraki baskılarda bunlardan faydalanabiliriz.

1. ve 12. Bölümlerin çevirisindeki katkısından dolayı A. Savaş Arapoğlu'na teşekkür ederiz.

Kitabın tüm öğrencilere ve öğretim üyelerine yararlı olması dileği ile...

Haluk Özbek
hozbek@itu.edu.tr
Sondan Durukanoğlu Feyiz
sondan.feyiz@gmail.com

Kuantum Mekaniğine Giriş

I. KISIM TEORİ

1. BÖLÜM

DALGA FONKSİYONU

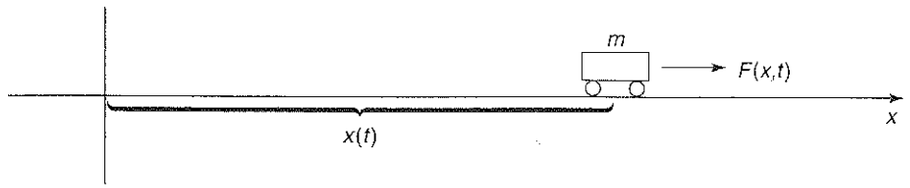
1.1 SCHRÖDINGER DENKLEMİ

Belirli bir F(x, t) kuvvetinin etkisiyle x ekseni boyunca harekete zorlanmış m kütleli bir parçacık düşünelim (1.1 nolu şekil). *Klasik* mekaniğin programı belirli bir zamanda parçacığın konumu $x(t)$'yi belirlemektir. Bu konumu belirledikten sonra hız ($v = dx/dt$), momentum ($p = mv$), kinetik enerji ($T = (1/2)mv^2$) veya diğer dinamik değişkenleri hesaplayabiliriz. $x(t)$'yi nasıl belirleriz? Newton'un ikinci yasası $F = ma$'yı uygulayarak (*Korunumlu sistemler* için, yalnız bu tip sistemleri göz önüne alacağız; ayrıca mikroskopik düzeyde de sadece bu tür sistemler gözlenir ve kuvvet bir potansiyel enerji fonksiyonunun türevi olarak ifade edilebilir[1], $F = -\partial V/\partial x$, Newton yasası $m\, d^2x/dt^2 = -\partial V/\partial x$ şeklini alır). Uygun başlangıç koşullarıyla (tipik olarak $t = 0$'daki hız ve konum) bu yasa $x(t)$'yi belirler.

Kuantum mekaniği aynı probleme oldukça farklı yaklaşır. Bu durumda aradığımız, parçacığın **dalga fonksiyonu** olan $\Psi(x, t)$ dir ve bunu **Schrödinger Denklemi'ni** çözerek buluruz:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi. \qquad [1.1]$$

[1] Manyetik kuvvetler istisna olup bu aşamada göz önüne almaya gerek yoktur. Tüm kitap boyunca hareketin relativistik olmadığını ($v \ll c$) kabul edeceğiz.



ŞEKİL 1.1: Belirli bir kuvvetin etkisi altında bir boyutta harekete zorlanmış bir "parçacık".

Burada i, -1'in karekökü, $\hbar$ Planck sabitidir (aslında *orijinal* sabit h'nın 2π'ye bölünmüş hali).

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054572 \times 10^{-34}\,\text{J s}. \qquad [1.2]$$

Schrödinger denklemi Newton'un ikinci yasasıyla aynı rolü oynamaktadır. Verilen uygun başlangıç koşullarıyla (örneğin, $\Psi(x, 0)$) Schrödinger denklemi, tıpkı klasik mekanikte Newton yasasının tüm zamanlar için $x(t)$'yi belirlediği gibi, tüm zamanlar için $\Psi(x, t)$'yi belirler[2].

1.2. İSTATİSTİKSEL YORUM

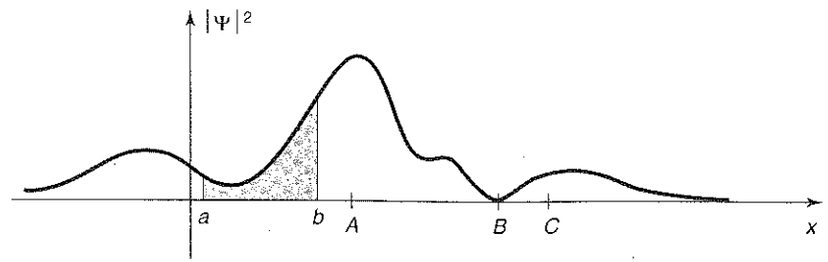
"Dalga fonksiyonu" tam olarak nedir ve belirlendikten sonra ne işe yarar? Bundan başka, parçacık doğası gereği bir noktada yerelleşmişken dalga fonksiyonu (adından anlaşılacağı gibi) uzayda yayılmıştır (yani belirli bir t zamanında x'in fonksiyonu). Bu tür bir nesne nasıl olur da bir *parçacığın durumunu* temsil eder? Yanıt Born'un dalga fonksiyonunun **istatistiksel yorumunda** yatar. Bu yoruma göre; $|\Psi(x,t)|^2$ parçacığın t anında x noktasında bulunma *olasılığını* vermektedir. Ya da daha kesin olarak,[3]

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2\,dx = \begin{Bmatrix} \textit{parcacığın } t \textit{ anında } a \textit{ ile } b \\ \textit{arasında bulunma olasılığı} \end{Bmatrix} \qquad [1.3]$$

Olasılık, $|\Psi|^2$'nin grafiğinin altında kalan *alandır*. 1.2 nolu şekildeki dalga fonksiyonu için, parçacığın $|\Psi|^2$'nin büyük olduğu A noktası civarında bulunma olasılığı $|\Psi|^2$'nin daha küçük olduğu B noktası civarında bulunma olasılığından daha fazladır.

[2] Schrödinger denkleminin kökeninin ilk elden zarif bir yanıtı için Felix Bloch, *Physics Today*, Aralık 1976 makalesine bakınız.

[3] Dalga fonksiyonunun kendisi kompleks olup, $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ (Ψ^*, Ψ'nin kompleks eşleniği), tıpkı olasılık gibi, reel ve pozitiftir.



ŞEKİL 1.2: Tipik bir dalga fonksiyonu. Gölgeli alan parçacığın *a* ile *b* arasında bulunma olasılığını vermektedir. Parçacık büyük olasılıkla *A* yakınında, düşük olasılıkla *B* yakınında bulunacaktır.

İstatistiksel yorum kuantum mekaniğine bir çeşit **belirsizlik** katar: Teorinin parçacık hakkında söyleyebileceği herşeyi (yani dalga fonksiyonunu) bilseniz bile, parçacığın konumunu ölçecek basit bir deneyin sonucunu kesin olarak tahmin edemezsiniz; kuantum mekaniğinin verebileceği şey *mümkün* sonuçlar hakkında *istatistiksel* bilgidir. Bu tarz bir belirsizlik hem fizikçiler hem de filozoflar için derin bir rahatsızlık noktasıdır. Bu belirsizlik doğanın bir gerçeği mi yoksa teorinin bir kusuru mudur?

Bir parçacığın konumunu ölçtüğümüzü ve C noktası[4] olarak bulduğumuzu varsayalım. *Soru:* Ölçümü yapmadan hemen *önce* parçacık neredeydi? Bu sorunun akla yatkın üç yanıtı vardır ve bu yanıtlar kuantum belirsizliğini önemseyen başlıca düşünce ekollerini karakterize ederler.

1. Gerçekçi (realist) tavır: Parçacık *C noktasındaydı*. Einstein tarafından da savunulan bu yanıt makul görünüyor. Öte yandan, bu yanıt doğru ise, kuantum mekaniğinin *eksik* bir teori olacağına dikkatinizi çekmek isterim. Parçacık *C konumundadır* ancak kuantum mekaniği bize bunun böyle olduğunu söyleyemiyor. Gerçekçi bakış açısına sahip bir kişiye göre, belirsizlik doğanın bir gerçeği olmayıp bizim bilgisizliğimizin bir yansımasıdır. d'Espagnat'ın dediği gibi "parçacığın konumu hiçbir zaman belirsiz değildir, yalnızca deneyci tarafından bilinmemektedir"[5]. O zaman Ψ hikayenin tamamı değildir ve parçacığın tam bir betimlemesini yapmak için **saklı değişken** adı verilen bazı ilave bilgilere ihtiyaç vardır.

2. Ortodoks tavır: *Gerçekte parçacık hiçbir yerde değildi*. Parçacığı taraf tutmaya (her ne kadar nasıl ve niçin C noktasını seçti diye sormaya cesaret edemesek de) zorlayan ölçme eylemidir. Jordan bu durumu "gözlemler yalnızca ölçülecek şeyin *düzenini bozmakla* kalmazlar onu *üretirler* de.... Biz parçacığı kesin belirli bir konumda bulunmaya zorlarız"[6] diyerek sade bir şekilde ifade etmiştir. **Kopenhag yorumu** olarak da adlandırılan bu bakış açısı Bohr ve takipçileri tarafından savunulmuştur ve

[4] Şüphesiz hiçbir ölçüm aleti tam doğruluğa sahip değildir. Burada *söylemek istediğimiz* deneysel duyarlılık sınırları içinde parçacığın *C civarında* bulunduğudur.

[5] Bernard d'Espagnat, "The Quantum Theory and Reality" (Scientific American, Nov. 1979, 165.sayfa).

[6] N. David Mermin'in çok güzel bir makalesinden alınmıştır. "Kimse bakmadığında ay orada mıdır?" (Physics Today, April 1985, 38. sayfa).

fizikçiler arasında yaygın olarak kabul görür. Öte yandan, eğer bu tavır doğruysa ölçme eyleminde olağan dışı bir şeyler olduğuna ve yarım yüzyılı aşkın bir tartışmanın bunu aydınlatmada çok az yol katettiğine dikkatinizi çekerim.

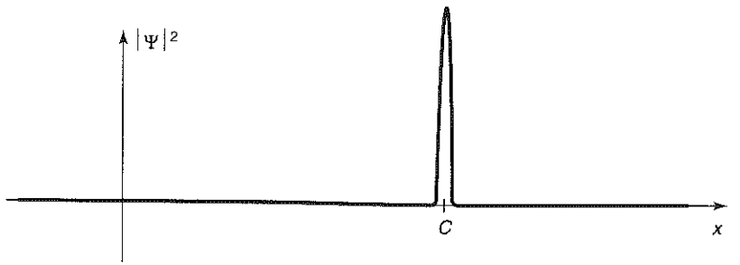
3. Bilinemezci (agnostik) tavır: *Yanıt vermeyi kabul etmez.* Bu göründüğü kadar da aptalca değil. Haklı olup olmadığınızı bilmenin tek ve kesin yolu bir deney yapmak ise (bu durumda "ölçümden önce" artık sizin için önemsizdir) ölçümden önce parçacığın durumu hakkında bir iddiada bulunmak ne kadar anlamlıdır? Doğası gereği test edilemeyecek bir şey hakkında telaşlanmak kelimenin tam anlamıyla metafiziktir. Pauli'nin dediği gibi "bir kişi başka birinin zihnine, hakkında kimsenin bir şey bilemeyeceği herhangi bir şeyin daima aynı durumda bulunup bulunmadığı problemi konusunda kadim bir soru olan bir iğnenin ucuna kaç tane melek oturabilir sorusundan daha fazla acı vermemelidir".[7] Bu, çoğu fizikçiyi yıllarca kararsız bıraktı: Size önce Ortodoks yanıtı satmaya çalışırlardı, fakat karşı duruşunuzu devam ettirdiğinizde, bilinemezci yanıta dönüp, konuşmayı bitirirlerdi.

Oldukça yakın zamana kadar her üç duruşun (gerçekçi, ortodoks ve bilinemezci) da ateşli savunucuları vardı. Ama 1964'de John Bell, parçacığın ölçümden önce kesin bir konuma (her ne kadar bilinmese de) sahip olup olmamasının *gözlenebilir* bir farklılık yarattığını göstererek fizikçileri şaşkınlığa uğrattı. Bell'in bu keşfi, bilinmezci yanıtı geçerli bir seçenek olmaktan çıkararak 1. ya da 2. duruşun doğru seçim olup olmadığını *deneysel* bir soru olarak ortaya koydu. Bell'in argümanının değerini daha iyi kavrayacağınız bir konuma geldiğinizde, kitabın sonunda bu hikayeye tekrar döneceğiz. Şimdilik, deneylerin Ortodoks yorumu şüpheye yer bırakmayacak şekilde doğruladığını söylemek yeterlidir.[8] Bir parçacık, ölçümden önce, tıpkı küçük bir göldeki ufak dalgacıklarda (çırpıntılarda) olduğu gibi kesin bir konuma sahip değildir. Konumun belirli bir sayısal değer almasını dayatan ölçüm sürecinin kendisidir, ve böylece dalga fonksiyonunca belirlenen bir istatistiksel ağırlıklandırma sınırları içinde ölçüm sonunda kesin bir sonuç elde edilir.

Birinci ölçümden *hemen* sonra *ikinci* bir ölçüm yapsam ne olurdu? C değerini tekrar mı elde ederdim yoksa ölçümün etkisi istemeye istemeye her seferinde tamamen yeni bir değer mi verirdi? Herkes bu sorunun yanıtı üzerinde hem fikirdir: Aynı parçacık üzerinde yapılan ardışık ölçümler aynı sonucu vermelidir. Aslında, bu olgu tekrarlanan deneylerle doğrulanmasaydı, ilk seferinde parçacığın gerçekten C'de bulunduğunu kanıtlamak zor olacaktı. Ortodoks yorum ikinci ölçümün de kesinlikle C değerini

[7] Mermin'den alınmıştır (6. dipnot), 40. sayfa.

[8] Bu cümle oldukça güçlüdür. Bir kısmını Sonsöz'de tartışacağımız birkaç tane teorik ve deneysel kaçamak noktalar kaldı. Özellikle David Bohm tarafından geliştirilen geçerli yerel olmayan saklı değişken teorileri ve burada verilen üç kategoriden hiçbirine tam olarak uymayan **çoklu dünyalar** yorumları gibi diğer formülasyonlar mevcuttur. Ancak, bu aşamada en azından pedagojik olarak temiz ve uyumlu bir platform benimseyip alternatifler hakkında daha sonra endişelenmenin akıllıca olduğunu düşünüyorum.



ŞEKİL 1.3: Dalga fonksiyonunun çökmesi: Parçacığın C noktasında bulunduğunu gösteren bir ölçümden hemen sonraki $|\Psi|^2$ grafiği.

vereceğini nasıl açıklar? Açıkçası ilk ölçüm dalga fonksiyonunu C noktası etrafında keskin bir tepe yapacak tarzda (1.3 nolu şekil) değiştirir. Dalga fonksiyonunun ölçümden hemen sonra C noktası etrafında bir tepe noktasına **çöktüğünü** söyleriz. Bu tepe noktası da Schrödinger denklemine uygun olarak zamanla yayılır, bu yüzden ikinci ölçüm çok çabuk yapılmalıdır. O halde tamamıyla birbirinden farklı iki çeşit fiziksel süreçten bahsedebiliriz: Dalga fonksiyonunun Schrödinger denklemi altında yavaşça evrimleştiği "sıradan" süreçler ve Ψ'nin aniden ve süreksiz olarak değiştiği (yani çöktüğü) "ölçümler"[9].

1.3 OLASILIK

1.3.1. Kesikli Değişkenler

İstatistiksel yorum yüzünden olasılık kuantum mekaniğinde temel bir rol oynar. Bu nedenle olasılık teorisinin kısa bir özeti için şimdilik ana konudan biraz ayrılacağız. Bir terminoloji ve notasyon oluşturmak başlı başına bir sorun olsa da bunu basit örneklerle aşacağız.

Bir odada yaşları aşağıdaki gibi verilen 14 kişi olduğunu varsayalım.

14 yaşında bir kişi

15 yaşında bir kişi

16 yaşında üç kişi

[9] Kuantum mekaniğinde ölçümün rolü o kadar kritik ve tuhaftır ki neyin bir ölçümü oluşturduğunu merak edebilirsiniz. Bu, Bohr'un da iddia ettiği gibi mikroskopik (kuantal) bir sistemle makroskopik (klasik) bir ölçüm aletinin etkileşmesi midir yoksa Heisenberg'in iddiasındaki gibi sürekli bir "kayıtın" alınmasıyla mı karakterize edilir ya da Winger'in öne sürdüğü gibi kasıtlı bir "gözlemcinin" müdahalesini mi gerektirir? Sonsöz'de bu karmaşık sürece döneceğiz; şimdilik basit bir görüş açısıyla yetinelim: Ölçme bir bilim adamının laboratuvarda cetvel, kronometre, Geiger sayacı vb. aletlerle gerçekleştirdiği şeydir.

22 yaşında iki kişi

24 yaşında iki kişi

25 yaşında beş kişi

Yaşı j olan kişi sayısını $N(j)$ ile gösterirsek, o zaman $N(17)$ sıfır iken,

$N(14) = 1$,

$N(15) = 1$,

$N(16) = 3$,

$N(22) = 2$,

$N(24) = 2$,

$N(25) = 5$,

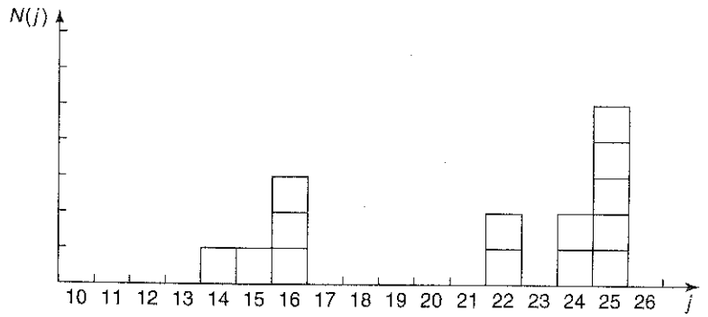
olur. Odadaki *toplam* kişi sayısı

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j) \qquad [1.4]$$

dir (verilen örnekte $N = 14$). 1.4 nolu şekil verilerin bir histogramını göstermektedir. Bu dağılım için sorulabilecek bazı sorular şunlardır:

Soru 1. Bu gruptan rastgele tek bir seçim yaptığımızda bu kişinin yaşının 15 olma **olasılığı** nedir? *Yanıt:* 14'de 1. Çünkü 14 mümkün seçim olup yalnızca bir kişi istenilen yaştadır. j yaşının elde edilme olasılığı $P(j)$ ise, o zaman $P(14) = 1/14$, $P(15) = 1/14$, $P(16) = 3/14$ vs. olur. Genel olarak bu olasılık

$$P(j) = \frac{N(j)}{N} \qquad [1.5]$$



ŞEKİL 1.4: 1.3.1.Kesim'deki dağılım için j yaşındaki kişi sayısı $N(j)$'yi gösteren histogram.

şeklindedir. 14 *veya* 15 yaşının elde edilme olasılığının tek tek olasılıkların *toplamı* olduğuna dikkat ediniz (bu durumda, 1/7). Özellikle, *tüm* olasılıkların toplamı 1'dir – bazı yaşları elde ettiğinizden eminsiniz:

$$\sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1. \qquad [1.6]$$

Soru 2. **En olası** yaş nedir? *Yanıt:* 25, beş kişi bu yaştadır, oysa başka bir yaşta en çok üç kişi vardır. Genel olarak, en olası j, $P(j)$'yi maksimum yapan j dir.

Soru 3. **Medyan** yaş değeri nedir? *Yanıt 23.* Çünkü 7 kişi 23'den daha genç, 7 kişi daha yaşlıdır. (Genel olarak, medyan daha büyük bir sonuç elde etme olasılığının daha küçük bir sonuç elde etme olasılığıyla aynı olduğu j değeridir)

Soru 4. **Ortalama yaş** nedir? *Yanıt:*

$$\frac{(14)+(5)+3(16)+2(22)+2(24)+5(25)}{14} = \frac{294}{14} = 21.$$

Genel olarak, j'nin ortalama değeri ($\langle j \rangle$ ile göstereceğiz) aşağıdaki gibi verilir:

$$\langle j \rangle = \frac{\sum jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j). \qquad [1.7]$$

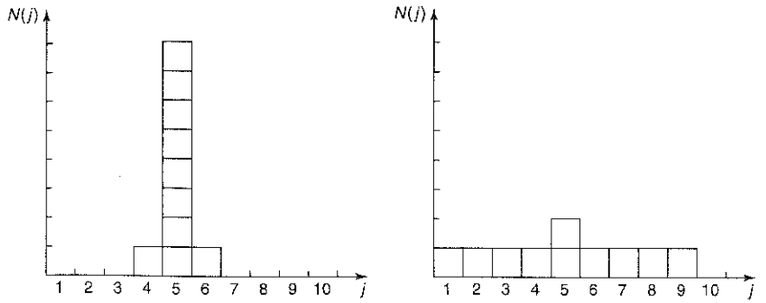
Hiç kimsenin ortalama ya da medyan yaşta olmak zorunda olmadığına dikkat ediniz – bu örnekte 21 ya da 23 yaşında hiç kimse yoktur. Kuantum mekaniğinde genellikle ilgilenilen büyüklük ortalama olup **beklenen değer** olarak adlandırılır. Tek bir ölçüm yaptığımızda en büyük olasılıkla elde edeceğiniz sonucu (aslında bu ortalama değer olmayıp *en olası* değerdir) çağrıştırdığından bu yanıltıcı bir terimdir – korkarım bu konuda başımız biraz ağrıyacak.

Soru 5. Yaşların *karelerinin* ortalaması nedir? *Yanıt:* $14^2 = 196$, 1/14 olasılıkla, $15^2 = 225$, 1/14 olasılıkla, ya da $16^2 = 256$, 3/14 olasılıkla elde edilir. O zaman, ortalama şöyle verilir;

$$\langle j^2 \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} j^2 P(j). \qquad [1.8]$$

Genel olarak, j'nin herhangi bir *fonksiyonunun* ortalama değeri şöyle verilir;

$$\boxed{\langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j)P(j).} \qquad [1.9]$$



ŞEKİL 1.5: Aynı medyan, ortalama ve en olası değere ancak farklı standart sapmalara sahip iki histogram.

(1.6, 1.7 ve 1.8 nolu denklemler, bu formülün özel durumlarıdır). *Dikkat:* Genel olarak karelerin ortalaması $\langle j^2 \rangle$, ortalamanın karesine $\langle j \rangle^2$ *eşit değildir*. Örneğin odada yaşları 1 ve 3 olan iki bebek olsaydı, o zaman $\langle j^2 \rangle = 5$, $\langle j \rangle^2 = 4$ olurdu.

1.5 nolu şekildeki iki histogram arasında, aynı medyan, ortalama, en olası değer ve aynı sayıda elemana sahip olmalarına rağmen, göze çarpan bir fark vardır. Birinci histogram ortalama değer etrafında oldukça keskin iken ikincisi yayvan ve düzdür (birincisi bir büyük şehir sınıfındaki öğrencilerin yaş profilini simgelerken, ikincisi kırsal kesimdeki tek sınıflı bir okulu simgeliyor olabilir). Bir dağılımda ortalamaya göre "yayılma" miktarının sayısal bir ölçüsüne gereksinimimiz vardır. Bunun en aşikâr yolu tek tek her bir değerin ortalamadan ne kadar saptığını belirlemek,

$$\Delta j = j - \langle j \rangle \qquad [1.10]$$

ve Δj'nin ortalamasını hesaplamak olabilir. Şüphesiz buradaki sonun, ortalamanın doğası gereği Δj pozitif olduğu kadar negatif de olacağından, sonucun sıfır olmasıdır.

$$\langle \Delta j \rangle = \sum (j - \langle j \rangle) P(j) = \sum j P(j) - \langle j \rangle \sum P(j)$$
$$= \langle j \rangle - \langle j \rangle = 0.$$

($\langle j \rangle$'nin sabit olduğuna, örneklemin bir üyesinden diğerine ilerlerken değişmediğine, böylelikle toplamın dışına alınabileceğine dikkat ediniz). Bu rahatsızlık verici problemden sakınmak için Δj'nin *mutlak değerinin* ortalamasını hesaplamaya karar verebilirsiniz. Ancak mutlak değerler, üzerinde çalışılmak için iyi değildirler. Bunun yerine ortalama almadan önce *kare* alarak işaret probleminin etrafından dolaşabiliriz:

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta j)^2 \rangle. \qquad [1.11]$$

Bu büyüklük dağılımın **varyansı** olarak bilinir. σ'nın kendisi (ortalamadan sapmanın karesinin ortalamasının karekökü – yutkunalım!) **standart sapma** olarak adlandırılır ve $\langle j \rangle$ etrafındaki yayılmanın alışılmış ölçüsüdür.

Varyanslar üzerine işe yarar küçük bir teorem:

$$\sigma^2 = \langle (\Delta j)^2 \rangle = \sum (\Delta j)^2 P(j) = \sum (j - \langle j \rangle)^2 P(j)$$
$$= \sum (j^2 - 2j\langle j \rangle + \langle j \rangle^2) P(j)$$
$$= \sum j^2 P(j) - 2\langle j \rangle \sum j P(j) + \langle j \rangle^2 \sum P(j)$$
$$= \langle j^2 \rangle - 2\langle j \rangle \langle j \rangle + \langle j \rangle^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2.$$

Karekök alınarak, standart sapma

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2} \qquad [1.12]$$

olarak yazılabilir. Pratikte σ'yı belirlemenin daha hızlı yolu: $\langle j^2 \rangle$ ve $\langle j \rangle^2$ hesaplanır, çıkarılır ve karekök alınır. Sırası gelmişken; daha önce uyardığımız gibi genel olarak $\langle j^2 \rangle$, $\langle j \rangle^2$'ne eşit değildir. σ^2 pozitif olduğundan (1.11 nolu denklemdeki tanımından dolayı) 1.12 nolu denklem

$$\langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2 \qquad [1.13]$$

olduğunu ifade eder ve bu ikisi yalnızca hiç yayılmamış dağılımlar (tüm elemanlar aynı değerde) durumunda yani $\sigma = 0$ olduğu zaman eşittir.

1.3.2 Sürekli Değişkenler

Buraya kadar yalnızca *kesikli* bir değişkenle ilgilendiğimizi varsaydık. Yani değişken yalnızca belirli yalıtılmış değerleri almaktadır (verilen örnekte, yaşlar yıl cinsinden verildiğinden j tamsayı olmak zorundadır). Ancak *sürekli* dağılımlara kolaylıkla genelleme yapılabilir. Caddedeki rastgele bir kişiyi seçtiğimizde bu kişinin yaşının tam olarak 16 yıl, 4 saat, 27 dakika, 3.33 saniye olma olasılığı sıfırdır. Anlamlı olan, bu kişinin yaşının belirli bir aralıkta, örneğin 16 ile 17 arasında, olma olasılığıdır. Eğer aralık yeteri kadar kısaysa, olasılık *aralığın uzunluğuyla orantılıdır*. Örneğin seçilen kişinin yaşının 16 ile 16 artı 2 gün arasında olma olasılığı bu kişinin yaşının 16 ile 16 artı 1 gün arasında olma olasılığının iki katıdır. (16 yıl önce tam da o günde sıra dışı bir doğum patlaması olmadığını varsayıyoruz. Bu durumda kuralın uygulanamayacağı kadar uzun bir aralık seçmiş oluruz. Eğer bu doğum patlaması altı saat sürdüyse güvenli

tarafta kalmak için aralıkları saniye ya da daha küçük mertebede seçeriz. Teknik olarak *sonsuz küçük* aralıklardan bahsediyoruz). Böylelikle

$$\left\{\begin{array}{l}\textit{rastgele seçilmiş bir örneğin}\\ \textit{değerinin } x \textit{ ile } x+dx \textit{ arasında}\\ \textit{olma olasılığı}\end{array}\right\} = \rho(x)dx \qquad [1.14]$$

dir. Orantı çarpanı $\rho(x)$ "x değerini elde etme olasılığı" olarak adlandırılmakla birlikte bu yarım yamalak bir ifadedir. **Olasılık yoğunluğu** daha iyi bir terimdir. x'in a ile b *sonlu* aralığında olma olasılığı $\rho(x)$'in integrali olarak verilir:

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x)\,dx. \qquad [1.15]$$

Kesikli dağılımlar için çıkardığımız kurallar sürekli dağılımlara kolaylıkla dönüştürülür.

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)\,dx, \qquad [1.16]$$

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)\,dx, \qquad [1.17]$$

$$\langle f(x)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)\,dx, \qquad [1.18]$$

$$\sigma^2 \equiv \langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2. \qquad [1.19]$$

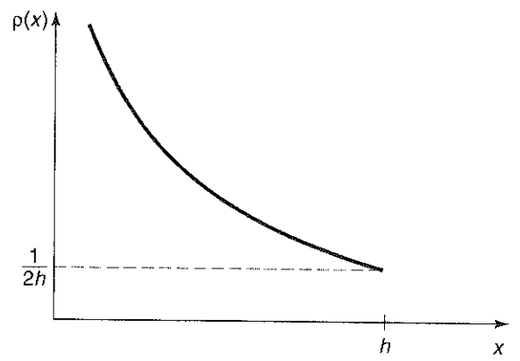
Örnek 1.1 Bir kayayı h yüksekliğindeki bir uçurumdan düşürdüğümüzü varsayalım. Düşüş sırasında rastgele aralıklarda bir milyon tane anlık fotoğraf çekelim. Her resimde kayanın düştüğü uzaklığı ölçelim. *Soru:* Tüm bu uzaklıkların *ortalaması* nedir? Kat edilen uzaklığın *zaman ortalaması* nedir?[10]

Çözüm: Kaya durgun halden hareketine başlar ve düşerken hızlanır; tepe noktası yakınında daha çok zaman geçirir ve bu yüzden ortalama uzaklık $h/2$'den küçük olmalıdır. Hava direncini yok sayarsak, t anındaki x uzaklığı

$$x(t) = \frac{1}{2}gt^2$$

ile verilir. Hız $dx/dt = gt$ ve toplam uçuş zamanı $T = \sqrt{2h/g}$ dir. Kameranın dt

[10] Bir istatistikçi *sonlu bir örneklemin* (burada bir milyon) ortalamasıyla sürekli bir örneklemin "doğru" ortalamasını karıştırdığımızdan yakınacaktır. Bu bir deneyci için özellikle örneklemin büyüklüğü küçükse sakat bir problem olabilir. Ancak, burada örneklem ortalamasına muhtemelen iyi bir yaklaştırma olan doğru ortalamayla ilgilenmekteyiz.



ŞEKİL 1.6: Örnek 1.1'deki olasılık yoğunluğu: $\rho(x) = 1/\left(2\sqrt{hx}\right)$.

aralığında çakma olasılığı dt/T, böylelikle verilen bir fotoğrafın karşılık olan dx aralığı içindeki bir uzaklığı gösterme olasılığı

$$\frac{dt}{T} = \frac{dx}{gt}\sqrt{\frac{g}{2h}} = \frac{1}{2\sqrt{hx}}dx.$$

olur. Açıkça 1.14 nolu denklem ile verilen olasılık *yoğunluğu*

$$\rho(x) = \frac{1}{2\sqrt{hx}}, \quad (0 \le x \le h)$$

dir (şüphesiz bu aralığın dışında olasılık yoğunluğu sıfırdır).

1.16 nolu denklemi kullanarak bu sonucu kontrol edebiliriz:

$$\int_0^h \frac{1}{2\sqrt{hx}}dx = \frac{1}{2\sqrt{h}}\left(2x^{1/2}\right)\Big|_0^h = 1.$$

Ortalama uzaklık (1.17 nolu denklem)

$$\langle x\rangle = \int_0^h x\frac{1}{2\sqrt{hx}}dx = \frac{1}{2\sqrt{h}}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)\Big|_0^h = \frac{h}{3},$$

olur ve beklendiği gibi $h/2$'den küçüktür.

1.6 nolu şekil $\rho(x)$'in grafiğini göstermektedir. ρ'nun integrali olan olasılığın kendisinin sonlu olmasına (aslında 1 ya da 1'den küçük) rağmen, olasılık *yoğunluğunun* sonsuz olabileceğine dikkat ediniz.

***Problem 1.1** 1.3.1. kesimde verilen yaş dağılımı için

(a) $\langle j^2 \rangle$ ve $\langle j \rangle^2$'ni hesaplayınız.

(b) Her bir j için Δj'yi belirleyiniz, standart sapmayı hesaplamak için 1.11 nolu denklemi kullanınız.

(c) (a) ve (b)'deki sonuçlarınızı kullanarak, 1.12 nolu denklemi kontrol ediniz.

***Problem 1.2**

(a) 1.1 nolu örnekte verilen dağılımın standart sapmasını bulunuz.

(b) Rastgele seçilmiş bir fotoğrafın ortalamadan bir standart sapma kadar daha büyük bir x uzaklığını gösterme olasılığı nedir?

***Problem 1.3** Bir **Gauss** dağılımı düşünelim.

$$\rho(x) = Ae^{-\lambda(x-a)^2}$$

Burada, A, a ve λ pozitif reel sabitlerdir. (Gerekli integrallere bakabilirsiniz)

(a) A'yı belirlemek için 1.16 nolu denklemi kullanınız.

(b) $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ ve σ'yı bulunuz.

(c) $\rho(x)$'in grafiğini çiziniz.

1.4 NORMLAMA

$|\Psi(x,t)|^2$'yi parçacığın t anında x noktasında bulunma olasılık yoğunluğu olarak ifade eden dalga fonksiyonunun istatistiksel yorumuna (1.3 nolu denklem) dönelim. 1.16 nolu denklemden hareketle, $|\Psi|^2$'nin integrali 1 olmalıdır (parçacık *herhangi* bir yerde olmak zorundadır).

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1.} \qquad [1.20]$$

Bu koşul olmadan istatistiksel yorum anlamsızdır.

Lakin bu koşul sizi endişelendirmeli: ne de olsa, dalga fonksiyonu Schrödinger denklemi tarafından belirlenir ve bu ikisinin tutarlı olup olmadığını kontrol etmeden Ψ üzerine dışarıdan bir koşul koyamayız. 1.1 nolu denkleme bakıldığında, $\Psi(x, t)$ bir

çözümse A herhangi bir (kompleks) sabit olmak üzere $A\Psi(x, t)$'nin de bir çözüm olduğu görülür. O zaman, yapmamız gereken bu bilinmeyen çarpanı 1.20 nolu denklemi sağlayacak şekilde belirlemektir. Bu işlem dalga fonksiyonunun **normlanması** olarak adlandırılır. Schrödinger denkleminin bazı çözümleri için integral *sonsuzdur* ve bu durumda *hiçbir* çarpan integrali 1 yapmaz. Aynı durum aşikâr çözüm $\Psi = 0$ için de geçerlidir. Bu tür **normlanamayan** çözümler parçacıkları temsil edemezler ve dışlanmalıdırlar. Fiziksel olarak kabul edilebilir durumlar Schrödinger denkleminin **karesi integre edilebilir** çözümlerine karşılık gelirler.[11]

Ama bir dakika! Dalga fonksiyonunu $t = 0$ zamanında normladığımızı varsayalım. Zaman ilerleyip Ψ evrimleşirken normlanmış *kalacağını* nasıl bilebiliriz? (A, t'nin bir fonksiyonu olacağından ve artık Schrödinger denkleminin bir çözümü olmayacağından dalga fonksiyonunu tekrar tekrar normlayamazsınız). Neyse ki, Schrödinger denkleminin dalga fonksiyonunun normunu otomatik olarak korumak gibi çarpıcı bir özelliği var. Bu can alıcı özellik olmasaydı Schrödinger denklemi istatistiksel yorumla uyuşmazdı ve tüm teori çökerdi.

Bu nokta önemli ve dikkatli bir kanıt için duraklasak iyi olur. Öncelikle

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(x,t)|^2 \, dx \qquad [1.21]$$

dir. (integralin yalnız t'nin fonksiyonu olduğuna dikkat ediniz. Bu yüzden ilk ifadede tam türev (d/dt) kullandık, ancak *integrand* hem x hem de t'nin fonksiyonu olduğundan ikinci ifadede *kısmi* türev (∂/∂t) kullanıldı). Çarpım kuralından

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi \qquad [1.22]$$

olur. Schrödinger denklemini kullanarak

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi \qquad [1.23]$$

elde ederiz. Bu ve 1.23 nolu denklemin kompleks eşleniği

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^* \qquad [1.24]$$

yerlerine konursa

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\right] \qquad [1.25]$$

olur.

---

[11] Açıkça, $|x| \to \infty$ için $\Psi(x, t)$, $1/\sqrt{|x|}$'den daha hızlı sıfıra gitmelidir. Sırası gelmişken, normlama A'nın yalnızca *modülünü* belirler ve *fazı* belirlenmemiş kalır. Bununla birlikte daha sonra göreceğimiz gibi fazın fiziksel anlamı yoktur.

1.21 nolu denklemdeki integral şimdi açık olarak hesaplanabilir;

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2\,dx = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty}. \qquad [1.26]$$

Ancak x, ($\pm$) sonsuza giderken $\Psi(x, t)$ sıfıra gitmelidir. Aksi takdirde dalga fonksiyonu normlanamaz[12]. Bu durumda

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2\,dx = 0 \qquad [1.27]$$

olacaktır ve böylece integral *sabit* olur (zamandan bağımsız); Ψ, $t = 0$'da normlanmışsa gelecek tüm zamanlar için normlanmış kalacaktır.

Problem 1.4 $t = 0$ anında bir parçacık

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} A\dfrac{x}{a}, & 0 \le x \le a, \\ A\dfrac{(b-x)}{(b-a)}, & a \le x \le b, \\ 0, & \text{diğer yerlerde,} \end{cases}$$

ile verilen dalga fonksiyonuyla temsil edilmektedir. Burada A, a ve b birer sabittir.

(a) Ψ'yı normlayınız (A'yı a ve b cinsinden bulunuz).

(b) $\Psi(x, 0)$'ı x'in fonksiyonu olarak çiziniz.

(c) $t = 0$ anında parçacık en büyük olasılıkla nerede bulunur?

(d) Parçacığın a'nın solunda bulunma olasılığı nedir? Sonuçlarınızı $b = a$ ve $b = 2a$ limit durumları için kontrol ediniz.

(e) x'in beklenen değeri nedir?

*** Problem 1.5**

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t}$$

ile verilen dalga fonksiyonunu düşünelim. Burada A, λ ve ω birer pozitif reel sabit olmak üzere (2. Bölümde ne tür bir potansiyelin (V) böyle bir dalga fonksiyonunu vereceğini göreceğiz),

(a) Ψ'yı normlayınız

(b) x ve x^2'nin beklenen değerlerini belirleyiniz.

[12] İyi bir matematikçi size kötü huylu karşıt örnekler sunabilir, ancak fizikte bunlara pek rastlanmaz. Bizim için dalga fonksiyonu sonsuzda *daima* sıfıra gider.

(c) x'in standart sapmasını bulunuz. $|\Psi|^2$'nin grafiğini x'in fonksiyonu olarak çiziniz ve σ'nin x'deki "yayılmayı" temsil ettiğinin ne anlama geldiğini görmek için ($\langle x\rangle+\sigma$) ile ($\langle x\rangle-\sigma$) noktalarını işaretleyiniz. Parçacığın bu aralığın dışında bulunma olasılığı ne kadardır?

1.5. MOMENTUM

Ψ durumunda bulunan bir parçacık için, x'in beklenen değeri

$$\boxed{\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\Psi(x,t)|^2\,dx.} \qquad [1.28]$$

dir. Gerçekte bunun anlamı nedir? Bunun, bir parçacığın konumunu tekrar tekrar ölçtüğünüzde, $\int x|\Psi|^2\,dx$'in bulacağınız sonuçların ortalaması anlamına gelmediğini vurgulayalım. Tersine, sonucu belirsiz olan ilk ölçüm dalga fonksiyonunun gerçekte elde edilen değerde konuşlanan keskin bir tepeye çökmesine neden olacaktır ve eğer oldukça hızlı olunursa ardından gelen ölçümler de aynı sonucu verecektir. O zaman, $\langle x\rangle$ *tümü aynı* Ψ durumunda bulunan parçacıklar üzerinde gerçekleştirilen ölçümlerin ortalamasıdır. Bunun için ya her bir ölçümden sonra parçacığı başlangıçtaki durumuna döndürecek bir yol geliştirmelisiniz ya da her biri aynı Ψ durumunda olan parçacıklar **topluluğu** hazırlayarak tümünün konumlarını ölçmelisiniz. $\langle x\rangle$ bu *ölçüm sonuçlarının* ortalamasıdır (Bir rafın üzerine dizilmiş ve her birinde Ψ durumunda bulunan bir parçacık olan şişeler düşünelim. Her bir şişenin başında elinde bir cetvelle bir yüksek lisans öğrencisi olsun ve bir sinyal verildiğinde her biri kendi şişelerindeki parçacıkların konumlarını ölçsünler. Sonra sonuçların $|\Psi|^2$ ile eşleşecek şekilde bir histogramını kuralım ve ortalamayı hesaplayalım. Bulunan sonuç $\langle x\rangle$ ile uyumlu olmalıdır. (Kuşkusuz sonlu bir örneklem kullandığımızdan mükemmel bir uyum bekleyemeyiz, ama ne kadar çok şişe kullanırsak o kadar yakın değerler elde ederiz). Kısaca, *beklenen değer özdeş olarak hazırlanmış bir sistemler topluluğunda yapılan ölçümlerin ortalaması olup*, tek ve aynı sistem üzerinde yapılan ardışık ölçümlerin ortalaması değildir.

Şimdi, zaman ilerledikçe Ψ'nin zaman bağımlılığı yüzünden $\langle x\rangle$ değişecektir ve bunun ne kadar hızlı değiştiğini bilmek isteyebiliriz. 1.25 ve 1.28 nolu denklemlerden hareketle

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \int x\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2\,dx = \frac{i\hbar}{2m}\int x\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)dx \qquad [1.29]$$

olduğu görülebilir[13].

[13] Kargaşadan uzak durmak için integralin limitlerini yazmayacağız.

Kısmi integrasyon[14] kullanılarak bu ifadeyi basitleştirmek mümkündür:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m}\int\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)dx. \qquad [1.30]$$

(Burada $\partial x/\partial x = 1$ olduğunu kullandım, ayrıca Ψ, ($\pm$) sonsuzda sıfıra gittiği için sınır terimini düşürdüm). İkinci terime tekrar kısmi integrasyon uygulayarak

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m}\int\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\,dx \qquad [1.31]$$

sonucuna ulaşırız.

Bu sonucu nasıl kullanacağız? x'in *beklenen* değerinin "hızından" bahsettiğimizi ve bunun *parçacığın* hızıyla aynı olmadığına dikkat ediniz. Şu ana dek gördüğümüz hiçbir şey parçacığın hızını hesaplamamıza imkân vermemekte. Aslında kuantum mekaniğinde hızın ne *anlama* geldiği de çok açık değildir; ölçüm öncesinde parçacık belirli bir konuma sahip değilse, iyi tanımlanmış bir hıza da sahip olamaz. Akla uygun olarak sorabileceğimiz tek şey belirli bir değeri elde etme *olasılığıdır*. 3. Bölümde verilen bir Ψ durumunda hız için olasılık yoğunluğunun nasıl kurulacağını göreceğiz. Bu aşamadaki amacımız için *hızın beklenen değerinin konumun beklenen değerinin zaman türevine eşit olduğunu* kabul etmek yeterlidir:

$$\langle v\rangle = \frac{d\langle x\rangle}{dt}. \qquad [1.32]$$

1.31 nolu denklem bize Ψ'den hareketle $\langle v\rangle$'nin nasıl hesaplanacağını söyler.

Alışılmış olan aslında, hız yerine **momentumla** ($p = mv$) çalışmaktır:

$$\boxed{\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -i\hbar\int\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)dx.} \qquad [1.33]$$

[14] Çarpım kuralından

$$\frac{d}{dx}(fg) = f\frac{dg}{dx} + \frac{df}{dx}g$$

elde edilir ve buradan

$$\int_a^b f\frac{dg}{dx}\,dx = -\int_a^b \frac{df}{dx}g\,dx + fg\Big|_a^b.$$

olur. İntegral işareti altındaki çarpımda çarpanlardan birindeki türev işlemini diğerinin üzerine yapıştırabilirsiniz; bu durumda elinizde fazladan bir eksi işareti ve sınır terimi olur.

$\langle x\rangle$ ve $\langle p\rangle$ ifadelerini daha anlamlı bir formda yazalım:

$$\langle x\rangle = \int\Psi^*(x)\Psi\,dx, \qquad [1.34]$$

$$\langle p\rangle = \int\Psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\,dx. \qquad [1.35]$$

Bu durumda, kuantum mekaniğinde x **operatörünün**[15] konumu "temsil ettiğini", $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ operatörünün momentumu "temsil ettiğini" söyleriz; beklenen değerleri hesaplamak için uygun operatörü Ψ^* ile Ψ arasına "sandviç" yapar ve integre ederiz.

Bu oldukça zekice, peki ya diğer büyüklükler? Aslında *tüm* klasik dinamik değişkenler konum ve momentum cinsinden ifade edilebilirler. Örneğin, kinetik enerji

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

ve açısal momentum

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times m\mathbf{v} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$$

dir (şüphesiz son yazılan bir boyuttaki harekette görülmez). $Q(x,p)$ gibi *herhangi* bir büyüklüğün beklenen değerini hesaplamak için p yerine $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ yazıp operatörü Ψ^* ile Ψ arasına yerleştirerek integre ederiz:

$$\boxed{\langle Q(x,p)\rangle = \int\Psi^*Q\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\,dx.} \qquad [1.36]$$

Örneğin, kinetik enerjinin beklenen değeri

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\,dx \qquad [1.37]$$

şeklindedir.

1.36 nolu denklem, Ψ durumunda bulunan bir parçacık için herhangi bir dinamik büyüklüğün beklenen değerini hesaplamanın reçetesidir ve 1.34 ve 1.35 nolu denklemler bunun özel halleridir. Bu kesimde 1.36 nolu denklemin Born'un istatistiksel yorumu altında akla uygun olmasını sağlamaya çalıştım. Aslına bakılırsa klasik mekanikle karşılaştırıldığında bu, hesap yapmak için yeni, radikal bir yol göstermekte; 3. Bölümde bu konuya tekrar dönerek sağlam teorik temelleri kurmadan önce bu formülün *kullanımı* üzerine biraz pratik yapmak iyi olur. Bu esnada formülü bir *aksiyom* olarak ele almayı isterseniz, benim için bir sakınca oluşturmaz.

[15] "Operatör" kendisini takip eden fonksiyon üzerinde bir *işlemi* tanımlar (üzerine etkidiği fonksiyonu başka bir fonksiyona dönüştürür – çevirmenin notu). Konum operatörü x ile *çarpma* işlemini, momentum operatörü x'e göre *türev almayı* ve sonucu $-i\hbar$ ile çarpma işlemini tanımlar. Bu kitaptaki *tüm* operatörler türevler (d/dt, d^2/dt^2, $\partial^2/\partial x\partial y$ vs.), çarpanlar (2, i, x^2 vs.) veya bunların kombinasyonları olacaktır.

Problem 1.6 1.29 nolu denklemde kısmi integrasyonu neden doğrudan ortadaki ifadeye uygulayamazsınız? $\partial x/\partial t = 0$ olduğuna dikkat ederek, zaman türevini x'in üzerine çekiniz ve $d\langle x\rangle/dt = 0$ sonucuna ulaşınız.

* **Problem 1.7** $d\langle p\rangle/dt$'yi hesaplayınız. *Yanıt:*

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle. \qquad [1.38]$$

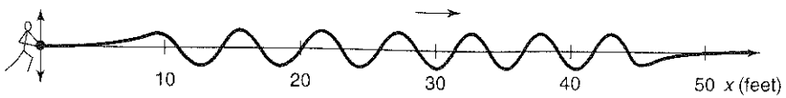
1.32 (ya da 1.33'ün ilk kısmı) ve 1.38 nolu denklemler, *beklenen değerlerin klasik yasalara uyduğunun* ifade den **Ehrenfest teoreminin** örnekleridir.

Problem 1.8 Potansiyel enerjiye V_0 gibi bir sabitin ("sabit" ile x ve t'den bağımsız olduğunu kastediyoruz) eklendiğini varsayınız. *Klasik* mekanikte bu hiçbir şeyi değiştirmez, peki ya *kuantum* mekaniğinde? Dalga fonksiyonunun $\exp(-iV_0t/\hbar)$ şeklinde zamana bağımlı bir faz çarpanı kazanacağını gösteriniz. Bu dinamik bir değişkenin beklenen değerini nasıl etkileyecektir?

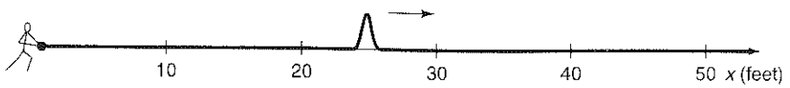
1.6 BELİRSİZLİK İLKESİ

Çok uzun bir halatın bir ucundan tuttuğunuzu ve yukarı aşağı ritmik olarak sallayarak 1.7 nolu şekildeki gibi bir dalga ürettiğinizi varsayın. Bir kişi size "dalga tam olarak nerededir?" diye sorarsa, onun biraz çatlak olduğunu düşünürsünüz. Dalga tam olarak *hiç*bir yerdedir ve olsa olsa sözgelimi 50 feetlik bir bölgeye yayılmıştır. Öte yandan, bu kişi *dalgaboyu* ne kadardır diye sorarsa ona anlamlı bir yanıt verebilirsiniz. Yaklaşık 6 feet. Tersine, halata ani bir hareket (dalga atması) verseydiniz, 1.8 nolu şekildeki gibi halat üzerinde hareket eden oldukça dar bir atma elde ederdiniz. Bu durumda ilk soru (dalga tam olarak nerededir?) makul, ikincisi (dalgaboyu ne kadardır?) anlamsız olacaktır. Hareket periyodik olmadığından dalgaboyunu nasıl tanımlayacaksınız? Kuşkusuz dalganın *oldukça iyi* yerelleştiği ve dalgaboyunun *oldukça iyi* tanımlı olduğu ara durumlar da betimleyebilirsiniz ama burada kaçınılmaz bir şekilde bir takas söz konusu: dalganın konumu ne kadar belirliyse dalgaboyu o kadar belirsiz olur ve bunun tersi de doğrudur[16]. Fourier analizinde bir teorem tüm bunları tam olarak vermekte, ancak bu aşamada yalnızca nitel bir tartışma yapıyoruz.

[16] İşte bu yüzden bir pikolo flüt çalgıcısı doğru perdeden çalmak zorunda iken, kontrbas çalgıcısı bahçe eldiveniyle bile çalabilir. Pikolo flüt için altmışdörtte bir nota çok sayıda tam devir içerir ve frekans (burada uzay yerine zaman bölgesinde çalışıyoruz) iyi tanımlanmıştır. Oysa, daha düşük ses aralığında kontrbas için altmış dörtte bir nota yalnızca birkaç devir içerir ve tüm duyduğumuz şey temiz bir tonda olmayan "ommph" gibi bir şeydir.



ŞEKİL 1.7: İyi tanımlı bir *dalgaboyuna* fakat kötü tanımlı bir *konuma* sahip bir dalga.



ŞEKİL 1.8: İyi tanımlı bir *konuma* fakat kötü tanımlı bir *dalgaboyuna* sahip bir dalga.

Şüphesiz bu sonuç *herhangi* bir dalga hareketine ve özellikle de kuantum mekaniksel dalga fonksiyonuna uygulanabilir. Ψ'nin dalgaboyu ile parçacığın momentumu arasındaki ilişki **de Broglie formülüyle**[17] verilir:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \qquad [1.39]$$

Böylelikle *dalgaboyunda* bir yayılma *momentumda* bir yayılmaya karşılık gelir. Bu durumda genel gözlemimiz bir parçacığın konumu ne kadar belirliyse momentumunun o kadar belirsiz olacağını söyler. Nicel olarak

$$\boxed{\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}} \qquad [1.40]$$

olur. Burada σ_x, x'deki standart sapma ve σ_p, p'deki standart sapmadır. Bu bağıntı Heisenberg'in ünlü **belirsizlik ilkesidir** (3. Bölümde bunu kanıtlayacağız, ancak 2. Bölümdeki örneklerin üzerinde bunu sınayabileceğiniz için burada bahsettik).

Belirsizlik ilkesinin *ne anlama* geldiğini lütfen iyi anlayın: konum ölçümleri gibi momentum ölçümleri de kesin yanıtlar verirler. Buradaki "yayılma" özdeş olarak hazırlanmış sistemler üzerindeki ölçümlerin özdeş sonuçlar vermediğine işaret etmektedir. Dilerseniz, Ψ'yi bir noktada yerelleşmiş keskin bir tepe şeklinde tanımlayarak ardışık konum ölçümlerinin birbirine çok yakın değerler vereceği bir durum kurgulayabilirsiniz, ama karşılığında bir bedel ödeyeceksiniz: bu durum üzerinde yapılacak momentum ölçümleri oldukça dağınık olacaktır. Ya da Ψ'yi uzun sinüzoidal

[17] Bunu ders sırasında yeri gelince kanıtlayacağız. Çoğu yazar de Broglie formülünü momentumun $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ operatörüyle verileceği sonucuna ulaştıkları bir *aksiyom* olarak alırlar. Bu kavramsal olarak daha temiz bir yaklaşım olsa da daha sonraya saklayacağımız oyalayıcı matematiksel zorluklar barındırır.

bir dalga alarak tekrarlanabilir momentum değerleri veren bir durum hazırlayabilirsiniz fakat bu kez de konum ölçümleri dağınık olacaktır. Şüphesiz eğer kötü bir ruh hali içindeyseniz, ne konumun ne de momentumun iyi tanımlı olduğu bir durum da yaratabilirsiniz. 1.40 nolu denklem bir *eşitsizlik* olup σ_x ve σ_p'nin ne kadar *büyüklükte* olabileceği üzerine bir sınırlama getirmez. Örneğin çok sayıda tümsekler ve çukurlar içeren, periyodik yapısı olmayan bir Ψ seçerek bunu görebilirsiniz.

---

* **Problem 1.9** m kütleli bir parçacık

$$\Psi(x,t) = Ae^{-a[(mx^2/\hbar)+it]}$$

ile verilen bir durumdadır. Burada A ve a pozitif, reel sabitlerdir.

(a) A'yı bulunuz.

(b) Ψ hangi $V(x)$ potansiyel enerji fonksiyonu için Schrödinger denklemini sağlar?

(c) x, x^2, p ve p^2'nin beklenen değerlerini hesaplayınız.

(d) σ_x ve σ_p'yı bulunuz. Bunların çarpımı belirsizlik ilkesiyle tutarlı mıdır?

---

1. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

Problem 1.10 π'nin ondalık açılımındaki ilk 25 basamağı (3, 1, 4, 1, 5, 9...) göz önüne alalım.

(a) Bu kümeden rastgele bir eleman seçtiğimizde, herbir rakamın (0, 1, 2,...9) seçilme olasılığı nedir?

(b) En olası rakam hangisidir? Medyan rakam değeri nedir? Ortalama değer nedir?

(c) Bu dağılımın standart sapmasını bulunuz.

Problem 1.11 Bozuk bir hız göstergesinin ibresi, bir fiske vurulduğunda 0 ile π arasındaki herhangi bir açıda durgun hale gelebilecek şekilde göstergenin her iki uç noktası arasında ileri geri serbestçe hareket edebilmektedir.

(a) Olasılık yoğunluğu, $\rho(\theta)$'yi belirleyiniz. *Yardım:* $\rho(\theta)d\theta$ ibrenin θ ile $(\theta+d\theta)$ arasında durgun hale gelme olasılığıdır. $\rho(\theta)$'nın grafiğini $-\pi/2$'den $3\pi/2$'ye kadar çiziniz (kuşkusuz, bu aralığın bir parçası dışlanacaktır ve ρ bu bölgede sıfırdır). Toplam olasılığın 1 olmasını sağlayın.

(b) Bu dağılım için $\langle\theta\rangle$, $\langle\theta^2\rangle$ ve σ'yı hesaplayınız.

(c) $\langle\sin\theta\rangle$, $\langle\cos\theta\rangle$ ve $\langle\cos^2\theta\rangle$'yı hesaplayınız.

Problem 1.12 Önceki problemdeki düzeneği göz önüne alalım, ancak bu kez ibrenin ucunun x koordinatıyla ilgileniyoruz. Yani ibrenin yatay eksen üzerindeki "izdüşümü" ya da "gölge"sine bakıyoruz.

(a) $\rho(x)$ olasılık yoğunluğunu belirleyiniz. $\rho(x)$'in x'e göre grafiğini $-2r$'den $+2r$'ye kadar çiziniz. Burada r ibrenin uzunluğudur. Toplam olasılığın 1 olmasını sağlayın. *Yardım:* $\rho(x)dx$ izdüşümün x ile $(x+dx)$ arasında olma olasılığıdır. 1.11 nolu problemden θ'nın verilen bir aralıkta olma olasılığını biliyorsunuz. Burada soru; $d\theta$ aralığına hangi dx aralığı karşılık gelir?

(b) Bu dağılım için $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ ve σ'yı hesaplayınız. Bu sonuçları 1.11 nolu problemin (c) şıkkından nasıl elde edebileceğinizi açıklayınız.

** **Problem 1.13 Buffon'un iğnesi.** l uzunluğundaki bir iğne rastgele olarak satırları arasındaki mesafe l olan çizgili bir sayfanın üzerine düşürülüyor. İğnenin bir satır çizgisiyle kesişme olasılığı nedir? *Yardım:* 1.12 nolu probleme bakınız.

Problem 1.14 $P_{ab}(t)$, t anında bir parçacığın $a < x < b$ aralığında bulunma olasılığı olsun

(a)

$$\frac{dP_{ab}}{dt} = J(a,t) - J(b,t)$$

olduğunu gösteriniz. Burada

$$J(x,t) \equiv \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)$$

olarak verilir. $J(x, t)$'nin birimi nedir? *Açıklama:* J **olasılık akım yoğunluğu** olarak adlandırılır. Çünkü geçmişten x noktasına "akan" olasılık oranını vermektedir. $P_{ab}(t)$ arttıkça göz önüne alınan bölgeye bir uçtan girip diğer uçtan çıkan olasılık artar.

(b) 1.9 nolu problemde verilen dalga fonksiyonu için olasılık akım yoğunlunu bulunuz (korkarım bu iyi bir örnek değil, ama ders sırasında yeni geldikçe daha iyi örneklerle karşılaşacağız).

Problem 1.15 "Yaşam" süresi τ ile verilen ve bozunmaya uğrayan **kararsız bir parçacık tanımlamak istediğinizi varsayın. Bu durumda parçacığın bir yerde bulunma olasılığı sabit *olmayacak* zamanla (sözgelimi) üstel olarak azalacaktır:

$$P(t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx = e^{-t/\tau}.$$

Bu sonuca ulaşmanın kabataslak bir yolu şöyledir: 1.24 nolu denklemde açıkça söylemesek de V'yi (potansiyel enerji) *reel* kabul ettik. Bu akla yatkın gelmekle birlikte 1.27 nolu denklemle verilen ve kutsal olarak kabul ettiğimiz "olasılığın korunumuna" yol açmakta. V'ye

$$V = V_0 - i\Gamma$$

gibi sanal bir kısım eklersek ne olacak? Burada V_0 doğru potansiyel enerji ve Γ pozitif, reel bir sabittir.

(a) Bu durumda 1.27 nolu denklem yerine

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{2\Gamma}{\hbar} P$$

elde edeceğimizi gösteriniz.

(b) $P(t)$'yi çözerek parçacığın yaşam süresini Γ cinsinden bulunuz.

Problem 1.16 Schrödinger denkleminin Ψ_1 ve Ψ_2 gibi normlanabilen herhangi iki çözümü için

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_2\, dx = 0$$

olduğunu gösteriniz.

Problem 1.17 Bir parçacık $t = 0$ anında

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} A(a^2 - x^2), & -a \le x \le +a, \\ 0, & \text{diğer yerlerde} \end{cases}$$

ile verilen dalga fonksiyonuyla temsil edilmektedir.

(a) Normlama sabiti A'yı belirleyin.

(b) $t = 0$ anında x'in beklenen değeri nedir?

(c) $t = 0$ anında p'nin beklenen değeri nedir? ($\langle p\rangle = m d\langle x\rangle/dt$'den elde *edilemeyeceğine* dikkat ediniz. Niçin?)

(d) x^2'nin beklenen değerini bulun.

(e) p^2'nin beklenen değerinin bulun.

(f) x'deki belirsizliği (σ_x) bulun.

(g) p'deki belirsizliği (σ_p) bulun.

(h) Sonuçlarınızın belirsizlik ilkesiyle tutarlı olup olmadığını kontrol edin.

Problem 1.18 Genel olarak, göz önüne alınan problemdeki parçacığın de Broglie dalgaboyu (h/p) sistemin karakteristik boyutundan (d) büyükse kuantum mekaniği geçerli olur. T (Kelvin) sıcaklığında ısıl denge durumunda bir parçacığın ortalama kinetik enerjisi

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2} k_B T$$

ile verilir. Burada k_B Boltzmann sabitidir. O zaman tipik de Broglie dalgaboyu

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_BT}} \qquad [1.41]$$

şeklini alır. Bu problemin amacı hangi sistemlerin kuantum mekaniği ile betimleneceğini ve hangilerinin klasik olarak tanımlanacağını belirlemektir.

(a) Katılar: Tipik bir katıda örgü aralığı d = 0.3 nm civarındadır. Bir katıdaki serbest[18] *elektronların* hangi sıcaklığın altında kuantum mekaniksel davranacağını bulunuz. Bir katıdaki *çekirdekler* hangi sıcaklığın altında kuantum mekanikseldir? (Tipik olarak sodyumu göz önüne alınız) *Alınacak Ders:* Bir katıdaki serbest elektronlar *daima* kuantum mekanikseldir; çekirdekler ise hiçbir zaman kuantum mekaniksel değildir. 4 K'in altındaki helyum hariç atomlararası uzaklık aynı olduğundan benzer sonuçlar sıvılar için de doğrudur.

(b) Gazlar: Basıncı P olan bir ideal gazdaki atomlar hangi sıcaklıklarda kuantum mekaniksel davranırlar? *Yardım:* Atomlararası uzaklığı belirlemek için ideal gaz yasasını ($PV = Nk_BT$) kullanın. *Yanıt:* $T < (1/k_B)(\hbar^2/3m)^{3/5}P^{2/5}$. Açıkça bir gazın kuantal davranış göstermesi için m'in mümkün olduğunca *küçük*, P'nin mümkün olduğunca *büyük* olmasını isteriz. Atmosferik basınçtaki helyum için sayısal değerleri yerlerine koyun. Sıcaklığın 3 K ve atomlararası uzaklığın yaklaşık 1 cm olduğu dış uzaydaki hidrojen kuantum mekaniksel midir? (H_2 değil, H_1 olduğunu varsayın).

---

[18] Bir katıda iç kabuktaki elektronlar belli bir çekirdeğe bağlıdır ve bunlar için ilgili büyüklük atomun yarıçapıdır. Ancak dış kabuktaki elektronlar bağlı değildirler ve bunlar için ilgili büyüklük örgü aralığıdır. Bu problem *dış kabuktaki* elektronlarla ilgilidir.

2. BÖLÜM

ZAMANDAN BAĞIMSIZ SCHRÖDINGER DENKLEMİ

2.1 KARARLI DURUMLAR

1. Bölümde dalga fonksiyonu ve bunun ilgili büyüklüklerin hesaplanmasında nasıl kullanılacağı konusunda çok konuştuk. Artık oyalanmayı bırakarak yüzleşmemiz gereken ana soruya gelelim: $\Psi(x, t)$'yi *nasıl bulacağız*? Belirli bir $V(x, t)$ potansiyeli[1] için Schrödinger denklemini

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \qquad [2.1]$$

çözerek. Gerek bu bölüm gerekse kitabın çoğu kısmında V'nin t'den *bağımsız* olduğunu kabul edeceğiz. Bu durumda Schrödinger denklemi, fizikçilerin herhangi bir kısmi türevli diferansiyel denklemi çözerken ilk giriştikleri yöntem olan **değişkenlere ayırma** yöntemiyle çözülebilir. Bu yöntemde çözümleri basit *çarpımlar*

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\,\varphi(t) \qquad [2.2]$$

şeklinde ararız. Burada (*küçük*) ψ yalnızca x'in ve φ yalnızca t'nin fonksiyonlarıdır. Bu anlamsız bir kısıtlama ve bu yolla tüm çözümlerin küçük bir alt kümesinden daha fazlasını elde etmeyi ümit edemeyiz. Ama durun bir dakika, elde edeceğimiz çözümler

[1] "Potansiyel enerji fonksiyonu" demek kaba gözüktüğünden çoğu kişi, birim yük başına potansiyel enerji olan *elektriksel* potansiyel ile nadiren karıştırılırsa da, V'yi "potansiyel" olarak adlandırmaktadır.

büyük merak uyandıracak. Üstelik, değişkenlere ayırma yönteminin tipik özelliği olan ayrılabilen çözümleri bir araya getirerek son aşamada en genel çözümü *kuracağız*.

Ayrılabilir çözümler için

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \psi\frac{d\varphi}{dt}, \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2\psi}{dx^2}\varphi$$

olur (artık *tam* türev kullandığımıza dikkat ediniz). Schrödinger denklemi

$$i\hbar\psi\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\varphi + V\psi\varphi$$

halini alır. Her iki tarafı $\psi\varphi$'e bölerek

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V \qquad [2.3]$$

elde edilir. Bu denklemin sol tarafı yalnızca t değişkenine sağ tarafı ise yalnızca x değişkenine bağlıdır[2]. Böyle bir eşitlik ancak her iki taraf *aynı sabite* eşitse geçerli olur. Aksi takdirde t'yi değiştirerek sağ tarafa hiç dokunmadan sol tarafı değiştirebilirdik ve bu durumda artık her iki taraf birbirine eşit olmazdı (Bu çok önemli ve zarif bir düşünce, eğer sizin için yeni ise emin olmak için biraz durun ve üzerinde düşünün). Birazdan göreceğimiz nedenlerle ayrıştırma sabitini E ile gösterelim. O zaman

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

olur. Düzenlenirse

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}\varphi \qquad [2.4]$$

elde edilir. Sağ taraf

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V = E$$

olur. Bu denklem düzenlenirse

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi} \qquad [2.5]$$

elde edilir.

Değişkenlere ayırma yöntemi *kısmi* türevli bir diferansiyel denklemi iki tane *tam* türevli (sıradan) diferansiyel denkleme (2.4 ve 2.5 nolu denklemler) çevirdi. Bu denklemlerden

[2] V hem x hem de t'nin fonksiyonu olsaydı bunun doğru olmayacağına dikkat ediniz.

birincisinin (2.4 nolu denklem) çözümü oldukça kolaydır (*dt* ile çarpıp integre ediniz) ve genel çözüm Cexp($-i\,Et/\hbar$) dir. İlgilendiğimiz büyülük $\psi\varphi$ çarpımı olduğundan C sabitini ψ'nin içine soğurabiliriz. O zaman

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \qquad [2.6]$$

elde edilir. İkinci denklem (2.5 nolu denklem) **zamandan bağımsız Schrödinger denklemi** olarak adlandırılır ve $V(x)$ potansiyeli verilmeden buradan öteye gidemeyiz.

Bu bölümün kalan kısmında çeşitli basit potansiyeller için zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümleri incelenecektir. Ama buna başlamadan önce şu soruyu sormaya hakkınız var: *ayrılabilen çözümler niçin önemlidir*? Ne de olsa, zamana bağımlı Schrödinger denkleminin çoğu çözümü $\psi(x)\varphi(t)$ formunda değildir. Bu soruya ikisi fiziksel, biri matematiksel olmak üzere üç tane yanıt sunacağız:

1. Ayrılabilen çözümler **kararlı (durağan) durumlardır**. Dalga fonksiyonunun kendisi

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \qquad [2.7]$$

şeklinde açıkça t'ye bağımlı olmasına rağmen, *olasılık yoğunluğu*

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*\Psi = \psi^* e^{+iEt/\hbar}\psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2 \qquad [2.8]$$

zamandan bağımsızdır.[3] Bu durumda, herhangi bir dinamik değişkenin hesaplanan beklenen değeri de zamandan bağımsız olur. 1.36 nolu denklem

$$\langle Q(x,p)\rangle = \int \psi^* Q\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi\, dx \qquad [2.9]$$

şeklini alır. *Her beklenen değer zamandan bağımsızdır*. O zaman $\varphi(t)$ çarpanını bütünüyle bırakıp Ψ yerine ψ'yi kullanabiliriz. (aslında, ψ'yi "dalga fonksiyonu" olarak adlandırmak yaygın olmakla birlikte bu özensiz seçim tehlikeli olabilir. Doğru dalga fonksiyonunun daima zamana bağımlı üstel çarpan içereceğini unutmayınız). Özellikle $\langle x\rangle$ sabit olur ve bu nedenle $\langle p\rangle = 0$'dır. Kararlı durumda hiçbir şey zamanla değişmez.

2. Ayırabilen çözümler belirli *toplam enerji* değerine karşılık olan durumları temsil ederler. Klasik mekanikte, toplam enerji (kinetik+potansiyel) **Hamiltonyen** olarak adlandırılır ve

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \qquad [2.10]$$

olarak verilir.

[3] Normlanabilir çözümler için E *reel* olmalıdır (2.1 nolu problemin (a) şıkkına bakınız)

Karşılık olan Hamiltonyen operatörü kanonik atama $p \to (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ ile elde edilir ve

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \qquad [2.11]$$

olarak verilir.[4] Böylece zamandan bağımsız Schrödinger denklemi (2.5 nolu denklem)

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad [2.12]$$

olarak yazılabilir. Toplam enerjinin beklenen değeri

$$\langle H\rangle = \int \psi^*\hat{H}\psi\, dx = E\int |\psi|^2\, dx = E\int |\Psi|^2\, dx = E \qquad [2.13]$$

olur (Ψ'nin normlanmış olmasının ψ'nin normlanmasını zorunlu kıldığına dikkat ediniz). Ayrıca

$$\hat{H}^2\psi = \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E(\hat{H}\psi) = E^2\psi$$

olur ve böylece

$$\langle H^2\rangle = \int \psi^*\hat{H}^2\psi\, dx = E^2\int |\psi|^2\, dx = E^2$$

elde edilir. O zaman H'nın varyansı

$$\sigma_H^2 = \langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2 = E^2 - E^2 = 0 \qquad [2.14]$$

olur. $\sigma = 0$ ise, örneklem içindeki her üyenin aynı değere sahip olacağını ve dağılımın yaygın olmayacağını hatırlayalım. *Sonuç: ayrılabilen bir çözümle temsil edilen durumda her toplam enerji ölçümü aynı E değerini verir* (bu nedenle ayrıştırma sabitini E harfiyle gösterdik).

3. Genel çözüm ayrılabilen çözümlerin **lineer bir kombinasyonudur**. Birazdan göreceğimiz gibi zamandan bağımsız Schrödinger denklemi, her biri ayrıştırma sabitinin belirli bir değerine (E_1, E_2, E_3,....) karşılık gelen sonsuz tane çözüm ($\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$,....) verir. Böylece her bir **izin verilen enerji** değeri için farklı bir dalga fonksiyonu elde edilir:

$$\Psi_1(x,t) = \psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}, \quad \Psi_2(x,t) = \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}, \quad \ldots.$$

Zamana bağımlı Schrödinger denklemi (2.1 nolu denklem) kendinizin de kolayca kontrol edebileceğiniz bir özelliğe sahiptir: Çözümlerin herhangi bir lineer kombinasyonu[5] da aynı denklemin çözümüdür.

[4] Bir karışıklık söz konusu olduğunda operatörü temsil ettiği dinamik değişkenden ayırmak için üzerinde bir "şapka" (^) ile göstereceğiz.

[5] $f_1(z), f_2(z),\ldots$ fonksiyonlarının **lineer bir kombinasyonu**

$$f(z) = c_1f_1(z) + c_2f_2(z) + \ldots,$$

olarak verilen ifadedir. Burada $c_1, c_2,\ldots$ keyfi kompleks sabitlerdir.

Ayrılabilen çözümleri bulduktan sonra en genel çözümü

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \qquad [2.15]$$

şeklinde kurabiliriz. Yani zamana bağımlı Schrödinger denkleminin her çözümü bu formda yazılabilir. Buradaki sorun, ele alınan problemin başlangıç koşullarına uyacak şekilde doğru c_1, c_2,... sabitlerini bulmaktır. Gelecek kesimlerde bu sürecin pratikte nasıl sonuç verdiğini göreceksiniz. 3. Bölümde süreci daha zarif bir dille yeniden ifade edeceğiz, ancak buradaki ana fikir şudur: zamandan bağımsız Schrödinger denklemini bir kez çözdükten sonra yapılması gereken *zamana bağımlı* Schrödinger denkleminin çözümlerini kurmaktır ve ilke olarak bu işlem basit ve oldukça açıktır.

Son dört sayfada birçok şeyle karşılaştık. Biraz farklı bir bakış açısıyla bunları yeniden özetleyelim. Zamandan bağımsız bir $V(x)$ potansiyeli ile başlangıç dalga fonksiyonu $\Psi(x, 0)$ verilmiş olsun. Yapılması gereken, daha sonraki bir t zamanı için dalga fonksiyonu $\Psi(x, t)$'yi bulmaktır. Bunu için zamana bağımlı Schrödinger denklemini (2.1 nolu denklem) çözmelisiniz. Burada uygulanacak strateji[6] ilk olarak zamandan bağımsız Schrödinger denklemini (2.5 nolu denklem) çözmektir. Böylece elinizde her biri belirli bir enerji değerine (E_1, E_2, E_3,...) karşılık olan, sonsuz tane çözümden oluşan ($\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$,...) bir küme olacaktır. $\Psi(x, 0)$'a uydurmak için bu çözümlerin lineer kombinasyonunu

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \qquad [2.16]$$

olarak ifade ederiz. Buradaki mucize şudur: uygun bir c_1, c_2, c_3,... sabit takımı seçimiyle *her zaman* belirli bir başlangıç durumunu elde edebilirsiniz. $\Psi(x, t)$'yi oluşturmak için her bir terimi kendi karakteristik zaman bağımlılığı $\exp(-iE_n t/\hbar)$ ile çarpmak yeterlidir. Yani genel çözüm

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x,t)} \qquad [2.17]$$

şeklinde olur.

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \qquad [2.18]$$

[6] Nadiren de olsa, zamana bağımlı Schrödinger denklemini değişkenlere ayırma yöntemine başvurmadan çözebilirsiniz (örnek olarak 2.49 ve 2.50 nolu problemlere bakınız). Ancak bu tür durumlar oldukça seyrektir.

Ayrılabilen çözümlerin kendileri *kararlı* durumlardır. Yani, tüm olasılıklar ve beklenen değerler zamandan bağımsızdır. Ancak, 2.17 nolu denklemle verilen genel çözüm kesinlikle bu özelliğe sahip *değildir*; farklı kararlı durumlar için enerjiler farklıdır ve $|\Psi|^2$'yi hesapladığınızda üstel fonksiyonlar kaybolmazlar.

Örnek 2.1 Bir parçacığın başlangıç durumunun *iki* kararlı durumun lineer bir kombinasyonu olduğunu varsayalım, yani

$$\Psi(x,0) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$$

olarak verilsin (basit olsun diye c_n sabitleriyle $\psi_n(x)$ durumlarını *reel* kabul edeceğim). Daha sonraki zamanlar için dalga fonksiyonu $\Psi(x, t)$ nedir? Olasılık yoğunluğunu bulun ve hareketi tanımlayın.

Çözüm: İlk kısım oldukça kolay

$$\Psi(x,t) = c_1\psi_1(x)e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2 t/\hbar},$$

Burada E_1 ve E_2, ψ_1 ve ψ_2 durumlarına karşılık olan enerjilerdir. Olasılık yoğunluğunu bulalım.

$$\begin{aligned}|\Psi(x,t)|^2 &= (c_1\psi_1 e^{iE_1 t/\hbar} + c_2\psi_2 e^{iE_2 t/\hbar})(c_1\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2\psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}) \\ &= c_1^2\psi_1^2 + c_2^2\psi_2^2 + 2c_1c_2\psi_1\psi_2\cos[(E_2 - E_1)t/\hbar]\end{aligned}$$

(Burada sonucu basitleştirmek için $\exp i\theta = \cos\theta + i\sin\theta$ **Euler formülünü** kullandık). Açıkça görüldüğü gibi, olasılık yoğunluğu $(E_2-E_1)/\hbar$ açısal frekansıyla sinüzoidal olarak *titreşmektedir* ve kararlı bir durum değildir. Hareketi oluşturmak için farklı enerjili durumların lineer *kombinasyonunun* kullanıldığına dikkat ediniz[7].

***Problem 2.1** Aşağıdaki üç teoremi kanıtlayınız.

(a) Normlanabilir çözümler için ayrıştırma sabiti E *reel* olmalıdır. *Yardım*: 2.7 nolu denklemdeki E'yi $E_0+i\Gamma$ olarak yazın. Burada E_0 ve Γ reeldir. Tüm t değerleri için 1.20 nolu denklemin geçerli olabilmesi için Γ'nın sıfır olması gerektiğini gösterin.

(b) Zamandan bağımsız dalga fonksiyonu $\psi(x)$ daima reel seçilebilir (aksine $\Psi(x, t)$ daima komplekstir). Bu, zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin her çözümünün reel olduğu anlamına gelmez. Teoremin söylediği şudur: eğer reel olmayan bir çözüme sahipseniz, bu çözüm daima aynı enerjili reel çözümlerin lineer bir kombinasyonu olarak ifade edilebilir. Böylece ψ'i reel seçmeniz *mümkün olur*. *Yardım*: Verilen bir E için $\psi(x)$ 2.5 nolu denklemi sağlıyorsa bunun kompleks eşleniği de aynı denklemi sağlar. Bu durumda $(\psi+\psi^*)$ ve $i(\psi-\psi^*)$ reel lineer kombinasyonları da aynı denklemi sağlarlar.

[7] Bu durum www.phys.uri.edu/~yoon/deepwellmain.html adresli web sitesinde küçük bir uygulamayla örneklenmiştir.

(c) $V(x)$ **çift fonksiyon,** yani $V(-x) = V(x)$ ise $\psi(x)$ daima çift ya da tek fonksiyon olarak alınabilir. *Yardım*: Verilen bir E için $\psi(x)$ 2.5 nolu denklemi sağlıyorsa $\psi(-x)$ de sağlar. Böylelikle $\psi(x) \pm \psi(-x)$ çift ya da tek lineer kombinasyonları da aynı denklemi sağlarlar.

***Problem 2.2** Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin normlanabilir her çözümü için E'nin $V(x)$'in minimum değerinden büyük olması gerektiğini gösteriniz. *Yardım:* 2.5 nolu denklemi aşağıdaki formda yazın.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi;$$

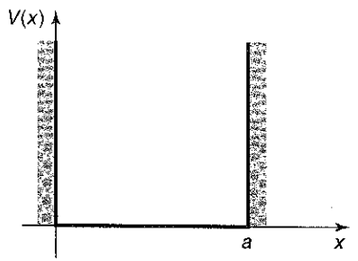
$E<V_{min}$ olması durumunda ψ ve ikinci türevi daima *aynı* işaretli olurlar. Böyle bir fonksiyonun normlanamayacağını tartışınız.

2.2 SONSUZ KARE KUYU

Potansiyel

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a, \\ \infty, & \text{diğer yerlerde} \end{cases} \qquad [2.19]$$

olarak verilsin (2.1 nolu şekil). Böyle bir potansiyel içindeki parçacık, kuyudan kaçmasını önleyen sonsuz kuvvetin uygulandığı uç noktaları ($x = 0$ ve $x = a$) dışında tamamıyla serbesttir. Tümüyle esnek tamponlara sahip ve sürtünmesiz yatay bir hava rayı üzerinde sürekli olarak ileri geri hareket eden bir araba klasik bir model olarak düşünülebilir. (Kuşkusuz bu potansiyel yapay olmakla beraber sizi ona saygı duymaya davet ediyorum. Olanca basitliğine rağmen bu potansiyel daha sonra göreceğimiz tüm zevkli mekanizma için bir test imkânı verir. Sık sık bu potansiyele gönderme yapacağız).



ŞEKİL 2.1. Sonsuz kare kuyu potansiyeli (2.19 nolu denklem).

Parçacığın kuyunun *dışında* bulunma olasılığı sıfır olduğundan, dışarıda $\psi(x) = 0$ dır. $V = 0$ olan kuyunun *içinde* zamandan bağımsız Schrödinger denklemi (2.5 nolu denklem)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \qquad [2.20]$$

ya da

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad [2.21]$$

şeklinde yazılır (bu şekilde yazarak açıkça söylemeden $E \ge 0$ olduğunu varsayıyoruz. Öte yandan 2.2 nolu problemden $E<0$'ın çalışmayacağını zaten biliyoruz). 2.21 nolu denklem klasik **basit harmonik salınıcı** denklemidir ve genel çözümü

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \qquad [2.22]$$

olarak verilir. Burada A ve B keyfi sabitlerdir. Tipik olarak bu sabitler problemin **sınır koşullarından** belirlenir. $\psi(x)$ için uygun sınır koşulları nedir? Genellikle ψ ve $d\psi/dx$ *süreklidir*. Ancak potansiyelin sonsuz olduğu yerlerde yalnızca ψ süreklidir (2.5. Kesimde bu sınır koşullarını kanıtlayacağız ve $V = \infty$ olduğu durumu göz önüne alacağız. Ancak şimdilik bana güvendiğinizi varsayıyorum).

$\psi(x)$'in sürekliliği, kuyunun dışındaki çözümle uyuşması için

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \qquad [2.23]$$

olmasını gerektirir. Bu durum bize A ve B hakkında ne anlatmaktadır? O zaman

$$\psi(0) = A\sin 0 + B\cos 0 = B$$

ve $B = 0$ olur. Böylece

$$\psi(x) = A\sin kx \qquad [2.24]$$

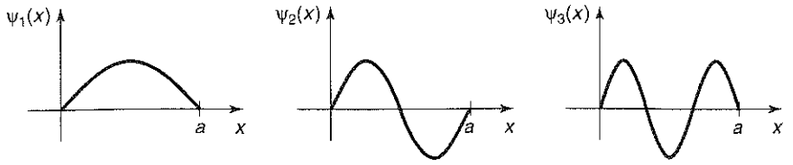
elde edilir. $\psi(a) = A\sin ka$ olduğundan ya $A = 0$ (normlanamayan aşikâr çözüm $\psi(x) = 0$) olmalı ya da $\sin ka = 0$ olmalıdır. Yani

$$ka = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \pm 3\pi, \ldots \qquad [2.25]$$

olmalıdır. Ancak $k = 0$ seçimi $\psi(x) = 0$ çözümüne götürdüğünden kabul edilemez. Ayrıca $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$ olduğundan ve eksi işareti A 'nın içine soğurulabileceğinden negatif çözümler yeni bir şey vermezler. Böylece *kabul edilebilir* ayrık çözümler

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad [2.26]$$

olarak bulunur.



ŞEKİL 2.2: Sonsuz kare kuyunun ilk üç kararlı durumu (2.28 nolu denklem).

İşin garibi, $x = a$'daki sınır koşulu A sabitini belirlemekten çok k sabitini belirler. Böylece E'nin mümkün değerleri

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}} \qquad [2.27]$$

olarak bulunur. Klasik durumla tamamıyla farklılık gösteren nokta, sonsuz kare kuyu içindeki bir kuantum parçacığının *her* enerji değerine sahip olamayacağıdır. Bu parçacık ancak yukarıda verilen izinli enerji değerlerine[8] sahip olabilir. ψ'yi *normlayarak* A'yı buluruz.

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(kx)\,dx = |A|^2 \frac{a}{2} = 1, \qquad |A|^2 = \frac{2}{a}.$$

Normlama yalnızca A'nın *büyüklüğünü* belirler ve en basit seçim pozitif reel kökü seçmektir. $A = \sqrt{2/a}$ (A'nın fazının fiziksel bir önemi yoktur). Böylece kuyunun içindeki çözümler

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)} \qquad [2.28]$$

olarak bulunur.

Söz verdiğimiz gibi, zamandan bağımsız Schrödinger denklemi her biri pozitif n tamsayısına karşılık olan sonsuz tane çözüm verdi. Bunların ilk birkaç tanesi 2.2 nolu şekilde gösterilmiştir. Bu çözümler, uzunluğu a olan bir sicimdeki duran dalgalara benziyorlar. En düşük enerjili ψ_1 durumu **taban durumu** ve enerjisi n^2 ile orantılı olarak artan diğer durumlar **uyarılmış durumlar** olarak adlandırılır. Bir bütün olarak, $\psi_n(x)$ fonksiyonlarının bazı ilginç ve önemli özellikleri şunlardır:

1. Bu fonksiyonlar kuyunun merkezine göre dönüşümlü olarak **çift** ve **tek** olarak sıralanırlar: ψ_1 çift, ψ_2 tek, ψ_3 çift vs.[9]

[8] Enerji kuantumlanmasının zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümleri üzerindeki sınır koşullarının bir sonucu olarak ortaya çıktığına dikkat ediniz.

[9] Bazı yazarlar bu simetriyi daha açık göstermek için kuyunun merkezini orijinde seçerler (bu durumda duvarlar $-a$ ve $+a$'dadır). O zaman çözümdeki çift fonksiyonlar kosinüsler, tek fonksiyonlar sinüsler olur. 2.36 nolu probleme bakınız.

2. Enerji artıkça, ardışık durumların **düğüm** sayısı (x eksenini kesme noktaları) artar. ψ_1'in hiç **düğüm noktası** yok (uç noktalar düğüm noktası sayılmazlar), ψ_2'nin bir düğüm noktası, ψ_3'ün iki düğüm noktası vb. var.

3. Bu fonksiyonlar karşılıklı olarak birbirlerine **ortogonaldir.** Yani $m \neq n$ için

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,dx = 0 \qquad [2.29]$$

bağıntısını sağlarlar. *Kanıt:*

$$\begin{aligned}
\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,dx &= \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx \\
&= \frac{1}{a}\int_0^a \left[\cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)\right]dx \\
&= \left\{\frac{1}{(m-n)\pi}\sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \frac{1}{(m+n)\pi}\sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)\right\}\Bigg|_0^a \\
&= \frac{1}{\pi}\left\{\frac{\sin[(m-n)\pi]}{(m-n)} - \frac{\sin[(m+n)\pi]}{(m+n)}\right\} = 0.
\end{aligned}$$

Bu işlemin $m = n$ durumunda çalışmadığına dikkat ediniz (bunun sebebini bulabilir misiniz?). Bu durumda normlama integralin 1'e eşit olduğunu söyler. Gerçekte ortogonallik ve normlamayı tek bir ifade altında birleştirebiliriz[10]. Bu durumda integral

$$\boxed{\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,dx = \delta_{mn}} \qquad [2.30]$$

olarak ifade edilir. Burada δ_{mn} **Kronecker deltası** olarak adlandırılır ve

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n; \\ 1, & m = n. \end{cases} \qquad [2.31]$$

olarak tanımlanır. Bu durumda ψ'ler **ortonormaldir** diyoruz.

4. Durum fonksiyonları tam bir **küme** oluşturur. Yani *herhangi* bir $f(x)$ fonksiyonu bunların lineer bir kombinasyonu olarak

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \qquad [2.32]$$

şeklinde ifade edilebilir.

[10] Bu örnekte ψ'ler reeldir ve ψ_m üzerindeki * gereksizdir. Ancak ilerideki amaçlarımız açısından * işaretini kullanmak yararlı bir alışkanlık olacaktır.

sin $(n\pi x/a)$ fonksiyonlarının tamlığını burada *kanıtlamayacağım*. Ancak ileri analiz dersi aldıysanız, 2.32 nolu denklemin $f(x)$'in **Fourier serisinden** başka bir şey olmadığını ve "herhangi bir" fonksiyonun bu yolla seriye açılabileceğini fark etmişsinizdir. Bazen bu yönteme **Dirichlet teoremi** de denilir.[11]

Verilen bir $f(x)$ için c_n katsayıları, $\{\psi_n\}$ kümesinin ortanormalliğini zarif bir şekilde kullanan **Fourier numarası** dediğimiz bir yöntemle hesaplanabilir. 2.32 nolu denklemin her iki tarafını $\psi_m(x)^*$ ile çarpın ve integre edin. c_m katsayıları

$$\int \psi_m(x)^* f(x)\,dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m \qquad [2.33]$$

olarak bulunur. (Kronocker deltasının toplamdaki $n = m$ hariç diğer terimleri nasıl öldürdüğüne dikkat ediniz). Böylelikle $f(x)$'in açılımındaki n -inci katsayı

$$\boxed{c_n = \int \psi_n(x)^* f(x)\,dx} \qquad [2.34]$$

olur.[12]

Burada verilen dört özellik oldukça güçlü olup, yalnızca sonsuz kare kuyuya özgü değildir. Birinci özellik potansiyelin simetrik bir fonksiyon olduğu her durum için doğrudur. İkinci özellik potansiyelin şekli ne olursa olsun evrenseldir[13]. Kanıtını 3. Bölümde göstereceğim ortogonallik oldukça geneldir. Tamlık karşılaşacağınız tüm potansiyeller için geçerli olmakla beraber kanıtlanması sıkıcı ve zahmetlidir. Çoğu fizikçi tamlık özelliğinin geçerli olduğunu *varsayıp* gerisi için en iyi olmasını dilerler.

Sonsuz kare kuyu için kararlı (durağan) durumlar (2.18 nolu denklem) açık olarak

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t} \qquad [2.35]$$

şeklindedir. Zamana bağımlı Schrödinger denkleminin en genel çözümünün (2.17 nolu denklem) kararlı durumların lineer bir kombinasyonu olmasını istiyoruz. O zaman en genel çözüm

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t} \qquad [2.36]$$

şeklini alır. (Eğer bunun bir çözüm olduğu konusunda bir kuşkunuz var ise *kontrol ediniz*).

[11] Örnek olarak, Mary Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, 2d ed. (New York; John Wiley, 1983), 313. sayfaya bakınız. $f(x)$ sonlu sayıda sonlu süreksizliklere (sıçramalara) de sahip olabilir.

[12] Şüphesiz denklemin her iki tarafı tutarlı olduktan sonra "sahte indis" olarak m ya da n'yi kullanmamız fark etmez. *Hangi* harfi kullanırsanız kullanın, bu harf herhangi bir pozitif tamsayıyı simgeler.

[13] Örnek olarak, John L. Powell ve Bernd Crasemann, *Quantum Mechanics* (Addsion-Wesley, Reading, MA, 1961) 126. sayfaya bakınız.

Bu aşamada yapılacak şey uygun bir c_n katsayı takımı seçimiyle verilen bir başlangıç dalga fonksiyonu $\Psi(x,0)$ 'ı oluşturabileceğimizi göstermektir. Bu durumda

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

olacaktır. Dirichlet teoremiyle doğrulanan ψ'lerin tamlığı $\Psi(x,0)$'ın daima yukarıdaki gibi ifade edilebileceğini garantiler. ψ'lerin ortanormalliği gerçek katsayıları belirlemek için Fourier numarasının kullanımına izin verir. Katsayılar

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x,0)\,dx \qquad [2.37]$$

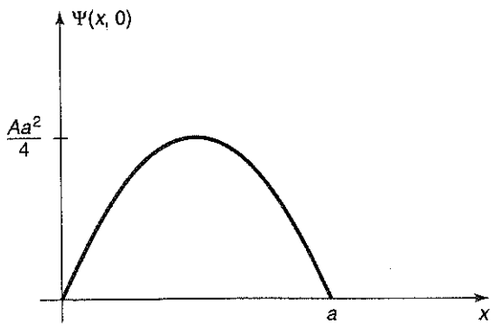
olarak verilir.

Yapılacak işlem: verilen başlangıç dalga fonksiyonuyla 2.37 nolu denklemi kullanarak c_n açılım katsayıları hesaplanır ve bu katsayılar 2.36 nolu denklemde yerine yazılarak $\Psi(x,t)$ elde edilir. Dalga fonksiyonunu bildiğimiz için, 1. Bölümde verilen yöntemleri kullanarak ilgilendiğimiz *herhangi* bir dinamik büyüklüğü hesaplayabilecek konumdayız. Buradaki süreç herhangi bir potansiyel için de aynıdır. Tek değişiklik ψ'lerin fonksiyonel formları ve izin verilen enerji değerlerini veren denklemdir.

Örnek 2.2 Sonsuz kare kuyu içinde bulunan bir parçacığın başlangıç dalga fonksiyonu

$$\Psi(x,0) = Ax(a-x), \quad (0 \le x \le a)$$

olarak verilmiştir (2.3 nolu şekile bakınız). Burada A bir sabittir. Kuşkusuz, kuyunun *dışında* $\Psi = 0$'dır. $\Psi(x,t)$'yi bulunuz.



ŞEKİL 2.3: 2.2 nolu örnekte verilen başlangıç dalga fonksiyonu.

Çözüm: İlk olarak $\Psi(x, 0)$'ı normlayarak A'yı belirlemeliyiz.

$$1 = \int_0^a |\Psi(x,0)|^2\,dx = |A|^2 \int_0^a x^2(a-x)^2\,dx = |A|^2 \frac{a^5}{30}$$

ve böylece

$$A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}$$

bulunur. n-inci katsayı (2.37 nolu denklem)

$$\begin{aligned}
c_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sqrt{\frac{30}{a^5}}\, x(a-x)\,dx \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3}\left[a\int_0^a x\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx - \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx\right] \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3}\left\{a\left[\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) - \frac{ax}{n\pi}\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right]\Bigg|_0^a \right. \\
&\quad \left. - \left[2\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 x\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) - \frac{(n\pi x/a)^2 - 2}{(n\pi/a)^3}\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right]\Bigg|_0^a\right\} \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3}\left[-\frac{a^3}{n\pi}\cos(n\pi) + a^3\frac{(n\pi)^2-2}{(n\pi)^3}\cos(n\pi) + a^3\frac{2}{(n\pi)^3}\cos(0)\right] \\
&= \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3}\left[\cos(0) - \cos(n\pi)\right] \\
&= \begin{cases} 0, & n \text{ çift} \\ 8\sqrt{15}/(n\pi)^3, & n \text{ tek} \end{cases}
\end{aligned}$$

şeklinde elde edilir. Böylece (2.36 nolu denklem) dalga fonksiyonu

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{30}{a}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^3 \sum_{n=1,3,5\ldots} \frac{1}{n^3}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-in^2\pi^2\hbar t/2ma^2}$$

olarak bulunur.

Aslında, c_n katsayısı "Ψ içindeki ψ_n miktarını" vermektedir. Bazı kişiler, $|c_n|^2$'yi "parçacığın n-inci kararlı durumda bulunma olasılığı" olarak tanımlamayı severler. Ama bu kötü bir kullanım tarzıdır. Parçacık Ψ_n durumunda değil, Ψ durumundadır. Hiçbir zaman, laboratuvarda "parçacığı belirli bir durumda" bulamazsınız. Yalnızca bazı *gözlenebilirleri ölçer* ve bir *sayı* elde edersiniz. 3. Bölümde göreceğimiz gibi, $|c_n|^2$, *tek bir enerji ölçümünün E_n değerini verme olasılığıdır* (ustaca yapılmış bir ölçüm daima "izin verilen" enerji değerlerinden birini vermelidir; böylece $|c_n|^2$ belirli E_n değerinin elde edilme olasılığıdır).

Şüphesiz tüm olasılıkların toplamı 1 olmalıdır, yani

$$\boxed{\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1} \qquad [2.38]$$

dir. Aslında bu sonuç Ψ'in normlanmasından kaynaklanır (c_n'ler zamandan bağımsız olduğundan kanıtı $t = 0$ için yapacağız, fakat bu durum canınızı sıkıyorsa tartışmayı kolaylıkla herhangi bir t zamanına genelleştirebilirsiniz).

$$\begin{aligned}
1 &= \int |\Psi(x,0)|^2\,dx = \int \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m\psi_m(x)\right)^* \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x)\right) dx \\
&= \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \int \psi_m(x)^*\psi_n(x)\,dx \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2.
\end{aligned}$$

(Kronocker deltası m üzerinden yapılan toplamada yalnızca $m = n$ terimini bırakır).

Ayrıca enerjinin beklenen değeri

$$\boxed{\langle H\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n} \qquad [2.39]$$

olmalıdır. Bu sonucun doğrudan kontrolü yapılabilir: zamandan bağımsız Schrödinger denklemi (2.12 nolu denklem)

$$H\psi_n = E_n\psi_n \qquad [2.40]$$

kullanılarak

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle &= \int \Psi^* H\Psi\,dx = \int \left(\sum c_m\psi_m\right)^* H\left(\sum c_n\psi_n\right) dx \\
&= \sum\sum c_m^* c_n E_n \int \psi_m^*\psi_n\,dx = \sum |c_n|^2 E_n
\end{aligned}$$

bulunur. Belirli bir enerji değerinin elde edilme olasılığının ve bundan dolayı H'nın beklenen değerinin zamandan bağımsız olduğuna dikkat ediniz. Bu sonuç kuantum mekaniğinde **enerjinin korunumunun** ifadesidir.

Örnek 2.3 2.2 nolu örnekte verilen başlangıç dalga fonksiyonu (2.3 nolu şekil) taban durumu ψ_1'e oldukça benziyor (2.2 nolu şekil). Bu durumda $|c_1|^2$ baskın terim olmalıdır. Gerçekten

$$|c_1|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\right)^2 = 0.998555\ldots.$$

bulunur. Geriye kalan katsayılar da farkı meydana getirirler[14]. Yani

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\right)^2 \sum_{n=1,3,5,\ldots}^{\infty} \frac{1}{n^6} = 1$$

elde edilir. Bu örnekte enerjinin beklenen değeri

$$\langle H\rangle = \sum_{n=1,3,5,\ldots}^{\infty} \left(\frac{8\sqrt{15}}{n^3\pi^3}\right)^2 \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{480\hbar^2}{\pi^4 ma^2} \sum_{n=1,3,5,\ldots}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}.$$

olur. Beklendiği gibi bu değer $E_i = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ değerine çok yakın olup uyarılmış durumların katılması yüzünden biraz daha büyüktür.

Problem 2.3 Sonsuz kare kuyuda $E = 0$ ve $E < 0$ durumları için zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin kabul edilebilir çözümleri olmadığını gösteriniz (bu, 2.2 nolu problemde verilen genel teorimin özel bir durumudur, ama bu kez hesabı Schrödinger denklemini açık olarak çözerek ve sınır koşullarının sağlanmadığını göstererek yapınız).

***Problem 2.4** Sonsuz kare kuyudaki n-inci kararlı (durağan) durum için $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$, σ_x ve σ_p'yi hesaplayınız. Belirsizlik ilkesinin sağlanıp sağlanmadığını kontrol ediniz. Belirsizlik limitine en yakın durum hangisidir?

***Problem 2.5** Sonsuz kare kuyu içindeki bir parçacığın başlangıç dalga fonksiyonu ilk iki kararlı durumun bir karışımı (lineer kombinasyonu)

$$\Psi(x, 0) = A[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

olarak verilmiştir.

[14] Matematik tablolarında "Ters Kuvvetlerin Toplamı" ya da "Riemann Zeta Fonksiyonu" adıyla aşağıdaki serilere bakabilirsiniz.

$$\frac{1}{1^6}+\frac{1}{3^6}+\frac{1}{5^6}+\ldots=\frac{\pi^6}{960}$$
$$\frac{1}{1^4}+\frac{1}{3^4}+\frac{1}{5^4}+\ldots=\frac{\pi^4}{96}.$$

(a) $\Psi(x, 0)$'ı normlayınız (yani A'yı bulunuz. Eğer ψ_1 ve ψ_2'nin ortonormalliğini kullanırsanız bu oldukça kolay bir işlem. Ψ'yi $t = 0$'da normladıktan sonra daima normlanmış *kalacağını* unutmayınız. Eğer bu canınızı sıkıyorsa (*b*) şıkkını yaptıktan sonra açık olarak kontrol edebilirsiniz).

(b) $\Psi(x, t)$ ve $|\Psi(x,t)|^2$'i bulunuz. $|\Psi(x,t)|^2$'yi 2.1 nolu örnekte olduğu gibi zamanın sinüzoidal bir fonksiyonu olarak ifade ediniz. Basitleştirmek için, $\omega \equiv \pi^2\hbar/2ma^2$ olarak alınız.

(c) $\langle x\rangle$'i hesaplayınız. Bunun zamanla salınım yaptığına dikkat ediniz. Bu salınımların açısal frekansı ve genliği nedir? (Eğer bulduğunuz genlik $a/2$'den büyükse, doğrudan cezaevine konacaksınız).

(d) $\langle p\rangle$'yi bulunuz. (Peter Larre'nin söylediği gibi "Johnny onu kolay ve hızlı yoldan yap!")

(e) Bu parçacığın enerjisi ölçülürse hangi değerler hangi olasılıklarla elde edilir? H'nın beklenen değerini bulunuz. E_1 ve E_2 ile karşılaştırınız.

Problem 2.6 Dalga fonksiyonunun fazının hiçbir fiziksel önemi olmamasına rağmen (bu çarpan ölçülebilir bir büyüklük hesapladığınızda yok olacaktır), 2.17 nolu denklemdeki katsayıların *bağıl* fazı önemlidir. Örneğin 2.5 nolu problemde ψ_1 ve ψ_2'nin bağıl fazını

$$\Psi(x, 0) = A[\psi_1(x) + e^{i\phi}\psi_2(x)],$$

şeklinde değiştirdiğimizi varsayalım. Burada ϕ bir sabittir. $\Psi(x, t)$, $|\Psi(x,t)|^2$ ve $\langle x\rangle$'i bulunuz. Sonuçlarınızı önceden elde ettiğiniz sonuçlarla karşılaştırınız. $\phi = \pi/2$ ve $\phi = \pi$ özel durumlarını inceleyiniz (bu problemin grafik bir gösterimi için 7. dipnottaki küçük uygulamaya bakın).

***Problem 2.7** Sonsuz kare kuyu içindeki bir parçacık

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} Ax, & 0 \le x \le a/2, \\ A(a-x), & a/2 \le x \le a. \end{cases}$$

ile verilen bir başlangıç dalga fonksiyonuna sahiptir.[15]

(a) $\Psi(x, 0)$'in grafiğini çiziniz. A sabitini belirleyiniz.

(b) $\Psi(x, t)$'yi bulunuz.

[15] İlke olarak, normlanabilir olduğu sürece başlangıç dalga fonksiyonunun şekli üzerine hiçbir kısıtlama yoktur. Özellikle $\Psi(x, 0)$'ın sürekli bir türeve sahip olması gerekmez. Gerçekte *sürekli* bir fonksiyon olmak zorunda da değildir. Bununla birlikte, böyle bir durum için $\int \Psi^*(x,0)H\Psi(x,0)dx$'i kullanarak $\langle H\rangle$'yı hesaplamak isterseniz, $\Psi(x,0)$'in ikinci türevi iyi tanımlı olmadığından teknik zorluklarla karşılaşırsınız. Bu 2.9 nolu problemde çalışır, çünkü süreksizlikler dalga fonksiyonunun sıfır olduğu uç noktalarda oluşur. 2.48 nolu problemde, 2.7 nolu problemdeki gibi durumların üstesinden nasıl geleceğinizi göreceksiniz.

(c) Bir enerji ölçümünde E_1 değerinin elde edilme olasılığı nedir?

(d) Enerjinin beklenen değerini bulunuz.

Problem 2.8 a genişliğindeki sonsuz kare kuyuda bulunan m kütleli bir parçacık $t = 0$'da kuyunun sol yarısından harekete başlıyor. Parçacık bu bölgede her noktada eşit olasılıkla bulunmaktadır.

(a) Başlangıç dalga fonksiyonu $\Psi(x, 0)$ nedir? (Dalga fonksiyonunun reel olduğunu varsayın ve normlamayı unutmayın).

(b) Bir enerji ölçümünde $\pi^2\hbar^2/2ma^2$ değerinin elde edilme olasılığı nedir?

Problem 2.9 2.2 nolu örnekte verilen dalga fonksiyonu için $t = 0$ anında H'nın ortalama değerini "eski moda yöntemle" yani

$$\langle H \rangle = \int \Psi(x, 0)^* \hat{H} \Psi(x, 0)\, dx$$

yardımıyla bulunuz. Sonucu 2.3 nolu örnekte elde edilen sonuçla karşılaştırınız. $\langle H \rangle$ zamandan bağımsız olduğundan, $t = 0$'da hesap yapmakla genellikten bir şey kaybetmeyiz.

2.3 HARMONİK SALINICI

Klasik harmonik salınıcı modeli, kuvvet sabiti k olan bir yayın ucuna bağlanmış m kütleli bir parçacıktır. Hareketi belirleyen **Hooke yasasıdır**. Yani

$$F = -kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

dir (sürtünme yoksayılıyor). Çözüm

$$x(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t)$$

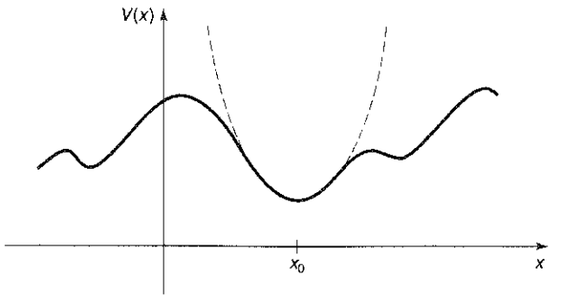
olarak bulunur. Burada

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}} \qquad [2.41]$$

salınımın (açısal) frekansıdır. Potansiyel enerji

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \qquad [2.42]$$

ile verilen bir paraboldür.



ŞEKİL 2.4: Yerel bir minimum civarında keyfi bir potansiyele parabolik yaklaşıklık (kesikli eğri).

Şüphesiz *mükemmel* bir harmonik salınıcı yoktur. Örneğin, salınıcıyı çok fazla gererseniz yay kırılacak ve Hooke yasası geçerliliğini yitirecektir. Ama pratik olarak, herhangi bir potansiyel yerel bir minimumu civarında *yaklaşık* olarak paraboliktir (2.4 nolu şekil). Formel olarak $V(x)$'i minimumu civarında **Taylor serisine** açabiliriz:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \cdots$$

Kuvveti değiştirmeyeceğinden, $V(x)$'e her zaman bir sabit eklenebilir gerçeğini kullanarak, yukarıdaki ifadeden $V(x_0)$'ı (x_0 bir minimum olduğundan, $V'(x_0) = 0$'dır) çıkardığımızda ve yüksek dereceli terimleri düşürdüğümüzde ($(x-x_0)$ küçük kaldığı sürece bu terimler yoksayılabilir)

$$V(x) \cong \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$$

ifadesini elde ederiz. Bu ifade x_0 noktası civarında etkin yay sabiti $k = V''(x_0)$[16] olan basit harmonik hareketi tanımlamaktadır. İşte bu nedenle basit harmonik salınıcı önemlidir: Hemen hemen her salınım hareketi genlik küçük olduğu sürece yaklaşık olarak basit harmonik harekettir.

Kuantum mekaniksel olarak

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \qquad [2.43]$$

potansiyeli için Schrödinger denklemi çözülmelidir (2.41 nolu denklem kullanılarak yay sabiti yerine klasik frekansı kullanmak alışılmış bir uygulamadır). Görüldüğü gibi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi \qquad [2.44]$$

olarak verilen zamandan bağımsız Schrödinger denklemini çözmek yeterlidir.

---

[16] x_0 *minimum* olarak kabul edildiğinden, $V''(x_0) \geq 0$ olduğuna dikkat ediniz. Nadiren de olsa $V''(x_0) = 0$ olur. Bu durumda salınım yaklaşık olarak basit harmonik olmaz.

Literatürde salınıcı problemine tamamıyla farklı iki yaklaşım bulunmaktadır. Birincisi **kuvvet serisi yöntemiyle** diferansiyel denklemi doğrudan "kaba kuvvet" kullanarak çözmektir. Bunun avantajı aynı stratejinin diğer birçok potansiyele uygulanabilmesidir (gerçekten 4. Bölümde Coulomb potansiyelinin çözümünde bu yöntemi kullanacağız). İkincisi daha zarif ve zekice bir yöntem olan, **merdiven operatörlerinin** kullanıldığı cebirsel yöntemdir. İlk olarak çabuk, basit ve daha zevkli olan cebirsel yöntemi[17] göstereceğiz. Bu aşamada kuvvet serisi yöntemini atlamak isterseniz bizim açımızdan sorun yok, ama gelecekte bu yöntemi öğrenmelisiniz.

2.3.1. Cebirsel Yöntem

Öncelikle 2.44 nolu denklemi daha farklı bir şekilde yazalım:

$$\frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]\psi = E\psi \qquad [2.45]$$

Burada $p \equiv (\hbar/i)d/dx$ momentum operatörüdür. Bu yöntemde ana fikir

$$H = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2] \qquad [2.46]$$

Hamiltonyenini çarpanlara ayırmaktır.

Eğer bunlar sıradan sayılar olsalardı bu işlem çok kolay olacaktı:

$$u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v).$$

Ancak p ve x *operatör* olduklarından ve operatörler genellikle **sıra değiştirmediklerinden** (xp ile px aynı değildir) burada işlem çok basit değildir. Yine de bu yapı bizi

$$\boxed{a_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x)} \qquad [2.47]$$

ile tanımlanan büyüklükleri incelemek için özendirmektedir (parantezin önündeki çarpan, sonuçları daha zarif yazmak için konulmuştur).

Bu durumda a_-a_+ çarpımının sonucu nedir?

$$a_-a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}(ip + m\omega x)(-ip + m\omega x)$$
$$= \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px)].$$

[17] 4. Bölümde açısal momentum teorisinde benzer stratejilerle karşılaşacağız. Bu teknik **süper simetrik kuantum mekaniğinde** çok geniş bir potansiyel sınıfı için genelleştirilir (örnek olarak, Richard W. Robinett, *Quantum Mechanics* (Oxford UP, New York, 1997) 14.4. kesime bakınız.

Beklendiği gibi ($xp - px$) şeklinde fazladan bir terim ortaya çıktı. Bu terimi x ile p'nin **komütatörü** olarak adlandırıyoruz. Komütatör, operatörlerin çarpımda *sıra değiştirememelerinin* bir ölçüsüdür. Genel olarak, A ve B operatörlerinin komütatörü köşeli parantez içinde yazılır ve

$$[A, B] \equiv AB - BA \qquad [2.48]$$

olarak tanımlanır. Bu notasyon yardımıyla

$$a_-a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar}[x, p] \qquad [2.49]$$

olur.

Bu aşamada x ve p'nin komütatörünü hesaplamalıyız. *Uyarı:* Kuramsal olarak operatörler üzerlerinde çalışmak için güvenilir büyüklükler değildir ve üzerine etkidikleri bir $f(x)$ "test fonksiyonu" kullanılmadıkça hata yapmaya mahkumsunuz. Hesabın sonunda test fonksiyonunu kaldırabilirsiniz ve böylece elinizde yalnızca operatörleri içeren bir denklem kalacaktır. O zaman x ve p'nin komütatörü

$$[x, p]f(x) = \left[x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(f) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(xf)\right] = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{df}{dx} - x\frac{df}{dx} - f\right) = i\hbar f(x) \qquad [2.50]$$

olur. Test fonksiyonu kaldırılırsa

$$\boxed{[x, p] = i\hbar} \qquad [2.51]$$

elde edilir. Zarif ve sık sık karışılacağımız bu sonuç **kanonik sıra değiştirme** bağıntısı olarak adlandırılır.[18]

Bu bağıntıyı kullanırsak 2.49 nolu denklem

$$a_-a_+ = \frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2} \qquad [2.52]$$

ya da

$$H = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right) \qquad [2.53]$$

şeklinde yazılabilir.

Açıkça Hamiltonyen tam olarak çarpanlarına ayrılmaz, sağ tarafta $-1/2$ gibi fazladan bir terim kalır. Burada a_+ ve a_-'nin çarpımında sıralamanın önemli olduğuna dikkat ediniz. a_+ sol tarafta olursa benzer bir çözümlemeyle

$$a_+a_- = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2} \qquad [2.54]$$

elde edilir. Özellikle

$$[a_-, a_+] = 1 \qquad [2.55]$$

[18] Derin anlamıyla kuantum mekaniğinin tüm gizemi konum ve momentumun sıra değiştirmemesinde yatmaktadır. Gerçekten, bazı yazarlar kanonik sıra değiştirme bağıntısını teorinin bir aksiyomu olarak kabul edip, bunu $p = (\hbar/i)(d/dx)$'i *türetmek* için kullanırlar.

olduğuna dikkat ediniz. O halde Hamiltonyen eşdeğer olarak

$$H = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right) \qquad [2.56]$$

şeklinde yazılabilir. $a_\pm$ operatörleri cinsinden harmonik salınıcı için Schrödinger denklemi[19]

$$\hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi \qquad [2.57]$$

olarak yazılır (bu tür denklemlerde aynı sıradaki üstteki işaretler ya da alttaki işaretler birlikte okunur).

Şimdi sıra önemli bir adımda: *ψ, E enerjili bir durum için Schrödinger denklemini sağlıyorsa (yani $H\psi = E\psi$), $a_+\psi$'nin de $(E + \hbar\omega)$ enerjili bir durum için Schrödinger denklemini sağlamasını isteyelim.* Yani $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$ olsun. *Kanıt:*

$$\begin{aligned} H(a_+\psi) &= \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)(a_+\psi) = \hbar\omega\left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+\right)\psi \\ &= \hbar\omega a_+\left(a_-a_+ + \frac{1}{2}\right)\psi = a_+\left[\hbar\omega\left(a_+a_- + 1 + \frac{1}{2}\right)\psi\right] \\ &= a_+(H + \hbar\omega)\psi = a_+(E + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)(a_+\psi). \end{aligned}$$

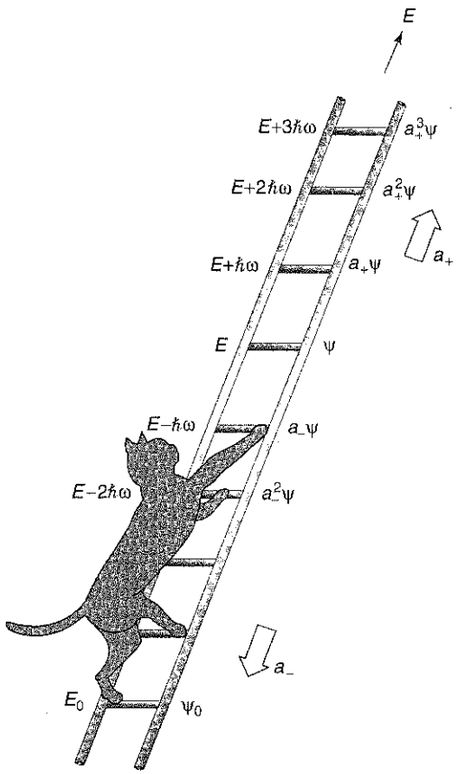
(İkinci satırda a_-a_+'yı $a_+a_- + 1$ ile değiştirmek için 2.55 nolu denklem kullanıldı. a_+ ve a_-'nin çarpımında sıralama önemli olduğu halde $a_\pm$ ile $\hbar$, ω ya da E gibi herhangi bir *sabitin* çarpımında sıralamanın *önemli olmadığına* dikkat ediniz. Yani bir operatör herhangi bir sabitle sıra değiştirir).

Aynı sebeple $a_-\psi$'de $(E-\hbar\omega)$ enerjili durum için bir çözümdür;

$$\begin{aligned} H(a_-\psi) &= \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right)(a_-\psi) = \hbar\omega a_-\left(a_+a_- - \frac{1}{2}\right)\psi \\ &= a_-\left[\hbar\omega\left(a_-a_+ - 1 - \frac{1}{2}\right)\psi\right] = a_-(H - \hbar\omega)\psi = a_-(E - \hbar\omega)\psi \\ &= (E - \hbar\omega)(a_-\psi). \end{aligned}$$

Bir kez işe koyulacak bir çözümü bulabildiğimizde, daha yüksek ve daha düşük enerjili yeni çözümleri üretecek harika bir mekanizma geliştirmiş olduk. $a_\pm$ operatörleri enerji durumları arasında yukarı çıkmamızı ve aşağı inmemizi sağladıklarından bunlara **merdiven operatörleri** diyoruz. a_+ **kaldırma operatörü** (arttıran operatör) ve a_- **indirme operatörü** (eksilten operatör) olarak adlandırılır. Durumların "merdiven" yapısı 2.5 nolu şekilde gösterilmiştir.

[19] Her defasında "zamandan bağımsız Schrödinger denklemi" yazmaktan yoruldum. Hangi bağlamda kullanıldığı çok açık olan durumlarda sadece "Schrödinger denklemi" yazacağım.



ŞEKİL 2.5: Harmonik salınıcı için durumların "merdiven" yapısı.

Ama bekleyin! İndirme operatörünü defalarca uygularsak ne olacak? En sonunda, 2.2 nolu problemde verilen genel teoreme göre mevcut olmayan sıfırdan daha düşük enerjili bir duruma ulaşacağız. Bir noktada mekanizma bozulmalı. Bu nasıl gerçekleşebilir? $a_-\psi$'nin Schrödinger denkleminin yeni bir çözümü olduğunu biliyoruz ama *bunun normlanabilir olacağının hiçbir garantisi yoktur.* Sıfır olabilir ya da karesinin integrali sonsuz olabilir. Pratikte ilk seçenek gerçekleşmektedir. Yani ψ_0 olarak gösterilen ve

$$a_-\psi_0 = 0 \qquad [2.58]$$

olan bir "en alt basamak" vardır. $\psi_0(x)$'i belirlemek için bu ifadeyi kullanabilirsiniz:

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0 = 0,$$

ya da

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

olarak yazılabilir. Bu diferansiyel denklemin çözümü oldukça kolaydır:

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}\int x\,dx \quad \Rightarrow \quad \ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \text{sabit}$$

Böylece

$$\psi_0(x) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

olarak bulunur. Normlama işlemi yapılırsa

$$1 = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar}\,dx = |A|^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}},$$

ve $A^2 = \sqrt{m\omega/\pi\hbar}$ bulunur. A normlama sabiti yerine yazılırsa

$$\boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}} \qquad [2.59]$$

olur. Bu duruma karşılık olan enerjiyi belirlemek için ψ_0, 2.57 nolu denklemdeki formda verilen Schrödinger denkleminde yerine yerleştirilir, $\hbar\omega(a_+a_-+1/2)\ \psi_0 = E_0\psi_0$ ve $a_-\psi_0 = 0$ olduğu kullanılırsa

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad [2.60]$$

olarak bulunur. Artık kuantum salınıcının taban durumu olan en alt basamakta güvenle durduğumuzdan, uyarılmış durumları üretmek için kaldırma operatörünü defalarca uygularız[20]. Her bir adımda enerji $\hbar\omega$ kadar artar. Yani

$$\boxed{\psi_n(x) = A_n(a_+)^n\psi_0(x), \qquad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega} \qquad [2.61]$$

olur. Burada A_n normlama sabitidir. Kaldırma operatörünü ψ_0'a tekrar tekrar uygulayarak (ilke olarak) harmonik salıncının tüm kararlı durumlarını kurabiliriz.[21] Tüm

[20] Harmonik salınıcıda alışılagelmiş uygulamadan saparak durumlar $n = 1$ yerine $n = 0$'dan başlanarak numaralandırılır. Açıkça, 2.17 nolu denklemdeki gibi formüllerde toplamanın alt limiti $n = 0$ olarak değiştirilmelidir.

[21] Bu süreç yardımıyla tüm normlanabilir çözümleri elde ettiğimize dikkat ediniz. Eğer başka çözümler olsaydı, bunları kaldırma ve indirme operatörlerini ardışık olarak uygulayarak ikinci bir merdivenden üretebilirdik. Ancak bu yeni merdivenin de en alt basamağı 2.58 nolu denklemi sağlamalıydı. O zaman karşı konulmaz bir şekilde 2.59 nolu denkleme ulaşırdık; yani en alt basamaklar aynı olurdu. Aslında bu durumda iki merdiven özdeş olurdu.

bu işlemler sırasında açık olarak hesap yapmadan izin verilen enerji değerlerini belirlerdik.

Örnek 2.4 Harmonik salınıcının ilk uyarılmış durumunu bulunuz.

Çözüm: 2.61 nolu denklemi kullanarak,

$$\psi_1(x) = A_1a_+\psi_0 = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$
$$= A_1\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}xe^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad [2.62]$$

bulunur. Normlama işlemini "elimizle" yaparsak

$$\int|\psi_1|^2\,dx = |A_1|^2\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}dx = |A_1|^2.$$

olur. O zaman $A_1 = 1$'dir.

Kaldırma operatörünü elli kez uygulayarak ψ_{50}'yi hesaplamak istemiyoruz. Ama önemli değil. *İlke olarak* 2.61 nolu denklem normlama hariç kendi işini yapar.

Normlamayı cebirsel olarak da elde etmek mümkündür ancak işlem biraz yorucudur. Bu yüzden dikkatle izleyin. $a_\pm\psi_n$'in $\psi_{n\pm1}$ ile *orantılı* olduğunu biliyoruz. O zaman

$$a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, \quad a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1} \qquad [2.63]$$

yazılabilir. Orantı katsayıları c_n ve d_n nasıl bulunacak? İlk olarak, "herhangi"[22] $f(x)$ ve $g(x)$ fonksiyonları için

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_\pm g)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}(a_\mp f)^*g\,dx \qquad [2.64]$$

olduğuna dikkat ediniz (lineer cebir dilinde $a_\mp$, $a_\pm$'nin **hermitsel eşleniğidir)**.

Kanıt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_\pm g)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty} f^*\left(\mp\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)g\,dx,$$

[22] Şüphesiz integraller *mevcut* olmalıdır; yani $f(x)$ ve $g(x)$, $\pm\infty$'da sıfıra gitmelidir.

Kısmi integrasyon $\int f^*(dg/dx)dx'i - \int (df/dx)^* g dx'e$ dönüştürür (22. nolu dipnotta belirtilen nedenle sınır terimleri sıfırdır). Böylece

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_\pm g)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\left(\pm\hbar\frac{d}{dx}+m\omega x\right)f\right]^* g\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}(a_\mp f)^* g\,dx$$

olur.

Özellikle

$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_\pm\psi_n)^*(a_\pm\psi_n)dx = \int_{-\infty}^{\infty}(a_\mp a_\pm\psi_n)^*\psi_n dx$$

olduğuna dikkat ediniz. 2.57 ve 2.61 nolu denklemler yardımıyla

$$a_+a_-\psi_n = n\psi_n,\quad a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n \qquad [2.65]$$

olur. Böylece,

$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n)dx = |c_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{n+1}|^2\,dx = (n+1)\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2 dx,$$
$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_-\psi_n)^*(a_-\psi_n)dx = |d_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{n-1}|^2\,dx = n\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2 dx.$$

elde edilir. ψ_n ve $\psi_{n\pm1}$ normlanmış olduklarından, $|c_n|^2 = n+1$ ve $|d_n|^2 = n$ olur. Böylece

$$\boxed{a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1},\quad a_-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}} \qquad [2.66]$$

elde edilir.

Bu durumda

$$\psi_1 = a_+\psi_0,\quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}a_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_+)^2\psi_0,$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3\cdot2}}(a_+)^3\psi_0,\quad \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}}a_+\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4\cdot3\cdot2}}(a_+)^4\psi_0,$$

vs. şeklindedir. O zaman

$$\boxed{\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n\psi_0} \qquad [2.67]$$

olarak bulunur. 2.61 nolu denklemde verilen normlama çarpanı $A_n = 1/\sqrt{n!}$ (özellikle $A_1 = 1$ olup, 2.4 nolu örnekte bulduğumuz sonucu doğrulamaktadır) olarak belirlenir.

Sonsuz kare kuyuda olduğu gibi, harmonik salınıcının kararlı durumları birbirlerine ortogonaldir:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n\,dx = \delta_{mn}. \qquad [2.68]$$

Bu bağıntı 2.64 ve 2.65 nolu denklemler kullanılarak kanıtlanabilir:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(a_+a_-)\psi_n\,dx = n\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n\,dx$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}(a_-\psi_m)^*(a_-\psi_n)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}(a_+a_-\psi_m)^*\psi_n\,dx$$
$$= m\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n\,dx.$$

$m = n$ olmadıkça, $\int\psi_m^*\psi_n dx$ sıfır olmalıdır. Ortonormallik bağıntısından hareketle, $\Psi(x, 0)$'ı kararlı durumların lineer bir kombinasyonu (2.16 nolu denklem) olarak açtığımızda açılım katsayılarını Fourier numarasını (2.34 nolu denklem) kullanarak hesaplayabiliriz. $|c_n|^2$ yine bir enerji ölçümünde E_n değerinin elde edilme olasılığıdır.

Örnek 2.5 Bir n durumunda bulunan harmonik salınıcı için potansiyel enerjinin beklenen değerini bulunuz.

Çözüm:

$$\langle V\rangle = \left\langle\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* x^2\psi_n\,dx.$$

x ve p'nin kuvvetlerini içeren bu tür integralleri hesaplamak için zarif bir yöntem vardır. 2.47 nolu denklem ile verilen tanımı kullanarak, x ve p'yi kaldırma ve indirme operatörleri cinsinden ifade edebiliriz:

$$\boxed{x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_+ + a_-);\quad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a_+ - a_-).} \qquad [2.69]$$

Bu örnekte x^2 ile ilgileneceğiz:

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left[(a_+)^2 + (a_+a_-) + (a_-a_+) + (a_-)^2\right].$$

Böylece

$$\langle V\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}\int\psi_n^*\left[(a_+)^2 + (a_+a_-) + (a_-a_+) + (a_-)^2\right]\psi_n\,dx$$

olur. Normlamayı düşünmezsek $(a_+)^2\psi_n$, ψ_n'ne ortogonal olan ψ_{n+2} ile ve benzer şekilde

$(a_-)^2\psi_n$ de ψ_{n-2} ile orantılıdır. Bu terimlerden $\langle V\rangle$'ye katkı gelmez. Kalan iki terimi hesaplamak için 2.65 nolu denklemi kullanabiliriz:

$$\langle V\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}(n+n+1) = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Görüldüğü gibi potansiyel enerjinin beklenen değeri toplam enerjinin *yarısına* eşittir. Kalan diğer yarısı da kinetik enerjinin beklenen değerine eşittir. Daha sonra göreceğimiz gibi bu harmonik salınıcıya ait bir özelliktir.

***Problem 2.10**

(a) $\psi_2(x)$'i kurunuz.

(b) ψ_0, ψ_1, ve ψ_2'nin grafiklerini çiziniz.

(c) İntegrasyonları açık olarak yaparak, ψ_0, ψ_1, ve ψ_2'nin ortogonalliklerini kontrol ediniz. *Yardım:* Fonksiyonların tek ya da çift olma özelliklerini kullanırsanız, hesap yapmak için bir tane integral kalacaktır.

***Problem 2.11**

(a) ψ_0 (2.59 nolu denklem) ve ψ_1 (2.62 nolu denklem) durumları için integrasyonları açık olarak yaparak, $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle x^2\rangle$ ve $\langle p^2\rangle$'yi hesaplayınız. *Açıklama:* Harmonik salınıcıyla ilgili gerek bu gerekse diğer problemlerde $\xi \equiv (\sqrt{m\omega/\hbar})x$ değişkeniyle, $\alpha \equiv (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ sabitini tanımlamak hesapları kolaylaştırmaktadır.

(b) Bu durumlar için belirsizlik ilkesini kontrol ediniz.

(c) Bu durumlar için ortalama kinetik enerji $\langle T\rangle$ ve ortalama potansiyel enerji $\langle V\rangle$'yi hesaplayınız. Bu ortalamaların toplamının neye eşit olmasını beklersiniz? (Burada yeni bir integral hesabına gerek yoktur).

***Problem 2.12** 2.5 nolu örnekteki yöntemi kullanarak, harmonik salınıcının n-inci kararlı durumu için $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p^2\rangle$ ve $\langle T\rangle$'yi bulunuz. Belirsizlik ilkesinin sağlandığını kontrol ediniz.

Problem 2.13 Harmonik salınıcı potansiyeli içindeki bir parçacığın başlangıç durum fonksiyonu

$$\Psi(x,0) = A[3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)]$$

olarak verilmiştir.

(a) A'yı bulunuz.

(b) $\Psi(x,t)$ ve $|\Psi(x,t)|^2$'yi kurunuz. Bunlar klasik frekansla salınıyorlarsa paniğe kapılmayın. $\psi_1(x)$ yerine $\psi_2(x)$ kullanılmış olsaydı ne olurdu?

(c) $\langle x\rangle$ ve $\langle p\rangle$'yi bulunuz. Bu dalga fonksiyonu için Ehrenfest teoreminin (1.38 nolu denklem) gerçeklendiğini kontrol ediniz.

(d) Bu parçacığın enerjisi ölçülürse hangi değerler hangi olasılıklarla elde edilir?

Problem 2.14 Bir parçacık, klasik frekansı ω olan harmonik salınıcının taban durumundadır. Başlangıçtaki dalga fonksiyonu değiştirilmeksizin yay sabiti aniden dört katına çıkarılıyor; yani $\omega' = 2\omega$ oluyor. Şüphesiz Hamiltonyen değiştiğinden, Ψ şimdi farklı bir şekilde evrim geçirecektir. Enerji bir kez ölçüldüğünde $\hbar\omega/2$ değerinin elde etme olasılığı nedir? $\hbar\omega$ değerinin elde edilme olasılığı nedir? [*Yanıt:* 0.943].

2.3.2. Analitik Yöntem

Harmonik salınıcı için

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi \qquad [2.70]$$

ile verilen Schrödinger denklemine geri dönerek seri yöntemiyle denklemi doğrudan çözelim.

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \qquad [2.71]$$

ile verilen boyutsuz bir değişken tanımlarsak denklemler daha sade gözükecektir. ξ cinsinden Schrödinger denklemini yeniden yazalım:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \qquad [2.72]$$

Burada K, $(1/2)\hbar\omega$ biriminde verilen enerjidir:

$$K \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}. \qquad [2.73]$$

Burada yapılacak işlem 2.72 nolu denklemi çözmek ve "izin verilen" K değerlerini (yani E değerlerini) belirlemektir.

Hesaba başlarken çok büyük ξ değerlerinde (yani çok büyük x değerlerinde), ξ^2'nin K'dan daha baskın olduğuna dikkat ediniz. O zaman büyük ξ değerleri için diferansiyel denklem

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi \qquad [2.74]$$

olur. Bu diferansiyel denklemin yaklaşık çözümü

$$\psi(\xi) \approx Ae^{-\xi^2/2} + Be^{+\xi^2/2} \qquad [2.75]$$

olur (kontrol ediniz).

B'li terim normlanamaz ($|x| \to \infty$ iken, ıraksak olur). Fiziksel olarak kabul edilebilir çözümler

$$\text{büyük } \xi\text{'ler için } \psi(\xi) \to (\ )e^{-\xi^2/2} \qquad [2.76]$$

ile verilen asimptotik forma sahiptir. O zaman

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2} \qquad [2.77]$$

şeklinde çözüm arayalım. Buradaki $h(\xi)$, $\psi(\xi)$'nın kendisinden daha basit bir fonksiyonel forma sahiptir[23]. 2.77 nolu denklemin türevleri alınarak

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \left(\frac{dh}{d\xi} - \xi h\right) e^{-\xi^2/2},$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left(\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (\xi^2 - 1)h\right) e^{-\xi^2/2}$$

bulunur. Böylece Schrödinger denklemi (2.72 nolu denklem)

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (K-1)h = 0 \qquad [2.78]$$

olur.

2.78 nolu denklem kuvvet serisi[24] yöntemiyle çözülebilir. Bunun için $h(\xi)$ fonksiyonu bir *kuvvet serisi* olarak yazılır:

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j. \qquad [2.79]$$

Kuvvet serisinin terim terime türevleri alınarak

$$\frac{dh}{d\xi} = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^{j-1},$$

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} = 2a_2 + 2\cdot 3a_3\xi + 3\cdot 4a_4\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty}(j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j$$

[23] 2.77 nolu denkleme ulaşmak için bazı yaklaştırmalar yapsak da sonucun *kesin* olduğuna dikkat ediniz. Diferansiyel denklemlerin kuvvet serisi yöntemiyle çözümünde ilk olarak asimptotik davranışın ortaya çıkarılması standart bir adımdır. Örnek olarak 11. dipnotta verilen kaynağın (Boas) 12. Bölümüne bakınız.

[24] Bu yöntem **Frobenius yöntemi** olarak bilinir. Taylor teoremine göre herhangi bir iyi huylu fonksiyon bir kuvvet serisi olarak ifade edilebilir. Bu yüzden 2.79 nolu denklem genellikten bir şey kaybetmeden yazılabilir. Yöntemin uygulanmasındaki gerekli koşullar için; Boas (11. dipnot) ya da George B, Arfken ve Hans Jurgen Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 5 th ed, Academic Pres, Orlando (2000) 8.5. Kesime bakınız.

bulunur. Bu ifadeler 2.78 nolu denklemde yerine yazılırsa

$$\sum_{j=0}^{\infty}\left[(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j\right]\xi^j = 0. \qquad [2.80]$$

elde edilir. Kuvvet serisi açılımlarının tekliğinden[25] ξ'nın *her bir kuvvetinin* katsayısı sıfır olmalıdır:

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0$$

Böylece,

$$a_{j+2} = \frac{(2j+1-K)}{(j+1)(j+2)}a_j. \qquad [2.81]$$

bulunur.

Bu **tekrarlama (rekürans) bağıntısı** tamamıyla Schrödinger denklemine eş değerdir. a_0 ile başlanarak tüm çift numaralı katsayılar

$$a_2 = \frac{(1-K)}{2}a_0, \quad a_4 = \frac{(5-K)}{12}a_2 = \frac{(5-K)(1-K)}{24}a_0, \quad \cdots$$

ve a_1 ile başlanarak tüm tek numaralı katsayılar

$$a_3 = \frac{(3-K)}{6}a_1, \quad a_5 = \frac{(7-K)}{20}a_3 = \frac{(7-K)(3-K)}{120}a_1, \quad \cdots$$

üretilir. Tam çözüm

$$h(\xi) = h_{\text{çift}}\ (\xi) + h_{\text{tek}}\ (\xi) \qquad [2.82]$$

olarak yazılır. Burada

$$h_{\text{çift}}\ (\xi) \equiv a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \cdots$$

ξ'nin çift fonksiyonudur ve a_0 yardımıyla kurulur. Benzer şekilde

$$h_{\text{tek}}\ (\xi) \equiv a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \cdots$$

ξ'nin tek fonksiyonudur ve a_1 yardımıyla kurulur. Böylelikle, 2.81 nolu denklem $h(\xi)$ fonksiyonunu a_0 ve a_1 gibi keyfi iki sabit cinsinden belirler ki ikinci dereceden diferansiyel denklemler için beklenen bir sonuçtur.

Öte yandan, bu şekilde elde edilen tüm çözümler *normlanabilir* fonksiyonlar değildir. Çok büyük j değerlerinde tekrarlama bağıntısı yaklaşık olarak

$$a_{j+2} \approx \frac{2}{j}a_j$$

[25] Örnek olarak, Arfken (24. dipnot), 5.7. Kesime bakınız.

olur. Yaklaşık çözüm

$$a_j \approx \frac{C}{(j/2)!}$$

olarak bulunur. Burada C keyfi bir sabittir. Böylece, daha yüksek dereceden kuvvetlerin baskın olduğu büyük ξ değerleri için $h(\xi)$'nın davranışı

$$h(\xi) \approx C \sum \frac{1}{(j/2)!} \xi^j \approx C \sum \frac{1}{j!} \xi^{2j} \approx C e^{\xi^2}$$

olur. h, $\exp(\xi^2)$ gibi davranırsa dalga fonksiyonu ψ (2.77 nolu denklem) tam da bizim istemediğimiz bir asimptotik davranış olan $\exp(\xi^2/2)$ şeklinde gider.[26] Bu sorundan kurtulmanın tek bir yolu var: normlanabilir çözümler için *kuvvet serisi sonlu bir j değerinde* (bu en büyük j değerini n olarak adlandıralım) *kesilmelidir*. Bu n değeri için tekrarlama bağıntısı $a_{n+2} = 0$ olur ve bu koşul *ya* $h_{\text{çift}}$ *ya da* h_{tek} serisini sonlandırır. Başlangıçtaki seçime göre diğer seri sıfır olmalıdır. Yani n çift ise $a_1 = 0$, n tek ise $a_0 = 0$ dır. Fiziksel olarak kabul edilebilir çözümler için 2.81 nolu denklemden

$$K = 2n + 1,$$

bulunur. Burada n pozitif tamsayıdır. Enerji değerleri 2.73 nolu denklemden

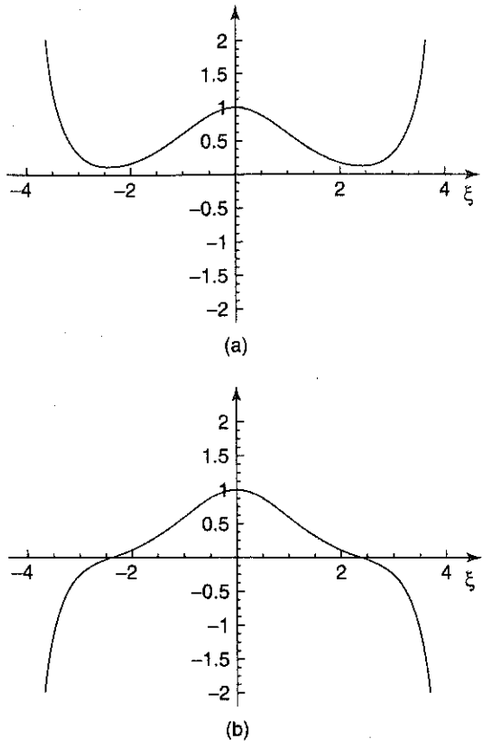
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots. \qquad [2.83]$$

olarak bulunur. Böylelikle, tamamıyla farklı bir yöntem kullanarak daha önce cebirsel olarak bulduğumuz 2.61 nolu denklemdeki temel kuantumlanma koşuluna tekrar ulaştık.

Enerji kuantumlanmasının, Schrödinger denkleminin kuvvet serisi çözümündeki teknik bir ayrıntı sonucu ortaya çıkması ilk bakışta oldukça şaşırtıcı görünüyor. Buna farklı bir açıdan tekrar bakalım. Kuşkusuz 2.70 nolu denklemin E'nin *herhangi bir* değeri için bir çözümü vardır (aslında her E değeri için *iki* tane lineer bağımsız çözüm vardır). Ancak çözümlerin birçoğu büyük x değerlerinde üstel olarak ıraksarlar ve bu yüzden normlanamazlar. Örneğin; çözümün izin verilen değerlerin birinden biraz daha küçük olan ($0.49\hbar\omega$ gibi) bir E değerini kullanarak grafiğini çizersek (2.6(a) nolu şekil), dalga fonksiyonunun "kuyruklarının" sonsuza doğru gittiğini görebiliriz. Şimdi biraz daha *büyük* bir E değeri ($0.51\ \hbar\omega$ gibi) için grafiği çizersek, çözümün "kuyruklarının" *negatif* taraftan sonsuza gittiğini (2.6(b) nolu şekil) göreceğiz. Parametreyi 0.49'dan 0.51'e çok küçük artışlarla değiştirdiğimizde, 0.5 değerinden geçerken kuyrukların ters döndüğünü görebiliriz. Yalnızca *tam olarak* 0.5 değerinde kuyruklar normlanabilir bir çözüm verecek şekilde sıfıra giderler.[27]

[26] 2.81 nolu denklemin içinde hala kötü huylu çözümlerin de olduğunu görmek bizim için hiç de şaşırtıcı değil. Bu tekrarlama bağıntısı Schrödinger denklemine eşdeğerdir ve 2.75 nolu denklemde bulduğumuz asimptotik formları da içerir.

[27] Bu işlemi bilgisayarda yaparak izin verilen enerji değerlerini "deneysel" olarak elde etmek mümkündür. Dikkat ederseniz, çözümlerin kuyrukları yön değiştirirken izin verilen bir enerji değerinden geçilmekte. Bazıları bunu "atış" yöntemi olarak adlandırılır (Nicholas Giordano, *Computational Physics*, Prentice Hall, Upper Saddle River, RJ (1997), 10.2. Kesim). 2.54 ve 2.56 nolu problemlere bakınız.



ŞEKİL 2.6: (a) $E = 0.49\ \hbar\omega$ ve (b) $E = 0.51\hbar\omega$ için Schrödinger denkleminin çözümleri.

K'nın izin verilen değerleri için, tekrarlama bağıntısı

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a \qquad [2.84]$$

olur. $n = 0$ ise, seride yalnızca bir terim vardır (h_{tek}'i yok etmek için $a_1 = 0$ alırız ve 2.84 nolu denklemde $j = 0$ için $a_2 = 0$ verecektir). Bu durumda

$$h_0(\xi) = a_0,$$

olur. Böylece

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2}$$

elde edilir. Normlama dışında 2.59 nolu denklemin aynısını bulduğumuza dikkat ediniz. $n = 1$ için $a_0 = 0$ seçeriz[28] ve $j = 1$ için 2.84 nolu denklem $a_3 = 0$ verecektir. Bu durumda

$$h_1(\xi) = a_1\xi$$

olur. Böylelikle

$$\psi_1(\xi) = a_1\xi e^{-\xi^2/2}$$

elde edilir (2.62 nolu denklemi doğrular). $n = 2$ için $j = 0$ $a_2 = -2a_0$ ve $j = 2$ ise $a_4 = 0$ verir. O zaman

$$h_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)$$

ve

$$\psi_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)e^{-\xi^2/2}$$

bulunur (Sonucu, ψ_2'nin cebirsel yöntemle elde edildiği 2.10 nolu problem ile karşılaştırınız). Bu şekilde devam ederek diğer çözümler de elde edilir.

Genel olarak $h_n(\xi)$, ξ'nın n-inci dereceden bir polinomu olacaktır. n çift tamsayı ise ξ'nin çift kuvvetleri, n tek tamsayı ise ξ'nin tek kuvvetleri elde edilir. Baştaki a_0 ya da a_1 çarpanı hariç bu fonksiyonlar ($H_n(\xi)$) **Hermite polinomları** olarak adlandırılır[29]. Bu polinomların ilk birkaçı 2.1 nolu tabloda verilmiştir. Geleneksel olarak, keyfi çarpan ξ'nin en yüksek kuvvetinin katsayısı 2^n olacak şekilde seçilir. Bu çarpan seçimiyle harmonik salınıcının normlanmış[30] kararlı durumları

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \qquad [2.85]$$

olarak bulunur.

Şüphesiz bu çözümler 2.67 nolu denklemle verilen ve cebirsel yöntemle elde edilen durumlarla özdeştir.

TABLO 2.1: İlk birkaç $H_n(\xi)$ Hermite polinomu,

$$\begin{aligned} H_0 &= 1, \\ H_1 &= 2\xi, \\ H_2 &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3 &= 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_4 &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\ H_5 &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi. \end{aligned}$$

[28] Her bir n değeri için a_j katsayılarının tamamen farklı bir takım oluşturduğuna dikkat ediniz.

[29] Matematik literatüründe Hermite polinomları yaygın olarak çalışılmaktadır ve bunlarla hesap yapmak için bir çok yöntem ve hile vardır. Bunlardan birkaç tanesi 2.17 nolu problemde kullanılacaktır.

[30] Burada normlama sabiti üzerinde fazla çalışmayacağız. Eğer bu sabitin nasıl hesaplandığını bilmek istiyorsanız, örneğin Leonard Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. Mc Graw-Hill, New York (1968) 13. Kesime bakabilirsiniz.

2.7(a) nolu şekilde ilk birkaç n değeri için $\psi_n(x)$'in grafiği gösterilmiştir. Kuantum salınıcı klasik karşılığından dikkat çekecek derecede farklıdır. Enerji kuantumlanması dışında konum dağılımları da tuhaf özelliklere sahiptir. Örneğin, parçacığın klasik olarak izin verilen bölgenin dışında (göz önüne alınan enerji değeri için x'in klasik genlikten büyük olduğu bölge) bulunma olasılığı sıfır *değildir* (2.15 nolu probleme bakınız). Tüm tek durumlar için parçacığı merkezde bulma olasılığı sıfırdır. Yalnızca büyük n değerlerinde klasik salınıcıyla benzerlikler gözlemeye başlarız. 2.7(b) nolu şekilde klasik konum dağılımıyla $n = 100$ için kuantum dağılımı üst üste çizilmiştir. Eğer tepeciklerin üzerinden düzgün bir eğri geçirirseniz, iki grafiğin oldukça uyumlu olduğu görebilirsiniz. Bununla birlikte, klasik durumda *bir* salınıcı için geçen *süre* üzerinden konum dağılımına bakarken, kuantum durumunda özdeş olarak hazırlanmış sistemler *topluluğu* üzerinden bir dağılıma bakıyoruz.[31]

Problem 2.15 Harmonik salınıcının taban durumunda, parçacığın klasik olarak izin verilen bölgenin dışında bulunma olasılığı nedir? (yanıtı üç anlamlı rakama kadar veriniz). *Yardım:* Klasik olarak bir salınıcının enerjisi $E = (1/2)ka^2 = (1/2)m\omega^2a^2$ dir. Burada a genliktir. O zaman E enerjili bir salınıcı için "klasik olarak izin verilen bölge" $-\sqrt{2E/m\omega^2}$ ile $+\sqrt{2E/m\omega^2}$ arasındadır. İntegralin sayısal değeri için matematik tablolarında "Normal Dağılım" ya da "Hata Fonksiyonu" kısımlarına bakınız.

Problem 2.16 2.84 nolu denklemdeki tekrarlama bağıntısını kullanarak $H_5(\xi)$ ve $H_6(\xi)$'yi elde ediniz. ξ'nin en büyük kuvvetinin katsayısının 2^n olması gerektiğini kullanarak sabit çarpanı belirleyiniz.

****Problem 2.17** Bu problemde Hermite polinomları için bazı yararlı teoremleri kanıtlarını vermeden inceleyeceğiz.

(a) Rodrigues formülü

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}. \qquad [2.86]$$

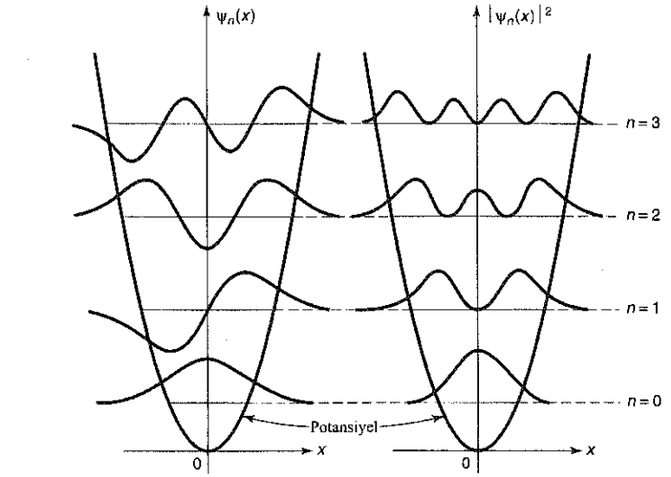
Bu formülü kullanarak H_3 ve H_4'ü türetiniz.

(b) Aşağıdaki tekrarlama bağıntısı H_{n+1}'i bundan önceki ve sonraki diğer iki Hermite polinomu cinsinden verir.

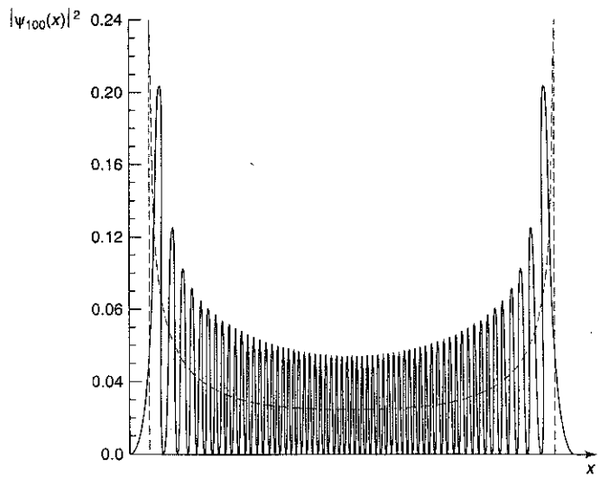
$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi). \qquad [2.87]$$

(a) şıkkındaki sonucu ve bu bağıntıyı kullanarak H_5 ve H_6'yı elde ediniz.

[31] Klasik dağılımı, tümü aynı enerjili fakat rastgele başlangıç zamanlarına sahip salınıcıların bir topluluğu olarak yorumlarsanız belki paralellik kurulabilir.



(a)



(b)

ŞEKİL 2.7: (a) Harmonik salınıcının ilk dört kararlı durumu. Stephen Gasiorowicz, *Quantum Physics*, John Wiley & Sons, Inc., 1974, John Wiley & Sons, Inc.'in izniyle kullanılmıştır. (b) $|\psi_{100}|^2$'nin grafiği. Kesikli çizgi klasik dağılımı göstermektedir.

(c) n-inci dereceden bir polinomun türevini alırsanız $(n-1)$–inci dereceden bir polinom elde ederseniz. Hermite polinomları için

$$\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi) \qquad [2.88]$$

olur. H_5 ve H_6'nin türevlerini alarak bu bağıntıyı kontrol ediniz.

(d) $H_n(\xi)$, $\exp(-z^2+2z\xi)$ olarak verilen **üretici fonksiyonun** n-inci z-türevinin $z = 0$'daki değeridir. Ya da başka bir şekilde ifade edersek, bu fonksiyonun Taylor açılımında $z^n/n!$'in katsayısıdır:

$$e^{-z^2+2z\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi). \qquad [2.89]$$

Üretici fonksiyonu kullanarak H_0, H_1 ve H_2'yi türetiniz.

2.4 SERBEST PARÇACIK

Şimdi karşılaşabileceğimiz en basit durumu göz önüne alalım: serbest parçacık (her yerde $V(x) = 0$). Klasik mekanikte bu durum sabit hızla hareket demektir. Ama kuantum mekaniğinde problem şaşırtıcı derecede zor ve bir o kadar da zariftir. Serbest parçacık için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \qquad [2.90]$$

ya da

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad [2.91]$$

olur. Bu aşamaya dek denklem potansiyelin sıfır olduğu sonsuz kare kuyu içindeki (2.21 nolu denklem) denklemle aynıdır. Ancak, bu kez genel çözümü sinüs ve kosinüsler yerine üstel formda yazacağız. Sırası gelince bunu neden böyle aldığımızı göreceğiz. Böylece genel çözüm:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \qquad [2.92]$$

Sonsuz kare kuyunun aksine, mümkün k değerlerini dolayısıyla E değerlerini sınırlayacak sınır koşulları yoktur: serbest parçacık herhangi bir pozitif enerji değerine sahip olabilir. Standart zaman bağımlılığı terimi $\exp(-iEt/\hbar)$ göz önüne alınırsa, serbest parçacık için genel çözüm

$$\Psi(x,t) = Ae^{ik(x-\frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x+\frac{\hbar k}{2m}t)}. \qquad [2.93]$$

olur.

x ve t değişkenlerini υ herhangi bir sabit olmak üzere $(x \pm \upsilon t)$ şeklinde içeren her fonksiyon $\mp x$ yönünde υ hızıyla ilerleyen sabit bir dalga profilini temsil eder. Dalga

formu üzerindeki sabit bir nokta (örneğin bir maksimum ya da bir minimum nokta) argümanın sabit bir değerine karşılık gelir. Böylece

$$x \pm vt = \text{sabit}, \qquad x = \mp vt + \text{sabit}$$

olur. Dalga formu üzerindeki her nokta aynı hızla hareket ettiğinden, dalga ilerlerken *şekli* değişmez. Bu nedenle, 2.93 nolu denklemdeki ilk terim *sağa* doğru ilerleyen bir dalgayı ve ikinci terim *sola* doğru ilerleyen aynı enerjili bir dalgayı temsil eder. Bunların arasındaki fark k'nın önündeki *işaret* olduğundan, dalga fonksiyonunu

$$\Psi_k(x,t) = Ae^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)} \qquad [2.94]$$

şeklinde de yazmak mümkündür. Burada sola doğru ilerleyen dalgayı da temsil etmesi için k'nın negatif olmasına izin veriyoruz. Yani,

$$k \equiv \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \qquad \begin{cases} k > 0 \Rightarrow \text{sağa doğru ilerleme} \\ k < 0 \Rightarrow \text{sola doğru ilerleme} \end{cases} \qquad [2.95]$$

olur. Açıkça serbest parçacığın "kararlı durumları" ilerleyen dalgalardır. Bunların dalga boyu $\lambda = 2\pi/|k|$'dir ve de Broglie formülü (1.39 nolu denklem) uyarınca

$$p = \hbar k \qquad [2.96]$$

kadarlık momentum taşırlar.

Bu dalgaların hızı (t'nin katsayısı/x'in katsayısı)

$$v_{\text{kuantum}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}} \qquad [2.97]$$

dir. Öte yandan, enerjisi E ile verilen serbest bir parçacığın *klasik* hızı $E = (1/2)mv^2$ ($V = 0$ olduğundan yalnızca kinetik enerji var) ifadesinden bulunur. Yani

$$v_{\text{klasik}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{kuantum}} \qquad [2.98]$$

olur. Açıkça görüldüğü gibi kuantum mekaniksel dalga fonksiyonu temsil ettiği parçacığın hızının *yarısı* kadarlık bir hızla hareket etmektedir. Bu çelişkiye bir süre sonra tekrar döneceğiz. İlk olarak yüzleşmemiz gereken çok daha ciddi bir sorunumuz var: bu *dalga fonksiyonu normlanabilir bir fonksiyon değildir*. Yani,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k \, dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = |A|^2(\infty) \qquad [2.99]$$

dir. Serbest parçacık için ayrılabilen çözümler fiziksel olarak kabul edilebilir durumları temsil etmezler. *Serbest bir parçacık kararlı bir durumda bulunamaz.*

Ama bu ayrılabilen çözümlerin işimize yaramayacağı anlamına gelmez, çünkü bu çözümlerin *fiziksel* yorumlarından tamamen bağımsız olarak *matematiksel* bir işlevi vardır. Zamana bağlı Schrödinger denkleminin genel çözümü halen ayrılabilen çözümlerin lineer bir kombinasyonudur (ancak, bu kez kesikli n indisi üzerinden *toplam* yerine sürekli k değişkeni üzerinden *integral* olarak verilir):

$$\boxed{\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)} \, dk.} \qquad [2.100]$$

(Uygunluk açısından integralin dışına $1/\sqrt{2\pi}$ çarpanı yazılmıştır. 2.17 nolu denklemdeki c_n katsayısının işlevini $(1/\sqrt{2\pi})\phi(k)dk$ kombinasyonu görmektedir). Uygun $\phi(k)$ fonksiyonu için bu dalga fonksiyonu *artık normlanabilir* bir fonksiyondur. Ancak ister istemez belli bir k *aralığına*, dolayısıyla enerji ve hız aralığına sahiptir. Bu tür dalga fonksiyonunu **dalga paketi** olarak adlandırıyoruz.[32]

Genel kuantum mekanik probleminde $\Psi(x, 0)$ verilir $\Psi(x, t)$ dalga fonksiyonunu bulmamız istenir. Serbest parçacık için çözüm 2.100 nolu denklemde verildiği gibidir ve kalan tek sorun başlangıç dalga fonksiyonuyla uyuşacak $\phi(k)$ 'nın nasıl belirleneceğidir. Başlangıç dalga fonksiyonu:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} \, dk. \qquad [2.101]$$

Bu Fourier analizinin klasik problemidir ve yanıtı **Plancherel teoremiyle** verilir (2.20 nolu probleme bakınız):

$$\boxed{f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} \, dk \iff F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} \, dx.} \qquad [2.102]$$

$F(k), f(x)$ fonksiyonunun **Fourier dönüşümü** ve $f(x)$, $F(k)$ fonksiyonunun **ters Fourier dönüşümü** olarak adlandırılır (tek fark üstel kısmın işaretidir). Şüphesiz kabul edilebilen fonksiyonlar üzerinde bazı kısıtlamalar vardır: integraller *mevcut* olmalıdır.[33] Bizim amaçlarımız için bu durum $\Psi(x, 0)$'ın kendisinin normlanabilir olması şartıyla garanti edilmektedir. O halde serbest parçacık için genel kuantum mekanik probleminin

[32] Sinüzoidal (harmonik) dalgalar sonsuza kadar her yeri kaplarlar ve normlanamazlar. Ancak bu dalgaların *üst üste bindirilmesiyle* elde edilen girişimler yerelleşme ve normlamaya izin verirler.

[33] $f(x)$ üzerindeki gerek ve yeter şart, $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 \, dx$ integralinin *sonlu* olmasıdır (bu durumda $\int_{-\infty}^{\infty} |F(k)|^2 \, dk$ integrali de sonlu olur. Aslında bu iki integral birbirine eşittir. Bazıları *bunu* 2.102 nolu denkleme isim vermeden Plancherel teoremi olarak adlandırır). Arfken (24. dipnot), 15.5. Kesime bakınız.

çözümü

$$\boxed{\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx}\, dx.} \qquad [2.103]$$

ile birlikte 2.100 nolu denklem tarafından verilir.

Örnek 2.6 Başlangıçta $-a < x < a$ aralığında yerelleşmiş serbest bir parçacık için

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A, & -a < x < a, \\ 0, & \text{diğer yerlerde} \end{cases}$$

dir. Burada A ve a pozitif reel sabitlerdir. $\Psi(x, t)$'yi bulunuz.

Çözüm: İlk olarak $\Psi(x, 0)$'yı normlayalım:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2\, dx = |A|^2 \int_{-a}^{a} dx = 2a|A|^2 \;\Rightarrow\; A = \frac{1}{\sqrt{2a}}.$$

2.103 nolu denklemi kullanarak $\phi(k)$ 'yı hesaplayalım:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-a}^{a} e^{-ikx}\, dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \frac{e^{-ikx}}{-ik} \Big|_{-a}^{a}$$

$$= \frac{1}{k\sqrt{\pi a}} \left(\frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2i} \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin(ka)}{k}.$$

Son olarak bulunan $\phi(k)$ ifadesi 2.100 nolu denklemde yerine yazılır ve

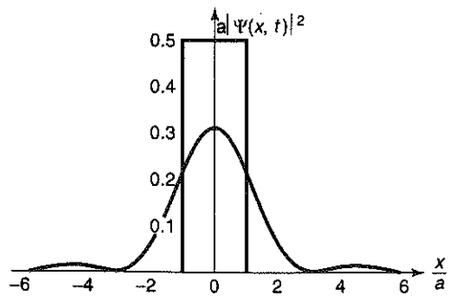
$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(ka)}{k} e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)}\, dk. \qquad [2.104]$$

elde edilir. Her ne kadar bu integral basit fonksiyonlar cinsinden çözülemese de şüphesiz sayısal olarak hesaplanabilir (2.8 nolu şekil). Aslında, 2.100 nolu denklemdeki $\Psi(x, t)$'yi veren integralin açık olarak *hesaplanabildiği* zarif birkaç örnek vardır. Oldukça güzel bir örnek için 2.22 nolu probleme bakabilirsiniz.

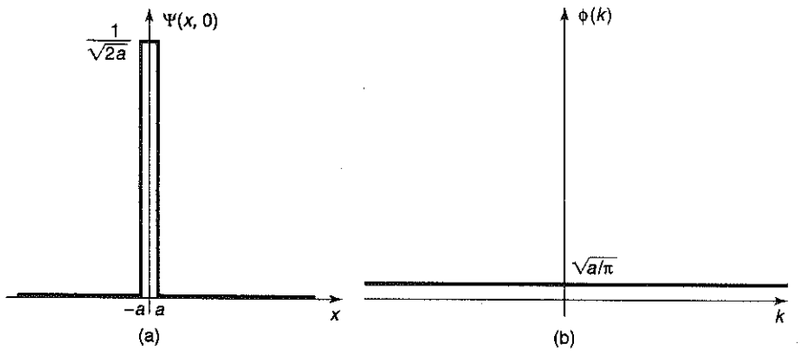
Limit durumları araştırmak aydınlatıcı olabilir. a çok küçük ise, başlangıç dalga fonksiyonu oldukça iyi yerelleşmiş keskin bir tepeciktir (2.9(a) nolu şekil). Bu durumda küçük açı yaklaşımını kullanarak, $\sin(ka) \approx ka$ yazabilirsiniz ve o zaman

$$\phi(k) \approx \sqrt{\frac{a}{\pi}}$$

olur.



ŞEKİL 2.8: $|\Psi(x,t)|^2$ 'nin (2.104 nolu denklem), $t = 0$ (dikdörtgen) ve $t = ma^2/\hbar$ (eğri) anlarındaki grafiği.

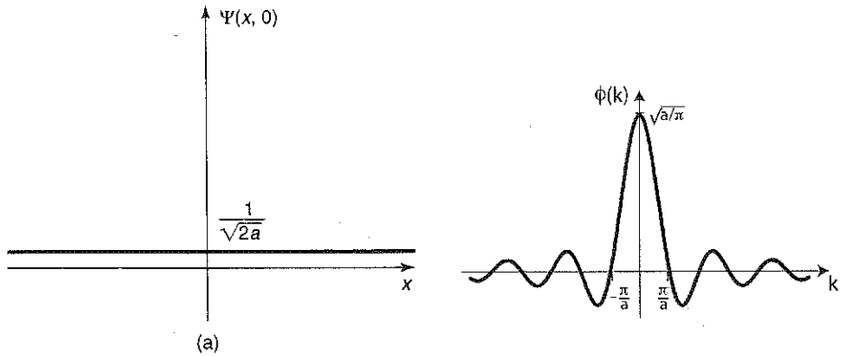


ŞEKİL 2.9: Küçük a değerleri için 2.6 nolu örnek (a) $\Psi(x, 0)$'ın grafiği (b) $\phi(k)$ 'nın grafiği

Böylece k'lar gözükmediği için $\phi(k)$ *sabit* bir fonksiyon olur (2.9(b) nolu şekil). Bu durum belirsizlik ilkesinin tipik bir örneğidir: *konumdaki* yayılma (belirsizlik) küçükse *momentumdaki* yayılma (belirsizlik) yani k'daki yayılma (2.96 nolu denkleme bakınız) büyük olmalıdır. Diğer uç durumda yani büyük a değerlerinde konumdaki yayılma (belirsizlik) büyük olur (2.10(a) nolu şekil) ve

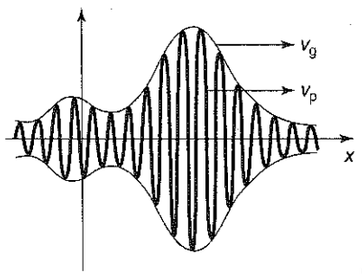
$$\phi(k) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\sin(ka)}{ka}.$$

şeklini alır. Bu durumda $\sin z/z$ fonksiyonu $z = 0$'da maksimumdur ve $z = \pm\pi$ (buradaki örnekte $k = \pm \pi/a$) değerlerinde sıfıra düşer. Böylece büyük a değerlerinde, $\phi(k)$, $k = 0$ civarında keskin bir tepecik verir (2.10(b) nolu şekil). Bu kez parçacık iyi tanımlanmış bir momentuma fakat kötü tanımlanmış bir konuma sahip olacaktır.



ŞEKİL 2.10: Büyük a değerleri için 2.6 nolu örnek (a) $\Psi(x, 0)$'ın grafiği (b) $\phi(k)$ 'nın grafiği

Şimdi daha önce söz ettiğimiz çelişkiye geri dönelim: 2.94 nolu denklemdeki ayrılabilen çözüm $\Psi_k(x, t)$ görünüşte temsil ettiği parçacık için "yanlış" hızla hareket etmektedir. Aslına bakılırsa, Ψ_k'nın fiziksel olarak kabul edilebilir bir durum olmadığını keşfettiğimiz anda problem uçup gitmiştir. Bununla beraber, hız hakkındaki bilginin serbest parçacık dalga fonksiyonu (2.100 nolu denklem) içinde nasıl yer aldığını keşfetmek ilginç olabilir. Ana fikir şudur: Bir dalga paketi, genliği ϕ fonksiyonuyla modüle edilmiş sinüzoidal (harmonik) fonksiyonların üst üste bindirilmesiyle elde edilir (2.11 nolu şekil) ve bir "zarfın" içindeki "küçük dalgacıklardan" meydana gelir. Parçacığın hızına karşılık gelen hız değeri tek tek her bir küçük dalgacığın hızı (**faz hızı**) olmayıp "zarfın" hızıdır (**grup hızı**). Grup hızı genellikle dalgaların doğasına bağlı olarak kendisi oluşturan küçük dalgacıkların hızına eşit olabilir, bu hızdan büyük olabilir ya da küçük olabilir. Bir sicim üzerindeki dalgalar için grup hızıyla faz hızı aynıdır. Küçük bir gölete taş attığınız zaman farkedeceğiniz gibi, su dalgaları için grup hızı faz hızının yarısıdır. Eğer tek bir dalgacığa odaklanırsanız, bunun arka tarafta oluşup, grup içinde ilerleyip, ön tarafta sönerken, grubun bir bütün olarak yarım hızla ilerlediğini görürsünüz. Şimdi göstermemiz gereken; kuantum mekaniğinde, serbest bir parçacığın dalga fonksiyonu için



ŞEKİL 2.11: Bir dalga paketi. "Zarf" grup hızıyla, "küçük dalgacıklar" faz hızıyla hareket ederler.

grup hızının, faz hızının iki katına eşit olduğu yani tam olarak klasik parçacık hızını temsil ettiğidir.

Artık çözmemiz gereken problem, genel formu

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx-\omega t)}\, dk$$

olarak verilen bir dalga paketinin grup hızını belirlemektir (göz önüne aldığımız örnekte $\omega = (\hbar k^2/2m)$ dir. Ancak, bulacağımız ifade **dağınım bağıntısına** bakılmaksızın *her çeşit* dalga paketi için geçerlidir. ω'yı k'nın fonksiyonu olarak veren bağıntıya **dağınım bağıntısı** adı verilir). $\phi(k)$ 'nın belirli bir k_0 değeri etrafında dar bir bölgede bir tepe noktasına ulaştığını varsayalım (k'ya göre geniş bir yayılma hakkında *yasa dışı* bir durum söz konusu değildir. Ancak, farklı bileşenler farklı hızlarda hareket ettiklerinden bu tür dalga paketlerinin şekilleri hızla bozulur. Bu durumda iyi tanımlanmış bir hızla bir bütün olarak ilerleyen "grup" kavramı anlamını yitirir). k_0 civarındaki noktalar haricinde integrand yoksanabileceğinden, $\omega(k)$'yı bu nokta civarında Taylor serisine açıp yalnızca baskın olan terimleri tutabiliriz:

$$\omega(k) \cong \omega_0 + \omega_0'(k - k_0).$$

Burada ω_0', ω'nın k'ya göre türevinin k_0'daki değeridir.

İntegral değişkenini değiştirerek, k yerine $s \equiv k - k_0$'ı kullanalım:

$$\Psi(x,t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0+s) e^{i[(k_0+s)x-(\omega_0+\omega_0' s)t]}\, ds.$$

$t = 0$ anında

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0+s) e^{i(k_0+s)x}\, ds$$

olur. Daha sonraki t zamanları için

$$\Psi(x,t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega_0 t + k_0 \omega_0' t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0+s) e^{i(k_0+s)(x-\omega_0' t)}\, ds$$

olur. Bu integral x yerine $(x - \omega_0' t)$ gelmesi dışında $\Psi(x, 0)$ ifadesindeki integral ile aynıdır. Böylece

$$\Psi(x,t) \cong e^{-i(\omega_0 - k_0\omega_0')t} \Psi(x - \omega_0' t, 0) \qquad [2.105]$$

olur. $|\Psi|^2$ 'yi etkilemeyen öndeki faz çarpanı dışında, dalga paketinin ω_0' hızıyla hareket ettiği açıkça görülmektedir. Yani grup hızı

($k = k_0$'da hesaplanacak) olur. Bu ifade faz hızını veren

$$v_{\text{faz}} = \frac{\omega}{k} \qquad [2.107]$$

ifadesinden farklıdır. Göz önüne aldığımız serbest parçacık için, $\omega = (\hbar k^2/2m)$

olduğundan faz hızı $\omega/k = (\hbar k/2m)$ ve grup hızı $d\omega/dk = (\hbar k/m)$ bulunur. Grup hızı faz hızının iki katıdır. Böylece, kararlı durumların faz hızının klasik parçacık hızını temsil etmediğini, oysa dalga paketinin grup hızının temsil ettiği parçacığın hızına eşit olduğunu doğrulamış olduk. Yani

$$v_{\text{klasik}} = v_{\text{grup}} = 2v_{\text{faz}} \qquad [2.108]$$

dir.

Problem 2.18 $[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}]$ ve $[C \cos kx + D \sin kx]$ fonksiyonlarının birbirlerine denk olduğunu gösteriniz. C ve D sabitlerini A ve B cinsinden ya da A ve B sabitlerini C ve D cinsinden belirleyiniz. *Açıklama:* Kuantum mekaniğinde, $V = 0$ olduğunda üstel ifade *ilerleyen dalgaları* temsil eder ve serbest parçacığın tartışılmasında daha uygundur. Öte yandan, sinüs ve kosinüs fonksiyonları *duran (kararlı) dalgalara* karşılık gelirler ve sonsuz potansiyel kuyusu için doğal olarak elde edilirler.

Problem 2.19 2.94 nolu denklemle verilen serbest parçacık dalga fonksiyonu için olasılık akım yoğunluğunu, (J) bulunuz (1.14 nolu problem). Olasılık akımının akış yönü ne tarafa doğrudur?

****Problem 2.20** Bu problem, *sonlu* bir aralık üzerinde sıradan Fourier serileri teorisinden başlayıp, aralığı sonsuza genişleterek Plancherel teoreminin kanıtlanmasında size bir rehber olarak tasarlanmıştır.

(a) Dirichlet teoremine göre $[-a, +a]$ aralığında tanımlı "herhangi" bir fonksiyon Fourier serisine açılabilir:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n \sin(n\pi x/a) + b_n \cos(n\pi x/a)].$$

Bu ifadenin

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/a}$$

olarak yazılabileceğini gösteriniz.

(b) Fourier numarasında uygun düzenleme yaparak,

$$c_n = \frac{1}{2a} \int_{-a}^{+a} f(x) e^{-in\pi x/a}\, dx$$

olduğunu gösteriniz.

(c) n ve c_n yerine yeni değişkenler $k = (n\pi/a)$ ve $F(k) = \sqrt{2/\pi}\ ac_n$'i kullanarak, (a) ve (b) şıklarının aşağıdaki gibi yazılabileceğini gösteriniz.

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} \Delta k; \quad F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^{+a} f(x) e^{-ikx}\, dx$$

Burada Δk, bir n değerinden ötekine geçerken k'daki artım miktarıdır.

(d) $a \to \infty$ limitine giderek Plancherel teoremini elde ediniz. *Açıklama:* Kökenleri oldukça farklı olsa da $a \to \infty$ limitinde $F(k)$'yi $f(x)$ cinsinden ve $f(x)$'i $F(k)$ cinsinden veren formüllerin benzer yapıda olması oldukça şaşırtıcı ve bir o kadar da güzeldir.

Problem 2.21 Serbest bir parçacığın başlangıçtaki dalga fonksiyonu

$$\Psi(x, 0) = Ae^{-a|x|}$$

olarak verilmiştir. Burada A ve a pozitif ve reel sabitlerdir.

(a) $\Psi(x, 0)$'i normlayın.

(b) $\phi(k)$'yı bulun.

(c) $\Psi(x, t)$'yi integral formunda oluşturun.

(d) a'nın çok büyük ve çok küçük olduğu limit durumları tartışın.

***Problem 2.22 Gauss dalga paketi**: Serbest bir parçacığın başlangıçtaki dalga fonksiyonu

$$\Psi(x, 0) = Ae^{-ax^2}$$

dir. Burada A ve a sabitlerdir (a reel ve pozitif).

(a) $\Psi(x, 0)$'ı normlayın.

(b) $\Psi(x, t)$'yi bulun. *Yardım:*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ax^2+bx)}\, dx$$

formundaki integraller "kareye tamamlanarak" hesaplanabilir.

$y \equiv \sqrt{a}[x + (b/2a)]$'yı tanımlayarak, $ax^2 + bx = y^2 - (b^2/4a)$ olduğuna dikkat ediniz. *Yanıt:*

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{-ax^2/[1+(2i\hbar at/m)]}}{\sqrt{1 + (2i\hbar at/m)}}.$$

(c) $|\Psi(x,t)|^2$'yi bulunuz. Yanıtınızı

$$w \equiv \sqrt{\frac{a}{1 + (2\hbar at/m)^2}}$$

büyüklüğü cinsinden ifade edin. $t = 0$ anında $|\Psi|^2$'yi x'in fonksiyonu olarak çizin. Daha büyük t zamanları için $|\Psi|^2$'yi x'e göre tekrar çizerek zamanla $|\Psi|^2$'nin davranışını yorumlayın.

(d) $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, σ_x ve σ_p'yi bulunuz. *Kısmi yanıt:* $\langle p^2 \rangle = a\hbar^2$ (ancak, bu basit formu elde etmek için uzun cebirsel işlemler gerekli).

(e) Belirsizlik ilkesi sağlanıyor mu? Sistem hangi t değerinde belirsizlik limitine en yakın olur?

2.5 DELTA FONKSİYONU POTANSİYELİ

2.5.1 Bağlı Durumlar ve Saçılma Durumları

Şu ana kadar zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin birbirinden oldukça farklı iki cins çözümüyle karşılaştık. Sonsuz kare kuyu ve harmonik salınıcı için *normlanabilir* ve *kesikli n* indisiyle etiketlenmiş çözümler bulduk. Oysa serbest parçacık için *normlanamayan* ve *sürekli k* değişkeniyle etiketlenmiş çözümler elde ettik. İlk sınıftaki çözümler fiziksel olarak kabul edilebilir durumları temsil ederken, diğer sınıftaki çözümler temsil etmezler. Ancak her iki durumda da zamana bağlı Schrödinger denkleminin genel çözümü kararlı durumların lineer bir kombinasyonu olarak verilir. İlk sınıftaki çözümler için bu kombinasyon n üzerinden bir *toplamla*, diğer sınıftaki çözümler için k üzerinden bir *integralle* ifade edilir. Bu ayrımın fiziksel önemi nedir?

Klasik mekanikte, zamandan bağımsız bir boyutlu bir potansiyel birbirinden oldukça farklı iki tür harekete yol açar. Her iki uçta $V(x)$ parçacığın E toplam enerjisinden büyükse (2.12(a) nolu şekil), parçacık potansiyel kuyusunun içine hapsolur, **dönüm (dönme) noktaları** arasında ileri geri hareketine devam eder ve kuyudan dışarı kaçamaz (şüphesiz burada motor gibi bir kaynakla dışarıdan ilave enerji vermediğimizi varsayıyoruz). Bu tür harekete **bağlı durum** diyoruz. Öte yandan, bir ya da her iki uçta parçacığın E toplam enerjisi $V(x)$'den büyükse parçacık "sonsuzdan" gelir ve potansiyelin etkisi altında ya yavaşlar ya da hızlanır ve sonsuza döner (2.12(b) nolu şekil). Sürtünme gibi enerji *yitimine* neden olacak bir mekanizma olmadıkça, parçacık potansiyel içinde tuzaklanmaz (ancak burada böyle süreçlerden söz etmiyoruz). Bu tür harekete **saçılma süreci** diyoruz. Örneğin harmonik salınıcı gibi bazı tür potansiyeller yalnızca bağlı durumlara izin verirken, örneğin bir potansiyel tepesi gibi bazı tür potansiyeller de yalnızca saçılma durumlarına izin verirler. Parçacığın enerjisine bağlı olarak bazı tür potansiyeller de her iki duruma da izin verirler.

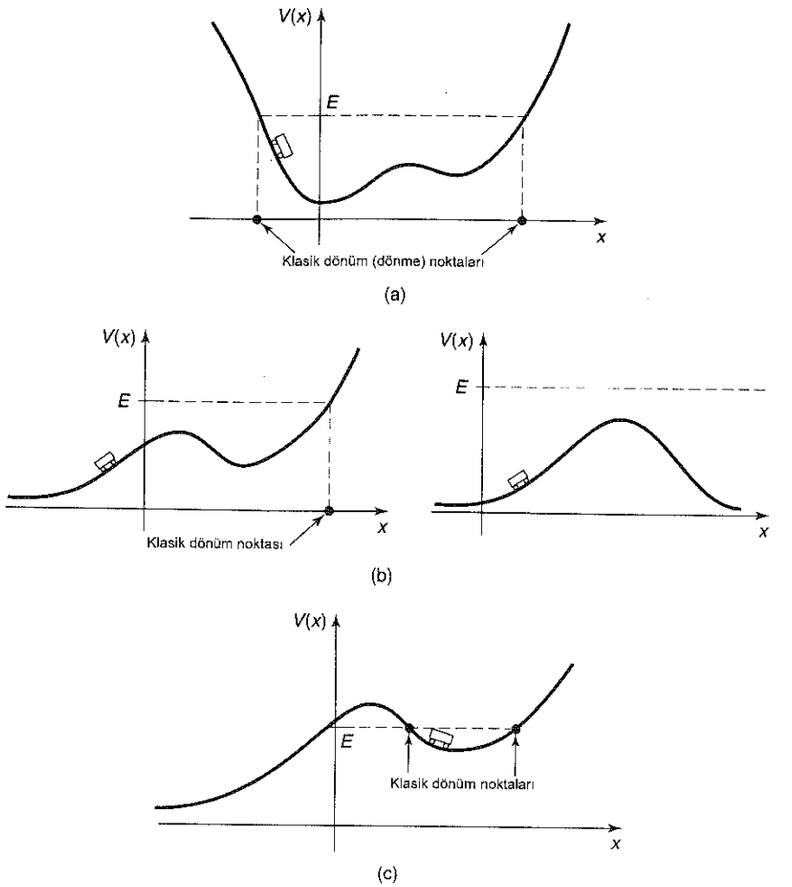
Schrödinger denkleminin iki cins çözümleri tam olarak bağlı durumlara ve saçılma durumlarına karşılık gelmektedir. Kuantum düzeyinde bu ayrım daha açık hale gelir çünkü **tünelleme olayı** parçacığın herhangi bir sonlu potansiyel engelinin içinden "sızmasına" izin vermektedir. Dolayısıyla önemli olan potansiyelin sonsuzdaki davranışıdır (2.12(c) nolu şekil).

$$\begin{cases} E < [V(-\infty) \text{ ve } V(+\infty)] \Rightarrow \text{ bağlı durum} \\ E > [V(-\infty) \text{ veya } V(+\infty)] \Rightarrow \text{ saçılma durumu} \end{cases} \qquad [2.109]$$

"Gerçek yaşamda", çoğu potansiyel sonsuzda sıfıra gider. Bu durumda yukarıda verdiğimiz ölçüt basitleşir:

$$\begin{cases} E < 0 \Rightarrow \text{ bağlı durum} \\ E > 0 \Rightarrow \text{ saçılma durumu} \end{cases} \qquad [2.110]$$

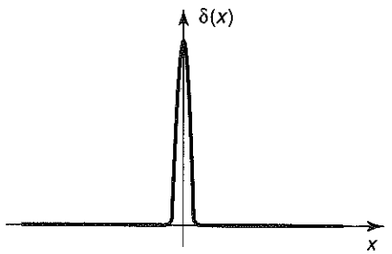
Sonsuz kare kuyu ve harmonik salınıcı potansiyelleri $x \to \pm\infty$ iken, sonsuza gittiklerinden yalnızca bağlı durumlara izin verirler. Serbest parçacık potansiyeli



ŞEKİL 2.12: (a) Bağlı durum (b) Saçılma durumları (c) *Klasik* olarak bağlı durum ama kuantum saçılma durumu.

heryerde sıfır olduğundan yalnızca saçılma durumlarına izin verir.[34] Bu ve bundan sonraki kesimde her iki cins durumlara neden olan potansiyelleri inceleyeceğiz.

[34] Eğer aşırı derecede dikkatli biriyseniz, $E > V_{min}$ olmasını gerektiren genel teoremin (2.2 nolu problem) hiçbir şekilde normlanamayan saçılma durumlarına uygulanamayacağını fark etmiş olmalısınız. Eğer bu canınızı sıkıyorsa, serbest parçacık için $E \leq 0$ durumunda Schrödinger denklemini çözmeyi deneyin ve bu çözümlerin lineer kombinasyonlarının da normlanamayacağını görün. Pozitif enerjili çözümlerin kendileri tam bir takım oluştururlar.



ŞEKİL 2.13: Dirac delta fonksiyonu (2.111 nolu denklem).

2.5.2 Delta Fonksiyonlu Kuyu

Dirac delta fonksiyonu orijinde yerelleşmiş sonsuz yükseklikte, sonsuz küçük genişlikte bir tepe olup, altındaki *alan* 1'e eşittir (2.13 nolu şekil):

$$\delta(x) \equiv \left\{ \begin{array}{ll} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{array} \right\}, \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,dx = 1. \qquad [2.111]$$

Aslında delta fonksiyonu $x = 0$'da sonlu olmadığından teknik olarak bir fonksiyon değildir. Matematikçiler delta fonksiyonunu **genelleştirilmiş fonksiyon** ya da **dağılım**[35] olarak adlandırırlar. Bununla birlikte teorik fizikte oldukça yararlı bir kavramdır. Örneğin elektrodinamikte noktasal bir yük için yük *yoğunluğu* delta fonksiyonuyla verilir. $\delta(x-a)$'nın a noktasında, alanı 1'e eşit olan bir tepe olacağına dikkat ediniz. $\delta(x-a)$'yı *herhangi* bir $f(x)$ fonksiyonuyla çarpmak $f(a)$ ile çarpmakla aynıdır,

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a), \qquad [2.112]$$

çünkü bu çarpım a noktası dışında heryerde sıfırdır. Özellikle:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)\,dx = f(a)\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)\,dx = f(a). \qquad [2.113]$$

Bu delta fonksiyonunun en önemli özelliğidir: $f(x)$ fonksiyonunun $\delta(x-a)$ ile integrali onun a noktasındaki değerini verir. Şüphesiz integralin limitleri $-\infty$'dan $+\infty$'a gitmek zorunda değildir, önemli olan integrasyon bölgesinin a noktasını içermesidir. Yani herhangi bir $\epsilon > 0$ için $a-\epsilon$'dan $a+\epsilon$'a kadar integrasyon yeterlidir.

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \qquad [2.114]$$

[35] Delta fonksiyonu bir fonksiyonlar *dizisinin limiti* olarak da düşünülebilir. Örneğin yüksekliği sürekli artan, genişliği sürekli azalan dikdörtgenler ya da üçgenler gibi.

formunda verilmiş bir potansiyel düşünelim. Burada α pozitif bir sabittir.[36] Bu potansiyel tıpkı sonsuz kare kuyu gibi yapay olmakla beraber üzerinde çalışmak için oldukça basittir ve çok az analitik hesapla temel teoriyi oldukça iyi açığa çıkarır. Delta fonksiyonlu kuyu için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi \qquad [2.115]$$

olur. Hem bağlı durumlar ($E < 0$) hem de saçılma durumları ($E > 0$) mümkündür.

İlk olarak bağlı durumları inceleyelim. $x < 0$ bölgesinde $V(x) = 0$ olduğundan

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi \qquad [2.116]$$

dir. Burada κ

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \qquad [2.117]$$

olarak verilir (E negatif kabul edildiğinden κ reel ve pozitiftir). 2.116 nolu denklemin genel çözümü:

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \qquad [2.118]$$

Ancak, ilk terim $x \to -\infty$ iken ıraksar. Bu yüzden $A = 0$ seçilir:

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad (x < 0). \qquad [2.119]$$

$x > 0$ bölgesinde $V(x)$ yine sıfır olduğundan genel çözüm $F\exp(-\kappa x) + G\exp(\kappa x)$ formundadır. Bu sefer $x \to \infty$ iken ikinci terim ıraksar. Bu nedenle $x > 0$ için

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}, \quad (x > 0) \qquad [2.120]$$

seçilir. Geriye kalan tek işlem: $x = 0$'da uygun sınır koşullarını kullanarak, iki fonksiyonu birbirine bitiştirmektir. Daha önceden ψ için standart sınır koşullarını aktarmıştım:

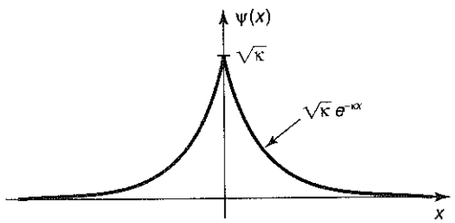
$$\boxed{\begin{array}{l} 1.\ \psi \quad \text{daima sürekli} \\ 2.\ d\psi/dx, \text{ potansiyelin sonsuz olduğu noktalar hariç sürekli} \end{array}} \qquad [2.121]$$

İlk sınır koşulundan $F = B$ elde edilir. Dolayısıyla çözüm

$$\psi(x) = \left\{ \begin{array}{ll} Be^{\kappa x}, & (x \leq 0), \\ Be^{-\kappa x}, & (x \geq 0); \end{array} \right. \qquad [2.122]$$

olarak yazılabilir. $\psi(x)$'in grafiği 2.14 nolu şekilde verilmiştir. İkinci sınır koşulundan

[36] Delta fonksiyonu *1/uzunluk* boyutundadır (2.111 nolu denkleme bakınız). Bu durumda α (*enerji* × *uzunluk*) boyutunda olur.



ŞEKİL 2.14: Delta fonksiyonu potansiyeli için bağlı durum dalga fonksiyonu (2.122 nolu denklem).

bir şey elde edemeyiz. Tıpkı sonsuz kare kuyudaki gibi burada da bitişme noktasında V sonsuzdur. Grafikten de açık olarak görüldüğü gibi, dalga fonksiyonu $x = 0$'da sivri bir uca (kink) sahiptir. Üstelik bu noktaya kadar delta fonksiyonu öyküye hiç katılmadı. O zaman delta fonksiyonu $x = 0$'da ψ'nin türevindeki süreksizliği belirlemelidir. Şimdi bunun nasıl çalıştığını ve yan ürün olarak $d\psi/dx$'in niçin sürekli olduğunu göreceğiz.

Burada ana fikir, Schrödinger denklemini $-\epsilon$'dan $+\epsilon$'a kadar *integre etmek* ve daha sonra $\epsilon \to 0$ limitine geçmektir. O zaman

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}\,dx + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x)\,dx = E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)\,dx \qquad [2.123]$$

yazılabilir. İlk integral her iki uç noktada hesaplanan $d\psi\,/\,dx$'i verir. Son integral sonlu yüksekliğe sahip ve sıfıra doğru giden bir genişliği olan ince bir dilimin alanı olduğundan, $\epsilon \to 0$ limitinde sıfır olur. Böylelikle

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) \equiv \lim_{\epsilon\to 0}\left(\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{+\epsilon} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-\epsilon}\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x)\,dx. \qquad [2.124]$$

olur. Tipik olarak sağ taraftaki limit yine sıfır olur ve bu yüzden $d\psi\,/\,dx$ süreklidir. $V(x)$ sınırda *sonsuz* olduğu zaman buradaki iddia doğru olmaz. Özellikle $V(x) = -\alpha\delta(x)$ için 2.113 nolu denklem kullanılarak

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0) \qquad [2.125]$$

elde edilir. 2.122 nolu denklemle verilen çözüm için

$$\begin{cases} d\psi/dx = -B\kappa e^{-\kappa x}, & (x > 0)\text{için;}\quad d\psi/dx\big|_+ = -B\kappa, \\ d\psi/dx = +B\kappa e^{+\kappa x}, & (x < 0)\text{için;}\quad d\psi/dx\big|_- = +B\kappa, \end{cases}$$

olur. Böylece $\Delta(d\psi\,/\,dx) = -2B\kappa$ olur ve $\psi(0) = B$ olduğundan, 2.125 nolu denklemden

$$\kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \qquad [2.126]$$

bulunur. Böylece izin verilen enerji değerleri (2.117 nolu denklem)

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \qquad [2.127]$$

olur. Son olarak ψ'yi normlayalım:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,dx = 2|B|^2\int_0^{\infty} e^{-2\kappa x}\,dx = \frac{|B|^2}{\kappa} = 1$$

Pozitif reel kök seçilirse

$$B = \sqrt{\kappa} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \qquad [2.128]$$

olur. Açıkçası delta fonksiyonlu kuyunun "şiddeti" α ne olursa olsun, *yalnızca bir tane* bağlı durumu vardır:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}; \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}.} \qquad [2.129]$$

Şimdi de $E > 0$ ile verilen *saçılma* durumlarına bakalım. $x < 0$ için Schrödinger denklemi

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$$

olarak yazılır. Burada

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad [2.130]$$

olmak üzere reel ve pozitiftir. Genel çözüm

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad [2.131]$$

şeklini alır. Bu sefer her iki terim de ıraksamadığından, bunları elimizde tutmalıyız. Benzer şekilde $x > 0$ için

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \qquad [2.132]$$

bulunur. $x = 0$'da $\psi(x)$'in sürekli olması koşulundan

$$F + G = A + B \qquad [2.133]$$

elde edilir. Türevler hesaplanırsa

$$\begin{cases} x > 0 \text{ için } d\psi/dx = ik(Fe^{ikx} - Ge^{-ikx}) & \text{ve} \quad d\psi/dx\big|_+ = ik(F-G), \\ x < 0 \text{ için } d\psi/dx = ik(Ae^{ikx} - Be^{ikx}) & \text{ve} \quad d\psi/dx\big|_- = ik(A-B), \end{cases}$$

olarak bulunur.

Böylece $\Delta(d\psi/dx) = ik(F - G - A + B)$ olur. Ayrıca $\psi(0) = (A + B)$ dir. Bu durumda, 2.125 nolu denklemle verilen ikinci sınır koşulundan

$$ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B) \qquad [2.134]$$

elde edilir. Ya da daha toparlanmış bir biçimde

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta), \qquad \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}. \qquad [2.135]$$

şeklinde yazılır.

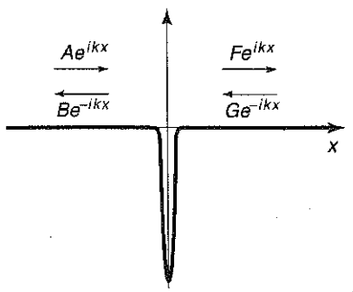
Her iki sınır koşulunu da uyguladıktan sonra, elimizde 2.133 ve 2.135 nolu denklemlerle verilen iki denklem fakat dört bilinmeyen (A, B, F ve G) var (k'yı da sayarsanız, *beş* bilinmeyen var). Normlama işlemi yardımcı olmaz çünkü saçılma durumları normlanamazlar. Bu aşamada biraz durup, yukarıdaki sabitlerin fiziksel anlamını inceleyelim. Zamana bağımlı çarpan $\exp(-iEt/\hbar)$ ile birleştirildiğinde $\exp(ikx)$ *sağa* doğru ilerleyen bir dalgayı, $\exp(-ikx)$ ise *sola* doğru ilerleyen bir dalgayı temsil etmektedir. Böylece 2.131 nolu denklemdeki A sabiti sol taraftan gelen dalganın genliği, B sabiti de sol tarafa geri yansıyan dalganın genliği olur. Benzer şekilde, 2.132 nolu denklemdeki F sabiti sağ tarafa geçen dalganın genliği ve G sabiti de sağ taraftan gelen dalganın genliği olacaktır (2.15 nolu şekile bakınız). Tipik bir saçılma deneyinde parçacıklar yalnızca tek bir taraftan hedefe gönderilirler. Parçacıkların sol taraftan gönderildiklerini kabul edelim. Böylece *sağ* taraftan gelen dalganın genliği sıfır olacaktır:

$$\text{sol taraftan gönderilen parçacıklarla saçılma için } G = 0, \qquad [2.136]$$

A, **gelen dalganın** genliği, B **yansıyan dalganın** genliği ve F de **geçen dalganın** genliği olur. 2.133 ve 2.134 nolu denklemlerden B ve F, A cinsinden çözülürse

$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta}A, \quad F = \frac{1}{1 - i\beta}A \qquad [2.137]$$

bulunur. (Eğer sağ taraftan gönderilen parçacıklarla saçılmayı çalışmak isterseniz, $A = 0$ alınır. G gelen genlik, F yansıyan genlik ve B de geçen genlik olacaktır).



ŞEKİL 2.15: Delta fonksiyonlu kuyundan saçılma.

Parçacığın belirli bir konumda bulunma olasılığının $|\Psi|^2$ ile verildiğini biliyoruz. Gelen parçacığın geri yansıma *bağıl*[37] olasılığı:

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2}. \qquad [2.138]$$

R'ye **yansıma katsayısı** denir (Eğer bir parçacık demeti ile çalışılıyorsa yansıma katsayısı gelen demetin geri yansıtılan *kesrini* tanımlar). Öte yandan, geçme olasılığı da **geçme katsayısı** ile verilir:

$$T \equiv \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \beta^2}. \qquad [2.139]$$

Şüphesiz, yansıma ve geçme olasılıklarının toplamı 1 olmalıdır:

$$R + T = 1. \qquad [2.140]$$

R ve T katsayılarının β'nın fonksiyonu ve dolayısıyla 2.130 ve 2.135 nolu denklemler aracılığıyla E'nin fonksiyonu olduğuna dikkat ediniz:

$$\boxed{R = \frac{1}{1 + (2\hbar^2 E/m\alpha^2)}, \quad T = \frac{1}{1 + (m\alpha^2/2\hbar^2 E)}.} \qquad [2.141]$$

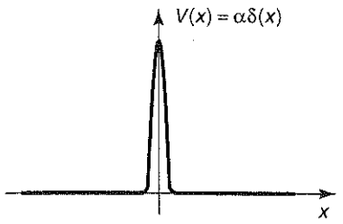
Enerji arttıkça beklendiği gibi, geçme olasılığı artar.

Buraya kadar yaptıklarımız oldukça derli toplu işlemlerdi. Ama tümden göz ardı edemeyeceğimiz zor bir sorun daha var: buradaki saçılma dalga fonksiyonları normlanamazlar ve bu yüzden mümkün parçacık durumlarını temsil etmezler. Ancak bu problemin nasıl çözüleceğini biliyoruz: tıpkı serbest parçacık için yaptığımız gibi kararlı durumların normlanabilir lineer kombinasyonlarını oluşturabiliriz. Gerçek fiziksel parçacıklar böylece elde edilen dalga paketleriyle temsil edilirler. Bu, ilke olarak basit görünse de pratikte kolay bir işlem değildir. Bu noktada en iyisi problemi bilgisayar ortamında çözmektir.[38] Öte yandan, bir enerji aralığına gerek duyulmadan normlanabilir bir serbest parçacık dalga fonksiyonu oluşturmak imkânsız olduğu için R ve T katsayıları, bir E değerinin *civarındaki* parçacıklar için *yaklaşık* yansıma ve geçme olasılıkları olarak yorumlanmalıdır.

Bu arada yeri gelmişken, *kararlı* durumları kullanarak zamana bağımlı bir problemi (parçacıklar gelir, potansiyelden saçılırlar ve sonsuza giderler) analiz edebilmemiz

[37] Bu normlanabilir bir dalga fonksiyonu olmadığından, parçacığın belirli bir konumda bulunma *mutlak* olasılığı iyi tanımlı değildir. Bununla birlikte, gelen ve yansıyan dalgalar için olasılıkların *oranı* anlamlıdır. Bu konu bir sonraki paragrafta daha fazla tartışılacak.

[38] Dalga paketlerinin kuyulardan ve engellerden saçılmasını konu alan sayısal çalışmalar oldukça zengin yapılar ortaya çıkarmıştır. Bu konuda klasik olmuş bir analiz: A. Goldberg, H. M. Schey and J. L. Schwartz, *Am. J. Phys.* **35**, 177 (1967). Web ortamında daha yeni çalışmalar bulabilirsiniz.



ŞEKİL 2.16: Delta Fonksiyonu Engeli.

size şaşırtıcı gelmiş olabilir. Unutulmamalıdır ki, 2.131 ve 2.132 nolu denklemlerdeki ψ, sabit genlikle her iki yönde sonsuza doğru yayılan, kompleks, zamandan bağımsız, sinüzoidal bir fonksiyondur. Böyle olduğu halde bu fonksiyona uygun sınır koşulları uygulayarak *yerelleşmiş* bir dalga paketiyle temsil edilen parçacığın geri yansıma ve potansiyeli geçme olasılıklarını belirleyebildik. Bunun ardında yatan matematiksel mucize şudur: aşikâr zaman bağımlılığı ile birlikte, tüm uzaya yayılmış durumların lineer kombinasyonlarını alarak zaman içinde oldukça iyi işlenmiş bir davranış gösteren ve bir noktada yoğunlaşmış dalga fonksiyonları *kurabiliriz* (2.43 nolu probleme bakınız).

Elimizin altında uygun denklemler oldukça, delta fonksiyonu *engelini* de kısaca inceleyebiliriz (2.16 nolu şekil). Formel olarak tek yapmamız gereken α'nın işaretini değiştirmektir. Tabii ki bu değişiklik bağlı durumu yok eder (2.2 nolu problem). Öte yandan yansıma ve geçme katsayıları yalnızca α^2'ye bağımlı olduklarından değişmezler. Burada ilginç olan, parçacığın engelin içinden diğer tarafa geçmesidir. Şüphesiz, klasik olarak hiçbir parçacık enerjisi ne olursa olsun sonsuz yüksekliğe sahip bir engelin diğer tarafına geçemez. Gerçekte, *klasik* saçılma problemleri oldukça yavandır. $E > V_{\max}$ ise, $T = 1$ ve $R = 0$ olur ve parçacık, diğer tarafa geçer. $E < V_{\max}$ ise $T = 0$ ve $R = 1$ olur. Parçacık gücü tükenene kadar tepeye tırmanır ve sonra geldiği yoldan geri döner. *Kuantum* saçılma problemleri daha zengindir. $E < V_{\max}$ olsa bile, parçacığın potansiyelden geçme olasılığı sıfırdan farklıdır. Bu olaya **tünelleme (tünel olayı)** diyoruz. Bu, modern elektroniğin ilerlemesinde temel mekanizmadır. Ayrıca mikroskopi alanındaki olağanüstü gelişmelerden burada söz etmeyeceğiz. Tersine olarak, $E > V_{\max}$ olsa bile parçacığın geriye yansıma olasılığı vardır. Ama yine de kuantum mekaniğinin sizi koruyacağını düşünerek arabanızı bir tepeye dosdoğru sürmeyin (2.35 nolu problem), bunu pek tavsiye etmem.

***Problem 2.23** Aşağıdaki integralleri hesaplayınız:

(a) $\int_{-3}^{+1}(x^3 - 3x^2 + 2x - 1)\delta(x + 2)\,dx$.

(b) $\int_0^{\infty}[\cos(3x) + 2]\delta(x - \pi)\,dx$.

(c) $\int_{-1}^{+1}\exp(|x| + 3)\delta(x - 2)\,dx$.

Problem 2.24 Delta fonksiyonları integral işareti altında yaşarlar. Herhangi bir $f(x)$ fonksiyonu için

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)D_1(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)D_2(x)\,dx$$

ise, delta fonksiyonları içeren iki ifade ($D_1(x)$ ve $D_2(x)$) birbirine eşit olur.

(a) c reel bir sabit olmak üzere

$$\delta(cx) = \frac{1}{|c|}\delta(x) \qquad [2.142]$$

olduğunu gösterin. (c'nin negatif olduğu durumları kontrol etmeyi unutmayın).

(b) $\theta(x)$ adım fonksiyonu

$$\theta(x) \equiv \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \qquad [2.143]$$

olarak tanımlanır (nadir olarak sorun çıkaran bir durum $\theta(0)$ dır. $\theta(0)$'ı 1/2 olarak tanımlıyoruz). $d\theta/dx = \delta(x)$ olduğunu gösteriniz.

****Problem 2.25** 2.129 nolu denklemle verilen dalga fonksiyonu için belirsizlik ilkesini kontrol edin. *Yardım:* $\langle p^2\rangle$'nin hesabı biraz zordur, çünkü ψ'nin türevi $x = 0$'da süreksizdir. 2.24 nolu problemin (b) şıkkındaki sonucu kullanın. *Kısmi yanıt:* $\langle p^2\rangle = (m\alpha/\hbar)^2$.

***Problem 2.26** $\delta(x)$'in Fourier dönüşümü nedir? Plancherel teoremini kullanarak,

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\,dk \qquad [2.144]$$

olduğunu gösteriniz. *Açıklama:* Bu formül iyi bir matematikçiyi felce uğratabilir. İntegral $x = 0$'da sonsuz olmasına rağmen, $x \neq 0$ iken integrand daima salınım yapacağından sıfıra ya da herhangi bir değere yakınsamaz. Bu sorunu düzeltmenin yolları vardır. Örneğin integrasyonu $-L$'den $+L$'ye kadar hesaplayıp, $L \to \infty$ limitinde 2.144 nolu denklemi sonlu bir integralin *ortalama değeri* olarak yorumlayabilirsiniz. Problemin kökeni şudur: delta fonksiyonu Plancherel teoremi için karesinin integre edilebilir olması (33. dipnota bakınız) koşulunu sağlamaz. Tüm bunlara rağmen dikkatlice ele alınırsa, 2.144 nolu denklem oldukça yararlıdır.

***Problem 2.27** *Çift* delta fonksiyonlu potansiyeli göz önüne alalım:

$$V(x) = -\alpha[\delta(x + a) + \delta(x - a)]$$

Burada α ve a birer pozitif sabitlerdir.

(a) Potansiyelin grafiğini çiziniz

(b) Bu potansiyelin kaç tane bağlı durumu vardır? $\alpha = \hbar^2/ma$ ve $\alpha = \hbar^2/4ma$ için izin verilen enerji değerlerini bulunuz. Dalga fonksiyonlarının grafiklerini çiziniz.

****Problem 2.28** 2.27 nolu problemde verilen potansiyel için geçme katsayısını bulunuz.

2.6 SONLU KARE KUYU

Son bir örnek olarak,

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & -a \le x \le a, \\ 0, & |x| > a, \end{cases} \qquad [2.145]$$

ile verilen sonlu kare kuyu potansiyelini göz önüne alalım. Burada V_0 pozitif bir sabittir (2.17 nolu şekil). Delta fonksiyonu kuyusunda olduğu gibi bu potansiyelin de bağlı ($E < 0$) ve saçılma ($E > 0$) durumları vardır. İlk olarak bağlı durumları inceleyeceğiz.

$x < -a$ bölgesinde potansiyel sıfır olduğundan Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \text{ya da} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi$$

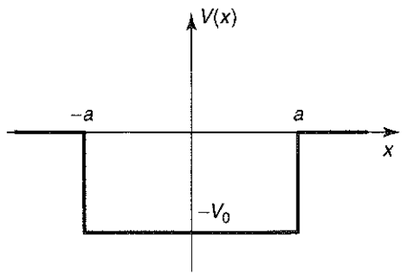
olarak yazılır. Burada κ reel ve pozitif bir sayı olmak üzere;

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}. \qquad [2.146]$$

Genel çözüm $\psi(x) = A\exp(-\kappa x) + B\exp(\kappa x)$ olur. Ancak $x \to -\infty$ iken ilk terim ıraksar, bu nedenle fiziksel olarak kabul edilebilir çözüm (daha önce olduğu gibi, 2.119 nolu denkleme bakınız)

$$x < -a \text{ için } \psi(x) = Be^{\kappa x} \qquad [2.147]$$

olur.



ŞEKİL 2.17: Sonlu kare kuyu (2.145 nolu denklem).

$-a < x < a$ bölgesinde $V(x) = -V_0$ dır ve Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi \quad \text{ya da} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi$$

olarak yazılır. Burada

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \qquad [2.148]$$

dir. Bağlı durumlar için E negatif olmasına rağmen, $E > V_{min}$ olarak verilen eski teorem (2.2 nolu problem) nedeniyle $-V_0$'dan büyük olmalıdır. Bu yüzden l reel ve pozitiftir. Genel çözüm[39]

$$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx), \qquad -a < x < a, \qquad [2.149]$$

şeklindedir. Burada C ve D keyfi sabitlerdir. Son olarak, $x > a$ bölgesinde potansiyel yine sıfırdır ve genel çözüm $\psi(x) = F\exp(-\kappa x) + G\exp(\kappa x)$ şeklindedir. Ancak $x \to \infty$ iken, ikinci terim ıraksar, bu yüzden çözüm

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}, \qquad x > a \qquad [2.150]$$

şeklini alır.

Sonraki adım sınır koşullarını uygulamak: $-a$ ve $+a$'da ψ ve $d\psi/dx$ süreklidir. Potansiyelin çift fonksiyon olduğuna dikkat ederek biraz zaman kazanabiliriz. Bu durumda, genellikten hiç bir şey kaybetmeden çözümlerin tek ya da çift olacağını (2.1 nolu problemin (c) şıkkı) kabul edebiliriz. Bunun avantajı şudur: sınır koşullarını yalnızca tek bir tarafta (örneğin $+a$'da) uygularız, $\psi(-x) = \pm\,\psi(x)$ olduğundan, diğer tarafta da otomatik olarak uygulanmış olur. Burada yalnızca çift çözümlere bakacağız, siz de 2.29 nolu problemde tek çözümleri çalışacaksınız. Kosinüs çift fonksiyon (sinüs, tek fonksiyondur) olduğundan çözümü

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x}, & x > a, \\ D\cos(lx), & 0 < x < a, \\ \psi(-x), & x < 0 \end{cases} \qquad [2.151]$$

şeklinde arayalım. $x = a$'da $\psi(x)$'in süreklilik koşulundan

$$Fe^{-\kappa a} = D\cos(la) \qquad [2.152]$$

bulunur. $d\psi/dx$'in süreklilik şartından

$$-\kappa Fe^{-\kappa a} = -lD\sin(la) \qquad [2.153]$$

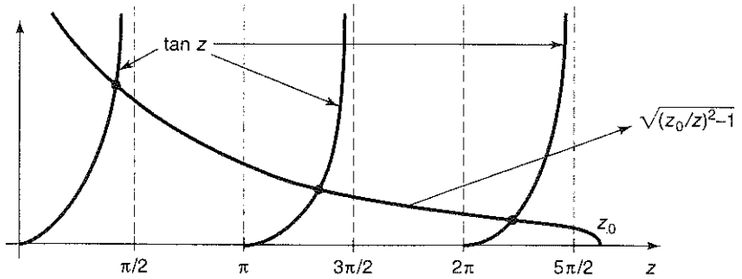
elde edilir. 2.153 nolu denklem, 2.152 nolu denkleme bölünürse

$$\kappa = l\tan(la) \qquad [2.154]$$

elde edilir.

---

[39] İsterseniz, genel çözümü ($Ce^{ilx} + De^{-ilx}$) şeklinde üstel olarak ifade edebilirsiniz. Bu seçim de bizi aynı sonuca götürür. Ancak potansiyel simetrik olduğundan çözümlerin çift ya da tek olacağını biliyoruz ve bu yüzden sinüs/kosinüs notasyonu kullanmak daha avantajlıdır.



ŞEKİL 2.18: $z_0 = 8$ için 2.156 nolu denklemin grafik çözümü (*çift durumlar*).

κ ve l'nin her ikisi de E'nin fonksiyonu olduklarından, bu ifade izin verilen enerji değerlerini veren formüldür. E'yi çözmek için daha zarif bir notasyon seçelim:

$$z \equiv la \quad \text{ve} \quad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0} \qquad [2.155]$$

olarak tanımlayalım. 2.146 ve 2.148 nolu denklemlerden $(\kappa^2+l^2) = 2mV_0/\hbar^2$ bulunur. Böylece $\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2}$ olur. Bu durumda 2.154 nolu denklem

$$\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1} \qquad [2.156]$$

şeklini alır. Bu ifade z_0'ın (kuyunun "büyüklüğünün" bir ölçüsü) bir fonksiyonu olarak z için (böylece E için) transendental bir denklemdir. Bu denklem bilgisayar yardımıyla sayısal olarak çözülebilir ya da $\tan z$ ve $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ aynı eksen takımı üzerine çizilerek grafik yöntemle çözülebilir. İki eğrinin kesim noktaları çözümleri verir (2.18 nolu şekile bakınız). İki limit duruma özel olarak bakalım:

1. Geniş, derin kuyu: z_0 çok büyükse, kesim noktaları tek sayılı n değerleri için $z_n = n\pi/2$'nin biraz altında olur. Bu durumda

$$E_n + V_0 \cong \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} \qquad [2.157]$$

yazılabilir. Ancak burada $E + V_0$ *kuyunun tabanından ölçülen enerjidir*. Sağ tarafta ise $2a$ genişliğindeki sonsuz kare kuyunun enerji değerleri yer alır (2.27 nolu denkleme bakınız). Aslında n tek olduğundan enerji değerlerinin *yarısını* bulduk (kalan diğer yarım parça 2.29 nolu problemde göreceğiniz gibi tek dalga fonksiyonlarından gelecektir). Böylelikle, sonlu kare kuyu $V_0 \to \infty$ iken sonsuz kare kuyuya gider. Bununla birlikte herhangi bir *sonlu* V_0 değeri için yalnızca sonlu sayıda bağlı durum vardır.

2. Sığ, dar kuyu: z_0 azalırken bağlı durumların sayısı yalnızca bir durum kalana dek azalacaktır (en *düşük tek* durumun kaybolduğu $z_0 < \pi/2$ için). Bununla beraber, kuyu *ne kadar* "zayıf" olursa olsun *daima bir bağlı* durum mutlaka vardır.

İlginizi çekiyorsa, 2.151 nolu denklemle verilen ψ'nin normlanması işlemini yapabilirsiniz (2.30 nolu problem) Ama ben saçılma durumlarına ($E > 0$) geçeceğim. $V(x) = 0$ olduğu sol tarafta

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad (x < -a) \qquad [2.158]$$

yazılabilir. Her zamanki gibi burada

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad [2.159]$$

dir. $V(x) = -V_0$ ile verilen kuyunun içinde

$$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx), \qquad (-a < x < a) \qquad [2.160]$$

olur. Önceden olduğu gibi burada

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \qquad [2.161]$$

dir. Sağ tarafta, bu bölgede gelen dalga olmadığını kabul edersek, çözüm

$$\psi(x) = Fe^{ikx} \qquad [2.162]$$

olarak verilir. Burada A gelen genlik, B yansıyan genlik ve F de geçen genliktir. [40]

Dört tane sınır koşulu bulunmakta: $\psi(x)$'in $-a$'daki sürekliliğinden

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C\sin(la) + D\cos(la) \qquad [2.163]$$

bulunur. $-a$'da $d\psi/dx$'in sürekliliği

$$ik[Ae^{-ika} - Be^{ika}] = l[C\cos(la) + D\sin(la)] \qquad [2.164]$$

sonunu verir. $+a$'da $\psi(x)$'in süreklilik koşulundan

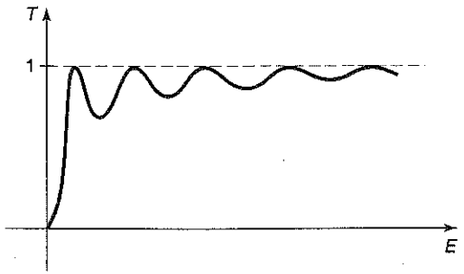
$$C\sin(la) + D\cos(la) = Fe^{ika} \qquad [2.165]$$

elde edilir. $+a$'da $d\psi/dx$'in süreklilik koşulu

$$l[C\cos(la) - D\sin(la)] = ikFe^{ika} \qquad [2.166]$$

bağıntısı verir. Bu denklemlerden ikisini C ve D'yi yok etmek için kullanır ve kalan iki

[40] Bağlı durumlarda yaptığımız gibi tek ve çift fonksiyonlar da *arayabilirdik*. Ancak dalgalar yalnızca tek bir taraftan geldiklerinden, saçılma problemi doğal olarak asimetriktir. Bu bağlamda, ilerleyen dalgaları temsil eden üstel notasyonu kullanmak daha doğrudur.



ŞEKİL 2.19: Enerjinin fonksiyonu olarak geçme katsayısı (2.169 nolu denklem).

denklemden B ve F'yi çözebiliriz (2.32 nolu probleme bakınız). Böylece

$$B = i\frac{\sin(2la)}{2kl}(l^2 - k^2)F, \qquad [2.167]$$

$$F = \frac{e^{-2ika}A}{\cos(2la) - i\frac{(k^2+l^2)}{2kl}\sin(2la)} \qquad [2.168]$$

elde edilir. Geçme katsayısı ($T = |F|^2/|A|^2$)

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)}\sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}\right) \qquad [2.169]$$

olarak bulunur. Sinüs'ün sıfır olduğu değerlerde $T = 1$ olduğuna yani kuyunun "şeffaf" olduğuna dikkat ediniz. Bu değerleri bulalım:

$$\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E_n + V_0)} = n\pi \qquad [2.170]$$

Burada n herhangi bir tamsayıdır. Mükemmel geçiş için enerji değerleri

$$E_n + V_0 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} \qquad [2.171]$$

olarak bulunur. Bu değerlerin *sonsuz* kare kuyu için izin verilen enerji değerleri olduğuna dikkat edin. 2.19 nolu şekilde T enerjinin fonksiyonu olarak çizilmiştir.[41]

***Problem 2.29** Sonlu kare kuyu için *tek* bağlı durum dalga fonksiyonlarını yazınız. İzin verilen enerji değerlerini veren transendental denklemi türetiniz ve grafik yöntemle çözünüz. İki limit durumu inceleyiniz. Her zaman bir tane tek bağlı durum var mıdır?

---

[41] **Ramsauer-Townsend etkisi** denilen bu umulmadık olay laboratuvarda gözlenmiştir. Aydınlatıcı bir tartışma için, Richard W. Robinett, *Quantum Mechanics*, Oxford U. P., 1997, 12.4.1. Kesime bakınız.

Problem 2.30 2.151 nolu denklemle verilen $\psi(x)$'i normlayarak D ve F sabitlerini belirleyiniz.

Problem 2.31 Dirac delta fonksiyonunu, alanı 1 olan bir dikdörtgenin yüksekliğinin sonsuza ve genişliğinin sıfıra gittiği limit durumu olarak düşünmek mümkündür. Sonsuz derinliğe sahip olsa bile delta fonksiyonlu kuyunun (2.114 nolu denklem) $z_0 \to 0$ durumundaki gibi "zayıf" bir potansiyel olduğunu gösteriniz. Delta fonksiyonu potansiyelini sonlu bir kare kuyunun limit durumu olarak alınız ve bağlı durum enerjisini belirleyiniz. Yanıtınızın 2.129 nolu denklemle uyumlu olduğunu kontrol ediniz. Uygun limitte 2.169 nolu denklemin 2.141 nolu denkleme indirgendiğini gösteriniz.

Problem 2.32 2.167 ve 2.168 nolu denklemleri türetiniz. *Yardım:* 2.165 ve 2.166 nolu denklemlerden C ve D'yi F cinsinden çözünüz

$$C = \left[\sin(la) + i\frac{k}{l}\cos(la)\right]e^{ika}F; \quad D = \left[\cos(la) - i\frac{k}{l}\sin(la)\right]e^{ika}F.$$

Bunları 2.163 ve 2.164 nolu denklemlerde yerine yerleştiriniz. Geçme katsayısını elde ederek 2.169 nolu denklemi doğrulayınız.

****Problem 2.33** Dikdörtgen *engel* (2.145 nolu denklemle aynı, tek fark $-a < x < a$ için $V(x) = +V_0 > 0$ olmasıdır) için geçme katsayısını belirleyin. Bu işlemi $E < V_0$, $E = V_0$ ve $E > V_0$ durumları için ayrı ayrı yapın. Her üç durumda engelin içinde dalga fonksiyonlarının farklı olacağına dikkat edin. *Kısmi yanıt*: $E < V_0$ için[42]

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}\sinh^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right).$$

***Problem 2.34** "Basamak" potansiyelini

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \le 0, \\ V_0, & x > 0. \end{cases}$$

göz önüne alın.

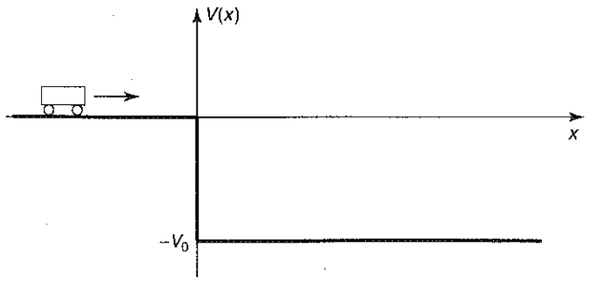
(a) $E < V_0$ durumunda yansıma katsayısını hesaplayarak yanıtınızı yorumlayın.

(b) $E > V_0$ için yansıma katsayısını hesaplayın.

(c) Engelin sağ tarafında tekrar sıfır olmayan bu tip bir potansiyel için geçme katsayısı basitçe $|F|^2/|A|^2$ *değildir*. (Burada A gelen genlik ve F geçen genliktir).

---

[42] Bu tünelleme için güzel bir örnektir. *Klasik* olarak parçacık geri yansır.



ŞEKİL 2.20: Bir "uçurumdan" saçılma (2.35 nolu problem).

Çünkü geçen dalganın ilerleme hızı farklıdır. Buna göre $E > V_0$ için

$$T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}}\,\frac{|F|^2}{|A|^2}, \qquad [2.172]$$

olduğunu gösterin. *Yardım:* 2.98 nolu denklemi kullanarak hesaplayabilirsiniz. Ya da daha zarif bir yolla, olasılık akım yoğunluğundan (2.19 nolu problem) hareketle hesaplayabilirsiniz. $E < V_0$ için T nedir?

(d) $E > V_0$ durumunda basamak potansiyelinden geçme katsayısını hesaplayın ve $T + R = 1$ olup, olmadığını kontrol edin.

Problem 2.35 m kütleli ve $E > 0$ kinetik enerjili bir parçacık ani bir V_0 potansiyel düşüşü olan (2.20 nolu şekil) bir noktaya yaklaşmaktadır.

(a) $E = V_0 / 3$ ise parçacığın geri yansıma olasılığı ne kadardır? *Yardım*: Bu problem tek bir farkla 2.34'e benziyor: burada basamak yukarı çıkmak yerine *aşağı* doğrudur.

(b) Şekli size bir uçuruma yaklaşan arabayı düşündürsün diye böyle çizdik. Ama açıkça görülüyor ki Bugs Bunny olmadığınız sürece, bir uçurumun kenarından geri yansıtılma olasılığı (a) şıkkında bulduğunuz değerden çok daha küçüktür. Bu potansiyelin bir uçurumu niçin doğru olarak temsil edemeyeceğini açıklayınız. *Yardım*: 2.20 nolu şekilde arabanın potansiyel enerjisi $x = 0$'dan geçerken *süreksiz* olarak $-V_0$'a düşüyor. Bu düşen bir araba için doğru olabilir mi?

(c) Serbest bir nötron bir çekirdeğin içine girdiğinde potansiyel enerjisi dışarıdaki $V = 0$ değerinden -12 MeV(milyon elektron volt)'luk ani bir düşüş yaşar. Bir parçalanma sürecinden üretilen 4 MeV kinetik enerjili bir nötronun böyle bir çekirdeğe çarptığını varsayalım. Böylelikle başka bir parçalanma sürecini başlatacak olan soğurulma olasılığı nedir? *Yardım:* (a) şıkkında *yansıma* olasılığını hesaplayacaksınız. Yüzeyden geçme olasılığını hesaplamak için $T = 1 - R$'yi kullanınız.

---

2. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

Problem 2.36 Zamandan bağımsız Schrödinger denklemini uygun sınır koşullarıyla "ortalanmış" (simetrik) sonsuz kare kuyu için çözün. Simetrik sonsuz kare kuyu: $V(x) = 0$ ($-a < x < +a$ için), $V(x) = \infty$ (diğer yerlerde) olarak verilir. Bulduğunuz izin verilen enerji değerlerini bizim bulduğumuz ve 2.27 nolu denklemle verilen enerji değerleriyle uyumlu olduğunu kontrol edin. Sizin bulduğunuz ψ'lerin bizim bulduklarımızdan (2.28 nolu denklem) $x \to (x+a)/2$ (ve uygun renormalizasyon) atamasıyla elde edilebileceğini gösteriniz. Bulduğunuz ilk üç çözümün grafiğini çizerek 2.2 nolu şekil ile karşılaştırın. Bu örnekte kuyunun genişliğinin $2a$ olduğuna dikkat edin.

Problem 2.37 Sonsuz kare kuyu (2.19 nolu denklem) içinde bulunan bir parçacığın başlangıç dalga fonksiyonu

$$\Psi(x, 0) = A \sin^3(\pi x/a) \quad (0 \le x \le a)$$

olarak verilmiştir. A'yı belirleyin. $\Psi(x, t)$'yi belirleyip $\langle x \rangle$'i zamanın fonksiyonu olarak hesaplayın. Enerjinin beklenen değeri nedir? *Yardım:* Trigonometrik toplama formülleri tekrar tekrar uygulanarak $\sin^n\theta$ ve $\cos^n\theta$, $m = 0, 1, 2, \ldots, n$ olmak üzere $\sin(m\theta)$ ve $\cos(m\theta)$'nın lineer kombinasyonlarına indirgenebilirler.

Problem 2.38 m kütleli bir parçacık sonsuz kare kuyunun (2.19 nolu denklem) taban durumundadır. Ani olarak kuyunun genişliği iki katına çıkarılıyor. Yani sağdaki duvar a'dan $2a$'ya çekiliyor. Çekme ani olduğundan dalga fonksiyonu aynı kalmaktadır. Bu durumda parçacığın enerjisi ölçülüyor.

(a) En olası değer hangisidir? Bu değeri elde etme olasılığı ne kadardır?

(b) *Bir sonraki* en olası değer hangisidir? Olasılık ne kadardır?

(c) Enerjinin *beklenen değeri* ne kadardır? *Yardım:* Eğer sonsuz serilerle karşılaşırsanız, başka bir yöntem deneyin.

Problem 2.39

(a) Sonsuz kare kuyu içindeki bir parçacığın dalga fonksiyonunun bir kuantum **ayılma zamanı** $T = 4ma^2/\pi\hbar$ sonunda orijinal formuna döndüğünü gösteriniz. Yani, $\Psi(x, T) = \Psi(x, 0)$ koşulu sadece kararlı bir durum için *değil* herhangi bir durum için de doğrudur.

(b) Duvarlar arasında ileri geri hareket eden E enerjili bir parçacık için *klasik* ayılma zamanı nedir?

(c) Hangi enerji değerinde bu iki ayılma zamanı birbirine eşit olur?[43]

---

[43] Klasik ve kuantum ayılma zamanlarının birinden diğerine geçmek için açık bir bağıntı vermemesi (ayrıca kuantum ayılma zamanı enerjiye bile bağlı değildir) önemli bir çelişkidir. Daniel Styer, *Am J. Phys.* **69**, 56 (2001)'e bakınız.

Problem 2.40 m kütleli bir parçacık

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0), \\ -32\hbar^2/ma^2 & (0 \le x \le a), \\ 0 & (x > a) \end{cases}$$

ile verilen potansiyelin içindedir.

(a) Kaç tane bağlı durum vardır?

(b) En yüksek enerjili bağlı durumda parçacığın kuyunun *dışında* ($x > a$) bulunma olasılığı nedir? *Yanıt:* 0.542. Yani, parçacık kuyu tarafından "bağlansa" bile, kuyunun dışında bulunma olasılığı neredeyse içeride bulunma olasılığı kadardır!

Problem 2.41 Harmonik salınıcı potansiyeli (2.43 nolu denklem) içindeki m kütleli bir parçacığın başlangıç durumu

$$\Psi(x, 0) = A\left(1 - 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

olarak verilmiştir. Burada A bir sabittir.

(a) Enerjinin beklenen değeri nedir?

(b) Daha sonraki bir T zamanında dalga fonksiyonu, B bir sabit olmak üzere

$$\Psi(x, T) = B\left(1 + 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

şeklindedir. T için mümkün en küçük değer nedir?

Problem 2.42

$$V(x) = \begin{cases} (1/2)m\omega^2x^2, & x > 0. \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

olarak tanımlanan *yarım* harmonik salınıcı potansiyeli için izin verilen enerji değerlerini bulun (Bu potansiyel gerilebilen ancak sıkıştırılamayan bir yayı temsil etmektedir). *Yardım:* Bu problem biraz dikkatli düşünmeyi gerektirir. Çok az hesap yapmak yeterli olacaktır.

****Problem 2.43** 2.22 nolu problemde *kararlı* (durağan) Gauss serbest parçacık dalga paketinin analizini yapmıştınız. Şimdi aynı problemi başlangıç dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi verilen *ilerleyen* Gauss dalga paketi için çözünüz.

$$\Psi(x, 0) = Ae^{-ax^2}e^{ilx}$$

Burada l reel bir sabittir.

****Problem 2.44** Ortasında delta fonksiyonu şeklinde bir engel olan simetrik (ortalanmış) sonsuz kare kuyu için zamandan bağımsız Schrödinger denklemini çözünüz. Potansiyel

$$V(x) = \begin{cases} \alpha\delta(x), & -a < x < +a, \\ \infty, & |x| \ge a. \end{cases}$$

ile verilir. Çift ve tek dalga fonksiyonlarını ayrı ayrı inceleyiniz. Normlama problemiyle uğraşmayınız. İzin verilen enerji değerlerini (gerekirse grafik yöntem kullanarak) bulunuz. Bulduğunuz değerleri delta fonksiyonu olmadığında bulunan enerjilerle karşılaştırınız. Tek çözümlerin delta fonksiyonundan niçin etkilenmediğini açıklayınız. $\alpha \to 0$ ve $\alpha \to \infty$ limit durumlarını yorumlayınız.

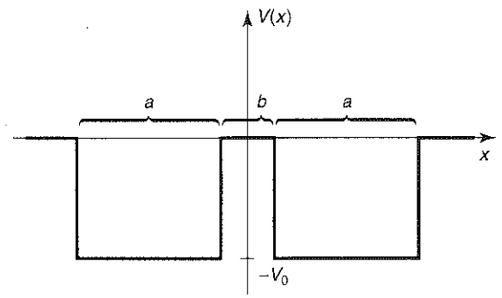
Problem 2.45 Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin aynı enerji değeri E'ye karşılık olan iki ya da daha çok ayrık[44] çözümü varsa, bu durumlar **katlı (çokkatlı, çakışık)** olarak adlandırılır. Örneğin, serbest parçacık durumları iki kez katlıdır. Bir çözüm sağa doğru hareketi, diğer çözüm sola doğru hareketi temsil eder. Ama buraya dek normlanabilir katlı çözümlerle karşılaşmadık ve bu bir tesadüf değildir. Şu teoremi kanıtlayın: *Bir boyutta*[45] *katlı bağlı durumlar yoktur. Yardım:* Aynı E enerjili ψ_1 ve ψ_2 gibi iki çözüm olduğunu varsayın. ψ_1 için olan Schrödinger denklemini ψ_2 ile ve ψ_2 için olan Schrödinger denklemini ψ_1 ile çarpıp bunları birbirinden çıkararak $(\psi_2 d\psi_1/dx - \psi_1 d\psi_2/dx)$'in sabit olduğunu gösterin. Normlanabilir çözümler için $\pm\infty$'da $\psi \to 0$ olduğunu kullanarak, bu sabitin gerçekte sıfır olduğunu gösterin. ψ_2'nin ψ_1'den bir çarpan kadar farklı olduğunu bularak bu iki çözümün ayrık olmadığını gösterin.

Problem 2.46 m kütleli bir boncuğun çevresi L ile verilen dairesel bir tel üzerinde sürtünmesiz olarak kaydığını düşünelim (aslında bu boncuk $\psi(x+L) = \psi(x)$ koşulunu sağlaması gereken serbest bir parçacık gibidir). Uygun normlamayla birlikte kararlı durumları ve bunlara karşılık gelen izin verilen enerji değerlerini bulun. Her bir E_n enerji değeri için, bir tanesi saat yönünde diğeri de saat yönünün tersine dönüşü simgeleyen *iki* bağımsız çözüm olduğuna dikkat edin. Bu çözümleri $\psi_n^+(x)$ ve $\psi_n^-(x)$ olarak isimlendirin. 2.45 nolu problemde verilen teorem çerçevesinde buradaki katlılığın sebebini inceleyin. Bu problemde teorem neden işlemez?

****Problem 2.47** *Dikkat:* Bu tamamıyla *nitel* bir problemdir ve hesap yapmaya izin yoktur. "Çift kare kuyu" potansiyelini (2.21 nolu şekil) göz önüne alalım. V_0 derinliğinin ve

[44] Eğer iki çözüm birbirlerinden bir sabit kadar farklılarsa (böylece normlandıklarında aralarında $e^{i\phi}$ gibi faz çarpanı kadar fark olur), aynı fiziksel durumu temsil ederler ve bunlar ayrık çözüm olmazlar. Teknik olarak "ayrık" deyince "lineer bağımsızlığı" kastediyoruz.

[45] 4. Bölümde göreceğimiz gibi, yüksek boyutlarda katlılık oldukça yaygındır. Potansiyelin, $V = \infty$ olan bölgelerle birbirinden ayrılan yalıtılmış parçalardan oluşmadığını varsayalım. Örneğin, iki tane yalıtılmış sonsuz kare kuyu katlı bağlı durumlara sebep olur çünkü parçacık ya bir taraftadır ya da öteki tarafta.



ŞEKİL 2.21: Çift kare kuyu (Problem 2.47).

a genişliğinin sabit tutulduğunu ve birkaç tane bağlı durum oluşacak kadar büyük olduğunu varsayalım.

(a) Taban durumu dalga fonksiyonu ψ_1 ile ilk uyarılmış durum ψ_2'nin grafiklerini (i) $b = 0$, (ii) $b \approx a$, (iii) $b >> a$ durumları için ayrı ayrı çiziniz.

(b) b, 0'dan ∞'a giderken, E_1 ve E_2 enerjileri nitel olarak nasıl değişir? Aynı grafik üzerine $E_1(b)$ ve $E_2(b)$'yi çiziniz.

(c) Çift kare kuyu, iki atomlu (diatomik) bir moleküldeki bir elektronun gördüğü potansiyel için oldukça basit bir boyutlu modeldir (iki kuyu çekirdeklerin çekici kuvvetini temsil eder). Eğer çekirdekler hareket etme serbestliğine sahipseler minimum enerji düzeneğini bulurlar. (b) şıkkındaki sonuçlarınıza dayanarak, elektron çekirdekleri birbirine doğru mu çeker yoksa onları birbirlerinden ayırır mı? (kuşkusuz çekirdekler arası itme de düşünülmelidir ama bu ayrı bir problemin konusudur).

Problem 2.48 2.7 nolu problemin (d) şıkkında, 2.39 nolu denklemle verilen seriyi toplayarak enerjinin beklenen değerini buldunuz. Ancak 15. dipnotta sizi "eski moda yol", $\langle H \rangle = \int \Psi(x,0)^* H \Psi(x,0) dx$'i denememeniz için uyarmıştık. Çünkü $\Psi(x,0)$'ın birinci türevindeki süreksizlikler ikinci türevi problemli kılabilir. Gerçekte, hesabı kısmi integrasyon kullanarak yapabilirsiniz, ama Dirac delta fonksiyonu bu tür anomalilerle uğraşmak için oldukça temiz bir yol sunar.

(a) 2.7 nolu problemdeki $\Psi(x, 0)$'ın birinci türevini hesaplayın ve yanıtınızı 2.143 nolu denklemle tanımlanan $\theta(x-a/2)$ basamak fonksiyonu cinsinden ifade ediniz (uç noktalar konusunda endişelenmeyin, $0 < x < a$ bölgesinin içindeler).

(b) 2.24 nolu problemin (b) şıkkında elde ettiğiniz sonuçtan yararlanarak $\Psi(x, 0)$'ın ikinci türevini delta fonksiyonu cinsinden yazınız.

(c) $\int \Psi(x,0)^* H \Psi(x,0) dx$ integralini hesaplayın ve daha önceden bulunanla aynı olduğunu kontrol edin.

***Problem 2.49**

(a)

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2 + \frac{a^2}{2}(1 + e^{-2i\omega t}) + \frac{i\hbar t}{m} - 2axe^{-i\omega t}\right)\right]$$

olarak verilen dalga fonksiyonunun harmonik salınıcı potansiyeli (2.43 nolu denklem) için *zamana bağımlı* Schrödinger denklemini sağladığını gösterin. Burada a uzunluk boyutunda herhangi bir reel sabittir.[46]

(b) $|\Psi(x,t)|^2$'yi bulun ve dalga paketinin hareketini tanımlayın.

(c) $\langle x \rangle$ ve $\langle p \rangle$'yi hesaplayın. Ehrenfest teoreminin (1.38 nolu denklem) sağlandığını kontrol edin.

Problem 2.50

$$V(x,t) = -\alpha\delta(x - vt)$$

olarak verilen *hareketli* delta fonksiyonu kuyusu düşünelim. Burada v kuyunun sabit hızıdır.

(a) $\Psi(x,t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x-vt|/\hbar^2} e^{-i[(E+(1/2)mv^2)t - mvx]/\hbar}$

ile verilen dalga fonksiyonunun zamana bağımlı Schrödinger denkleminin kesin bir çözümü olduğu gösterin. Burada $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$ durağan delta fonksiyonu kuyusunun bağlı durum enerjisidir. *Yardım:* Bu fonksiyonu denkleme yerleştirin ve *kontrol edin*. 2.24 nolu problemin (b) şıkkında elde edilen sonucu kullanın.

(b) Bu durum için Hamiltonyenin beklenen değerini hesaplayın ve sonucunuzu yorumlayın.

***Problem 2.51**

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 a^2}{m}\text{sech}^2(ax).$$

ile verilen potansiyeli düşünelim. Burada a pozitif bir sabittir ve "sech" hiperbolik sekant fonksiyonudur.

(a) Potansiyelin grafiğini çizin.

(b) Bu potansiyelin taban durumunun

$$\psi_0(x) = A\ \text{sech}(ax)$$

olduğunu kontrol edin ve enerjisini bulun. ψ_0'ı normlayın ve grafiğini çizin.

---

[46] Bu zamana bağımlı Schrödinger denkleminin kapalı formdaki kesin çözümlerinin nadir bulunan bir örneğidir ve 1926'da Schrödinger'in kendisi tarafından keşfedilmiştir.

(c)

$$\psi_k(x) = A\left(\frac{ik - a\tanh(ax)}{ik + a}\right)e^{ikx}$$

(burada her zamanki gibi $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$) fonksiyonunun herhangi bir pozitif enerji değeri E için Schrödinger denklemini çözdüğünü gösteriniz. $z \to -\infty$ iken $\tan hz \to -1$ olduğundan

$$\text{büyük negatif } x \text{ değerleri için } \psi_k(x) \approx Ae^{ikx}$$

dir. Bu ifade sol taraftan gelen ama *hiç yansımayan* bir dalgayı temsil etmektedir ($\exp(-ikx)$ terimi yok). Büyük pozitif x değerleri için $\psi_k(x)$'in asimptotik formu nedir? *Açıklama:* bu **yansımasız potansiyelin** meşhur bir örneğidir. Gelen her parçacık enerjisi ne olursa olsun diğer tarafa geçer.[47]

Problem 2.52 Saçılma matrisi: Saçılma teorisi keyfi bir şekli olan yerelleşmiş potansiyelleri (2.22 nolu şekil) oldukça zarif ve açık bir yolla genelleştirir. Sol tarafta (I. Bölge) $V(x) = 0$ olduğundan

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

olmak üzere

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad [2.173]$$

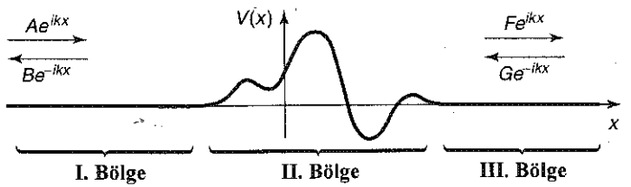
dir. Sağ tarafta (III. Bölge) $V(x)$ yine sıfır olduğundan

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \qquad [2.174]$$

dir. Şüphesiz aradaki II. Bölgede potansiyel verilmediği için ψ'nin ne olduğunu söyleyemeyiz. Ama Schrödinger denklemi lineer, ikinci dereceden bir diferansiyel denklem olduğundan genel çözüm

$$\psi(x) = Cf(x) + Dg(x)$$

formunda olmalıdır. Burada $f(x)$ ve $g(x)$ iki tane lineer bağımsız ayrık çözümdür.[48] Dört tane sınır koşulu olacaktır (I. ve II. bölgeleri birleştiren iki koşul, II. ve III. bölgeleri



ŞEKİL 2.22: Keyfi bir şekle sahip yerelleşmiş potansiyelden saçılma (II. Bölge hariç $V(x)$=0); 2.52 nolu problem.

[47] R. E. Crandall and B. R. Litt, *Annals of Physics*, **146**, 458 (1983).

[48] Herhangi bir diferansiyel denklemler kitabına bakınız. Örneğin; J. L. Van Iwaarden, *Ordinary Differential Equations with Numerical Techniques*, Harcourt Brace Jovanovich, San Diego, 1985, 3. Bölüm.

birleştiren iki koşul). Bunlardan iki tanesi C ve D'yi yok etmek için kullanılır. Kalan iki taneden B ve F, A ve G cinsinden "çözülebilir":

$$B = S_{11}A + S_{12}G, \quad F = S_{21}A + S_{22}G.$$

k'ya dolayısıyla E'ye bağlı olan dört tane S_{ij} katsayıları 2×2 boyutunda bir matris $\mathbf{S}$ oluşturur. Bu matrise **saçılma matrisi** (ya da kısaca **S-matrisi**) denilir. S-matrisi giden genlikleri (B ve F) gelen genlikler A ve G cinsinden ifade eder:

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}. \qquad [2.175]$$

Tipik bir sol taraftan saçılma durumunda $G = 0$ dır. Böylece yansıma ve geçme katsayıları

$$R_l = \left.\frac{|B|^2}{|A|^2}\right|_{G=0} = |S_{11}|^2, \quad T_l = \left.\frac{|F|^2}{|A|^2}\right|_{G=0} = |S_{21}|^2 \qquad [2.176]$$

olur. Sağ taraftan saçılma durumunda, $A = 0$ olur ve

$$R_r = \left.\frac{|F|^2}{|G|^2}\right|_{A=0} = |S_{22}|^2, \quad T_r = \left.\frac{|B|^2}{|G|^2}\right|_{A=0} = |S_{12}|^2 \qquad [2.177]$$

elde edilir.

(a) 2.114 nolu denklemdeki delta fonksiyonlu kuyudan saçılma için S-matrisini kurunuz.

(b) Sonlu kare kuyu (2.145 nolu denklem) için S-matrisini kurunuz. *Yardım:* Eğer problemin simetrisinden dikkatlice yararlanırsanız, burada yeni bir iş yapmaya gerek kalmaz.

*****Problem 2.53 Transfer matrisi:** 2.52 nolu problemdeki S-matrisi *giden* genlikleri (B ve F) *gelen* genlikler (A ve G) cinsinden verir (2.175 nolu denklem). Bazı durumlarda **transfer matrisi M** ile çalışmak daha uygun olabilir. Transfer matrisi, potansiyelin sağ tarafındaki genlikleri (F ve G) sol taraftaki genlikler (A ve B) cinsinden verir:

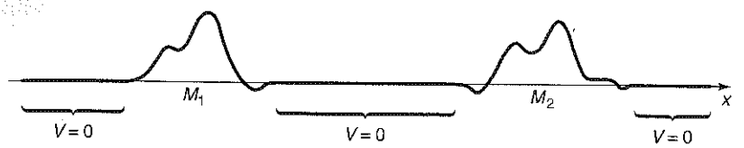
$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \qquad [2.178]$$

(a) M matrisinin dört tane elemanını S-matrisinin elemanları cinsinden ve S-matrisinin elemanlarını M-matrisinin elemanları cinsinden bulunuz. R_l, T_l, R_r ve T_r (2.176 ve 2.177 nolu denklemler) katsayılarını M-matrisinin elemanları cinsinden ifade ediniz.

(b) İki tane yalıtılmış parçadan oluşan bir potansiyeli (2.23 nolu şekil) göz önüne alalım. Bu kombinasyonun M-matrisinin ayrı ayrı her bir parçaya ait M-matrislerinin *çarpımı* olduğunu gösteriniz. Yani

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_2\mathbf{M}_1. \qquad [2.179]$$

(Bu durum herhangi sayıdaki parçaya genelleştirilebilir ve bu M-matrisinin ne kadar kullanışlı olduğunu gösterir).



ŞEKİL 2.23: İki tane yalıtılmış parçası olan bir potansiyel (2.53 nolu problem).

(c) a noktasındaki tek delta fonksiyonlu potansiyelden,

$$V(x) = -\alpha\delta(x - a).$$

saçılma için M-matrisini kurunuz.

(d) (b) şıkkındaki yöntemi kullanarak çift delta fonksiyonundan

$$V(x) = -\alpha[\delta(x + a) + \delta(x - a)].$$

saçılma için M-matrisini bulunuz. Bu potansiyel için geçme katsayısı nedir?

Problem 2.54 Sayısal yöntemle beş anlamlı rakama kadar harmonik salınıcının taban durumu enerjisini bulunuz. Yani, büyük ξ değerlerinde sıfıra giden bir dalga fonksiyonu elde edinceye dek K'yı değiştirerek 2.72 nolu denklemi sayısal olarak çözünüz. Mathematica programlama dilinde uygun bir giriş kodu

```
Plot[Evaluate[u[x]/.NDSolve[{u''[x] -(x^2 - K)*u[x] == 0,  u[0] == 1,
u'[0] == 0}, u[x], {x, 10^-8, 10}, MaxSteps -> 10000]], {x, a, b},
PlotRange -> {c, d}];
```

şeklindedir (Burada (a, b) grafiğin yataydaki erimi ve (c, d) düşeydeki erimidir. Başlangıçta: $a = 0$, $b = 10$, $c = -10$, $d = 10$ değerlerini kullanın). Doğru çözümün $K = 1$ olduğunu biliyoruz, bu yüzden bir "tahmin" olarak $K = 0.9$ ile başlayabilirsiniz. Fonksiyonun "kuyruğunun" davranışına dikkat edin. Şimdi $K = 1.1$'i deneyin ve kuyrukların ters döndüğünü gözlemleyin. Doğru çözüm bu iki değerin arasında bir yerdedir. K'yı değiştirerek bu aralığı iyice küçültünüz. Bunu yaparken tam geçiş noktasında sıfırlamak için a, b, c ve d'yi ayarlamak gerekebilir.

Problem 2.55 Harmonik salınıcının ilk üç uyarılmış düzeyinin enerjilerini, beş anlamlı rakama kadar sayısal yöntemle (2.54 nolu problem) bulunuz. İlk ve üçüncü uyarılmış durum için $u[0] = = 0$ ve $u'[0] = = 1$ almalısınız.

Problem 2.56 Sonsuz kare kuyunun ilk dört izin verilen enerji değerini, beş anlamlı rakama kadar sayısal yöntemle çözünüz. *Yardım*: 2.54 nolu probleme tekrar dönerek, diferansiyel denklemde uygun değişiklikleri yapın. Bu kez aramanız gereken koşul $u(1) = 0$'dır.

---

3. BÖLÜM

FORMÜLASYON

3.1 HİLBERT UZAYI

Geçtiğimiz iki bölümde basit kuantum sistemlerinin birkaç ilginç özelliğiyle karşılaştık. Bunlardan bazıları, örneğin harmonik salınıcının enerji düzeylerinin eşit aralıklı olması gibi, özel potansiyellerin "tesadüfi" özellikleriyken, diğerleri çok daha genel özelliklerdir. Belirsizlik ilkesi, kararlı durumların ortogonalliği gibi bu tür genel özellikler bir kerede ve tümü için kanıtlanırsa iyi olacaktır. Bu bölümün amacı bu düşüncelerle teoriyi daha güçlü bir formda yeniden şekillendirmektir. Burada gerçekten *yeni* bir şey yoktur ve temel fikir daha önceden özel durumlarda keşfedilenleri daha tutarlı bir forma getirmektir.

Kuantum teorisi iki kavram üzerine oturtulmuştur; *dalga fonksiyonları* ve *operatörler*. Bir sistemin durumu dalga fonksiyonuyla, gözlenebilir büyüklükler ise operatörlerle temsil edilirler. Matematiksel olarak, dalga fonksiyonları soyut **vektörler** için verilen belirli koşulları sağlarken, operatörler vektörler üzerine **lineer dönüşümler** olarak uygulanırlar. Bu nedenle, kuantum mekaniğinin doğal dili **lineer cebirdir.**[1] Fakat, sanırım, lineer cebirin bu formu alışageldiğiniz bir formu değil. N boyutlu bir uzayda, bir $|\alpha\rangle$ vektörü, belirli bir ortonormal baza göre verilen N tane $\{a_n\}$ bileşeniyle temsil edilir:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}. \qquad [3.1]$$

[1] Daha önceden lineer cebir çalışmadıysanız, devam etmeden önce Ek kısmını okuyunuz.

Üç boyuttaki noktasal çarpımın genelleştirilmesi olan, iki vektörün **iç çarpımı** $\langle \alpha | \beta \rangle$

$$\langle \alpha | \beta \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_N^* b_I \qquad [3.2]$$

ile verilir ve kompleks sayıdır. T lineer dönüşümleri sıradan **matris** çarpımı kuralıyla vektörlerin üzerine etkiyerek yeni vektörler oluşturan ve belirli bir baza göre verilen **matrislerle** temsil edilirler:

$$|\beta\rangle = T|\alpha\rangle \rightarrow \mathbf{b} = \mathbf{Ta} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1N} \\ t_{21} & t_{22} & \cdots & t_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_{N1} & t_{N2} & \cdots & t_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}. \qquad [3.3]$$

Ancak, kuantum mekaniğinde karşılaştığımız "vektörlerin" çoğu *fonksiyonlardır* ve *sonsuz* boyutlu uzaylarda yaşarlar. Bu vektörler için N-bileşenli/matris notasyonu kullanışlı değildir ve sonlu boyutlu durumlarda iyi huylu olan işlemler sorunlar çıkarabilir (bunun altında yatan sebep; 3.2 nolu denklemdeki sonlu toplam her zaman mevcutken, *sonsuz* toplam ya da integral yakınsamayabilir. Bu durumda iç çarpım mevcut olmaz ve iç çarpımlar içeren herhangi bir argüman da hemen şüpheli gözükür). Bu yüzden çoğu terminoloji ve notasyon tanıdık gelse de, bu konuya dikkatle yaklaşılmalıdır.

x'in *tüm* fonksiyonlarının bir topluluğu bir vektör uzayı oluşturur. Fakat bizim amaçlarımız için bu uzay çok büyüktür. Mümkün bir fiziksel durumu temsil eden dalga fonksiyonu Ψ *normlanmış* olmalıdır. Yani

$$\int |\Psi|^2 \, dx = 1$$

olmalıdır. Belirli bir aralıkta[2] **karesi integre edilebilir** tüm fonksiyonların oluşturduğu küme,

$$f(x) \quad \text{öyle ki} \quad \int_a^b |f(x)|^2 \, dx < \infty, \qquad [3.4]$$

(çok daha küçük) bir vektör uzayı oluşturur (3.1 nolu problemin (a) şıkkına bakınız). Matematikçiler bunu $L_2(a, b)$ olarak adlandırır iken, fizikçiler ise **Hilbert uzayı**[3] olarak adlandırır. Kuantum mekaniğinde,

Dalga fonksiyonları Hilbert uzayında yaşarlar. [3.5]

[2] Bizim için (a, b) integral limitleri her zaman $\pm\infty$ olacak. Ancak, bu aşamada her şeye daha genel olarak bakıyoruz.

[3] Teknik olarak, Hilbert uzayı bir **tam iç çarpım uzayıdır** ve karesi integre edilebilir fonksiyonların kümesi Hilbert uzayının yalnızca bir örneğidir. Gerçekte her sonlu boyutlu vektör uzayı aşikâr bir Hilbert uzaydır. Ancak L_2 kuantum mekaniğinin alanına girdiğinden fizikçilerin "Hilbert uzayı" diyerek *kastettikleri* uzay işte bu uzaydır. Yeri gelmişken; buradaki **tam** sözcüğü Hilbert uzayındaki fonksiyonların herhangi bir Cauchy dizisinin yine bu uzaydaki bir fonksiyona yakınsaması anlamına gelir. Yani tıpkı tüm reel sayılar kümesinin deliklerinin olmaması gibi (tersine olarak, örneğin bütün *polinomların* uzayı, tıpkı *rasyonel* sayılar kümesi gibi, içinde delikler barındırır) içinde "delikler" barındırmaz. *Bir uzayın* tamlığının bir fonksiyonlar kümesinin tamlığı ile (maalesef aynı sözcük) hiçbir ilişkisi yoktur. Bir fonksiyon kümesinin (ya da setinin) tanımlığı herhangi bir fonksiyonun bu kümenin elemanlarının lineer kombinasyonu olarak yazabilmesinden başka bir şey değildir.

$f(x)$ ve $g(x)$ gibi **iki fonksiyonun iç çarpımını**

$$\langle f | g \rangle \equiv \int_a^b f(x)^* g(x) \, dx \qquad [3.6]$$

olarak tanımlarız. Eğer f ve g'nin her ikisi de karesi integre edilebilir fonksiyonlarsa (yani ikisi de Hilbert uzayında ise) iç çarpımları her zaman mevcuttur (3.6 nolu denklemdeki integral sonlu bir sayıya yakınsar).[4] Bu **Schwarz eşitsizliğinin** integral formunun sonucudur[5]:

$$\left| \int_a^b f(x)^* g(x) \, dx \right| \leq \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2 \, dx \int_a^b |g(x)|^2 \, dx}. \qquad [3.7]$$

3.6 nolu denklemin bir iç çarpımın tüm şartlarını sağladığını kendiniz kontrol edebilirsiniz (3.1 nolu problemin (b) şıkkı). Özellikle

$$\langle g | f \rangle = \langle f | g \rangle^* \qquad [3.8]$$

olduğuna dikkat edin. Bundan başka, $f(x)$'in kendisiyle iç çarpımı

$$\langle f | f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 \, dx \qquad [3.9]$$

reel ve pozitiftir ve sadece[6] $f(x) = 0$ olduğunda *sıfıra* eşit olur.

Bir fonksiyonun kendisiyle iç çarpımı 1 ise, bu fonksiyona **normlanmıştır** denilir; iki fonksiyonun iç çarpımı 0 ise, bu fonksiyonlar **otogonaldir;** bir $\{f_n\}$ fonksiyonlar kümesi normlanmış ve birbirlerine ortogonalse, bu küme **ortonormaldir**:

$$\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{mn}. \qquad [3.10]$$

Son olarak, Hilbert uzayındaki herhangi bir fonksiyon bu $\{f_n\}$ fonksiyonlar kümesinin lineer bir kombinasyonu olarak yazılabiliyorsa, bu kümeye **tamdır** denilir:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x). \qquad [3.11]$$

[4] 2. Bölümde normlanamayan fonksiyonlarla çalışmak zorunda kaldık. Bu tür fonksiyonlar Hilbert uzayının *dışındadırlar*, ve daha sonra göreceğimiz gibi bu tür fonksiyonlarla çalışmak özel bir dikkat gerektirir. Bu aşamada, karşılaştığımız tüm fonksiyonların Hilbert uzayında bulunduğunu kabul edeceğim.

[5] Kanıt için; F. Riesz and B. Sz. Nagy, *Functional Analysis* (Unger, New York, 1955) 21. kesime bakınız. *Sonlu* boyutlu bir vektör uzayında, $|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle$ Schwarz eşitsizliğinin kanıtı kolaydır (E.5 nolu probleme bakınız). Fakat bu kanıt, burada tam olarak ortaya koymaya çalıştığımız iç çarpımların mevcut olduğunu varsayar.

[6] Belli başlı birkaç nokta hariç her yerde sıfır olan bir fonksiyon durumunda ne olur? 3.9 nolu denklemdeki integral, fonksiyonun kendisi sıfır olmasa da sıfır olacaktır. Eğer bu durum canınızı sıkıyorsa, matematikte de diplomanız olmalıydı. Fizikte bu tür kötü huylu fonksiyonlar bulunmaz ve Hilbert uzayında farklarının mutlak değer kare integrali sıfır olan iki fonksiyon eşdeğer kabul edilir. Teknik olarak, Hilbert uzayındaki vektörler fonksiyonların **eşdeğerlik sınıflarını** temsil ederler.

$\{f_n(x)\}$ fonksiyonları ortonormal ise, katsayılar Fourier numarasıyla bulunur. Yani

$$c_n = \langle f_n | f \rangle \qquad [3.12]$$

dir. Bu terminolojiyi daha önce 2. Bölümde göstermiştik (sonsuz kare kuyuda kararlı durumlar (2.28 nolu denklem) (0, a) aralığında tam bir ortonormal küme oluşturur; harmonik salınıcının kararlı durumları (2.67 ya da 2.85 nolu denklemler) ($-\infty$, ∞) aralığında tam bir ortonormal kümedir).

Problem 3.1

(a) Karesi integre edilebilir tüm fonksiyonlar kümesinin bir vektör uzayı olduğunu gösterin (tanım için E.1. Kesime bakınız). *Yardım:* Esas problem karesi integre edilebilir iki fonksiyonun toplamının da karesinin integre edilebilir olduğunu göstermektir. 3.7 nolu denklemi kullanın. Tüm *normlanmış* fonksiyonlar kümesi bir vektör uzayı mıdır?

(b) 3.6 nolu denklemdeki integralin iç çarpım koşullarını sağladığını gösterin (E.2. Kesim).

***Problem 3.2**

(a) ν'nun hangi değerleri için $f(x) = x^\nu$ fonksiyonu (0, 1) aralığındaki Hilbert uzayındadır? ν'nin reel olduğunu varsayın, ama pozitif olmak zorunda değildir.

(b) Özel olarak $\nu = 1/2$ için $f(x)$ bu Hilbert uzayının içinde midir? $xf(x)$ ve $(d/dx)f(x)$ durumlarında ne olur?

3.2. GÖZLENEBİLİRLER

3.2.1 Hermitsel Operatörler

$Q(x, p)$ gibi bir gözlenebilirin beklenen değeri, iç çarpım notasyonuyla[7]

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi \, dx = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle \qquad [3.13]$$

olarak çok güzel bir şekilde ifade edilebilir.

[7] $\hat{Q}$ operatörünün, Q büyüklüğünden $p \to \hat{p} \equiv (\hbar / i)(d / dx)$ şeklinde atamayla kurulduğunu hatırlayın. Buradaki operatörler **lineerdir**, yani herhangi f ve g fonksiyonları ve a ve b kompleks sayıları için

$$\hat{Q}\,[af(x) + bg(x)] = a\hat{Q}f(x) + b\hat{Q}g(x)$$

bağıntısı sağlarlar. Tüm fonksiyonların oluşturduğu uzayda lineer *dönüşümleri* meydana getirirler. Bununla beraber bazen Hilbert uzayının içindeki bir fonksiyonu uzayın dışındaki bir fonksiyona götürürler (3.2 nolu problemin (b) şıkkına bakınız). Bu durumda operatörün tanım kümesini kısıtlamak gerekebilir.

Bir ölçümün sonucu, daha doğrusu birçok ölçümün *ortalaması reel* olmak zorundadır. Yani

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^* \qquad [3.14]$$

olmalıdır. Öte yandan, bir iç çarpımın kompleks eşleniği sırayı ters çevirdiğinden (3.8 nolu denklem)

$$\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle \qquad [3.15]$$

olur. Bu bağıntı tüm Ψ dalga fonksiyonları için doğru olmalıdır. Böylece, *gözlenebilirleri* temsil eden operatörler şu özelliği sağlarlar:

$$\text{Tüm } f(x)\text{'ler için } \left\langle f \middle| \hat{Q} f \right\rangle = \left\langle \hat{Q} f \middle| f \right\rangle. \qquad [3.16]$$

Bu operatörlere **hermitsel** operatörler denir.

Aslında, birçok kitap

$$\text{Tüm } f(x) \text{ ve } g(x)\text{'ler için } \left\langle f \middle| \hat{Q} g \right\rangle = \left\langle \hat{Q} f \middle| g \right\rangle \qquad [3.17]$$

şeklinde daha kuvvetli bir şart öngörmektedir. Ancak sizin de 3.3 nolu problemde kanıtlayacağınız gibi, görünümdeki farklılığa rağmen bu şart bizim verdiğimiz tanıma (3.16 nolu denklem) eşdeğerdir. Bu yüzden hangisi hoşunuza giderse onu kullanabilirsiniz. Buradaki önemli nokta şudur: hermitsel bir operatör aynı sonucu verecek şekilde bir iç çarpımın birinci ya da ikinci elemanına uygulanabilir. Hermitsel operatörler, beklenen değerleri reel olduğundan, kuantum mekaniğinde doğal olarak ortaya çıkarlar.

Gözlenebilir büyüklükler hermitsel operatörlerle temsil edilir. [3.18]

Şimdi bunu kontrol edelim. Örneğin, momentum operatörü hermitsel midir?

$$\langle f | \hat{p} g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{\hbar}{i} \frac{dg}{dx} \, dx = \frac{\hbar}{i} f^* g \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right)^* g \, dx = \langle \hat{p} f | g \rangle. \qquad [3.19]$$

Burada kısmi integrasyon kullanarak, alışılmış sebepten sınır terimini attık: $f(x)$ ve $g(x)$ karesi integre edilebilir fonksiyonlarsa, $\pm\infty$'da sıfıra gitmelidirler.[8] i'nin kompleks eşleniğinin kısmi integrasyondan gelen eksi işaretiyle nasıl denkleştiğine dikkatinizi

[8] Aslında bu tam anlamıyla doğru değil. 1. Bölümde bahsettiğimiz gibi, karesi integre edilebilen ama sonsuzda sıfıra gitmeyen kötü huylu fonksiyonlar mevcuttur. Fakat bu tür fonksiyonlar fizikte ortaya çıkmazlar ve eğer bu durum canınızı sıkıyorsa, operatörlerin tanım kümesini kısıtlayarak bu fonksiyonlardan kurtulabiliriz. *Sonlu* aralıklar durumunda, sınır terimleriyle uğraşırken daha dikkatli olmalısınız, ($-\infty$, ∞) aralığında hermitsel olan bir operatör, $(0, \infty)$ ya da $(-\pi, \pi)$ aralığında hermitsel *olmayabilir*. Sonsuz kare kuyuyu merak ediyorsanız, dalga fonksiyonlarının sonsuz bir çizgi üzerinde oturduklarını ve (0, a) aralığı dışında sıfır olduklarını düşünmek en güvenli yoldur.

çekmek isterim. i olmaksızın d/dx operatörü hermitsel değildir ve mümkün bir gözlenebilir büyüklüğü temsil etmez.

---

*__Problem 3.3__ Hilbert uzayındaki tüm h fonksiyonları için $\langle h|\hat{Q}h\rangle = \langle \hat{Q}h|h\rangle$ ise, tüm f ve g'ler için $\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle$ olduğunu gösterin (yani 3.16 ve 3.17 nolu denklemlerle verilen "hermitsellik" tanımlarının eşdeğer olduğunu gösterin). *Yardım:* Önce $h = f + g$ ve sonra $h = f + ig$ alın.

Problem 3.4

(a) Hermitsel iki operatörün *toplamının* hermitsel olduğunu gösterin.

(b) $\hat{Q}$ 'nun hermitsel ve α'nın kompleks bir sayı olduğunu varsayalım. α için hangi koşul altında $\alpha\hat{Q}$ hermitseldir?

(c) Hermitsel iki operatörün *çarpımı* ne zaman hermitsel olur?

(d) Konum operatörüyle $(\hat{x} = x)$ Hamiltonyen operatörünün $(\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + V(x))$ hermitsel olduklarını gösterin.

Problem 3.5 Bir $\hat{Q}$ operatörünün **hermitsel eşleniği** (ya da **adjointi**) $\hat{Q}^+$

$$\text{Tüm } f \text{ ve } g\text{'ler için } \langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}^\dagger f|g\rangle \qquad [3.20]$$

olarak tanımlanır (Hermitsel operatör, hermitsel eşleniği kendisine eşit olan operatördür: $\hat{Q} = \hat{Q}^+$).

(a) x, i ve d/dx'in hermitsel eşleniklerini bulun.

(b) Harmonik salınıcı kaldırma operatörü a_+'nın (2.47 nolu denklem) hermitsel eşleniğini kurun.

(c) $(\hat{Q}\hat{R})^+ = \hat{R}^+\hat{Q}^+$ olduğunu gösterin.

3.2.2 Kesin (Belirli) Durumlar

Tümü aynı Ψ durumunda bulunan ve özdeş olarak hazırlanmış bir sistemler topluluğu üzerinde bir Q gözlenebilirini ölçtüğünüzde, her defasında aynı sonucu elde *edemezsiniz.* Bu durum kuantum mekaniğinin *belirsizliğidir.*[9] *Soru:* Q'nun her ölçümünün *aynı* değeri, örneğin q, vereceği bir durum hazırlamak mümkün müdür? Böyle bir durum, Q gözlenebiliri için **kesin (belirli) bir durumdur.** Aslında böyle bir örneği zaten biliyoruz: kararlı (durağan) durumlar Hamiltonyenin kesin (belirli) durumlarıdır. Ψ_n kararlı durumunda bulunan bir parçacığın toplam enerjisi

[9] Burada büyük bir ustalıkla yapılmış ölçümler hakkında konuşuyoruz. Tabii ki her zaman için *yanılmak* ve yanlış bir sonuç elde etmek mümkündür. Ama bu kuantum mekaniğinin hatası değildir.

ölçüldüğünde, bu duruma karşılık gelen "izin verilen" E_n enerji değeri bulunacağı kesindir.

Kesin (belirli) bir durumda Q'nun standart sapması sıfır olacaktır. Yani

$$\sigma^2 = \langle(\hat{Q} - \langle Q\rangle)^2\rangle = \langle\Psi|(\hat{Q} - q)^2\Psi\rangle = \langle(\hat{Q} - q)\Psi|(\hat{Q} - q)\Psi\rangle = 0 \qquad [3.21]$$

dir. Her ölçüm q değerini veriyorsa bunların ortalaması şüphesiz q olacaktır: $\langle Q\rangle = q$. Ayrıca burada iç çarpımdaki bir çarpanı birinci terimin üzerinden geçirmek için $\hat{Q}$ 'nun ve tabii ki $\hat{Q} - q$ 'nun *hermitsel* operatörler olduklarını kullandık. Kendisiyle iç çarpımını sıfır veren tek fonksiyon 0 olduğundan,

$$\hat{Q}\Psi = q\Psi \qquad [3.22]$$

bulunur. Bu, $\hat{Q}$ operatörü için **özdeğer denklemidir.** Ψ, $\hat{Q}$ 'nun bir **özfonksiyonu**, q ise, karşılık gelen **özdeğerdir.** Böylelikle

Kesin (belirli) durumlar $\hat{Q}$'nun özfonksiyonlarıdır. [3.23]

Böyle bir durum üzerinde Q'nun ölçümü kesin olarak q özdeğerini verecektir.

Özdeğerin bir sayı olduğuna (bir operatör ya da bir fonksiyon değil) dikkat ediniz. Herhangi bir özfonksiyonu bir sabitle çarpabilirsiniz ve sonuç yine aynı özdeğere karşılık olan bir özfonksiyondur. Sıfır bir özfonksiyon olarak sayılmaz (tanım gereği bu durumu dışarıda tutuyoruz. Aksi takdirde herhangi bir $\hat{Q}$ operatörü ve tüm q'lar için $\hat{Q}0 = q0 = 0$ olduğundan, her sayı bir özdeğer olurdu). Fakat, bir özdeğer olarak sıfır kabul edilebilir. Bir operatörün tüm özdeğerlerinin topluluğuna bu operatörün **özdeğer spektrumu** diyoruz. Bazı durumlarda iki ya da daha fazla lineer bağımsız özfonksiyon aynı özdeğere karşılık gelebilir; bu durumda spektrum **katlı (çokkatlı, çakışık)** dır.

Örneğin, toplam enerjinin kesin (belirli) durumları Hamiltonyenin özfonksiyonlarıdır. Yani

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad [3.24]$$

dir ve bu tam da zamandan bağımsız Schrödinger denklemidir. Bu bağlamda, özdeğerler için E harfini, özfonksiyonlar için ψ'yi kullanırız. İsterseniz Ψ'yi kurmak için $\exp(-iEt/\hbar)$ çarpanını ilave edebilirsiniz ve bu da H'nın bir özfonksiyonudur.

Örnek 3.1

$$\hat{Q} \equiv i\frac{d}{d\phi} \qquad [3.25]$$

operatörünü göz önüne alalım. Burada ϕ iki boyutta azimut açısıdır (Bir halka üzerinde hareket eden bir boncuğu göz önüne alırsak fiziksel olarak bu operatörle karşılaşırız. 2.46 nolu probleme bakınız). $\hat{Q}$ hermitsel midir? $\hat{Q}$ 'nun özdeğer ve özfonksiyonlarını bulunuz.

Çözüm: Burada $0 \le \phi \le 2\pi$ *sonlu* aralığındaki $f(\phi)$ fonksiyonlarıyla çalışıyoruz. ϕ ile $\phi + 2\pi$ fiziksel olarak aynı noktayı temsil ettiğinden

$$f(\phi + 2\pi) = f(\phi) \qquad [3.26]$$

şartını koyalım. Kısmi integrasyonla

$$\langle f|\hat{Q}\, g\rangle = \int_0^{2\pi} f^* \left(i\frac{dg}{d\phi}\right) d\phi = if^* g\Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} i\left(\frac{df^*}{d\phi}\right) g\, d\phi = \langle \hat{Q}\, f|g\rangle$$

elde edilir. Dolayısıyla $\hat{Q}$ hermitseldir (bu sefer sınır terimi 3.26 nolu denklem nedeniyle sıfır oldu).

Özdeğer denklemi

$$i\frac{d}{d\phi} f(\phi) = qf(\phi) \qquad [3.27]$$

şeklindedir. Bu denklemin genel çözümü:

$$f(\phi) = Ae^{-iq\phi}. \qquad [3.28]$$

3.26 nolu denklem, q'nun olası değerleri üzerine kısıtlama getirir:

$$e^{-iq2\pi} = 1 \quad \Rightarrow \quad q = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad [3.29]$$

Bu operatörün özdeğer spektrumu tamsayılar kümesidir ve katlı değildir.

Problem 3.6 $\hat{Q} = d^2/d\phi^2$ operatörünü göz önüne alın. Burada ϕ (3.1 nolu örnekte olduğu gibi) kutupsal koordinatlarda azimut açısıdır ve fonksiyonlar 3.26 nolu denklemle verilen şartı sağlarlar. $\hat{Q}$ hermitsel midir? $\hat{Q}$'nun özfonksiyonlarını ve özdeğerlerini bulunuz. $\hat{Q}$'nun özdeğer spektrumu nedir? Spektrum katlı mıdır?

3.3 HERMİTSEL BİR OPERATÖRÜN ÖZFONKSİYONLARI

Bu kesimde dikkatimizi *hermitsel operatörlerin özfonksiyonları* (fiziksel olarak: gözlenebilirlerin kesin durumları) üzerine yoğunlaştıracağız. Bu özfonksiyonlar iki sınıfa ayrılırlar: Özdeğer spektrumu **kesikli** ise (yani özdeğerler birbirlerinden ayrıksa), özfonksiyonlar Hilbert uzayı içindedirler ve fiziksel olarak kabul edilebilir durumlara karşılık gelirler. Özdeğer spektrumu **sürekliyse** (yani özdeğerler belli bir aralıkta her değeri alabiliyorsa), özfonksiyonlar normlanamazlar ve mümkün dalga fonksiyonlarını temsil etmezler (buna rağmen, özdeğerlerde zorunlu olarak bir dağılmaya sebep olsa da bu fonksiyonların lineer *kombinasyonları* normlanabilirler). Bazı operatörler yalnızca kesikli özdeğer spektrumuna sahipken (örneğin, harmonik salınıcı Hamiltonyeni), bazıları da yalnızca sürekli özdeğer spektrumuna (örneğin, serbest parçacık Hamiltoyeni) sahip olurlar. Sonlu kare kuyu Hamiltonyeni örneğinde olduğu gibi, bazı durumlarda da operatörlerin özdeğer spektrumunda hem kesikli hem de sürekli kısım bulunur. İlgili iç

çarpımların varlığı garanti olduğundan, kesikli spektrumu ele almak daha kolaydır. Aslında bu sonlu boyutlu teoriye (hermitsel bir *matrisin* özvektörleri) çok benzerdir. İlk olarak kesikli spektrumu çalışacağız.

3.3.1 Kesikli Spektrum

Matematiksel olarak, hermitsel bir operatörün normlanabilir özfonksiyonları iki önemli özelliğe sahiptir:

1. Teorem: Özdeğerler reeldir.

Kanıt: $\hat{Q}$'nun q özdeğerine karşılık olan özfonksiyon $f(x)$ olsun. Yani

$$\hat{Q}f = qf$$

olsun. $\hat{Q}$ hermitsel olduğundan

$$\langle f|\hat{Q}f\rangle = \langle \hat{Q}f|f\rangle$$

dir.[10] O zaman

$$q\langle f|f\rangle = q^*\langle f|f\rangle$$

elde edilir (q *bir sayı* olduğundan integralin dışına çıkarılabilir. İç çarpımda ilk fonksiyonun kompleks eşleniği alındığı için (3.6 nolu denklem) sağ tarafta q'nun da kompleks eşleniği alındı). Ancak $\langle f|f\rangle$ sıfır olamaz ($f(x) = 0$ yasal bir özfonksiyon değildir) böylece $q = q^*$ elde edilir. Yani q reeldir.

Bu sonuç oldukça rahatlatıcıdır: Kesin (belirli) bir durumda bulunan bir parçacık üzerinde gözlenebilir bir büyüklük ölçerseniz, reel bir sayı elde edersiniz.

2. Teorem: Farklı özdeğerlere karşılık olan özfonksiyonlar ortogonaldir.

Kanıt:

$$\hat{Q}f = qf \quad \text{ve} \quad \hat{Q}g = q'g$$

olsun. $\hat{Q}$ hermitsel olduğundan $\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle$ dir. Böylece

$$q'\langle f|g\rangle = q^*\langle f|g\rangle$$

elde edilir (burada özfonksiyonların Hilbert uzayında oldukları kabul edildiğinden, iç çarpımlar mevcuttur). Ancak q reel olduğundan (1. Teorem), $q' \ne q$ ise $\langle f|g\rangle = 0$ olmalıdır.

---

[10] Burada özfonksiyonların Hilbert uzayında olduklarını kabul ediyoruz. Aksi takdirde, iç çarpım mevcut olmazdı.

İşte bu nedenle, örneğin, sonsuz kare kuyunun ya da harmonik salınıcının kararlı (durağan) durumları ortogonaldir. Bu durumlar Hamiltonyenin farklı özdeğerlerine karşılık olan özfonksiyonlarıdır. Ancak bu özellik yalnızca Hamiltonyene özgü olmayıp, *herhangi* bir gözlenebilirin kesin (belirli) durumları için de doğrudur.

Maalesef, 2. Teorem katlı ($q' = q$) durumlar hakkında bir şey söylemez. Bununla birlikte, aynı özdeğere karşılık olan iki ya da daha fazla özfonksiyon varsa bunların lineer bir kombinasyonu da aynı özdeğere karışlık olan bir özfonksiyondur (3.7 nolu problemin (a) şıkkı) ve katlı altuzayda ortogonal özfonksiyonları *kurmak* için **Gram-Schmidt yöntemini** (E.4 nolu problem) kullanabiliriz. Neyse ki, bu işlemi açık olarak yapmak her zaman gerekli değildir, ancak ilke olarak daima yapmak mümkündür. Böylelikle *katlı durumların varlığında* bile özfonksiyonları ortogonal seçmek mümkündür ve kuantum mekaniğinin formülasyonunun kuruluşunda bu işlemin zaten yapıldığını kabul edeceğiz. Bu aynı zamanda baz fonksiyonlarının ortogonalliğine bağlı olan Fourier numarasını kullanmamıza da izin verir.

Sonlu boyutlu bir vektör uzayında hermitsel bir matrisin özvektörleri üçüncü bir ana özelliğe daha sahiptir: bu vektörler tüm uzayı örterler (yani her vektör bunların lineer bir kombinasyonu olarak ifade edilebilir). Maalesef, bunun kanıtı sonsuz boyutlu uzaylara genelleştirilemez. Ama bu özelliğin kendisi kuantum mekaniğinin tutarlılığı için olmazsa olmaz koşuludur. O yüzden, Dirac'ın yolundan giderek[11], bunu bir temel varsayım olarak (ya da tam anlamıyla; gözlenebilirleri temsil eden hermitsel operatörler sınıfı üzerinde bir kısıtlama olarak) alacağız.

> **Temel varsayım:** Gözlenebilir bir operatörün özfonksiyonları *tam* bir küme oluşturur. Hilbert uzayındaki herhangi bir fonksiyon bunların lineer bir kombinasyonu olarak ifade edilebilir.[12]

Problem 3.7

(a) $f(x)$ ve $g(x)$, $\hat{Q}$ operatörünün aynı q özdeğerine karşılık olan iki özfonksiyonu olsun. f ve g'nin herhangi bir lineer kombinasyonunun da aynı q özdeğerine karşılık olan bir özfonksiyon olduğunu gösteriniz.

(b) $f(x) = \exp(x)$ ve $g(x) = \exp(-x)$'in d^2/dx^2 operatörünün aynı özdeğere karşılık olan özfonksiyonları olduğunu gösteriniz. $(-1, 1)$ aralığında ortogonal özfonksiyonlar olacak şekilde f ve g'nin iki ayrı lineer kombinasyonunu kurunuz.

---

[11] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, New York (1958).

[12] Bazı özel durumlarda, tamlık kanıtlanabilirdir. (örneğin, Dirichlet teoreminden, sonsuz kare kuyunun kararlı durumlarının tam olduğunu biliyoruz). Bazı özel durumlarda kanıtlanabilir olan bir şeye "temel varsayım" demek biraz uygunsuz olsa da, bunu üstesinden gelmek için daha iyi bir yol bilmiyorum.

Problem 3.8

(a) 3.1 nolu örnekte verilen hermitsel operatörün özdeğerlerinin reel olduğunu kontrol ediniz.

(b) Aynı işlemi 3.6 nolu problemde verilen operatör için yapınız.

3.3.2 Sürekli Spektrum

Hermitsel bir operatörün özdeğer spektrumu *sürekli* ise, özfonksiyonlar normlanamazlar ve iç çarpımlar mevcut olmayacağından 1. ve 2. teoremin kanıtları doğru olmaz. Bununla beraber, üç önemli özellik yani reellik, ortogonallik ve tamlık hâlâ geçerlidir. Bu incelikli duruma özgül örneklerle yaklaşmak sanırım daha iyi olacaktır.

Örnek 3.2 Momentum operatörünün özdeğer ve özfonksiyonlarını bulunuz.

Çözüm: $f_p(x)$ özfonksiyon, p karşılık gelen özdeğer olsun. O zaman,

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}f_p(x) = pf_p(x) \qquad [3.30]$$

olur. Genel çözüm

$$f_p(x) = Ae^{ipx/\hbar}$$

dir. p'nin *herhangi* bir (kompleks) değeri için bu çözüm, karesi integre edilebilir bir fonksiyon değildir. Momentum operatörünün Hilbert uzayı içinde özfonksiyonları *yoktur*. Eğer kendimizi *reel* özdeğerlere kısıtlarsak, yapay bir "ortonormallik" bağıntısı yazabiliriz. 2.24(a) ve 2.26 nolu problemlere tekrar dönerek;

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x)\, f_p(x)\, dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar}\, dx = |A|^2 2\pi\hbar\, \delta(p - p') \qquad [3.31]$$

elde edilir. $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ seçilirse, özfonksiyon

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \qquad [3.32]$$

halini alır ve 3.10 nolu denklemle verilen *doğru* ortonormallik bağıntısına benzeyen

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p - p') \qquad [3.33]$$

ifadesi elde edilir. Buradaki indisler sürekli değişkenlerdir ve Kronecker deltası Dirac delta fonksiyonu haline gelmiştir. Bunun dışında her şey aynı görünüyor. 3.33 nolu denklemi **Dirac ortonormalliği** olarak adlandıracağım. Daha da önemlisi, momentum

özfonksiyonları *tamdır* ve 3.11 nolu denklemdeki toplamın yerini bir integral alır. Yani karesi integre edilebilir herhangi bir $f(x)$ fonksiyonu

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p)\, f_p(x)\, dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar}\, dp \qquad [3.34]$$

şeklinde momentum özfonksiyonları cinsinden yazılabilir. Açılım katsayısı (bu durumda $c(p)$ *fonksiyonu*) her zaman Fourier numarasıyla elde edilebilir:

$$\langle f_{p'} | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \langle f_{p'} | f_p \rangle\, dp = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \delta(p - p')\, dp = c(p') \qquad [3.35]$$

Ya da açılım katsayısını 2.102 nolu denklemle verilen Plancherel teoreminden hareketle elde edebilirsiniz. Bu, 3.34 nolu denklemdeki açılım için bir Fourier dönüşümünden başka bir şey değildir.

3.32 nolu denklemle verilen momentum özfonksiyonları, dalga boyu

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \qquad [3.36]$$

ile verilen sinüzoidal fonksiyonlardır. Bu bağıntı daha önceden uygun bir zamanda kanıtlamaya söz verdiğim eski de Broglie formülüdür (1.39 nolu denklem). Ancak, artık kesin momentuma sahip olan bir parçacık gibi *bir şeyin* gerçekte olmadığını bildiğimizden, bu bağıntı de Broglie'nin düşündüğünden çok daha akıllıca bir yolla elde edilmiştir. Fakat, dar bir momentum aralığına sahip olan normlanabilir bir dalga *paketi* yapabiliriz ve bu de Broglie bağıntısına uyar.

3.2 nolu örnekten ne anlıyoruz? $\hat{p}$'nin hiçbir özfonksiyonu Hilbert uzayında yaşamadığı halde, bunların reel özdeğerlere karşılık olan belirli bir kısmı yakın civarda bulunan ve bir çeşit sanki-normlanabilir özelliği olan "kenar mahallelerde" yaşarlar. Bu fonksiyonlar mümkün fiziksel durumları temsil etmezler, ama bir boyutlu saçılma süreçlerinde gördüğümüz gibi hala oldukça yararlıdırlar.[13]

Örnek 3.3 Konum operatörünün özdeğer ve özfonksiyonlarını bulunuz.

Çözüm: $g_y(x)$, y özdeğerine karşılık olan özfonksiyon olsun. O zaman,

$$x\, g_y(x) = y\, g_y(x) \qquad [3.37]$$

olur.

[13] *Reel olmayan* özdeğerlere karşılık olan özfonksiyonlara ne olacak? Bu fonksiyonlar yalnızca normlanamaz değildirler. Aslında $\pm\infty$'da ıraksarlar. Hilbert uzayının "kenar mahallelerinde" tanımladığım bu fonksiyonların (tüm büyükşehir sınırları içine giren bölgeler bazen "donanımlı Hilbert uzayı" olarak adlandırılır, örneğin; Leslie Ballentine, *Quantum Mechanics: A Modern Development*, World Scientific, 1998'e bakınız) bir özelliği şudur: bu fonksiyonların *kendileriyle* sonlu iç çarpımları olmadığı halde, bunlar Hilbert uzayının tüm üyeleriyle iç çarpıma izin verirler. Bu, $\hat{p}$'nin reel olmayan özdeğerlere karşılık olan özfonksiyonları için doğru *değildir*. Özellikle, momentum operatörünün Hilbert uzayındaki fonksiyonlar için hermitsel olduğunu göstermiştim. Fakat kullanılan argüman 3.19 nolu denklemdeki sınır teriminin düşmesine bağlıydı. Bu terim, g, $\hat{p}$'nin reel bir özdeğerine karşılık olan özfonksiyonsa (f, Hilbert uzayında olduğu sürece) yine de sıfırdır. Ama özdeğerin sanal kısmı varsa sıfır olmaz. Bu durumda herhangi bir kompleks sayı $\hat{p}$ operatörünün bir özdeğeridir, ama *hermitsel* $\hat{p}$ operatörünün özdeğerleri yalnızca *reel* sayılardır. Diğerleri $\hat{p}$'nin üzerinde hermitsel olduğu uzayın dışında kalırlar.

Burada y, verilen bir özfonksiyon için, sabit bir sayı, x ise sürekli bir değişkendir. x'in hangi fonksiyonu şu özelliğe sahiptir? Fonksiyonun x ile çarpılması, sabit y ile çarpılmasıyla aynıdır. Yani $x = y$ noktası hariç bu fonksiyon *sıfır* olmalıdır. Aslında bu fonksiyon Dirac delta fonksiyonundan başka bir şey değildir. Böylece

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

olarak elde edilir. Bu kez özdeğerler reel olmalıdır; özfonksiyonların karesi integre edilebilir değildir ancak Dirac ortonormalliğine izin verirler. Böylece

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_{y'}^*(x)\, g_y(x)\, dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y')\delta(x - y)\, dx = |A|^2 \delta(y - y') \qquad [3.38]$$

olur. $A = 1$ seçilirse

$$g_y(x) = \delta(x - y) \qquad [3.39]$$

elde edilir. O zaman

$$\langle g_{y'} | g_y \rangle = \delta(y - y') \qquad [3.40]$$

olur. Bu özfonksiyonlar tam bir küme oluştururlar. Bu nedenle

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(y)\, g_y(x)\, dy = \int_{-\infty}^{\infty} c(y)\delta(x - y)\, dy \qquad [3.41]$$

dir ve

$$c(y) = f(y) \qquad [3.42]$$

olur (buradaki işlem aşikâr olmakla beraber, isterseniz bunu Fourier numarasını kullanarak da bulabilirsiniz).

Hermitsel bir operatörün özdeğer spektrumu *sürekliyse* (bu durumda özdeğerler sürekli bir değişkenle verilir – örneklerde p ve y; bundan sonra genel olarak z ile göstereceğiz), özfonksiyonlar normlanamazlar. Bu fonksiyonlar Hilbert uzayında bulunmazlar ve mümkün fiziksel durumları temsil etmezler. Bununla birlikte, reel özdeğerlere karşılık olan özfonksiyonlar *Dirac* ortonormalliğine sahiptirler ve tam bir küme oluştururlar (bu durumda toplamlar integrale dönüşür). Neyse ki, bütün istediğimiz de budur.

Problem 3.9

(a) 2. Bölümden harmonik salınıcı *dışında*, yalnızca *kesikli* özdeğer spektrumuna sahip bir Hamiltonyen örneği veriniz.

(b) 2. Bölümden, serbest parçacık *dışında*, yalnızca *sürekli* özdeğer spektrumuna sahip bir Hamiltonyen örneği veriniz.

(c) 2. Bölümden, sonlu kare kuyu *dışında*, özdeğer spektrumunda hem kesikli hem de sürekli kısım bulunan bir Hamiltonyen örneği veriniz.

Problem 3.10 Sonsuz kare kuyunun taban durumu momentumun bir özfonksiyonu mudur? Eğer özfonksiyonuysa momentumun değeri nedir? Eğer değilse, niçin değildir?

3.4 GENELLEŞTİRİLMİŞ İSTATİSTİKSEL YORUM

1. Bölümde, bir parçacığın belirli bir konumda bulunma olasılığının ve herhangi bir gözlenebilir büyüklüğün beklenen değerinin nasıl hesaplanacağını göstermiştik. 2. Bölümde de bir enerji ölçümünün olası sonuçlarının ve bunların elde edilme olasılıklarının nasıl bulunacağını öğrendiniz. Şimdi, tüm bunları kapsayan, *herhangi bir* ölçümün olası sonuçlarını ve bunların elde edilme olasılıklarını hesaplamanızı sağlayan **genelleştirilmiş istatistiksel yorumu** ifade etme aşamasındayız. Dalga fonksiyonunun zamanla nasıl evrimleştiğini veren Schrödinger denklemiyle birlikte bu yorum kuantum mekaniğinin temelini oluşturmaktadır.

Genelleştirilmiş istatistiksel yorum: $\Psi(x, t)$ durumunda bulunan bir parçacık üzerinde bir $Q(x, p)$ gözlenebilir büyüklüğünü ölçtüğünüzde, $\hat{Q}(x, -i\hbar d/dx)$ hermitsel operatörünün *özdeğerlerinden birini* elde edersiniz. $\hat{Q}$'nun özdeğer spektrumu kesikli ise, $f_n(x)$ ortonormal özfonksiyonuna karşılık olan bir q_n özdeğerinin elde edilme olasılığı

$$c_n = \langle f_n|\Psi\rangle \quad \text{olmak üzere} \quad |c_n|^2 \tag{3.43}$$

dir. Özdeğer spektrumu sürekli ise, reel $q(z)$ özdeğeri ve buna karşılık olan Dirac ortonormalliğine sahip $f_z(x)$ özfonksiyonu için, dz aralığında bir ölçüm sonucu elde edilme olasılığı

$$c(z) = \langle f_z|\Psi\rangle \quad \text{olmak üzere} \quad |c(z)|^2\, dz \tag{3.44}$$

ile verilir. Ölçüm sonucunda, dalga fonksiyonu bulunan özdeğere karşılık olan özduruma "çöker".[14]

İstatistiksel yorum klasik fizikte karşılaştığımız şeylerden oldukça farklıdır. Biraz farklı bir bakış açısı bu yorumu daha akla yatkın yapacaktır. Herhangi bir gözlenebilir operatörün özfonksiyonları *tam* bir küme oluşturur, böylelikle dalga fonksiyonu bu özfonksiyonların lineer bir kombinasyonu olarak yazılabilir:

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n(t)\, f_n(x) \tag{3.45}$$

[14] Sürekli özdeğer spektrumunda, ölçüm cihazının duyarlılığına bağlı olarak, ölçülen değer etrafında dar bir aralığa çökme olur.

(Basitlik açısından özdeğer spektrumunu kesikli kabul ediyorum. Buradaki argümanı sürekli spektrumuna genelleştirmek çok zor değil). Özfonksiyonlar *ortonormal* olduğundan, açılım katsayıları Fourier numarasıyla elde edilir:[15]

$$c_n = \langle f_n|\Psi\rangle = \int f_n(x)^*\Psi(x,t)\, dx. \tag{3.46}$$

Nitel olarak, c_n "Ψ içinde ne kadar f_n olduğunu" söyler ve eğer bir ölçüm $\hat{Q}$'nun özdeğerlerinden birini verecekse, belli bir q_n özdeğerinin elde edilme olasılığının Ψ içindeki "f_n miktarı" ile belirleneceğini düşünmek mantıklı gözüküyor. Ancak, olasılıklar dalga fonksiyonunun mutlak değer karesiyle belirlendiğinden, tam ölçü aslında $|c_n|^2$ dir. Bu, genelleştirilmiş istatistiksel yorumun önemli bir sorumluluğudur.[16]

Şüphesiz, *toplam* olasılık (tüm olası sonuçlar üzerinden toplama) 1 olmalıdır. Yani

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{3.47}$$

dir. Bunun dalga fonksiyonunun normlanmasından elde edileceğini gösterelim:

$$1 = \langle\Psi|\Psi\rangle = \left\langle \left(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'}\right) \middle| \left(\sum_n c_n f_n\right)\right\rangle = \sum_{n'}\sum_n c_{n'}^* c_n \langle f_{n'}|f_n\rangle$$
$$= \sum_{n'}\sum_n c_{n'}^* c_n \delta_{n'n} = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2. \tag{3.48}$$

Benzer şekilde, Q'nun beklenen değeri, tüm olası özdeğer sonuçları çarpı bu özdeğerlerin elde edilme olasılıkları üzerinden bir toplama olmalıdır. Yani beklenen değer

$$\langle Q\rangle = \sum_n q_n |c_n|^2 \tag{3.49}$$

olarak verilir. Gerçekten $\langle Q\rangle$'yu,

$$\langle Q\rangle = \langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle = \left\langle \left(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'}\right) \middle| \left(\hat{Q}\sum_n c_n f_n\right)\right\rangle \tag{3.50}$$

şeklinde yazmak mümkündür. Ayrıca, $\hat{Q}f_n = q_n f_n$ olduğundan,

[15] Burada gösterilmeyen zaman bağımlılığının katsayıların içinde olduğuna dikkat ediniz. Açıkça ifade etmek istersek, aslında $c_n(t)$ yazmalıyız.

[16] Burada, "$|c_n|^2$ parçacığın f_n durumunda bulunma olasılığıdır" şeklinde çok sıkça yapılan yanlıştan kaçınmalıyız. Bu iddia saçmadır. Parçacık Ψ durumundadır ve $|c_n|^2$, Q'nun *ölçümünde* q_n değerinin elde edilme olasılığıdır. Böyle bir ölçümün mevcut durumu f_n özfonksiyonuna çöktüreceği doğrudur. Böylece, $|c_n|^2$'nin "şu anda Ψ durumunda olan bir parçacığın Q'nun bir ölçümünden sonra f_n durumunda bulunma olasılığı" olduğunu söyleyebiliriz. Ancak bu tamamıyla farklı bir iddiadır.

$$\langle Q \rangle = \sum_{n'} \sum_{n} c_{n'}^* c_n q_n \langle f_{n'} | f_n \rangle = \sum_{n'} \sum_{n} c_{n'}^* c_n q_n \delta_{n'n} = \sum_{n} q_n |c_n|^2 \qquad [3.51]$$

elde edilir. Buraya kadar her şey tutarlı gözüküyor.

Buradaki dili kullanarak, konum ölçümleri için orijinal istatistiksel yorumu yeniden elde edebilir miyiz? Elbette. Bu gerçekten gereksizdir, ama kontrol etmeye değer. Ψ durumunda bulunan bir parçacık üzerinde x'in ölçümü, konum operatörünün özdeğerlerinden birini vermelidir. 3.3 nolu örnekte her y reel sayısının x'in bir özdeğeri olduğunu bulmuştuk. Buna karşılık olan ve Dirac ortonormalliğine sahip özfonksiyon $g_y(x) = \delta(x-y)$ dir. O zaman

$$c(y) = \langle g_y | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y) \Psi(x, t)\, dx = \Psi(y, t) \qquad [3.52]$$

elde edilir. Böylelikle, dy aralığında bulunan bir sonuç elde etme olasılığı $|\Psi(y,t)|^2\, dy$ dir. Bu tam da orijinal istatistiksel yorumdur.

Momentumdan ne haber? 3.2 nolu örnekte momentum operatörünün özfonksiyonları $f_p(x) = (1/\sqrt{2\pi\hbar})\exp(ipx/\hbar)$ olarak bulunmuştu. O zaman

$$c(p) = \langle f_p | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t)\, dx \qquad [3.53]$$

olarak bulunur. Bu önemli bir büyüklük olduğundan, özel bir isim vererek ayrı bir sembolle gösteririz: **momentum uzayı dalga fonksiyonu**, $\Phi(p, t)$. Bu, (**konum uzayı**) dalga fonksiyonu $\Psi(x, t)$'nin *Fourier dönüşümüdür*. $\Psi(x, t)$ de, Plancherel teoreminden, $\Phi(p, t)$'nin *ters* Fourier dönüşümüdür: Böylece momentum ve konum uzayı dalga fonksiyonları sırasıyla

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t)\, dx \qquad [3.54]$$

ve

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p, t)\, dp \qquad [3.55]$$

olarak verilir. Genelleştirilmiş istatistiksel yoruma göre, momentum bir kez ölçüldüğünde dp aralığında bir sonuç elde etme olasılığı

$$|\Phi(p, t)|^2\, dp \qquad [3.56]$$

olur.

Örnek 3.4 m kütleli bir parçacık $V(x) = -\alpha\,\delta(x)$ ile verilen delta fonksiyonu kuyusu içinde bağlıdır. Parçacığın momentumu bir kez ölçüldüğünde, $p_0 = m\alpha/\hbar$'den daha büyük bir değer elde etme olasılığı nedir?

Çözüm: Konum uzayı dalga fonksiyonu (2.129 nolu denklem)

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} e^{-iEt/\hbar}$$

dir. Burada $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$ dir. Momentum uzayı dalga fonksiyonu

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-iEt/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}\, dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{p_0^{3/2} e^{-iEt/\hbar}}{p^2 + p_0^2}$$

olarak bulunur. Aranan olasılık

$$\frac{2}{\pi} p_0^3 \int_{p_0}^{\infty} \frac{1}{(p^2 + p_0^2)^2}\, dp = \frac{1}{\pi} \left[\frac{pp_0}{p^2 + p_0^2} + \tan^{-1}\left(\frac{p}{p_0}\right) \right]\Bigg|_{p_0}^{\infty}$$
$$= \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} = 0.0908$$

dir. Burada çıkan integralleri integral tablolarından bulduk.

Problem 3.11 Harmonik salınıcının taban durumunda bulunan bir parçacık momentum uzayı dalga fonksiyonu $\Phi(p, t)$'yı bulunuz. Bu durumda bulunan parçacık üzerinde p bir kez ölçüldüğünde, aynı enerji için, klasik aralığın dışında değer elde etme olasılığı nedir? *Yardım*: Matematik tablolarından "Normal Dağılım' da "Hata Fonksiyonu"na bakınız ya da Mathematica kullanınız.

Problem 3.12

$$\langle x \rangle = \int \Phi^* \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi\, dp. \qquad [3.$$

olduğunu gösteriniz *Yardım*: $x \exp(ipx/\hbar) = -i\hbar(d/dp)\exp(ipx/\hbar)$ olduğuna dikkat edi

Momentum uzayında konum operatörü $i\hbar\partial/\partial p$ dir. Genel olarak, bir gözlenebi beklenen değeri

$$\langle Q(x, p) \rangle = \begin{cases} \displaystyle\int \Psi^* \hat{Q}\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi\, dx, & \text{konum uzayında} \\ \displaystyle\int \Phi^* \hat{Q}\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}, p\right) \Phi\, dp, & \text{moment uzayında} \end{cases} \qquad [3.$$

olarak verilir. İlke olarak, önceden konum uzayında yaptığınız tüm hesaplam momentum uzayında yapabilirsiniz (ancak bu hesaplar her zaman *kolay* olmayabilir)

3.5 BELİRSİZLİK İLKESİ

Belirsizlik ilkesini 1.6. Kesimde $\sigma_x\sigma_p \geq \hbar/2$ formunda ifade etmiştik ve siz de birçok problemde bunu kontrol etmiştiniz. Ancak bu ilkeyi şimdiye kadar kanıtlamadık. Bu kesimde, belirsizlik ilkesinin çok daha genel bir sürümünü kanıtlayarak sonuçlarını inceleyeceğiz. Argüman güzel olmakla beraber biraz soyuttur ve bu yüzden dikkatli izleyiniz.

3.5.1. Genelleştirilmiş Belirsizlik İlkesinin Kanıtı

Herhangi bir A gözlenebiliri için,

$$\sigma_A^2 = \langle(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi\rangle = \langle f|f\rangle$$

dir (3.21 nolu denklem). Burada $f \equiv (\hat{A}-\langle A\rangle)\Psi$ dir. Aynı şekilde, *diğer bir B* gözlenebiliri için

$$g \equiv (\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi \quad \text{olmak üzere} \quad \sigma_B^2 = \langle g|g\rangle$$

yazılabilir. 3.7 nolu denklemle verilen Schwarz eşitsizliğini kullanarak

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 = \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2 \qquad [3.59]$$

elde edilir. Herhangi bir z kompleks sayısı için

$$|z|^2 = [\mathrm{Re}(z)]^2 + [\mathrm{Im}(z)]^2 \geq [\mathrm{Im}(z)]^2 = \left[\frac{1}{2i}(z - z^*)\right]^2 \qquad [3.60]$$

yazılabilir. Böylece $z = \langle f|g\rangle$ seçilerek

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}[\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle]\right)^2 \qquad [3.61]$$

bulunur. Ancak

$$\begin{aligned}\langle f|g\rangle &= \langle(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi|(\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi\rangle = \langle\Psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)(\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle B\rangle - \hat{B}\langle A\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle)\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle - \langle B\rangle\langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle - \langle A\rangle\langle\Psi|\hat{B}\Psi\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle \\ &= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle B\rangle\langle A\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle \\ &= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle\end{aligned}$$

olur. Benzer şekilde $\langle g|f\rangle$ hesaplanırsa

$$\langle g|f\rangle = \langle\hat{B}\hat{A}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle,$$

bulunur.

Böylece

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{B}\hat{A}\rangle = \langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle$$

elde edilir. Burada

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

iki operatörün komütatörüdür (2.48 nolu denklem). *Sonuç:*

$$\boxed{\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right)^2.} \qquad [3.62]$$

3.62 nolu denklem (genelleştirilmiş) **belirsizlik ilkesidir.** i nedeniyle sağ *tarafın negatif* olduğunu düşünebilirsiniz. Aslında değildir, hermitsel iki operatörün komütatörü i içerdiğinden, bunlar birbirlerini götürürler.[17]

Bir örnek olarak, ilk gözlenebiliri konum ($\hat{A} = x$) ikinciyi momentum ($\hat{B} = (\hbar/i)d/dx$) alalım. Bunların komütatörünü 2. Bölümde hesaplamıştık (2.51 nolu denklem):

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

Böylelikle

$$\sigma_x^2\sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i}i\hbar\right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$$

elde edilir. Ya da, standart sapmalar doğaları gereği pozitif olduklarından

$$\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \qquad [3.63]$$

bulunur. Bu bağıntı orijinal Heisenberg belirsizlik ilkesidir, ancak burada çok daha genel bir teoremin bir uygulaması olarak karşımızdadır.

Gerçekte, *karşılık olan operatörleri sıra değiştirmeyen her gözlenebilir çifti için* bir "belirsizlik ilkesi" mevcuttur. Böyle gözlenebilirlere **uyuşumsuz gözlenebilirler** diyoruz. Uyuşumsuz gözlenebilirlerin ortak özfonksiyonları yoktur ya da en azından, ortak özfonksiyonların tam bir kümesine sahip olmazlar (3.15 nolu probleme bakınız). Tersine olarak, *uyuşumlu* (sıra değiştiren) *gözlenebilirlerin* ortak özfonksiyonları tam küme oluşturabilirler.[18] Örneğin; (4. Bölümde göreceğimiz gibi) hidrojen atomunda,

[17] Aslında tam olarak, hermitsel iki operatörün komütatörünün kendisi antihermitseldir $(\hat{Q}^\dagger = -\hat{Q})$ ve beklenen değeri sanaldır (3.26 nolu problem).

[18] Bu ifadenin karşılığı şudur; sıra değiştirmeyen matrisler aynı anda köşegenleştirilemezler (yani aynı benzerlik dönüşümüyle köşegen forma getirilmezler), oysa sıra değiştiren hermitsel matrisler aynı anda köşegenleştirilebilirler. E.5. Kesime bakınız.

Hamiltonyen, açısal momentumun büyüklüğü ve açısal momentumun z-bileşeni uyuşumlu gözlenebilirlerdir ve bunların üçünün özdeğerleriyle etiketlenmiş ortak özfonksiyonlarını kurmak mümkündür. Fakat konum ve momentum operatörleri uyuşumsuz olduklarından bunların ortak özfonksiyonları yoktur.

Belirsizlik ilkesinin kuantum teorisinde ekstra bir varsayım olmadığına ve daha çok istatistiksel yorumun bir *sonucu* olduğunda dikkat ediniz. Bunun laboratuvarda nasıl uygulandığını merak edebilirsiniz. *Niçin* bir parçacığın konumunu ve momentumunu aynı anda belirleyemiyoruz? Parçacığın konumunu kesin olarak ölçebilirsiniz, fakat ölçüm işlemi dalga fonksiyonunun dar ve sivri uçlu bir fonksiyona çökmesine sebep olur ve bu fonksiyon Fourier bileşenleri içinde geniş bir dalgaboyu aralığı (yani momentum aralığı) taşır. Eğer şimdi momentumu ölçerseniz durum fonksiyonu iyi tanımlanmış dalgaboyuna sahip, uzun bir sinüzoidal dalga fonksiyonuna çökecektir. Ancak bu kez parçacık ilk ölçümde bulduğunuz konuma sahip olmayacaktır.[19] Buradaki problem ikinci ölçümün ilk ölçümün sonucunu yürürlükten kaldırmasıdır. Sadece dalga fonksiyonu her iki gözlenebilirin ortak bir özdurumu olduğu zaman, ikinci ölçümü parçacığın durumunu değiştirmeksizin yapmak mümkün olur (yani ikinci çökme süreci hiçbir şeyi değiştirmez). Genel olarak böyle bir süreç, ancak iki gözlenebilir uyuşumlu ise mümkündür.

***Problem 3.13**

(a)

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \qquad [3.64]$$

ile verilen komütatör özdeşliğini kanıtlayınız.

(b)

$$[x^n, p] = i\hbar n x^{n-1}$$

olduğunu gösteriniz.

(c) Genel olarak, herhangi bir $f(x)$ fonksiyonu için

$$[f(x), p] = i\hbar \frac{df}{dx} \qquad [3.65]$$

olduğunu gösteriniz.

---

[19] Niels Bohr, örneğin x'in ölçümünün önceden elde edilmiş p değerini yok eden *mekanizmayı* ararken çok ızdırap çekti. Sorunun çözümünün zor yanı şudur: bir parçacığın konumunu belirlemek için bu parçacığı herhangi bir yolla dürtüklemelisiniz. Örneğin parçacığı ışıkla aydınlatabilirsiniz. Ancak bu fotonlar parçacığa kontrol edemeyeceğiniz bir momentum aktarırlar. Bu durumda konumu tam olarak bildiğiniz halde momentumu artık bilemezsiniz. Bohr ve Einstein'in ünlü tartışmaları, deneysel kısıtlamaların belirsizlik ilkesine nasıl zorladığını ayrıntılarıyla gösteren birçok güzel örnekle doludur. Son derece ilham veren bir örnek için, *Albert Einstein: Philosopher Scientist*, edited by P. A. Schilpp, Tudor New York (1949)'da Bohr'un yazdığı makaleye bakınız.

***Problem 3.14** Konumdaki belirsizlikle ($A = x$) enerjideki belirsizliği ($B = p^2/2m+V$) ilişkilendiren ünlü "(isminiz) belirsizlik ilkesini" kanıtlayınız.

$$\sigma_x \sigma_H \geq \frac{\hbar}{2m}|\langle p \rangle|.$$

Kararlı durumlar için bu ifade çok fazla şey söylemez. Niçin?

Problem 3.15 Sıra değiştirmeyen iki operatörün ortak özfonksiyonların tam bir kümesine sahip olamayacaklarını gösteriniz. *Yardım:* $\hat{P}$ ve $\hat{Q}$ ortak özfonksiyonların tam bir kümesine sahiplerse, Hilbert uzayındaki herhangi bir fonksiyon için $\left[\hat{P}, \hat{Q}\right] f = 0$ olduğunu gösteriniz.

3.5.2 Minimum Belirsizliğe Sahip Dalga Paketi

Şimdiye kadar konum-momentum belirsizlik ilkesinde limit değeri veren ($\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$) dalga fonksiyonlarıyla iki kez karşılaştık: harmonik salınıcının taban durumu (2.11 nolu problem) ve serbest parçacık için Gauss dalga paketi (2.22 nolu problem). Bu durum ilginç bir soruyu ortaya çıkarıyor: minimum belirsizliğe sahip *en genel* bir dalga paketi nedir? Belirsizlik ilkesinin kanıtına tekrar dönersek; argümanda eşitsizliklerin kullanıldığı iki nokta vardı: 3.59 ve 3.60 nolu denklemler. Bunların her birinin eşitlik olması gerektiğini varsayalım ve bunun Ψ hakkında ne söyleyeceğine bakalım.

Schwarz eşitsizliğinde, bir fonksiyon diğerinden bir çarpan kadar farklıysa, yani bir c kompleks sayısı için $g(x) = cf(x)$ ise, bu ifade bir eşitlik haline gelir (E.5 nolu probleme bakınız). Aynı zamanda, 3.60 nolu denklemde z'nin reel kısmını düşürdüm. $Re(z) = 0$ ise, yani $Re\langle f \mid g \rangle = Re(c\langle f \mid f \rangle) = 0$ ise, eşitlik sağlanır. Bu durumda $\langle f \mid f \rangle$ kesinlikle reel olur. Bu da c sabitinin sanal olması demektir. Bunu ia olarak seçelim. O zaman, minimum belirsizlik için gerek ve yeter koşul

$$a \text{ reel} \quad \text{olmak üzere,} \quad g(x) = iaf(x) \qquad [3.66]$$

dir. Konum-momentum belirsizlik ilkesi için bu ölçüt

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - \langle p \rangle\right)\Psi = ia(x - \langle x \rangle)\Psi \qquad [3.67]$$

halini alır. Bu ifade, x'in fonksiyonu olarak Ψ için bir diferansiyel denklemdir. Bu denklemin genel çözümü

$$\Psi(x) = Ae^{-a(x-\langle x \rangle)^2/2\hbar} e^{i\langle p \rangle x/\hbar} \qquad [3.68]$$

şeklindedir (3.16 nolu problem). Görüldüğü gibi, minimum belirsizliğe sahip dalga paketi bir *Gauss* fonksiyonudur. Zaten önceden karşılaştığımız iki örnek de Gauss fonksiyonuydu.[20]

[20] Buradaki sonucun, Ψ'nin yalnızca x bağımlılığı için elde edildiğine dikkat ediniz. A, a, $\langle x \rangle$ ve $\langle p \rangle$ "sabitleri" zamanın fonksiyonları olabilirler. Bu durumda Ψ minimal formundan evrimleşebilir. Buradaki tüm iddiam şudur: belirli bir anda, dalga fonksiyonu x için Gauss fonksiyonu ise o anda belirsizlikler çarpımı minimumdur.

Problem 3.16 3.67 nolu denklemi $\Psi(x)$'e göre çözünüz $\langle x \rangle$ ve $\langle p \rangle$'nin *sabit* olduklarına dikkat ediniz.

3.5.3 Enerji-Zaman Belirsizlik İlkesi

Konum-momentum belirsizlik ilkesi çoğunlukla

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \qquad [3.69]$$

formunda yazılır. Özdeş olarak hazırlanmış sistemler üzerindeki tekrar tekrar alınan ölçüm sonuçlarının standart sapması için kullanılan Δx (x'deki "belirsizlik") saçma ve özensiz bir notasyondur.[21] 3.69 nolu denkleme genellikle **enerji-zaman belirsizlik ilkesi**

$$\Delta t \, \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \qquad [3.70]$$

eşlik etmektedir. Aslında özel relativite bağlamında enerji-zaman formu konum-momentum sürümünün bir *sonucu* olarak düşünülebilir, çünkü p ve E (daha doğrusu E/c) enerji-momentum dörtlü vektörünü oluştururken x ve t (daha doğrusu ct) de konum-zaman dörtlü vektörünü oluşturmaktadır. Böylelikle, relativistik bir teoride 3.70 nolu denklem, 3.69 nolu denklemin doğal bir sonucu olarak ortaya çıkacaktır. Fakat burada relativistik kuantum mekaniği yapmıyoruz. Schrödinger denklemi açıkça relativistik değildir: t ve x'i eşit olmayan bir temelde içerir (t'ye göre *birinci*, x'e göre *ikinci* mertebeden bir diferansiyel denklemdir) ve 3.70 nolu denklem, 3.69 nolu denklemin kesin bir sonucu değildir. Burada amacım enerji-zaman belirsizlik ilkesini *türetmek* ve bu türetme işlemi boyunca sizi, konum-momentum belirsizlik ilkesine olan bu yüzeysel benzerliğin yanıltıcı olduğuna ikna etmek.

Unutulmamalıdır ki, konum, momentum ve enerji dinamik değişkenlerdir ve belirli bir zamanda sistemin ölçülebilen karakteristik büyüklükleridir. Fakat zamanın kendisi dinamik bir değişken değildir. Bir parçacığın konumunu, enerjisini ölçtüğünüz gibi parçacığın "zamanını" ölçemezsiniz. Zaman *bağımsız* bir değişkendir ve dinamik büyüklükler zamanın fonksiyonudur. Özellikle, enerji-zaman belirsizlik ilkesindeki Δt zaman ölçümlerinin bir derlemesinin standart sapması değildir; (biraz sonra daha açık olarak ifade edeceğim gibi) *sistemin durumunun değişmesi için geçen süredir.*

[21] Gerçekte belirsizlik ilkesinin birçok uygulaması, çoğu zaman da dikkatsizce, tamamıyla farklı ve bazen de gerekçesiz bir "belirsizlik" ölçüsüne dayanır. Tersine, bazı son derece özenle hazırlanmış argümanlar da "belirsizliğin" diğer tanımlarını kullanırlar. Jan Hilgevoord, *Am. J. Phys.* **70**, 983 (2002)'ye bakınız.

Sistemin ne kadar hızlı değiştiğinin bir ölçüsü olarak, $Q(x, p, t)$ gözlenebilir büyüklüğünün beklenen değerinin zamana göre türevini hesaplayalım:

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{d}{dt}\langle \Psi | \hat{Q}\Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \middle| \hat{Q}\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \hat{Q}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle.$$

Schrödinger denklemi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

(burada $H = p^2/2m + V$, Hamiltonyendir) kullanılarak

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle \hat{H}\Psi | \hat{Q}\Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi | \hat{Q}\hat{H}\Psi \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle$$

elde edilir. $\hat{H}$ hermitsel olduğundan, $\left\langle \hat{H}\Psi \middle| \hat{Q}\Psi \right\rangle = \left\langle \Psi \middle| \hat{H}\hat{Q}\Psi \right\rangle$ dir. Böylelikle

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle} \qquad [3.71]$$

bulunur. Bu oldukça ilginç ve yararlı bir sonuçtur (3.17 ve 3.31 nolu problemlere bakınız). Operatörün açık olarak zamana bağlı olmadığı tipik bir durumda,[22] bu ifade, beklenen değerin değişim hızının operatörün Hamiltonyenle komütatörüne eşit olduğunu söyler. Özellikle, $\hat{Q}, \hat{H}$ ile *sıra değiştiriyor* ise, Q *korunan* bir büyüklüktür.

Şimdi, genelleştirilmiş belirsizlik ilkesinde (3.62 nolu denklem) $A = H$ ve $B = Q$ seçelim. Q'nun açık olarak t'ye bağlı olmadığını varsayalım. O zaman 3.62 nolu denklem kullanılarak

$$\sigma_H^2 \sigma_Q^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle\right)^2 = \left(\frac{1}{2i}\frac{\hbar}{i}\frac{d\langle Q \rangle}{dt}\right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \left(\frac{d\langle Q \rangle}{dt}\right)^2$$

elde edilir. Bunu daha basit olarak yazmak mümkündür:

$$\sigma_H \sigma_Q \geq \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d\langle Q \rangle}{dt}\right|. \qquad [3.72]$$

$\Delta E \equiv \sigma_H$ ve

$$\Delta t \equiv \frac{\sigma_Q}{|d\langle Q \rangle/dt|} \qquad [3.73]$$

olarak tanımlayalım.

[22] t'ye açık olarak bağlı olan operatörler oldukça nadirdir ve *daima* $\partial \hat{Q}/\partial t = 0$ alınabilir. Açıkça zaman bağımlılığına bir örnek olarak, yay sabiti değişen (belki sıcaklık artmakta, böylece yay daha esnek olmakta) bir harmonik salınıcının potansiyel enerjisini, $Q = (1/2)m[\omega(t)]^2 x^2$ düşünebilirsiniz.

Böylece

$$\Delta E\,\Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \qquad [3.74]$$

enerji-zaman belirsizlik ilkesi bulunur. Burada Δt'nin ne anlama geldiğine dikkat ediniz.

$$\sigma_Q = \left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right| \Delta t$$

olduğundan, Δt, *Q'nun beklenen değerinin bir standart sapma kadar değişim göstermesi için gerekli süreyi temsil etmektedir.*[23] Özellikle, Δt, hangi Q gözlenebiliri ile ilgilendiğinize bağlıdır. Değişim bir gözlenebilir için hızlı olurken, diğeri için yavaş olabilir. (Ancak eğer ΔE küçükse, tüm gözlenebilirlerin değişim oranı çok yavaştır). Ya da, herhangi bir gözlenebilir hızla değişiyorsa enerjideki "belirsizlik" büyük olmalıdır.

Örnek 3.5 Enerjinin tam olarak belirlendiği kararlı (durağan) bir durumun sıra dışı hali, tüm beklenen değerlerin zamanla sabit olmasıdır. ($\Delta E = 0 \Rightarrow \Delta t = \infty$). Aslında bu noktaya bir süre önce değinmiştik (2.9 nolu denkleme bakınız). Bir şeyler yapmak için, en azından iki kararlı durumun lineer bir kombinasyonunu almalısınız. Yani

$$\Psi(x,t) = a\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + b\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

olmalıdır. a, b, ψ_1 ve ψ_2 reel ise

$$|\Psi(x,t)|^2 = a^2(\psi_1(x))^2 + b^2(\psi_2(x))^2 + 2ab\psi_1(x)\psi_2(x)\cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right)$$

dir. Salınım periyodu $\tau = 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$ dir. $\Delta E = E_2 - E_1$ ve $\Delta t = \tau$ (kesin hesap için 3.18 nolu probleme bakınız) alınarak

$$\Delta E\,\Delta t = 2\pi\hbar,$$

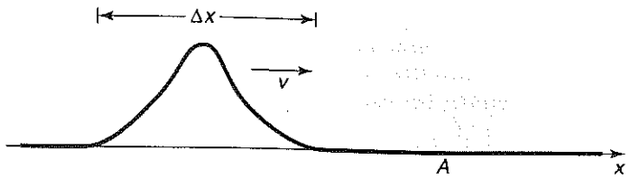
elde edilir. Sonuç gerçekten de $\hbar/2$'den büyüktür.

Örnek 3.6 Serbest parçacık dalga paketinin belirli bir noktadan geçmesi (3.1 nolu şekil) ne kadar sürer? Nitel olarak (3.19 nolu problemde kesin çözümü incelenecektir) $\Delta t = \Delta x / v = m\,\Delta x / p$ dir. $E = p^2/2m$ olduğundan $\Delta E = p\Delta p / m$ dir. Böylece

$$\Delta E\,\Delta t = \frac{p\Delta p}{m}\frac{m\Delta x}{p} = \Delta x\Delta p$$

olur. Konum-momentum belirsizlik ilkesinin sonucu olarak $\Delta E\Delta t \geq \hbar/2$ dir.

[23] Bu bazen, enerji-zaman belirsizlik ilkesinin "Mandelstam-Tamm" formülasyonu olarak adlandırılır. Farklı yaklaşımların toplu bir incelemesi için; Paul Busch, *Found. Phys.* **20**, 1 (1990)'a bakınız.

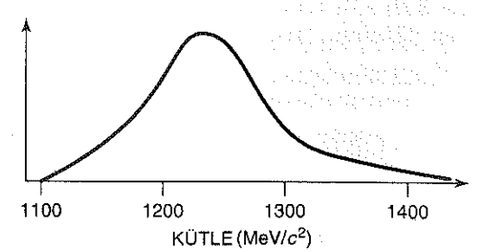


ŞEKİL 3.1: Serbest parçacık dalga paketi A noktasına yaklaşmakta (3.6 nolu örnek).

Örnek 3.7 Δ parçacığı kendiliğinden bozunmadan önce yaklaşık 10^{-23} saniye kadar yaşar. Eğer bu parçacığın tüm kütle ölçümlerinden bir histogram yaparsanız, genişliği yaklaşık 120 MeV/c^2 ve maksimumu 1232 MeV/c^2 değerinde olan bir çan eğrisi elde ederseniz (3.2 nolu şekil). Durgun kütle enerjisi (mc^2) niçin bazen 1232'den büyük bazen de daha küçük olur? Bu deneysel bir hata mıdır? Hayır.

$$\Delta E\,\Delta t = \left(\frac{120}{2}\ \text{MeV}\right)(10^{-23}\ \text{sec}) = 6 \times 10^{-22}\ \text{MeV sec}$$

dir. Oysa $\hbar/2 = 3 \times 10^{-22}$ MeV s dir. Böylece m'deki yayılma belirsizlik ilkesinin izin verdiği sınırlar içindedir. Böyle kısa ömürlü bir parçacık çok iyi tanımlanmış bir kütleye sahip değildir.[24]



ŞEKİL 3.2: Δ parçacığın kütle ölçümlerinin histogramı (3.7 nolu örnek)

[24] Gerçekte, 3.7 nolu örnekte biraz hilekârlık var. 10^{-23}s'yi bir kronometre ile ölçemezsiniz. Pratikte, böyle çok kısa süre yaşayan bir parçacığın ömrü, belirsizlik ilkesinin *girdi* olarak kullanıldığı kütle grafiğinin genişliğinden *belirlenir*. Bununla birlikte, örnekte kullandığımız mantık tersine olsa da sonuçlar geçerlidir. Ayrıca, Δ parçacığının protonla aynı büyüklükte (~10^{-15} m) olduğunu varsayarsınız, 10^{-23}s aşağı yukarı ışığın parçacığı geçmesi için gereken süredir ve parçacığın ömrünün bu süreden *az* olabileceğini düşünmek zordur.

Buraya kadar gördüğümüz örneklerde Δt terimine atfedilen özel anlamların çeşitliliğine dikkat ediniz; 3.5 nolu örnekte salınım periyodu; 3.6 nolu örnekte bir parçacığın belirli bir noktadan geçmesi için gerekli süre; 3.7 nolu örnekte kararsız bir parçacığın yaşam süresi. Bununla birlikte, her durumda Δt sistemin "önemli" bir değişim geçirmesi için gerekli süredir.

Kuantum mekaniğinde, çoğunlukla belirsizlik ilkesinin enerjinin tam olarak korunmadığını ifade ettiği söylenir. Yani, $\Delta t \approx \hbar/(2\Delta E)$ kadarlık süre içinde geri ödemek koşuluyla ΔE kadarlık enerjiyi "ödünç" alabilirsiniz. Bu ne kadar kısa sürede oluşursa o kadar fazla enerji ödünç alınabilir. Enerji-zaman belirsizlik ilkesinin birçok akla uygun yorumu mevcuttur ve burada verilen de söz konusu yorumlardan biri değildir. Kuantum mekaniğinin enerji korunumunu çiğnemeye yetkisi olmadığı gibi bu tür yetki de 3.74 nolu denklemin türetilmesinde işin içine girmemiştir. Fakat belirsizlik ilkesi olağanüstü kuvvetli bir ilkedir. Çok ciddi yanlışlara yol açmaksızın bazen kötüye kullanılabilir ve bu nedenle fizikçiler bu ilkeyi biraz dikkatsizce kullanmaya meraklıdırlar.

***Problem 3.17** 3.71 nolu denklemi aşağıdaki özel durumlara uygulayınız. (a) $Q = 1$; (b) $Q = H$; (c) $Q = x$; (d) $Q = p$. Her bir durumda sonuçlarınızı, 1.27, 1.33, 1.38 nolu denklemlere dönerek ve enerjinin korunumu ilkesini (2.39 nolu denklem) hatırlayarak yorumlayınız.

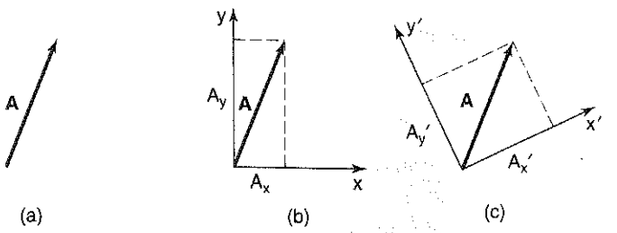
Problem 3.18 Enerji-zaman belirsizlik ilkesini 2.5 nolu problemdeki dalga fonksiyonu ve x gözlenebiliri için σ_H, σ_x ve $d\langle x\rangle/dt$'yi tam olarak hesaplayarak test ediniz.

Problem 3.19 Enerji-zaman belirsizlik ilkesini, 2.43 nolu problemdeki serbest parçacık dalga fonksiyonu ve x gözlenebiliri için σ_H, σ_x ve $d\langle x\rangle/dt$'yi kesin olarak hesaplayarak test ediniz.

Problem 3.20 3.14 nolu problemdeki gözlenebiliri x olarak seçerseniz, enerji-zaman belirsizlik ilkesinin "isminiz" belirsizlik ilkesine (Problem 3.14) indirgeneceğini gösteriniz.

3.6 DIRAC NOTASYONU

İki boyutta bir **A** vektörünü göz önüne alalım (3.3(a) nolu şekil). Bu vektörü karşımızdaki bir kişiye nasıl tarif ederiz? En uygun yöntem x ve y kartezyen koordinat eksenlerini çizerek, **A**'nın bileşenlerini belirlemektir: $A_x = \hat{\imath}\cdot\mathbf{A}$, $A_y = \hat{\jmath}\cdot\mathbf{A}$ (3.3(b) nolu şekil). Kuşkusuz başka bir kişi, örneğin kardeşiniz, farklı x′ ve y′ eksenleri çizerek farklı bileşenler belirleyebilir: $A'_x = \hat{\imath}'\cdot\mathbf{A}$, $A'_y = \hat{\jmath}'\cdot\mathbf{A}$ (3.3(c) nolu şekil). Ancak bileşenler farklı olmakla beraber, temsil ettikleri vektör *aynıdır*. **A** vektörü $\{\hat{\imath},\hat{\jmath}\}$ ve $\{\hat{\imath}',\hat{\jmath}'\}$ gibi farklı iki *bazda* ifade edilmiştir. Yani, vektörün varlığı koordinat sistemin seçiminden bağımsızdır.



ŞEKİL 3.3: (a) A vektörü. (b) xy eksenlerine göre A'nın bileşenleri (c) xy' eksenlerine göre A'nın bileşenleri.

Bu sonuç kuantum mekaniğinde bir sistemin durumu için de doğrudur. Bir sistemin durumu, "Hilbert uzayında yaşayan" ve kendisini birçok *farklı baza* göre ifade edebileceğimiz $|\mathcal{S}(t)\rangle$ *vektörüyle* temsil edilir. Aslında $\Psi(x, t)$ dalga fonksiyonu $|\mathcal{S}\rangle$'nin konum özfonksiyonları bazında açılım katsıyıdır:

$$\Psi(x,t) = \langle x|\mathcal{S}(t)\rangle, \qquad [3.75]$$

(burada $|x\rangle$, $\hat{x}$ 'in x özdeğerine karşılık olan özfonksiyonudur)[25], momentum uzayı dalga fonksiyonu $\Phi(p, t)$ ise $|\mathcal{S}\rangle$'nin momentum özfonksiyonları bazındaki açılım katsayısıdır.

$$\Phi(p,t) = \langle p|\mathcal{S}(t)\rangle \qquad [3.76]$$

(burada $|p\rangle$, $\hat{p}$ 'nin p özdeğerine karşılık olan özfonksiyonudur)[26]. $|\mathcal{S}\rangle$'yi enerji özfonksiyonları bazında da açabiliriz. Basit olsun diye özdeğer spektrumunun kesikli olduğunu varsayarsak,

$$c_n(t) = \langle n|\mathcal{S}(t)\rangle \qquad [3.77]$$

yazılabilir. Burada $|n\rangle$, $\hat{H}$ 'nın n-inci özfonksiyonudur (3.46 nolu denklem). Fakat tüm bunlar aynı durumu temsil etmektedir; Ψ ve Φ fonksiyonlarıyla, $\{c_n\}$ katsayılarının kümesi tam olarak aynı bilgiyi taşımaktadırlar ve aynı vektörün üç farklı yolla temsil edilişidir:

$$\Psi(x,t) = \int \Psi(y,t)\delta(x-y)\,dy = \int \Phi(p,t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}\,dp$$
$$= \sum c_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x). \qquad [3.78]$$

---

[25] Burada özfonksiyonları g_x ile göstermekten (3.39 nolu denklem) kaçındım. Çünkü bu konum bazında kullanılan formdur. Oysa burada herhangi bir özel baz kullanmak istemiyoruz. Aslında, Hilbert uzayını, x üzerinden mutlak değer karesi integre edilebilir fonksiyonlar kümesi olarak (bu tanım bile oldukça kısıtlayıcıdır) tanımladığımda, konum bazı olarak adlandırdığımız özel bir temsile yönlendirilmiş oluruz. Bu aşamada Hilbert uzayını, elemanları istenilen herhangi bir bazda ifade edilen soyut vektör uzayı olarak düşünmek istiyorum.

[26] Konum uzayında $f_p(x)$ olur (3.32 nolu denklem).

Gözlenebilir büyüklükleri temsil eden operatörler lineer dönüşümlerdir ve bir vektörü başka bir vektöre dönüştürürler:

$$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle. \qquad [3.79]$$

Vektörler belirli bir $\{|e_n\rangle\}$[27] bazına göre bileşenleriyle temsil edilir:

$$|\alpha\rangle = \sum_n a_n|e_n\rangle; \qquad a_n = \langle e_n|\alpha\rangle; \quad |\beta\rangle = \sum_n b_n|e_n\rangle; \qquad b_n = \langle e_n|\beta\rangle \qquad [3.80]$$

Operatörler belirli bir baza göre matris elemanlarıyla[28] temsil edilir. $\hat{Q}$ operatörünün $\{|e_n\rangle\}$ bazındaki **matris elemanları**

$$\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle \equiv Q_{mn} \qquad [3.81]$$

şeklinde tanımlanır. Bu notasyonla 3.79 nolu denklem

$$\sum_n b_n|e_n\rangle = \sum_n a_n\hat{Q}|e_n\rangle \qquad [3.82]$$

şeklinde yazılır. Her iki tarafın $|e_m\rangle$ ile iç çarpımı alınırsa

$$\sum_n b_n\langle e_m|e_n\rangle = \sum_n a_n\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle \qquad [3.83]$$

olur. Böylece

$$b_m = \sum_n Q_{mn}a_n \qquad [3.84]$$

elde edilir. Yani, matris elemanları bileşenlerin nasıl dönüştüğünü vermektedir.

Daha sonra, yalnızca sonlu sayıda (N) lineer bağımsız durumları olan sistemlerle karşılaşacağız. Bu takdirde $|\mathcal{S}(t)\rangle$, N boyutlu bir vektör uzayında yaşar ve verilen bir baza göre N bileşenli bir sütun matrisle temsil edilebilir. Operatörler de $N \times N$ boyutlu matrislerle temsil edilir. Bunlar en basit kuantum sistemleridir ve sonsuz boyutlu vektör uzaylarındaki inceliklerin hiçbiri burada yoktur. Bu sistemlerin de en kolayı aşağıdaki örnekte inceleyeceğimiz iki durumlu sistemlerdir.

Örnek 3.8 *İki tane* lineer bağımsız durumu

$$|1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad \text{ve} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

olarak verilen[29] bir sistem düşünelim.

[27] Bazın kesikli olduğunu kabul ediyorum. Aksi takdirde n sürekli bir indis olur ve toplamlar integrallerle yer değiştirir.

[28] Buradaki terminoloji sonlu boyutlu durumlardan esinlenmektedir. Ancak "matris" sonsuz sayıda elemana sahip olacaktır.

[29] Teknik olarak, buradaki "eşit" işareti "ile temsil edilmektedir" anlamına gelir, ancak bu şekilde alışılmış bir notasyon kullanılması sanırım fazla karışıklığa sebep olmayacaktır.

En genel durum vektörü bunların normlanmış bir lineer kombinasyonudur. Böylece durum vektörü

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad \text{olmak üzere} \quad |\mathcal{S}\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

olarak yazılır. Hamiltonyen hermitsel bir matrisle temsil edilir. Örneğin, özel olarak Hamiltonyenin

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix}h & g\\ g & h\end{pmatrix}$$

formunda olduğunu varsayalım. Burada g ve h reel sabitlerdir. Sistem başlangıçta ($t = 0$ anında) $|1\rangle$ durumundaysa, t anında durum vektörü nedir?

Çözüm: Zamana bağımlı Schrödinger denklemi

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\mathcal{S}\rangle = H|\mathcal{S}\rangle \qquad [3.85]$$

şeklindedir. Her zaman olduğu gibi, işe zamandan bağımsız Schrödinger denklemini

$$H|\mathcal{s}\rangle = E|\mathcal{s}\rangle \qquad [3.86]$$

çözerek başlayacağız. Yani H'nın özdeğer ve özvektörlerini bulacağız. Özdeğerler karakteristik denklemin çözümünden bulunur.

$$\det\begin{pmatrix}h-E & g\\ g & h-E\end{pmatrix} = (h-E)^2 - g^2 = 0 \Rightarrow h - E = \mp g \Rightarrow E_\pm = h \pm g.$$

İzin verilen enerji değerleri (h+g) ile (h–g) dir. Özvektörleri belirlemek için

$$\begin{pmatrix}h & g\\ g & h\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = (h \pm g)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} \Rightarrow h\alpha + g\beta = (h \pm g)\alpha \Rightarrow \beta = \pm\alpha$$

olduğunu kullanırsak, normlanmış özvektörler

$$|\mathcal{s}_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm 1\end{pmatrix}$$

olarak bulunur. Şimdi başlangıç durumunu Hamiltonyenin özvektörlerinin lineer bir kombinasyonu olarak açalım:

$$|\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\mathcal{s}_+\rangle + |\mathcal{s}_-\rangle\right).$$

Son olarak, standart zaman bağımlılığı terimi $\exp(-iE_nt/\hbar)$'yi ilave edelim:

$$|\mathcal{S}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[e^{-i(h+g)t/\hbar}|\mathcal{s}_+\rangle + e^{-i(h-g)t/\hbar}|\mathcal{s}_-\rangle]$$

$$= \frac{1}{2}e^{-iht/\hbar}\left[e^{-igt/\hbar}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + e^{igt/\hbar}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right]$$
$$= \frac{1}{2}e^{-iht/\hbar}\begin{pmatrix}e^{-igt/\hbar}+e^{igt/\hbar}\\e^{-igt/\hbar}-e^{igt/\hbar}\end{pmatrix} = e^{-iht/\hbar}\begin{pmatrix}\cos(gt/\hbar)\\-i\sin(gt/\hbar)\end{pmatrix}.$$

Eğer sonuçtan emin değilseniz, şu *kontrolleri* yapın: sonuç zamana bağımlı Schrödinger denklemini sağlıyor mu? $t = 0$ olduğunda sonuç başlangıç durum vektörüne indirgeniyor mu?

Bu örnek **nötrino salınımları** için kaba bir modeldir. Bu durumda, $|1\rangle$, elektron nötrinosunu, $|2\rangle$, müyon nötrinosunu temsil eder. Hamiltonyen sıfırdan farklı, köşegen olmayan bir terime (g) sahipse zamanla elektron nötrinosu müyon nötrinosuna dönüşür (ve tekrar eski haline döner).

Dirac, $\langle\alpha\,|\,\beta\rangle$ iç çarpımındaki parantez (İngilizcesi: bracket) notasyonunu iki parçaya ayırmayı teklif etmiştir. $\langle\alpha\,|$'ya **bra** $|\,\beta\rangle$'ya **ket** denilir (*c* harfine ne olduğunu bilmiyorum). $|\,\beta\rangle$ bir vektördür ancak $\langle\alpha\,|$'nin anlamı tam olarak nedir? Aslında bra, vektörlerin *lineer bir fonksiyonu* olup, sağ tarafındaki bir vektöre etki ettiğinde kompleks bir sayı verir – iç çarpım (Bir *operatör* etki ettiği vektörü başka bir vektöre dönüştürürken, *bra* bir vektöre etki ettiği zaman bir sayı üretir). Bir fonksiyon uzayında, brayı sağ tarafına gelecek nesneyi integre etmek üzere bekleyen bir komut olarak düşünebilirsiniz:

$$\langle f| = \int f^*[\cdots]\,dx$$

Burada üç nokta [...] branın sağ tarafına gelen ket vektörü içindeki fonksiyon tarafından doldurulacaktır. Vektörlerin sütun matrislerle ifade edildiği sonlu boyutlu bir vektör uzayında,

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{pmatrix} \qquad [3.87]$$

ketine karşılık olan bra bir satır matristir:

$$\langle\alpha| = \begin{pmatrix}a_1^* & a_2^* & \cdots & a_n^*\end{pmatrix} \qquad [3.88]$$

Tüm braların oluşturduğu topluluk **dual uzay** olarak adlandırılan başka bir vektör uzayı oluşturur.

Braları (ya da bra vektörlerini) kendi hakları olan ayrı varlıklar olarak ele alma serbestisi bize oldukça güçlü ve güzel bir notasyon sunmaktadır. Örneğin, $|\alpha\rangle$ normlanmış bir vektörse,

$$\hat{P} \equiv |\alpha\rangle\langle\alpha| \qquad [3.89]$$

olarak tanımlanan operatör, üzerine etki ettiği diğer vektörün $|\alpha\rangle$ vektörü "boyunca uzanan" parçasını seçip ayırır yani $|\alpha\rangle$ vektörü doğrultusundaki izdüşümünü verir:

$$\hat{P}|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle|\alpha\rangle;$$

$\hat{P}$ 'ye $|\alpha\rangle$ tarafından örtülen bir boyutlu alt uzay üzerine **izdüşüm operatörü** denilir. $\{|e_n\rangle\}$ kesikli bir ortonormal baz oluşturuyor ise

$$\langle e_m|e_n\rangle = \delta_{mn} \qquad [3.90]$$

ve

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n| = 1 \qquad [3.91]$$

olur (birim operatör). Bu operatörü herhangi bir $|\alpha\rangle$ vektörü üzerine etki ettirirsek $|\alpha\rangle$'nın $\{|e_n\rangle\}$ bazındaki açılımını elde ederiz:

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n|\alpha\rangle = |\alpha\rangle. \qquad [3.92]$$

Benzer şekilde, $\{|e_z\rangle\}$ *Dirac* ortonormalliğine sahip sürekli bir baz ise

$$\langle e_z|e_{z'}\rangle = \delta(z - z') \qquad [3.93]$$

dir. Bu takdirde,

$$\int |e_z\rangle\langle e_z|\,dz = 1 \qquad [3.94]$$

olur. 3.91 ve 3.94 nolu denklemler tamlık özelliğinin en derli toplu ifadeleridir.

Problem 3.21 İzdüşüm operatörlerinin **idempotent** olduğunu yani $\hat{P}^2 = \hat{P}$ özelliğini sağladığını gösteriniz. $\hat{P}$ 'nin özdeğer ve özvektörlerini belirleyiniz.

Problem 3.22 $|1\rangle$, $|2\rangle$ ve $|3\rangle$ ortonormal baz vektörleri tarafından örtülen üç boyutlu bir vektör uzayı düşünelim. $|\alpha\rangle$ ve $|\beta\rangle$ ketleri

$$|\alpha\rangle = i|1\rangle - 2|2\rangle - i|3\rangle, \quad |\beta\rangle = i|1\rangle + 2|3\rangle$$

şeklinde verilmiştir.

(a) $\langle 1|$, $\langle 2\,|$ ve $\langle 3\,|$ dual bazı cinsinden $\langle\alpha\,|$ ve $\langle\,\beta\,|$'yı kurun.

(b) $\langle\alpha\,|\,\beta\rangle$ ve $\langle\beta\,|\,\alpha\rangle$'yı bulunuz. $\langle\,\beta\,|\,\alpha\rangle = \langle\alpha\,|\,\beta\rangle^*$ olduğunu doğrulayın.

(c) $\hat{A} \equiv |\alpha\rangle\,\langle\beta\,|$ operatörünün bu bazdaki dokuz matris elemanını bularak **A** matrisini kurun. **A** matrisi hermitsel midir?

Problem 3.23 İki düzeyli bir sistemin Hamiltonyeni

$$\hat{H} = \epsilon\,(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)\ \epsilon$$

olarak verilmiştir. Burada $|1\rangle$ ve $|2\rangle$ ortonormal baz vektörleri, ϵ enerji boyutunda bir sabittir. $\hat{H}$ 'nın özdeğerlerini ve özvektörlerini bulun. Özvektörleri $|1\rangle$ ve $|2\rangle$'nin lineer bir kombinasyonu olarak ifade edin. Bu baza göre $\hat{H}$ 'yı temsil eden **H** matrisi nedir?

Problem 3.24 Bir $\hat{Q}$ operatörünün ortonormal özvektörlerinin tam bir küme oluşturduğunu düşünelim:

$$\hat{Q}|e_n\rangle = q_n|e_n\rangle \quad (n = 1, 2, 3, \ldots).$$

$\hat{Q}$ 'nun **spektral ayrışımı** cinsinden yazılabileceğini gösteriniz.

$$\hat{Q} = \sum_n q_n |e_n\rangle\langle e_n|.$$

Yardım: Bir operatör tüm mümkün vektörler üzerindeki etkisiyle karakterize edilir. Böylece, herhangi bir $|\alpha\rangle$ vektörü için

$$\hat{Q}|\alpha\rangle = \left\{\sum_n q_n |e_n\rangle\langle e_n|\right\}|\alpha\rangle$$

olduğunu göstermelisiniz.

3. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

Problem 3.25 Legendre polinomları: Gram-Schmidt yöntemini (E.4 nolu problem) kullanarak, $1, x, x^2$ ve x^3 fonksiyonlarını, $-1 \le x \le 1$ aralığında ortonormal hale getiriniz. Sonuçları hemen tanıyacaksınız, (normlama dışında)[30] **Legendre polinomlarının** (4.1 nolu tablo) ta kendisi.

Problem 3.26

$$\hat{Q}^\dagger = -\hat{Q}. \qquad [3.95]$$

bağıntısını sağlayan $\hat{Q}$ operatörüne **anti-hermitsel (ters-hermitsel)** operatör denir.

(a) Anti-hermitsel bir operatörün beklenen değerinin sanal olduğunu gösterin..

(b) Hermitsel iki operatörün komütatörünün anti-hermitsel olduğunu gösterin. Anti-hermitsel iki operatörün komütatörü için ne söyleyebilirsiniz?

[30] Legendre en iyi uzlaşımın ne olacağını bilmiyordu ve normlama çarpanını fonksiyonlar $x = 1$'de 1 olacak şekilde seçti. Biz de maalesef bu talihsiz seçime saplanıp kaldık.

Problem 3.27 Ardışık ölçümler: A gözlenebilir büyüklüğünü temsil eden $\hat{A}$ operatörü, ψ_1 ve ψ_2 olarak verilen iki tane normlanmış özduruma sahiptir. Karşılık olan özdeğerler de sırasıyla a_1 ve a_2 dir. B gözlenebilirini temsil eden $\hat{B}$ operatörünün sırasıyla b_1 ve b_2 özdeğerlerine karşılık olan normlanmış özdurumları ϕ_1 ve ϕ_2 dir. Özdurumlar arasındaki bağıntı

$$\psi_1 = (3\phi_1 + 4\phi_2)/5, \quad \psi_2 = (4\phi_1 - 3\phi_2)/5.$$

olarak verilmiştir.

(a) A gözlenebiliri ölçülmüş ve a_1 değeri bulunmuş olsun. Bu ölçümden hemen sonra sistemin durum vektörü nedir?

(b) Şimdi de B gözlenebiliri ölçülürse hangi değerler hangi olasılıklarla elde edilir?

(c) B'nin ölçümünden hemen sonra, A tekrar ölçülüyor. a_1 değerini elde etme olasılığı nedir? (Eğer B ölçümünün sonucu verilseydi yanıtın oldukça farklı olacağına dikkat ediniz).

****Problem 3.28** Sonsuz kare kuyunun n-inci kararlı durumu için momentum uzayı dalga fonksiyonu $\Phi_n(p, t)$'yi bulun. $|\Phi_1(p, t)|^2$ ve $|\Phi_2(p, t)|^2$ grafiklerini p'nin fonksiyonu olarak çizin (özellikle $p = \pm n\pi\hbar/a$ noktalarına dikkat edin). $\Phi_n(p, t)$'yi kullanarak p^2'nin beklenen değerini hesaplayın. Yanıtınızı 2.4 nolu problem ile karşılaştırın.

Problem 3.29

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2n\lambda}} e^{i2\pi x/\lambda}, & -n\lambda < x < n\lambda, \\ 0, & \text{diğer yerlerde,} \end{cases}$$

şeklinde verilen dalga fonksiyonunu göz önüne alalım. Burada n pozitif bir tamsayıdır. Bu fonksiyon, dalga boyu λ ile verilen, $-n\lambda < x < n\lambda$ aralığında sinüzoidal bir fonksiyondur. Ancak salınımlar sonsuza kadar devam etmediğinden söz konusu fonksiyon yine de bir momentum aralığına sahiptir. Momentum uzayı dalga fonksiyonu $\Phi(p, 0)$'ı bulunuz. $|\Psi(x, 0)|^2$ ve $|\Phi(p, 0)|^2$ grafiklerini çizerek ω_x ve ω_p genişliklerini (ana tepenin her iki yanındaki sıfırlar arasındaki uzaklık) belirleyiniz. $n \to \infty$ için genişliklerin değerleri nedir? ω_x ve ω_p'yi kullanarak Δx ve Δp için bir tahmin yapınız ve belirsizlik ilkesinin sağlanıp sağlanmadığını kontrol ediniz. *Uyarı:* σ_P'yi hesaplamaya çalışırsanız kötü bir sürprizle karşılaşacaksınız. Soruna tanı koyabilir misiniz?

Problem 3.30

$$\Psi(x, 0) = \frac{A}{x^2 + a^2}, \quad (-\infty < x < \infty)$$

olarak verilen bir dalga fonksiyonunu düşünelim. Burada A ve a sabitlerdir.

(a) $\Psi(x, 0)$'ı normlayarak A'yı belirleyiniz.

(b) $t = 0$ anında, $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ ve σ_x'i bulunuz.

(c) Momentum uzayı dalga fonksiyonu $\Phi(p, 0)$'ı bulunuz ve bu fonksiyonun normlanmış olduğunu kontrol ediniz.

(d) $t = 0$ anında, $\Phi(p, 0)$'ı kullanarak $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ ve σ_p'yi hesaplayınız.

(e) Bu durum için Heisenberg belirsizlik ilkesini kontrol ediniz.

***Problem 3.31 Virial teoremi**: 3.71 nolu denklemi kullanarak

$$\frac{d}{dt}\langle xp \rangle = 2\langle T \rangle - \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle \qquad [3.96]$$

olduğunu gösteriniz. Burada T kinetik enerjidir ($H = T + V$). *Kararlı (durağan)* bir durumda sol taraf sıfırdır (niçin?). Böylece

$$2\langle T \rangle = \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle \qquad [3.97]$$

bulunur. Bu ifadeye **virial teoremi** denir. Bu teoremi kullanarak harmonik salınıcının kararlı durumları için $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ olduğunu kanıtlayınız. Bunun 2.11 ve 2.12 nolu problemlerde bulduğunuz sonuçlarla uyumlu olduğunu kontrol ediniz.

Problem 3.32 Enerji-zaman belirsizlik ilkesinin ilginç bir sürümünde,[31] $\Delta t = \tau/\pi$ olarak verilir. Burada τ, $\Psi(x, t)$'nin $\Psi(x, 0)$'a ortogonal bir duruma evrimleşmesi için geçen zamandır. Bu sürümü, keyfi bir potansiyelin iki tane ortonormal kararlı durumunun eşit karışımından oluşan bir dalga fonksiyonu $\Psi(x, 0) = 1/\sqrt{2}\,[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$ kullanarak sınayınız.

****Problem 3.33** Harmonik salınıcının kararlı durumlarının oluşturduğu (ortonormal) bazda (2.67 nolu denklem) $\langle n|x|n' \rangle$ ve $\langle n|p|n' \rangle$ matris elemanlarını bulunuz. 2.12 nolu problemde "köşegen" elemanları ($n = n'$) zaten hesaplamıştınız. Aynı tekniği daha genel bir hal için kullanın. Sonsuz boyutlu $\mathbf{X}$ ve $\mathbf{P}$ matrislerini kurun. $(1/2m)\mathbf{P}^2 + (m\omega^2/2)\mathbf{X}^2 = \mathbf{H}$'nın bu bazda *köşegen* olduğunu gösterin. Köşegen elemanların ne olmalarını bekliyorsunuz? *Kısmi yanıt*:

$$\langle n|x|n' \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n'}\delta_{n,n'-1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1} \right). \qquad [3.98]$$

---

[31] Kanıt için, Lev Vaidman, *Am. J. Phys.* **60**, 182 (1992)'ye bakınız.

Problem 3.34 Bir harmonik salınıcının enerjisi ölçüldüğünde, $(1/2)\hbar\omega$ ve $(3/2)\hbar\omega$ değerleri eşit olasılıklarla elde edilmektedir. Salınıcı böyle bir durumda bulunurken $\langle p \rangle$'nin mümkün en büyük değeri nedir? Bu maksimum değer $t = 0$ anında ise, $\Psi(x, t)$ nedir?

****Problem 3.35 Harmonik salınıcının uyumlu (eşevreli) durumları.** Harmonik salınıcının kararlı durumları ($|n\rangle = \psi_n(x)$, 2.67 nolu denklem) arasında yalnızca $n = 0$ durumu belirsizlik limitine ($\sigma_x\sigma_p = \hbar/2$) isabet etmektedir. 2.12 nolu problemde bulduğunuz gibi, genel olarak $\sigma_x\sigma_p = (2n+1)\hbar/2$ dir. Ancak **uyumlu (eşevreli) durumlar** olarak bilinen bazı *lineer kombinasyonlar* belirsizlikler çarpımını minimum yapmaktadır. Bu kombinasyonlar *indirme operatörünün özfonksiyonlarıdır*:[32]

$$a_-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

(α özdeğeri herhangi bir kompleks sayı olabilir).

(a) $|\alpha\rangle$ durumunda, $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$'yi hesaplayın. *Yardım:* 2.5 nolu örnekteki yöntemi kullanın. a_+'nın a_-'nin hermitsel eşleniği olduğunu unutmayın. α'yi reel sayı olarak kabul *etmeyin.*

(b) σ_x ve σ_p'yi bulun. $\sigma_x\sigma_p = \hbar/2$ olduğunu gösterin.

(c) Tıpkı herhangi bir dalga fonksiyonu gibi, uyumlu bir durum da enerji özdurumları cinsinden seriye açılabilir:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle.$$

Açılım katsayılarının

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0.$$

olduğunu gösterin.

(d) $|\alpha\rangle$'yı normlayarak c_0'ı belirleyin. *Yanıt:* $\exp(-|\alpha|^2/2)$.

(e)

$$|n\rangle \to e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle$$

zaman bağımlılığını koyarak, $|\alpha(t)\rangle$'nin a_-'nin özdurumu olarak kaldığını gösterin. Ancak *özdeğer* zamanla evrimleşir:

$$\alpha(t) = e^{-i\omega t}\alpha.$$

Böylelikle uyumlu bir durum daima uyumlu *kalır* ve belirsizlikler çarpımını minimum yapmaya devam eder.

---

[32] *Kaldırma* operatörünün normlanabilir özfonksiyonları yoktur.

(f) Taban durumunun kendisi ($|n = 0\rangle$) uyumlu bir durum mudur? Eğer uyumlu durumsa, özdeğer nedir?

Problem 3.36 Genişletilmiş belirsizlik ilkesi:[33] 3.62 nolu denklemde verildiği gibi genelleştirilmiş belirsizlik ilkesi

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}\langle C\rangle^2$$

şeklindedir. Burada $\hat{C} \equiv -i[\hat{A}, \hat{B}]$ dir.

(a) Bu ilkenin

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}(\langle C\rangle^2 + \langle D\rangle^2) \qquad [3.99]$$

şeklinde takviye edilebileceğini gösteriniz. Burada $\hat{D} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} - 2\langle A\rangle\langle B\rangle$ dir. *Yardım:* 3.60 nolu denklemdeki $Re(z)$ terimini elde tutunuz.

(b) $B = A$ hali için 3.99 nolu denklemi kontrol ediniz (bu takdirde $\hat{C} = 0$ olduğundan standart belirsizlik ilkesi aşikâr olur ve maalesef genişletilmiş belirsizlik ilkesi de pek yardımcı olmaz).

Problem 3.37 Üç düzeyli bir sistemin Hamiltonyeni

$$\mathsf{H} = \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix}$$

matrisiyle temsil edilmektedir. Burada a, b ve c reel sayıdır ($a - c \neq \pm b$).

(a) Sistem başlangıçta

$$|\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

durumundaysa, $|\mathcal{S}(t)\rangle$ nedir?

(b) Sistemin başlangıç durumu

$$|\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

olursa, $|\mathcal{S}(t)\rangle$ nedir?

---

[33] İlginç yorumlar ve kaynaklar için, R. R. Puri, *Phys. Rev A* **49**, 2178 (1994)'e bakınız.

Problem 3.38 Üç düzeyli bir sistemde Hamiltonyen

$$\mathsf{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

matrisiyle temsil edilmektedir. A ve B gözlenebilirleri ise

$$\mathsf{A} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \mathsf{B} = \mu \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

matrisleriyle temsil ediliyorlar. Burada ω, λ ve μ pozitif, reel sayılardır.

(a) **H**, **A** ve **B**'nin özdeğerlerini ve normlanmış özvektörlerini bulunuz.

(b) Sistemin başlangıçta

$$|\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

ile verilen genel bir durumda olduğunu varsayalım. Burada $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$ dir. H, A ve B'nin $t = 0$ anındaki beklenen değerlerini bulunuz.

(c) $|\mathcal{S}(t)\rangle$'yi yazınız. t anında enerji ölçülürse, hangi değerler hangi olasılıklarla elde edilir? Aynı soruyu A ve B için de yanıtlayınız.

****Problem 3.39**

(a) Taylor serisine açılabilen bir $f(x)$ fonksiyonu için

$$f(x + x_0) = e^{i\hat{p}x_0/\hbar} f(x)$$

olduğunu gösteriniz. Burada x_0 herhangi bir sabit yerdeğiştirmedir. Bu bağıntı nedeniyle, $\hat{p}/\hbar$'ye **uzayda ötelemelerin üreteci** (jeneratörü) denir. *Not:* Bir *operatörün* üstel ifadesi, kuvvet serisi açılımıyla tanımlanır:

$$e^{\hat{Q}} \equiv 1 + \hat{Q} + (1/2)\hat{Q}^2 + (1/3!)\hat{Q}^3 + \ldots.$$

(b) $\Psi(x, t)$ zamana bağımlı Schrödinger denklemini sağlıyorsa,

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

olduğunu gösteriniz. Burada t_0 herhangi bir sabit zaman değeridir. $-\hat{H}/\hbar$'ye **zamanda ötelemelerin üreteci** (jeneratörü) denir.

(c) $Q(x, p, t)$ dinamik değişkeninin $t + t_0$ anındaki beklenen değerinin

$$\langle Q\rangle_{t+t_0} = \langle \Psi(x,t)|e^{i\hat{H}t_0/\hbar}\,\hat{Q}(\hat{x},\hat{p},t+t_0)e^{-i\hat{H}t_0/\hbar}|\Psi(x,t)\rangle$$

olarak yazılabileceğini gösteriniz.[34] Bunu kullanarak, 3.71 nolu denklemi yeniden elde ediniz. *Yardım*: $t_0 = dt$ alın ve dt'de ilk mertebeye kadar seriye açın.

****Problem 3.40**

(a) Serbest parçacık için zamana bağımlı "Schrödinger denklemini" momentum uzayında yazınız ve çözünüz. *Yanıt:* $\exp(-ip^2t/2m\hbar)\,\Phi(p, 0)$.

(b) İlerleyen Gauss dalga paketi için (2.43 nolu problem) $\Phi(p, 0)$'ı bulunuz. Bu dalga paketi için $\Phi(p, t)$'yi kurunuz. $|\Phi(p, t)|^2$'ini yazınız ve bunun zamandan bağımsız olduğuna dikkat ediniz.

(c) $\langle p\rangle$ ve $\langle p^2\rangle$'yi hesaplayınız. Yanıtlarınızı 2.43 nolu problem ile karşılaştırınız.

(d) $\langle H\rangle = \langle p\rangle^2/2m + \langle H\rangle_0$ olduğunu gösteriniz (burada 0 indisi kararlı *–durağan–* Gauss dalga paketini göstermektedir). Sonucu yorumlayınız.

---

[34] Özel olarak, t = 0 alınır ve t_0'dan indis düşürülürse

$$\langle Q(t)\rangle = \left\langle \Psi(x,t)\middle|\hat{Q}\middle|\Psi(x,t)\right\rangle = \left\langle \Psi(x,0)\middle|\hat{U}^{-1}\hat{Q}\hat{U}\middle|\Psi(x,0)\right\rangle$$

olur. Burada $\hat{U} \equiv \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ dir. Yani Q'nun beklenen değerini, ya $\hat{Q}$'yu $\Psi^*(x, t)$ ile $\Psi(x, t)$ arasına, daha önceden yaptığımız gibi, sandviç ederek (bu durumda dalga fonksiyonları zamana bağımlıdır) ya da $\hat{U}^{-1}\hat{Q}\hat{U}$'yu $\Psi^*(x, 0)$ ile $\Psi(x, 0)$ arasına sandviç ederek (bu durumda zaman bağımlılığı operatörlerdedir) hesaplayabilirsiniz. İlk duruma **Schrödinger resmi** ikicisine **Heisenberg resmi** denilir.

4. BÖLÜM

ÜÇ BOYUTTA KUANTUM MEKANİĞİ

4.1 KÜRESEL KOORDİNATLARDA SCHRÖDINGER DENKLEMİ

Üç boyuta genelleme kolaylıkla yapılabilir. Schrödinger denklemi

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \qquad [4.1]$$

dir ve Hamiltonyen operatörü H[1]

$$\frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V$$

ile verilen klasik enerji ifadesinden standart reçete yardımıyla elde edilir:

$$p_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}, \qquad [4.2]$$

(reçeteyi x ile birlikte y ve z koordinatlarına da uyguladık),

---

[1] Bir karışıklığın olacağı yerlerde operatörleri karşılık olan klasik gözlenebilirlerden ayırtetmek için üzerlerinde " ^ " kullanıyordum. Bu bölümde anlam karşılıklığının çok fazla olacağını sanmıyorum ve bu nedenle bu aşamadan sonra şapkaları kullanmayacağım.

ya da kısaca

$$\boxed{\mathbf{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla} \qquad [4.3]$$

şeklinde yazılabilir. Böylece Schrödinger denklemi

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi} \qquad [4.4]$$

şeklini alır. Burada

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad [4.5]$$

kartezyen koordinatlarda **Laplace operatörüdür.**

Artık potansiyel enerji V ve dalga fonksiyonu Ψ, $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ve t'nin fonksiyonlarıdır. Parçacığın sonsuz küçük $d^3\mathbf{r} = dx\,dy\,dz$ hacminde bulunma olasılığı $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2\, d^3\mathbf{r}$ olarak verilir. Normlama koşulu

$$\int |\Psi|^2\, d^3\mathbf{r} = 1 \qquad [4.6]$$

şeklindedir. İntegral tüm uzay üzerinden alınır. Potansiyel zamandan bağımsızsa

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})e^{-iE_n t/\hbar} \qquad [4.7]$$

olarak verilen kararlı durumların tam bir kümesi mevcuttur. Buradaki uzaysal dalga fonksiyonu ψ_n

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi} \qquad [4.8]$$

zamandan bağımsız Schrödinger denklemini sağlar. *Zamana bağımlı* Schrödinger denkleminin genel çözümü

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum c_n \psi_n(\mathbf{r})e^{-iE_n t/\hbar} \qquad [4.9]$$

şeklindedir. c_n sabitleri başlangıç dalga fonksiyonu $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ verilmişse, daha önce gördüğümüz yöntemlerle bulunur (eğer potansiyel sürekli durumlara izin veriyorsa 4.9 nolu denklemdeki toplama bir integrale dönüşür).

***Problem 4.1**

(a) $\mathbf{r}$ ve $\mathbf{p}$ operatörlerinin bileşenleri için $[x, y]$, $[x, p_y]$, $[x, p_x]$, $[p_y, p_z]$ vs. tüm **kanonik sıra değiştirme bağıntılarını** hesaplayınız. *Yanıt:*

$$[r_i, p_j] = -[p_i, r_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0 \qquad [4.10]$$

Burada $r_x = x$, $r_y = y$ ve $r_z = z$ dir.

(b) 3-boyutta Ehrenfest teoremini

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{m}\langle \mathbf{p} \rangle, \qquad \frac{d}{dt}\langle \mathbf{p} \rangle = \langle -\nabla V \rangle \qquad [4.11]$$

gerçekleyiniz (kuşkusuz bu bağıntıların her *biri üç* tane denkleme karşılık gelmektedir). *Yardım:* 3.71 nolu denklemin 3-boyutta da geçerli olup olmadığını kontrol ediniz.

(c) Üç boyutta Heisenberg belirsizlik ilkesini ifade ediniz. *Yanıt:*

$$\sigma_x\sigma_{p_x} \geq \hbar/2, \quad \sigma_y\sigma_{p_y} \geq \hbar/2, \quad \sigma_z\sigma_{p_z} \geq \hbar/2 \qquad [4.12]$$

$\sigma_x\sigma_{p_y}$ vs. üzerinde kısıtlama olmadığına dikkat ediniz.

4.1.1 Değişkenlere Ayırma

Tipik olarak, potansiyel yalnızca orijinden olan uzaklığın bir fonksiyonudur. Bu durumda (r, θ, ϕ) **küresel koordinatlarını** (4.1 nolu şekil) kullanmak daha elverişlidir. Küresel koordinatlarda Laplace operatörü[2]

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \qquad [4.13]$$

şeklini alır. Böylece küresel koordinatlarda zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin ifadesi

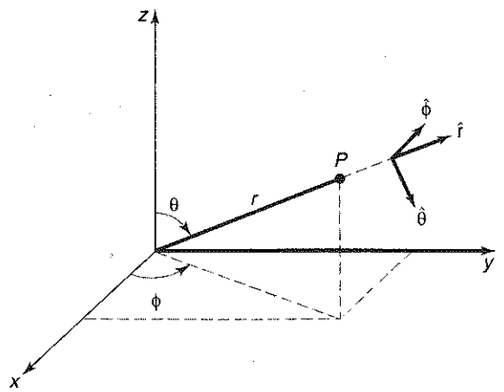
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right)\right] + V\psi = E\psi, \qquad [4.14]$$

olarak yazılabilir. Değişkenlere ayırma yöntemini kullanalım. Bu amaçla

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \qquad [4.15]$$

şeklinde bir çözüm arayalım.

[2] İlke olarak, bu ifade 4.5 nolu denklemle verilen kartezyen koordinatlardaki formundan değişken dönüşümüyle elde edilebilir. Bununla beraber küresel koordinatlardaki formu elde etmenin çok daha verimli yöntemleri de vardır. Örnek olarak M. Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1983) 10. Bölüm, 9. Kesim'e bakınız.



ŞEKİL 4.1: Küresel koordinatlar: yarıçap r, kutup açısı θ ve azimut açısı ϕ.

Bu ifade 4.14 nolu denklemde yerine yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{Y}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{R}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{R}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]$$
$$+VRY=ERY.$$

elde edilir. Denklemin her iki tarafı (RY) ile bölünür ve $-2mr^2/\hbar^2$ ile çarpılırsa

$$\left\{\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E]\right\}$$
$$+\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}=0.$$

olur. İlk kıvrımlı parantez içindeki terim yalnızca r değişkeninin, oysa kalan kısım yalnızca θ ve ϕ değişkenlerinin fonksiyonudur. Bu eşitliği sağlayabilmenin tek yolu her birinin bir sabite eşit olmasıdır. Zamanı geldiğinde öğreneceğimiz sebeplerden[3] dolayı "ayrıştırma sabitini" $l(l+1)$ olarak seçelim. Buradan

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E]=l(l+1); \qquad [4.16]$$

$$\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}=-l(l+1) \qquad [4.17]$$

denklemleri bulunur.

[3] Burada genellikten bir şey kaybetmediğimize dikkat edelim. Bu aşamada l herhangi bir kompleks sayı olabilir. Daha sonra l'nin *tamsayı olması* gerektiğini göreceğiz. Bu sonucun bir beklentisi olarak ayrıştırma sabitini özel bir formda ifade ettik.

***Problem 4.2** *Kartezyen* koordinatlarda değişkenlere ayırma yöntemini kullanarak sonsuz *kübik* kuyu ("kutu içindeki parçacık")

$$V(x,y,z,)=\begin{cases}0, & x,y,z\ 0\ \textit{ile a aralığında ise}\\ \infty, & \textit{diğer yerlerde}\end{cases}$$

problemini çözünüz.

(a) Kararlı (durağan) durumları ve karşılık gelen enerji değerlerini bulunuz.

(b) Ayrık enerji düzeylerini, artan enerji ölçeğinde, E_1, E_2, E_3.... olarak sıralayalım. E_1, E_2, E_3, E_4, E_5 ve E_6'yı bulunuz. Bu düzeylerin katlılıklarını (aynı enerjiye sahip farklı durumların sayısı) belirleyiniz. *Açıklama:* Bir boyutta katlı bağlı durumlar yoktur (2.45 nolu probleme bakınız). Üç boyutta ise oldukça yaygındır.

(c) E_{14}'ün katlılığı ne kadardır ve bu durum niçin ilginçtir?

4.1.2 Açısal Denklem

4.17 nolu denklem, ψ'nin θ ve ϕ'ye nasıl bağımlı olduğunu verir. Bu denklemi $Y\sin^2\theta$ ile çarparsak

$$\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}=-l(l+1)\sin^2\theta Y \qquad [4.18]$$

halini alır. Bu denklemi hemen tanıyacaksınız. Klasik elektrodinamikte Laplace denkleminin çözümünde ortaya çıkar. Her zaman olduğu gibi değişkenlere ayırma yöntemini deneyelim:

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi). \qquad [4.19]$$

$Y(\theta,\phi)$ yukarıda yerine yazılır ve $\Theta\Phi$'ye bölünürse,

$$\left\{\frac{1}{\Theta}\left[\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right]+l(l+1)\sin^2\theta\right\}+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=0$$

elde edilir. İlk terim yalnızca θ değişkeninin, ikincisi ise yalnızca ϕ değişkeninin bir fonksiyonudur. Bu yüzden bu terimlerin her biri aynı bir sabite eşit olmalıdır. Bu sefer ayrıştırma sabitini m^2 olarak seçelim.[4] Bu durumda

$$\frac{1}{\Theta}\left[\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right]+l(l+1)\sin^2\theta=m^2; \qquad [4.20]$$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=-m^2 \qquad [4.21]$$

elde edilir.

[4] Burada da, m herhangi bir kompleks sayı olabileceğinden, genellikten hiçbir şey kaybetmeyiz. Ancak birazdan m'nin tam sayı olması gerektiğini göreceğiz. Dikkat: m harfinin burada iki görevi var. Kütle ve ayrıştırma sabiti. Her ikisinin de kullanımı standart olduğundan karışıklıktan kaçınmanın bir yolu yok. Bazı yazarlar kütle için M ya da μ harflerini kullansalar da yarı yolda notasyon değiştirmek pek hoş değildir. Üzerinde çalıştığınız problemin farkında olduğunuz sürece karışıklık çıkacağını sanmıyorum.

ϕ denkleminin çözümü kolaydır:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2\Phi \;\Rightarrow\; \Phi(\phi) = e^{im\phi}. \qquad [4.22]$$

[Aslında $\exp(im\phi)$ ve $\exp(-im\phi)$ olmak üzere *iki* çözüm söz konusudur. Ancak m'nin negatif değerler almasına izin vererek ikinci çözümü de hesaba kattık. Çözümün önünde sabit bir çarpan da olmalıdır, ama bu Θ fonksiyonunun içine katılabilir. Bu arada, elektrodinamikte azimutal fonksiyon Φ'yi sinüs ve kosinüsler cinsinden yazarız çünkü elektrik potansiyeli *reel* olmalıdır. Kuantum mekaniğinde böyle bir kısıtlama yoktur ve üstel ifadeler üzerinde çalışmak daha kolaydır]. ϕ'yi 2π kadar artırdığımızda uzayda aynı noktaya geri geliriz (4.1 nolu şekil). Bu yüzden

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \qquad [4.23]$$

şartını koymak doğaldır.[5] Diğer bir deyişle,

$\exp[im(\phi + 2\pi)] = \exp(im\phi)$ ya da $\exp(2\pi i m) = 1$ dir. Bunun sağlanması için m *tamsayı* olmalıdır:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots. \qquad [4.24]$$

θ denklemine dönelim:

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}\right) + [l(l+1)\sin^2\theta - m^2]\Theta = 0 \qquad [4.25]$$

Bunun çözümü çok kolay değildir. Çözüm

$$\Theta(\theta) = AP_l^m(\cos\theta) \qquad [4.26]$$

olarak verilir. Burada P_l^m **assosiye Legendre fonksiyonudur** ve

$$P_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{|m|/2}\left(\frac{d}{dx}\right)^{|m|} P_l(x) \qquad [4.27]$$

olarak tanımlanır.[6] $P_l(x)$, ***l*-inci Legendre polinomudur** ve **Rodrigues formülüyle** tanımlanır:

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l. \qquad [4.28]$$

[5] Bu koşul göründüğünden daha zor anlaşılır. Unutulmamalıdır ki *olasılık yoğunluğu* ($|\Phi|^2$), m'den *bağımsız olarak* tek değerlidir. 4.3. Kesimde m'nin üzerindeki şartı daha farklı ve çok daha zorlayıcı bir argümandan elde edeceğiz.

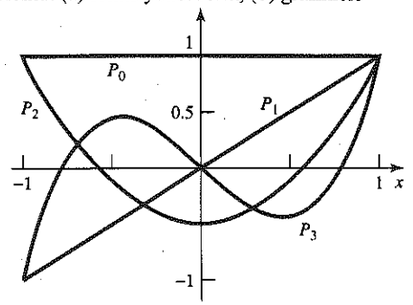
[6] $P_l^{-m} = P_l^m$ olduğuna dikkat ediniz. Bazı yazarlar m'nin negatif değerleri için farklı bir işaret anlaşması kullanırlar. Boas (2. dipnot) 505. sayfaya bakınız.

TABLO 4.1: İlk birkaç $P_l(x)$ Legendre polinomu: (a) fonksiyonel form, (b) grafikleri

(a)

$P_0 = 1$
$P_1 = x$
$P_2 = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
$P_3 = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$
$P_4 = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$
$P_5 = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$

(b)



Örneğin;

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = \frac{1}{2}\frac{d}{dx}(x^2-1) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{1}{4\cdot 2}\left(\frac{d}{dx}\right)^2 (x^2-1)^2 = \frac{1}{2}(3x^2-1),$$

vs. İlk birkaç Legendre polinomu 4.1 nolu tabloda listelenmiştir. Adından da anlaşıldığı gibi $P_l(x)$, x'in l inci dereceden bir polinomudur ve l'nin paritesine göre çift ya da tek olmaktadır. Ama genel olarak $P_l^m(x)$ bir polinom değildir. m tek ise $\sqrt{1-x^2}$ gibi bir çarpana sahiptir.

$$P_2^0(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1), \quad P_2^1(x) = (1-x^2)^{1/2}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{2}(3x^2-1)\right] = 3x\sqrt{1-x^2},$$

$$P_2^2(x) = (1-x^2)\left(\frac{d}{dx}\right)^2\left[\frac{1}{2}(3x^2-1)\right] = 3(1-x^2),$$

vs. (Öte yandan bize gereken $P_l^m(\cos\theta)$ dır. $\sqrt{1-\cos^2\theta} = \sin\theta$ olur. Böylece $P_l^m(\cos\theta)$ daima $\cos\theta$'nin bir polinomudur. m tek ise $\sin\theta$ çarpanı içerir. $\cos\theta$'ya göre birkaç assosiye Legendre fonksiyonu 4.2 nolu tabloda listelenmiştir).

Rodrigues formülünden l'nin pozitif *tamsayı* olması gerektiğine dikkat ediniz. Öte yandan $|m| > l$ ise 4.27 nolu denklemden $P_l^m = 0$ bulunur. Bu durumda verilen bir l değeri için m'nin $(2l+1)$ tane mümkün değeri vardır:

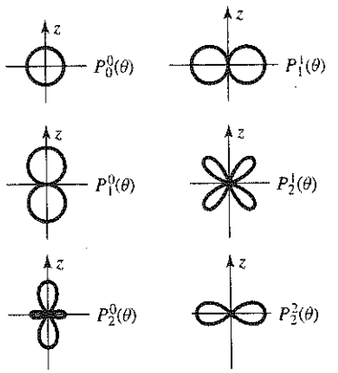
$$l = 0,\ 1,\ 2, \ldots; \quad m = -l,\ -l+1,\ \ldots,\ -1,\ 0,\ 1,\ \ldots,\ l-1,\ l. \qquad [4.29]$$

Ama biraz durun bakalım! 4.25 nolu denklem ikinci dereceden bir diferansiyel denklemdir. l ve m'nin *herhangi eski* değerleri için iki tane lineer bağımsız çözümü olmalıdır. Bu durumda diğer çözümler nerede? *Yanıt:* Şüphesiz, bunlar denklemin

TABLO 4.2: Birkaç $P_l^m(\cos\theta)$ assosiye Legendre fonksiyonu: (a) fonksiyonel form, (b) $r = P_l^m(\cos\theta)$ 'nın grafikleri (bu grafiklerde r, θ yönünde fonksiyonun büyüklüğünü vermektedir; her bir grafik z ekseni etrafında döndürülmelidir).

$P_0^0 = 1$	$P_2^0 = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$
$P_1^1 = \sin\theta$	$P_3^3 = 15\sin\theta(1-\cos^2\theta)$
$P_1^0 = \cos\theta$	$P_3^2 = 15\sin^2\theta\cos\theta$
$P_2^2 = 3\sin^2\theta$	$P_3^1 = \frac{3}{2}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)$
$P_2^1 = 3\sin\theta\cos\theta$	$P_3^0 = \frac{1}{2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$

(a)



(b)

matematiksel çözümleri olarak mevcuttur. Ancak bu çözümler, $\theta = 0$ ve/veya $\theta = \pi$'de ıraksak olduklarından (4.4 nolu probleme bakınız) *fiziksel* olarak kabul edilebilir çözümler değildir.

Küresel koordinatlarda hacim elemanı[7]

$$d^3\mathbf{r} = r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi \qquad [4.30]$$

şeklindedir. Böylece normlama koşulu (4.6 nolu denklem)

$$\int |\psi|^2 r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi = \int |R|^2 r^2\, dr \int |Y|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\phi = 1$$

şeklini alır. R ve Y fonksiyonlarını ayrı ayrı normlamak daha kullanışlıdır. Bu durumda normlama integralleri:

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2\, dr = 1\ ; \qquad \int_0^{2\pi}\int_0^\pi |Y|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\phi = 1. \qquad [4.31]$$

[7] Boas (2. dipnot), 5. Bölüm, 4. Kesime bakınız.

TABLO 4.3: İlk birkaç $Y_l^m(\theta,\phi)$ küresel harmonik.

$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$Y_2^{\pm2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2}\sin^2\theta e^{\pm2i\phi}$
$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta$	$Y_3^0 = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
$Y_1^{\pm1} = \mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm1} = \mp\left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)e^{\pm i\phi}$
$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2}(3\cos^2\theta - 1)$	$Y_3^{\pm2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2}\sin^2\theta\cos\theta e^{\pm2i\phi}$
$Y_2^{\pm1} = \mp\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm3} = \mp\left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2}\sin^3\theta e^{\pm3i\phi}$

Normlanmış açısal dalga fonksiyonlarına[8] **küresel harmonikler** denilir.

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \epsilon\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, e^{im\phi}\, P_l^m(\cos\theta) \qquad [4.32]$$

Burada $m \geq 0$ için $\epsilon = (-1)^m$ ve $m \leq 0$ için $\epsilon = 1$ dir. Daha sonra kanıtlayacağımız gibi küresel harmonikler otomatik olarak ortogonaldir yani

$$\int_0^{2\pi}\int_0^\pi [Y_l^m(\theta,\phi)]^*[Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)]\sin\theta\, d\theta\, d\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \qquad [4.33]$$

bağıntısını sağlarlar. 4.3 nolu tabloda ilk birkaç küresel harmonik listelenmiştir. Tarihsel sebeplerle, l indisine **azimutal kuantum sayısı** ve m indisine **manyetik kuantum sayısı** denir.

***Problem 4.3** 4.27, 4.28 ve 4.32 nolu denklemleri kullanarak, Y_0^0 ve Y_2^1'i kurunuz. Bunların normlanmış ve ortogonal olduklarını kontrol ediniz.

Problem 4.4

$$\Theta(\theta) = A\ln[\tan(\theta/2)]$$

[8] Normlama çarpanı 4.54 nolu problemde türetilmiştir. Daima 1 veya −1 değerini alan ϵ katsayısı, açısal momentum teorisinde kullanacağımız notasyonla uyumlu olsun diye seçilmiştir. Bazı eski kitaplar farklı anlaşmalar kullansalar da burada verilen oldukça standart bir anlaşmadır. Ayrıca

$$Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*$$

olduğuna dikkat edin.

olarak verilen fonksiyonun $l = m = 0$ için θ denklemini (4.25 nolu denklem) sağladığını gösteriniz. Bu kabul edilemeyen "ikinci çözümdür". Buradaki *sorun* nedir?

***Problem 4.5** 4.32 nolu denklemi kullanarak $Y_l^l(\theta, \phi)$ ve $Y_3^2(\theta, \phi)$'yi kurun (P_3^2 'yi 4.2 nolu tablodan alabilirsiniz ancak P_l^l 'yi 4.27 ve 4.28 nolu denklemlerden çıkarmalısınız). Bu fonksiyonların uygun l ve m değerleri için açısal denklemi (4.18 nolu denklem) sağladıklarını kontrol edin.

****Problem 4.6** Rodrigues formülünden başlayarak

$$\int_{-1}^{1} P_l(x) P_{l'}(x)\, dx = \left(\frac{2}{2l+1}\right) \delta_{ll'} \qquad [4.34]$$

olarak verilen Legendre polinomlarının ortonormallik bağıntısını türetiniz.
Yardım: Kısmi integrasyon kullanın.

4.1.3 Radyal Denklem

Dalga fonksiyonunun açısal kısmı $Y(\theta, \phi)$ tüm küresel simetrik potansiyeller için aynıdır. $V(r)$ potansiyelinin *şekli*, 4.16 nolu denklemle verilen, dalga fonksiyonunun *radyal* kısmı $R(r)$'yi etkilemektedir. Yani ayrıntılı çözümü bulmak için $V(r)$ potansiyelinin verilmesi gerekir. Radyal denklem

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r) - E]R = l(l+1)R \qquad [4.35]$$

şeklindedir.

$$u(r) \equiv rR(r) \qquad [4.36]$$

bağıntısıyla yeni bir $u(r)$ fonksiyonu tanımlarsak denklem daha basit bir ifadeye dönüşür. Bu durumda

$R = u/r$, $dR/dr = [r(du/dr) - u]/r^2$, $(d/dr)[r^2(dR/dr)] = rd^2u/dr^2$

olur. Böylece, $u(r)$'nin sağladığı diferansiyel denklem

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[V + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u = Eu} \qquad [4.37]$$

şeklini alır. Bu denkleme **radyal denklem**[9] denir. *Şekil olarak* bir boyutlu Schrödinger denklemiyle (2.5 nolu denklem) *aynıdır*. Buradaki tek fark şudur: Potansiyelin yerini

$$V_{\text{eff}} = V + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}. \qquad [4.38]$$

[9] Bu denklemdeki *m'ler kütledir*. Ayrıştırma sabiti m radyal denklemde gözükmez.

olarak verilen **etkin potansiyel** almıştır. Etkin potansiyeldeki $(\hbar^2/2m)\,[l(l+1)/r^2]$ ile verilen ilave terim **merkezkaç potansiyeli** olarak bilinir. Bu terim, klasik mekanikteki *yalancı* merkezkaç kuvveti gibi parçacığı orijinden uzağa, dışarı doğru fırlatma eğilimindedir. Bu arada 4.31 nolu denklemle verilen normlama koşulu

$$\int_0^\infty |u|^2\, dr = 1 \qquad [4.39]$$

şeklini alır. Bu noktadan öteye gidebilmek için $V(r)$ potansiyelinin verilmiş olması gerekir.

Örnek 4.1

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \le a; \\ \infty, & r > a \end{cases} \qquad [4.40]$$

ile verilen **sonsuz küresel kuyu** potansiyelini göz önüne alınız. Dalga fonksiyonlarını ve izin verilen enerji değerlerini bulunuz.

Çözüm: Kuyunun dışında dalga fonksiyonu sıfırdır. Kuyunun içinde ise, radyal denklem

$$\frac{d^2u}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2\right]u, \qquad [4.41]$$

şeklindedir. Burada

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad [4.42]$$

dir. Yapılacak işlem diferansiyel denklemi çözerek $u(a) = 0$ sınır koşulunu uygulamaktır. $l = 0$ durumu kolay olduğundan önce bunu inceleyelim:

$$\frac{d^2u}{dr^2} = -k^2u \;\Rightarrow\; u(r) = A\sin(kr) + B\cos(kr).$$

Gerçek radyal dalga fonksiyonunun $R(r) = u(r)/r$ olduğunu hatırlayalım. O zaman $r \to 0$ iken, $[\cos(kr)]/r$ terimi ıraksar. Bu yüzden $B = 0$ seçmeliyiz.[10] Sınır koşulundan $\sin(ka) = 0$ ve böylece $ka = n\pi$ (n = tamsayı) bulunur. İzin verilen enerji değerleri

$$E_{n0} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \ldots), \qquad [4.43]$$

[10] Gerçekte, istediğimiz tek koşul dalga fonksiyonunun sonlu olması değil normlanabilmesidir: $R(r) \sim 1/r$ (4.31 nolu denklemdeki r^2 yüzünden) orijinde normlanabilirdir. $B = 0$ şartına daha zorlayıcı bir kanıt R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics, 2nd ed.* (Plenum, New York, 1994) 342. sayfada bulunabilir.

olarak bulunur. İzin verilen enerji değerlerinin bir boyutlu sonsuz kare kuyudaki enerji değerleriyle (2.27 nolu denklem) aynı olduğuna dikkat ediniz. $u(r)$'nin normlanmasıyla $A=\sqrt{2/a}$ bulunur. Açısal kısmı da göz önüne alarak ($Y_0^0(\theta,\phi)=1/\sqrt{4\pi}$ olduğundan bu örnekte sıradandır) dalga fonksiyonunu yazalım:

$$\psi_{n00}=\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{\sin(n\pi r/a)}{r}. \qquad [4.44]$$

[Kararlı durumların n, l ve m ile gösterilen üç tane **kuantum sayısıyla** belirlendiğine dikkat edin: $\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)$. Bununla birlikte *enerji* yalnızca n ve l'ye bağımlıdır: E_{nl}]

l'nin *keyfi bir tamsayı* değeri için 4.41 nolu denklemin genel çözümü çok fazla tanıdık değildir. Genel çözüm

$$u(r)=Arj_l(kr)+Brn_l(kr) \qquad [4.45]$$

şeklindedir. Burada $j_l(x)$, l-inci dereceden **küresel Bessel fonksiyonu** ve $n_l(x)$, l-inci dereceden **küresel Neumann fonksiyonudur**. Bu fonksiyonlar aşağıdaki gibi tanımlanırlar:

$$j_l(x)\equiv(-x)^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{\sin x}{x};\quad n_l(x)\equiv-(-x)^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{\cos x}{x}. \qquad [4.46]$$

Örneğin;

$$j_0(x)=\frac{\sin x}{x};\quad n_0(x)=-\frac{\cos x}{x};$$

$$j_1(x)=(-x)\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\left(\frac{\sin x}{x}\right)=\frac{\sin x}{x^2}-\frac{\cos x}{x};$$

$$j_2(x)=(-x)^2\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^2\frac{\sin x}{x}=x^2\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)\frac{x\cos x-\sin x}{x^3}$$

$$=\frac{3\sin x-3x\cos x-x^2\sin x}{x^3};$$

vs. 4.4 nolu tabloda ilk birkaç küresel Bessel ve Neumann fonksiyonları listelenmiştir. Küçük x değerleri için ($\sin x = x-x^3/3!+x^5/5!-\ldots$ ve $\cos x = 1-x^2/2+x^4/4!$)

$$j_0(x)\approx 1;\quad n_0(x)\approx-\frac{1}{x};\quad j_1(x)\approx\frac{x}{3};\quad j_2(x)\approx\frac{x^2}{15};$$

olduğu gösterilebilir. Bessel fonksiyonlarının orijinde *sonlu* oysa *Neumann* fonksiyonlarının orijinde *ıraksak* olduklarına dikkat edin. Bu nedenle $B_l=0$ seçmeliyiz. Böylece çözüm

$$R(r)=Aj_l(kr) \qquad [4.47]$$

olur.

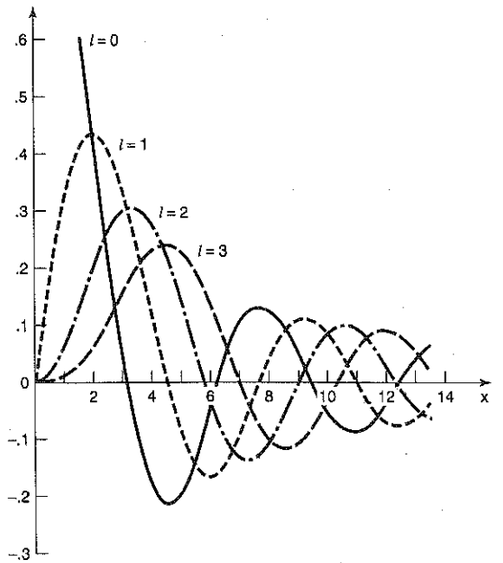
TABLO 4.4: İlk birkaç $j_l(x)$ küresel Bessel ve $n_l(x)$ Neumann fonksiyonları ve küçük x değerleri için asimptotik davranışları.

$j_0=\frac{\sin x}{x}$	$n_0=-\frac{\cos x}{x}$
$j_1=\frac{\sin x}{x^2}-\frac{\cos x}{x}$	$n_1=-\frac{\cos x}{x^2}-\frac{\sin x}{x}$
$j_2=\left(\frac{3}{x^3}-\frac{1}{x}\right)\sin x-\frac{3}{x^2}\cos x$	$n_2=-\left(\frac{3}{x^3}-\frac{1}{x}\right)\cos x-\frac{3}{x^2}\sin x$
$j_l\to\frac{2^l l!}{(2l+1)!}x^l,$	$n_l\to-\frac{(2l)!}{2^l l!}\frac{1}{x^{l+1}},\quad x\ll 1.$

Çözümün sağlaması gereken sınır koşulu $R(a)=0$ dır. k değeri

$$j_l(ka)=0 \qquad [4.48]$$

olacak şekilde seçilmelidir. Yani (ka), l-inci küresel Bessel fonksiyonunun köküdür. Bessel fonksiyonları salınımlı davranış gösterdiğinden (4.2 nolu şekil) her bir fonksiyonun sonsuz tane kökü vardır. Ama ne yazık ki bu kökler n ya da $n\pi$ gibi pratik



ŞEKİL 4.2: İlk dört küresel Bessel fonksiyonunun grafikleri.

ve kullanışlı noktalarda değildir. Bu nedenle sayısal olarak hesaplanırlar.[11] Sınır koşulundan

$$k = \frac{1}{a}\beta_{nl} \qquad [4.49]$$

bulunur. Burada β_{nl} l-inci küresel Bessel fonksiyonunun n-inci köküdür. Böylece izin verilen enerji değerleri

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\beta_{nl}^2 \qquad [4.50]$$

ve dalga fonksiyonları

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl}\, j_l(\beta_{nl} r/a) Y_l^m(\theta, \phi) \qquad [4.51]$$

olur. Buradaki A_{nl} sabiti normlama koşulundan bulunur. Verilen bir l değeri için $(2l + 1)$ tane farklı m değeri mümkün olduğundan (4.29 nolu denkleme bakınız) her bir enerji düzeyi $(2l + 1)$ kez katlıdır (çakışıktır).

Problem 4.7

(a) 4.46 nolu denklemle verilen tanımdan başlayarak $n_1(x)$ ve $n_2(x)$'i kurun.

(b) $x \ll 1$ iken sinüs ve kosinüs fonksiyonlarını seriye açarak $n_1(x)$ ve $n_2(x)$ için yaklaşık ifadeleri elde edin. Bu fonksiyonların orijinde ıraksadıklarını gösterin.

Problem 4.8

(a) $Arj_1(kr)$'nın $V(r) = 0$ ve $l = 1$ durumunda radyal denklemi sağladığını gösterin.

(b) $l = 1$ için sonsuz küresel kuyunun izin verilen enerji değerlerini grafik yöntemle belirleyin. Büyük n değerleri için, $E_{nl} \approx (\hbar^2\pi^2/2ma^2)(n + 1/2)^2$ olduğunu gösterin. *Yardım:* Önce $j_l(x) = 0 \Rightarrow x = \tan x$ olduğunu gösterin. x ve $\tan x$'i aynı grafik üzerine çizerek kesim noktalarını işaretleyin.

[11] Abramowitz & Stegun, eds. *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover, New York, 1965) 10. Bölümde geniş bir liste halinde sunulmuştur.

****Problem 4.9** m kütleli bir parçacık

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r \le a; \\ 0, & r > a \end{cases}$$

ile verilen sonlu küresel kuyunun içindedir. $l = 0$ için radyal denklemi çözerek taban durumunu belirleyin. $V_0 a^2 < \pi^2\hbar^2/8m$ ise bağlı durum olamayacağını gösterin.

4.2 HİDROJEN ATOMU

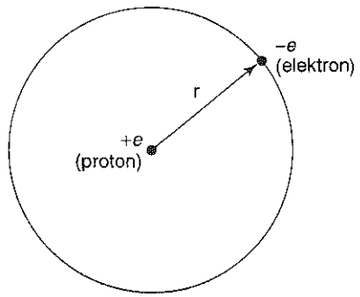
Hidrojen atomu e yüklü, ağır ve neredeyse hareketsiz olan bir protonla (protonu orijine yerleştireceğiz), bunun etrafında yörüngede dönen, $-e$ yüklü ve oldukça hafif olan elektrondan oluşur. Sistem zıt işaretli yükler arasındaki karşılıklı çekim kuvveti tarafından bağlanır (4.3 nolu şekil). Coulomb yasasından hareketle *SI* birimlerinde potansiyel enerji

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \qquad [4.52]$$

olarak yazılır. Bu potansiyel için radyal denklem (4.37 nolu denklem)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u = Eu \qquad [4.53]$$

şeklini alır. Hidrojen atomu problemi radyal denklemi çözerek $u(r)$ dalga fonksiyonunu ve izin verilen enerji değerleri E'yi belirlemektir. Hidrojen atomu önemli bir problem olduğundan, harmonik salınıcının analitik çözümünde kullandığımız yöntemi kullanarak bunun üzerinde detaylı çalışacağız (eğer çözüm sürecinde anlamadığınız noktalar olursa daha detaylı bir açıklama bulmak için 2.3.2. Kesime geri dönebilirsiniz).



ŞEKİL 4.3: Hidrojen atomu.

Bu noktada, 4.52 nolu denklemle verilen Coulomb potansiyelinin, hidrojen atomunu temsil eden kesikli bağlı durumların yanında, elektron-proton saçılmasını tanımlayan $E > 0$ enerjili *sürekli* durumları da içerdiğini hatırlayalım. Ancak biz yalnızca bağlı durumları inceleyeceğiz.

4.2.1 Radyal Dalga Fonksiyonu

Denklemin çözümüne başlamadan önce birkaç notasyon değişikliği yapalım.

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \qquad [4.54]$$

olarak tanımlansın. Bağlı durumlar için E negatif olduğundan κ *reeldir.* 4.53 nolu denklem E'ye bölünürse

$$\frac{1}{\kappa^2}\frac{d^2u}{dr^2} = \left[1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa}\frac{1}{(\kappa r)} + \frac{l(l+1)}{(\kappa r)^2}\right]u$$

elde edilir. İki yeni büyüklük tanımlayalım:

$$\rho \equiv \kappa r \quad \text{ve} \quad \rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa} \qquad [4.55]$$

Bu büyüklükler cinsinden radyal denklem şu hale dönüşür:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u. \qquad [4.56]$$

Bundan sonraki adımda çözümlerin asimptotik formlarını araştıracağız. $\rho \to \infty$ iken, parantez içindeki sabit terim baskın hale gelir ve böylece (yaklaşık olarak)

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = u$$

yazılabilir. Genel çözüm ise

$$u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho} \qquad [4.57]$$

şeklindedir. $\rho \to \infty$ için, e^{ρ} ıraksak olduğundan $B = 0$ seçilmelidir. Böylece büyük ρ değerleri için

$$u(\rho) \sim Ae^{-\rho} \qquad [4.58]$$

bulunur. Öte yandan $\rho \to 0$ iken, merkezkaç terimi baskın olur[12] ve yaklaşık olarak

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2}u$$

elde edilir.

[12] $l = 0$ durumunda, buradaki argüman çalışmaz (4.59 nolu denklemin bu durumda da geçerli olduğunu ifade eden sonuca rağmen). Ama üzülmeyin, tüm yapmaya çalıştığımız 4.60 nolu denklemle verilen değişken değişikliği için biraz *motivasyon* kazandırmak.

Genel çözüm (kontrol edin)

$$u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l},$$

dir. Ancak $\rho \to 0$ için, ρ^{-l} ıraksar ve $D = 0$ seçilir. Böylece küçük ρ değerleri için

$$u(\rho) \sim C\rho^{l+1} \qquad [4.59]$$

olur.

Bu iki asimptotik davranışı gördükten sonra yeni bir $v(\rho)$ fonksiyonu tanımlayarak $u(\rho)$ dalga fonksiyonu için

$$u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho) \qquad [4.60]$$

şeklinde bir çözüm arayalım. Bu iki davranışı ayırarak kalan $v(\rho)$ için daha basit bir çözüm bulmayı umuyoruz. Ancak ilk belirtiler olumlu değil:

$$\frac{du}{d\rho} = \rho^l e^{-\rho}\left[(l+1-\rho)v + \rho\frac{dv}{d\rho}\right]$$

ve

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \rho^l e^{-\rho}\left\{\left[-2l - 2 + \rho + \frac{l(l+1)}{\rho}\right]v + 2(l+1-\rho)\frac{dv}{d\rho} + \rho\frac{d^2v}{d\rho^2}\right\}$$

olduğuna göre $v(\rho)$ fonksiyonu cinsinden radyal denklem (4.56 nolu denklem)

$$\rho\frac{d^2v}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{dv}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]v = 0. \qquad [4.61]$$

olarak yazılır.

Son olarak çözümün yani $v(\rho)$'nun ρ'ya göre bir kuvvet serisi olarak yazılabileceğini varsayalım:

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j\rho^j. \qquad [4.62]$$

Artık problem, $(c_0, c_1, c_2, \ldots)$ katsayılarının belirlenmesi problemine dönüştü. Terim terime türev alınarak

$$\frac{dv}{d\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} jc_j\rho^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty}(j+1)c_{j+1}\rho^j$$

elde edilir [ikinci toplamda indis değiştirilerek $j \to j+1$ yapılmıştır. Eğer bu durumdan rahatsız olduysanız, ilk birkaç terimi açık olarak yazın ve *kontrol* edin. Bu durumda

toplamanın $j = -1$'den başlaması gerekecek. Ancak $(j + 1)$ çarpanı zaten bu terimi öldürecek. Böylece toplama yine sıfırdan başlayacaktır]. Bir kez daha türev alınarak

$$\frac{d^2v}{d\rho^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1)c_{j+1}\rho^{j-1}.$$

elde edilir. Bu ifadeler 4.61 nolu denklemde yerine yerleştirilirse

$$\sum_{j=0}^{\infty} j(j+1)c_{j+1}\rho^j + 2(l+1)\sum_{j=0}^{\infty}(j+1)c_{j+1}\rho^j$$

$$-2\sum_{j=0}^{\infty} jc_j\rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)]\sum_{j=0}^{\infty} c_j\rho^j = 0$$

olur. Aynı kuvvetteki katsayılar eşitlenerek

$$j(j+1)c_{j+1} + 2(l+1)(j+1)c_{j+1} - 2jc_j + [\rho_0 - 2(l+1)]c_j = 0$$

ya da

$$c_{j+1} = \left\{\frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)}\right\} c_j \qquad [4.63]$$

elde edilir. Bu tekrarlama bağıntısı katsayıları ve böylece $v(\rho)$ fonksiyonunu tam olarak belirler. c_0 katsayısı ile başlarsak (bu katsayı çözümde bir çarpan olarak gözükür ve normlama işlemiyle belirlenir). 4.63 nolu denklem yardımıyla c_1'i bulunuz, c_1 yerine yazılarak c_2 elde edilir ve bu şekilde devam edilir.[13]

Büyük j değerleri için (bu durum yüksek dereceden kuvvetlerin baskın olduğu büyük ρ değerlerine karşılık gelir) katsayıların davranışını araştıralım. Büyük j'ler için tekrarlama bağıntısı[14]

$$c_{j+1} \cong \frac{2j}{j(j+1)}c_j = \frac{2}{j+1}c_j.$$

haline gelir.

[13] Kuvvet serisi yöntemini doğrudan doğruya niçin $u(\rho)$ fonksiyonuna uygulamadığımızı merak edebilirsiniz. Niçin asimptotik davranışı ayırdık? ρ^{l+1}'i ayırmamızın sebebi biraz estetik nedenlerden. Bu terim olmasaydı seri birçok terimin sıfır olduğu bir diziyle başlayacaktı (sıfırdan farklı ilk katsayı c_{l+1} olacaktı). ρ^{l+1}'i çarpan olarak ayırarak ρ^0 ile başlayan bir seri yakaladık. $e^{-\rho}$ çarpanı biraz kritik. Bu terim ayıklanmasaydı c_{j+2}, c_{j+1} ve c_j'yi içeren üç terimli bir tekrarlama bağıntısı bulunacaktı (deneyin ve görün). Bu bağıntıyla çalışma daha zor olacaktır.

[14] j+1'deki 1'i niçin tuttuğumu sorabilirsiniz. Ne de olsa, paydaki $2(l+1) - \rho_0$ terimiyle, paydadaki $2l$+2'yi ihmal ediyoruz. Buradaki yaklaştırmada 1'i de ihmal etmek mümkündür ancak bunu tutmak tartışmayı daha açık hale getiriyor. Siz de 1'i ihmal ederek deneyin ne demek istediğimi görün.

Bir an için bunun kesin olduğunu varsayalım. Bu durumda

$$c_j = \frac{2^j}{j!}c_0 \qquad [4.64]$$

olur. $v(\rho)$ fonksiyonu

$$v(\rho) = c_0\sum_{j=0}^{\infty}\frac{2^j}{j!}\rho^j = c_0e^{2\rho}$$

halini alır. Böylelikle

$$u(\rho) = c_0\rho^{l+1}e^{\rho} \qquad [4.65]$$

elde edilir. Bu çözüm büyük ρ değerlerinde ıraksaktır. Pozitif üstel tıpkı 4.57 nolu denklemde olduğu gibi *istemediğimiz* asimptotik davranıştır (pozitif üstelin tekrar ortaya çıkması tesadüf değil, ne de olsa bu üstel de radyal denklemin asimptotik formunun bir *çözümünü* simgeler. Ancak bu bizim ilgilendiğimiz çözüm değil, çünkü bu çözüm normlanamaz). Bu ikilemden kurtulmanın tek bir yolu var: seri çözümü bir yerde kesilmeli. Bu işlem $j_{\max}$ gibi maksimum bir tamsayıda yapılmalı yani

$$c_{(j_{\max}+1)} = 0 \qquad [4.66]$$

olmalı (böylece bundan sonraki tüm katsayılar otomatik olarak sıfır olurlar). 4.63 nolu denklemden

$$2(j_{\max} + l + 1) - \rho_0 = 0$$

elde edilir.

$$n \equiv j_{\max} + l + 1 \qquad [4.67]$$

olarak tanımlansın. n'ye **temel kuantum sayısı** denir. Böylece

$$\rho_0 = 2n \qquad [4.68]$$

olur. 4.54 ve 4.55 nolu denklemler yardımıyla ρ_0, E değerini belirlemektedir:

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{me^4}{8\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2\rho_0^2}. \qquad [4.69]$$

Böylelikle izin verilen enerji değerleri

$$\boxed{E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right]\frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots} \qquad [4.70]$$

olarak bulunur. Bu denklem tüm kuantum mekaniğindeki en önemli sonuçlardan biri olan ünlü **Bohr formülüdür**. Bohr bu formülü eski kuantum teorisiyle (Schrödinger

denklemi 1924'e dek bilinmiyordu) klasik fiziğin mucizevi bir karışımıyla 1913'de elde etmiştir.

4.55 ve 4.68 nolu denklemler birleştirilerek

$$\kappa = \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)\frac{1}{n} = \frac{1}{an} \qquad [4.71]$$

bulunur. Burada

$$\boxed{a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10}\ \text{m}} \qquad [4.72]$$

dir ve **Bohr yarıçapı**[15] olarak adlandırılır. 4.55 nolu denklemden

$$\rho = \frac{r}{an} \qquad [4.73]$$

elde edilir. Hidrojenin uzaysal dalga fonksiyonları üç tane kuantum sayısıyla (n, l ve m) belirlenir:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\theta, \phi). \qquad [4.74]$$

4.36 ve 4.60 nolu denklemler yardımıyla radyal dalga fonksiyonu

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r}\rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho) \qquad [4.75]$$

olarak verilir. Burada $v(\rho)$, ρ'nun $j_{\max} = n-l-1$- inci dereceden bir polinomudur. ρ'nun katsayıları bir normlama çarpanı farkıyla

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)}c_j \qquad [4.76]$$

tekrarlama bağıntısıyla bulunur.

Taban durumunda (en düşük enerjili durum) $n = 1$ dir. Fiziksel sabitlerin sayısal değerleri kullanılarak taban durumu enerjisi

$$\boxed{E_1 = -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right] = -13.6\ \text{eV}} \qquad [4.77]$$

olarak bulunur. Dolayısıyla hidrojenin **bağlanma enerjisi** (atomu iyonlaştırmak için

[15] Bohr yarıçapı için a_0 kullanmak alışılmış bir notasyondur. Ancak bu gösterim çok gerekli ve kullanışlı olmadığından alt indisi kullanmamayı tercih ediyoruz.

taban durumundaki elektrona verilmesi gereken enerji miktarı) 13.6 eV'dur. Taban durumunda, 4.67 nolu denklemden $l = 0$ elde edilir ve bundan dolayı $m = 0$ olur (4.29 nolu denkleme bakınız). Böylelikle

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta, \phi) \qquad [4.78]$$

elde edilir. Tekrarlama bağıntısı ilk terimden sonra kesilir ($j = 0$ durumunda, 4.76 nolu denklemden $c_1 = 0$ bulunur). Bu durumda $v(\rho)$ sabit olacaktır (c_0). Böylece radyal dalga fonksiyonu

$$R_{10}(r) = \frac{c_0}{a}e^{-r/a} \qquad [4.79]$$

şeklini alır. 4.31 nolu denklem yardımıyla normlanırsa

$$\int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2\, dr = \frac{|c_0|^2}{a^2}\int_0^\infty e^{-2r/a}\, r^2\, dr = |c_0|^2\frac{a}{4} = 1$$

ve $c_0 = 2/\sqrt{a}$ bulunur. Öte yandan $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ olduğu kullanırsa, hidrojenin taban durumu dalga fonksiyonu

$$\boxed{\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}} \qquad [4.80]$$

olarak elde edilir.

$n = 2$ için enerji

$$E_2 = \frac{-13.6\ \text{eV}}{4} = -3.4\ \text{eV} \qquad [4.81]$$

dir ve ilk uyarılmış durum olarak adlandırılır. Aslında $n = 2$ için $l = 0$ ($m = 0$) ve $l = 1$ ($m = -1, 0, +1$) olduğundan aynı enerjili dört farklı durum mevcuttur. $l = 0$ ise tekrarlama bağıntısı (4.76 nolu denklem)

$$c_1 = -c_0 \quad (j = 1 \text{ için}) \qquad \text{ve} \qquad c_2 = 0 \quad (j = 1 \text{ için})$$

verir. Böylece $v(\rho) = c_0(1-\rho)$ olur. Dolayısıyla

$$R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a}\left(1 - \frac{r}{2a}\right)e^{-r/2a} \qquad [4.82]$$

dir [farklı n ve l kuantum sayıları için $\{c_j\}$ açılım katsayılarının tamamıyla farklı olduğuna dikkat ediniz]. $l = 1$ ise tekrarlama bağıntısı tek bir terimden sonra kesilir ve $v(\rho)$ sabit olur. Böylece R_{21}

$$R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2}re^{-r/2a} \qquad [4.83]$$

olarak bulunur (her bir durum için c_0 sabiti normlamayla bulunur, 4.11 nolu probleme bakınız).

Keyfi bir n için, l'nin mümkün değerleri (4.67 nolu denklemle ile uyumlu):

$$l = 0, 1, 2, \ldots, n-1 \qquad [4.84]$$

Her bir l değeri için m'nin alabileceği $(2l + 1)$ tane mümkün değer olduğundan (4.29 nolu denklem) E_n enerji düzeyinin toplam katlılık (çokkatlılık, çakışıklık) derecesi

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \qquad [4.85]$$

olur. 4.76 nolu denklemle verilen tekrarlama bağıntısıyla tanımlanan $v(\rho)$ polinomu normlama sabiti dışında uygulamalı matematikçiler tarafından oldukça iyi bilinen bir fonksiyondur. $v(\rho)$ fonksiyonu

$$v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho), \qquad [4.86]$$

şeklinde yazılabilir. Burada

$$L_{q-p}^{p}(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x) \qquad [4.87]$$

olarak verilen **assosiye Laguerre polinomudur**. L_q ise q-uncu **Laguerre polinomudur**[16] ve

$$L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q \left(e^{-x}x^q\right) \qquad [4.88]$$

olarak tanımlanır. İlk birkaç Laguerre polinomu 4.5 nolu tabloda, birkaç assosiye Laguerre polinomu ise 4.6 nolu tabloda verilmiştir. İlk birkaç radyal dalga fonksiyonu 4.7 nolu tabloda listelenmiş ve bunların grafikleri 4.4 nolu şekilde verilmiştir. Hidrojenin normlanmış dalga fonksiyonları:[17]

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\, e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na)\right] Y_l^m(\theta, \phi). \qquad [4.89]$$

Fonksiyonlar oldukça karışık gözükmekle birlikte şikâyet etmemeliyiz. Hidrojen atomu kapalı formda kesin çözümü olan birkaç gerçekçi sistemden biridir. Dalga fonksiyonları her üç kuantum sayısına da bağlı iken, *enerji düzeylerinin* (4.70 nolu denklem) yalnızca n ile belirlendiğine dikkat ediniz. Bu Coulomb potansiyeline özgü bir özelliktir. Küresel kuyu probleminde, enerjilerin l'ye de bağımlı olduğunu

[16] Literatürde birbirine rakip olan farklı normlama uzlaşımları vardır. Burada en standart olanı kullandık.

[17] Normlama sabitinin nasıl hesaplandığını görmek istiyorsanız, L. Schiff, *Quantum Mechanics*, 2nd ed., (Mc Graw Hill, New York, 1968), 93. sayfaya bakınız.

TABLO 4.5: İlk birkaç $L_q(x)$ Laguerre polinomu.

$L_0 = 1$
$L_1 = -x + 1$
$L_2 = x^2 - 4x + 2$
$L_3 = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6$
$L_4 = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24$
$L_5 = -x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120$
$L_6 = x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720$

TABLO 4.6: Birkaç $L_{q-p}^{p}(x)$ assosiye Laguerre polinomu.

$L_0^0 = 1$	$L_0^2 = 2$
$L_1^0 = -x + 1$	$L_1^2 = -6x + 18$
$L_2^0 = x^2 - 4x + 2$	$L_2^2 = 12x^2 - 96x + 144$
$L_0^1 = 1$	$L_0^3 = 6$
$L_1^1 = -2x + 4$	$L_1^3 = -24x + 96$
$L_2^1 = 3x^2 - 18x + 18$	$L_2^3 = 60x^2 - 600x + 1200$

(4.50 nolu denklem) hatırlayalım. Dalga fonksiyonları birbirlerine ortogonaldir. Yani;

$$\int \psi_{nlm}^* \psi_{n'l'm'}\, r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}. \qquad [4.90]$$

Bu sonuç küresel harmoniklerin ortogonal olmasından (4.33 nolu denklem) ve $n \neq n'$ için dalga fonksiyonlarının H'nın farklı özdeğerlerine karşılık olan özfonksiyonları olmaları gerçeğinden elde edilir.

Hidrojenin dalga fonksiyonlarını gözümüzde canlandırmak çok kolay değildir. Kimyacılar, bulutun parlaklığının $|\psi|^2$ ile orantılı olduğu "yoğunluk grafikleri" (4.5 nolu şekil) çizmeyi tercih ederler. Daha niceliksel ama okuması daha zor olan, sabit olasılık yoğunluğu yüzeyleridir (4.6 nolu şekil).

***Problem 4.10** 4.76 nolu denklemle verilen tekrarlama bağıntısını kullanarak, R_{30}, R_{31} ve R_{32} radyal dalga fonksiyonlarını belirleyin. Normlama işlemi için endişe etmeyin.

TABLO 4.7: Hidrojen atomu için ilk birkaç $R_{nl}(r)$ radyal dalga fonksiyonu.

$R_{10} = 2a^{-3/2}\exp(-r/a)$
$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}a^{-3/2}\left(1-\frac{1}{2}\frac{r}{a}\right)\exp(-r/2a)$
$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}a^{-3/2}\frac{r}{a}\exp(-r/2a)$
$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}a^{-3/2}\left(1-\frac{2}{3}\frac{r}{a}+\frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\exp(-r/3a)$
$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}a^{-3/2}\left(1-\frac{1}{6}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)\exp(-r/3a)$
$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\exp(-r/3a)$
$R_{40} = \frac{1}{4}a^{-3/2}\left(1-\frac{3}{4}\frac{r}{a}+\frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)\exp(-r/4a)$
$R_{41} = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}}a^{-3/2}\left(1-\frac{1}{4}\frac{r}{a}+\frac{1}{80}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\frac{r}{a}\exp(-r/4a)$
$R_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}}a^{-3/2}\left(1-\frac{1}{12}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)^2\exp(-r/4a)$
$R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3\exp(-r/4a)$

***Problem 4.11**

(a) R_{20}'yi (4.82 nolu denklem) normlayarak ψ_{200} fonksiyonunu kurun.

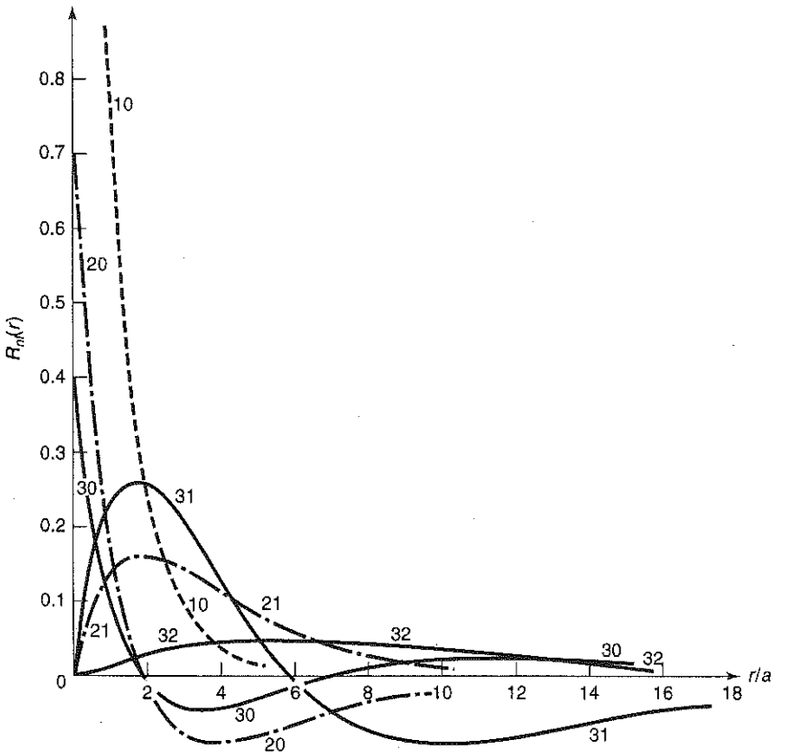
(b) R_{21}'i (4.83 nolu denklem) normlayın ve ψ_{211}, ψ_{210} ve $\psi_{21\text{-}1}$ fonksiyonlarını kurun.

***Problem 4.12**

(a) 4.88 nolu denklemi kullanarak ilk dört Laguerre polinomunu kurun.

(b) 4.86, 4.87 ve 4.88 nolu denklemleri kullanarak, $n = 5$, $l = 2$ durumu için $\upsilon(\rho)$ 'yu bulun.

(c) $n = 5$, $l = 2$ durumu için, 4.76 nolu denklemle verilen tekrarlama bağıntısından hareketle $\upsilon(\rho)$ 'yu yine bulun.



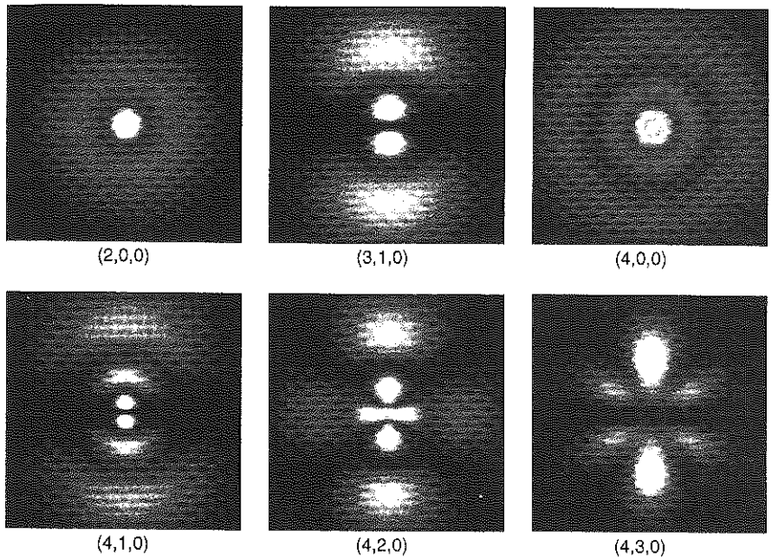
ŞEKİL 4.4: Hidrojenin ilk birkaç radyal dalga fonksiyonu $R_{nl}(r)$'nin grafikleri.

***Problem 4.13**

(a) Hidrojenin taban durumundaki bir elektron için, $\langle r\rangle$ ve $\langle r^2\rangle$'yi bulunuz. Yanıtınızı Bohr yarıçapı cinsinden veriniz.

(b) Hidrojenin taban durumundaki bir elektron için $\langle x\rangle$ ve $\langle x^2\rangle$'yi bulunuz. *Yardım:* Bu problem yeni bir integrasyon gerektirmiyor. $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ olduğuna dikkat edin ve taban durumunun simetrisini kullanın.

(c) $n = 2$, $l = 1$, $m = 1$ durumunda $\langle x^2\rangle$'yi bulunuz. *Uyarı:* Bu durum x, y ve z'ye göre simetrik değildir. $x = r\sin\theta\cos\phi$ olduğunu hatırlayın.



ŞEKİL 4.5: Hidrojenin dalga fonksiyonları (*n*, *l*, *m*) için yoğunluk grafikleri. Her bir grafiğin (düşey) *z* ekseni etrafında döndürüldüğünü düşünün. Dauger Research, "Atom in a Box" v1.0.8'in izniyle basılmıştır. http://dauger.com web sitesini ziyaret ederek kendi grafiklerinizi oluşturabilirsiniz.

Problem 4.14 Hidrojen atomunun taban durumunda *en olası r* değeri nedir? (Yanıt sıfır değil!) *Yardım:* Öncelikle elektronun merkezden *r* ile $r + dr$ arasında bulunma olasılığı için bir ifade bulun.

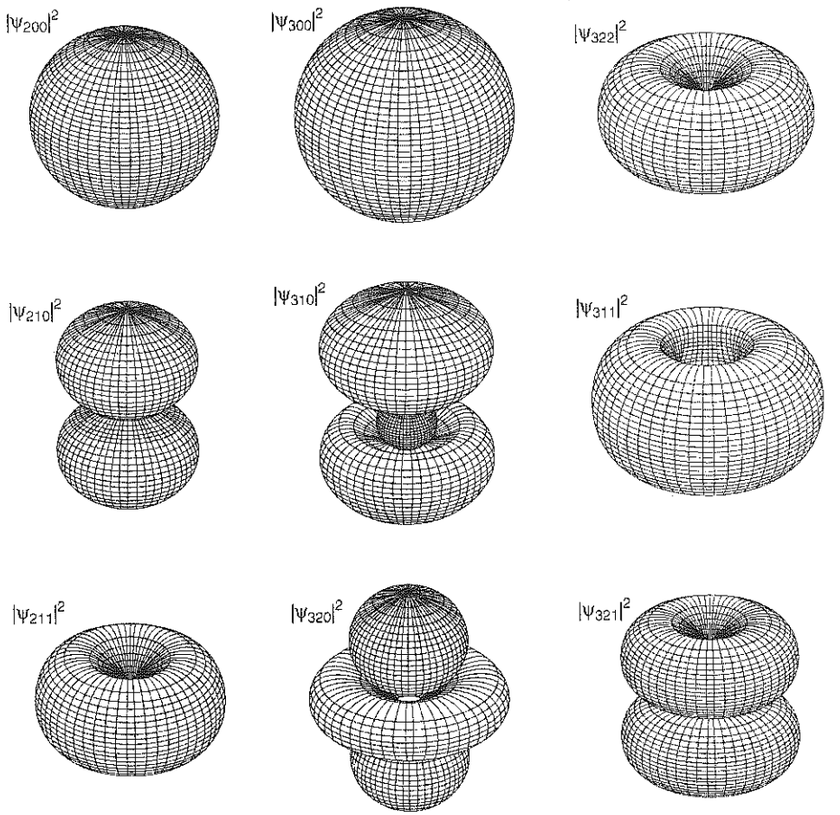
Problem 4.15 Bir hidrojen atomunun başlangıç dalga fonksiyonu, $n = 2$, $l = 1$ $m = 1$ ve $n = 2$, $l = 1$, $m = -1$ kararlı durumlarının lineer bir kombinasyonudur. Yani

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1})$$

dir.

(a) $\Psi(\mathbf{r}, t)$'yi kurarak mümkün olduğu kadar basitleştiriniz.

(b) Potansiyel enerjinin beklenen değeri $\langle V \rangle$'yi bulunuz. (Bu değer *t*'ye bağımlı mıdır?) Yanıtınızı hem parametrik hem de elektron volt (eV) cinsinden sayısal olarak veriniz.



ŞEKİL 4.6: Hidrojenin ilk birkaç dalga fonksiyonu için sabit $|\Psi|^2$ yüzeyleri. Siegmund Brandt and Hans Dieter Dahmen, *The Picture Book of Quantum Mechanics*, 3 rd. ed., Springer, New York (2001)'in izniyle basılmıştır.

4.2.2 Hidrojen Atomunun Spektrumu

İlke olarak, bir hidrojen atomunu herhangi bir Ψ_{nlm} kararlı durumunda bırakırsanız daima orada kalacaktır. Bununla beraber, hidrojeni başka bir atomla çarpıştırarak ya da üzerine ışık göndererek uyarırsanız elektron diğer bir kararlı duruma **geçiş** yapar. Bu geçiş ya enerji *soğurup* daha yüksek enerjili duruma giderek ya da enerjiyi

elektromanyetik ışıma şeklinde *vererek* daha düşük enerjili bir duruma inerek gerçekleşir.[18] Pratikte, bu tür tedirgemeler *her zaman* mevcuttur. Bazen "kuantum sıçramaları" da denilen bu geçişler sürekli olarak meydana gelir. Sonuç olarak bir kap dolusu hidrojen, enerjisi başlangıç ve son durumlar arasındaki enerji *farkına* eşit olan ışık (yani fotonlar) yayımlar:

$$E_\gamma = E_i - E_f = -13.6 \text{ eV}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right). \qquad [4.91]$$

Planck formülüne göre[19] bir fotonun enerjisi frekansıyla doğru orantılıdır:

$$E_\gamma = h\nu. \qquad [4.92]$$

Öte yandan *dalga boyu* $\lambda = c/\nu$ olduğundan

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \qquad [4.93]$$

olur. Burada R

$$R \equiv \frac{m}{4\pi c\hbar^3}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \qquad [4.94]$$

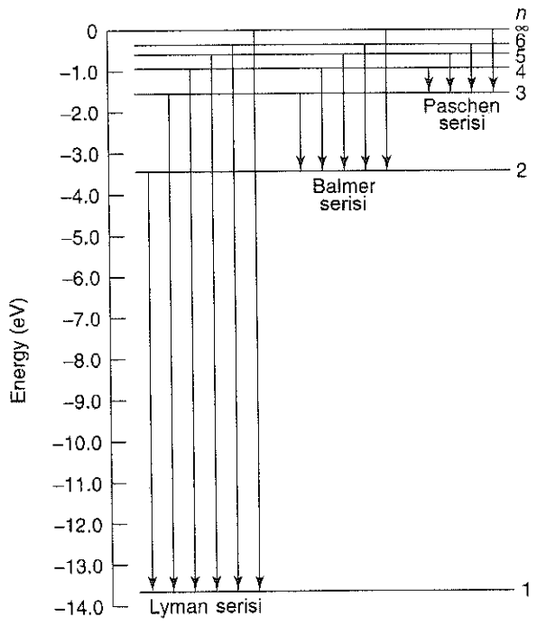
dir ve **Rydberg sabiti** olarak adlandırılır. 4.93 nolu denklem, hidrojenin spektrumunu veren **Rydberg formülüdür**. Bu formül ondokuzuncu yüzyılda deneysel olarak bulunmuştur. Bohr teorisinin en büyük zaferi bu sonucu açıklayabilmesi ve R'yi doğanın temel sabitleri cinsinden hesaplayabilmesidir. Taban durumuna geçişler ($n_f = 1$) morötesi bölgede yer alırlar ve spektroskopistlerce **Lyman serisi** olarak adlandırılır. İlk uyarılmış duruma geçişler ($n_f = 2$) görünür bölgede yer alır ve **Balmer serisini** meydana getirir. $n_f = 3$ durumuna geçişler (**Paschen serisi**) kızıl ötesi bölgededir (4.7 nolu şekil). (Oda sıcaklığında çoğu hidrojen atomu taban durumundadır ve yayımlama (ışıma) spektrumunu elde etmek için çeşitli uyarılmış durumlardaki atom sayısını arttırmalısınız; tipik olarak bu işlem gazın içinden elektrik akımı geçirilerek yapılır.)

***Problem 4.16 Hidrojenimsi atom** Z tane protonu olan bir çekirdeğin etrafında dönen tek bir elektrondan oluşur ($Z = 1$ hidrojenin kendisi, $Z = 2$ iyonlaşmış helyum, $Z = 3$ iki kez iyonlaşmış lityum vb.) Hidrojenimsi bir atom için $E_n(Z)$ Bohr enerjilerini, $E_1(Z)$ bağlanma enerjisini, $a(Z)$ Bohr yarıçapını ve $R(Z)$ Rydberg sabitini belirleyiniz. Yanıtlarınızı hidrojene ait değerlerin uygun katları şeklinde ifade ediniz. $Z = 2$ ve $Z = 3$ için Lyman serisi elektromanyetik spektrumun hangi bölgesindedir? *Yardım:* Bu problemde çok fazla *hesaplama* yoktur. 4.52 nolu denklemle verilen potansiyelde $e^2 \to Ze^2$ yazılmalıdır. O zaman tüm yapmanız gereken şey tüm sonuçlarda benzer bir atama işlemi olacaktır.

---

[18] Doğası gereği bu süreç zamana bağımlı bir etkileşmeyi gerektirir, ancak daha fazla detay için 9. Bölüme kadar beklemek zorundayız. Buradaki amacımız için gerçek mekanizma önemli değil.

[19] Foton elektromanyetik ışımanın kuantumudur. Relativistik olduğundan, relativistik olmayan kuantum mekaniğinin kapsamı dışında kalır. Foton enerjisi için Planck formülünü kullanmak yararlı olsa da bunun geliştirdiğimiz teorinin dışında olduğunu unutmamalıyız.



ŞEKİL 4.7: Hidrojenin enerji düzeyleri ve spektrumundaki geçişler.

Problem 4.17 Dünya-güneş sistemini hidrojen atomunun kütleçekimsel benzeri olarak göz önüne alalım.

(a) Potansiyel enerji fonksiyonu nedir? (4.52 nolu denklemin yerine ne yazılacaktır?) (dünyanın kütlesini m, güneşin kütlesini M ile gösteriniz)

(b) Bu sistem için a_g "Bohr yarıçapı" nedir? Sayısal değerini hesaplayın.

(c) Kütleçekimsel "Bohr formülünü" yazınız. E_n'i, r_0 yarıçaplı dairesel bir yörüngede dolanan bir gezegenin klasik enerjisine eşitleyerek, $n = \sqrt{r_0/a_g}$ olduğunu gösterin. Buradan hareketle dünyanın n kuantum sayısını belirleyin.

(d) Dünyanın $(n-1)$ düzeyine bir geçiş yaptığını düşünelim. Bu geçişte bırakılan enerji Joule cinsinden ne kadardır? Salınan fotonun (muhtemelen gravitonun) dalga boyu nedir? Yanıtınızı ışık yılı cinsinden ifade ediniz. Bu dikkate değer yanıt[20] bir tesadüf müdür?

4.3 AÇISAL MOMENTUM

Önceki kesimde gördüğümüz gibi hidrojen atomunun kararlı (durağan) durumları üç tane kuantum sayısı (n, l, m) ile belirlenir. Temel kuantum sayısı (n) durumların enerjilerini (4.70 nolu denklem) belirlerken, l ve m sayıları yörüngesel açısal momentumla ilgilidir. Merkezsel kuvvetlerin klasik teorisinde, enerji ve açısal momentum temel korunan büyüklüklerdir. Bu nedenle, açısal momentumun kuantum teorisinde de *önemli* bir rol oynaması sürpriz değildir.

Klasik olarak bir parçacığın orijine göre açısal momentumu

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \qquad [4.95]$$

formülüyle verilir. Bileşenler cinsinden

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x \qquad [4.96]$$

şeklindedir. Karşılık olan kuantum operatörleri standart atamayla, yani $p_x \to -i\hbar\,\partial/\partial x$, $p_y \to -i\hbar\partial/\partial y$, $p_z \to -i\hbar\partial/\partial z$ ile elde edilir. Bu kesimde açısal momentum operatörlerinin özdeğerlerini, 2. Bölümde harmonik salınıcının izin verilen enerji değerlerini elde ederken kullandığımız cebirsel yönteme benzeyen bir yöntemle elde edeceğiz. Yöntem sıra değiştirme bağıntılarının akıllıca kullanımına dayanıyor. Sonraki aşamada daha zor bir problem olan özfonksiyonların belirlenmesi problemine döneceğiz.

4.3.1 Özdeğerler

L_x ve L_y operatörleri sıra değiştirmezler. Bunu görelim[21];

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z]. \end{aligned} \qquad [4.97]$$

[20] John Meyer'e bu noktayı vurguladığı için teşekkür ederim.

[21] Kuantum mekaniğinde karşılaştığımız tüm operatörlerin toplamaya göre *dağılma* özelliğine sahip olduklarına (1. Bölüm, 15. dipnot) dikkat ediniz. $A(B+C) = AB + AC$, özellikle: $[A, B+C] = [A, B] + [A, C]$.

4.10 nolu denklemle verilen kanonik sıra değiştirme bağıntılarından yalnızca x'in p_x ile, y'nin p_y ile ve z'nin p_z ile sıra değiştirmediğini biliyoruz. Böylece ortadaki iki terim sıfır olur ve

$$[L_x, L_y] = yp_x[p_z, z] + xp_y[z, p_z] = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \qquad [4.98]$$

bulunur. Şüphesiz $[L_y, L_z]$ ya da $[L_z, L_x]$ komütatörleriyle de başlayabilirdik. Ancak bunları ayrı ayrı hesaplamaya gerek yoktur. Sıra değiştirme bağıntıları indislerin çevrimsel döngüsüyle ($x \to y$, $y \to z$, $z \to x$) hemen yazılabilir:

$$\boxed{[L_x, L_y] = i\hbar L_z; \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x; \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y} \qquad [4.99]$$

Bunlar açısal momentum için temel sıra değiştirme bağıntılarıdır ve her şey bu bağıntılardan elde edilebilir.

L_x, L_y ve L_z'nin *uyuşumsuz* gözlenebilirler olduklarına dikkat ediniz. Genelleştirilmiş belirsizlik ilkesine (3.62 nolu denklem) göre

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle i\hbar L_z\rangle\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4}\langle L_z\rangle^2$$

olur ya da

$$\sigma_{L_x}\sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2}|\langle L_z\rangle| \qquad [4.100]$$

dir. Bu nedenle L_x ve L_y'nin ortak özfonksiyonları olan durumları aramak boşunadır. Öte yandan, *toplam* açısal momentumun *karesi*

$$L^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, \qquad [4.101]$$

L_x ile sıra değiştirir:

$$\begin{aligned}[L^2, L_x] &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z \\ &= L_y(-i\hbar L_z) + (-i\hbar L_z)L_y + L_z(i\hbar L_y) + (i\hbar L_y)L_z \\ &= 0. \end{aligned}$$

(Burada komütatörleri sadeleştirmek için 3.64 nolu denklem kullanılmıştır. Herhangi bir operatörün *kendisiyle* sıra değiştirdiğine dikkat ediniz). L^2'nin L_y ve L_z ile de sıra değiştirdiğini göstermek zor değildir. Yani

$$[L^2, L_x] = 0, \quad [L^2, L_y] = 0, \quad [L^2, L_z] = 0 \qquad [4.102]$$

dir.

Ya da kısaca

$$[L^2, \mathbf{L}] = 0 \qquad [4.103]$$

yazılabilir. Böylece L^2, $\mathbf{L}$'nin her bir bileşeniyle uyuşumludur ve L^2 ile (örneğin) L_z'nin ortak özdurumlarını bulabiliriz. L^2 ile L_z'nin özdurum denklemlerini

$$L^2 f = \lambda f \quad \text{ve} \quad L_z f = \mu f \qquad [4.104]$$

şeklinde yazalım.

2.3.1. Kesimde harmonik salınıcı için yaptığımıza çok benzeyen "merdiven operatörü" yöntemini kullanacağız. Bu amaçla

$$\boxed{L_\pm \equiv L_x \pm iL_y} \qquad [4.105]$$

operatörlerini tanımlayalım. Bunların L_z ile komütatörünü hesaplayalım:

$$[L_z, L_\pm] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y] = i\hbar L_y \pm i(-i\hbar L_x) = \pm \hbar(L_x \pm iL_y)$$

ve böylece

$$[L_z, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm \qquad [4.106]$$

bulunur. Ayrıca

$$[L^2, L_\pm] = 0 \qquad [4.107]$$

dir. f, L^2 ve L_z'nin bir özfonksiyonuysa, $L_\pm f$'nin de bir özfonksiyon olduğunu iddia ediyoruz. 4.107 nolu denklem yardımıyla

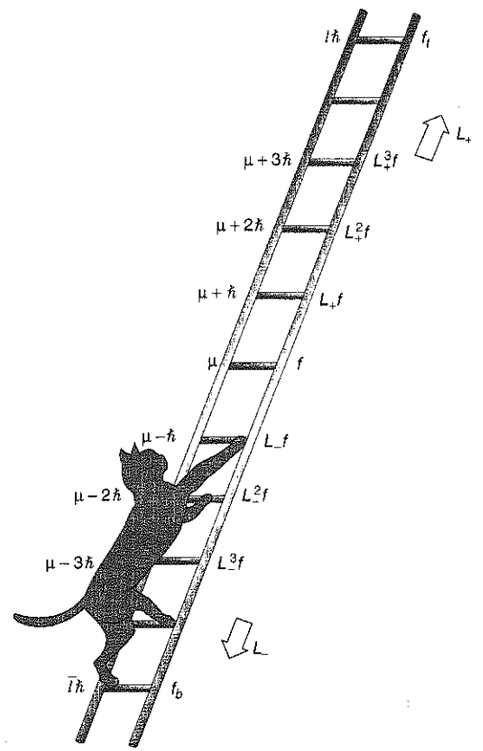
$$L^2(L_\pm f) = L_\pm(L^2 f) = L_\pm(\lambda f) = \lambda(L_\pm f) \qquad [4.108]$$

bulunur. Yani $L_\pm f$, L^2'nin aynı λ özdeğerine karşılık olan özfonksiyonudur. 4.106 nolu denklem kullanılarak

$$\begin{aligned} L_z(L_\pm f) &= (L_z L_\pm - L_\pm L_z) f + L_\pm L_z f = \pm \hbar L_\pm f + L_\pm(\mu f) \\ &= (\mu \pm \hbar)(L_\pm f) \end{aligned} \qquad [4.109]$$

elde edilir. Böylece, $L_\pm f$, L_z'nin $(\mu \pm \hbar)$ özdeğerine karşılık olan özfonksiyonudur. L_+, L_z'nin özdeğerini $\hbar$ kadar arttırdığı için, L_+'ya "kaldırma" operatörü, L_-'ye de, özdeğeri $\hbar$ kadar azalttığı için "indirme" operatörü denilir.

λ'nın verilen bir değeri için durumların "merdiven yapısını" elde edebiliriz. Her bir "basamak" komşularından L_z'nin özdeğerinden bir $\hbar$ birimi kadar farklıdır (4.8 nolu şekil). Merdivene tırmanmak için kaldırma operatörünü, inmek için indirme



ŞEKİL 4.8: Açısal momentum durumlarının "merdiven" yapısı.

operatörünü uygularız. Ama bu süreç sonsuza kadar süremez. Er geç z-bileşeninin toplam açısal momentumu geçtiği bir duruma ulaşırız ve bu tür durumlar imkânsızdır.[22] O zaman

$$L_+ f_{en\ddot{u}b} = 0 \qquad [4.110]$$

ile belirlenen[23] bir "en üst basamak" $f_{en\ddot{u}b}$ bulunmalıdır.

[22] Formel olarak, $\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle$, ancak $\langle L_x^2 \rangle = \langle f \,|\, L_x^2 f \rangle = \langle L_x f \,|\, L_x f \rangle \geq 0$ (benzer koşul L_y için de doğrudur). Böylece $\lambda = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \mu^2 \geq \mu^2$ dir.

[23] Aslında çıkarabileceğimiz tüm sonuç $L_+ f_{en\ddot{u}b}$'nin *normlanamayacağıdır*. Normun değeri sıfır yerine sonsuz olabilir. 4.18 nolu problemde bu seçenek araştırılacaktır.

Bu en üst basamakta L_z'nin özdeğerini $\hbar l$ ile gösterelim ("l" harfinin niçin uygun bir seçim olduğu birazdan ortaya çıkacak):

$$L_z f_{e\ddot{u}b} = \hbar l f_{e\ddot{u}b}; \quad L^2 f_{e\ddot{u}b} = \lambda f_{e\ddot{u}b} \qquad [4.111]$$

Ayrıca

$$L_\pm L_\mp = (L_x \pm iL_y)(L_x \mp iL_y) = L_x^2 + L_y^2 \mp i(L_x L_y - L_y L_x)$$
$$= L^2 - L_z^2 \mp i(i\hbar L_z)$$

olduğundan L^2'yi L_+ ve L_- cinsinden

$$L^2 = L_\pm L_\mp + L_z^2 \mp \hbar L_z. \qquad [4.112]$$

şeklinde yazmak mümkündür. 4.112 nolu denklem yardımıyla

$$L^2 f_{e\ddot{u}b} = (L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z) f_{e\ddot{u}b} = (0 + \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l) f_{e\ddot{u}b} = \hbar^2 l(l+1) f_{e\ddot{u}b}$$

elde edilir. Böylece

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1) \qquad [4.113]$$

bulunur. Bu ifade bize L^2'nin özdeğerini L_z'nin *maksimum* özdeğeri cinsinden vermektedir.

Öte yandan, benzer sebeplerle

$$L_- f_{eab} = 0 \qquad [4.114]$$

ile verilen bir *en alt basamak* mevcuttur. $\hbar\bar{l}$, L_z'nin bu en alt basamaktaki özdeğeri olsun:

$$L_z f_{eab} = \hbar\bar{l} f_{eab} \qquad L^2 f_{eab} = \lambda f_{eab} \qquad [4.115]$$

4.112 nolu denklem kullanılarak

$$L^2 f_{eab} = (L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z) f_{eab} = (0 + \hbar^2 \bar{l}^2 - \hbar^2 \bar{l}) f_{eab} = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l} - 1) f_{eab}$$

bulunur. Böylece

$$\lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l} - 1) \qquad [4.116]$$

elde edilir. 4.113 ve 4.116 nolu denklemler karşılaştırıldığında, $l(l+1) = \bar{l}(\bar{l} - 1)$ olduğu görülür. Bu durumda ya $\bar{l} = l + 1$ (bu anlamsızdır, çünkü en alt basamak en üst basamaktan büyük olamaz) ya da

$$\bar{l} = -l \qquad [4.117]$$

dir.

Açıkça L_z'nin özdeğerleri $m\hbar$ ile verilir (bu harfinin seçiminin niçin uygun olduğu birazdan ortaya çıkacaktır) ve m, $-l$'den $+l$'ye N tane tamsayı adımla gider. Özellikle $l = -l + N$ dir ve buradan $l = N/2$ bulunur. Böylelikle l bir *tamsayı* ya da *yarım tamsayı* olmalıdır. Özfonksiyonlar l ve m sayılarıyla karakterize edilirler:

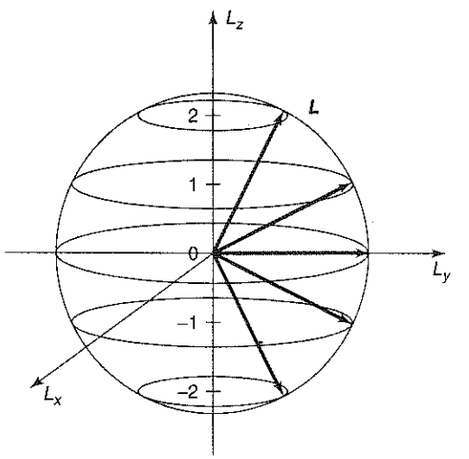
$$\boxed{L^2 f_l^m = \hbar^2 l(l+1) f_l^m; \quad L_z f_l^m = \hbar m f_l^m} \qquad [4.118]$$

Burada

$$l = 0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2,\ \ldots; \quad m = -l,\ -l+1,\ \ldots,\ l-1,\ l \qquad [4.119]$$

dir. l'nin verilen bir değeri için m'nin $(2l+1)$ farklı değeri vardır yani "merdivende" $2l+1$ tane "basamak" vardır.

Bazı kişiler buradaki sonucu 4.9 nolu şekilde verilen ($l = 2$ durumu için çizilmiştir) diyagramla göstermeyi tercih ederler. Oklar mümkün açısal momentum vektörlerini temsil etmektedir. $\hbar$ birimlerinde tümünün uzunluğu aynıdır ve $\sqrt{l(l+1)}$'ye eşittir (bu örnekte $\sqrt{6} = 2.45$). z bileşenlerinin izin verilen değerleri m ile (–2, –1, 0, 1, 2) verilir. Vektörlerin büyüklüklerinin (kürenin yarıçapı) en büyük z bileşeninden daha büyük olduğuna dikkat ediniz (genel olarak, $l = 0$ "aşikâr" durumu hariç, $\sqrt{l(l+1)} > l$). Yani, açısal momentum vektörü hiçbir zaman tam z yönünde olamaz. İlk bakışta biraz saçma geliyor. "Niçin eksenlerimizi açısal momentum vektörü z yönünde olacak şekilde *seçemiyoruz*?" Aslında bunu yapabilmemiz için her üç bileşeni de aynı anda bilmek zorundayız ve belirsizlik ilkesi (4.100 nolu denklem) bunun imkansız olduğunu söyler.



ŞEKİL 4.9: $l = 2$ için açısal momentum durumları.

"Tamam, kabul, ama arada sırada da olsa, z eksenim ile **L**'nin aynı yönde olmalarını *istesem*." Hayır, hayır! Bir noktayı gözden kaçırıyorsunuz: Bu sadece **L**'nin her üç bileşenini bilmemekten kaynaklanmıyor; üç tane bileşen zaten yok. Nasıl ki bir parçacık aynı anda belli bir konum ve momentum değerine sahip olamaz ise, kesin bir açısal momentum vektörüne de sahip olamaz. L_z'nin iyi tanımlanmış bir değeri varsa, o zaman L_x ve L_y tam olarak belirli olamazlar. Bu yüzden vektörleri 4.9 nolu şekildeki gibi *çizmek* bile yanıltıcı olabilir. Bu nedenle, L_x ve L_y'nin tamamen belirsiz olduklarını göstermek için şekil üzerinde yapılabilecek en iyi şey vektörleri enlem çizgileri boyunca döndürmektir.

Umarım açısal momentum için temel sıra değiştirme bağıntılarından (4.99 nolu denklem) başlayarak, özfonksiyonların kendilerini görmeden *tamamen cebirsel* yöntemlerle L^2 ve L_z'nin özdeğerlerini belirlemiş olmamız sizi etkilemiştir. Artık özfonksiyonların kurulması problemine geçebiliriz. Ama bunun oldukça karışık bir işlem olduğunu hatırlatmalıyım. Yine de şu kadarını söyleyelim: $f_l^m = Y_l^m$. L^2 ve L_z'nin özfonksiyonları 4.1.2. Kesimde tamamen farklı bir yol izleyerek bulduğumuz eski küresel harmoniklerden başka bir şey değildir (kuşkusuz tamamen bu nedenle l ve m harflerini seçtik). Artık küresel harmoniklerin niçin birbirlerine ortogonal olduklarını söyleyebiliriz. Bu fonksiyonlar hermitsel L^2 ve L_z operatörlerinin ayrık özdeğerlerine karşılık olan özfonksiyonlardır (3.3.1. Kesim, 2. Teorem).

***Problem 4.18** Kaldırma ve indirme operatörleri m'nin değerini birer birer arttırır ya da azaltır. Yani

$$L_\pm f_l^m = (A_l^m) f_l^{m\pm 1} \qquad [4.120]$$

dir. Burada A_l^m bir sabittir. *Soru:* Özfonksiyonlar normlanmışsalar, A_l^m nedir? *Yardım:* İlk olarak $L_\mp$'nın, $L_\pm$'nın hermitsel eşleniği olduğunu gösteriniz (L_x ve L_y gözlenebilir büyüklükler olduklarından bunlar hermitseldir. İsterseniz bunu kanıtlayabilirsiniz). Ardından 4.112 nolu denklemi kullanın. *Yanıt:*

$$A_l^m = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)} = \hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}. \qquad [4.121]$$

Merdivenin en üst ve en alt basamaklarında ne olur? (yani L_+'yı f_l^l'ye ya da L_-'yi f_l^{-l}'ye uygularsanız ne olur?)

***Problem 4.19**

(a) Konum ve momentum için kanonik sıra değiştirme bağıntılarından (4.10 nolu denklem) başlayarak aşağıdaki komütatörleri gerçekleyiniz.

$$\begin{aligned} &[L_z, x] = i\hbar y, \quad [L_z, y] = -i\hbar x, \quad [L_z, z] = 0, \\ &[L_z, p_x] = i\hbar p_y, \quad [L_z, p_y] = -i\hbar p_x, \quad [L_z, p_z] = 0. \end{aligned} \qquad [4.122]$$

(b) 4.96 nolu denklemi ve bu sonuçları kullanarak, $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$'yi elde ediniz.

(c) $[L_z, r^2]$ ve $[L_z, p^2]$ komütatörlerini hesaplayınız. Burada $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ve $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ dir.

(d) V yalnızca r'ye bağımlıysa Hamiltonyen $H = (p^2/2m) + V$'nin **L**'nin üç bileşeniyle de sıra değiştirdiğini gösteriniz (Böylelikle H, L^2 ve L_z uyuşumlu gözlenebilirler olurlar).

****Problem 4.20**

(a) $V(\mathbf{r})$ potansiyeli içindeki bir parçacık için yörüngesel açısal momentum **L**'nin beklenen değerinin zamanla değişim oranının torkun beklenen değerine eşit olduğunu kanıtlayınız. Yani;

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{L}\rangle = \langle \mathbf{N}\rangle$$

Burada

$$\mathbf{N} = \mathbf{r} \times (-\nabla V)$$

dir. Bu Ehrenfest teoreminin dönme hareketindeki karşılığıdır.

(b) Herhangi bir küresel simetrik potansiyel için $d\langle \mathbf{L}\rangle/dt = 0$ olduğunu gösteriniz (Bu **açısal momentum korunumunun** kuantum mekaniksel ifadesidir).

4.3.2. Özfonksiyonlar

Öncelikle, L_x L_y ve L_z'in küresel koordinatlardaki ifadelerini yazmalıyız. $\mathbf{L} = (\hbar/i)(\mathbf{r} \times \nabla)$ olarak yazarsak, gradyent operatörünün küresel koordinatlardaki şekli[24]

$$\nabla = \hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}; \qquad [4.123]$$

kullanılabilir. Ayrıca $\mathbf{r} = r\hat{r}$ olduğundan,

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}\left[r(\hat{r}\times\hat{r})\frac{\partial}{\partial r} + (\hat{r}\times\hat{\theta})\frac{\partial}{\partial \theta} + (\hat{r}\times\hat{\phi})\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\right]$$

bulunur.

---

[24] George Arfken and Hans-Jurgen Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 5th ed., Academic Press, Orlando (2000), 2.5. Kesim

$(\hat{r}\times\hat{r})=0$, $(\hat{r}\times\hat{\theta})=\hat{\phi}$ ve $(\hat{r}\times\hat{\phi})=-\hat{\theta}$ olduğundan (4.1 nolu şekil),

$$\mathbf{L}=\frac{\hbar}{i}\left(\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta}-\hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \qquad [4.124]$$

şeklini alır. $\hat{\theta}$ ve $\hat{\phi}$ birim vektörleri kartezyen bileşenleri cinsinden yazılabilir:

$$\hat{\theta}=(\cos\theta\cos\phi)\hat{\imath}+(\cos\theta\sin\phi)\hat{\jmath}-(\sin\theta)\hat{k}; \qquad [4.125]$$

$$\hat{\phi}=-(\sin\phi)\hat{\imath}+(\cos\phi)\hat{\jmath}. \qquad [4.126]$$

Böylelikle, **L** operatörü şu şekilde bulunmuş olur:

$$\mathbf{L}=\frac{\hbar}{i}\left[(-\sin\phi\,\hat{\imath}+\cos\phi\,\hat{\jmath})\frac{\partial}{\partial\theta}\right.$$
$$\left.-(\cos\theta\cos\phi\,\hat{\imath}+\cos\theta\sin\phi\,\hat{\jmath}-\sin\theta\,\hat{k})\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right].$$

Açıkça bileşenler

$$L_x=\frac{\hbar}{i}\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \qquad [4.127]$$

$$L_y=\frac{\hbar}{i}\left(+\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \qquad [4.128]$$

ve

$$\boxed{L_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}} \qquad [4.129]$$

şeklindedir. Ayrıca kaldırma ve indirme operatörlerini küresel koordinatlarda ifade etmeliyiz:

$$L_\pm=L_x\pm iL_y=\frac{\hbar}{i}\left[(-\sin\phi\pm i\cos\phi)\frac{\partial}{\partial\theta}-(\cos\phi\pm i\sin\phi)\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right].$$

$\cos\phi\pm i\sin\phi=e^{\pm i\phi}$ olduğunu kullanalım ve böylece

$$L_\pm=\pm\hbar e^{\pm i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \qquad [4.130]$$

bulunur. Özellikle (4.21(a) nolu problem)

$$L_+L_-=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+i\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \qquad [4.131]$$

şeklini alır ve L^2

$$\boxed{L^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]} \qquad [4.132]$$

olarak bulunur.

Artık $f_l^m(\theta,\phi)$'yi bulabiliriz. Bu L^2'nin $\hbar^2l(l+1)$ özdeğerine karşılık olan özfonksiyondur. Yani;

$$L^2f_l^m=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]f_l^m=\hbar^2l(l+1)f_l^m.$$

Bu ifade tam olarak 4.18 nolu denklemdeki "açısal denklem" dir. f_l^m ayrıca L_z'nin $m\hbar$ özdeğerine karşılık olan özfonksiyondur yani

$$L_zf_l^m=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}f_l^m=\hbar mf_l^m$$

dir. Bu da 4.21 nolu azimut denklemidir. Bu denklem sistemini zaten çözmüştük. *Çözümler* uygun olarak normlanmış küresel harmonikler $Y_l^m(\theta,\phi)$ dir. *Sonuç:* küresel harmonikler L^2 ve L_z'nin ortak özfonksiyonlarıdır. 4.1. Kesimde değişkenlere ayırma yöntemiyle Schrödinger denklemini çözdüğümüz zaman birbirleriyle sıra değiştiren üç operatör H, L^2 ve L_z'nin ortak özfonksiyonlarını kurmuş olduk:

$$H\psi=E\psi,\quad L^2\psi=\hbar^2l(l+1)\psi,\quad L_z\psi=\hbar m\psi. \qquad [4.133]$$

Bu arada, 4.132 nolu denklemi kullanarak Schrödinger denklemini (4.14 nolu denklem)

$$\frac{1}{2mr^2}\left[-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+L^2\right]\psi+V\psi=E\psi.$$

şeklinde daha kapalı formda yazabiliriz. Burada bir gariplik var: Açısal momentumun *cebirsel* teorisi l'nin, dolayısıyla m'nin, *yarım* tamsayı değerler almasına izin verirken (4.119 nolu denklem), değişkenlere ayırma yöntemiyle bulunan özfonksiyonlarda yalnızca *tamsayı* değerlere izin verilmekte. İlk bakışta yarım tamsayılı çözümlerin sahte olduğunu düşünebilirsiniz, ancak gelecek kesimlerde göreceğimiz gibi bu çözümler oldukça önemlidir.

***Problem 4.21**

(a) 4.130 nolu denklemden hareketle 4.131 nolu denklemi türetiniz. *Yardım*: Bir test fonksiyonu kullanın; aksi takdirde bazı terimleri kaybedersiniz.

(b) 4.129 ve 4.131 nolu denklemlerden 4.132 nolu denklemi türetiniz. *Yardım:* 4.112 nolu denklemi kullanın.

***Problem 4.22**

(a) $L_+ Y_l^l = ?$ (Hiç bir hesaba izin yok!)

(b) (a) şıkkında elde edilen sonucu, 4.130 nolu denklemi ve $L_z Y_l^l = \hbar l Y_l^l$ olduğunu kullanarak bir normlama sabiti kadar farkla $Y_l^l(\theta,\phi)$ 'yi belirleyin.

(c) Doğrudan integrasyonla normlama sabitini belirleyin. Yanıtınızı 4.5 nolu problemde bulduğunuz sonuçla karşılaştırın.

Problem 4.23 4.3 nolu problemde

$$Y_2^1(\theta,\phi) = -\sqrt{15/8\pi}\,\sin\theta\cos\theta e^{i\phi}$$

olduğunu gösterdiniz. $Y_2^2(\theta,\phi)$ 'yi bulmak için kaldırma operatörünü uygulayın. 4.121 nolu denklemi kullanarak normlamayı yapın.

Problem 4.24 m kütleli iki parçacık a uzunluğundaki kütlesiz katı bir çubuğun uçlarına tutturulmuştur. Sistem sabit tutulan bir merkez etrafında, üç boyutta serbestçe dönebilmektedir.

(a) Bu **katı döner**'in izin verilen enerji değerlerinin

$$n = 0,\ 1,\ 2,\ldots \quad \text{olmak üzere} \quad E_n = \frac{\hbar^2 n(n+1)}{ma^2}$$

olduğunu gösterin.

Yardım: Öncelikle klasik enerjiyi toplam açısal momentum cinsinden ifade edin.

(b) Bu sistemin normlanmış özfonksiyonları nedir? n–inci enerji düzeyinin katlılığı ne kadardır?

4.4 SPİN

Klasik mekanikte katı bir cismin iki çeşit açısal momentumu vardır: kütle merkezinin hareketiyle ilişkili **yörüngesel** ($\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$) ve kütle merkezi *etrafındaki* hareketle ilişkili **spin** ($\mathbf{S} = I\boldsymbol{\omega}$) açısal momentumu. Örneğin, dünyanın, güneş etrafındaki bir yıllık dönüşüyle ilişkili bir yörüngesel açısal momentumu ve kuzey-güney ekseni etrafında bir günlük dönüşüyle ilişkili spin açısal momentumu vardır. Klasik bağlamda bu tür bir ayrım bir anlaşma sorunudur. Çünkü **S**, dünyayı meydana getiren kum, kil çakıl, toprak ve kaya gibi etmenlerin eksen etrafındaki dönüşlerinden gelen "yörüngesel" açısal momentumlarının toplamından başka bir şey değildir. Kuantum mekaniğinde de benzer durum olmakla beraber burada temel bir ayrım söz konusudur. Hidrojeni ele alırsak, elektronun çekirdek etrafındaki hareketiyle ilişkili olan ve küresel harmoniklerle tanımlanan yörüngesel açısal momentumuna ek olarak elektron başka bir açısal momentum daha taşımaktadır. Bu açısal momentum, uzaydaki bir hareketle ilişkili değildir ve bu yüzden r, θ, ϕ konum değişkenlerinin herhangi bir fonksiyonuyla tanımlanamaz ancak klasik spinle benzerlik taşır (bu yüzden aynı sözcüğü kullandık). Bu benzerliği daha ileriye götürmek anlamsızdır. Elektron bugün için bildiğimiz kadarıyla iç yapısı olmayan noktasal bir parçacıktır ve spin açısal momentumu kendisini oluşturan öğelerin yörüngesel açısal momentumları cinsinden yazılamaz (4.25 nolu probleme bakınız)[25]. O halde, temel parçacıklar "dış" açısal momentumlarına (**L**) ek olarak **iç** açısal momentum (**S**) taşırlar.

Spinin *cebirsel teorisi* yörüngesel açısal momentum teorisinin bir karbon kopyasıdır. Temel sıra değiştirme bağıntıları ise,[26]

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y. \qquad [4.134]$$

şeklindedir. Daha önceden olduğu gibi S^2 ve S_z'nin özvektörleri

$$S^2|s\,m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s\,m\rangle; \quad S_z|s\,m\rangle = \hbar m|s\,m\rangle, \qquad [4.135]$$

özdurum denklemlerini sağlarlar.[27] $S_\pm \equiv S_x \pm iS_y$ olmak üzere

[25] Modern bir yorum için; Hans C. Ohanian, "What is Spin?", *Am. J. Phys.* **54**, 500 (1986)'ya bakınız.

[26] Bu bağıntıları spin teorisinin *temel varsayımları* (postülatları) olarak kabul edeceğiz. Yörüngesel açısal momentum için benzer bağıntılar (4.99 nolu denklem) operatörlerin bilinen formlarından (4.96 nolu denklem) türetilmişti. Daha karmaşık bir türetme üç boyutta dönme değişmezliğinden elde edilebilir (Örnek olarak; Leslie E. Ballentine, *Quantum Mechanics: A Modern Development*, World Scientific, Singapore (1998), 3.3. Kesime bakınız). Aslında, buradaki temel sıra değiştirme bağıntıları, spin, yörüngesel ya da biraz spin biraz yörüngesel kısım içeren karma bir sistemdeki toplam açısal momentum gibi açısal momentumun tüm formlarına uygulanır.

[27] Spin özdurumları *fonksiyonlar* olmadıklarından bunları "ket" notasyonuyla göstereceğiz (aslında 4.3. kesimde Y_l^m yerine $|lm\rangle$ notasyonunu da kullanabilirdik, ama fonksiyon notasyonu daha doğaldı). Tıpkı L_z'de olduğu gibi S_z'nin özdeğeri için m harfini kullanıyoruz (bazı yazarlar bu aşamada daha açık olması için m_l ve m_s harflerini kullanırlar).

$$S_{\pm}|s\,m\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)}\;|s\,(m\pm 1)\rangle \qquad [4.136]$$

olur. Ancak buradaki özvektörler küresel harmonikler değildir (yani bunlar θ ve ϕ'nin fonksiyonları değildir). Ayrıca s ve m için yarım tamsayılı değerleri dışarlamak için özel bir neden yoktur:

$$s = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \ldots;\quad m = -s,\ -s+1,\ \ldots,\ s-1,\ s. \qquad [4.137]$$

Her temel parçacığın *kendisine özgü ve değişmeyen bir s değeri* vardır. Bu değere parçacığın **spini** denir. Pi mezonların spini 0, elektronların spini 1/2, fotonların spini 1, delta parçacıklarının spini 3/2, gravitonun spini 2'dir. Tersine, *yörüngesel* açısal momentum kuantum sayısı l (örneğin hidrojen atomundaki bir elektron için) herhangi bir tamsayı değere sahip olabilir ve sisteme bir tedirgeme uygulanırsa değeri değişebilir. Ancak belirli bir parçacık için s bir tek şekilde belirlidir *ve değişmez*. Bu nedenle spin teorisi daha basittir.[28]

Problem 4.25 Eğer elektron, yarıçapı

$$r_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \qquad [4.138]$$

ile verilen klasik bir katı küre olsaydı ve açısal momentumu da $(1/2)\hbar$ olsaydı "ekvator" üzerindeki bir noktanın hızı m/s cinsinden ne kadar olurdu? (**klasik elektron yarıçapı** olarak adlandırılan r_c, $E = mc^2$ Einstein formülü yardımıyla elektronun kütlesinin kendi elektrik alanında depolanan enerjiye atfolunabileceği kabul edilerek elde edilir). Bu model bir anlam ifade eder mi? (Aslında elektronun deneysel olarak belirlenen yarıçapı r_c'den çok daha küçüktür ve bu sorunu daha da kötüleştirir).

---

[28] Aslında matematiksel açıdan yarım spin mümkün olan en basit sıradan olmayan kuantum sistemidir ve iki tane durumu vardır. Bu durumda tüm karmaşıklıkları ve incelikleriyle birlikte sonsuz boyutlu bir Hilbert uzayı yerine, bildik 2 boyutlu bir vektör uzayında çalışırız. Çok tanıdık olmayan diferansiyel denklemler ve fonksiyonlar yerine 2 × 2'lik matrisler ve 2 bileşenli vektörlerle karşılaşırız. Bu nedenle, bazı yazarlar kuantum mekaniğine spini inceleyerek başlarlar (seçkin bir örnek: John S. Townsend, A *Modern Approach to Quatum Mechanics*, University Books, Sausalito, CA, 2000). Ama matematiksel basitliğin bedeli kavramsal soyutlamadır ve burada bu yolu tercih etmiyoruz.

4.4.1 Yarım Spin

Tüm kuarkların ve tüm leptonların yanında bilinen maddeyi oluşturan parçacıkların (protonlar, nötronlar ve elektronlar) spini $\frac{1}{2}$ olduğundan, spin durumları için en önemli örnek $s = \frac{1}{2}$'dir. Ayrıca, bir kez $\frac{1}{2}$ spin durumunu anladıktan sonra, formülasyonu daha büyük spin değerlerine genelleştirmek oldukça kolay olacaktır. *İki tane* özdurum vardır. Bunlar: $\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle$, **spin yukarı** (ya da $\uparrow$) ve $\left|\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)\right\rangle$, **spin aşağı** (ya da $\downarrow$) durumlarıdır. Bunları baz vektörleri olarak alarak herhangi bir spini $\frac{1}{2}$ olan parçacık için genel durum vektörünü iki elemanlı bir sütun matris (ya da **spinör**) olarak ifade edebiliriz:

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_-. \qquad [4.139]$$

Burada

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad [4.140]$$

spin yukarı durumunu ve

$$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad [4.141]$$

spin aşağı durumunu temsil etmektedir.

Bu arada, spin operatörleri χ_+ ve χ_- spinörlerine olan etkilerine bakarak üzerinde çalışabileceğimiz 2 × 2'lik matris şeklini alırlar. 4.135 nolu denklem yardımıyla

$$\mathbf{S}^2\chi_+ = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_+ \quad \text{ve} \quad \mathbf{S}^2\chi_- = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_- \qquad [4.142]$$

yazılır. $\mathbf{S}^2$'yi bu aşamada elemanlarını bilmediğimiz bir matris olarak

$$\mathbf{S}^2 = \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}$$

şeklinde yazarsak birinci denklemden

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{veya} \quad \begin{pmatrix} c \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}\hbar^2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

bulunur. Böylece, $c = (3/4)\hbar^2$ ve $e = 0$ olur. İkinci denklemden

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{veya} \quad \begin{pmatrix} d \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{3}{4}\hbar^2 \end{pmatrix}$$

elde edilir. Buradan $d = 0$ ve $f = (3/4)\hbar^2$ bulunur. *Sonuç:*

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \qquad [4.143]$$

Benzer şekilde

$$\mathbf{S}_z\chi_+ = \frac{\hbar}{2}\chi_+ \qquad \mathbf{S}_z\chi_- = -\frac{\hbar}{2}\chi_- \qquad [4.144]$$

olur. Buradan

$$\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \qquad [4.145]$$

olarak bulunur. Bu arada 4.136 nolu denklemden de

$$\mathbf{S}_+\chi_- = \hbar\chi_+, \quad \mathbf{S}_-\chi_+ = \hbar\chi_-, \quad \mathbf{S}_+\chi_+ = \mathbf{S}_-\chi_- = 0$$

yazılabilir. Böylelikle,

$$\mathbf{S}_+ = \hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_- = \hbar\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix} \qquad [4.146]$$

olur. Ayrıca, $S_\pm = S_x \pm iS_y$ olduğundan, $S_x = (1/2)(S_+ + S_-)$ ve $S_y = (1/2i)(S_+ - S_-)$ şeklini alır. Buradan, $\mathbf{S}_x$ ve $\mathbf{S}_y$ matrisleri

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \qquad [4.147]$$

olarak elde edilir. $\mathbf{S}_x$, $\mathbf{S}_y$ ve $\mathbf{S}_z$'nin tümünde $\hbar/2$ çarpanı ortak olduğundan, $\mathbf{S} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ şeklinde yazmak daha kullanışlıdır. Burada

$$\boxed{\sigma_x \equiv \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}} \qquad [4.148]$$

dir ve bunlar ünlü **Pauli spin matrisleridir**. $\mathbf{S}_x$, $\mathbf{S}_y$, $\mathbf{S}_z$ ve $\mathbf{S}^2$'nin tümünün *hermitsel* olduğuna (bunlar gözlenebilir büyüklükleri temsil ettiklerinden zaten hermitsel olmaları *gerekir*) dikkat ediniz. Oysa $\mathbf{S}_+$ ve $\mathbf{S}_-$ hermitsel değildir ve gözlenebilir değillerdir.

Şüphesiz, $\mathbf{S}_z$'nin özspinörleri şunlardır:

$$\chi_+ = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}, \left(\text{özdeğer } +\frac{\hbar}{2}\right); \quad \chi_- = \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}, \left(\text{özdeğer } -\frac{\hbar}{2}\right). \qquad [4.149]$$

Parçacık genel bir χ durumundayken (4.139 nolu denklem) S_z'yi ölçerseniz $|a|^2$ olasılıkla $+\hbar/2$ değerini ve $|b|^2$ olasılıkla $-\hbar/2$ değerini elde edersiniz. Bunlar olasılıklar olduklarından

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \qquad [4.150]$$

koşulu sağlanmalıdır (diğer bir deyişle; spinörler *normlanmış* olmalıdır).[29]

[29] İnsanlar çok kez $|a|^2$'yi "parçacığın spin yukarı durumunda bulunma olasılığı" olarak kullanırlar. Ancak bu özensiz bir dil seçimidir. Aslında demek istedikleri S_z'yi ölçersen, $\hbar/2$ değerini elde etme olasılığın $|a|^2$ dir. 3. Bölümdeki 16. dipnota bakınız.

Ancak S_z'yi ölçmek yerine S_x'i ölçmek isterseniz ne olur? Hangi değerler hangi olasılıklarla elde edilir? Genelleştirilmiş istatistiksel yoruma göre S_x'in özdeğer ve özspinörlerini bilmeliyiz. Karakteristik denklemden

$$\begin{vmatrix}-\lambda & \hbar/2\\ \hbar/2 & -\lambda\end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \Rightarrow \lambda = \pm\frac{\hbar}{2}$$

bulunur. Bu sonuç sürpriz değildir. S_x'in mümkün değerleri S_z'in mümkün değerleriyle aynıdır. Özspinörler standart yolla bulunur:

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \pm\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}\beta\\ \alpha\end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$$

Buradan $\beta = \pm\alpha$ elde edilir. Böylece, S_x'in normlanmış özspinörleri şu şekilde bulunur:

$$\chi_+^{(x)} = \begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}, \left(\text{özdeğer } +\frac{\hbar}{2}\right); \quad \chi_-^{(x)} = \begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{-1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}, \left(\text{özdeğer } -\frac{\hbar}{2}\right). \qquad [4.151]$$

Bunlar hermitsel bir matrisin özvektörleri olduğundan, uzayı örterler yani baz oluştururlar. Genel bir spinör χ (4.139 nolu denklem) bu vektörlerin lineer bir kombinasyonu olarak ifade edilebilir:

$$\chi = \left(\frac{a+b}{\sqrt{2}}\right)\chi_+^{(x)} + \left(\frac{a-b}{\sqrt{2}}\right)\chi_-^{(x)}. \qquad [4.152]$$

S_x'i ölçerseniz $+\hbar/2$ değerini elde etme olasılığı $(1/2)|a+b|^2$ ve $-\hbar/2$ değerini elde etme olasılığı $(1/2)|a-b|^2$ dir. (bu olasılıkların toplamının 1 olduğunu kontrol etmelisiniz).

Örnek 4.2 Spini $\frac{1}{2}$ olan bir parçacığın

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1+i\\ 2\end{pmatrix}$$

durumunda olduğunu varsayalım.

S_z ve S_x'i ölçerseniz $+\hbar/2$ ve $-\hbar/2$ değerlerini elde etme olasılıkları ne kadardır?

Çözüm: Bu örnekte $a = (1+i)/\sqrt{6}$ ve $b = 2/\sqrt{6}$ dır. S_z için $+\hbar/2$'yi elde etme olasılığı $\left|(1+i)/\sqrt{6}\right|^2 = 1/3$ ve $-\hbar/2$'yi elde etme olasılığı $\left|2/\sqrt{6}\right|^2 = 2/3$'dür. S_x için $+\hbar/2$ değerini elde etme olasılığı $(1/2)\left|(3+i)/\sqrt{6}\right|^2 = 5/6$ ve $-\hbar/2$ değerini elde etme olasılığı

$(1/2)\left|(-1+i)/\sqrt{6}\right|^2 = 1/6$ 'dır. Bu arada S_x'in beklenen değeri

$$\frac{5}{6}\left(+\frac{\hbar}{2}\right)+\frac{1}{6}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=\frac{\hbar}{3}$$

olarak bulunur. Aynı sonuç doğrudan doğruya

$$\langle S_x\rangle = \chi^\dagger \mathbf{S}_x \chi = \begin{pmatrix}\frac{(1-i)}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \hbar/2\\ \hbar/2 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}(1+i)/\sqrt{6}\\ 2/\sqrt{6}\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{3}$$

şeklinde hesap yapılarak da bulunur.

Yarım spin durumu, 1. Bölümde tartıştığımız bazı soyut görüşleri çok somut terimlerle betimleyebildiğinden, sizi 1/2 spin durumlarını içeren sanal bir ölçüm senaryosuna yönlendirmek istiyorum. χ_+ durumunda bulunan bir parçacıkla başlayalım. Herhangi bir kişi "parçacığın spin açısal momentumunun z-bileşeni nedir?" diye sorsa, açıkça $+\hbar/2$'dir yanıtını veririz. S_z'in ölçümü sonucunda kesin bir değer bulunur. Fakat bunun yerine *bizim* sorgulayıcı kişi "parçacığın spin açısal momentumunun x-bileşeni nedir?" diye sorarsa, kaçamak bir yanıt vermek zorundayız. S_x'i ölçerseniz, $\hbar/2$ ya da $-\hbar/2$ değerini elde etmek için yarı yarıya şansınız vardır. Eğer soruyu soran kişi bir klasik fizikçi ya da 1.2. Kesimdeki anlamıyla bir "gerçekçi" (realist) ise, bu yanıtı yetersiz olarak değerlendirecek ve "siz bana parçacığın doğru durumunu bilmediğinizi mi söylüyorsunuz?" diyerek tepki gösterecektir. Tersine; parçacığın tam olarak hangi durumda olduğunu biliyoruz: χ_+ durumunda. "Peki, o zaman, siz bana parçacığın spininin x-bileşeninin ne olduğunu nasıl olur da söyleyemezsiniz?" Çünkü parçacık, spinin belli bir x-bileşenine *sahip değildir* ve de olamaz çünkü S_x ve S_z iyi tanımlı olmuş olsalardı, belirsizlik ilkesi çiğnenmiş olurdu.

Tam bu noktada rakibimiz test tüpünü kaparak parçacığın spinin x-bileşenini *ölçer*. Ölçümden $+\hbar/2$ değerini elde ettiğini varsayalım. "Aha, buldum işte" diyerek zafer duygusuyla haykırmaktadır."Bana *yalan söyledin*, bu parçacık için S_x'in iyi tanımlanmış bir değeri var: $\hbar/2$". Doğru, şimdi böyle bir değere sahip. Ama bu, ölçümden önce x-bileşeninin bulunan bu değere *sahip olduğunu* kanıtlamaz. "Şimdi saçlarını yolma noktasına geldin. Belirsizlik ilkesine ne oldu? Şimdi hem S_x'i hem de S_z'yi biliyorum". Üzgünüm, ama *bilmiyorsun.* Ölçüm sırasında parçacığın durumunu değiştirdiniz ve artık parçacık $\chi_+^{(x)}$ durumunda. Bu nedenle S_x'in değerini biliyorsunuz ve S_z'nin değerleri ile ilgili bilgilere artık sahip değilsiniz. "Ama S_x'i ölçerken parçacığı rahatsız etmemeye özen gösterdim." Çok güzel. Bize inanmıyorsanız kontrol edebilirsiniz. S_z'yi ölçün ve hangi değeri elde edeceğinize bakın. Şüphesiz kahramanımız bizi utandıracak şekilde $+\hbar/2$ değerini elde edebilir. Ama tüm senaryoyu defalarca tekrarlarsak bu tekrarların yarısında $-\hbar/2$ değerini elde edecektir.

Uzman olmayan bir kişiye, filozofa ya da klasik fizikçiye, "bu parçacık iyi tanımlanmış bir konuma (ya da momentuma veya spin açısal momentumunun x-bileşenine vb.) sahip değildir" şeklindeki bir cümle muğlak ve yetersiz hatta daha da kötüsü çok derin gelebilir. Aslında bunların hiçbiri değildir. Bunun tam anlamı şudur:

Hayatında biraz derinlemesine kuantum mekaniği çalışmamış bir kişiye bunları anlatmak hemen hemen imkânsızdır. Zaman zaman konunun elinizin altında kayıp gittiğini hissederseniz (eğer böyle hissetmezseniz, muhtemelen problemi tam anlamamışsınızdır) $\frac{1}{2}$ spinli sisteme geri dönün: Bu, kuantum mekaniğinin kavramsal çelişkileri üzerinde düşünmek için en basit ve en temiz durumdur.

Problem 4.26

(a) 4.145 ve 4.147 nolu denklemler ile verilen spin matrislerinin açısal momentum için temel sıra değiştirme bağıntılarını (4.134 nolu denklem) sağladıklarını kontrol ediniz.

(b) Pauli spin matrislerinin (4.148 nolu denklem)

$$\sigma_j\sigma_k = \delta_{jk} + i\sum_l \epsilon_{jkl}\sigma_l, \qquad [4.153]$$

ile verilen çarpım kuralını sağladığını gösteriniz. Burada indisler x, y ve z'yi temsil etmektedir. ϵ_{jkl}'ye **Levi-Civita** sembolü denilir. jkl = 123, 231 ya da 312 ise $\epsilon_{jkl} = +1$; jkl = 132, 213 ya da 321 ise $\epsilon_{jkl} = -1$; diğer durumlarda $\epsilon_{jkl} = 0$ dır.

***Problem 4.27** Bir elektron

$$\chi = A\begin{pmatrix}3i\\ 4\end{pmatrix}$$

ile verilen bir spin durumundadır.

(a) Normlama sabiti A'yı belirleyin.

(b) S_x, S_y ve S_z'nin beklenen değerlerini bulun.

(c) $\sigma_{S_x}, \sigma_{S_y}$ ve σ_{S_z} "belirsizliklerini" bulun (Dikkat: Buradaki sigmalar Pauli matrisleri değil standart sapmalardır).

(d) Sonuçlarınızın üç tane belirsizlik ilkesiyle uyumlu olduğunu gösterin (4.100 nolu denklem ve bunun çevrimsel permütasyonları; kuşkusuz L yerine S gelecek).

***Problem 4.28** En genel normlanmış bir spinör χ (4.139 nolu denklem) için $\langle S_x\rangle$, $\langle S_y\rangle$, $\langle S_z\rangle$, $\langle S_x^2\rangle$, $\langle S_y^2\rangle$ ve $\langle S_z^2\rangle$'yi hesaplayınız. $\langle S_x^2\rangle + \langle S_y^2\rangle + \langle S_z^2\rangle = \langle S^2\rangle$ olduğunu kontrol ediniz.

***Problem 4.29**

(a) $\mathbf{S}_y$'nin özdeğer ve özspinörlerini hesaplayınız.

(b) Parçacık genel bir χ durumundayken (4.139 nolu denklem) S_y'yi ölçerseniz hangi değerleri hangi olasılıklarla elde edersiniz? Olasılıkların toplamının 1 olduğunu kontrol ediniz. *Dikkat: a* ve *b* reel olmak zorunda değildir!

(c) S_y^2'yi ölçerseniz hangi değerler hangi olasılıklarla bulunur?

****Problem 4.30** Spin açısal momentumunun keyfi bir $\hat{r}$ doğrultusundaki bileşenini temsil eden $\mathbf{S}_r$ matrisini kurunuz. Küresel koordinatlarda $\hat{r}$ için

$$\hat{r} = \sin\theta\cos\phi\,\hat{\imath} + \sin\theta\sin\phi\,\hat{\jmath} + \cos\theta\,\hat{k} \qquad [4.154]$$

olarak verilen ifadesini kullanın. $\mathbf{S}_r$'nin özdeğerlerini ve normlanmış özspinörlerini bulunuz. *Yanıt:*

$$\chi_+^{(r)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi}\sin(\theta/2) \end{pmatrix}; \quad \chi_-^{(r)} = \begin{pmatrix} e^{-i\phi}\sin(\theta/2) \\ -\cos(\theta/2) \end{pmatrix}. \qquad [4.155]$$

Dikkat: $e^{i\phi}$ gibi keyfî bir faz çarpanıyla çarpma hakkınız daima mevcuttur. Bu nedenle yanıtınız bizimkine tam olarak benzemez.

Problem 4.31 Spin 1 parçacığı için $\mathbf{S}_x$, $\mathbf{S}_y$ ve $\mathbf{S}_z$ spin matrislerini kurunuz. *Yardım:* S_z için kaç tane özdurum vardır? S_z, S_+ ve S_-'nin bu durumların her biri üzerine etkilerini belirleyiniz. Metinde spin 1/2 için kullanılan süreçleri izleyiniz.

4.4.2 Manyetik Alan İçindeki Elektron

Spini olan yüklü bir parçacık bir manyetik dipol oluşturur. Parçacığın **manyetik dipol momenti** $\boldsymbol{\mu}$ spin açısal momentumu $\mathbf{S}$ ile doğru orantılıdır:

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma\mathbf{S}; \qquad [4.156]$$

orantı sabiti γ'ya **jiromanyetik oran**[30] denir. Bir manyetik dipol $\mathbf{B}$ ile verilen bir manyetik alan içine yerleştirilirse üzerine $\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$ ile verilen bir tork etkir. Bu tork, manyetik dipolü tıpkı bir pusulanın iğnesinde olduğu gibi alana paralel yapmaya çalışır.

[30] Örnek olarak, D. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 3rd. ed. (Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 1999), 252. sayfaya bakınız. Klasik olarak, yükü q, kütlesi m olan ve yüküyle kütlesi düzgün dağılmış bir cismin jiromanyetik oranı $q/2m$'dir. Yalnızca relativistik kuantum teorisince açıklanabilecek nedenlerle, elektronun jiromanyetik oranı klasik değerinin hemen hemen iki katıdır: $\gamma = -e/m$.

Bu tork nedeniyle biriken enerji[31]

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} \qquad [4.157]$$

dir. Böylelikle bir $\mathbf{B}$ manyetik alanı içinde durgun olan,[32] spinli ve yüklü bir parçacığın Hamiltonyeni

$$H = -\gamma\mathbf{B}\cdot\mathbf{S} \qquad [4.158]$$

şeklindedir.

Örnek 4.3 Larmor presesyonu: Düzgün bir manyetik alan içinde durgun olan 1/2 spinli bir parçacık düşünelim. Manyetik alan z yönünde olsun:

$$\mathbf{B} = B_0\hat{k}. \qquad [4.159]$$

Matris formunda Hamiltonyen (4.158 nolu denklem) şu şekildedir:

$$\mathsf{H} = -\gamma B_0\mathbf{S}_z = -\frac{\gamma B_0\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad [4.160]$$

H'nın özdurumları $\mathbf{S}_z$'nin özdurumlarıyla aynıdır:

$$\begin{cases} \chi_+, & \text{enerji} \quad E_+ = -(\gamma B_0\hbar)/2, \\ \chi_-, & \text{enerji} \quad E_- = +(\gamma B_0\hbar)/2. \end{cases} \qquad [4.161]$$

Tıpkı klasik durumda olduğu gibi dipol momenti alana paralel olduğu zaman enerji en düşük değerindedir.

Hamiltonyen zamandan bağımsız olduğundan, zamana bağımlı Schrödinger denkleminin

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = \mathsf{H}\chi \qquad [4.162]$$

genel çözümü kararlı (durağan) durumlar cinsinden ifade edilebilir:

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_-t/\hbar} = \begin{pmatrix} ae^{i\gamma B_0 t/2} \\ be^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}.$$

[31] Griffiths (30. dipnot) 281. sayfa.

[32] Eğer parçacık hareket etseydi kinetik enerjisi de olacaktı. Bu durumda üzerindeki kuvvet, bir potansiyel enerji fonksiyonundan türetilmeyen ($q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$) Lorentz kuvveti olacaktır. Bu nedenle buraya kadar formülasyonunu verdiğimiz Schrödinger denklemine uymayacaktır. Daha sonra böyle durumların nasıl ele alınacağını göstereceğiz (4.59 nolu problem). Ama şimdilik parçacığın dönme serbestisi olduğunu aksi durumda kararlı olduğunu kabul edelim.

a ve b sabitleri başlangıç koşullarından belirlenir:

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

($|a|^2 + |b|^2 = 1$ olduğunu unutmayalım). Genellikten hiçbir şey kaybetmeden[33] $a = \cos(\alpha/2)$ ve $b = \sin(\alpha/2)$ yazılabilir. Burada α, fiziksel önemi birazdan ortaya çıkacak sabit bir açıdır. Böylece genel çözüm

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \qquad [4.163]$$

olur. Burada ne olduğunu anlamak için S'nin beklenen değerini zamanın fonksiyonu olarak hesaplayalım:

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \chi(t)^\dagger \mathbf{S}_x \chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} & \sin(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \\ &\quad \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \qquad [4.164] \\ &= \frac{\hbar}{2}\sin\alpha\cos(\gamma B_0 t). \end{aligned}$$

Benzer şekilde

$$\langle S_y \rangle = \chi(t)^\dagger \mathbf{S}_y \chi(t) = -\frac{\hbar}{2}\sin\alpha\sin(\gamma B_0 t) \qquad [4.165]$$

ve

$$\langle S_z \rangle = \chi(t)^\dagger \mathbf{S}_z \chi(t) = \frac{\hbar}{2}\cos\alpha \qquad [4.166]$$

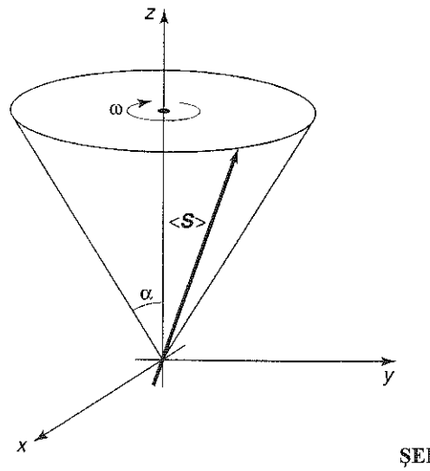
olarak bulunur. Açıkça görülüyor ki $\langle \mathbf{S} \rangle$, z ekseniyle sabit bir α açısı yapacak şekilde eğilmiştir ve alan etrafında

$$\omega = \gamma B_0 \qquad [4.167]$$

Larmor frekansıyla tıpkı klasik olarak yaptığı gibi[34] presesyon (dolanım) yapar (4.10 nolu şekil). Burada bir sürpriz yoktur. 4.20 nolu problemde türetildiği şekliyle Ehrenfest teoremi $\langle \mathbf{S} \rangle$'nin klasik yasalara uymasını garanti etmektedir. Ama bunun özel bir örnekte nasıl çalıştığını görmek yine de güzel.

[33] Bu a ve b'nin reel olduğunu varsaymaz. Eğer isterseniz en genel durumda hesap yapabilirsiniz, ama bunun tüm yaptığı t'ye bir sabit eklemek olacaktır.

[34] Örneğin; *The Feynman Lectures on Physics* (Addison-Wesley, Reading, 1964). II. Cilt, 34-3. Kesime bakınız. Şüphesiz klasik durumda manyetik alanın etrafında presesyon yapan beklenen değeri değil açısal momentumun kendisidir.



ŞEKİL 4.10 $\langle \mathbf{S} \rangle$'nin düzgün bir manyetik alan içindeki presesyonu.

Örnek 4.4 Stern-Gerlach deneyi: *Düzgün olmayan* bir manyetik alan içinde bulunan manyetik dipol üzerinde yalnızca *tork* değil bir *kuvvet* de vardır.[35] Bu kuvvet

$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) \qquad [4.168]$$

şeklindedir. Bu kuvvet, aşağıda anlatıldığı gibi, parçacıkları özel bir spin yönelime göre ayırmak için kullanılabilir. y yönünde hareket eden ve

$$\mathbf{B}(x, y, z) = -\alpha x\hat{\imath} + (B_0 + \alpha z)\hat{k} \qquad [4.169]$$

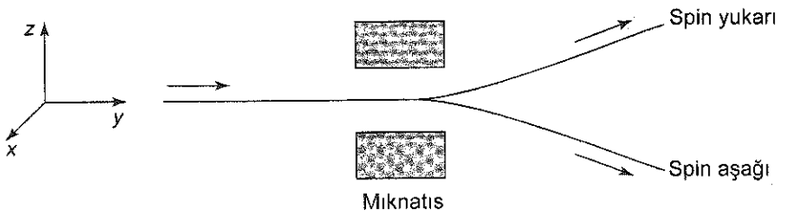
ile verilen düzgün olmayan bir manyetik alan bölgesine giren ağır, yüksüz atomlardan[36] oluşan bir demet düşünelim (4.11 nolu şekil). 4.169 nolu denklemde B_0 kuvvetli, düzgün bir manyetik alan ve α sabiti düzgünlükten küçük bir sapmayı veren terimdir (aslında, tüm yapmak istediğimiz z-bileşeni düzgün olmayan bir manyetik alan oluşturmak. Maalesef bu mümkün değil, çünkü bu durumda $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ elektromanyetik teori yasası çiğnenir). Atomlar üzerindeki kuvvet

$$\mathbf{F} = \gamma\alpha(-S_x\hat{\imath} + S_z\hat{k})$$

olur.

[35] Griffiths (30. dipnot), 258. sayfa. F'nin 4.157 nolu denklemde verilen enerjinin negatif gradyenti olduğuna dikkat ediniz.

[36] Lorentz kuvvetinden doğacak büyük ölçekli sapmalardan kaçınmak için yüksük atomlarla çalışıyoruz. Ağır atomlarla çalışarak yerelleşmiş dalga paketleri kurabilir ve hareketi klasik parçacık yörüngeleri cinsinden betimleyebilirsiniz. Pratikte, Stern-Gerlach deneyi bir serbest elektronlar demeti için çalışmaz.



ŞEKİL 4.11: Stern-Gerlach deney düzeneği.

Ancak B_0 etrafındaki Larmor presesyonu yüzünden S_x çok hızlı titreşecek ve ortalaması sıfır olacaktır. Böylece

$$F_z = \gamma \alpha S_z \qquad [4.170]$$

net kuvveti z yönünde olur ve demet, spin açısal momentumunun z bileşeniyle orantılı olarak yukarı ya da aşağı sapar. *Klasik* olarak sürekli bir iz (dağılım) beklerdik (çünkü S_z kuantumlanmış olmayacaktı). Ancak demet, açısal momentumun kuantumlanmasını çok zarif bir şekilde sergileyerek, $(2s+1)$ tane kısma ayrılır (örneğin deneyde gümüş atomları kullanırsanız, içteki tüm elektronlar spin ve yörüngesel açısal momentumları sıfır olacak şekilde çiftlenmişlerdir. Net spin en dıştaki çiftlenmemiş elektrondan kaynaklanır ve bu durumda $s = 1/2$ dir. Böylece demet ikiye ayrılır).

Son adıma kadar buradaki argüman tamamen *klasikti*. Çünkü doğru kuantum hesaplamalarında "kuvvet" kavramının yeri yoktur. Bu nedenle aynı problem için aşağıda vereceğimiz yaklaşımı[37] tercih edebilirsiniz. Süreci, demetle beraber hareket eden bir gözlem çerçevesinden bakarak inceleyeceğiz. Bu çerçevede, Hamiltonyen sıfır değeriyle başlar, parçacık mıknatıs içinden geçerken yani bir T zamanı boyunca sıfırdan farklıdır ve ardından yine sıfır olur. Bu durumda Hamiltonyen

$$H(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ -\gamma(B_0 + \alpha z)S_z, & 0 \le t \le T, \\ 0, & t > T \end{cases} \qquad [4.171]$$

olarak yazılabilir (**B**'nin can sıkıcı x-bileşenini yok saydık, zaten yukarıda anlatılan sebepler yüzünden problemle çok ilgili de değildir). Atomun 1/2 spinli olduğunu ve

$$\chi(t) = a\chi_+ + b\chi_- \qquad t \le 0.$$

durumundan başladığını varsayalım.

[37] Bu argüman için L. Ballentine (26. dipnot) 9.1. Kesime bakınız.

Hamiltonyen üzerine etki ederken $\chi(t)$ standart yolla evrimleşir:

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+ t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_- t/\hbar}, \qquad 0 \le t \le T,$$

Burada (4.158 nolu denklem yardımıyla)

$$E_\pm = \mp\gamma(B_0 + \alpha z)\frac{\hbar}{2} \qquad [4.172]$$

olarak verilir. Böylece parçacık $t \ge T$ için

$$\chi(t) = \left(ae^{i\gamma T B_0/2}\chi_+\right)e^{i(\alpha\gamma T/2)z} + \left(be^{-i\gamma T B_0/2}\chi_-\right)e^{-i(\alpha\gamma T/2)z} \qquad [4.173]$$

durumunda olur. Buradaki iki terim de z yönünde *momentum* taşımaktadır (3.32 nolu denkleme bakınız). Spin yukarı bileşeninin momentumu

$$p_z = \frac{\alpha\gamma T\hbar}{2} \qquad [4.174]$$

dir ve $+z$ yönünde hareket etmektedir. Spin aşağı bileşeninin momentumu zıt işaretlidir ve $-z$ yönünde hareket etmektedir. Böylelikle önceden olduğu gibi demet ikiye ayrılmaktadır (4.174 nolu denklemle verilen sonucun daha önce elde edilen ve 4.170 nolu denklemle verilen sonuçla uyumlu olduğuna dikkat ediniz. Burada $S_z = \hbar/2$ dir ve $p_z = F_z T$ olur).

Stern-Gerlach deneyi, hem bir kuantum durumunun hazırlanmasında bir prototip olarak hem de kesin bir kuantum ölçümü için açıklayıcı bir model olarak, kuantum mekaniğinin felsefesinde önemli bir rol oynar. Aslında bir sistemin *başlangıç* durumunun *bilindiğini* sorgulamadan kabul ederiz ve Schrödinger denklemi bize bu durumun zamanla evrimini anlatır. Ancak ilk olarak bir sistemin özel bir durumda nasıl hazırlandığını merak etmemiz doğaldır. Atomlardan oluşan bir demeti verilen bir spin durumunda hazırlamak istiyorsanız, bu kutuplanmamış (polarize olmamış) demeti bir Stern-Gerlach mıknatısı içinden geçirir ve uygun kontrol düzeneklerini açıp kapayarak çıkan demetin içinden ilgilenmek istediğinizi seçebilirsiniz. Tersine, bir atomun spininin z-bileşenini *ölçmek* istiyorsanız, onu bir Stern-Gerlach düzeneğinin içine yollar ve hangi hazneye düştüğünü kayıt edersiniz. Elbette bunun en pratik yol olduğunu iddia edecek değiliz. Ancak bu, bir durumun hazırlanması ve ölçüm sürecini anlamak için kavramsal olarak çok açık ve oldukça yararlıdır.

Problem 4.32 4.3 nolu örnekte:

(a) t zamanında spin açısal momentumunun x yönündeki bileşenini ölçseydiniz, $+\hbar/2$ değerini elde etme olasılığı ne olurdu?

(b) y-bileşeni için aynı soru.

(c) z-bileşeni için aynı soru.

Problem 4.33 Bir elektron

$$\mathbf{B} = B_0 \cos(\omega t)\hat{k}$$

şeklinde titreşim yapan bir manyetik alan içinde durgun durumdadır. Burada B_0 ve ω sabitlerdir.

(a) Bu sistem için Hamiltonyen matrisini kurunuz.

(b) Elektron başlangıçta ($t = 0$) x-eksenine göre spin yukarı durumundadır (yani $\chi(0) = \chi_+^{(x)}$ dir). Daha sonraki zamanlar için $\chi(t)$'yi belirleyiniz. *Dikkat:* Hamiltonyen *zamana bağımlıdır*, bu yüzden $\chi(t)$'yi kararlı durumlardan standart yolla elde edemezsiniz. Ama şanslısınız, zamana bağımlı Schrödinger denklemini (4.162 nolu denklem) bu örnek için doğrudan çözebilirsiniz.

(c) S_x'i ölçerseniz $-\hbar/2$ değerini elde etme olasılığı nedir?

Yanıt:

$$\sin^2\left(\frac{\gamma B_0}{2\omega}\sin(\omega t)\right).$$

(d) S_x'i tam olarak döndürmeye yetecek minimum manyetik alan (B_0) ne kadardır?

4.4.3 Açısal Momentumların Toplanması

İki tane 1/2 spinli parçacığı göz önüne alalım. Örneğin taban durumunda bulunan hidrojen atomundaki[38] elektron ve proton. Parçacıkların her biri yukarı ya da aşağı spine sahip olabilir. Bu durumda toplam dört olasılık mevcuttur[39]:

$$\uparrow\uparrow,\ \uparrow\downarrow,\ \downarrow\uparrow,\ \downarrow\downarrow \qquad [4.175]$$

Burada ilk ok elektronu, ikincisi protonu temsil etmektedir. *Soru:* Atomun *toplam* açısal momentumu nedir?

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)} \qquad [4.176]$$

olarak tanımlayalım. Buradaki dört tane karma durumun her biri S_z'in bir özdurumudur. z-bileşenleri basitçe *toplanabilmektedir*. Yani

[38] Parçacıklar taban durumunda olduklarından *yörüngesel* açısal momentumları yoktur. Endişelenmeye gerek yok.

[39] Daha doğru bir açıklama: her bir parçacık yukarı ve aşağı spinlerin *lineer bir kombinasyonu* olan bir durumdadır. O zaman karma sistem de burada verilen dört durumun *lineer bir kombinasyonu* olan bir durumda bulunacaktır.

$$S_z\chi_1\chi_2 = (S_z^{(1)} + S_z^{(2)})\chi_1\chi_2 = (S_z^{(1)}\chi_1)\chi_2 + \chi_1(S_z^{(2)}\chi_2)$$
$$= (\hbar m_1\chi_1)\chi_2 + \chi_1(\hbar m_2\chi_2) = \hbar(m_1 + m_2)\chi_1\chi_2$$

dir ($\mathbf{S}^{(1)}$'in yanlıca χ_1 üzerine ve $\mathbf{S}^{(2)}$'nin de yalnızca χ_2 üzerine etki ettiğine dikkat ediniz. Bu notasyon çok zarif olmasa da işe yarıyor). Böylece karma sistemin kuantum sayısı m, m_1+m_2'ye eşit olur:

$$\uparrow\uparrow\text{:}\ \ m = 1;$$
$$\uparrow\downarrow\text{:}\ \ m = 0;$$
$$\downarrow\uparrow\text{:}\ \ m = 0;$$
$$\downarrow\downarrow\text{:}\ \ m = -1.$$

Bu yazdığımız ilk bakışta doğru gözükmüyor. m'nin $-s$'den $+s$'ye tamsayı adımlarla ilerlemesi beklenir ve böylece s =1 durumu elde edilir. Ancak $m = 0$ olan "fazladan" bir durum daha vardır. Bu problemi çözmek için, 4.146 nolu denklemi kullanarak, $\uparrow\uparrow$ durumuna $S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$ indirme operatörünü uygulayalım:

$$S_-(\uparrow\uparrow) = (S_-^{(1)}\uparrow)\uparrow + \uparrow(S_-^{(2)}\uparrow)$$
$$= (\hbar\downarrow)\uparrow + \uparrow(\hbar\downarrow) = \hbar(\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow).$$

Böylece $s = 1$ için üç tane durum elde edilir. $|sm\rangle$ notasyonuyla yazalım:

$$\left\{\begin{array}{ll} |1\,1\rangle & = \uparrow\uparrow \\ |1\,0\rangle & = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1\,{-1}\rangle & = \downarrow\downarrow \end{array}\right\} \quad s = 1 \text{ (üçlü durum) (triplet)} \qquad [4.177]$$

(Kontrol için, $|10\rangle$ durumuna indirme operatörünü uygulayın. Hangi durumu elde etmelisiniz? 4.34 nolu problemin (a) şıkkına bakınız). Açıkça görüldüğü gibi, s = 1'e **üçlü-durum (triplet)** kombinasyonu denilir. Öte yandan $s = 1$, $m = 0$ durumuna ortogonal olan durum $s = 0$, $m = 0$ durumudur:

$$\left\{|0\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)\right\} \quad s = 0 \text{ (tekli durum) (singlet)} \qquad [4.178]$$

(*Bu duruma* kaldırma ya da indirme operatörünü uygularsanız *sıfır* bulursunuz. 4.34 nolu problemin (b) şıkkına bakınız).

Burada, iki tane 1/2 spinli parçacığın birleşiminin toplam spininin, triplet ya da singlet düzeneğini doldurup doldurmadığına bağlı olarak 1 ya da 0 olacağını iddia ediyoruz. Bunu *doğrulamak* için, triplet durumların S^2'nin $2\hbar^2$ özdeğerine karşılık olan özvektörler olduğunu ve singlet durumun da S^2'nin 0 özdeğerine karşılık olan özvektör olduğunu kanıtlamalıyız. S^2'yi

$$S^2 = (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}) \cdot (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}) = (S^{(1)})^2 + (S^{(2)})^2 + 2\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}. \qquad [4.179]$$

şeklinde yazalım. 4.145 ve 4.147 nolu denklemleri kullanarak,

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}(\uparrow\downarrow) &= (S_x^{(1)} \uparrow)(S_x^{(2)} \downarrow) + (S_y^{(1)} \uparrow)(S_y^{(2)} \downarrow) + (S_z^{(1)} \uparrow)(S_z^{(2)} \downarrow) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\downarrow\right)\left(\frac{\hbar}{2}\uparrow\right) + \left(\frac{i\hbar}{2}\downarrow\right)\left(\frac{-i\hbar}{2}\uparrow\right) + \left(\frac{\hbar}{2}\uparrow\right)\left(\frac{-\hbar}{2}\downarrow\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow)\end{aligned}$$

olduğu bulunur. Benzer şekilde

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}(\downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4}(2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$$

elde edilir. Böylece

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}|1\,0\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\frac{1}{\sqrt{2}}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow + 2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4}|1\,0\rangle \qquad [4.180]$$

ve

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}|0\,0\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\frac{1}{\sqrt{2}}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow - 2\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = -\frac{3\hbar^2}{4}|0\,0\rangle \qquad [4.181]$$

olur. 4.142 nolu denklemi de kullanarak 4.179 nolu denkleme tekrar dönersek

$$S^2|1\,0\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} + 2\frac{\hbar^2}{4}\right)|1\,0\rangle = 2\hbar^2|1\,0\rangle \qquad [4.182]$$

sonucunu buluruz. Böylece $|10\rangle$ durumunun gerçekten S^2'nin $2\hbar^2$ özdeğerine karşılık olan özdurumu olduğunu göstermiş olduk. Benzer şekilde

$$S^2|0\,0\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} - 2\frac{3\hbar^2}{4}\right)|0\,0\rangle = 0 \qquad [4.183]$$

olarak bulunur. $|00\rangle$ durumu S^2'nin 0 özdeğerine karşılık olan özdurumudur ($|11\rangle$ ve $|1-1\rangle$ durumlarının S^2'nin uygun özdeğerli özdurumları olduğunu doğrulama işini size bırakıyoruz. 4.34 nolu problemin (c) şıkkına bakınız).

Bu aşamaya kadar 1/2 spin ile 1/2 spin'i birleştirerek toplam spin için 1 ve 0 durumlarını elde ettik. Aslında bu yaptığımız daha büyük bir problemin en basit örneğidir: s_1 spini ve s_2 spini birleştirirsek toplam s spini için hangi değerler mümkündür?[40] *Yanıt:*[41] toplam s spini, $(s_1 + s_2)$ değerinden $(s_1 - s_2)$ (ya da $s_2 > s_1$ ise $(s_2 - s_1)$) değerine kadar birer fark ile (pozitif) her değeri alır. Yani

$$\boxed{s = (s_1 + s_2),\ (s_1 + s_2 - 1),\ (s_1 + s_2 - 2),\ \ldots,\ |s_1 - s_2|} \qquad [4.184]$$

dir (Kabaca söylersek; en yüksek spin durumu spinler tek tek birbirlerine paralel olduklarında ve en düşük durum da spinler birbirlerine antiparalel olduklarında elde edilir). Örneğin; 3/2 spinli bir parçacıkla spini 2 olan bir parçacığı bir araya getirdiğimizde toplam spin 7/2, 5/2, 3/2 ve 1/2 değerlerini alabilir. Diğer bir örnek: Bir hidrojen atomu ψ_{nlm} durumundaysa elektronun toplam açısal momentumu (spin artı yörüngesel) $l + 1/2$ ya da $l - 1/2$ olabilir. Eğer protonun spinini de eklerseniz atomun toplam açısal momentum kuantum sayısı $l + 1$, l ya da $l - 1$ olabilir (l durumu, elektronun $l + 1/2$ ya da $l - 1/2$ durumunda bulunmasına bağlı olarak iki farklı yolla elde edilir).

Toplam spin s ve z-bileşeni m için birleşik durum $|sm\rangle$, $|s_1m_1\rangle|s_2m_2\rangle$ karma durumlarının lineer bir kombinasyonu olacaktır. Böylece

$$|s\,m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C^{s_1 s_2 s}_{m_1 m_2 m}|s_1\,m_1\rangle|s_2\,m_2\rangle \qquad [4.185]$$

yazılabilir (z-bileşenleri basitçe toplanabildiklerinden, yalnızca $m_1 + m_2 = m$ koşulunu sağlayan karma durumlardan katkı gelir). 4.177 ve 4.178 nolu denklemler buradaki genel formun $s_1 = s_2 = 1/2$ özel durumlarıdır ($\uparrow = \left|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right\rangle$ ve $\downarrow = \left|\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)\right\rangle$ notasyonlarını kullandık). $C^{s_1 s_2 s}_{m_1 m_2 m}$ sabitlerine **Clebsh-Gordan katsayıları** denir. 4.8 nolu tabloda birkaç tane basit durum listelenmiştir.[42] Örneğin; 2×1 tablosundaki gölgeli sütun

$$|3\,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{5}}|2\,1\rangle|1\,-1\rangle + \sqrt{\tfrac{3}{5}}|2\,0\rangle|1\,0\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{5}}|2\,-1\rangle|1\,1\rangle$$

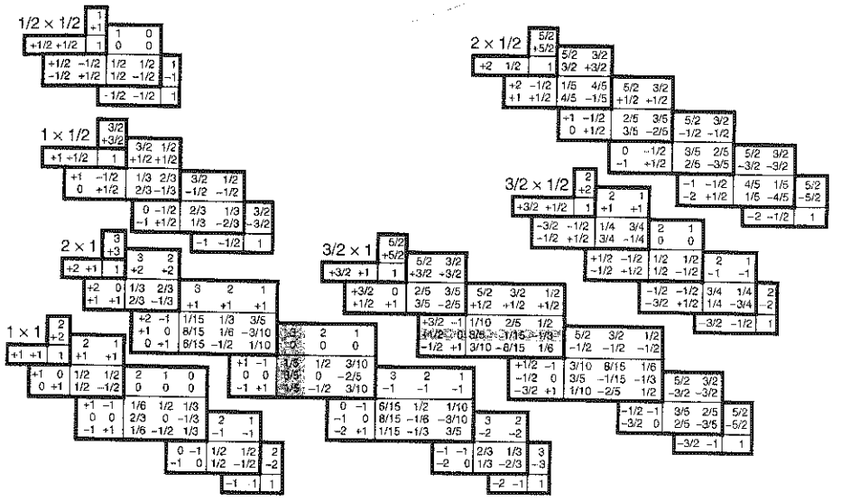
olduğunu söyler. Özellikle, spini 2 ve spini 1 olan iki parçacık bir kutu içinde durgun haldeyseler ve toplam spin 3 ve z-bileşeni 0 ise, $S_z^{(1)}$ bir kez ölçüldüğünde 1/5 olasılıkla

[40] Her ne kadar *spin* terimini kullansak da toplamlardan bir ya da ikisi yörüngesel açısal momentum da olabilir. Böyle durumlarda l harfini kullanırız.

[41] Kanıt için daha ileri düzeydeki kitaplara bakmalısınız. Örneğin; Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloe, *Quantum Mechanics*, (Wiley, New York, 1977) 2. Cilt, X. Bölüme bakınız.

[42] Genel formül, Arno Bohm, *Quantum Mechanics: Foundations and Applications*, 2nd ed., (Springer, 1986) 172. sayfada türetilmiştir.

TABLO 4.8: Clebsch-Gordan katsayıları (Tabloda katsayıları veren kısımda karekök işareti unutulmamalıdır, eksi işaretleri karekökün *dışındadır*).



$\hbar$, 3/5 olasılıkla 0 ve 1/5 olasılıkla $-\hbar$ değeri elde edilir. Olasılıkların toplamının 1 olduğuna dikkat ediniz (Clebsch-Gordan tablosunda herhangi bir sütundaki katsayıların karelerinin toplamı 1'e eşittir).

Bu tabloları ters yönde de kullanmak mümkündür. Bu durumda

$$|s_1\, m_1\rangle|s_2\, m_2\rangle = \sum_s C^{s_1 s_2 s}_{m_1 m_2 m}|s\, m\rangle \qquad [4.186]$$

olur. Örneğin 3/2 × 1 tablosundaki gölgeli sıra

$$|\tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle|1\,0\rangle = \sqrt{\tfrac{3}{5}}\,|\tfrac{5}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{15}}\,|\tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle.$$

olduğunu söyler. Spini 3/2 ve spini 1 olan parçacıkları bir kutuya yerleştirdiyseniz ve birinci parçacık için $m_1 = 1/2$ ve ikinci için $m_2 = 0$ olduğunu biliyorsanız (bu durumda m 1/2'ye eşit olacaktır), toplam spin s'yi ölçtüğünüzde 3/5 olasılıkla 5/2, 1/15 olasılıkla 3/2 ve 1/3 olasılıkla 1/2 bulursunuz. Olasılıkların toplamı yine 1'e eşittir (Clebsch-Gordan tablosundaki her bir *sırada* bulunan katsayıların karelerinin toplamı 1'e eşittir).

Tüm bunlar size sayıların gizemli anlamları olduğunu düşündürüyorsa sizi pek fazla suçlayamam. Her ne kadar kitabın geri kalan kısımlarında Clebsch-Gordan tablolarını kullanmasak da, bunlarla karşılaştığınızda ne anlama geldiklerini bilmenizi istiyorum. Matematiksel olarak tüm bunlar **grup teorisinin** uygulamalarıdır. Burada yaptığımız; bir dönme grubunun iki tane indirgenemez temsilinin direkt çarpımının, indirgenemez

temsillerin direkt toplamlarına ayrıştırılmasıdır (arkadaşlarınızı etkilemek için bu cümleyi kullanabilirsiniz).

***Problem 4.34**

(a) S_-'yi $|10\rangle$ durumuna (4.177 nolu denklem) uygulayarak, $\sqrt{2}\hbar|1-1\rangle$ elde edildiğini doğrulayınız.

(b) $S_\pm$'yi $|00\rangle$ durumuna (4.178 nolu denklem) uygulayarak, sıfır elde edileceğini gösteriniz.

(c) $|11\rangle$ ve $|1-1\rangle$ durumlarının (4.177 nolu denklem) S^2'nin uygun özdeğerli özdurumları olduğunu gösteriniz.

Problem 4.35 Kuarkların spini 1/2 dir. Üç tane kuark bağlanarak proton ya da nötron gibi **baryonları** oluştururlar. İki tane kuark (daha doğrusu bir kuark ve bir antikuark) bağlanarak pion ya da kaon gibi **mezonları** oluştururlar. Kuarkların taban durumunda bulunduklarını varsayalım böylece *yörüngesel* açısal momentum sıfır olur.

(a) Baryonlar için mümkün spin değerleri nedir?

(b) Mezonlar için mümkün spin değerleri nedir?

Problem 4.36

(a) Spini 1 ve spini 2 olan iki parçacık toplam spin 3 ve z-bileşeni $\hbar$ olan bir düzenekte durgun durumdadır. Spini 2 olan parçacığın açısal momentumunun z-bileşenini ölçtüğümüzde, hangi değerler hangi olasılıklarla elde edilir?

(b) Spini aşağı olan bir elektron hidrojen atomunun ψ_{510} durumundadır. Yalnızca elektronun (protonun spini *hariç*) toplam açısal momentumunun karesini ölçtüğümüzde, hangi değerler hangi olasılıklarla bulunur?

Problem 4.37 $\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$ olmak üzere S^2 ile $S_z^{(1)}$'nin komütatörünü hesaplayınız. Elde ettiğiniz sonucu genelleştirerek

$$[S^2, \mathbf{S}^{(1)}] = 2i\hbar(\mathbf{S}^{(1)} \times \mathbf{S}^{(2)}) \qquad [4.187]$$

olduğunu gösteriniz. *Açıklama:* $S_z^{(1)}$ ile S^2 sıra değiştirmediğinden bunların ortak özvektörleri olan durumlar bulamayız. S^2'nin özdurumlarını oluşturmak için $S_z^{(1)}$'in

özdurumlarının *lineer kombinasyonlarına* ihtiyacımız var. Bunlar da tam olarak 4.185 nolu denklemle verilen Clebsch-Gordan katsayılarıdır. Öte yandan, 4.187 nolu denklemden açıkça görüleceği gibi, $\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$ *toplamı* S^2 ile *sıra değiştirir*. Bu daha önceden zaten bildiğimiz bir şeyin (4.103 nolu denkleme bakınız) özel bir durumudur.

4. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

***Problem 4.38**

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2. \qquad [4.188]$$

potansiyeli ile verilen **üç boyutlu harmonik salınıcıyı** göz önüne alalım.

(a) Kartezyen koordinatlarda değişkenlere ayırma yönteminin üç tane bir boyutlu salınıcı verdiğini gösteriniz. Eski bilgilerinizi kullanarak izin verilen enerji değerlerini belirleyiniz. *Yanıt:*

$$E_n = (n + 3/2)\hbar\omega. \qquad [4.189]$$

(b) E_n durumunun $d(n)$ katlılığını belirleyiniz.

*****Problem 4.39** 4.188 nolu denklemle verilen üç boyutlu harmonik salınıcı potansiyeli *küresel* simetrik olduğundan, Schrödinger denklemi küresel koordinatlarda da değişkenlere ayrılarak çözülebilir. Radyal denklemi çözmek için kuvvet serisi yöntemini kullanın. Katsayılar için tekrarlama bağıntısını bulunuz ve izin verilen enerji değerlerini belirleyiniz. Yanıtınızı 4.189 nolu denklemle karşılaştırınız.

****Problem 4.40**

(a) Kararlı durumlar için

$$2\langle T\rangle = \langle \mathbf{r}\cdot\nabla V\rangle \qquad [4.190]$$

olarak verilen **üç boyutlu virial teoremini** kanıtlayınız. *Yardım:* 3.31 nolu probleme bakınız.

(b) Virial teoremini hidrojene uygulayarak,

$$\langle T\rangle = -E_n; \quad \langle V\rangle = 2E_n \qquad [4.191]$$

olduğunu gösteriniz.

(c) Virial teoremini üç boyutlu harmonik salınıcıya (4.38 nolu problem) uygulayarak,

$$\langle T\rangle = \langle V\rangle = E_n/2 \qquad [4.192]$$

olduğunu gösteriniz.

*****Problem 4.41** [Vektör hesabı hakkında yeterli bilginiz varsa bu problemi çözebilirsiniz] 1.14 nolu problemi genelleştirerek üç boyutlu **olasılık akım yoğunluğunu** tanımlayalım:

$$\mathbf{J} \equiv \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi\right). \qquad [4.193]$$

(a) **J**'nin

$$\nabla\cdot\mathbf{J} = -\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2, \qquad [4.194]$$

olarak verilen **süreklilik denklemini** sağladığını gösteriniz. Bu denklem **olasılığın yerel olarak korunumunu** ifade etmektedir. Diverjans teoremi kullanılarak,

$$\int_{\mathcal{S}} \mathbf{J}\cdot d\mathbf{a} = -\frac{d}{dt}\int_{\mathcal{V}} |\Psi|^2\, d^3\mathbf{r} \qquad [4.195]$$

yazılabilir. Burada $\mathcal{V}$ belirli bir hacmi ve $\mathcal{S}$ bu hacmi sınırlayan yüzeyi göstermektedir. Yani: bir yüzeyden dışarı doğru akan olasılık parçacığın bu yüzeyin sınırladığı hacim içinde bulunma olasılığındaki azalmaya eşittir.

(b) Hidrojenin $n = 2$, $l = 1$, $m = 1$ durumu için **J**'yi bulunuz. *Yanıt:*

$$\frac{\hbar}{64\pi m a^5} r e^{-r/a}\sin\theta\,\hat{\phi}.$$

(c) m**J**'yi *kütle akışı* olarak yorumlarsak açısal momentum

$$\mathbf{L} = m\int (\mathbf{r}\times\mathbf{J})\, d^3\mathbf{r}$$

olur. Bunu kullanarak, ψ_{211} durumu için L_z'yi hesaplayınız. Sonucu yorumlayınız.

*****Problem 4.42** Üç boyutta (zamandan bağımsız) **momentum uzayı dalga fonksiyonu** 3.54 nolu denklemin genelleştirilmesiyle elde edilir:

$$\phi(\mathbf{p}) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar}\psi(\mathbf{r})\, d^3\mathbf{r}. \qquad [4.196]$$

(a) Hidrojenin taban durumu (4.80 nolu denklem) için momentum uzayı dalga fonksiyonunu bulunuz. *Yardım:* Kutup eksenini **p** yönünde alarak küresel koordinatları kullanın. Öncelikle θ integralini yapın. *Yanıt:*

$$\phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2}\frac{1}{[1+(ap/\hbar)^2]^2}. \qquad [4.197]$$

(b) $\phi(\mathbf{p})$'nin normlanmış olup olmadığını kontrol ediniz.

(c) Hidrojenin taban durumunda, $\phi(\mathbf{p})$'yi kullanarak $\langle p^2\rangle$'yi hesaplayınız.

(d) Bu durum için kinetik enerjinin beklenen değeri nedir? Yanıtınızı E_1 cinsinden veriniz. Yanıtın 4.191 nolu denklemle verilen virial teoremi ile uyumlu olduğunu kontrol ediniz.

Problem 4.43

(a) Hidrojenin $n = 3$, $l = 2$, $m = 1$ durumu için uzaysal dalga fonksiyonunu kurunuz. Yanıtınızda ρ, z vb. değişkenler, Y, υ vb. gibi fonksiyonlar, A, c_0 vb. sabitler ya da türevler olmamalıdır. Yanıtınızı yalnızca r, θ, ϕ ve a (Bohr yarıçapı) cinsinden veriniz (π, e ve 2 vb. sayılara izin var).

(b) r, θ ve ϕ üzerinden uygun integralleri alarak dalga fonksiyonunun normlanmış olduğunu gösteriniz.

(c) Bu durum için r^s'nin beklenen değerini bulunuz. s'nin hangi değer aralığı (pozitif veya negatif) için sonuç sonlu kalır?

Problem 4.44

(a) Hidrojenin $n = 4$, $l = 3$, $m = 3$ durumu için dalga fonksiyonunu kurunuz. Yanıtınızı küresel koordinatlar r, θ ve ϕ cinsinden veriniz.

(b) Bu durum için r'nin beklenen değerini bulunuz (gerektiğinde, aşikâr olmayan-nontriviyal-integrallere bakabilirsiniz).

(c) Atom bu durumdayken $L_x^2 + L_y^2$ gözlenebilirini bir şekilde ölçebildiğinizi düşünelim. Hangi değerler hangi olasılıklarla elde edilir?

Problem 4.45 Hidrojenin atomunun taban durumunda bulunan bir elektronun *çekirdeğin içinde* bulunma olasılığı ne kadardır?

(a) 4.80 nolu denklemdeki dalga fonksiyonunun $r = 0$'a kadar geçerli olduğunu kabul ederek *kesin yanıtı* hesaplayınız. Çekirdeğin yarıçapını b alın.

(b) Sonucunuzu $\epsilon = 2b/a$ olarak tanımlanan küçük ϵ sayısına göre kuvvet serisine açınız ve en düşük mertebeli terimin kübik olduğunu gösteriniz: $P \approx (4/3)(b/a)^3$. $b \ll a$ koşulu altında, bu uygun bir yaklaşıklıktır (burada da öyledir).

(c) $P \approx (4/3)\,\pi b^3\,|\psi(0)|^2$ olacak şekilde $\psi(r)$'nin çekirdeğin (küçük) hacmi boyunca sabit olduğunu varsayabiliriz. Bu yolla da aynı sonucu elde edeceğinizi kontrol ediniz.

(d) $b \approx 10^{-15}$ m ve $a \approx 0.5 \times 10^{-10}$m alarak P için sayısal bir değer elde ediniz. Bu sayı aslında "elektronun çekirdek içinde harcadığı zaman kesrini" temsil etmektedir.

Problem 4.46

(a) 4.76 nolu denklemle verilen tekrarlama bağıntısını kullanarak, $l = n-1$ için rądyal dalga fonksiyonunun

$$R_{n(n-1)} = N_n r^{n-1} e^{-r/na}$$

şeklinde olduğunu doğrulayınız. Doğrudan integrasyonla N_n normlama sabitini belirleyiniz.

(b) $\psi_{n(n-1)m}$ formundaki durumlar için $\langle r\rangle$ ve $\langle r^2\rangle$'yi hesaplayınız.

(c) Bu durumlar için, r'deki "belirsizlik" olan σ_r'nin $\langle r\rangle/\sqrt{2n+1}$ olduğunu gösteriniz. n arttıkça r'deki kesirsel yayılmanın azaldığına (büyük n değerleri için sistem tanımlanabilir dairesel "yörüngeleri" olan klasik bir sistem gibi görünmeye başlıyor) dikkat ediniz. Bu noktayı açıklığa kavuşturmak için n'nin birkaç değeri için radyal dalga fonksiyonlarının grafiğini çiziniz.

Problem 4.47 Çakışan spektral çizgiler.[43] 4.93 nolu denklemle verilen Rydberg formülüne göre, hidrojenin spektrumundaki bir çizginin dalgaboyu ilk ve son durumların temel kuantum sayıları tarafından belirlenir. Aynı λ değerini veren iki tane ayrık $\{n_i, n_f\}$ çifti bulunuz. Örneğin {6851, 6409} ve {15283, 11687} çiftleri aynı λ'yı vermekte. Ama size bunları kullanmanız için izin yok!

Problem 4.48 $A = x^2$ ve $B = L_z$ gözlenebilirlerini alalım.

(a) $\sigma_A\sigma_B$ için belirsizlik ilkesini kurunuz.

(b) Hidrojenin ψ_{nlm} durumu için σ_B'yi hesaplayınız.

(c) Bu durum için $\langle xy\rangle$ hakkında ne söyleyebilirsiniz?

---

[43] Nicholas Wheeler, "Coincident Spectral Lines" (Reed College raporu, 2001).

Problem 4.49 Bir elektron

$$\chi = A\begin{pmatrix} 1-2i \\ 2 \end{pmatrix}$$

ile verilen spin durumundadır.

(a) χ'yı normlayarak A sabitini belirleyiniz.

(b) Bu elektron için S_z'yi ölçtüğünüzde, hangi değerler hangi olasılıklarla bulunur? S_z'nin beklenen değeri nedir?

(c) S_x'i ölçtüğünüzde, hangi değerler hangi olasılıklarla elde edilir? S_x'in beklenen değeri ne kadardır?

(d) Bu elektronda S_y'i ölçtüğünüzde, hangi değerleri hangi olasılıklarla bulursunuz? S_y'nin beklenen değeri nedir?

***Problem 4.50** İki tane 1/2 spinli parçacığın singlet (tekli) durumda oldukları (4.178 nolu denklem) biliniyor olsun. $S_a^{(1)}$, 1 numaralı parçacığın spin açısal momentumunun $\hat{a}$ birim vektörüyle tanımlanan doğrultudaki bileşeni olsun. Benzer şekilde 2. parçacığın açısal momentumunun $\hat{b}$ doğrultusundaki bileşeni $S_b^{(2)}$ olsun.

$$\langle S_a^{(1)} S_b^{(2)} \rangle = -\frac{\hbar^2}{4}\cos\theta \qquad [4.198]$$

olduğunu gösteriniz. Burada θ, $\hat{a}$ ve $\hat{b}$ birim vektörleri arasındaki açıdır.

***Problem 4.51**

(a) $s_1 = 1/2$, s_2 = herhangi bir sayı durumu için Clebsch-Gordan katsayılarını hesaplayınız. *Yardım:* $|sm\rangle$, S^2'nin bir özdurumu olacak şekilde

$$|s\,m\rangle = A|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle|s_2\,(m-\tfrac{1}{2})\rangle + B|\tfrac{1}{2}\,(-\tfrac{1}{2})\rangle|s_2\,(m+\tfrac{1}{2})\rangle$$

ifadesindeki A ve B katsayılarını bulmalısınız. 4.179 nolu denklemden 4.182 nolu denkleme kadar izlenen yöntemi kullanınız. Örneğin $S_x^{(2)}$'nin $|s_2 m_2\rangle$'ye ne yapacağını bulamıyorsanız, 4.136 nolu denkleme ve 4.147 nolu denklemden bir önceki satıra tekrar bakınız. *Yanıt:*

$$A = \sqrt{\frac{s_2 \pm m + 1/2}{2s_2+1}}; \quad B = \pm\sqrt{\frac{s_2 \mp m + 1/2}{2s_2+1}}$$

ve burada $\pm$ işaretleri $s = s_2 \pm 1/2$ durumlarını göstermektedir.

(b) Bu genel sonucu 4.8 nolu tabloda üç ya da dört farklı deneme için kontrol ediniz.

Problem 4.52 S_z'in özdurumlarını baz olarak kullanarak 3/2 spinli bir parçacık için S_x'in matris temsilini bulunuz. S_x'in özdeğerlerini belirlemek için karakteristik denklemi çözünüz.

***Problem 4.53** 1/2 (4.145 ve 4.147 nolu denklemler), 1 (4.31 nolu problem) ve 3/2 (4.52 nolu problem) spin durumlarını genelleştirerek keyfi bir s spin değeri için spin matrislerini kurunuz. *Yanıt:*

$$\mathbf{S}_z = \hbar\begin{pmatrix} s & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s-1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & s-2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -s \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & b_s & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b_s & 0 & b_{s-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_{s-1} & 0 & b_{s-2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{s-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b_{-s+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{-s+1} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -ib_s & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ ib_s & 0 & -ib_{s-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & ib_{s-1} & 0 & -ib_{s-2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ib_{s-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -ib_{-s+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & ib_{-s+1} & 0 \end{pmatrix}$$

ve burada

$$b_j \equiv \sqrt{(s+j)(s+1-j)}$$

dir.

***Problem 4.54** Küresel harmonikler için normlama çarpanını aşağıda açıklanan yoldan giderek hesaplayınız. 4.1.2. Kesimden

$$Y_l^m = B_l^m e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta)$$

olduğunu biliyoruz. Burada problem B_l^m çarpanının belirlenmesidir (bu çarpanı 4.32 nolu denklemden aktardık, türetmedik). 4.120, 4.121 ve 4.130 nolu denklemleri kullanarak,

B_l^{m+1}'i B_l^m cinsinden verecek bir tekrarlama bağıntısı elde ediniz. Bunu matematik indüksiyon yöntemiyle çözerek B_l^m'yi $C(l)$ gibi bir sabit kadar farkla bulunuz. Son aşamada, 4.22 nolu problemdeki sonucu kullanarak sabiti belirleyiniz. Assosiye Legendre fonksiyonlarının türevleri için

$$(1-x^2)\frac{dP_l^m}{dx} = \sqrt{1-x^2}\,P_l^{m+1} - mxP_l^m. \qquad [4.199]$$

şeklinde verilen bağıntı yararlı olabilir.

Problem 4.55 Bir hidrojen atomundaki elektronun toplam (tam) dalga fonksiyonu (spin ve konum kısımlarını içeren dalga fonksiyonu)

$$R_{21}\left(\sqrt{1/3}\,Y_1^0\chi_+ + \sqrt{2/3}\,Y_1^1\chi_-\right)$$

olarak verilmiştir.

(a) Yörüngesel açısal momentumun karesi (L^2) ölçülürse, hangi değerler hangi olasılıklarla elde edilir?

(b) Aynı problemi yörüngesel açısal momentumun z-bileşeni (L_z) için çözünüz.

(c) Spin açısal momentumunun karesi (S^2) için aynı problem.

(d) Spin açısal momentumunun z-bileşeni (S_z) için aynı problem.

Toplam açısal momentum $\mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S}$ olsun.

(e) J^2'yi ölçtüğünüzde, hangi değerleri hangi olasılıklarla elde edersiniz?

(f) Aynı problemi J_z için çözünüz.

(g) Parçacığın *konumunu* ölçerseniz, (r, θ, ϕ) noktasında bulunma olasılık yoğunluğu ne kadardır?

(h) Spinin z bileşeniyle orijinden uzaklık ölçülürse (bunların uyuşumlu gözlenebilirler olduklarına dikkat ediniz) parçacığın r noktasında yukarı spinle bulunma olasılık yoğunluğu ne kadardır?

***Problem 4.56**

(a) Taylor serisine açılabilen bir $f(\phi)$ fonksiyonu için

$$f(\phi+\varphi) = e^{iL_z\varphi/\hbar}f(\phi)$$

olduğunu gösteriniz. Burada φ keyfi bir açıdır. Bu nedenle $L_z/\hbar$'ye z ekseni etrafındaki **dönmelerin üreteci (jeneratörü)** denilir. *Yardım:* 4.129 nolu denklemi kullanınız ve 3.39 nolu probleme tekrar dönünüz. Genel olarak, $\mathbf{L}\cdot\hat{n}/\hbar$, $\hat{n}$ etrafındaki dönmelerin üretecidir. Yani $\exp(i\mathbf{L}\cdot\hat{n}\varphi/\hbar)$, $\hat{n}$ ekseni etrafında φ açısı kadar dönmeyi (sağ elli dönme) gerçekleştirir. *Spin* için dönmelerin üreteci $\mathbf{S}\cdot\hat{n}/\hbar$'dir. Özellikle 1/2 spin durumu için

$$\chi' = e^{i(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{n})\varphi/2}\chi \qquad [4.200]$$

spinörlerin nasıl döndüğünü tanımlar.

(b) x ekseni etrafında 180°'lik dönmeyi temsil eden (2×2)'lik matrisi kurunuz ve beklendiği gibi bunun "spin yukarı" (χ_+) durumunu "spin aşağı" (χ_-) durumuna dönüştürdüğünü gösteriniz.

(c) y ekseni etrafında 90°'lik dönmeyi temsil eden matrisi kurunuz ve bunun χ_+ durumuna etkisini kontrol ediniz.

(d) z ekseni etrafında 360°'lik dönmeyi temsil eden matrisi kurunuz. Yanıt beklediğiniz gibi değilse sonuçlarını tartışınız.

(e)

$$e^{i(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{n})\varphi/2} = \cos(\varphi/2) + i(\hat{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\sin(\varphi/2) \qquad [4.201]$$

olduğunu gösteriniz.

Problem 4.57 Açısal momentum için temel sıra değiştirme bağıntıları (4.99 nolu denklem) tamsayılar yanında yarım tamsayılı özdeğerlere de izin vermektedir. Ancak *yörüngesel* açısal momentum yalnızca tamsayı değerler alabilir. Öyleyse $\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$ şeklindeki formda yarım tamsayılı değerleri dışlayan *ilave* bir kısıtlama olmalıdır.[44] a uzunluk boyutunda (hidrojenden bahsediyorsak Bohr yarıçapı) uygun bir sabit olsun.

$$q_1 \equiv \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[x + (a^2/\hbar)p_y\right]; \quad p_1 \equiv \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[p_x - (\hbar/a^2)y\right]$$
$$q_2 \equiv \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[x - (a^2/\hbar)p_y\right]; \quad p_2 \equiv \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[p_x + (\hbar/a^2)y\right]$$

operatörlerini tanımlayalım.

(a) $[q_1, q_2] = [p_1, p_2] = 0$ ve $[q_1, p_1] = [q_2, p_2] = i\hbar$ olduğunu doğrulayınız. Böylece q'lar ve p'ler konum ve momentum için kanonik sıra değiştirme bağıntılarını sağlarlar. Yani 1 indislilerle 2 indisliler uyuşumludurlar.

(b)

$$L_z = \frac{\hbar}{2a^2}(q_1^2 - q_2^2) + \frac{a^2}{2\hbar}(p_1^2 - p_2^2)$$

olduğunu gösteriniz.

---

[44] Bu problem, Ballentine (26. dipnot) 127. sayfadaki bir tartışmaya dayanmaktadır.

(c) $L_z = H_1 - H_2$ olup olmadığını kontrol ediniz. Burada her bir H, $m = \hbar/a^2$ kütleli ve frekansı $\omega = 1$ olan bir harmonik salınıcı Hamiltonyenidir.

(d) Harmonik salınıcı Hamiltonyeninin özdeğerlerinin $n = 0, 1, 2, \ldots$ olmak üzere $(n + 1/2)\hbar\omega$ ile verildiğini biliyorsunuz (2.3.1. Kesimde verilen cebirsel teoride, bu sonuç Hamiltonyenin formundan ve kanonik sıra değiştirme bağıntılarından ortaya çıkar). Bu sonucu kullanarak L_z'in özdeğerlerinin tamsayılar olduğunu gösteriniz.

Problem 4.58 Genel bir durumda bulunan (4.139 nolu denklem) 1/2 spinli bir parçacık için S_x ve S_y'deki minimum belirsizlik koşulunu elde ediniz (yani $\sigma_{S_x}\sigma_{S_y} \geq (\hbar/2)\left|\langle S_z\rangle\right|$ ifadesindeki *eşitlik* durumuna bakacaksınız). *Yanıt:* Genellikten hiçbir şey kaybetmeden a'yı reel alabiliriz. Böylece minimum belirsizlik için gerekli koşul b'nın saf reel veya saf sanal olmasıdır.

***Problem 4.59** Klasik elektrodinamikte, **E** ve **B** elektrik ve manyetik alanları içinde **v** hızıyla hareket eden q yüklü bir parçacığın üzerindeki kuvvet **Lorentz kuvvet yasasıyla** verilir:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \qquad [4.202]$$

Bu kuvvet bir skalar potansiyel enerji fonksiyonunun gradyenti olarak ifade edilemez ve bu yüzden Schrödinger denklemi, 1.1 nolu denklemle verilen orijinal formuyla kullanılamaz. Ancak

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \qquad [4.203]$$

şeklindeki formunu kullanırsak sorun çıkmaz. Klasik Hamiltonyen[45]

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\varphi \qquad [4.204]$$

dir. Burada **A** vektör potansiyel ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$) ve φ skalar potansiyeldir. Elektrik alan $\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \partial\mathbf{A}/\partial t$ ile verilir. $\mathbf{p} \to (\hbar/i)\nabla$ kanonik ataması yapılırsa Schrödinger denklemi

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 + q\varphi\right]\Psi} \qquad [4.205]$$

olarak elde edilir.

[45] Örneğin, H. Goldstein, C. P. Poole and J. L. Safko, *Classical Mechanics*, 3rd ed. (Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2002) 342. sayfaya bakabilirsiniz.

(a)

$$\frac{d\langle\mathbf{r}\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle(\mathbf{p} - q\mathbf{A})\rangle \qquad [4.206]$$

olduğunu gösteriniz

(b) Her zaman için $\langle\mathbf{v}\rangle$'yi $d\langle\mathbf{r}\rangle/dt$ olarak tanımlayabiliriz (1.32 nolu denkleme bakınız).

$$m\frac{d\langle\mathbf{v}\rangle}{dt} = q\langle\mathbf{E}\rangle + \frac{q}{2m}\langle(\mathbf{p}\times\mathbf{B} - \mathbf{B}\times\mathbf{p})\rangle - \frac{q^2}{m}\langle(\mathbf{A}\times\mathbf{B})\rangle \qquad [4.207]$$

olduğunu gösteriniz.

(c) Özel olarak, **E** ve **B** alanları dalga paketinin hacmi boyunca *düzgünseler*

$$m\frac{d\langle\mathbf{v}\rangle}{dt} = q(\mathbf{E} + \langle\mathbf{v}\rangle \times \mathbf{B}) \qquad [4.208]$$

olduğunu gösteriniz. Böylece, Ehrenfest teoreminden beklendiği gibi $\langle\mathbf{v}\rangle$'nin *beklenen değeri* Lorentz kuvvet yasasına göre hareket eder.

***Problem 4.60** (Öncelikle 4.59 nolu probleme bakınız)

$$\mathbf{A} = \frac{B_0}{2}(x\hat{\jmath} - y\hat{\imath}) \quad \text{ve} \quad \varphi = Kz^2$$

olarak verildiğini varsayalım. Burada B_0 ve K sabittir.

(a) **E** ve **B** alanlarını bulun.

(b) Bu alanlar içinde bulunan, kütlesi m ve yükü q olan bir parçacık için izin verilen enerji değerlerini bulun. *Yanıt:*

$$E(n_1, n_2) = (n_1 + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_1 + (n_2 + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_2, \quad (n_1, n_2 = 0, 1, 2, \ldots) \qquad [4.209]$$

Burada $\omega_1 \equiv qB_0/m$ ve $\omega_2 \equiv \sqrt{2qK/m}$ dir. *Açıklama:* $K = 0$ durumu **siklotron hareketinin** kuantum benzeridir. ω_1 klasik siklotron frekansıdır. Parçacık z-yönünde serbesttir. $(n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega_1$ enerjilerine **Landau düzeyleri**[46] denilir.

Problem 4.61 (Öncelikle 4.59 nolu probleme bakınız) Klasik elektrodinamikte **A** ve φ potansiyelleri *tek* olarak belirlenemezler[47]; bu nedenle *fiziksel* büyüklükler **E** ve **B** *alanlarıdır*.

[46] Daha ileri düzeydeki tartışma için Ballentine (26. dipnot), 11.3. Kesime bakınız.
[47] Örneğin, Griffiths (30. dipnot), 10.1.2. Kesime bakabilirsiniz.

(c) $L_z = H_1 - H_2$ olup olmadığını kontrol ediniz. Burada her bir H, $m = \hbar/a^2$ kütleli ve frekansı $\omega = 1$ olan bir harmonik salınıcı Hamiltonyenidir.

(d) Harmonik salınıcı Hamiltonyeninin özdeğerlerinin $n = 0, 1, 2, \ldots$ olmak üzere $(n + 1/2)\hbar\omega$ ile verildiğini biliyorsunuz (2.3.1. Kesimde verilen cebirsel teoride, bu sonuç Hamiltonyenin formundan ve kanonik sıra değiştirme bağıntılarından ortaya çıkar). Bu sonucu kullanarak L_z'in özdeğerlerinin tamsayılar olduğunu gösteriniz.

Problem 4.58 Genel bir durumda bulunan (4.139 nolu denklem) 1/2 spinli bir parçacık için S_x ve S_y'deki minimum belirsizlik koşulunu elde ediniz (yani $\sigma_{S_x}\sigma_{S_y} \geq (\hbar/2)\left|\langle S_z\rangle\right|$ ifadesindeki *eşitlik* durumuna bakacaksınız). *Yanıt:* Genellikten hiçbir şey kaybetmeden a'yı reel alabiliriz. Böylece minimum belirsizlik için gerekli koşul b'nın saf reel veya saf sanal olmasıdır.

***Problem 4.59** Klasik elektrodinamikte, **E** ve **B** elektrik ve manyetik alanları içinde **v** hızıyla hareket eden q yüklü bir parçacığın üzerindeki kuvvet **Lorentz kuvvet yasasıyla** verilir:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \qquad [4.202]$$

Bu kuvvet bir skalar potansiyel enerji fonksiyonunun gradyenti olarak ifade edilemez ve bu yüzden Schrödinger denklemi, 1.1 nolu denklemle verilen orijinal formuyla kullanılamaz. Ancak

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \qquad [4.203]$$

şeklindeki formunu kullanırsak sorun çıkmaz. Klasik Hamiltonyen[45]

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\varphi \qquad [4.204]$$

dir. Burada **A** vektör potansiyel ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$) ve φ skalar potansiyeldir. Elektrik alan $\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \partial\mathbf{A}/\partial t$ ile verilir. $\mathbf{p} \to (\hbar/i)\nabla$ kanonik ataması yapılırsa Schrödinger denklemi

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 + q\varphi\right]\Psi} \qquad [4.205]$$

olarak elde edilir.

[45] Örneğin, H. Goldstein, C. P. Poole and J. L. Safko, *Classical Mechanics*, 3rd ed. (Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2002) 342. sayfaya bakabilirsiniz.

(a)

$$\frac{d\langle\mathbf{r}\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle(\mathbf{p} - q\mathbf{A})\rangle \qquad [4.206]$$

olduğunu gösteriniz

(b) Her zaman için $\langle\mathbf{v}\rangle$'yi $d\langle\mathbf{r}\rangle/dt$ olarak tanımlayabiliriz (1.32 nolu denkleme bakınız).

$$m\frac{d\langle\mathbf{v}\rangle}{dt} = q\langle\mathbf{E}\rangle + \frac{q}{2m}\langle(\mathbf{p}\times\mathbf{B} - \mathbf{B}\times\mathbf{p})\rangle - \frac{q^2}{m}\langle(\mathbf{A}\times\mathbf{B})\rangle \qquad [4.207]$$

olduğunu gösteriniz.

(c) Özel olarak, **E** ve **B** alanları dalga paketinin hacmi boyunca *düzgünseler*

$$m\frac{d\langle\mathbf{v}\rangle}{dt} = q(\mathbf{E} + \langle\mathbf{v}\rangle \times \mathbf{B}) \qquad [4.208]$$

olduğunu gösteriniz. Böylece, Ehrenfest teoreminden beklendiği gibi $\langle\mathbf{v}\rangle$'nin *beklenen değeri* Lorentz kuvvet yasasına göre hareket eder.

***Problem 4.60** (Öncelikle 4.59 nolu probleme bakınız)

$$\mathbf{A} = \frac{B_0}{2}(x\hat{j} - y\hat{\imath}) \quad \text{ve} \quad \varphi = Kz^2$$

olarak verildiğini varsayalım. Burada B_0 ve K sabittir.

(a) **E** ve **B** alanlarını bulun.

(b) Bu alanlar içinde bulunan, kütlesi m ve yükü q olan bir parçacık için izin verilen enerji değerlerini bulun. *Yanıt:*

$$E(n_1, n_2) = (n_1 + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_1 + (n_2 + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_2, \quad (n_1, n_2 = 0, 1, 2, \ldots) \qquad [4.209]$$

Burada $\omega_1 \equiv qB_0/m$ ve $\omega_2 \equiv \sqrt{2qK/m}$ dir. *Açıklama:* $K = 0$ durumu **siklotron hareketinin** kuantum benzeridir. ω_1 klasik siklotron frekansıdır. Parçacık z-yönünde serbesttir. $\left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1$ enerjilerine **Landau düzeyleri**[46] denilir.

Problem 4.61 (Öncelikle 4.59 nolu probleme bakınız) Klasik elektrodinamikte **A** ve φ potansiyelleri *tek* olarak belirlenemezler[47]; bu nedenle *fiziksel* büyüklükler **E** ve **B** *alanlarıdır*.

[46] Daha ileri düzeydeki tartışma için Ballentine (26. dipnot), 11.3. Kesime bakınız.
[47] Örneğin, Griffiths (30. dipnot), 10.1.2. Kesime bakabilirsiniz.

(a)

$$\varphi' \equiv \varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \mathbf{A}' \equiv \mathbf{A} + \nabla \Lambda \qquad [4.210]$$

olarak tanımlanan potansiyellerin, φ ve **A** ile elde edilen alanlar ile aynı alanları verdiğini gösteriniz. Burada Λ konum ve zamanın keyfi bir reel fonksiyonudur. 4.210 nolu denkleme **ayar dönüşümü** denir ve teori **ayar değişmezliğine** sahiptir.

(b) Kuantum mekaniğinde potansiyeller doğrudan rol oynarlar ve bu nedenle teorinin ayar değişmez kalıp kalmadığını bilmek önem kazanır.

$$\Psi' \equiv e^{iq\Lambda/\hbar}\Psi \qquad [4.211]$$

ile verilen Ψ'nün ayar dönüştürülmüş φ' ve $\mathbf{A}'$ potansiyellerini içeren Schrödinger denklemini (4.205 nolu denklem) sağladığını gösteriniz. Ψ', Ψ'den sadece bir *faz çarpanı* kadar farklı olduğundan aynı fiziksel durumu temsil etmektedir[48] ve teori ayar değişmezdir (daha ileri düzeyde tartışma için 10.2.3. Kesime bakınız).

[48] Yani $\langle \mathbf{r} \rangle$ ve $d\langle \mathbf{r} \rangle/dt$ değişmeden kalır. Λ konuma bağlı olduğundan $\langle \mathbf{p} \rangle$ ($\mathbf{p}$, $(\hbar/i)\nabla$ operatörüyle temsil edilmekte) *değişir*, ancak 4.206 nolu denklemden bulduğumuz gibi $\mathbf{p}$, bu bağlamda mekanik momentum $m\mathbf{v}$'yi temsil etmez (Lagrange mekaniğinde buna **kanonik momentum** denilir).

5. BÖLÜM

ÖZDEŞ PARÇACIKLAR

5.1 İKİ PARÇACIKLI SİSTEMLER

Tek parçacık için $\Psi(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{r}$ uzay koordinatları ve t zaman koordinatının bir fonksiyonudur (şimdilik spin'i yok sayacağız). İki parçacıklı sistemin durumu 1-inci parçacığın koordinatları ($\mathbf{r}_1$), 2-inci parçacığın koordinatları ($\mathbf{r}_2$) ve zamanın fonksiyonu olarak

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \qquad [5.1]$$

şeklinde yazılır. Bunun zamana göre değişimi her zamanki gibi Schrödinger denklemi ile belirlenir:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \qquad [5.2]$$

ve burada H tüm sisteme karşılık gelen Hamiltonyen'dir;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)\,. \qquad [5.3]$$

(∇ operatörlerindeki alt indisler 1-inci parçacık ve 2-inci parçacığın koordinatlarına göre olan türevleri belirtir). İstatistiksel yorumu:

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2\, d^3\mathbf{r}_1\, d^3\mathbf{r}_2 \qquad [5.4]$$

1-inci parçacığın $d^3\mathbf{r}_1$ hacminde ve 2-inci parçacığın $d^3\mathbf{r}_2$ hacminde bulunma olasılığıdır ve doğal olarak normlama

$$\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2\, d^3\mathbf{r}_1\, d^3\mathbf{r}_2 = 1 \qquad [5.5]$$

şeklindedir.

Zamandan bağımsız potansiyeller için, değişkenlere ayırma yöntemi ile tam bir çözüm takımı elde ederiz:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)e^{-iEt/\hbar} \qquad [5.6]$$

ve burada ψ

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2\psi + V\psi = E\psi \qquad [5.7]$$

zamandan bağımsız Schrödinger denklemini sağlayan uzaysal dalga fonksiyonu iken, E sistemin toplam enerjisidir.

**Problem 5.1 Tipik olarak etkileşim potansiyeli sadece iki parçacık arasındaki bağıl konum vektörü olan $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$'ye bağlıdır. Bu durumda $\mathbf{R} \equiv (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ (kütle merkezi) tanımlayıp, $\mathbf{r}_1$ ve $\mathbf{r}_2$ değişkenlerini $\mathbf{r}$ ve $\mathbf{R}$ cinsinden yazarsak, Schrödinger denklemi değişkenlerine ayrılabilir duruma gelir.

(a) $\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + (\mu/m_1)\mathbf{r}$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - (\mu/m_2)$ ve $\nabla_1 = (\mu/m_2)\nabla_R + \nabla_r$, $\nabla_2 = (\mu/m_1)\nabla_R - \nabla_r$ olduğunu gösterin. Burada

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \qquad [5.8]$$

olmak üzere **indirgenmiş kütle**'dir.

(b) Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin aşağıdaki şekli aldığını gösterin.

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\nabla_R^2\psi - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi.$$

(c) $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi_R(\mathbf{R})\,\psi_r(\mathbf{r})$ şeklinde değişken ayrımı yapınız. Yalnız, burada ψ_r, m'nin yerini indirgenmiş kütlenin aldığı, V potansiyelli ve E_r enerjili tek parçacık için Schrödinger denklemini sağlarken, ψ_R'nin m'nin yerini $(m_1 + m_2)$ toplam kütlesinin aldığı, sıfır potansiyelli ve E_R enerjili tek parçacık için Schrödinger denklemini sağladığına dikkat edin. Bu bize kütle merkezinin serbest parçacık gibi hareket ettiğini ve bağıl hareketin (2-inci parçacığın 1-inci parçacığa göre hareketi) ise kütlesi indirgenmiş kütle olan, V potansiyeli ile etkileşen bir parçacığın hareketiymiş gibi olduğunu söyler. Aynı ayrıştırma Klasik Mekanikte[1] de olur: İki cisim problemini bir cisim problemine indirger.

---

[1] Jerry B, Marion ve Stephen T. Thornton, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, 4 th ed., Saunders, Forth Worth, TX (1995), 8.2. Kesime bakınız.

Problem 5.2 5.1 nolu problemin yardımı ile hidrojen çekirdeğinin hareketini sadece elektron kütlesi yerine indirgenmiş kütle koyarak düzeltebiliriz.

(a) Hidrojenin bağlanma enerjisinin hesaplanmasında m yerine μ kullanılmasının (4.77 nolu denklem) yol açtığı hata yüzdesini (iki basamağa kadar) hesaplayın.

(b) Hidrojen ve döteryum için kırmızı Balmer çizgileri ($n = 3 \rightarrow n = 2$) arasındaki dalga boyunda ayrışmayı bulun.

(c) Pozitronyum'un (protonun yerini bir pozitronun aldığı durum. Pozitronlar elektronlarla aynı kütleye fakat zıt yüke sahiptirler.) bağlanma enerjisini bulun.

(d) Elektronun yerini müyonun aldığı durum olan müyonik hidrojenin varlığını göstermek istediğimizi varsayalım (*müyon* elektron ile aynı yüke sahip fakat 206.77 kat daha ağırdır). "Lyman-α" çizgisini ($n = 2 \rightarrow n = 1$) nerede, bir başka deyişle hangi dalga boyunda arardınız?

Problem 5.3 Klor'ün doğal yollarla oluşan Cl^{35} ve Cl^{32} olmak üzere iki izotopu vardır. HCl'nin titreşimsel spektrumunun $\Delta\nu = 7.51 \times 10^{-4}\nu$ kadar bir aralıkla ayrıştırılmış çok yakın çiftlerden oluştuğunu gösterin. Burada ν yayılan fotonun frekansıdır. *Yardım*: HCl molekülünü $\omega = \sqrt{k/\mu}$ frekanslı harmonik bir salınıcı gibi düşünün ve μ 5.8 nolu denklemdeki indirgenmiş kütledir. Her iki izotop için k'nın aynı olduğunu varsayın.

5.1.1 Bozonlar ve Fermiyonlar

1-inci ve 2-inci parçacığın sırasıyla $\psi_a(\mathbf{r})$ ve $\psi_b(\mathbf{r})$ tek parçacık durumlarında olduklarını varsayalım. O zaman $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, bu iki durumun basit bir çarpımı olur:[2]

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2). \qquad [5.9]$$

Doğal olarak bu, parçacıkların ayırt edilebilir olduklarının varsayılması demektir. Öteki türlü, 1-inci parçacığın ψ_a durumunda ve 2-inci parçacığın ψ_b durumunda olduğunu iddia etmenin bir anlamı kalmazdı ve söyleyebileceğimiz tek şey hangi parçacığın hangi durumda olduğunu bilmeden birinin ψ_a durumunda diğerininde ψ_b durumunda bulunduğu olurdu. Çünkü, parçacıklar her zaman ayırt edilebilirdir. Klasik Mekanikte hangisinin hangisi olduğu sorusu gülünç olurdu. Birini kırmızıya diğerini maviye

[2] Her iki parçacıklı dalga fonksiyonunun iki tek parçacık dalga fonksiyonunun çarpımı olduğu kesinlikle *doğru* değildir. Bu şekilde *ayrıştırılamayan* ve **dolanık** diye adlandırılan durumlar vardır. Öte yandan, 1-inci parçacık a durumunda ve 2-inci parçacık b durumunda ise, o zaman iki parçacıklı durum bir çarpımdır. Ne düşündüğünüzü biliyorum: "Nasıl olurda 1-inci parçacık *herhangi* bir durumda bulunamazken 2-inci parçacık *başka* bir durumda bulunabilir?" Buna klasik örnek tekli spin düzeneğidir (4.178 nolu denklem). Size 1-inci parçacığın sadece kendisinin durumu ile ilgili bir şey söyleyemem çünkü 2-inci parçacığın durumu ile "dolanık"tır (Schrödinger'in güzel tanımlaması). Eğer 2-inci parçacık için yapılan ölçümde durumu *aşağı* spinli bulunursa, 1-inci parçacık *yukarı* spinli olur. 2-inci parçacık *yukarı* spinli bulunursa, o zaman 1-inci parçacık *aşağı* spinli olur.

boyayabilir veya üzerlerine kimlik numarası yapıştırabilir ve onları takip edecek özel dedektifler tutabilirsiniz. Fakat kuantum mekaniğinde durum temelde farklıdır. Bir elektronu kırmızıya boyayamazsınız veya üzerini etiketleyemezsiniz. Ayrıca, bir dedektifin gözlemleri kaçınılmaz ve öngörülemez bir şekilde elektronun durumunu değiştirir. Bu sadece bizim hangi elektronun hangisi olduğunu bilemiyor olmamızdan değildir. Çünkü "bu" ya da "şu" elektron diye bir şey yok. Söyleyebileceğimiz tek şey "bir" elektrondur.

Kuantum mekaniği *ayırt edilemez* parçacıklarının varlığını çok güzel bir şekilde içinde barındırır. Hangi parçacığın hangi durumda olduğunu gösterebilmek için sadece *sıra değiştirme özelliği göstermeyen* bir dalga fonksiyonu oluştururuz. Bunu yapmanın gerçekte iki yolu vardır:

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)]. \qquad [5.10]$$

Yani, teori bize iki çeşit özdeş parçacığın var olduğunu söylüyor. Artı işareti ile gösterilen **bozonlar** ve eksi işareti ile gösterilen **fermiyonlardır**. Öyle ki,

$$\begin{cases} \textit{spini tamsayı} \text{ olan tüm parçacıklar bozon ve} \\ \textit{spini yarım tamsayı} \text{ olan tüm parçacıklar fermiyondur.} \end{cases} \qquad [5.11]$$

Spin ve istatistik arasındaki bu ilişkinin varlığı *relativistik* kuantum mekaniğinde *gösterilebilir* (daha sonra göreceğimiz gibi bozonlar ve fermiyonlar oldukça farklı istatistiksel özelliklere sahiptirler). Relativistik olmayan durumda bir aksiyom olarak kabul edilir.[3]

Buradan çıkan özel sonuç şudur: *İki özdeş fermiyon* (örneğin iki elektron) aynı durumda bulunamazlar. Çünkü, $\psi_a = \psi_b$ olursa,

$$\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)] = 0$$

olur ve elinizde hiçbir dalga fonksiyonu kalmaz.[4] Bu çok bilinen **Pauli dışarlama ilkesinden** başka bir şey değildir. Şöyle ya da böyle inandırılmış olabileceğiniz gibi, bu sadece ve sadece elektronlara uygulanan bir varsayım değil, iki parçacıklı sistemin dalga fonksiyonunu oluşturmanın kurallarının ortaya çıkarttığı ve *tüm* özdeş parçacıklara uygulanan bir sonuçtur.

Anlaşılabilir olsun diye bir parçacık ψ_a durumunda iken öteki parçacığın ψ_b durumunda olduğunu varsayalım. Problemi matematiksel olarak ortaya koyacak çok daha genel ve

[3] *Relativitenin* bununla bir ilgisi olması tuhaf görünüyor olabilir ve son zamanlarda spin-istatistik ilişkisini başka basit yollarla ispatlanabilir olup olmayacağı konusunda çok yoğun tartışma da var. Örneğin Robert C. Hilborn, Am. J. Phys. **63**, 298 (1995); Ian Duck and E. C. G. Sudarshan, *Pauli and the Spin-Statistics Theorem*, World Scientific, Singapore (1997)'e bakınız.

[4] Unutmayın hala spin'i gözönüne almıyoruz. Bu yok sayma sizi rahatsız ediyorsa (ne de olsa spinsiz fermiyon terminolojik olarak da bir çelişki), *aynı* spin durumunda olduklarını varsayın. Çok geçmeden spini açık olarak dahil edeceğiz.

güzel bir yol var: İki parçacığın yerlerini değiştiren P **değiştokuş operatörünü** tanımlayalım:

$$Pf(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \qquad [5.12]$$

Aşikar olarak, $P^2 = 1$'dir ve bu da P'nin özdeğerlerinin ± 1 olduğunu gösterir (kanıtını kendiniz yapın). Şimdi iki parçacık özdeş ise, Hamiltonyen parçacıkları aynı şekilde ele almalı: $m_1 = m_2$ ve $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$. Bu da, P ve H'nın uyuşumlu gözlenebilirler olduğunu söyler,

$$[P, H] = 0 \qquad [5.13]$$

ve böylece her iki operatörün ortak özdurumları olan tam bir fonksiyon takımı elde edilir. Bir başka deyişle Schrödinger denklemine öyle çözümler buluruz ki bu çözümler değiştokuş işlemi altıda ya simetrik (+1 özdeğerli) ya da antisimetrik (-1 özdeğerli) olurlar.

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1).} \qquad [5.14]$$

Ayrıca, bir sistem başlangıçta böyle bir durumda ise, aynı durumu koruyacaktır. **Simetrileştirme koşulu** diye adlandıracağım bu *yeni* kural şunu ifade eder: özdeş parçacık dalga fonksiyonları 5.14 nolu denklem ile verilen koşulu sağlamak *zorundadırlar*. Artı işareti bozonlar için, eksi işareti fermiyonlar içindir.[5] Bu 5.10 nolu denklemi özel bir durum olarak içeren genel bir ifadedir.

Örnek 5.1 Birbirleriyle etkileşmeyen iki parçacığımızın (birbirlerini es geçen) olduğunu varsayın (pratikte bunu nasıl oluşturacağınızı dert etmeyin). Parçacıkların her ikisinin de kütlesi m olsun ve sonsuz kuyu potansiyelinde bulunsunlar (2.2. Kesim). Tek parçacık durumları aşağıdaki gibidir:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad E_n = n^2K.$$

Burada kolaylık olsun diye $K \equiv \pi^2\hbar^2/ma^2$ alınmıştır. 1-inci parçacık n_1 durumunda ve 2-inci parçacık n_2 durumunda olacak şekilde parçacıklar *ayırt edilebilir* ise, bileşik dalga fonksiyonu basit bir çarpım olur:

$$\psi_{n_1n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2), \quad E_{n_1n_2} = (n_1^2 + n_2^2)K.$$

[5] Bazen 5.14 nolu denklemde verilen simetrileştirme koşulunun P ve H'nın sıra değiştirebilme *özelliğinin sonucu* olduğu söylenir. Bu doğru değildir: Hamiltonyeni simetrik olan ve bununla beraber dalga fonksiyonu üzerinde simetrik ya da antisimetrik olma koşulu olmayan iki *ayırt edilebilen* parçacıklı (örneğin bir elektron ve bir proton) sistem düşünmek pekala mümkündür. Fakat *özdeş* parçacıklar ya simetrik ya da antisimetrik durumda olmak zorundadırlar ve bu *yeni bir temel yasadır*. Doğal olarak, özdeş parçacıklar gibi bir şeyler *var* olmak zorunda değildi: doğada her bir tek parçacık diğerlerinden ayırt ediliyor olabilirdi. Kuantum mekaniği özdeş parçacık *olasılığını* ortaya koyunca, tembel doğa da fırsatı kaçırmadı. (Bundan şikayet etmiyorum çünkü bu her şeyi çok daha basit kılıyor!).

Örneğin, taban durumuna bakarsak,

$$\psi_{11} = \frac{2}{a}\sin(\pi x_1/a)\sin(\pi x_2/a), \quad E_{11} = 2K$$

dır ve ilk uyarılmış durum 2 kez katlıdır (yozdur).

$$\psi_{12} = \frac{2}{a}\sin(\pi x_1/a)\sin(2\pi x_2/a), \quad E_{12} = 5K,$$

$$\psi_{21} = \frac{2}{a}\sin(2\pi x_1/a)\sin(\pi x_2/a), \quad E_{21} = 5K;$$

ve diğerleri böylece devam eder. İki parçacık özdeş *bozon* ise, taban durumu değişmez, fakat ilk uyarılmış durum *katlı* değildir:

$$\frac{\sqrt{2}}{a}\left[\sin(\pi x_1/a)\sin(2\pi x_2/a) + \sin(2\pi x_1/a)\sin(\pi x_2/a)\right].$$

Enerji hala 5K'dır. Parçacıklar özdeş *fermiyon* ise, 2K enerjili durumlar yoktur, taban durumu

$$\frac{\sqrt{2}}{a}\left[\sin(\pi x_1/a)\sin(2\pi x_2/a) - \sin(2\pi x_1/a)\sin(\pi x_2/a)\right]$$

şeklindedir ve enerjisi 5K'dır.

***Problem 5.4**

(a) ψ_a ve ψ_b birbirlerine ortogonal ve normlanmış ise, 5.10 nolu denklemdeki A sabitini bulunuz.

(b) Eğer $\psi_a = \psi_b$ ve normlanmış ise, A sabiti nedir? (Bu özel durum doğal olarak sadece bozonlar için geçerlidir).

Problem 5.5

(a) Sonsuz kuyu potansiyelinde birbirleri ile etkileşmeyen iki özdeş parçacık için Hamiltonyeni yazınız. 5.1 nolu örnekte verilen fermiyon taban durumunun H'nın uygun bir özdeğerine karşılık gelen bir özfonksiyonu olduğunu gösterin.

(b) Ayırt edilen parçacıklar, özdeş bozonlar ve özdeş fermiyonlar için ayrı ayrı 5.1 nolu örnekte bulunanlardan sonraki iki uyarılmış duruma karşılık gelen dalga fonksiyonlarını ve enerjileri bulunuz.

5.1.2 Değiştokuş Kuvvetleri

Simetrileştirme koşulunun gerçek anlamda ne yaptığını bir parça olsun gösterebilmek için basit, bir boyutlu bir örnek üzerine çalışacağım. Bir parçacığın $\psi_a(x)$ durumunda, diğerinin de $\psi_b(x)$ durumunda olduğunu ve bu iki durumun da ortogonal ve normlanmış olduğunu varsayalım. Eğer bu iki parçacık ayırt edilebilir ise ve 1 sayısı ψ_a durumunda olan parçacığı gösteriyorsa, o zaman sistemin dalga fonksiyonu

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \qquad [5.15]$$

şeklinde yazabiliriz. Bu iki parçacık özdeş bozonlar ise, bileşik dalga fonksiyonu (normlama için 5 nolu probleme bakınız)

$$\psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \qquad [5.16]$$

ve eğer bunlar özdeş fermiyonlarsa, sistemin dalga fonksiyonu

$$\psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \qquad [5.17]$$

şeklini alır.

İki parçacık arasındaki mesafenin karesinin beklenen değerini hesaplayalım:

$$\langle(x_1 - x_2)^2\rangle = \langle x_1^2\rangle + \langle x_2^2\rangle - 2\langle x_1 x_2\rangle. \qquad [5.18]$$

1. Durum: Ayırt edilebilen parçacıklar. 5.15 nolu denklem ile verilen dalga fonksiyonu için

$$\langle x_1^2\rangle = \int x_1^2|\psi_a(x_1)|^2\,dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2\,dx_2 = \langle x^2\rangle_a$$

(ψ_a tek parçacık durumunda x^2'nin beklenen değeri),

$$\langle x_2^2\rangle = \int |\psi_a(x_1)|^2\,dx_1 \int x_2^2|\psi_b(x_2)|^2\,dx_2 = \langle x^2\rangle_b,$$

olur ve

$$\langle x_1 x_2\rangle = \int x_1|\psi_a(x_1)|^2\,dx_1 \int x_2|\psi_b(x_2)|^2\,dx_2 = \langle x\rangle_a\langle x\rangle_b$$

elde edilir. Bu durumda,

$$\langle(x_1 - x_2)^2\rangle_d = \langle x^2\rangle_a + \langle x^2\rangle_b - 2\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b \qquad [5.19]$$

olur. (Aklıma gelmişken, 1-inci parçacık ψ_b durumunda ve 2-inci parçacık ψ_a durumunda olmuş olsalardı, yanıt doğal olarak aynı oldurdu).

2. Durum: Özdeş parçacıklar. 5.16 ve 5.17 nolu denklemleri ile verilen dalga fonksiyonları için

$$\begin{aligned}\langle x_1^2\rangle = \frac{1}{2}\Big[&\int x_1^2|\psi_a(x_1)|^2\,dx_1\int|\psi_b(x_2)|^2\,dx_2\\ &+\int x_1^2|\psi_b(x_1)|^2\,dx_1\int|\psi_a(x_2)|^2\,dx_2\\ &\pm\int x_1^2\psi_a(x_1)^*\psi_b(x_1)\,dx_1\int\psi_b(x_2)^*\psi_a(x_2)\,dx_2\\ &\pm\int x_1^2\psi_b(x_1)^*\psi_a(x_1)\,dx_1\int\psi_a(x_2)^*\psi_b(x_2)\,dx_2\Big]\\ =\frac{1}{2}\Big[\langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b\pm 0\pm 0\Big] &= \frac{1}{2}\Big(\langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b\Big)\end{aligned}$$

elde edilir. Benzer şekilde,

$$\langle x_2^2\rangle = \frac{1}{2}\Big(\langle x^2\rangle_b+\langle x^2\rangle_a\Big)$$

bulunur. Parçacıklar ayırt edilemez olduğundan, doğal olarak $\langle x_2^2\rangle = \langle x_1^2\rangle$ olur. Fakat,

$$\begin{aligned}\langle x_1x_2\rangle = \frac{1}{2}\Big[&\int x_1|\psi_a(x_1)|^2\,dx_1\int x_2|\psi_b(x_2)|^2\,dx_2\\ &+\int x_1|\psi_b(x_1)|^2\,dx_1\int x_2|\psi_a(x_2)|^2\,dx_2\\ &\pm\int x_1\psi_a(x_1)^*\psi_b(x_1)\,dx_1\int x_2\psi_b(x_2)^*\psi_a(x_2)\,dx_2\\ &\pm\int x_1\psi_b(x_1)^*\psi_a(x_1)\,dx_1\int x_2\psi_a(x_2)^*\psi_b(x_2)\,dx_2\Big]\\ =\frac{1}{2}\big(\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b+\langle x\rangle_b\langle x\rangle_a\pm\langle x\rangle_{ab}\langle x\rangle_{ba}\pm\langle x\rangle_{ba}\langle x\rangle_{ab}\big)\\ =\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b\pm|\langle x\rangle_{ab}|^2\end{aligned}$$

olur. Burada

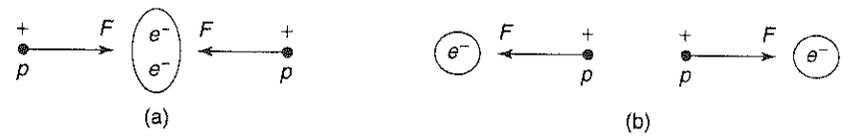
$$\langle x\rangle_{ab}\equiv\int x\psi_a(x)^*\psi_b(x)\,dx \qquad [5.20]$$

dir. Böylece,

$$\langle(x_1-x_2)^2\rangle_\pm = \langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b-2\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b\mp 2|\langle x\rangle_{ab}|^2 \qquad [5.21]$$

elde edilir. 5.19 ve 5.21 nolu denklemleri kıyasladığımızda, farkın en son terimde yattığını görürüz.

$$\langle(\Delta x)^2\rangle_\pm = \langle(\Delta x)^2\rangle_d\mp 2|\langle x\rangle_{ab}|^2. \qquad [5.22]$$



ŞEKİL 5.1: Kovalent bağlanmanın şematik gösterimi: (a) Simetrik düzenek çekici kuvvet'e sebep olur. (b) Antisimetrik düzenek itici kuvvet'e neden olur.

Özdeş bozonlar (üstteki işaretler) aynı durumda bulunan iki ayırt edilebilir parçacığa nazaran daha yakın olmak isterlerken, özdeş fermiyonlar (alttaki işaretler) ise daha ayrık olmak isterler. Bu iki dalga fonksiyonu *üst üste binmedikleri* sürece, $\langle x\rangle_{ab}$'nın sıfır olduğuna dikkat edin ($\psi_b(x)$'in *sıfır olmadığı* her yerde $\psi_a(x)$ sıfır ise, 5.20 nolu denklemde integral sıfır verir). Yani, ψ_a Chicago'daki bir atomun bir elektronunu temsil eder ve ψ_b de Seattle'daki bir atomun bir elektronunu temsil ederse, dalga fonksiyonunu antisimetrik yapıp yapmamamız hiçbir değişikliğe yol açmayacaktır. Bu nedenle *pratik* yaklaşım olarak üst üste binmeyen dalga fonksiyonlarına sahip elektronların ayırt edilebilir olduğunu söylemekte bir sakınca yoktur. Aslında bu fizikçilerin ve kimyacıların önünü açan *tek şeydir*. Çünkü *genel olarak* evrendeki her bir elektron diğer bir elektrona dalga fonksiyonlarının antisimetrik olması koşulu ile bağlıdır ve eğer bu gerçekten *önemli* olsaydı, *var olan tüm elektronlarla* muhatap olmaya hazır olmadığımız sürece hiçbir elektron hakkında konuşamazdık.

İlginç olan durum dalga fonksiyonlarının üst üste bindiği durumdur. Sistem özdeş bozonlar için sanki parçacıkları birbirine doğru çeken "çekici kuvvet" varmış gibi, özdeş fermiyonlar için parçacıkları ayrıştıran "itici kuvvet" varmış gibi davranır (şimdilik spin'i yok saydığımı hatırlayın). Tamamıyla simetrileştirme koşulunun *geometrik* bir sonucu olan bu, gerçek bir kuvvet olmamasına rağmen –parçacıklar üzerine etkiyen fiziksel bir şey yok– **değiştokuş** kuvveti olarak adlandırılır. Bu ayrıca, klasik karşılığı olmayan kuantum mekaniksel bir olaydır. Bununla beraber çok önemli sonuçları vardır. Örneğin hidrojen molekülünü (H_2) göz önüne alalım. Taban durumu kabaca, 1-inci çekirdekte merkezlenen atomik taban durumunda (4.80 nolu denklem) bulunan bir elektron ve 2-inci çekirdekte merkezlenen atomik taban durumunda bulunan diğer elektrondan oluşur. Elektronlar *bozon* olmuş olsalardı, simetrileştirme koşulu (ya da isterseniz, "değiştokuş kuvveti") elektronları iki proton arasında ortada yoğunlaştırırdı (5.1 (a) nolu şekil). Ortada oluşan bu negatif yük birikimi **kovalent bağlanmayı**[6] oluşturan protonların içeriye doğru çekilmesine yol açar. Ne yazık ki, elektronlar bozon *değil* fermiyondur. Bu da negatif yük yoğunluğunun gerçekte molekülü parçalayacak şekilde (5.1 (b) nolu şekil) dışarıya doğru kaymasını gerektirir.

[6] Kovalent bağlanma, paylaşılan elektronların çekirdekler arasında toplandığında oluşur. Bu da atomların birbirlerine doğru çekilmelerine yol açar. Bunun *iki* elektron içermesi gerekmiyor. 7.3 nolu kesimde sadece *bir* elektron içeren kovalent bağlanma ile karşılaşacağız.

Bir dakika! Şimdiye kadar spini yok sayıyorduk. Elektronu *eksiksiz* tanımlayan durum fonksiyonu sadece onun uzay dalga fonksiyonunu değil, spin yönelimini tanımlayan spinörü de içerir:[7]

$$\psi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{s}). \qquad [5.23]$$

İki elektronlu durumu oluşturduğumuzda dalga fonksiyonunun sadece uzay kısmı değil *tümü* değiştokuş altında antisimetrik olmalıdır. Şimdi 4.177 ve 4.178 nolu denklemlerle verilen bileşik spin durumlarına baktığımızda üçlü bileşimler simetrik iken (bu da uzay kısmının *antisimetrik* olmasını gerektirir), tekli bileşimler antisimetriktir (bu da dalga fonksiyonunun uzay kısmının *simetrik* olmasını gerektirir). O zaman, aşikar olarak, tekli durumlar *bağ oluşturmaya*, üçlü durumlar *bağ oluşturmamaya* yol açar. Gerçekten de, kimyacılar bize kovalent bağlanmanın toplam spini sıfır olacak şekilde tekli durumu işgal eden iki elektronu içerdiğini söyler.[8]

***Problem 5.6** Sonsuz kuyu potansiyelinde her biri m kütleli ve etkileşmeyen iki parçacık düşünün. Bunlardan biri ψ_n durumunda (2.28 nolu denklem) ve diğeri de ψ_l durumunda ise ($l \neq n$), aşağıdaki özel durumlar için $\langle(x_1 - x_2)^2\rangle$'yi hesaplayınız. **(a)** her ikisi ayırt edilebilen parçacık, **(b)** her ikisi özdeş bozon ve **(c)** her ikisi özdeş fermiyon.

Problem 5.7 Birinin $\psi_a(x)$ ve diğer birinin $\psi_b(x)$ ve de diğer kalanın $\psi_c(x)$ durumunda olan üç parçacığınız olsun. ψ_a, ψ_b ve ψ_c'nin ortogonal olduklarını varsayın ve aşağıdaki özel durumlar için üç parçacıklı durum fonksiyonunu 5.15, 5.16 ve 5.17 nolu denklemlere benzer şekilde oluşturun. **(a)** ayırt edilebilen parçacıklar, **(b)** özdeş bozonlar ve **(c)** özdeş fermiyonlar. (b)'nin herhangi bir parçacık çiftinin yer değiştirme altında tümüyle simetrik olması ve de (c)'nin antisimetrik olması gereğini akılda tutunuz. *Açıklama:* Tümüyle antisimetrik dalga fonksiyonlarını oluşturmada güzel bir kestirme yol var: 1-inci sırası $\psi_a(x_1)$, $\psi_b(x_1)$ $\psi_c(x_1)$ vb. 2-inci sırası $\psi_a(x_2)$, $\psi_b(x_2)$ $\psi_c(x_2)$ vb. ve öylece devam eden **Slater determinantı**. Bu yol her parçacık sayısı için çalışır.

5.2 ATOMLAR

Z atom numaralı ve yüksüz bir atom Z tane elektronla (m kütleli, $-e$ yüklü) çevrili, Ze

---

[7] Spin ve konum arasında çiftlenim olmadığı durumda, durum fonksiyonunun spin ve uzay kısmına *ayrıştırılabilir* olduğunu varsayma özgürlüğüne sahibiz. Bu, parçacığın spininin yukarı olma olasılığının parçacığın *konumundan* bağımsız olduğunu söyler. *Çiftlenim olduğu* durumda genel durum fonksiyonu 4.55 nolu problemde oldu gibi lineer kombinasyon şeklini alır: $\psi_+(\mathbf{r})\chi_+ + \psi_-(\mathbf{r})\chi_-$.

[8] Günlük dilde, elektronların birinin spin yukarı ve diğerinin spin aşağı olmak üzere "zıt yönlendirilmiş" olduğu söylenir. Aynı şey $m = 0$ üçlü durum için de söylenebileceğinden bu biraz fazlaca basitleştirme olur. Tam doğru ifade onların tekli düzenekte olduklarını söylemektir.

yüklü ağır bir çekirdekten oluşur. Bu sistem için Hamiltonyen[9]

$$H = \sum_{j=1}^{Z}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{Ze^2}{r_j}\right\} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)\sum_{j\neq k}^{Z}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|} \qquad [5.24]$$

şeklindedir. Kıvrımlı parantezdeki terim, çekirdeğin elektrik alanında bulunan elektronun potansiyel ve kinetik enerjisini temsil eder. $j = k$ terimi hariç tüm j ve k değerleri üzerinden toplamları içeren ikinci terim ise, elektronların karşılıklı birbirlerini itmeleri ile ilgili potansiyel enerjiyi temsil eder (öndeki 1/2 çarpanı toplamada bir çiftin iki kez sayılmasından kaynaklanan hatayı düzeltir). Şimdi problem Schrödinger denklemini

$$H\psi = E\psi \qquad [5.25]$$

$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_z)$ dalga fonksiyonları için çözmektir. Elektronlar özdeş fermiyon olduklarından 5.25 nolu denklemi sağlayan çözümlerin tümü kabul edilir çözümler değildir. Uzay ve spin kısımlarını içeren tam çözümlerden

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_Z)\chi(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \ldots, \mathbf{s}_Z) \qquad [5.26]$$

sadece iki elektronun yerdeğiştirme işlemi altında antisimetrik olanları aranılan çözümler olacaktır. Yani, iki elektron aynı kuantum durumunda bulunamaz.

Ne yazık ki, 5.24 nolu denklemde verilen Hamiltonyene sahip Schrödinger denklemi çok basit bir durum olan hidrojen atomu ($Z = 1$) dışında tam olarak çözülemez. Pratik uygulamalar için ayrıntılı yaklaşık yöntemlere başvurmak gerekir. Bunlardan bazılarını II. Kısımda inceleyeceğiz. Şimdilik, elektron itme terimi yok sayılarak elde edilen çözümlerin bazı nitel özelliklerini kaba hatlarıyla ortaya koymayı planlıyorum. 5.2.2. Kesimde daha fazla elektron içeren atomların taban durumlarını inceleyeceğiz.

Problem 5.8 5.25 nolu denklemde Hamiltonyen için Schrödinger denkleminin $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_Z)$ çözümünü bulabildiğinizi varsayın. Bu çözümden, Schrödinger denklemini aynı enerji ile sağlayacak tamamıyla simetrik ve antisimetrik dalga fonksiyonunu nasıl oluşturulabileceğinizi anlatın.

---

[9] Çekirdeğin *durağan* olduğunu varsayıyorum. Çekirdeğin hareketini indirgenmiş kütle kullanarak probleme dahil etme (5.1 nolu problem) yöntemi sadece *iki cisim* problemi için çalışır. Neyse ki, çekirdek elektronlara kıyasla çok daha ağır olduğundan düzeltme terimi hidrojen atomu için bile çok çok küçüktür (5.21 nolu problemin (a) şıkkına bakın). Daha ağır atomlar için bu düzeltme terimi çok daha küçüktür. Elektron spinlerinin manyetik etkileşmelerinden, relativistik düzeltmelerden ve çekirdeğin sonlu boyutlarından kaynaklanan çok daha ilginç etkiler vardır. Bunlara daha sonraki bölümlerde bakacağız. Fakat bunların hepsi 5.24 nolu denklem ile tanımlanan "katıksız coloumb" atomuna yapılacak çok küçük düzeltmelerdir.

5.2.1 Helyum

Hidrojen'den sonra gelen en basit atom Helyum'dur (Z = 2). Hamiltonyen her bir elektron için yazılan iki *hidrojenimsi*

$$H=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{r_1}\right\}+\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{r_2}\right\}+\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} \quad [5.27]$$

Hamiltonyen'den (çekirdek yükü 2e) oluşur. Bunlara ek olarak Hamiltonyen'de elektronlar arasındaki itmeyi tanımlayan bir terim daha vardır. Bütün zorlukların kaynağı işte bu son terimdir. Eğer bu terimi *görmemezlikten* gelirsek, Schrödinger denklemi ayrıştırılabilir olur ve çözüm *hidrojen* dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazılabilir:

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\psi_{nlm}(\mathbf{r}_1)\psi_{n'l'm'}(\mathbf{r}_2). \quad [5.28]$$

Bu dalga fonksiyonları yarım Bohr yarıçaplıdır (4.72 nolu denklem) ve enerjileri Bohr enerjilerinin (4.70 nolu denklem) dört katıdır. Bunun neden böyle olduğunu göremiyorsanız, 4.16 nolu probleme geri dönüp bir bakın. Toplam enerji

$$E=4(E_n+E_{n'}) \quad [5.29]$$

olur ve burada $E_n=-13.6/n^2$ eV'dir. Taban durumu (4.80 nolu denkleme bakın)

$$\psi_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)=\frac{8}{\pi a^3}e^{-2(r_1+r_2)/a} \quad [5.30]$$

şeklini alır ve bu duruma karşılık gelen enerji

$$E_0=8(-13.6\text{ eV})=-109\text{ eV} \quad [5.31]$$

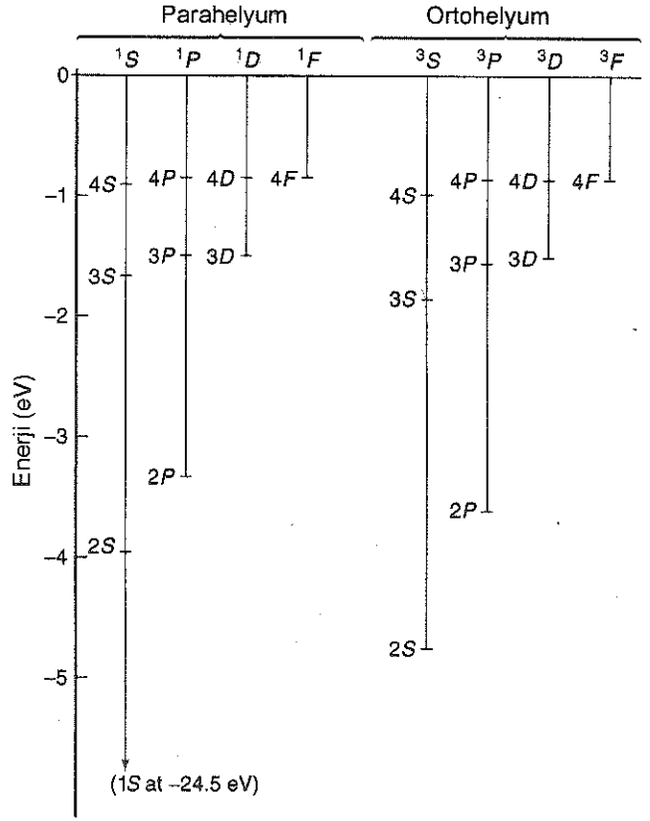
dir. ψ_0 simetrik bir fonksiyon olduğundan, spin durum fonksiyonu *antisimetrik* olmak zorundadır ki helyumun taban durumu spinleri "zıt yönelmiş" *tekli* durum olabilsin. Helyum'un gerçek taban durumu gerçekten bir teklidir. Fakat taban durumunun deneysel olarak belirlenen enerji değeri −78.975 eV'dir. Öyleyse deney ve teori arasında bir uyum yok. Bu hiç şaşırtıcı bir sonuç değil: Hiç de küçük *olmayan* elektron itmesini ihmal ettik. 5.27 nolu denkleme bakıldığında *pozitif* olduğu kesin olan bu katkı biraz rahat nefes aldırır. Toplam enerjiyi −109 eV'den −79 eV'ye düşürür (5.11 nolu probleme bakın).

Helyum'un uyarılmış durumları hidrojenimsi taban durumundaki bir elektron ve uyarılmış durumlardaki diğer elektrondan oluşur:

$$\psi_{nlm}\psi_{100}. \quad [5.32]$$

Her iki elektronu da uyarılmış durumlara yerleştirmeye çalışırsanız, bir tanesi hemen taban durumuna iner ve bu geçişi yaparken diğer elektronu enerji spektrumunun sürekli bölgesine (E > 0) itebilmeye yetecek enerji salar. Bu da sizi bir He^+ *iyonu* ve bir serbest

elektron ile baş başa bırakır. Bu ilginç bir sistem olmasına rağmen (5.9 nolu probleme bakın) şu an ilgi alanımıza giren bir şey değildir. Hem simetrik hem de antisimetrik düzenekleri alışılmış yolla oluşturabiliriz (5.10 nolu denklem). İlki *antisimetrik* bir spin düzeneği (tekli durum) gerektirirken, sonraki *simetrik* bir spin düzeneği (üçlü durum) gerektirir. Tekli düzenek **parahelyum**, üçlü düzenek **ortohelyum** olarak adlandırılır. Taban durumu parahelyum olmak zorundadır. Uyarılmış durumlar her iki şekilde de oluşturulabilirler. Daha önce 5.1.2. Kesimde tartıştığımız gibi, simetrik uzay durumları elektronları daha yakınlaştırdığı için, parahelyum durumların daha yüksek enerjiye sahip olmalarını bekleriz. Gerçekten de deneysel olarak parahelyum durumların ortohelyum benzer durumlarına kıyasla daha yüksek enerjiye sahip oldukları gözlenmiştir (5.2 nolu şekle bakın).



ŞEKİL 5.2: Helyum atomunun enerji düzey diyagramı (buradaki notasyon 5.2.2. Kesimde açıklandığı gibidir). Parahelyum enerjilerinin ortohelyum enerji benzerlerine göre daha yüksek olduklarına dikkat edin. Dikey ölçekteki sayısal değerler iyonlaşmış Helyum atomunun taban durumuna göre olan değerlerdir. (He^+): 4 × (−13.6 eV) = −54.4 eV; Bir durumun *toplam* enerjisini elde etmek için 54.4 eV'u çıkarmanız gerekir.

Problem 5.9

(a) Helyumun her iki elektronunu $n = 2$ durumuna yerleştirdiğinizi varsayın. Salınan elektronun enerjisi ne olur?

(b) Helyum iyonunun (He^+) spektrumunu nitel olarak tanımlayın.

Problem 5.10 Aşağıdaki durumlar için Helyum enerji durumlarını tartışınız. **(a)** elektronlar özdeş bozon olsalardı, **(b)** elektronlar ayırt edilebilir ama aynı kütle ve yüke sahip parçacıklar olsalardı. Bu "elektron"ların hala 1/2 spinli olduklarını varsayın ki spin düzenekleri tekli ve üçlü olabilsin.

****Problem 5.11**

(a) 5.30 nolu denklemde ψ_0 durumu için $\langle(1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)\rangle$'yi hesaplayın. *Yardım:* önce

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2}$$

olacak şekilde kutupsal ekseni $\mathbf{r}_1$ boyunca yerleştirilmiş küresel koordinatlarda $d^3\mathbf{r}_2$ integralini alın. θ_2 integrali kolay ama *pozitif kökü* alırken dikkat edin. $\mathbf{r}_2$ integralini 0'dan $\mathbf{r}_1$'e ve $\mathbf{r}_1$'den ∞'a olmak üzere iki parçaya ayırmak zorunda kalacaksınız. *Yanıt:* 5/4a.

(b) (a) şıkkında elde ettiğiniz sonucu kullanarak, helyum atomunun taban durumundaki elektron etkileşim enerjisini hesaplayınız. Yanıtınızı elektronvolt cinsinden yazınız ve taban durum enerjisini doğru bulabilmeniz için E_0'a ekleyiniz (5.31 nolu denklem). Unutmayın ki, hala yaklaşık bir dalga fonksiyonu kullanıyoruz. Bu nedenle *mükemmel* bir uyum beklemeyin.

5.2.2 Periyodik Tablo

Daha ağır atomların taban durumlarının elektron düzenekleri benzer yolla parçaların bir araya getirilmesiyle oluşturulabilir. İlk yaklaşıklık olarak, her bir elektron Ze yüklü çekirdeğin Coloumb potansiyelinde **ortibal** diye adlandırılan (n, l, m) tek parçacıklı hidrojenimsi durumlarda bulunsunlar (burada elektronların birbirlerini karşılıklı olarak itmelerini tamamıyla yok sayıyoruz). Elektronlar bozon ya da ayırt edilebilen parçacık olsalardı, hepsi birden (1,0,0) taban durumuna doluşurlardı ve bu çok garip bir kimya oluştururdu. Fakat elektronlar gerçekte Pauli dışarlama ilkesine uymak zorunda olan özdeş formiyonlardır. Böylece sadece *iki* elektron herhangi bir orbitalde (o da ancak bir elektron yukarı spinli diğeri de aşağı spinli olmak ya da daha doğru olarak tekli durum düzeneğinde olmak koşulu ile) bulunabilirler. Herhangi bir n değeri için aynı enerjili n^2 tane hidrojenimsi dalga fonksiyonu vardır. Bu da $n = 1$ **kabuğunda** 2 elektron, $n = 2$ kabuğunda 8 elektron, $n = 3$ kabuğunda 18 elektron ve en genel olarak *n-inci* kabukta $2n^2$ tane elektron için yer olması demektir. Nitel olarak **Periyodik Tablo**'da yatay sıralar her bir kabuğun doldurulmasına karşılık gelir. (Tüm hikaye bu olsa idi, yatay

sıraların 2, 8, 8, 18, 18 ... vs. yerine 2, 8, 18, 32, 50 ... vs. değerlerine sahip olmaları gerekirdi. Kısa süre içinde elektron-elektron itmesinin bu sayımı nasıl değiştirdiğini göreceğiz).

Helyum ile n =1 kabuğunu doldurduk. Öyleyse bir sonraki atom olan Lityum ($Z = 3$) bir elektronunu $n = 2$ kabuğuna koymak zorundadır. Şimdi $n = 2$ için, $l = 0$ ya da $l = 1$ durumları var. Üçüncü elektron bunlardan hangisini seçecektir? Elektron-elektron etkileşmelerinin yokluğunda her iki durum da aynı enerjiye sahiptir (unutmayın, Bohr enerjileri l'ye değil, n'ye bağlıdır). Ancak elektronlar arasındaki itme kuvveti aşağıda açıklanan sebepten dolayı l'nin düşük değerini tercih ettirecektir. Açısal momentum elektronu dışarıya doğru atma eğilimindedir. Elektron ne kadar çok dışarıya açılırsa içteki elektronlar o kadar çok çekirdeği **perdeler** (kabaca en içteki elektronlar çekirdeğin Ze yükünü tam olarak görürler, fakat en dıştaki elektronlar etkin yük olarak e'den birazcık büyük yük görürler). Bundan dolayı verilen bir kabukta en düşük enerjili elektron için, bir başka deyişle en sıkı bağlı elektron için, $l = 0$'dır ve artan l ile enerji artar. Böylece, lityum'daki üçüncü elektron (2,0, 0) orbitalini işgal eder. Bir sonraki atom olan ve $Z = 4$ atom numarasına sahip berilyum da bu durum için uygundur (sadece "zıt spinli" dir). Fakat $Z = 5$ atom numaralı bor, $l = 1$ durumunu kullanmak zorundadır. [10]

Böylece devam edersek, $n = 2$ kabuğunu dolduran neon'a ($Z = 10$) ulaşırız ve periyodik tablonun bir sonraki sırasına gelerek, $n = 3$ kabuğunu doldurmaya başlarız. Önce $l = 0$'lı iki atom (sodyum ve magnezyum) var ve sonra $l = 1$'li (aluminyum'dan argon'a) altı atom var. Argon'u takip eden $n = 3$ ve $l = 2$ olan 10 tane atom "olmalı". Öte yandan, buna gelene kadar perdeleme etkisi o kadar güçlenir ki bir sonraki kabuğun üstüne biner. Bundan dolayı, potasyum ($Z = 19$) ve kalsiyum ($Z = 20$) n = 3, $l = 2$ yerine $n = 4$, 1 = 0 durumunu seçer. Bundan sonra geride bıraktığımız $n = 3$, $l = 2$'ye (skandiyum'dan çinko'ya kadar) ve sonra $n = 4$, $l = 1$'e (galyum'dan kripton'a kadar) dönüp doldururuz. Bu noktada yine bir sonraki kabuğa ($n = 5$) erken bir sıçrama yapar ve $n = 4$ kabuğundaki $l = 2$ ve $l = 3$ orbitallerine gelene kadar bekleriz. Bu karmaşık yaklaşım hakkında daha fazla bilgi edinmek için, herhangi bir atom fiziği kitabına bakmanızı öneririm.

19. yüzyıl sperktroskopistlerin çok iyi bildiği nedenlerden dolayı, $l = 0$ durumu "sharp" a atfen s, $l = 1$ durumu "principal" a atfen p, $l = 2$ durumu "diffuse" e atfen d ve $l = 3$ durumu "fundemental" a atfen f olarak adlandırılır. Sanırım artık bir şey düşünemeyecek noktaya geldiklerinden, l durumlarını $l = 4$'den sonra g, h, i, j'yi atlayarak alfabetik sırayla adlandırdılar (k, l, vs.). Bir elektronun durumu n (sayı) kabuğu ve l (harf) yörüngesel açısal momentumu belirleyen nl çifti ile belirlenir.[11] Manyetik

---

[10] Örneğin, U. Fano and L. Fano, *Basic Physics of Atoms and Molecules*, Wiley, New York (1959), 18. Bölüm ya da G. Herzberg'in klasik yapıtı, *Atomic Spectra and Atomic Structure*, Dover, New York (1944)'e bakınız.

[11] Kabuklara da K'dan başlayarak (neden diye sormayın) keyfi takma adlar verilmiştir. K kabuğu için $n = 1$ dir, L kabuğu için $n = 2$ dir, M kabuğu için $n = 3$ tür ve böyle devam eder. En azından alfabetik sırayı izlerler.

kuantum sayısı m kullanılmaz fakat söz konusu durumda bulunan elektronların sayısını göstermek için bir üstel sayı kullanılır. Böylece, aşağıdaki gibi bir düzenek

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^2 \qquad [5.33]$$

bize (1, 0, 0) orbitalinde iki elektron, (2, 0, 0) orbitalinde iki elektron ve (2, 1, 1), (2, 1, 0) ve (2, 1, −1) orbitallerinin bazı kombinasyonlarında iki elektronun olduğunu söyler. Yukarıdaki elektron dağılım düzeneği Karbon'un taban durumudur.

Bu örnekte 1 yörüngesel açısal momentum kuantum sayılı iki elektron vardır. Böylece sadece tek bir parçacığın değil, *toplam* gösteren toplam yörüngesel açısal momentum kuantum sayısı L (büyük L küçük l değil) 2, 1 ya da 0 olabilir. Aynı zamanda iki $1s$ elektronları toplam spini sıfır olacak şekilde tekli durumda birbirlerine kenetlenmişlerdir. İki $2s$ elektronları da aynı düzenektedirler. Ancak $2p$ elektronları tekli ya da üçlü düzeneklerde bulunabilirler. Böylece toplam spin kuantum sayısı S (yine büyük harf çünkü *toplamı* ifade ediyor) 1 ya da 0 olabilir. Aşikar olarak büyük toplam (yörüngesel+spin) J: 3, 2, 1 ya da 0 olabilir. Bir atom için bu toplamların ne olabileceğini ortaya koyan kurallar vardır ve bunlar **Hund kuralları** olarak bilinir (5.13 nolu probleme bakınız). Sonuç aşağıdaki gösterimle verilir:

$$^{2S+1}L_J. \qquad [5.34]$$

Burada S ve J sayı iken, bu kez *toplam* büyüklüklerle ilgilendiğimizden L büyük harftir. Karbon atomunun taban durumu $^3P_0$ olduğu görülür. Buradaki toplam spin 1 olduğundan sol üst indis 3'tür ve toplam yörüngesel açısal momentum 1 olduğundan L için P yazılır ve *büyük* toplam açısal momentum sıfır olduğu için, alt indis sıfır olur. 5.1 nolu tabloda Periyodik Tablo'nun ilk dört sırası için her bir düzenek ve toplam açısal momentumlar 5.34 nolu denklem ile verilen gösterim şekli kullanarak listelenmiştir.[12]

***Problem 5.12**

(a) Periyodik tablonun ilk beş sırası için (neon'a kadar) elektron dağılımlarını (5.33 nolu denklemde verildiği şekliyle) belirleyiniz ve sonuçlarınızı 5.1 nolu tablo ile kontrol ediniz.

(b) İlk dört element için ilgili toplam açısal momentumları 5.34 nolu denklemde verilen gösterim ile oluşturunuz. Bor, karbon ve azot için tüm *olasılıkları* listeleyiniz.

---

[12] 36. element kripton'dan sonra ince yapı, durumların sırasını belirlemede önemli rol almaya başladığından durum daha karmaşık olur. Bu nedenle tablo burada sonlanıyor. Yoksa, yer olmadığından değil.

TABLO 5.1: Periyodik Tablonun ilk dört sırasındaki atomların taban durumlarının elektron dağılım düzenekleri.

Z	Element	Düzenek	
1	H	$(1s)$	$^2S_{1/2}$
2	He	$(1s)^2$	$^1S_0$
3	Li	(He)$(2s)$	$^2S_{1/2}$
4	Be	(He)$(2s)^2$	$^1S_0$
5	B	(He)$(2s)^2(2p)$	$^2P_{1/2}$
6	C	(He)$(2s)^2(2p)^2$	$^3P_0$
7	N	(He)$(2s)^2(2p)^3$	$^4S_{3/2}$
8	O	(He)$(2s)^2(2p)^4$	$^3P_2$
9	F	(He)$(2s)^2(2p)^5$	$^2P_{3/2}$
10	Ne	(He)$(2s)^2(2p)^6$	$^1S_0$
11	Na	(Ne)$(3s)$	$^2S_{1/2}$
12	Mg	(Ne)$(3s)^2$	$^1S_0$
13	Al	(Ne)$(3s)^2(3p)$	$^2P_{1/2}$
14	Si	(Ne)$(3s)^2(3p)^2$	$^3P_0$
15	P	(Ne)$(3s)^2(3p)^3$	$^4S_{3/2}$
16	S	(Ne)$(3s)^2(3p)^4$	$^3P_2$
17	Cl	(Ne)$(3s)^2(3p)^5$	$^2P_{3/2}$
18	Ar	(Ne)$(3s)^2(3p)^6$	$^1S_0$
19	K	(Ar)$(4s)$	$^2S_{1/2}$
20	Ca	(Ar)$(4s)^2$	$^1S_0$
21	Sc	(Ar)$(4s)^2(3d)$	$^2D_{3/2}$
22	Ti	(Ar)$(4s)^2(3d)^2$	$^3F_2$
23	V	(Ar)$(4s)^2(3d)^3$	$^4F_{3/2}$
24	Cr	(Ar)$(4s)(3d)^5$	$^7S_3$
25	Mn	(Ar)$(4s)^2(3d)^5$	$^6S_{5/2}$
26	Fe	(Ar)$(4s)^2(3d)^6$	$^5D_4$
27	Co	(Ar)$(4s)^2(3d)^7$	$^4F_{9/2}$
28	Ni	(Ar)$(4s)^2(3d)^8$	$^3F_4$
29	Cu	(Ar)$(4s)(3d)^{10}$	$^2S_{1/2}$
30	Zn	(Ar)$(4s)^2(3d)^{10}$	$^1S_0$
31	Ga	(Ar)$(4s)^2(3d)^{10}(4p)$	$^2P_{1/2}$
32	Ge	(Ar)$(4s)^2(3d)^{10}(4p)^2$	$^3P_0$
33	As	(Ar)$(4s)^2(3d)^{10}(4p)^3$	$^4S_{3/2}$
34	Se	(Ar)$(4s)^2(3d)^{10}(4p)^4$	$^3P_2$
35	Br	(Ar)$(4s)^2(3d)^{10}(4p)^5$	$^2P_{3/2}$
36	Kr	(Ar)$(4s)^2(3d)^{10}(4p)^6$	$^1S_0$

**Problem 5.13

(a) Birinci Hund kuralı en yüksek toplam spinli (S) durumun en düşük enerjiye sahip olduğunu söyler ve bu Pauli ilkesiyle de uyumludur. Bu kural helyumun uyarılmış durumları için ne öngörür?

(b) İkinci Hund kuralı verilen bir spin için en yüksek toplam yörüngesel açısal momentumlu (L) bir durum antisimetrileştirme kuralına uymak koşulu ile en düşük enerjiye sahip olacağını söyler. Niçin karbon L = 2 durumunu alamaz? *Yardım:* M_L = L durumu olan "merdiven tepesi" simetriktir.

(c) Üçüncü Huld kuralı eğer (n, l) alt kabuğu yarıdan fazla dolu değilse, en düşük enerji düzeyi J = |L – S| değerine, yarıdan fazla dolu ise J = L + S değerine sahip olur. Bunu kullanarak, 5.12 nolu problemin (b) şıkkında bor için ortaya çıkan belirsizliği çözün.

(d) Hund kurallarıyla birlikte, simetrik spin durumunun antisimetrik uzay durumu gerektirdiği gerçeğini kullanarak, 5.12 nolu problemin (d) şıkkında karbon ve azot için ortaya çıkan belirsizliği çözün. *Yardım:* Bir durumun simetrisini belirlemek için her zaman "merdiven tepesine" gitmeyi unutmayın.

Problem 5.14: Periyodik Tablo'nun 6. sırasındaki 66. element olan disprosyum'un taban durumu $^5I_8$ olarak listelenir. Toplam spin, toplam yörüngesel ve büyük toplam açısal momentum kuantum sayıları nelerdir? Disprosyum için olası bir elektron dağılım düzeneği önerin.

5.3. KATILAR

Katı halde, her bir atomun en dış yörüngesinde bulunan, gevşek bağlı, **değerlik** elektronlarından bir kaçı atomdan ayrılır ve malzeme boyunca dolanır. Artık sadece belli bir "ebeveyn" çekirdeğin Coloumb alanı yerine tüm kristal örgünün bileşik potansiyelinin etkisi altındadır. Bu kesimde son derece basit iki modeli inceleyeceğiz. Birincisi, çerçeve sınırlarından başka *tüm* kuvvetleri yok sayan ve dolanan elektronu bir kutu içerisinde serbest parçacık olarak ele alan Sommerfeld teorisidir (üç boyutlu kutudaki elektron, sonsuz kuyu potansiyelindeki elektrona benzer). Ve ikincisi, elektronları kristalde belli bir düzen içinde yerleşen, pozitif yüklü çekirdeklerle etkileşmesini periyodik bir potansiyel ile gösteren Bloch teorisidir (fakat elektronlar arasındaki itici etkileşme hala ihmal edilir). Bu modeller katılar için bir kuantum teorisine doğru götüren ilk ve tamamlanmamış adımlardan başka bir şey değildir. Yine de bunlar "katı"'nın açıklanmasında Pauili dışarlama ilkesinin oynadığı önemli rolü ortaya

koymuşlar ve de iletkenlerin, yarı-iletkenlerin ve yalıtkanların dikkate değer özelliklerinin anlaşılmasına yardımcı olmuşlardır.

5.3.1 Serbest Elektron Gazı

Ele aldığımız malzeme l_x, l_y, l_z boyutlarında dikdörtgenimsi bir katı olsun ve içeride sızılamayan duvarların dışında hiçbir noktada kuvvet hissetmeyen bir elektron olsun:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < l_x,\ 0 < y < l_y, \text{ ve } 0 < z < l_z; \\ \infty, & \text{diğer hallerde.} \end{cases} \quad [5.35]$$

Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi,$$

kartezyen koordinatlarda $\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z)$ şeklinde değişkenlere ayrılır.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X}{dx^2} = E_xX; \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y}{dy^2} = E_yY; \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z}{dz^2} = E_zZ$$

ve $E = E_x + E_y + E_z$'dir.

$$k_x \equiv \frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}, \quad k_y \equiv \frac{\sqrt{2mE_y}}{\hbar}, \quad k_z \equiv \frac{\sqrt{2mE_z}}{\hbar}$$

dönüşümleri ile aşağıdaki genel çözümler elde edilir.

$$X(x) = A_x\sin(k_xx) + B_x\cos(k_xx), \quad Y(y) = A_y\sin(k_yy) + B_y\cos(k_yy),$$

$$Z(z) = A_z\sin(k_zz) + B_z\cos(k_zz).$$

Sınır koşulları $X(0) = Y(0) = Z(0) = 0$ olması gereğini ortaya koyar. Böylece, $B_x = B_y = B_z = 0$ ve $X(l_x) = Y(l_y) = Z(l_z) = 0$ sınır koşulundan

$$k_xl_x = n_x\pi, \quad k_yl_y = n_y\pi, \quad k_zl_z = n_z\pi \quad [5.36]$$

elde edilir. Burada her bir n pozitif bir tam sayıdır:

$$n_x = 1, 2, 3, \ldots, \quad n_y = 1, 2, 3, \ldots, \quad n_z = 1, 2, 3, \ldots. \quad [5.37]$$

Normlanmış dalga fonksiyonları

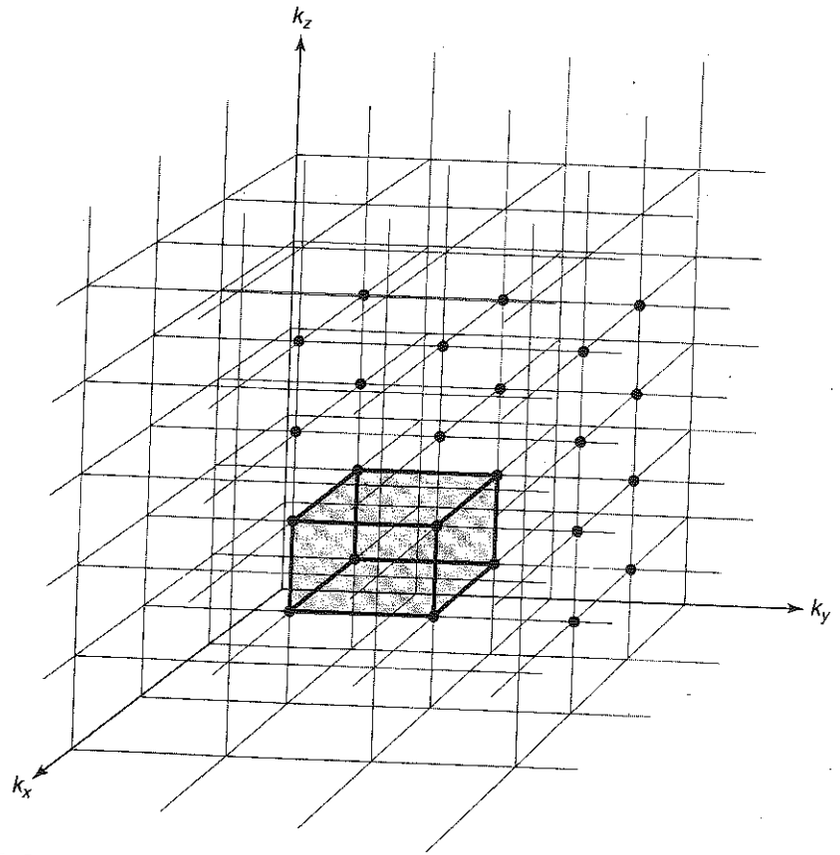
$$\psi_{n_xn_yn_z} = \sqrt{\frac{8}{l_xl_yl_z}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{l_x}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{l_y}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{l_z}z\right) \quad [5.38]$$

ve izin verilen enerji değerleri k, $\mathbf{k} \equiv (k_x, k_y, k_z)$ **dalga vektörünün** büyüklüğü olmak üzere

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{l_x^2} + \frac{n_y^2}{l_y^2} + \frac{n_z^2}{l_z^2}\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad [5.39]$$

şeklini alır.

k_x, k_y ve k_z eksen takımlı üç boyutlu uzayı ve $k_x = (\pi/l_x), (2\pi/l_x), (3\pi/l_x),\ldots$, $k_y = (\pi/l_y), (2\pi/l_y), (3\pi/l_y),\ldots$, $k_z = (\pi/l_z), (2\pi/l_z), (3\pi/l_z),\ldots$, noktalarında çizilen düzlemleri



ŞEKİL 5.3: Serbest elektron gazı. Örgü üzerinde her kesim noktası durağan bir durumu temsil eder. Gölgelendirilmiş bölge bir "Blok" gösterir ve her bir bloğa karşılık gelen bir durum vardır.

düşünelim. Her kesişme noktası ayrı bir (tek parçacık) durağan durumu temsil eder (5.3 nolu şekil). Örgüye dahil her bir blok ve dolayısıyla her bir durum "k-uzay"nın

$$\frac{\pi^3}{l_x l_y l_z} = \frac{\pi^3}{V} \qquad [5.40]$$

kadarlık bir hacmini işgal eder. Burada $V \equiv l_x l_y l_z$ malzemenin kendi hacmidir. Örneğimizin N tane atom içerdiğini ve her bir atomun q tane serbest elektronu olduğunu varsayalım (Gerçekte, N çok büyükken – Avagadro sayısı mertebesinde, q küçük bir sayıdır – tipik olarak 1 ya da 2). Elektronlar bozon (ya da ayırt edilebilen parçacık) olsalardı, ψ_{111} taban durumuna yerleşirlerdi.[13] Fakat elektronlar özdeş *fermiyonlardır* ve Pauli dışarlama ilkesine uymak zorundadırlar. Bu da sadece iki tanesinin verilen bir durumu alabileceği anlamına gelir. k-uzayında[14] bir *kürenin* 1/8'ni doldururlar. Kürenin k_F yarıçapı her bir elektron çiftine karşılık π^3/V hacminin gelmesi koşulu uygulanarak elde edilir.

$$\frac{1}{8}\left(\frac{4}{3}\pi k_F^3\right) = \frac{Nq}{2}\left(\frac{\pi^3}{V}\right)$$

ve böylece

$$k_F = (3\rho\pi^2)^{1/3} \qquad [5.41]$$

olarak bulunur. Burada

$$\rho \equiv \frac{Nq}{V} \qquad [5.42]$$

olmak üzere birim hacimde *serbest elektron sayı*sını veren serbest elektron yoğunluğudur.

k-uzayında doldurulmuş ve doldurulmamış durumları ayıran sınır **Fermi yüzeyi** olarak adlandırılır ve o nedenle F alt indisi kullanılır. Buna karşılık gelen enerjiye de **Fermi enerjisi** denir. Serbest elektron gazı için Fermi enerjisi:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\rho\pi^2)^{2/3}. \qquad [5.43]$$

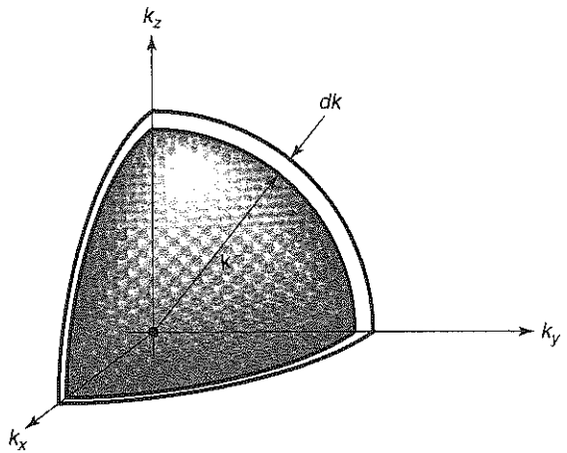
Elektron gazının *toplam* enerjisi aşağıdaki gibi hesaplanır: dk kalınlığındaki bir kabuk

$$\frac{1}{8}(4\pi k^2)\,dk$$

hacmini içerir ve böylece kabuğun içindeki elektronik durumların sayısı

[13] Burada, katıyı kolektif taban durumundan kaldırabilecek kadar kayda değer ısıl ya da başka uyarımların olmadığını varsayıyoruz. İsterseniz şöyle söyleyelim: "soğuk" katılar hakkında konuşuyoruz. Aslında 5.16 nolu problemin (c) şıkkında göstereceğiniz gibi, bu bağlamda bilinen katılar oda sıcaklığının çok üstü sıcaklıklarda bile "soğuk" turlar.

[14] N öyle büyük bir sayıdır ki örgünün dişli kenarları ile benzetmeye çalıştığımız pürüzsüz küre yüzeyi arasıdaki farkı dert etmeye gerek yoktur.



ŞEKİL 5.4: k-uzayında küresel bir kabuğun sekizde biri.

$$\frac{2[(1/2)\pi k^2\,dk]}{(\pi^3/V)} = \frac{V}{\pi^2}k^2\,dk$$

olur. Bu durumların her biri $\hbar^2k^2/2m$ (5.39 nolu denklem) enerjisini taşır. Bu da, kabuğun içindeki dE enerjisini

$$dE = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\frac{V}{\pi^2}k^2\,dk \qquad [5.44]$$

olarak verir ve toplam enerji

$$E_{\text{top}} = \frac{\hbar^2V}{2\pi^2m}\int_0^{k_F} k^4\,dk = \frac{\hbar^2k_F^5V}{10\pi^2m} = \frac{\hbar^2(3\pi^2Nq)^{5/3}}{10\pi^2m}V^{-2/3} \qquad [5.45]$$

şeklini alır.

Bu kuantum mekaniksel enerjinin sıradan bir gazın *ısıl* iç enerjisine (U) benzer bir rolü vardır. Özellikle kutu dV hacmi kadar genleşirse, kutu duvarlarına bir basınç uygular ve toplam enerjideki değişim

$$dE_{\text{top}} = -\frac{2}{3}\frac{\hbar^2(3\pi^2Nq)^{5/3}}{10\pi^2m}V^{-5/3}\,dV = -\frac{2}{3}E_{\text{top}}\frac{dV}{V}$$

olur ve bu azalan enerji kuantum basıncının dışarıya yaptığı iş ($dW = PdV$) olarak ortaya çıkar. Aşikar olarak,

$$P = \frac{2}{3}\frac{E_{\text{top}}}{V} = \frac{2}{3}\frac{\hbar^2k_F^5}{10\pi^2m} = \frac{(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2}{5m}\rho^{5/3} \qquad [5.46]$$

elde edilir. O zaman soğuk katı bir nesne neden *çökmez* sorusuna kısmi yanıt: ihmal

ettiğimiz elektron-elektron etkileşmesi ya da göz önüne almadığımız ısıl hareket ile hiçbir ilişkisi olmayan dengeleyici bir iç basınç var. Bu basınç kuantum mekanikseldir ve tümüyle özdeş fermiyonların dalga fonksiyonlarının antisimetrik olma koşulu sonucu ortaya çıkar. Bazen "**katılık (dejenerelik)**" olarak adlandırılmasına rağmen, "dışarlama basıncı" daha doğru bir adlandırma olur.[15]

Problem 5.15 Bir serbest elektron başına düşen ortalama enerjiyi (E_{top}/Nq) Fermi enerjisinin kesri şeklinde bulunuz. *Yanıt:* $(3/5)E_F$.

Problem 5.16 Bakırın yoğunluğu 8.96 gm/cm^3 ve atom ağılığı 63.5 gm/mol'dür.

(a) Bakırın Fermi enerjisini hesaplayın (5.43 nolu denklem). $q = 1$ olduğunu varsayın ve yanıtınızı elektron volt cinsinden veriniz.

(b) Bu enerjiye karşılık gelen elektron hızı nedir? *Yardım:* $E_F = (1/2)mv^2$'ye eşitle. Bakır atomundaki elektronların relativistik olmadıklarını varsaymak ne kadar doğrudur?

(c) Bakır için hangi sıcaklıkta tipik ısıl enerji (k_BT : k_B Boltzmann sabiti ve T Kelvin cinsinden sıcaklıktır) Fermi enerjisine eşit olur? *Açıklama:* Bu sıcaklığa **Fermi sıcaklığı** denir. Gerçek sıcaklık Fermi sıcaklığının oldukça altında kaldığı sürece, malzeme çoğu elektronların ulaşılabilir en düşük enerji düzeylerinde bulunduğu durum olan "soğuk" olarak göz önüne alınabilir. Bakırın erime sıcaklığı 1356 K olduğundan, katı bakır *her zaman* soğuktur.

(d) Elektron gazı modelinde bakırın katlılık basıncını (5.46 nolu denklem) hesaplayın.

Problem 5.17 Bir malzemenin **bulk modülü** basınçtaki ufak bir azalmanın hacimde yol açtığı küçük artışa oranı olarak tanımlanır:

$$B = -V\frac{dP}{dV}.$$

Serbest elektron gaz modelinde $B = (5/3)P$ olduğunu gösterin ve 5.16 nolu problemin (d) şıkkında bulduğunuz sonucu kullanarak, bakırın bulk modülünü hesaplayın. *Açıklama:* ölçülen değer 13.4×10^{16} N/cm^2 dir ve de sakın mükemmel bir uyum beklemeyin çünkü biz

---

[15] 5.41, 5.43, 5.45 ve 5.46 nolu denklemleri özel bir durum olan sonsuz dikdörtgen kuyu potansiyeli için *çıkardık*. Fakat bu denklemler parçacık sayısı son derece büyük olduğu sürece, herhangi bir şekle sahip kap için de geçerlidir.

tüm elektron-çekirdek ve elektron-elektron etkileşmelerini yok sayıyoruz! Aslında bu hesaplamanın bu kadar *yakın* sonuçlar vermesi şaşırtıcıdır.

5.3.2 Bant Yapısı

Şimdi serbest elektron modelini kristalde düzenli olarak yerleştirilmiş, esas olarak durgun olan çekirdeklerin elektronlara uyguladığı kuvvetleri dahil ederek geliştireceğiz. Katıların nitel davranışları küçümsenemeyecek derecede bu potansiyelin *periyodikliği* tarafından belirlenir (potansiyelin gerçek şekli sadece daha ince ayrıntılar için gerekli olacaktır). Size bunun nasıl olduğunu göstermek için, çok basit bir model geliştireceğim: eş aralıklı yerleştirilmiş delta fonksiyonlarından oluşan bir boyutlu **Dirac tarağı** (5.5 nolu şekil)[16]. Ama önce size periyodik potansiyellerin analizini büyük ölçüde kolaylaştıran güçlü bir teoremi anlatmam gerek.

Periyodik bir potansiyel kendisini sabit bir uzaklıktan sonra tekrar eden bir potansiyeldir.

$$V(x+a) = V(x). \qquad [5.47]$$

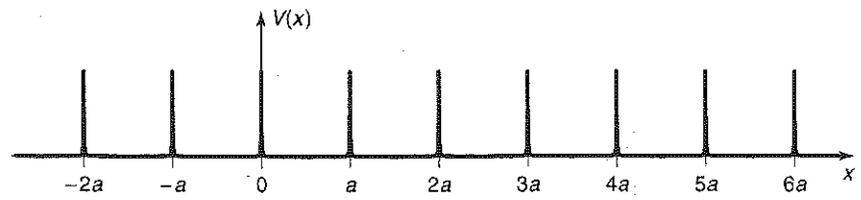
Bloch teoremi bize böyle bir potansiyel için

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \qquad [5.48]$$

Schrödinger denkleminin çözümlerinin aşağıdaki koşulu sağlayacak şekilde alınabileceğini söyler. Bazı sabit K'lar için:

$$\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x). \qquad [5.49]$$

(Burada sabit ile x'den bağımsız olduğunu ve E'ye bağımlı olabileceğini söylemek istiyorum).



ŞEKİL 5.5: 5.57 nolu denklem ile verilen Dirac tarağı.

[16] Çekirdeğin çekici kuvvetlerini temsil edebilmek için delta fonksiyonlarının *azalmasına* izin vermek çok daha doğal olabilirdi. Fakat o zaman da pozitif enerji çözümlerinin yanında negatif enerji çözümleri de olurdu ve bu da hesaplamaları çok daha zora sokardı (5.20 nolu probleme bakın). Burada sadece periyodikliğin sonuçlarını ortaya koymaya çalıştığımızdan, delta fonksiyonunun daha az uygun olan bu şekli ile çalışmak daha kolaydır. Sizi rahatlatacak ise, çekirdeklerin $\pm a/2$, $\pm 3a/2$, $\pm 5a/2$,... konumlarında olduklarını düşünün.

Kanıt: D "yerdeğiştirme" operatörü olsun:

$$Df(x) = f(x+a). \qquad [5.50]$$

Periyodik bir potansiyel için (5.47 nolu denklem), D Hamiltonyen ile sıra değiştirir, yani

$$[D, H] = 0 \qquad [5.51]$$

olur ve bundan dolayı H'nın özfonksiyonlarını D'nin de özfonksiyonları olacak şekilde seçme özgürlüğüne sahibiz: $\mathbf{D}\psi = \lambda\psi$ ya da

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x). \qquad [5.52]$$

Burada λ kesinlikle sıfır değildir (sıfır olsaydı, 5.52 nolu denklem tüm x değerleri için geçerli olduğundan, izin verilen öz durumlar arasında bulunmayan $\psi(x) = 0$ durumunu elde ederdik). Sıfır olmayan herhangi bir kompleks sayı gibi, λ üstel olarak yazılabilir:

$$\lambda = e^{iKa}, \qquad [5.53]$$

burada K bir sabittir.

Bu aşamada 5.53 nolu denklem λ özdeğerini yazmak için alışılmış bir yol olabilir ama kısa bir süre sonra K'nın aslında reel bir sayı olduğunu göreceğiz. Bu da $\psi(x)$'in kendisinin periyodik olmamasına rağmen, $|\psi(x)|^2$'nın periyodik olması demektir:[17]

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2. \qquad [5.54]$$

Doğal olarak hiçbir *gerçek* katı sonsuz boyutlara sahip değildir ve kenarlar (sınırlar) $V(x)$'in periyodikliğini bozar. Bu da Bloch teoremini kullanılmaz kılar. Öte yandan, Avagadro sayısı mertebesinde atom içeren makroskopik boyutlu bir kristal için, çok derindeki elektronların davranışlarını etkileyebilecek boyut etkilerini düşünebilmek biraz zor. Bu, Bloch teoremini kurtaracak aşağıdaki çareyi ortaya koyar: x eksenini bir daire şekli verecek şekilde bükeriz ve yaklaşık $N \approx 10^{23}$ gibi büyük bir sayılı periyodla eksenin bir ucunu diğer ucuna bağlarız: yani

$$\psi(x+Na) = \psi(x) \qquad [5.55]$$

olarak yazılan periyodik sınır koşullarını uygularız. 5.49 nolu denklemden

$$e^{iNKa}\psi(x) = \psi(x)$$

[17] Gerçekten, 5.54 nolu denklem ile *başlayan* tartışmamızı tersine çevirmek Bloch teoremini kanıtlamanın bir yolu olarak çekici gelebilir. Ama bu çalışmaz. Çünkü 5.54 nolu denklem 5.49 nolu denklemdeki faz çarpanını x'in *fonksiyonu* yapar.

olur ve böylece $e^{iNKa} = 1$ ya da $NKa = 2\pi n$ elde edilir.

$$(n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots) \text{ olmak üzere, } K = \frac{2\pi n}{Na} \qquad [5.56]$$

olmasına yol açar. Özellikle bu düzenleme için K'nın reel olması gerekir. Bloch teoreminin mahareti Schrödinger denkleminin sadece *tek bir hücre için* (örneğin $0 \le x < a$ aralığında) çözülmesini yeterli kılmasıdır. Diğer her bir bölge için, çözüm 5.49 nolu denklemin ardışık uygulanması ile elde edilir.

Şimdi potansiyelin delta fonksiyonu şeklinde, sıralı sivri tepeciklerden oluşan uzun bir zincir olduğunu varsayalım (Dirac Tarağı):

$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja). \qquad [5.57]$$

(5.5 nolu şekilde x ekseninin N-inci ucu $x = -a$ konumuna gelecek şekilde katlandığını düşünmelisiniz). Hiç kimse bunu *gerçek* bir modelmiş gibi düşünmez fakat unutmayın burada bizi ilgilendiren tek şey *periyodikliğin* etkisidir. Klasik çalışmada,[18] birçok yazarın halen tercih ettiği, kendini tekrarlayan *dikdörtgenimsi* model kullanıldı.[19] $0 < x < a$ bölgesinde potansiyel sıfır, öyleyse

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

ya da

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$$

ve burada her zamanki gibi

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad [5.58]$$

ile verilir. Genel çözüm:

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \quad (0 < x < a). \qquad [5.59]$$

Bloch teoremine göre, orijinin hemen *sol* tarafındaki hücrede çözüm:

$$\psi(x) = e^{-iKa}[A\sin k(x + a) + B\cos k(x + a)], \quad (-a < x < 0). \qquad [5.60]$$

[18] R. de L. Kronig and W. G. Penny, *Proc. R. Soc. Lond.*, ser. A, **130**, 499 (1930).
[19] Örneğin, D. Park, *Introduction to the Quantum Theory*, 3rd ed., McGraw-Hill, New York (1992)'e bakınız.

$x = 0$'da ψ'nin sürekli olması koşulundan

$$B = e^{-iKa}[A\sin(ka) + B\cos(ka)] \qquad [5.61]$$

elde edilir ve dalga fonksiyonunun türevindeki süresizlik delta fonksiyonunun keskinliği ile orantılıdır. Buradaki delta fonksiyonları kuyu yerine sivri tepecikler oluşturduğundan, α'nın işareti değişir. Bu durumda 2.125 nolu denklem

$$kA - e^{-iKa}k[A\cos(ka) - B\sin(ka)] = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}B \qquad [5.62]$$

sonucunu verir. 5.61 nolu denklemin $A\sin(ka)$ için çözümü;

$$A\sin(ka) = [e^{iKa} - \cos(ka)]B. \qquad [5.63]$$

Bunu 5.62 nolu denkleme yerleştirdiğimizde ve de kB'yi sadeleştirdiğimizde

$$[e^{iKa} - \cos(ka)][1 - e^{-iKa}\cos(ka)] + e^{-iKa}\sin^2(ka) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k}\sin(ka)$$

elde ederiz. Bu da aşağıdaki basit şekle indirgenir:

$$\cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\sin(ka). \qquad [5.64]$$

Bu her şeyi veren temel bir sonuçtur. Kronig-Penney potansiyeli (18. Dipnota bakınız) için ifade çok daha karmaşık olmasına rağmen, birazdan irdeleyeceğimiz nitel özelliklere benzer sonuçlar verir.

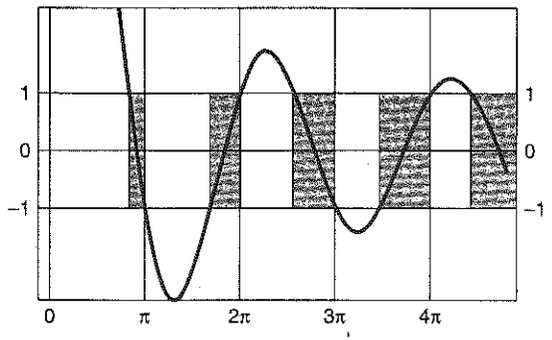
5.64 nolu denklem k'nın olası değerlerini ve dolayısıyla izin verilen enerjileri belirler. Notasyonu basitleştirebilmek için

$$z \equiv ka \quad \text{ve} \quad \beta \equiv \frac{m\alpha a}{\hbar^2} \qquad [5.65]$$

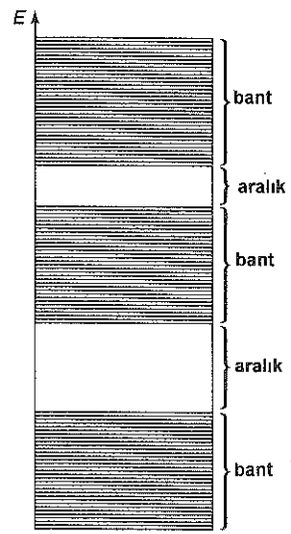
olsun. Böylece, 5.64 nolu denklemin sağ tarafı aşağıdaki gibi yazılır:

$$f(z) \equiv \cos(z) + \beta\frac{\sin(z)}{z}. \qquad [5.66]$$

Boyutsuz olan β sabiti delta fonksiyonun ne kadar "keskin" olduğunu gösterir. $\beta = 10$ için $f(z)$ 5.6 nolu şekilde gösterilmiştir. Burada dikkate değer olan şey $f(z)$'nin $(-1, +1)$ aralığı dışındaki bölgelere uzanmasıdır. $|\cos(Ka)|$ hiçbir zaman 1'den büyük olamayacağından, bu bölgeler için 5.64 nolu denklemin çözümü yoktur. Bu **aralıklar** *yasak* enerjileri temsil ederler ve *izin verilen* enerjilerin oluşturduğu **bantlar** ile ayrıştırılırlar. Verilen herhangi bir bant içinde, 5.56 nolu denkleme göre N çok büyük bir sayı n de herhangi bir tam sayı olmak üzere $Ka = 2\pi n/N$ olduğundan, neredeyse enerji değerlerinin tümüne izin verilir. 5.6 nolu şekilde $+1$ $(n = 0)$ ile -1 $(n = N/2)$ arasında $\cos(2\pi n/N)$'nin değerlerinden geçen N tane yatay çizgi çizdiğimizi ve $+1$'e $(n = N-1)$ geri döndüğümüzü düşünün. Bu noktada e^{iKa} Bloch çarpanı kendini tekrarlar ve artık artan n değerleri yeni çözümler üretmez. Bu çizgilerin $f(z)$ ile kesişen her biri izin



ŞEKİL 5.6: $\beta = 10$ değeri için izin verilen bantların (gölgeli), $|f(z)| > 1$ olduğu bölgeleri tanımlayan yasak aralıklarla ayrıştırıldığını gösteren $f(z)$'in (5.66 nolu denklem) grafiği.



ŞEKİL 5.7: Periyodik bir potansiyel için izin verilen enerjiler sürekli bantlar oluştururlar.

verilen enerji değerini gösterir. Her bir bant için birbirine çok yakın ve çoğu zaman sürekli dağılım olarak göz önüne alınan N tane durum olduğu açıktır (5.7 nolu şekil).

Şu ana kadar potansiyelimize sadece *bir* elektron koyduk. Pratikte q atom başına olan "serbest" elektron sayısı olmak üzere, Nq tane elektron olacaktır. Pauli dışarlama ilkesi yüzünden sadece iki elektron verilen bir uzay durumunu işgal edebileceğinden, taban durumunda elektronlar $q = 1$ ise ilk bandın yarısını, $q = 2$ ise ilk bandın tümünü, $q = 3$ ise ikinci bandın yarısını ve böyle devam ederek doldururlar. Üç boyutta ve çok daha

gerçekçi potansiyeller kullanıldığında bant yapısı çok daha karmaşık olur. Fakat yine de yasaklanmış bölgelerle ayrıştırılmış izin verilen bantlar olacaktır – bant yapısı periyodik potansiyelin bir *işaretidir*.

Bir bant tamamen dolu olduğu durumda, elektron yasak bölge üzerinden bir zıplama yapmak zorunda kalacağı için elektronu uyarmak nispeten fazla enerjiye mal olur ve böyle malzemeler **yalıtkandır**. Öte yandan bir bant *kısmen* dolu ise bir elektronu uyarmak çok az enerjiye mal olur ve bu tip malzemeler tipik **iletkendir**. Bir yalıtkanı daha büyük ya da daha küçük q'lu birkaç atom ile **katkılarsanız**, bu bir sonraki yüksek enerjili banda fazladan elektronlar konmasına ya da daha önce doldurulmuş bantta **boşluklar** oluşmasına yol açar. Her iki durumda da zayıf bir elektrik akımı oluşur. Bu tür malzemeler **yarı iletken** olarak adlandırılır. Serbest elektron modelinde izin verilen enerji spekturumunda büyük yasak bölgeler olmadığından, *tüm* katılar mükemmel iletken olmalıdırlar. Katıların elektriksel iletkenlik davranışında sergiledikleri sıra dışı farklılık bant teorisini gerektirir.

Problem 5.18

(a) 5.59 ve 5.63 nolu denklemleri kullanarak periyodik delta fonksiyon potansiyelinde bulunan bir parçacık için dalga fonksiyonunun aşağıdaki şekilde yazılabileceğini gösterin.

$$\psi(x) = C[\sin(kx) + e^{-iKa}\sin k(a-x)], \quad (0 \le x \le a).$$

(C normlama katsayısını bulmaya çalışmayın).

(b) İstisnai bir durum var: z'nin π'nin tam katı olduğu tepe noktasında (5.6 nolu şekil), (a) şıkkı $\psi(x) = 0$ olması gerektiğini söyler. Bu durum için doğru dalga fonksiyonunu bulunuz. ψ'ye her bir delta fonksiyonunda ne olduğuna dikkat edin.

Problem 5.19 $\beta = 10$ olduğu durumda, ilk izin verilen bandın en alt enerji değerini üç basamağa kadar hesaplayın. $\alpha/a = 1$ eV olduğunu varsayın.

****Problem 5.20** Sivri tepecikler yerine delta fonksiyon *kuyuları* kullandığımızı varsayalım (bir başka deyişle 5.57 nolu denklemde α'nın işaretini değiştirelim). Bu durumu 5.6 nolu şekle benzer bir şekilde çalışarak irdeleyiniz. Bu, pozitif enerji çözümleri için yeni hesaplamalar gerektirmez (sadece β burada negatif olur ve grafik için $\beta = -1.5$ değerini kullanın). Fakat negatif çözümler için çalışmanız gerekecek ($E < 0$ değerleri için $\kappa \equiv \sqrt{-2mE/\hbar}$ ve $z \equiv -\kappa a$ alın). İlk izin verilen enerji bandında kaç durum vardır?

Problem 5.21 5.64 nolu denklem ile belirlenen enerjilerin *çoğunun* 2 kez katlı olduğunu gösterin. İstisnai durumlar nelerdir? *Yardım:* $N = 1, 2, 3, \ldots$ için deneyin ve nasıl değiştiğini görün. Her bir durum için $\cos(Ka)$'nın olası değerleri nelerdir?

5.4 KUANTUM İSTATİSTİKSEL MEKANİĞİ

Fiziksel bir sistem mutlak sıcaklıkta izin verilen en düşük enerji düzeneğini alır. Sıcaklığı artırdıkça, rastgele ısıl hareketlilik uyarılmış durumları doldurmaya başlar ve şu sorunun oluşmasına neden olur: T sıcaklığında ısıl dengede olan N tane (N çok büyük bir sayı) parçacığımız varsa, rastgele seçilen bir parçacığın belirli bir E_j enerjisine sahip olma olasılığı nedir? Bu sorudaki "olasılığın" kuantum belirsizliği ile hiçbir ilişkisi olmadığına dikkatinizi çekerim. Bu aynı soru ile klasik istatistik mekanikte de karşılaşırız. Bu *olasılıksal* yanıttan hoşnut kalmak zorunda olmamızın sebebi genelde çok fazla sayıda parçacıklarla çalışıyor olmamız ve altında yatan mekanizma deterministik olsun ya da olmasın her bir parçacığın ayrı ayrı izlenmesinin mümkün olmamasıdır.

İstatistiksel mekaniğin temel varsayımı: ısıl dengede aynı toplam E enerjisini veren her bir ayrı durum eşit olasılığa sahiptir. Rastgele ısıl hareketler sürekli olarak enerjiyi bir parçacıktan diğerine aktarır ve bir şekilden (dönme, kinetik, titreşim, vs) başka bir şekle dönüştürür. Fakat dış etkilerin olmadığı durumlarda *toplam* enerji korunur. Düşünmeye değer ve derin olan bir varsayım ise, enerjinin bu sürekli yeniden dağılımının herhangi belli bir durumu tercih eğilimi göstermemesidir. **T sıcaklığı** ısıl dengede bulunan bir sistemin toplam enerjisinin bir ölçüsüdür. Kuantum mekaniğinin getirdiği yeni bir değişiklik *ayrı durumları nasıl saydığımızla* ilintilidir (aslında durumlar genel olarak ayrık olduğundan bu sayma işlemi klasik mekanikten çok *daha kolaydır*) ve de bu, önemli derecede söz konusu parçacıkların ayırt edilebilir, özdeş bozon ve özdeş fermiyon olup olmadıklarına bağlıdır. Argümanlar nispeten kolay görünmesine rağmen, *matematiği* oldukça ağırdır. Bu nedenle genel bir durum için sorunun ne olduğu hakkında bir bilginiz olsun diye saçmalık derecesinde basit olan bir örnekle başlayacağım.

5.4.1 Bir Örnek

Bir boyutlu sonsuz kare kuyu potansiyelinde her biri m kütleli ve birbirleriyle etkileşmeyen üç parçacığımız olsun (2.2. Kesim). Toplam enerji: n_A, n_B ve n_C pozitif tam sayı olmak üzere,

$$E = E_A + E_B + E_C = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_A^2 + n_B^2 + n_C^2) \qquad [5.67]$$

dir (2.27 nolu denkleme bakın). Şimdi, $E = 363(\pi^2\hbar^2 / 2ma^2)$ olsun. Yani

$$n_A^2 + n_B^2 + n_C^2 = 363 \qquad [5.68]$$

olur. Karelerinin toplamı 363 olan 3 pozitif sayının 13 kombinasyonu vardır: Hepsi 11

olabilir, ikisi 13 ve diğeri 5 olabilir (üç farklı şekilde yazılabilir, permütasyon = 3), biri 19 ve diğer ikisi 1 (yine permütasyon = 3) ya da biri 17 olabilir, diğer biri 7 ve kalan diğeri 5 olabilir (permütasyon = 6). Böylece (n_A, n_B, n_c) sıralaması aşağıdakilerden birisi olur:

$$(11, 11, 11),$$

$$(13, 13, 5),\ (13, 5, 13),\ (5, 13, 13),$$

$$(1, 1, 19),\ (1, 19, 1),\ (19, 1, 1),$$

$$(5, 7, 17),\ (5, 17, 7),\ (7, 5, 17),\ (7, 17, 5),\ (17, 5, 7),\ (17, 7, 5).$$

Parçacıklar *ayırt edilebilir* ise, bunların her biri ayrı bir kuantum durumunu temsil eder ve istatistiksel mekaniğin temel varsayımı ısıl denge[20] durumunda hepsinin eşit olasılığa sahip olduğunu söyler. Fakat burada *hangi* parçacığın *hangi* tek parçacık durumunda olduğu ile değil, sadece her bir durumdaki toplam parçacık *sayısı* yani ψ_n **durumunun doluluk sayısı** olan N_n ile ilgileniyorum. Verilen herhangi bir 3 parçacıklı durumun tüm doluluk sayıları topluluğuna **düzenek** adı vereceğiz. Eğer üç parçacığın hepsi ψ_{11} durumunda ise, düzenek aşağıdaki gibidir.

$$(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \ldots) \qquad [5.69]$$

şeklindedir. Başka bir deyişle $N_{11} = 3$ ve diğer tümü sıfırdır. İki parçacık ψ_{13} durumunda ve bir parçacık ψ_5 durumunda ise, düzenek aşağıdaki gibidir.

$$(0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 0, \ldots). \qquad [5.70]$$

Başka bir deyişle $N_5 = 1$, $N_{13} = 2$ ve diğer tümü sıfırdır. Eğer iki parçacık ψ_1 ve diğeri ψ_{19} durumunda ise düzenek

$$(2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, \ldots) \qquad [5.71]$$

olur, yani $N_1 = 2$, $N_{19} = 1$ ve diğer tümü sıfır. Bir parçacık ψ_5 ve diğer biri ψ_7 ve de kalan diğeri ψ_{17} durumunda ise, düzenek

$$(0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \ldots) \qquad [5.72]$$

şeklindedir. Yani $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$ ve geri kalan hepsi sıfırdır. Tüm bu düzenekler içinde *en olası* olan en son düzenektir. Çünkü bu düzenek 6 farklı yolla elde edilebilecek iken, ortadaki iki düzenek 3 farklı yolla ve ilk düzenek ise tek bir yolla elde edilebilir.

[20] Parçacıkların birbirleriyle etkileşmeden ısıl dengeyi nasıl sürdürdükleri kendi başına bir sorudur ama şimdilik onunla kafamızı yormuyoruz. Kim bilir birileri arada bir ortaya çıkıp enerji ilavesi ya da soğurması yapmadan dikkatlice ortamı karıştırıyordur. Gerçek yaşamda enerjinin sürekli yeniden dağılımı tamamıyla parçacıkların birbirleriyle etkileşmeleriyle mümkündür. Aklınız bu müdahaleye yatmıyorsa, o zaman parçacıklar arasındaki etkileşmelerin sistemi uzun zaman periyotlarında ısıl dengeye getirilebilecek kadar güçlü, aynı zamanda durağan durumları ve izin verilen enerjileri dikkate değer bir şekilde değiştirmeyecek kadar küçük, zayıf etkileşmeler olduğunu varsayın.

Esas soruma dönelim. Bu üç parçacıktan bir tanesini rastgele seçtiğimizde, belirli bir E_n enerjisini (izin verilen) elde etme olasılığı olan P_n nedir? E_1 enerjisini elde etmenin tek yolu parçacığın 5.71 nolu denklemdeki üçüncü düzenekte olmasıdır. Sistemin o düzenekte bulunma şansı 13'de 3'tür ve bu düzenekte E_1 enerjisini elde etme olasılığı 2/3'tür. Bundan dolayı $P_1 = (3/13) \times (2/3) = 2/13$ olur. E_5 enerjisini ya 13'de 3 şans ve 1/3 olasılıkla 2. düzenekte ya da 13'de 6 şans ve 1/3 olasılıkla (5.72 nolu denklem) 4. düzenekte elde edebilirsiniz. Böylece, $P_5 = (3/13) \times (1/3) + (6/13) \times (1/13) = 3/13$ olur. E_7 enerjisini sadece 4. düzenekte elde edebilirsiniz: $P_7 = (6/13) \times (1/13) = 2/3$. Benzer şekilde E_{11} sadece 13 de 1 şans ve 1 olasılıkla ilk düzenekte elde edilebilir (5.63 nolu denklem): $P_{11} = (1/13)$. Aynı yöntemle, $P_{13} = (3/13) \times (2/3) = 2/13$, $P_{17} = (6/13) \times (1/13) = 2/13$ ve $P_{19} = (3/13) \times (1/13) = 1/13$ olur. Kontrol için

$$P_1 + P_5 + P_7 + P_{11} + P_{13} + P_{17} + P_{19} = \frac{2}{13} + \frac{3}{13} + \frac{2}{13} + \frac{1}{13} + \frac{2}{13} + \frac{2}{13} + \frac{1}{13} = 1$$

olduğuna dikkat ediniz. Bu, parçacıkların ayırt edilebilir olduğu durumda geçerlidir. Gerçekte bunlar *özdeş fermiyon* iseler (basit olsun diye spin'i de bir tarafa bırakalım ya da isterseniz hepsinin *aynı* spin durumunda olduğunu varsayalım), antisimetrileştirme koşulu iki ve daha da kötüsü üç parçacığı *bir* duruma koyan ilk üç düzeneği dışlar. Dördüncü düzenekte sadece *bir* durum vardır (5.22 nolu problemin (a) şıkkına bakın). Özdeş fermiyonlar için, o zaman, $P_5 = P_7 = P_{17} = 1/3$ olur ve bunların toplamı yine 1 olur. Öte yandan bunlar *özdeş bozon* ise, simetrileştirme koşulu her *bir* düzenekte bir duruma izin verir (5.22 nolu problemin (b) şıkkına bakın) ve $P_1 = (1/4) \times (2/3) = 1/6$, $P_5 = (1/4) \times (1/3) + (1/4) \times (1/3) = 1/6$, $P_7 = (1/4) \times (1/3) = 1/12$, $P_{11} = (1/4) \times (1) = 1/4$, $P_{13} = (1/4) \times (2/3) = 1/6$, $P_{17} = (1/4) \times (1/3) = 1/12$ ve $P_{19} = (1/4) \times (1/3) = 1/12$ değerlerini alır. Her zaman olduğu gibi, olasılıkların toplamı 1 olur.

Bu örneğin amacı durumları sayma işleminin parçacıkların doğasına nasıl bağlı olduğunu göstermek idi. Bu örnek bir açıdan N'nin çok büyük olduğu gerçek durumdan *daha karmaşık* idi. N büyüdükçe en olası düzenek (bu örnekte ayırt edilebilen parçacıklar için $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$) diğer olası düzeneklere nazaran en şanslı düzenek olur ki istatistiksel olarak diğer düzenekleri yok sayabilmeyi göze alabilir duruma geliriz.[21] *Denge durumunda parçacık enerjilerinin dağılımı en olası durumdaki dağılımdır* (bu $N = 3$ için doğru olsaydı ki doğru değil, ayırt edilebilen parçacıklar için $P_5 = P_7 = P_{17} = 1/3$ sonucunu verirdi). 5.4.3. Kesimde bu noktaya tekrar geri döneceğim, fakat önce sayma sürecini genelleştirmemiz gerekir.

[21] Büyük sayıların istatistiği için bu şaşırtıcı ve sezgisel beklentilere aykırı bir olgudur. Konu hakkında iyi bir tartışma için, Ralph Baierlein, *Thermal Physics*, Cambridge U. P. (1999), 2.1. Kesime bakınız.

***Problem 5.22**

(a) Birinin ψ_5 durumunda, diğer birinin ψ_7 durumunda ve kalan diğerinin ψ_{17} durumunda olduğu üç özdeş fermiyon için tamamıyla antisimetrik olan $\psi(x_A, x_B, x_C)$ dalga fonksiyonunu oluşturun.

(b) Üç bozon için tamamıyla simetrik olan dalga fonksiyonunu aşağıdaki her bir durum için ayrı ayrı oluşturun. (i) Hepsi ψ_{11} durumunda, (ii) ikisi ψ_1 durumunda ve diğeri ψ_{19} durumunda, (iii) biri ψ_5 durumunda, diğer biri ψ_7 durumunda ve kalan diğeri ψ_{17} durumunda.

***Problem 5.23** Denge durumunda bir boyutlu harmonik salınıcı potansiyelinde bulunan ve toplam enerjisi $E = (9/2)\hbar\omega$ olan ve de birbirleriyle etkileşmeyen üç parçacığımız olsun.

(a) Bunlar aynı kütleli, ayırt edilebilen parçacıklar ise, olası dolululuk-sayı düzenekleri nelerdir ve her bir düzenek için kaç tane farklı üç parçacık durumları vardır? En olası düzenek hangisidir? Rastgele bir parçacık seçip bunun enerjisini ölçtüğünüzde, hangi değerleri elde ederdiniz ve her birinin olasılığı ne olurdu? En olası enerji değeri nedir?

(b) Spin'i yok sayarak (5.4.1. Kesimde yaptığımız gibi) aynı sorgulamayı özdeş fermiyonlar için tekrar edin.

(c) Spin'i yok sayarak aynı sorgulamayı özdeş bozonlar için tekrar edin.

5.4.2 Genel Durum

Şimdi katlılıkları sırasıyla d_1, d_2, d_3 olan E_1, E_2, E_3 tek parçacık enerji durumlarını veren herhangi bir potansiyeli ele alalım (yani her bir E_n enerjisi için d_n tane ayrı tek parçacık durumu var). Aynı kütleli N tane parçacığı bu potansiyele koyduğumuzu varsayalım. İlgilendiğimiz düzenek N_1 tane parçacığın E_1 enerjisine, N_2 tane parçacığın E_2 enerjisine sahip olduğu ve öylece devam eden düzenektir. *Soru:* Bu düzenek kaç değişik yol ile gerçekleştirilebilir? (ya da daha doğru olarak, bu düzeneğe karşılık gelen kaç tane ayrı durum vardır?). $Q(N_1, N_2, N_3\ldots)$ yanıtı, parçacıkların ayırt edilebilir, özdeş fermiyon, ya da özdeş bozon olup olmadıklarına bağlıdır. Bu nedenle bu üç farklı durumu ayrı ayrı inceleyeceğiz.[22]

Önce, parçacıkların *ayırt edilebilir* olduklarını varsayalım. N tane adaydan N_1 tane parçacığı kaç değişik yol ile ilk "kutu" ya yerleştirebiliriz?

[22] Buradaki anlatım Amnon Yariv'in anlatımını takip eder. *An Introduction to Theory and Applications of Quantum Mechanics*, Wiley, New York (1982).

Yanıt: **Binom katsayısı:** "N'de N_1'i seç"

$$\binom{N}{N_1} \equiv \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!}. \qquad [5.73]$$

İlk parçacığı seçmek için N tane yol vardır, bu da ikinci parçacık için geriye (N-1) tane yol bırakır ve böyle devam ederek

$$N(N-1)(N-2)\dots(N-N_1+1) = \frac{N!}{(N-N_1)!}$$

elde edilir. Öte yandan bu N_1 parçacığın $N_1!$ farklı *permütasyonunu* ayrı ayrı sayar. Halbuki bizim için 37 sayısının ilk çekilişte mi yoksa 29. çekilişte mi çıktığı önemli değildir. O nedenle $N_1!$'e böleriz ve bu da 5.73 nolu denklemi doğrular. Şimdi bu N_1 tane parçacık kaç farklı yolla ilk kutu *içerisinde* düzenlenebilirler? Kutuda d_1 tane durum var. O zaman her bir parçacığın d_1 tane seçeneği var. Bu da her biri için toplam $(d_1)^{N_1}$ tane seçeneğin olduğunu söyler. Böylelikle, toplam N parçacıklı bir topluluktan seçilen N_1 tane parçacığı d_1 tane farklı seçenek içeren bir kutuya koyma sayısı

$$\frac{N!d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!}$$

olur. Aynı süreç, 2. kutu için de geçerlidir ve doğal olarak geriye kalan ve üzerine çalışılacak parçacık sayısı N yerine (N–N_1) olur:

$$\frac{(N-N_1)!d_2^{N_2}}{N_2!(N-N_1-N_2)!}$$

ve böyle devam eder. Sonunda

$$\begin{aligned} Q(N_1, N_2, N_3, \dots) &= \frac{N!d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!}\frac{(N-N_1)!d_2^{N_2}}{N_2!(N-N_1-N_2)!}\frac{(N-N_1-N_2)!d_3^{N_3}}{N_3!(N-N_1-N_2-N_3)!}\dots \\ &= N!\frac{d_1^{N_1}d_2^{N_2}d_3^{N_3}\dots}{N_1!N_2!N_3!\dots} = N!\prod_{n=1}^{\infty}\frac{d_n^{N_n}}{N_n!}. \end{aligned} \qquad [5.74]$$

elde edilir. (Şimdi ara verip, sonucu 5.4.1. Kesimdeki örnek için *kontrol* edin– 5.2.4 nolu probleme bakın).

Problem *özdeş fermiyonlar* için çok daha kolaydır. Çünkü onlar ayırt edilemeyen parçacıklardır ve *hangi* parçacığın *hangi* durumda olduğunun önemi yoktur. Antisimetrileştirme koşulu belli bir tek parçacık durum setinin doldurulduğu tek bir N-parçacık durumunun olduğunu söyler. Bundan başka, verilen bir durumu sadece tek bir parçacık doldurabilir. O zaman n-inci kutuda

$$\binom{d_n}{N_n}$$

kadar N_n tane doldurulmuş durum seçme yolu vardır.[23] Böylece,

$$Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty}\frac{d_n!}{N_n!(d_n-N_n)!} \qquad [5.75]$$

olur. (Bunu 5.4.1. Kesimdeki örnek için kontrol edin– 5.24 nolu probleme bakın).

Hesaplamanın en zor olduğu durum *özdeş bozonlardır*. Yine simetrileştirme koşulu belli bir tek parçacık durum setinin doldurulduğu sadece tek bir N-parçacık durumu olduğunu söyler ama bu kez aynı tek parçacık durumunu paylaşan parçacık sayısında kısıtlama yoktur. n-inci kutu için soru şu olur: N_n tane özdeş parçacığı kaç değişik yolla farklı d_n bölmelerine koyabiliriz? Bu kombinasyon problemini çözmenin birçok numarası vardır; özellikle akılcı olanı şudur: noktalar parçacıkları ve çarpılar bölmeleri göstersin. Örneğin $d_n = 5$ ve $N_n = 7$ ise,

● ● × ● × ● ● ● × ● ×

şeklindeki düzenek ilk durumda iki parçacık, ikinci durumda bir parçacık, üçüncü durumda üç, dördüncü durumda bir parçacık olduğunu ve beşinci durumda hiçbir parçacığın olmadığını gösterir. N_n tane nokta ve noktaları d_n gruplarına bölen $(d_n - 1)$ tane çarpı olduğuna dikkat edin. Eğer her bir nokta ve çarpı *işaretlenmiş olsaydı*, onları düzenlemenin $(N_n + d_n - 1)!$ tane farklı yolu olurdu. Fakat bizim durumumuz için noktalar eşdeğerdir ve onları sırasını değiştirmek ($N_n!$ tane yol) durumu değiştirmez. Aynı şekilde, çarpılar da eşdeğerdir ve onların sırasını değiştirmek ($(d_n - 1)!$ tane yol) hiçbir şeyi değiştirmez. Bu nedenle aslında N_n parçacığı n-inci kutuda d_n tek parçacık durumlarına dağıtmanın

$$\frac{(N_n+d_n-1)!}{N_n!(d_n-1)!} = \binom{N_n+d_n-1}{N_n} \qquad [5.76]$$

tane farklı yolu vardır ve bu da

$$Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty}\frac{(N_n+d_n-1)!}{N_n!(d_n-1)!} \qquad [5.77]$$

sonucuna götürür. (5.4.1. Kesimdeki örnek için kontrolünü yapın– 5.24 nolu probleme bakın).

***Problem 5.24** 5.74, 5.75, 5.77 nolu denklemleri 5.4.1. Kesimde verilen örnek için kontrol ediniz.

****Problem 5.25** 5.76 nolu denklemi tümevarım yöntemi ile elde edin. Kombinasyon sorusu: N tane özdeş topu d tane kutu içine kaç değişik yol ile koyabilirsiniz

---

[23] Bu sıfır olmalı. $N_n > d_n$ olduğu durumda negatif bir tamsayının faktöriyelinin sonsuz olduğunu göz önüne aldığımızda sıfırdır.

(bu problem için n alt indisine aldırış etmeyin). N tanesinin hepsini üçüncü kutuya koyabilirsiniz, ya da bir tanesi hariç tümünü ikinci kutuya ve birini beşinci kutuya, ya da iki tanesini ilk kutuya ve üçünü üçüncü kutuya ve geri kalan hepsini yedinci kutuya, vs. koyabilirsiniz. $N = 1$, $N = 2$, $N = 3$ ve $N = 4$ durumları için açık bir şekilde çalışın; $N = 4$'e geldiğinizde genel bir formül çıkarabilecek durumda olmalısınız.

5.4.3 En Olası Düzenek

Isıl denge durumunda, E toplam enerjili, N parçacıklı her durum eş olasılığa sahip. Öyleyse *en olası düzenek* $(N_1, N_2, N_3, \ldots)$ en fazla farklı yolla elde edilebilen düzenektir. Öyle ki bu düzenek için Q $(N_1, N_2, N_3, \ldots)$ en büyüktür ve aşağıdaki bağ koşullarını sağlamalıdır:

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n = N \qquad [5.78]$$

ve

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n = E. \qquad [5.79]$$

$f_1(x_1, x_2, x_3, \ldots) = 0, f_2 = (x_1, x_2, x_3, \ldots) = 0$ vs gibi bağ koşullarını sağlamak zorunda olan çok değişkenli bir $F(x_1, x_2, x_3, \ldots)$ fonksiyonunu maksimumlaştırma problemi en uygun **Langrange çarpanları** yöntemiyle çözümlenebilir.[24] Yeni bir fonksiyon tanımlarız:

$$G(x_1, x_2, x_3, \ldots, \lambda_1, \lambda_2, \ldots) \equiv F + \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \cdots \qquad [5.80]$$

ve *tüm* türevlerini sıfıra eşitleriz:

$$\frac{\partial G}{\partial x_n} = 0; \quad \frac{\partial G}{\partial \lambda_n} = 0. \qquad [5.81]$$

Bizim durumumuzda Q yerine Q'nun *logaritmasıyla* çalışmak biraz daha kolay olur. Bu *çarpımları toplama* dönüştürür. Logaritma, argümanının monotonik bir fonksiyonu olduğundan, Q'nun ve $\ln(Q)$'nun maksimumu aynı noktada olur. Böylece

$$G \equiv \ln(Q) + \alpha\left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\right] + \beta\left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\right] \qquad [5.82]$$

[24] Mary Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, 2nd ed. Wiley, New York (1983) 4. Bölüm, 9. Kesime bakınız.

olur ve burada α ve β Langrange çarpanlarıdır. α ve β'ya göre türevleri sıfıra eşitleyerek, 5.78 ve 5.79 nolu denklemleriyle verilen bağ koşulları tekrar elde edilir. O zaman geriye N_n'e göre türevleri sıfıra eşitlemek kalır.

Parçacıklar *ayırt edilebilen* parçacıklar ise Q, 5.74 nolu denklemden elde edilir ve

$$G = \ln(N!) + \sum_{n=1}^{\infty}[N_n \ln(d_n) - \ln(N_n!)] + \alpha\left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\right] + \beta\left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\right] \qquad [5.83]$$

olur. Söz konusu N_n dolululuk sayılarının büyük olduğu varsayıp, **Stirling yaklaşıklığını**[25] kullanabiliriz.

$$z \gg 1 \text{ ise,} \quad \ln(z!) \approx z\ln(z) - z \qquad [5.84]$$

ve bu da G'yi

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty}[N_n \ln(d_n) - N_n \ln(N_n) + N_n - \alpha N_n - \beta E_n N_n] + \ln(N!) + \alpha N + \beta E \qquad [5.85]$$

şeklinde yazabilmemizi sağlar. Buradan

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(d_n) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n \qquad [5.86]$$

elde edilir. Bu denklemi sıfıra eşitleyerek N_n için çözdüğümüzde, ayırt edilebilen parçacıklar için *en olası doluluk sayıları*

$$N_n = d_n e^{-(\alpha+\beta E_n)} \qquad [5.87]$$

şeklinde olur. Parçacıklar *özdeş fermiyonlar* ise Q, 5.75 nolu denklemden elde edilir ve

$$G = \sum_{n=1}^{\infty}\{\ln(d_n!) - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - N_n)!]\} + \alpha\left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\right] + \beta\left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\right] \qquad [5.88]$$

[25] Stirling yaklaşıklığı Stirling serisine daha fazla terimler dahil ederek geliştirilebilir. Fakat buradaki amacımız için ilk iki terim yeterlidir. George Arfken ve Hans-Jurgen Weber, *Mathematical Methods for Pysicists*, 5th ed, Academic Press, Orlando (2000). 10.3 Kesime bakınız. Söz konusu doluluk sayıları 5.4.1. Kesimde olduğu gibi büyük *değil* ise, o zaman istatistiksel mekanik uygulanamaz. Buradaki amaç: öyle büyük sayılarla çalışalım ki istatistiksel yaklaşım güvenilir sonuçlar versin. Her zaman çok yüksek enerjili ve doldurulmamış tek parçacık durumları olacaktır. Neyse ki, Stirling yaklaşıklığı $z = 0$ için de geçerlidir. Burada "söz konusu" kelimesini N_n'nin ne çok büyük ne de sıfır olduğu uçlarda dolanan başı boş durumları dışarlamak için kullandım.

olur. Bu sefer sadece N_n'nin büyük olduğunu değil, $d_n >> N_n$ olduğunu da varsayacağız[26] ki her iki terime de Stirling yaklaşıklığını uygulayabilelim. Bu durumda

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \Big[\ln(d_n!) - N_n \ln(N_n) + N_n - (d_n - N_n)\ln(d_n - N_n) + (d_n - N_n) - \alpha N_n - \beta E_n N_n \Big] + \alpha N + \beta E \qquad [5.89]$$

haline gelir. Böylece

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = -\ln(N_n) + \ln(d_n - N_n) - \alpha - \beta E_n \qquad [5.90]$$

olur. Bunu sıfıra eşitleyerek N_n için çözdüğümüzde, özdeş fermiyonlar için *en olası dolululuk sayılarını*

$$N_n = \frac{d_n}{e^{(\alpha+\beta E_n)} + 1} \qquad [5.91]$$

olarak buluruz.

En son olarak, eğer parçacıklar *özdeş bozon* iseler *Q.* 5.77 nolu denklemden elde edilir ve

$$G = \sum_{n=1}^{\infty} \{\ln[(N_n + d_n - 1)!] - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - 1)!]\} + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right] \qquad [5.92]$$

şeklini alır. Her zamanki gibi $N_n >> 1$ olduğunu varsayarak ve Stirling yaklaşıklığını kullanarak,

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \{(N_n + d_n - 1)\ln(N_n + d_n - 1) - (N_n + d_n - 1) - N_n \ln(N_n) + N_n - \ln[(d_n - 1)!] - \alpha N_n - \beta E_n N_n\} + \alpha N + \beta E \qquad [5.93]$$

ve böylece

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(N_n + d_n - 1) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n \qquad [5.94]$$

[26] *Bir* boyutta enerjiler katlı (yoz) değildir (2.45 nolu probleme bakın), fakat üç boyutta d_n artan n ile tipik olarak hızlı bir şekilde artar (Hidrojen atomunda örneğin, $d_n = n^2$). O nedenle doldurulmuş *çoğu* durumlar için, $d_n >> 1$ olduğunu varsaymak dayanaksız olmaz. Öte yandan, Fermi seviyesine kadar tüm durumların doldurulduğu ve $d_n = N_n$ olduğu mutlak sıcaklıkta d_n elbette N_n'den çok büyük değildir. Burada bizi tekrar Stirling formülünün $z = 0$ için de geçerli olması kurtarır.

olarak bulunur. Bunu sıfıra eşitleyip N_n için çözdüğümüzde, özdeş bozonlar için *en olası doluluk sayılarını*

$$N_n = \frac{d_n - 1}{e^{(\alpha+\beta E_n)} - 1} \qquad [5.95]$$

olarak buluruz. (Fermiyonlar için başvurduğumuz yaklaşımla uyumlu olabilmek için paydaki 1'i atmalıyız ve de bundan sonra öyle yapacağım.)

Problem 5.26 Langrange çarpanları yöntemini kullanarak $(x/a)^2 + (y/b)^2 = 1$ elipsi içinde, kenarları eksenlere paralel olacak en büyük alanlı dikdörtgeni bulunuz. Bu en büyük alan nedir?

Problem 5.27

(a) $z = 10$ olduğu durumunda Stirling yaklaşıklığındaki hata yüzdesini hesaplayın.

(b) Hatayı %1'den az verecek en küçük z tamsayısı nedir?

5.4.4 α ve β'nın Fiziksel Önemi

α ve β parametreleri hikayeye sırasıyla toplam parçacık ve toplam enerji ile ilgili Langrange çarpanları olarak girdiler. Matematiksel olarak, doluluk sayılarının (5.87, 5.91 ve 5.95 nolu denklemler) bağ koşulu denklemlerine (5.78 ve 5.79 nolu denklemler) yerleştirilmeleriyle elde edilirler. Öte yandan toplamı alabilmek için, söz konusu potansiyel için verilen E_n enerji değerlerini ve bunlara karşılık gelen d_n katlılık sayısını bilmemiz gerekir. Örnek olarak, üç boyutlu sonsuz kare kuyu potansiyelinde, aynı kütleli ve etkileşmeyen çok sayıda parçacık içeren **ideal gaz** durumunu inceleyeceğim. Bu α ve β'nın fiziksel yorumunu anlamamıza yardımcı olacaktır.

5.3.1. Kesimde izin verilen enerji değerlerini (5.39 nolu denklem)

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \qquad [5.96]$$

olarak bulmuştuk. Burada

$$\mathbf{k} = \left(\frac{\pi n_x}{l_x}, \frac{\pi n_y}{l_y}, \frac{\pi n_z}{l_z} \right)$$

dir. Daha önce yaptığımız gibi, k–uzayında π^3 / V hacmine düşen bir durum (ya da, s spini için, $2s + 1$ tane durum) olan $\mathbf{k}$'yı sürekli değişken gibi göz önüne alarak, toplamı integrale dönüştürürüz. Kürenin ilk 1/8'lik parçasındaki (5.4 nolu şekle bakın) küresel

kabukları "kutu" olarak kabul edersek, kutudaki durum sayısı olan "katlılık sayısı"

$$d_k = \frac{1}{8}\frac{4\pi k^2\,dk}{(\pi^3/V)} = \frac{V}{2\pi^2}k^2\,dk \qquad [5.97]$$

şeklinde elde edilir. Ayırt edilebilen parçacıklar için (5.87 nolu denklem), ilk bağ koşulu (5.87 nolu denklem)

$$N = \frac{V}{2\pi^2}e^{-\alpha}\int_0^\infty e^{-\beta\hbar^2k^2/2m}k^2\,dk = Ve^{-\alpha}\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2}$$

olur ve böylece

$$e^{-\alpha} = \frac{N}{V}\left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}\right)^{3/2} \qquad [5.98]$$

elde edilir. İkinci bağ koşulu (5.79 nolu denklem)

$$E = \frac{V}{2\pi^2}e^{-\alpha}\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty e^{-\beta\hbar^2k^2/2m}k^4\,dk = \frac{3V}{2\beta}e^{-\alpha}\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2}$$

olduğunu söyler ya da $e^{-\alpha}$'yı 5.98 nolu denkleme yerine koyduğumuzda,

$$E = \frac{3N}{2\beta} \qquad [5.99]$$

elde edilir. (5.97 nolu denklemde $(2s + 1)$ spin çarpanını dahil etseniz bile, bu noktada sadeleştiklerinden dolayı 5.99 nolu denklem tüm spinler için doğrudur).

Bu sonuç (5.99 nolu denklem) T sıcaklığında bir atomun ortalama kinetik enerjisini tanımlayan klasik formülü[27] hatırlatıyor.

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{2}k_BT \qquad [5.100]$$

ve burada k_B Boltzmann sabitidir. Bu β'nın *sıcaklık* ile ilişkili olduğunu gösterir:

$$\beta = \frac{1}{k_BT}. \qquad [5.101]$$

Bunun sadece üç boyutlu sonsuz kare kuyu potansiyelinde ayırt edilebilen parçacıklar için değil de, genelde doğru olduğunu kanıtlayabilmek için birbirleriyle ısıl dengede bulunan farklı cisimlerin aynı β değerine sahip olduklarını göstermemiz gerekecek. Konu birçok kitapta tartışılmıştır.[28] Burada aynı şeyin tekrarını yapmayacağım. Sadece 5.101 nolu denklemi T'nin *tanımı* olarak alacağım.

[27] Örneğin, David Halliday, Robert Resnick, and Jearl Walker, *Fundamentals of Physics*, 5th ed,. Wiley, New York (1997) 20.5. Kesime bakınız.

[28] Örneğin, Yariv (22. dipnot), 15.4. Kesime bakınız.

T'nin fonksiyonu olan α (5.98 nolu denkleme bakın) yerine **kimyasal potansiyeli** kullanmak alışıla gelmiş bir tercihtir.

$$\mu(T) \equiv -\alpha k_BT \qquad [5.102]$$

ve 5.87, 5.91 ve 5.95 nolu denklemleri *belli bir ϵ enerjili (tek parçacık) durumundaki en olası parçacık sayısı* olarak tekrar yazarsak (verilen bir enerjideki parçacık sayısından o enerjiye sahip bir *durumdaki* parçacık sayısına geçmek için, sadece durumun katlılığına böleriz):

$$n(\epsilon) = \begin{cases} e^{-(\epsilon-\mu)/k_BT} & \text{MAXWELL-BOLTZMANN} \\ \dfrac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}+1} & \text{FERMI-DIRAC} \\ \dfrac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}-1} & \text{BOSE-EINSTEIN} \end{cases} \qquad [5.103]$$

Maxwell-Boltzmann dağılımı klasik sonuçtur ve *ayırt edilebilen parçacıklar* içindir; **Fermi-Dirac dağılımı** *özdeş fermiyonlara ve* **Bose-Einstein dağılımı** özdeş bozonlara uygulanır.

Fermi-Dirac dağılımı $T \to 0$ iken, basit bir davranış sergiler:

$$e^{(\epsilon-\mu)/k_BT} \to \begin{cases} 0, & \epsilon < \mu(0), \\ \infty, & \epsilon > \mu(0), \end{cases}$$

ve böylece

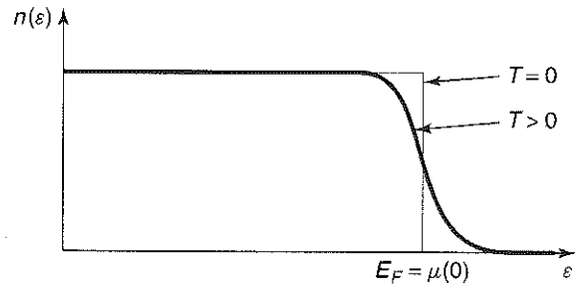
$$n(\epsilon) \to \begin{cases} 1, & \epsilon < \mu(0), \\ 0, & \epsilon > \mu(0) \end{cases} \qquad [5.104]$$

olur. $\mu(0)$ enerjisine kadar *tüm* durumlar dolu ve bu enerjinin üzerindeki tüm durumların hepsi boştur (5.8 nolu şekil). Buradan mutlak sıfır sıcaklığındaki kimyasal potansiyelin tam olarak Fermi enerjisine eşit olduğu açık olarak görülür:

$$\mu(0) = E_F. \qquad [5.105]$$

Sıcaklık arttıkça, 5.8 nolu şekildeki eğirinin gösterdiği gibi Fermi-Dirac dağılımı keskinliğini "yumuşatır". Şimdi özel bir durum olan ideal gaz durumuna dönersek, daha önce ayırt edilebilen parçacıklar için T sıcaklığında toplam enerjiyi (5.99 nolu denklem)

$$E = \frac{3}{2}Nk_BT \qquad [5.106]$$



ŞEKİL 5.8: $T = 0$ ve biraz daha yüksek sıcaklıklar için Fermi-Dirac dağılımı.

ve kimyasal potansiyeli (5.98 nolu denklem) ise

$$\mu(T) = k_B T \left[\ln\left(\frac{N}{V}\right) + \frac{3}{2} \ln\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}\right) \right] \qquad [5.107]$$

olarak bulmuştuk. Şimdi 5.87 nolu denklem yerine 5.91 ve 5.95 nolu denklemleri kullanarak, özdeş fermiyon ve bozonlardan oluşan ideal gaza karşılık gelen ifadeleri elde etmek için biraz uğraşmak istiyorum. 5.78 nolu denklem ile verilen ilk bağ koşulu

$$N = \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2}{e^{[(\hbar^2 k^2/2m) - \mu]/k_B T} \pm 1} dk \qquad [5.108]$$

halini alır (artı işareti fermiyonlar için, eksi işareti bozonlar içindir). 5.79 nolu denklemdeki ikinci bağ koşulu

$$E = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \frac{k^4}{e^{[(\hbar^2 k^2/2m) - \mu]/k_B T} \pm 1} dk \qquad [5.109]$$

sonucunu verir. Bunlardan ilki $\mu(T)$'yi ve ikincisi $E(T)$'yi belirler (örneğin $E(T)$'i kullanarak, ısı sığasını elde edebiliriz: $C = \partial E/\partial T$). Ne yazık ki, bu integraller temel fonksiyonlar cinsinden hesaplanamazlar ve bu sorunu daha fazla irdelemeyi size bırakacağım (5.28 ve 5.29 nolu problemlere bakın).

Problem 5.28 5.108 ve 5.109 nolu denklemlerdeki integralleri mutlak sıfır sıcaklıkta özdeş fermiyonlar için hesaplayınız. Sonuçlarınızı 5.43 ve 5.45 nolu denklemler ile kıyaslayın. (5.108 ve 5.109 nolu denklemlerde elektronlar için spin katlılığını dahil edecek fazladan 2 çarpanı olduğuna dikkat edin).

***Problem 5.29**

(a) Bozonlar için kimyasal potansiyelin her zaman en düşük izin verilen enerji değerinden daha düşük olması gerektiğini gösterin. *Yardım:* $n(\epsilon)$ negatif olamaz.

(b) Özellikle ideal bozon gazı için tüm T değerlerinde $\mu(T) < 0$ olur. Bu durumda N ve T'nin sabit tutulduğunu varsayarak, azalan T ile $\mu(T)$'nin tekdüze olarak arttığını gösterin. *Yardım:* 5.108 nolu denklemi eksi işaretiyle gözden geçirin.

(c) Bose yoğunlaşması olarak bilinen olgu T'yi azaltırken $\mu(T)$'nin sıfır olduğu anda oluşur. $\mu = 0$ için integrali hesaplayın ve bu olayın gözlendiği kritik sıcaklık (T_c) için ifadeyi elde edin. Bu kritik sıcaklığın altında parçacıklar taban durumunda toplanır ve ayrık toplamı sürekli bir integralle yer değiştirme tekniği geçerliliğini kaybeder.[29] *Yardım:*

$$\int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx = \Gamma(s)\zeta(s) \qquad [5.110]$$

ve burada Γ Euler **gamma fonksiyonu,** ξ ise **Reimann zeta fonksiyonudur.** Uygun sayısal değerlere bakınız.

(d) ^4He için kritik sıcaklığı bulunuz. Bu sıcaklıkta ^4He'ün yoğunluğu 0.15 gm/cm^3'tür. *Açıklama:* ^4He için deneysel kritik sıcaklık 2.17 K'dir. ^4He'ün T_c civarında gösterdiği dikkate değer özellikler 29. dipnotta verilen kaynakta tartışılmıştır.

5.4.5 Karacisim Spektrumu

Elektromanyetik alanın kuantası olan fotonlar, spini 1 olan özdeş bozonlardır. Fakat *kütlesiz* oldukları için de çok özeldirler ve bu nedenle özde relativistik parçacıklardır. Relativistik olmayan Kuantum Mekaniğine ait olmayan dört önermeyi kabul etmeye hazırsanız, fotonları da konumuza dahil edebiliriz.

1. Bir fotonun enerjisi ile frekansı arasındaki ilişki Plank formülü ile verilir: $E = h\nu = \hbar\omega$
2. Dalga sayısı ile frekansı arasındaki ilişki: c ışık hızı olmak üzere, $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$.
3. Sadece iki spin durumu olabilir (m kuantum sayısı +1 ve −1 olabilir ama 0 olamaz).

---

[29] F. Mandl, *Statistical Physics*, Wiley, London (1971) 11.5. Kesime bakınız.

4. Foton *sayısı* korunan bir büyüklük değildir; sıcaklık artırıldığında, birim hacimdeki foton sayısı artar.

4. önerme 5.78 nolu denklem ile verilen ilk bağ koşulunun uygulanamayacağını söyler. Bunu 5.82 nolu denklemde ve sonraki izlenen her adımda $\alpha \to 0$ yaparak sağlayabiliriz. Böylece, fotonlar için en olası doluluk sayısı (5.95 nolu denklem)

$$N_\omega = \frac{d_k}{e^{\hbar\omega/k_BT} - 1} \qquad [5.111]$$

olur. V hacimli bir kutudaki serbest fotonlar için, 5.97 nolu denklem[30] ile verilen d_k, 2 spin çarpanı ile çarpılıp (3. önerme) ve k yerine ω cinsinden ifade edilmesi (2. önerme) ile

$$d_k = \frac{V}{\pi^2 c^3}\omega^2\, d\omega \qquad [5.112]$$

şeklini alır. Böylece dω frekans aralığındaki, $N_\omega \hbar\omega/V$ enerji yoğunluğu $\rho(\omega)d\omega$'ya eşit olur. Burada $\rho(\omega)$

$$\boxed{\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3\left(e^{\hbar\omega/k_BT} - 1\right)}} \qquad [5.113]$$

dir. Bu, T sıcaklığında dengede olan elektromanyetik alan için birim hacim ve frekans başına enerjiyi veren **karacisim spektrumu** için bilinen Planck formülüdür ve 5.9 nolu şekilde üç farklı sıcaklık için çizilmiştir.

Problem 5.30

(a) 5.113 nolu denklemi kullanarak $d\lambda$ dalga boyu aralığındaki enerji yoğunluğunu bulunuz. *Yardım:* $\rho(\omega)d\omega$ 'yı $\overline{\rho}(\lambda)d\lambda$'ya eşitleyip, $\overline{\rho}(\lambda)$ için çözün.

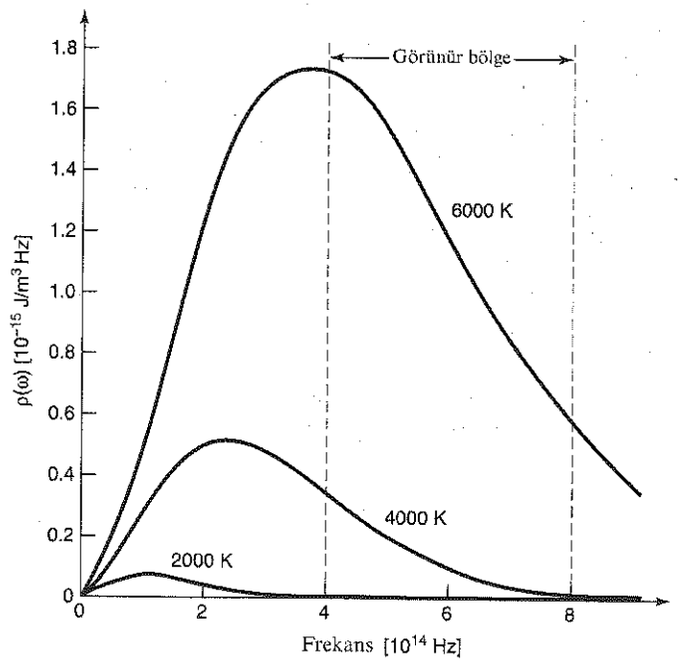
(b) Karacisim enerji yoğunluğunun en yüksek olduğu dalga boyu için **Wien yerdeğiştirme yasasını** çıkarın:

$$\lambda_{\text{en yüksek}} = \frac{2.90 \times 10^{-3}\ \text{mK}}{T}. \qquad [5.114]$$

Yardım: Hesap makinesi ya da bilgisayar kullanarak $(5-x) = 5\ e^{-x}$ transendental denklemini çözmek zorunda kalacaksınız. Sayısal değeri üç anlamlı rakama kadar elde edin.

---

[30] Gerçeği söylemek gerekirse, relativistik olmayan Schrödinger denkleminden çıkan bu ifade ile hiçbir işimiz yok. Neyse ki, katılık relativistik durumdaki ile aynı. 5.36 nolu probleme bakın.



ŞEKİL 5.9 5.113 nolu denklem ile verilen karacisim spektrumu için Planck Formülü.

Problem 5.31: Karacisim ışımasında *toplam* enerji yoğunluğu için **Stefan-Boltzmann formülünü** çıkarın:

$$\frac{E}{V} = \left(\frac{\pi^2 k_B^4}{15\hbar^3 c^3}\right) T^4 = \left(7.57 \times 10^{-16}\ \text{Jm}^{-3}\text{K}^{-4}\right) T^4. \qquad [5.115]$$

Yardım: İntegrali hesaplamak için 5.110 nolu denklemi kullanın. $\zeta(4) = \pi^4/90$ olduğuna dikkat edin.

---

5. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

Problem 5.32: Bir boyutlu harmonik salınıcı potansiyeli içinde bulunan (2.43 nolu denklem), birbirleriyle etkileşmeyen ve her birinin kütlesi m olan iki parçacığı ele alın. Parçacıklardan biri taban durumunda ve diğeri ilk uyarılmış durumda iken, $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$'yı **(a)** iki parçacık ayırt edilebilir olduğunda, **(b)** her ikisi özdeş bozon olduğunda, **(c)** her ikisi özdeş fermiyon olduğunda hesaplayın. Spini yok sayın. (Bu sizi rahatsız ediyor ise,

parçacıkların aynı spin durumunda olduğunu varsayın).

Problem 5.33: Üç parçacığınız ve üç ayrı girilebilecek tek parçacık durumları ($\psi_a(x)$, $\psi_b(x)$ ve $\psi_c(x)$) olsun. Aşağıda sıralanan durumlar için kaç farklı üç parçacık durumları elde edilebilir? **(a)** parçacıklar ayırt edilebilen parçacıklar ise, **(b)** parçacıklar özdeş bozonlar ise, **(c)** parçacıklar özdeş fermiyonlar ise (Parçacıklar *farklı* durumlarda olmak zorunda değiller. Yani parçacıklar ayırt edilebilir parçacıklar ise, $\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)\psi_a(x_3)$ üç parçacık durumu için olası bir durum olabilir).

Problem 5.34 *İki* boyutlu sonsuz kare kuyu potansiyelinde etkileşmeyen elektronlar için Fermi enerjisini hesaplayınız. σ'yı birim alana düşen elektron sayısı olarak kabul edin.

***Problem 5.35 Beyaz cüceler** diye bilinen belli soğuk yıldızlar kütleçekim çökmeye karşı elektronların katlılık basıncı (5.46 nolu denklem) ile dengelenmişlerdir. Yoğunluğu sabit kabul edersek, böyle bir cismin R yarıçapı şöyle hesaplanabilir:

(a) Toplam enerjiyi (5.45 nolu denklem) yarıçap, N nükleon sayısı (proton ve nötronlar), nükleon başına düşen elektron sayısı olan q ve elektronun m kütlesi cinsinden yazın.

(b) Düzgün yoğunluğa sahip kürenin kütleçekim enerjisini hesaplayın. Yanıtınızı evrensel kütleçekim sabiti G, R, N ve nükleon kütlesi M cinsinden veriniz. Kütleçekim enerjisinin *negatif* olduğuna dikkatinizi çekerim.

(c) Toplam enerjinin ((a) artı (b)) en düşük olduğu yarı çapı bulun. *Yanıt:*

$$R = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2 q^{5/3}}{GmM^2N^{1/3}}.$$

(Toplam kütle *arttıkça* yarıçapın *azaldığına* dikkat edin). N'den başka tüm sayıları yerleştirin ve $q = 1/2$ alın. Gerçekte atom numarası arttıkça, q bir parça azalır. Fakat buradaki amacımız için bu yeterince yakın bir değerdir. *Yanıt:* $R = 7.6 \times 10^{25} N^{1/3}$m.

(d) Güneşin kütlesine sahip bir beyaz cücenin yarıçapını kilometre olarak belirleyin.

(e) (d) şıkkındaki beyaz cüce için Fermi enerjisini eV cinsinden belirleyin ve bunu elektronun durgun kütle enerjisi ile kıyaslayın. Bu sistemin tehlikeli bir şekilde relativistik bir sisteme dönüştüğüne dikkat edin (5.36 nolu probleme bakın).

***Problem 5.36** $E = p^2/2m$ klasik enerji yerine $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2$ relativistik formülü koyarak serbest elektron gazı teorisini (5.3.1. Kesim) relativistik bölge için de oluşturabiliriz. Momentum ve dalga vektörü arasındaki genel ilişki: $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Özellikle, en uç relativistik limitte: $E \approx pc = \hbar ck$.

(a) 5.44 nolu denklemde $\hbar^2k^2/2m$ yerine en uç relativistik ifade olan $\hbar ck$'yı koyun ve bu rejimde E_{top} toplam enerjiyi hesap edin.

(b) 5.35 nolu problemin (a) ve (b) şıklarını en uç relativistik elektron gazı için tekrar edin. R'nin değeri ne olursa olsun, bu durumda dengede minimumun olmadığına dikkat edin. Toplam enerji pozitif ise, katlılık kuvvetleri kütleçekim kuvvetlerini geçer ve yıldız genişler. Öte yandan, toplam enerji negatif ise, kütleçekim kuvvetleri kazanır ve yıldız çökmeye başlar. Öyle bir N_c kritik nükleon sayısı bulun ki, $N > N_c$ için kütleçekim çökme gerçekleşsin. Bu **Chandrasekhar limit**'i olarak adlandırılır. *Yanıt:* 2.04×10^{57}. Buna karşılık gelen yıldızın kütlesini güneş kütlesinin çarpanı olarak bulun. Bu kütleden daha büyük kütleli yıldızlar beyaz cüce oluşturamazlar fakat çökmeye devam edip (koşullar uygun ise) **nötron yıldızlarına** dönüşürler.

(c) Çok yüksek yoğunluklarda, $e^- + p^+ \rightarrow n + \nu$ **ters beta bozunması** neredeyse tüm protonları ve elektronları (nötrinoları serbest bıraktırarak) nötronlara dönüştürür. Sonunda *nötronların* katlılık basıncı beyaz cücelerde *elektronların* yaptığı gibi (3.35 nolu probleme bakın) çökmeyi dengeler. Güneş ile aynı kütleye sahip bir nötron yıldızının yarıçapını hesaplayın. Ayrıca nötron Fermi enerjisini hesaplayın ve bunu nötron'un durgun kütle enerjisi ile kıyaslayın. Bir nötron yıldızını relativistik değilmiş gibi incelemek uygun mudur?

***Problem 5.37** Üç boyutlu harmonik salınıcı potansiyelinde (4.38 nolu problem) ayırt edilebilen parçacıklar için toplam enerji ve kimyasal potansiyeli bulun. *Yardım:* 5.78 ve 5.79 nolu denklemlerindeki toplamlar tam olarak hesaplanabilirler. Bu durumda sonsuz kuyu potansiyelinde yaptığımız gibi, bir integral yaklaşımı yapmak zorunda değiliz. **Geometrik serilerin** türevini alırken dikkat edin;

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \qquad [5.116]$$

ve

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{x}{1-x}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} (n+1)x^n$$

olur ve yüksek dereceli türevler için benzer sonuçlar elde edilir. *Yanıt:*

$$E = \frac{3}{2}N\hbar\omega\left(\frac{1+e^{-\hbar\omega/k_BT}}{1-e^{-\hbar\omega/k_BT}}\right). \qquad [5.117]$$

(a) $k_BT << \hbar\omega$ olduğu limit durumu tartışın.

(b) Eş bölüşüm teoremini[31] gözönüne alarak, $k_BT >> \hbar\omega$ olduğu klasik durumu tartışın. Üç boyutlu harmonik salınıcı potansiyelindeki bir parçacığın kaç **serbestlik derecesi** vardır?

[31] Halliday and Resnick (27. dipnot) 20-9. Kesime bakınız.

II. KISIM UYGULAMALAR

6. BÖLÜM

ZAMANDAN BAĞIMSIZ TEDİRGEME TEORİSİ

6.1 KATLI OLMAYAN TEDİRGEME TEORİSİ

6.1.1 Genel Formülasyon

Zamandan bağımsız Schrödinger denklemini her hangi bir potansiyel için (örneğin bir boyutlu sonsuz kare kuyu potansiyeli) çözdüğümüzü varsayalım:

$$H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0. \qquad [6.1]$$

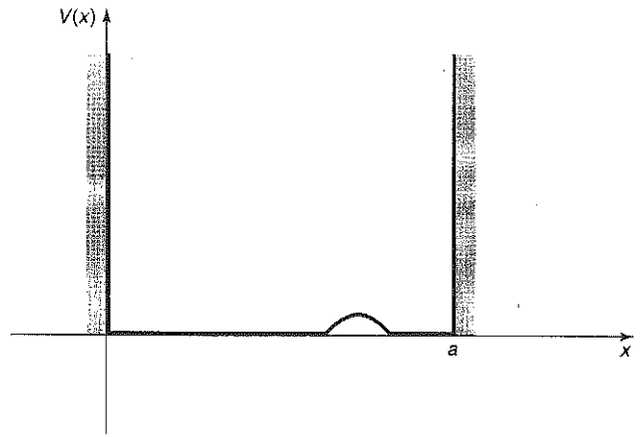
Çözüm bize ortonormal ψ_n^0 özfonksiyon takımını

$$\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle = \delta_{nm} \qquad [6.2]$$

ve bu özfonksiyonlara karşılık gelen E_n^0 özdeğerlerini verir. Şimdi potansiyele çok küçük bir tedirgeme uygulayalım (6.1 nolu şekilde gösterildiği gibi kuyunun tabanına küçük bir çıkıntı koyalım). Bu yeni duruma karşılık gelen yeni özfonksiyonları ve yeni özdeğerleri bulalım:

$$H\psi_n = E_n\psi_n, \qquad [6.3]$$

fakat talih kuşu başımıza konmadığı sürece, bu daha karmaşık potansiyel için Schrödinger denklemini tam olarak çözemeyiz. **Tedirgeme teorisi** tedirgenmiş sistemlere *tedirgenmemiş* sistemlerin bilinen kesin çözümlerini kullanarak *yaklaşık çözümler* üreten sistematik bir süreçtir.



ŞEKİL 6.1: Küçük bir şekilde tedirgenmiş sonsuz kare kuyu potansiyeli.

Önce yeni Hamiltonyeni iki ayrı terimin toplamı olarak yazarız:

$$H = H^0 + \lambda H', \qquad [6.4]$$

burada H' tedirgeme (pertürbasyon) terimidir ve 0 üst indisi her zaman tedirgenmemiş büyüklükleri belirtir. Şimdilik λ'yı çok ufak bir sayı olarak ele alacağız. Daha sonraları onu 1'e kadar çıkaracağız ve H gerçek Hamiltonyen olacaktır. Şimdi ψ_n ve E_n'leri λ'nın kuvvetleri şeklinde seriye açalım:

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots; \qquad [6.5]$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots. \qquad [6.6]$$

Burada E_n^1 *n-inci* özdeğere **birinci dereceden düzeltme** ve ψ_n^1 de n-inci özfonksiyona birinci dereceden düzeltme terimidir. E_n^2 ve ψ_n^2 **İkinci dereceden düzeltme** terimleri ve böylece devam eder. 6.5 ve 6.6 nolu denklemleri 6.3 nolu denkleme yerleştirdiğimizde

$$(H^0 + \lambda H')[\psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots] = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots)[\psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots]$$

elde ederiz. λ'nın kuvvetleri şeklinde tekrar yazarsak

$$H^0\psi_n^0 + \lambda(H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0) + \lambda^2(H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1) + \cdots = E_n^0\psi_n^0 + \lambda(E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0) + \lambda^2(E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0) + \cdots$$

olur. En düşük derece[1] (λ^0) $H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0$'ı verir (6.1 nolu denklem). Birinci derece (λ^1),

$$H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0. \qquad [6.7]$$

İkinci derece (λ^2),

$$H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1 = E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0, \qquad [6.8]$$

ve böyle devam eder. (λ ile işim burada bitti. Farklı dereceden yaklaşıkların izini sürmemize yarayan bir araçtı. Onu 1 yaptım.)

6.1.2 Birinci Dereceden Düzeltmeler

6.7 nolu denklemin ψ_n^0 ile iç çarpımını ($(\psi_n^0)^*$ ile çarpıp integralini almak) alırsanız:

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|H'\psi_n^0\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle.$$

Fakat H^0 hermitseldir:

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^1\rangle = \langle H^0\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = \langle E_n^0\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle$$

ve bu, sağ taraftaki ilk terimi yok eder. Üstelik, $\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = 1$ olduğundan,[2]

$$\boxed{E_n^1 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle.} \qquad [6.9]$$

olur. Bu birinci dereceden tedirgeme teorisinin temel sonucudur ve *pratikte*, kuantum mekaniğinin en sık kullanılan denklemi de olabilir. Bu, enerjiye birinci dereceden düzeltme teriminin tedirgemenin *tedirgenmemiş* durumlardaki *beklenen değerine* eşit olduğunu söyler.

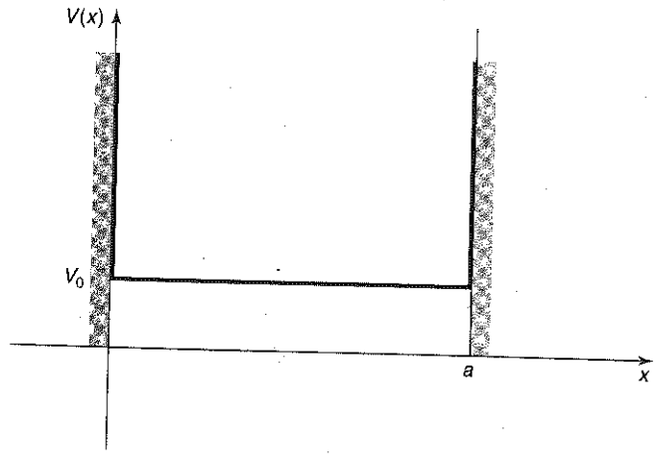
Örnek 6.1 Sonsuz kare kuyu potansiyeli için tedirgenmemiş dalga fonksiyonları (2.28 nolu denklem):

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right).$$

---

[1] Her zaman olduğu gibi kuvvet serisi açılımlarının tekliği (2. Bölüm, 25. dipnot), benzer kuvvetlerin katsayılarını eşit kılar.

[2] Bu bağlamda, $\langle\psi_n^0|H'\psi_n^0\rangle$ ya da $\langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle$ (fazladan | işareti) yazıp yazmadığımız önemli değildir. Çünkü dalga fonksiyonunu sadece bir durumu "etiketlemek" için kullanırız. Burada ikinci yazılan notasyon tercih edilir.



ŞEKİL 6.2: Tüm kuyu üzerinden sabit tedirgeme.

6.2 nolu şekilde gösterildiği gibi, sistemi kuyunun "tabanı"nı sabit bir V_0 kadar yükselterek tedirgediğimizi varsayalım. Enerji özdeğerlerine birinci dereceden düzeltme terimlerini hesaplayın.

Çözüm: Bu durumda $H' = V_0$'dır ve n-inci durumun enerjisine birinci dereceden düzeltme

$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|V_0|\psi_n^0\rangle = V_0\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = V_0$$

şeklindedir. O zaman düzeltilmiş enerji düzeyleri sadece V_0 kadar yükseltilmişlerdir; $E_n \cong E_n^0 + V_0$. Burada şaşırtıcı olan tek şey, birinci dereceden tedirgeme teorisinin *kesin* çözümü veriyor olmasıdır. *Sabit* bir tedirgeme için daha yüksek dereceden düzeltme terimlerinin yok olacağı da açıktır.[3] Öte yandan, eğer tedirgeme sadece kuyu boyunca yarısına kadar uzanırsa (6.3 nolu şekil),

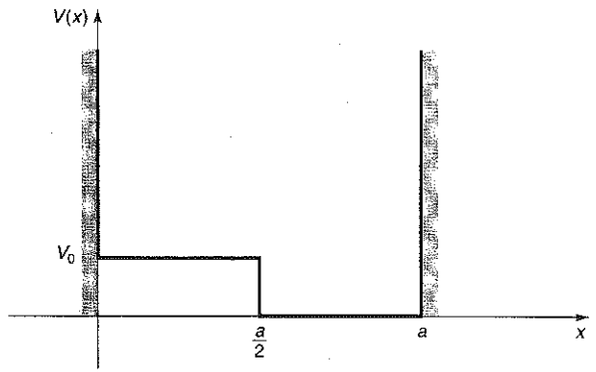
$$E_n^1 = \frac{2V_0}{a}\int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\,dx = \frac{V_0}{2}$$

olur. Bu durumda her enerji düzeyi $V_0/2$ kadar yükseltilmiş olur. Bu birinci derece yaklaşımı olarak uygun görünmesine rağmen, *kesin* sonuç değildir.

6.9 nolu denklem *enerjiye* birinci dereceden düzeltmeyi verir. *Dalga fonksiyonuna* birinci dereceden düzeltmeyi bulmak için 6.7 nolu denklemi tekrar yazarız.

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0. \qquad [6.10]$$

[3] Burada hiç bir şey sonsuz kuyu potansiyelinin doğasına bağlı değildir. Tedirgemenin sabit olduğu durumda *herhangi* bir potansiyel için bu geçerliliğini korur.



ŞEKİL 6.3: Kuyunun yarısına uzanan sabit tedirgeme.

Denklemin sağ tarafı bilinen bir fonksiyondur. Böylece ψ_n^1 için homojen olmayan diferansiyel denklem elde edilir. Tedirgenmemiş dalga fonksiyonları tam bir takım oluşturduğundan, herhangi bir fonksiyon gibi ψ_n^1 de bu fonksiyonların lineer kombinasyonu olarak ifade edilebilir:

$$\psi_n^1 = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\psi_m^0. \qquad [6.11]$$

Toplamda $m = n$ terimlerini dahil etmemize gerek yok. Çünkü ψ_n^1 6.10 nolu denklemi sağlarsa, herhangi bir α sabiti için $(\psi_n^1 + \alpha\psi_n^0)$ de sağlar ve bunu kullanarak ψ_n^0 terimlerini elde edebiliriz.[4] $c_m^{(n)}$ katsayılarını belirleyebildiğimizde de işimiz biter.

6.11 nolu denklemi 6.10 nolu denkleme yerleştirip, ψ_m^0 dalga fonksiyonları tedirgenmemiş Schrödinger denklemini (6.1 nolu denklem) sağladığı gerçeğini de kullandığımızda,

$$\sum_{m\neq n}(E_m^0 - E_n^0)c_m^{(n)}\psi_m^0 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0.$$

elde ederiz. ψ_l^0 ile iç çarpımını alarak,

$$\sum_{m\neq n}(E_m^0 - E_n^0)c_m^{(n)}\langle\psi_l^0|\psi_m^0\rangle = -\langle\psi_l^0|H'|\psi_n^0\rangle + E_n^1\langle\psi_l^0|\psi_n^0\rangle$$

[4] 6.5 nolu denklem ayrıca, ψ_n^1 içinden herhangi ψ_n^0 bileşenin çekilip ilk terimle birleştirilebileceğini söyler. Aslında $c_n^{(n)} = 0$ seçimi 6.5 nolu denklemde ψ_n^0'ın katsayısı için 1 değerine sahip ψ_n'nin *normlanabilmesinin* garantisidir (λ'da birinci derece): $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle + \lambda(\langle\psi_n^1|\psi_n^0\rangle + \langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle) + \lambda^2(\cdots) + \cdots$ öte yandan tedirgenmemiş durumlar için, ortonormallik bağıntısı ψ_n^1'in ψ_n^0 bileşeni olmadığı sürece ilk terimin 1 ve $\langle\psi_n^1|\psi_n^0\rangle = \langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = 0$ olduğunu söyler.

elde ederiz. $l = n$ ise, sol taraf sıfır olur ve 6.9 nolu denklemi tekrar elde ederiz. $l \neq n$ ise,

$$(E_l^0 - E_n^0)c_l^{(n)} = -\langle\psi_l^0|H'|\psi_n^0\rangle$$

ya da

$$c_m^{(n)} = \frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \qquad [6.12]$$

elde ederiz. Böylece

$$\boxed{\psi_n^1 = \sum_{m\neq n} \frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle}{(E_n^0 - E_m^0)}\psi_m^0} \qquad [6.13]$$

olur. *Tedirgenmemiş enerji spektrumu katlı olmadığı sürece*, toplam $m = n$ terimlerini içermediğinden payda sorunsuzdur. Fakat iki farklı tedirgenmemiş durum aynı enerjiye sahip olursa, ciddi bir sorun ile karşılaşırız (6.12 nolu denklemi elde etmek için sıfıra bölmek zorunda kalırız). Bu durumda **katlı tedirgeme teorisine** ihtiyacımız olur ve bunu 6.2. Kesimde anlatacağım.

Böylece birinci dereceden tedirgeme teorisi tamamlanmış olur: 6.9 nolu denklem enerjiye birinci dereceden düzeltme olan, E_n^1'i ve 6.13 nolu denklem de dalga fonksiyonuna birinci dereceden düzeltme olan, ψ_n^1'i verir. Bir konuda sizi uyarmam gerekiyor: Tedirgeme teorisi çoğu zaman şaşırtıcı bir şekilde gerçek enerji değerlerine yakın sonuçlar (yani, $E_n^0 + E_n^1$ gerçek E_n değerine çok yakın) verirken, dalga fonksiyonları açısında sonuçlar çok kötüdür.

***Problem 6.1** Sonsuz kare kuyu potansiyelinin merkezine bir delta fonksiyon çıkıntısını koyduğumuzu varsayalım:

$$H' = \alpha\delta(x - a/2)$$

ve burada α bir sabittir.

(a) İzin verilen enerji değerlerine birinci dereceden düzeltmeyi hesaplayın. n'nin çift değerleri için enerjilerin neden tedirgenmediğini açıklayınız.

(b) ψ_1^1 taban durumuna düzeltme serisinde (6.13 nolu denklem) sıfır olmayan ilk üç terimi hesaplayın.

***Problem 6.2** $V(x) = 1/2\ kx^2$ harmonik salınıcı için izin verilen enerji değerleri, $\omega = \sqrt{k/m}$ klasik frekans olmak üzere

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

şeklindedir. Şimdi yay sabitinin azıcık arttırıldığını varsayın: $k \to (1 + \epsilon)k$. (Belki yayı soğutarak esnekliğini azaltabiliriz).

(a) Yeni enerjilerin *kesin* değerlerini bulun (bu durumda sıradandır). İfadenizi ϵ'nun kuvvetleri olarak ikinci dereceye kadar seriye açın.

(b) Şimdi 6.9 nolu denklemi kullanarak enerjide birinci dereceden tedirgemeyi hesaplayın. Burada H′ nedir? Sonucunuzu (a) şıkkı ile kıyaslayın. *Yardım:* Bu soruyu çözerken tek bir integral bile almanıza gerek yok.

Problem 6.3 Sonsuz kuyu potansiyeline konmuş ve birbirleriyle

$$V(x_1, x_2) = -aV_0\delta(x_1 - x_2)$$

potansiyeli ile zayıf bir şekilde etkileşen iki bozonu göz önüne alın. Potansiyel ifadesinde V_0 enerji boyutuna sahip bir sabit ve a kuyunun genişliğidir.

(a) İlk olarak parçacıklar arası etkileşmeyi görmemezlikten gelerek, taban durumuna ve ilk uyarılmış duruma karşılık gelen hem dalga fonksiyonu hem de enerjiyi hesaplayın.

(b) Birinci dereceden tedirgeme teorisini kullanarak parçacıklar arası etkileşmenin taban ve ilk uyarılmış durum enerjilerine verdiği katkıyı hesaplayın.

6.1.3 Enerjiye İkinci Dereceden Düzeltmeler

Daha önce yaptığımızı izleyerek, *ikinci* dereceden denklemin (6.8 nolu denklem) ψ_n^0 ile iç çarpımını alalım.

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^2\rangle + \langle\psi_n^0|H'\psi_n^1\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^2\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle.$$

Yine H^0'ın hermitsel oluşunu kullanarak,

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^2\rangle = \langle H^0\psi_n^0|\psi_n^2\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle$$

elde ederiz. Böylece sol taraftaki ilk terim sağ taraftaki ilk terimi götürür. Aynı zamanda $\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = 1$ olduğundan, E_n^2 için aşağıdaki ifadeyi buluruz:

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle - E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle. \qquad [6.14]$$

Fakat toplam $m = n$ terimlerini içermediğinden ve diğerleri de birbirlerine ortogonal olduğundan

$$\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle = 0$$

olur ve böylece,

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\langle\psi_n^0|H'|\psi_m^0\rangle = \sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle\langle\psi_n^0|H'|\psi_m^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

ya da,

$$\boxed{E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{|\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}} \qquad [6.15]$$

bulunur ve bu ikinci dereceden tedirgeme teorisinin temel sonucudur.

Dalga fonksiyonuna ikinci dereceden düzeltme terimini (ψ_n^2), enerjiye üçüncü-dereceden düzeltme terimini ve böylece devam eden düzeltme terimlerini hesap etmeye devam edebiliriz, fakat pratikte genel olarak 6.15 nolu denklemi hesaplamak bu yöntemin kullanımı için yeterlidir.[5]

***Problem 6.4**

(a) 6.1 nolu problemde verilen potansiyel için enerjiye ikinci dereceden düzeltme terimini (E_n^2) hesaplayın. *Açıklama:* Serileri doğrudan toplayarak tek n'ler için $-2m(\alpha/\pi\hbar n)^2$'yi elde edebilirsiniz.

(b) 6.2 nolu problemde verilen potansiyel için taban durum enerjisine ikinci dereceden düzeltme terimini (E_n^2) hesaplayın. Sonucunuzun kesin çözümle uyumlu olup olmadığını kontrol edin.

Problem 6.5 Bir boyutlu harmonik salınıcı potansiyeli içinde bulunan yüklü bir parçacığı göz önüne alın. Potansiyel enerjiyi $H' = -qEx$ artıracak kadar da zayıf bir elektrik alanı uyguladığımızı varsayalım.

[5] Kısa gösterimde $V_{mn} \equiv \langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle$, $\Delta_{mn} \equiv E_m^0 - E_n^0$ olarak tanımlansın. n-inci enerji düzeyine olan düzeltme terimlerinin ilk üçü:

$$E_n^1 = V_{nn},\quad E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}},\quad E_n^3 = \sum_{l,m\neq n}\frac{V_{nl}V_{lm}V_{mn}}{\Delta_{nl}\Delta_{nm}} - V_{nn}\sum_{m\neq n}\frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}^2}.$$

Üçüncü derece düzeltme terimleri için Landau ve Lifschitz'in *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (3rd ed., Pergamon, Oxford (1977), 136. sayfa) kitabına bakın. Dördüncü ve beşinci dereceler ve daha yüksek dereceleri de dahil edebilecek güçlü bir teknik Nicholas Wheler tarafından geliştirildi: *High-Order Spectral Perturbation* (Yayınlanmamış Roed Colleger Report 2000). Zamandan bağımsız tedirgeme teorisinin daha aydınlatıcı formülasyonları, Delgarno-Lewis yöntemini ve "logaritmik" tedirgeme teorisini içerir. (LPT için T. Imbo and U. Sukhatme, *Am. J. Phys.* 52, **140** (1984), Delgarno-Lewis için, H. Mavromatis, *Am. J. Phys.* **59**, 783(1991)'e bakınız.

(a) Enerji düzeylerinde birinci dereceden değişimin olmadığını gösterin ve ikinci dereceden katkıyı hesaplayın. *Yardım:* 3.33 nolu probleme bakın.

(b) Bu problem için Schrödinger denklemi bir değişken dönüşümü ile, $x' \equiv x - (qE/m\omega^2)$, doğrudan çözülebilir. Kesin enerjileri bulun ve bunların tedirgeme teorisi yaklaşımı ile uyumlu olduklarını gösterin.

6.2 KATLI DURUMLARIN TEDİRGEME TEORİSİ

Tedirgenmemiş durumlar katlı ise, yani iki (ψ_a^0 ve ψ_b^0) ya da daha fazla ayrı durum aynı enerjiye sahip ise, tedirgeme teorisi çalışmaz: 6.12 ve 6.15 nolu denklemlerle verilen $c_a^{(b)}$ ve E_a^2 bir ihtimal pay sıfır olmadıkça ($\langle\psi_A^0|H'|\psi_b^0\rangle = 0$, bu daha sonra bizim için iyi bir manevra yolu olacaktır) patlar. Bu nedenle katlılık durumunda, enerjiye birinci dereceden düzeltme terimlerine (6.9 nolu denklem) güvenebilmek için bir dayanağımız yoktur ve problemi çözebilmek için başka bir yöntem aramak zorundayız.

6.2.1 İki Kez Katlılık

ψ_a^0 ve ψ_b^0 normlanmış dalga fonksiyonları olmak üzere

$$H^0\psi_a^0 = E^0\psi_a^0,\quad H^0\psi_b^0 = E^0\psi_b^0,\quad \langle\psi_a^0|\psi_b^0\rangle = 0 \qquad [6.16]$$

olsun. Bu durumların

$$\psi^0 = \alpha\psi_a^0 + \beta\psi_b^0 \qquad [6.17]$$

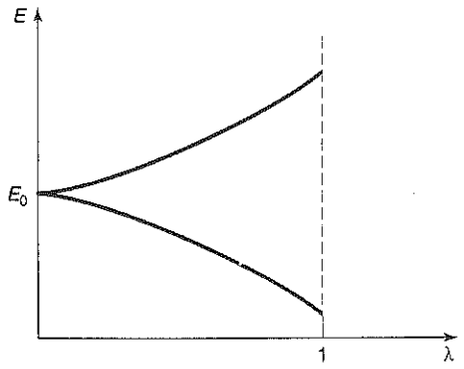
lineer kombinasyonun da H^0'ın aynı E^0 özdeğerli bir özfonksiyonu olduğuna dikkat edin:

$$H^0\psi^0 = E^0\psi^0. \qquad [6.18]$$

H' tedirgemesi katlılığı ortadan "kaldıracaktır". λ'yı 0'dan 1'e doğru arttırdıkça, ortak E^0 tedirgenmemiş enerji ikiye yarılacaktır (6.4 nolu şekil). Öteki türlü devam edersek, yani tedirgemeyi ortadan kaldırdığımızda, "yukarı" durum ψ_a^0 ve ψ_b^0'ın lineer kombinasyonu olan bir duruma indirgenir ve "aşağı" durum ise *ortogonal* lineer kombinasyon durumuna indirgenir. Fakat bu "**uygun**" lineer kombinasyonların ne olacağını önceden bilemeyiz. Bu nedenle, *birinci* dereceden enerji düzeltme terimini (6.9 nolu denklem) dahi hesaplayamayız çünkü hangi tedirgenmemiş durumları kullanacağımızı bilemiyoruz.

Bundan dolayı, şimdilik "uygun" tedirgenmemiş durumları α ve β ayarlanabilir büyülükler olmak üzere genel şekilde (6.17 nolu denklem) yazalım.

$$H\psi = E\psi \qquad [6.19]$$



ŞEKİL 6.4: Katlılığın tedirgeme ile "kaldırılması".

Schrödinger denklemini çözmek istiyoruz. Burada $H = H^0 + \lambda H'$ ve

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \cdots, \quad \psi = \psi^0 + \lambda\psi^1 + \lambda^2\psi^2 + \cdots. \qquad [6.20]$$

dir. Bu denklemleri 6.19 nolu denklemde yerine koyup, λ'nın kuvvetleri şeklinde toparlarsak,

$$H^0\psi^0 + \lambda(H'\psi^0 + H^0\psi^1) + \cdots = E^0\psi^0 + \lambda(E^1\psi^0 + E^0\psi^1) + \cdots$$

bulunur. $H^0\psi^0 = E^0\psi^0$ olduğundan ilk terimler birbirini götürür. Elimizde λ^1 derecesinde

$$H^0\psi^1 + H'\psi^0 = E^0\psi^1 + E^1\psi^0 \qquad [6.21]$$

kalır. ψ_a^0 ile iç çarpımı alırsak,

$$\langle\psi_a^0|H^0\psi^1\rangle + \langle\psi_a^0|H'\psi^0\rangle = E^0\langle\psi_a^0|\psi^1\rangle + E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$

elde edilir. H^0'ın hermitsel olması soldaki ilk terimin sağdaki ilk terimi götürmesine neden olur. Bunu 6.17 nolu denklemde yerine yazıp, ortonormallik koşulunu kullandığımızda,

$$\alpha\langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle + \beta\langle\psi_a^0|H'|\psi_b^0\rangle = \alpha E^1$$

sonucunu elde ederiz. Daha kısa olarak,

$$\alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1 \qquad [6.22]$$

şeklinde yazabiliriz. Burada

$$W_{ij} \equiv \langle\psi_i^0|H'|\psi_j^0\rangle, \quad (i, j = a, b) \qquad [6.23]$$

dir. Benzer şeklide ψ_b^0 ile iç çarpım

$$\alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E^1 \qquad [6.24]$$

sonucunu verir. Bu ifadelerdeki W'lar sadece H''nün tedirgenmemiş ψ_a^0 ve ψ_b^0 dalga fonksiyonlarına göre "matris elemanları" olduğundan genelde *bilinen* büyüklükler olduğuna dikkatinizi çekerim. 6.24 nolu denklem W_{ab} ile çarpıldığında ve de βW_{ab}'yı yok etmek için 6.22 nolu denklem kullanıldığında,

$$\alpha[W_{ab}W_{ba} - (E^1 - W_{aa})(E^1 - W_{bb})] = 0. \qquad [6.25]$$

bulunur. Eğer α sıfır *değil* ise, 6.25 nolu denklem E^1 için aşağıdaki denklemi verir:

$$(E^1)^2 - E^1(W_{aa} + W_{bb}) + (W_{aa}W_{bb} - W_{ab}W_{ba}) = 0. \qquad [6.26]$$

$W_{ba} = W_{ab}^*$ olduğunu hatırda tutarak ikinci dereceden denklemi kullanıp şu sonuca varabiliriz:

$$\boxed{E_\pm^1 = \frac{1}{2}\left[W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2}\right].} \qquad [6.27]$$

Bu katlı durumların tedirgeme teorisinin temel sonucudur; iki kök tedirgenmiş iki enerji değerine karşılık gelir.

Fakat ya α sıfır ise? Bu durumda $\beta = 1$, 6.22 nolu denklem $W_{ab} = 0$ olduğunu söyler ve 6.24 nolu denklemi kullanarak, $E^1 = W_{bb}$ sonucunu elde ederiz. Bu aslında 6.27 nolu denklem ile verilen genel sonucun $W_{aa} \rangle W_{bb}$ varsayımı altında eksi işaretlisinin kapsamı içindedir. Artı işareti $\alpha = 1$, $\beta = 0$ değerine karşılık gelir. Dahası da var,

$$E_+^1 = W_{aa} = \langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle, \quad E_-^1 = W_{bb} = \langle\psi_b^0|H'|\psi_b^0\rangle$$

tamamıyla katlı *olmayan* tedirgeme teorisi kullanılarak elde edilecek *sonuçlardır* (6.9 nolu denklem). Bu sadece bizim *şansımız*; ψ_a^0 ve ψ_b^0 durumları "uygun" bir lineer kombinasyon idi. Belli ki, bir şekilde işin tam başında "uygun" durumları *tahmin* edebilmek bize çok büyük bir avantaj sağlıyor. Devam edip, katlı olmayan tedirgeme teorisini kullanabiliriz. Aslında aşağıdaki teoremi kullanarak bunu çok sıklıkla yapabiliriz.

Teorem: A, H^0 ve H' ile sıra değiştirebilen hermitsel bir operatör olsun. H^0'ın çok katlı özfonksiyonları olan ψ_a^0 ve ψ_b^0, A'nın farklı özdeğerlere sahip özfonksiyonları ise,

$$A\psi_a^0 = \mu\psi_a^0, \quad A\psi_b^0 = \nu\psi_b^0 \quad \text{ve} \quad \mu \neq \nu$$

olur. Bu durumda $W_{ab} = 0$'dır ve böylece ψ_a^0 ve ψ_b^0 tedirgeme teorisinde kullanılabilecek "uygun" durumlar olur.

Kanıt: Varsayım gereği $[A, H'] = 0$ ve böylece;

$$\begin{aligned}\langle\psi_a^0|[A, H']\psi_b^0\rangle &= 0\\ &= \langle\psi_a^0|AH'\psi_b^0\rangle - \langle\psi_a^0|H'A\psi_b^0\rangle\\ &= \langle A\psi_a^0|H'\psi_b^0\rangle - \langle\psi_a^0|H'\nu\psi_b^0\rangle\\ &= (\mu - \nu)\langle\psi_a^0|H'\psi_b^0\rangle \coloneqq (\mu - \nu)W_{ab}.\end{aligned}$$

Ancak $\mu \neq \nu$ olduğundan, $W_{ab} = 0$ dır.

Alınacak Ders: Katlı durumlarla karşılaştığınızda, H^0 ve H' ile sıra değiştirebilen hermitsel operatörler arayın; H^0'ın ve A'nın ortak özfonksiyonlarını tedirgenmemiş durum dalga fonksiyonları olarak seçin. Sonra bilinen birinci dereceden tedirgeme teorisini kullanın. Böyle bir operatör bulamadığınız durumda ise, 6.27 nolu denkleme başvurmak zorunda kalacaksınız ancak pratikte böyle bir durumla çok nadir karşılaşılır.

Problem 6.6

$$\psi_\pm^0 = \alpha_\pm\psi_a^0 + \beta_\pm\psi_b^0$$

"uygun" iki tedirgenmemiş durum fonksiyonu olsun. Burada $\alpha_\pm$ ve $\beta_\pm$ bir normlama çarpanı kadar farkla 6.22 nolu ya da 6.24 nolu denklem kullanılarak belirlenir.

(a) $\psi_\pm^0$'ın ortogonal olduklarını ($\langle\psi_+^0|\psi_-^0\rangle = 0$);

(b) $\langle\psi_+^0|H'|\psi_-^0\rangle = 0$;

(c) $\langle\psi_\pm^0|H'|\psi_\pm^0\rangle = E_\pm^1$ ($E_\pm^1$ 6.27 nolu denklemle verilen ifadeye eşittir) olduğunu tüm işlemleriyle gösterin.

Problem 6.7 Kendi üzerine kapanan L uzunluğunda bir boyutlu uzayda serbestçe hareket edebilen m kütleli bir parçacığı göz önüne alın. (örneğin, 2.46 nolu problemde verilen, uzunluğu L olan dairesel bir tel üzerinde sürtünme olmaksızın kayabilen boncuk gibi).

(a) Durağan durumların $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ olmak üzere aşağıdaki gibi yazılabileceğini gösterin;

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{2\pi inx/L}, \quad (-L/2 < x < L/2)$$

İzin verilen enerji değerleri ise,

$$E_n = \frac{2}{m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$$

dir. $n = 0$ taban durumu hariç tüm enerji düzeylerinin iki kez katlı olduğuna dikkat edin.

(b) Şimdi $a << L$ olmak üzere,

$$H' = -V_0e^{-x^2/a^2}$$

tedirgemesini uygulayalım (bu sanki $x = 0$'da potansiyelde bir "tuzak" oluşturmak için teli birazcık bükmüşüz gibi bir "gamze" oluşturur.) 6.27 nolu denklemi kullanarak, E_n için birinci dereceden düzeltme terimini hesaplayın. *Yardım:* Bu integralleri hesaplayabilmek için, integralin alt ve üst sınırlarını $\pm L/2$'den $\pm\infty$'a dönüştürmek için $a << L$ olduğu varsayımını kullanın. Zaten H', $-a < x < a$ bölgesi dışında esas olarak sıfırdır.

(c) Bu problem için ψ_n ve ψ_{-n}*'nin* "uygun" lineer kombinasyonları nelerdir? Bu durumları kullanarak birinci dereceden düzeltme teriminin 6.9 nolu denklemden elde edilebileceğini gösterin.

(d) Teoremin koşullarına uygun hermitsel bir A operatörü bulun ve H^0 ile A'nın ortak özfonksiyonlarının (c) şıkkında kullandığınız fonksiyonlar ile bire bir aynı olduğunu gösterin.

6.2.2 Yüksek Dereceli Katlılık

Bir önceki kesimde katlılığın iki katlı olduğunu varsaydım. Fakat yöntem kolaylıkla genelleştirilebilir. 6.22 ve 6.24 nolu denklemleri matris biçiminde tekrar yazalım:

$$\begin{pmatrix}W_{aa} & W_{ab}\\ W_{ba} & W_{bb}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = E^1\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}. \qquad [6.28]$$

E^1'lerin W-matrisinin *özdeğerlerinden* başka bir şey olmadıkları açıktır; 6.26 nolu denklem bu matrisin karakteristik denklemidir .ve tedirgenmemiş durum fonksiyonlarının "uygun" lineer kombinasyonları da **W** matrisinin özvektörleridir.

n kez katlılığın olduğu durumlarda, boyutu $n \times n$ olan

$$W_{ij} = \langle\psi_i^0|H'|\psi_j^0\rangle \qquad [6.29]$$

matrisinin özdeğerlerini ararız. Lineer cebir dilinde "uygun" tedirgenmemiş dalga fonksiyonlarını bulmak, katlı alt uzayda **W** matrisini *köşegenleştiren* bir baz oluşturmak

anlamına gelir. Yine H' ile *sıra değiştirebilen* bir A operatörü düşünüp, A ve H^0'ın ortak özfonksiyonlarını kullanabilirseniz, o zaman **W** matrisi *otomatik* olarak köşegen olacaktır ve karakteristik denklemi çözme telaşına düşmek zorunda kalmazsınız.[6] (Eğer iki kez katlılıktan yola çıkarak n kez katlılık için yaptığım genelleştirmem sizde biraz sıkıntı yaratıyor ise, 6.10 nolu problemin üzerinde çalışın.)

Örnek 6.2 4.2 nolu problemde verilen üç boyutlu sonsuz kübik kuyuyu ele alın.

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < a, \text{ ve } 0 < z < a; \\ \infty & \text{diğer yerlerde.} \end{cases} \quad [6.30]$$

n_x, n_y ve n_z pozitif tamsayılar olmak üzere durağan durumlar

$$\psi^0_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right) \quad [6.31]$$

ve bunlara karşılık gelen izin verilen enerji değerleri

$$E^0_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad [6.32]$$

şeklindedir. ψ_{111} taban durumunun katlı olmadığına dikkat edin ve enerjisi

$$E^0_0 \equiv 3\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad [6.33]$$

dır. Fakat ilk uyarılmış durum üç kez katlıdır

$$\psi_a \equiv \psi_{112}, \quad \psi_b \equiv \psi_{121} \quad \text{ve} \quad \psi_c \equiv \psi_{211} \quad [6.34]$$

ve hepsi aynı enerjiye sahiptir:

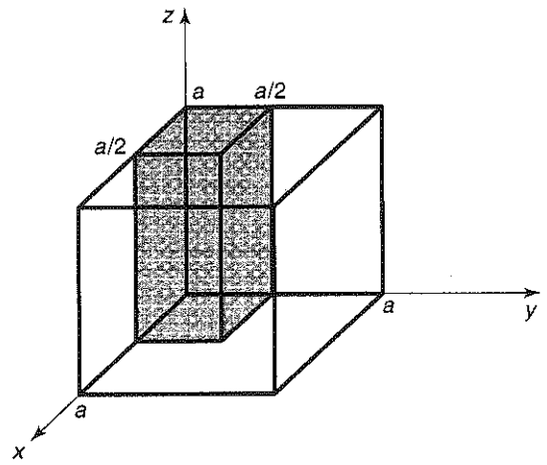
$$E^0_1 \equiv 3\frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}. \quad [6.35]$$

Şimdi,

$$H' = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2 \text{ ve } 0 < y < a/2; \\ 0, & \text{diğer yerlerde.} \end{cases} \quad [6.36]$$

şeklinde bir tedirgeme uygulayalım.

[6] Katlı durumların tedirgeme teorisi Hamiltonyenin katlı olan kısmının köşegenleştirilmesine karşılık gelir. Matrislerin köşegenleştirilmesi ve sıra değiştirebilen matrislerin aynı anda köşegenleştirilebilmeleri Ek bölümünde verilmiştir (E. 5. Kesim)



ŞEKİL 6.5: Tedirgeme taralı bölgede potansiyeli V_0 kadar arttırır.

Bu, 6.5 nolu şekilde gösterildiği gibi kutunun bir çeyreklik kısmında potansiyeli V_0 kadar arttırır. Taban durumu için birinci dereceden düzeltme terimi 6.9 nolu denklem ile verilir:

$$\begin{aligned} E^1_0 &= \langle \psi_{111} | H' | \psi_{111} \rangle \\ &= \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}y\right) dy \int_0^{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz \\ &= \frac{1}{4} V_0 \end{aligned} \quad [6.37]$$

olur ki hemen hemen beklenilen de budur.

İlk uyarılmış durum için katlı durumların tedirgeme teorisinin tüm mekanizmasına ihtiyacımız olacaktır. İlk adım **W** matrisini oluşturmaktır. Matrisin köşegen elemanları taban durumu ile aynıdır. Sadece sinüslerden birinin argümanı çiftlenmiştir.

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{1}{4} V_0$$

olduğunu kendiniz kontrol edebilirsiniz. Köşegen olmayan elemanlar daha ilgi çekicidir.

$$\begin{aligned} W_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 &\int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \\ &\times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) dy \int_0^{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz. \end{aligned}$$

Ancak, z üzerinden integral sıfırdır. W_{ac} için de bu böyledir. Yani:

$$W_{ab} = W_{ac} = 0.$$

Sonunda

$$W_{bc} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) dx \times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) dy \int_0^{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz = \frac{16}{9\pi^2} V_0$$

olur. Bu da $\kappa \equiv (8/3\pi)^2 \approx 0.7205$ olmak üzere

$$\mathbf{W} = \frac{V_0}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \qquad [6.38]$$

sonucunu verir.

W'nın ya da üzerinde çalışılması daha kolay olduğu için $4\mathbf{W}/V_0$'ın karakteristik denklemi

$$(1-w)^3 - \kappa^2(1-w) = 0$$

şeklini alır ve özdeğerler ise

$$w_1 = 1; \quad w_2 = 1+\kappa \approx 1.7205 \quad w_3 = 1-\kappa \approx 0.2795$$

dir. λ'ın birinci dereceden kuvveti cinsinden

$$E_1(\lambda) = \begin{cases} E_1^0 + \lambda V_0/4, \\ E_1^0 + \lambda(1+\kappa)V_0/4, \\ E_1^0 + \lambda(1-\kappa)V_0/4, \end{cases} \qquad [6.39]$$

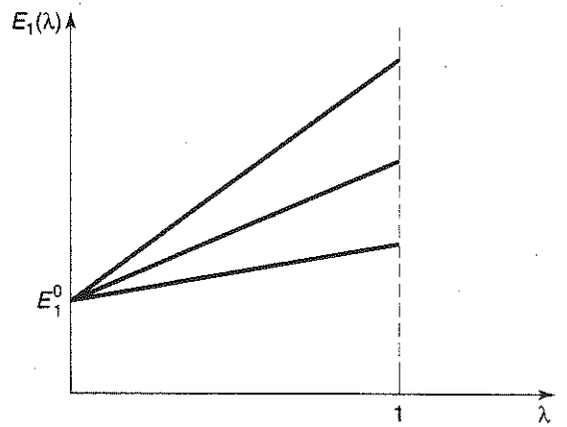
olarak bulunur. Burada E_1^0, 6.35 nolu denklem ile verilen ortak tedirgenmemiş enerjidir. Tedirgeme katlılığı 6.6 nolu şekilde gösterildiği gibi E_1^0'ı üç ayrı enerji düzeyine bölerek kaldırır. Bu probleme katlı *olmayan* tedirgeme teorisini uygulamış olsaydık, birinci dereceden düzeltme terimi (6.9 nolu denklem) bu üç durum için aynı $V_0/4$ değerine eşit olurdu. Bu değer sadece ortadaki durum için doğrudur.

Öte yandan, "uygun" tedirgenmemiş durumlar

$$\psi^0 = \alpha\psi_a + \beta\psi_b + \gamma\psi_c \qquad [6.40]$$

şeklindeki lineer kombinasyonlardır. Burada α, β ve γ katsayıları **W** matrisinin özvektörlerini oluştururlar:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = w \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}.$$



ŞEKİL 6.6: 6.2 nolu örnek ve 6.39 nolu denklem ile verilen katlılığın kaldırılması.

$\omega = 1$ için $\alpha = 1$, $\beta = \gamma = 0$ buluruz; $\omega = 1 \pm \kappa$ için $\alpha = 0$, $\beta = \pm\gamma = 1/\sqrt{2}$ buluruz (Yol boyunca normlama koşulunu uyguladım). Böylece "uygun" durumlar[7]

$$\psi^0 = \begin{cases} \psi_a, \\ (\psi_b + \psi_c)/\sqrt{2}, \\ (\psi_b - \psi_c)/\sqrt{2}, \end{cases} \qquad [6.41]$$

olarak bulunur.

Problem 6.8 6.30 nolu denklem ile verilen sonsuz kübik kuyuyu, (a/4, a/2, 3a/4) noktasına bir delta fonksiyon "çıkıntı" sı koyarak tedirgediğimizi varsayalım:

$$H' = a^3 V_0 \delta(x - a/4)\delta(y - a/2)\delta(z - 3a/4).$$

Taban durumu ve üç kez katlı olan ilk uyarılmış durumun enerjileri için birinci dereceden düzeltme terimlerini hesaplayın.

---

[7] Bu sonucu işin başında x ve y'yi yerdeğiştiren P_{xy} operatörünün H' ile sıra değiştirebilir olduğunu fark ederek tahmin edebilirdik. Özdeğerler değiştokuş işlemi altında çift kalan fonksiyonlar için +1 ve tek kalan fonksiyonlar için −1 dir. Bu örnekte ψ_a zaten *çift* fonksiyondur. $(\psi_b + \psi_c)$ çift fonksiyon iken $(\psi_b - \psi_c)$ tek fonksiyondur. Çift fonksiyonların herhangi bir lineer kombinasyonu yine çift fonksiyon verdiğinden bu sonuç kesin değildir. Fakat z'yi $a - z$ yapan Q operatörünü de kullanıp ve ψ_a özdeğeri −1 olan bir özfonksiyon iken diğer iki özfonksiyonun +1 özdeğerine sahip olduğuna dikkat edersek, belirsizlik ortadan kalkmış olur. Burada P_{xy} ve Q operatörleri 6.2.1. Kesimde verilen teoremde A'nın üstlendiği rolü birlikte üstlenirler.

*Problem 6.9 *Üç* lineer bağımsız durum içeren bir kuantum sistemini ele alın. V_0 bir sabit ve ϵ çok küçük bir sayı ($\epsilon << 1$) olmak üzere, Hamiltonyenin aşağıdaki matris ile verildiğini varsayın:

$$\mathbf{H} = V_0 \begin{pmatrix} (1-\epsilon) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 2 \end{pmatrix}$$

(a) *Tedirgenmemiş* Hamiltonyenin özvektörlerini ve özdeğerlerini bulun ($\epsilon = 0$).

(b) **H**'nın *kesin* özdeğerlerini belirleyin. Her bir çözümü ϵ'nun ikinci dereceden kuvvetlerine kadar seriye açın.

(c) Birinci ve ikinci dereceden katlı *olmayan* tedirgeme teorisini kullanarak, H^0'ın katlı olmayan özvektöründen ortaya çıkan duruma karşılık gelen yaklaşık özdeğeri bulun. (b) şıkkında elde edilen kesin sonuç ile karşılaştırın.

(d) *Katlı durumların* tedirgeme teorisini kullanarak katlı olan ilk iki özdeğer için birinci dereceden düzeltme terimini hesaplayın. Kesin sonuçlarla karşılaştırın.

Problem 6.10 Konuda, n kez katlı olan enerjiler için birinci dereceden düzeltme terimlerinin W matrisinin özdeğerleri olduğunu ileri sürmüştüm ve bunu $n = 2$ durumunun "doğal" bir genellemesi olduğunu göstermeye çalıştım. Bunun kanıtını

$$\psi^0 = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \psi_j^0$$

ile başlayıp, 6.2.1. Kesimdeki adımları takip ederek yapın ve 6.22 nolu denkleme olan benzerliğin **W** matrisinin özdeğer denklemi olarak yorumlanabileceğini göstererek bitirin.

6.3 HİDROJEN ATOMUNUN İNCE YAPISI

4.2. Kesimdeki hidrojen atomu için yaptığımız çalışmada Hamiltonyeni elektronun kinetik enerjisi ve Coulomb potansiyel enerjisinin toplamı olarak almıştık:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}. \qquad [6.42]$$

Ancak, hikayenin tümü bu değildir. Çekirdeğin hareketini daha doğru *nasıl* tanımlayabileceğimizi daha önce öğrendik: Sadece m yerine indirgenmiş kütle konur

TABLO 6.1: Hidrojen atomunun Bohr enerjilerine olan düzeltme terimlerinin sıra düzeni.

Bohr enerjileri:	$\alpha^2 mc^2$	mertebesinde
İnce yapı:	$\alpha^4 mc^2$	mertebesinde
Lamb kayması:	$\alpha^5 mc^2$	mertebesinde
Çok ince yarılma:	$(m/m_p)\alpha^4 mc^2$	mertebesinde

(5.1 nolu problem). Daha da önemli olan **ince yapıdır** ve bu iki ayrı mekanizma olan **relativistik düzeltme** ve **spin yörünge çiftlenimi** sonucu oluşur. 4.70 nolu denklem ile verilen Bohr enerjileri ile kıyaslandığında, ince yapı küçücük bir tedirgemedir: $-\alpha^2$ çarpanı kadar daha küçük ve burada α

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \cong \frac{1}{137.036} \qquad [6.43]$$

bilinen **ince yapı sabitidir.** Elektrik alanın kuantumlanmasıyla ilgili ve bir α çarpanı kadar daha küçük olan bir başka düzeltme **Lamb kaymasıdır**. Elektron ve protonun dipol momentleri arasındaki manyetik etkileşmeden dolayı oluşan **çok ince yapı** da bir mertebe daha küçüktür. Bu sıra düzen 6.1 nolu tabloda özetlenmiştir. Bu kesimde zamandan bağımsız tedirgeme teorisinin bir uygulaması olarak hidrojenin ince yapısını inceleyeceğiz.

Problem 6.11

(a) Bohr enerjisini ince yapı sabiti ve elektronunu durgun kütle enerjisi (mc^2) cinsinden ifade edin.

(b) İnce yapı sabitini temel ilkelerden yani ϵ_0, e, $\hbar$ ve c'nin deneysel değerlerine başvurmadan hesaplayın. *Açıklama:* ince yapı sabiti şüphesiz ki tüm fiziğin içinde boyutsuz en temel sayıdır. Elektromanyetizmanın (elektron yükü), relativitenin (ışık hızı) ve kuantum mekaniğinin (Planck sabiti) temel sabitlerini birbirleriyle ilişkilendirir. Olur ya (b) şıkkını çözerseniz, tarihteki en belirgin Nobel ödülü sizi bekliyor olur. Fakat şu an bu problem üzerine çok zaman harcamanızı önermem; bugüne kadar birçok zeki insan bunu denedi, ama başarılı olamadı.

6.3.1 Relativistik Düzeltme

Hamiltonyen'deki ilk terim kinetik enerjiyi temsil etmeli:

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \qquad [6.44]$$

ve $\mathbf{p} \to (\hbar/i)\nabla$ kanonik ataması

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \qquad [6.45]$$

operatörünü verir. Öte yandan 6.44 nolu denklem kinetik enerjinin klasik ifadesidir. *Relativistik* formül ise,

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1-(v/c)^2}} - mc^2 \qquad [6.46]$$

dir. İlk terim, şimdilik ilgilenmediğimiz ve potansiyel enerji hesaba katılmadığı durumdaki *toplam* relativistik enerjiyi verir. İkinci terim *durgun* kütle enerjisidir. Aralarındaki *fark* ise harekete atfedilebilecek bir enerjidir.

T'yi hız yerine relativistik momentum

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \qquad [6.47]$$

cinsinden ifade etmeliyiz. Ayrıca

$$p^2c^2 + m^2c^4 = \frac{m^2v^2c^2 + m^2c^4[1-(v/c)^2]}{1-(v/c)^2} = \frac{m^2c^4}{1-(v/c)^2} = (T+mc^2)^2$$

olduğundan, kinetik enerji

$$T = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 \qquad [6.48]$$

şeklini alır. Kinetik enerji için bulduğumuz bu relativistik denklem relativistik olmayan $p << mc$ limitinde, 6.44 nolu denklem ile verilen klasik sonuca indirgenir: (p/mc)'nin kuvvetleri şeklinde seriye açtığımızda,

$$T = mc^2\left[\sqrt{1+\left(\frac{p}{mc}\right)^2} - 1\right] = mc^2\left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{p}{mc}\right)^2 - \frac{1}{8}\left(\frac{p}{mc}\right)^4 \cdots - 1\right]$$

$$= \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \cdots \qquad [6.49]$$

elde ederiz.[8] O zaman Hamiltonyene en düşük dereceden düzeltme terimi:

$$H'_r = -\frac{p^4}{8m^3c^2}. \qquad [6.50]$$

[8] Hidrojen atomundaki elektronun kinetik enerjisi 10 eV mertebesindedir. Bu, elektronun durgun kütle enerjisi ile (511.000 eV) karşılaştırıldığında çok küçük olduğundan, hidrojen atomu temelde relativistik değildir ve sadece en düşük düzeltme terimini göz önüne almamız yeterli olur. 6.49 nolu denklem ile verilen p, klasik mv momentumu *değil* 6.47 nolu denklem ile verilen *relativistik* momentumdur. Kuantum operatörü $-i\hbar\nabla$ ile ilişkilendirdiğimiz momentum, relativistik momentumdur.

Birinci dereceden tedirgeme teorisinde, E_n için düzeltme terimi H''nün tedirgenmemiş durumdaki (6.9 nolu denklem) beklenen değeri ile verilir:

$$E_r^1 = \langle H'_r\rangle = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle\psi|p^4\psi\rangle = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle p^2\psi|p^2\psi\rangle. \qquad [6.51]$$

Tedirgenmemiş durumlar için Schrödinger denklemi

$$p^2\psi = 2m(E-V)\psi \qquad [6.52]$$

olduğundan,[9]

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\langle(E-V)^2\rangle = -\frac{1}{2mc^2}[E^2 - 2E\langle V\rangle + \langle V^2\rangle] \qquad [6.53]$$

şeklini alır. Şu ana kadar yazdığımız her şey genel ifadeleri içeriyor. Fakat biz potansiyeli $V(r) = -(1/4\pi\epsilon_0)e^2/r$ olan hidrojen atomu ile ilgileniyoruz. O halde

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 2E_n\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle\right] \qquad [6.54]$$

olur ve bu ifadedeki E_n, ilgilenilen durumun Bohr enerjisidir.

İşi tamamlamak için $1/r$ ve $1/r^2$'nin tedirgenmemiş ψ_{nlm} (4.2.1 nolu denklem) durumlardaki beklenen değerlerine ihtiyacımız var. İlki kolay (6.12 nolu probleme bakın):

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle = \frac{1}{n^2a}. \qquad [6.55]$$

İfadede a, 4.72 nolu denklem ile verilen Bohr yarıçapıdır. İkinci beklenen değerin hesabı o kadar kolay değildir (6.33 nolu probleme bakın). Fakat sonuç[10] aşağıdaki gibidir:

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle = \frac{1}{(l+1/2)n^3a^2}. \qquad [6.56]$$

6.55 ve 6.56 nolu ifadeleri 6.54 nolu denkleme yerleştirildiğinde

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 2E_n\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{n^2a} + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\frac{1}{(l+1/2)n^3a^2}\right]$$

[9] Bu manevrada p^2 ve $(E-V)$'nin hermitsel olmaları gerçeğinin kullanıldığı bir cambazlık var. Gerçekte, $l = 0$ olduğu durumlar için, p^4 hermitsel *değildir* (6.15 nolu probleme bakın) ve bu nedenle tedirgeme teorisinin $l = 0$ durumu için 6.50 nolu denkleme uygulanabilirliği tartışma yaratır. Neyse ki, *kesin* çözüm mevcuttur ve Schrödinger denklemi yerine (relativistik) Dirac denklemi kullanılarak elde edilebilir. Bu çözüm burada hiç de iddialı olmayan yöntemle elde ettiğimiz sonuçla uyumludur (6.19 nolu probleme bakın).

[10] r'nin *herhangi bir* kuvvetinin beklenen değerini içeren genel bir ifade için, Hans A. Bethe ve Edwin E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Plenum, New York (1977), 17. sayfaya bakınız.

sonucu elde edilir. 4.72 nolu denklemi kullanarak a'yı yok edip, 4.70 nolu denklemin yardımıyla her terimi E_n cinsinden yazarsak,

$$E_r^1 = -\frac{(E_n)^2}{2mc^2}\left[\frac{4n}{l+1/2} - 3\right] \qquad [6.57]$$

buluruz. Buradan relativistik düzeltme teriminin E_n'den $E_n/mc^2 = 2 \times 10^{-5}$ çarpanı kadar daha küçük olduğu açıkça görülmektedir.

Hidrojen atomu oldukça fazla katlılık göstermesine rağmen, bu hesaplamalarda (6.51 nolu denklem) katlı olmayan tedirgeme teorisini kullandığımı fark etmiş olmasınız. Fakat tedirgeme küresel simetriye sahip olduğundan, L^2 ve L_z ile sıra değiştirir. Bundan da öte, birlikte ele alınan bu operatörlerin özfonksiyonları belli bir E_n enerjili n^2 durumları için ayrık özdeğerlere sahiptir. Bu da ψ_{nlm} dalga fonksiyonlarının bu problem için "uygun" durumlar olması demektir ya da daha bilinen şekli ile n, l ve m **uygun kuantum sayılarıdır**. Tüm bunlar katlı olmayan tedirgeme teorsini kullanmayı makul kılar (6.2.1. Kesimdeki "Alınacak ders"e bakınız).

***Problem 6.12** Virial teoremini kullanarak (4.40 nolu problem) 6.55 nolu denklemin doğruluğunu gösteriniz.

Problem 6.13 4.43 nolu problemde verilen ψ_{321} durumu için r^s'nin beklenen değerini hesaplayın. Yanıtınızı $s = 0$ (sıradan), $s = -1$ (6.55 nolu denklem), $s = -2$ (6.56 nolu denklem) ve $s = -3$ (6.64 nolu denklem) özel durumları için kontrol edin. $s = -7$ durumu için ne düşündüğünüzü yazınız.

****Problem 6.14** Bir boyutlu harmonik salınıcının enerji düzeylerine en düşük dereceden relativistik düzeltmeyi hesaplayınız. *Yardım:* 2.5 nolu örnekteki tekniği kullanın.

*****Problem 6.15** Hidrojen atomunun $l = 0$ durumları için p^2'nin hermitsel fakat p^4'ün hermitsel olmadığını gösterin. *Yardım:* Bu durumlar için ψ, θ ve ϕ'den bağımsızdır. Bu nedenle

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)$$

olur (4.13 nolu denklem). Kısmi integrasyon yöntemini kullanarak,

$$\langle f|p^2 g\rangle = -4\pi\hbar^2\left(r^2 f\frac{dg}{dr} - r^2 g\frac{df}{dr}\right)\Big|_0^\infty + \langle p^2 f|g\rangle$$

olduğunu gösterin. Orijine yakın noktalarda aşağıdaki forma benzeyen ψ_{n00} için sınır

$$\psi_{n00} \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(na)^{3/2}}\exp(-r/na)$$

terimlerinin yok olup olmadığını kontrol edin. Şimdi, aynı şeyi p^4 için yapın ve sınır terimlerinin yok *olmadığını* gösterin. Gerçekte:

$$\langle\psi_{n00}|p^4\psi_{m00}\rangle = \frac{8\hbar^4}{a^4}\frac{(n-m)}{(nm)^{5/2}} + \langle p^4\psi_{n00}|\psi_{m00}\rangle.$$

6.3.2 Spin-Yörünge Çiftlenimi

Çekirdeğin etrafındaki bir yörüngede dönen elektronu düşünün; *elektrona* göre proton *onun* etrafında dönüyor (6.7 nolu şekil). Bu dönen pozitif yük, elektronun bulunduğu referans sisteminde bir **B** manyetik alanı oluşturur. Bu da dönen elektronun $\boldsymbol{\mu}$ spin manyetik momentini alan doğrultusunda yönlendirmeye çalışan bir tork'un oluşmasına neden olur. 4.157 nolu denklem ile verilen Hamiltonyen

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} \qquad [6.58]$$

şeklindedir. Başlayabilmek için önce protonun **B** manyetik alanını ve elektronun $\boldsymbol{\mu}$ dipol momentini belirlememiz gerek.

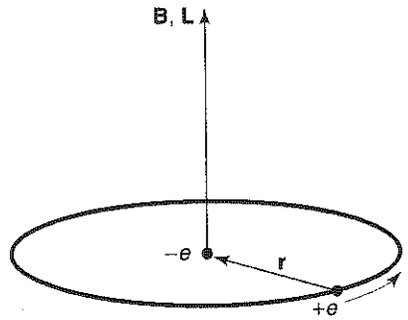
Protonun manyetik alanı: Elektronun bulunduğu referans sisteminden baktığımızda protonu sürekli bir akım çevrimi olarak görürüz (6.7 nolu şekil). Manyetik alan Biot-Savart yasasından

$$B = \frac{\mu_0 I}{2r}$$

olarak hesaplanabilir. Burada $I = e/T$ ve e protunun yükü, T yörüngenin periyodudur. Öte yandan, *çekirdeğin* durgun referans sisteminde *elektronun* yörüngesel açısal momentumu $L = rmv = 2\pi mr^2/T$'dir. Ayrıca, **B** ve **L** aynı yöndedirler (yukarı doğru, 6.7 nolu şekil). Böylece;

$$\mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e}{mc^2r^3}\mathbf{L} \qquad [6.59]$$

(ϵ_0'ı kullanabilmek ve μ_0'ı yok edebilmek için $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ kullandım).



ŞEKİL 6.7: Elektronun bakış açısından Hidrojen atomu.

Elektronun manyetik dipol momenti: Dönen bir yükün manyetik dipol momenti kendi spin açısal momentumu ile orantılıdır ve orantı katsayısı 4.4.2. Kesimde karşılaştığımız jiromanyetik orandır. Şimdi klasik elektrodinamiği kullanarak, bu ifadeyi çıkaralım. Önce 6.8 nolu şekilde gösterildiği gibi, r yarıçaplı bir halka etrafında T periyodu ile dönen bir q yükünü ele alalım. Halkanın manyetik dipol momenti q/T akımı ile πr^2 alanının çarpımı olarak tanımlanır:

$$\mu = \frac{q\pi r^2}{T}.$$

Halkanın kütlesi m ise, açısal momentumu, mr^2 eylemsizlik momenti ile $2\pi/T$ açısal hızının çarpımıdır:

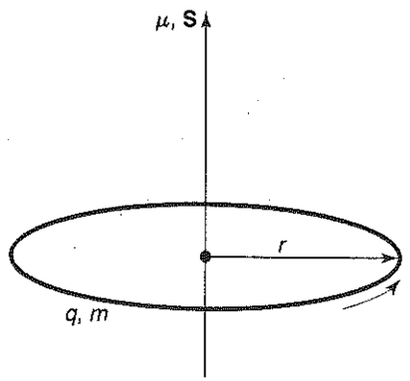
$$S = \frac{2\pi m r^2}{T}.$$

Bu düzeneğin jiromanyetik oranının $\mu/S = q/2m$ olduğu açıktır. Burada bu oranın r ve T den bağımsız olduğuna dikkat edin. Eğer küre gibi daha karmaşık bir cismin olsaydı (istediğim tek şey ekseni etrafında dönen bir cisim olmasıdır), $\boldsymbol{\mu}$ ve **S**'yi bu kez küreyi küçük halkalara bölüp, her bir halkadan gelen katkıları toplayarak hesaplardım. Yük ve kütle dağılımı yükün kütleye oranının sabit verecek şekilde oluğu sürece, jiromanyetik oran her bir halka için ve bundan dolayı cismin tümü içinde aynı olur. Üstelik, $\boldsymbol{\mu}$ ve **S**'nin yönleri de aynı (yük negatif ise zıt) olur. Öyleyse,

$$\boldsymbol{\mu} = \left(\frac{q}{2m}\right)\mathbf{S}$$

dir. Bu tam bir *klasik* hesaplamadır. Fakat elektronun manyetik momentinin bu klasik değerin iki katı olduğu görüldü.

$$\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e}{m}\mathbf{S}. \qquad [6.60]$$



ŞEKİL 6.8: Eksen etrafında dönen bir yük halkası.

Bu "fazla"dan 2 çarpanını Dirac kendisinin geliştirdiği elektronun relativistik teorisinde açıkladı.[11]

Her şeyi bir araya getirdiğimizde,

$$H = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

buluruz. Fakat bu hesaplamalarda ciddi bir hile var. Çözümlemeyi elektronun durgun sisteminde yaptım. Öte yandan bu bir *eylemsizlik sistemi değildir*. Elektron çekirdek etrafında dönerken *ivmelenir*. Bundan ancak **Thomas presesyonu**[12] olarak bilinen uygun bir kinematik düzeltme yapılırsa kurtulunabilir. Bu bağlamda 1/2 çarpanı gerekir:[13]

$$H'_{sy} = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}. \qquad [6.61]$$

Buna **spin-yörünge etkileşmesi** denir; iki düzeltme teriminden (tamamıyla şans eseri birbirlerini yok eden elektronun yeni jiromanyetik oranı ve Thomas presesyon çarpanı) ayrı olarak, bu spin-yörünge etkileşmesi katıksız bir klasik modelin beklenilen bir sonucudur. Bunun fiziksel nedeni, elektronun anlık durgun sisteminde protonun oluşturduğu manyetik alanın dönen elektronun manyetik dipol momentine uyguladığı torkdur.

Sıra şimdi kuantum mekaniğinde. Spin-yörünge çiftleniminin varlığında, Hamiltonyen **L** ve **S** ile sıra değiştirmez. Yani spin ve yörüngesel açısal momentumları ayrı ayrı korunmaz (6.16 nolu probleme bakın). Öte yandan H'_{sy}, L^2, S^2 ve *toplam* açısal momentum

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S} \qquad [6.62]$$

ile sıra değiştirir ve bu nedenle bu büyüklükler korunan büyüklüklerdir (3.71 nolu

[11] Daha önce elektronu dönen bir küre olarak betimlemenin tehlikeli olabileceğini hatırlattık (4.25 nolu probleme bakın) ve katıksız klasik modelin jiromanyetik oranı yanlış elde etmesi hiç de şaşırtıcı değil. Öngörülen klasik değerden *sapma* **g-çarpanı** olarak bilinir ve $\boldsymbol{\mu} = g(q/2m)\mathbf{S}$'dir. Dirac teorisinde elektronun g-çarpanı tam olarak 2'dir. Öte yandan **kuantum elektrodinamiği** buna çok küçük de olsa bir düzeltme ortaya koyar: g_e aslında $2+(\alpha/\pi)+\ldots=2.002\ldots$ Elektronun **anormal manyetik momentinin** mükemmel bir uyum gösteren hesabı ve deneyi yirminci yüzyıl fiziğinin en büyük başarılarındandır.

[12] Bunu düşünmenin bir yolu elektronun sürekli bir şekilde bir eylemsizlik sisteminden diğerine adım adım geçmesidir; Thomas presesyonu tüm bu Lorentz dönüşümlerinin toplanmış etkisidir. Çekirdeğin durgun olduğu *lab* sisteminde çalışarak problemin tümünden kurtulabilirdik. Bu durumda protonun yüzünden oluşan alan tamamıyla *elektriksel* olurdu ve bu alanın neden elektron üzerine bir tork uyguladığını merak edebilirdiniz. Aslında olan şey şudur: hareket eden *manyetik* dipol *elektrik* dipol kazanır ve lab sisteminde spin-yörünge çiftlenimi çekirdeğin elektrik alanının elektronun *elektrik* dipol momenti ile etkileşmesinden kaynaklanır. Bu analiz çok daha detaylı elektrodinamik gerektirdiğinden, en iyisi fiziksel mekanizmanın daha anlaşılır olduğu elektron bakış açısını kabul etmek gibi görünüyor.

[13] Daha kesin bir biçimde, Thomas presesyonu g çarpanından 1 çıkarır. R. R. Haar and L. J. Curtis, *Am. J. Physics.*, **55**, 1044 (1987)'e bakınız.

denklem). Bir başka deyişle, L_z ve S_z'nin özdurumlarının aksine, L^2, S^2, J^2 ve J_z'nin özdurumları tedirgeme teorisinde kullanılabilecek "uygun" durum fonksiyonlarıdır.

$$J^2 = (\mathbf{L}+\mathbf{S})\cdot(\mathbf{L}+\mathbf{S}) = L^2 + S^2 + 2\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$$

olduğundan

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2). \qquad [6.63]$$

şeklini alır ve bundan dolayı $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$'nin özdeğerleri

$$\frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

olur. Bu durumda $s = 1/2$'dir. Aynı zamanda $1/r^3$'ün beklenen değeri (6.35 nolu problemin (c) şıkkına bakın)

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3a^3}. \qquad [6.64]$$

olup, aşağıdaki sonuca götürür

$$E^1_{sy} = \langle H'_{sy}\rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\frac{1}{m^2c^2}\frac{(\hbar^2/2)[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)n^3a^3}.$$

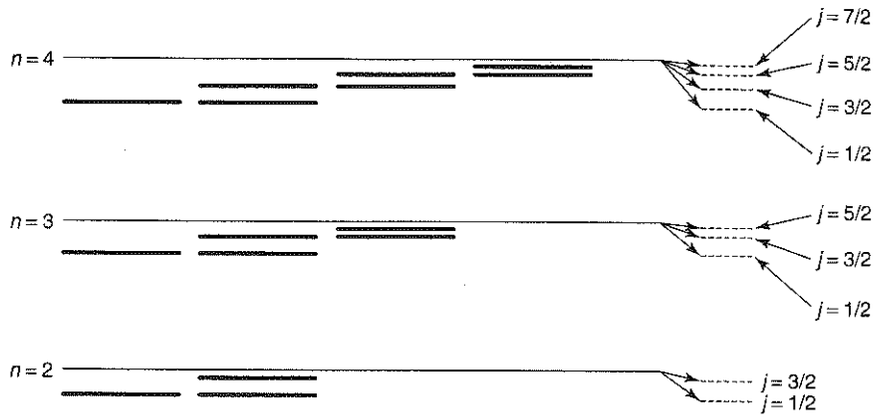
İfadedeki tüm terimleri E_n cinsinden yazarsak:[14]

$$E^1_{sy} = \frac{(E_n)^2}{mc^2}\left\{\frac{n[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)}\right\}. \qquad [6.65]$$

Tamamıyla farklı fiziksel mekanizmalar oldukları göz önünde bulundurulduğunda, relativistik düzeltme terimi ve spin-yörünge çiftleniminin aynı E_n^2/mc^2 mertebesinde sonuç vermesi dikkate değerdir. Tüm terimleri topladığımızda tam ince yapı formülünü bulmuş oluruz (6.17 nolu probleme bakın):

$$E^1_{iy} = \frac{(E_n)^2}{2mc^2}\left(3 - \frac{4n}{j+1/2}\right). \qquad [6.66]$$

[14] Yine $l = 0$ durumu sıfıra bölme içerdiğinden sorun çıkarıcıdır. Öte yandan, bu durumda $j = s$ olduğundan pay da sıfırdır. Bu nedenle 6.65 nolu denklem belirsizdir. Fiziksel olarak $l = 0$ durumunda spin-yörünge çiftlenimi olmaması gerekir. Bu sorunu çözmenin bir yolu **Darwin terimini** (G. K. Woodgate, *Elementrary Atomic Structure*, 2.nd ed., Oxford (1983). 63. sayfaya bakın) kullanmaktır. Hem relativistik düzeltme terimi (6.57 nolu denklem) hem de spin-yörünge çiftleniminin (6.65 nolu denklem) $l = 0$ durumunda sorunlu olmalarına rağmen, *toplamları* (6.66 nolu denklem) l'nin *tüm* değerleri için beklenmedik şekilde doğru sonuç veriyor (6.19 nolu probleme bakın).



ŞEKİL 6.9: Hidrojen atomunun ince yapıyı da içeren ölçeklenmemiş enerji düzeyleri.

Bunu Bohr formülü ile birleştirdiğimizde, hidrojen atomu için ince yapıyı da içeren enerji düzeylerini veren genel ifadeyi elde etmiş oluruz:

$$\boxed{E_{nj} = -\frac{13.6\,\text{eV}}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)\right].} \qquad [6.67]$$

İnce yapı l'de var olan katlılığı bozar, yani verilen bir n değeri için izin verilmiş l değerleri aynı enerjiye karşılık gelmez. Öte yandan, 6.9 nolu şekilde görüldüğü gibi, j'de olan katlılık kalır. Yörüngesel ve spin açısal momentumlarının z bileşenlerinin özdeğerleri (m_l ve m_s) artık "uygun" kuantum sayıları değildir. Kararlı durumlar bunların farklı değerlerine sahip durumların lineer kombinasyonudur. "Uygun" kuantum sayıları da n, l, s, j ve m_j'dir.[15]

[15] Verilen l ve s değerleri için $|jm_j\rangle$'yi $|lm_l\rangle|sm_s\rangle$'nin lineer kombinasyonu olarak yazabilmek için uygun Clebsch-Gordon katsayılarını (4.185 nolu denklem) kullanmak durumunda kalırdık.

Problem 6.16 Aşağıda verilen komütatörleri hesaplayın: **(a)** $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{L}]$, **(b)** $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{S}]$, **(c)** $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{J}]$, **(d)** $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, L^2]$, **(e)** $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, S^2]$, **(f)** $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, J^2]$. *Yardım*: **L** ve **S** ve 4.99 ve 4.134 nolu denklemler ile verilen açısal mometumun temel sıra değiştirme bağıntılarını sağlar ve birbirleriyle de sıra değiştirirler.

***Problem 6.17** İnce yapı bağıntısını (6.66 nolu denklem) relativistik düzeltme (6.57 nolu denklem) ve spin-yörünge çiftleniminden (6.65 nolu denklem) türetiniz. *Yardım:* $j = l \pm 1/2$ 'dir. Artı ve eksi işaretleri için yapılan ayrı ayrı hesaplamalarda aynı sonucu bulursunuz.

****Problem 6.18** Görünür bölgede hidrojen atomunun spektrumunun en önemli özelliği $n = 3$ düzeyinden $n = 2$ düzeyine geçişin neden olduğu kırmızı Balmer çizgisidir. İlk olarak, Bohr teorisi içinde bu çizginin frekansını ve dalga boyunu belirleyin. İnce yapı bu çizginin birbirlerine çok yakın ayrıştırılmış birçok çizgiye yarılmasına neden olur. *Soru: Kaç tane çizgiye* yarılır ve *ayrıştırma miktarı nedir*? *Yardım:* Önce $n = 2$ düzeyinin kaç alt düzeye yarılacağını ve bunlara karşılık gelen E_{iy}^1 'yı eV cinsinden belirleyin. Sonra aynı süreci $n = 3$ düzeyi için tekrarlayın. $n = 3$ düzeyinden $n = 2$ düzeyine tüm mümkün geçişleri gösteren enerji diyagramını çizin. Foton olarak bırakılan enerji $(E_3-E_2)+\Delta E$'dir. Birinci kısım tüm geçişler için ortaktır ve ince yapıdan kaynaklanan ΔE ise bir geçişten diğer bir geçişe değişir. Her bir geçiş için ΔE'yi eV cinsinden bulun. En sonunda, foton frekansına dönüştürün ve komşu çizgiler arasındaki ayrışmayı Hz cinsinden belirleyin. Yalnız, burada her bir çizgi ile artık gözlenemeyen *tedirgenmemiş* çizgi arasındaki frekans aralığını *değil*, her bir çizgi ile *bir sonraki* çizgi arasındaki frekans aralığını belirlemeniz gerek. En sonunda yanıtınız "Kırmızı Balmer çizgisi (???) çizgiye yarılır". Artan frekansa göre sıralandığında, (1) j = (???)'den j = (???)'e, (2) j = (???)'den j = (???)'e ... olan geçişler sonucunda oluşurlar. (1). ve (2). çizgi arasındaki frekans aralığı (???) Hz, (2). ve (3). çizgi arasındaki frekans aralığı (???) Hz,... şeklinde olmalıdır.

Problem 6.19 Hidrojen atomu için tedirgeme teorisine başvurmadan Dirac denkleminden elde edilen *kesin* ince yapı formülü [16]

$$E_{nj} = mc^2\left\{\left[1+\left(\frac{\alpha}{n-(j+1/2)+\sqrt{(j+1/2)^2-\alpha^2}}\right)^2\right]^{-1/2}-1\right\}$$

şeklinde verilir. $\alpha \ll 1$ olduğunu kullanarak, yukarıdaki ifadeyi α 'nın 4. kuvvetine kadar seriye açın ve tekrar 6.67 nolu denklemi elde ettiğinizi gösterin.

[16] Bethe and Salpeter (10. Dipnot) 238. sayfa

6.4 ZEEMAN ETKİSİ

Herhangi bir atom düzgün bir $\mathbf{B}_{dış}$ dış manyetik alanı içerisine yerleştirildiğinde, enerji düzeyleri kayma gösterir. Bu olaya **Zeeman etkisi** denir. Tek bir elektron için tedirgeme

$$H'_Z = -(\boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s)\cdot\mathbf{B}_{dış} \qquad [6.68]$$

şeklindedir. Burada

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{e}{m}\mathbf{S}, \qquad [6.69]$$

elektron spini ile ilgili manyetik dipol momenti ve

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{e}{2m}\mathbf{L}, \qquad [6.70]$$

yörüngesel hareketle ilgili dipol momentidir.[17] Böylece tedirgeme

$$H'_Z = \frac{e}{2m}(\mathbf{L}+2\mathbf{S})\cdot\mathbf{B}_{dış} \qquad [6.71]$$

şeklini alır.

Zeeman yarılmasının doğası, büyük ölçüde dış manyetik alanın spin-yörünge çiftlenimine yol açan *iç* alana (6.59 nolu denklem) nazaran ne kadar kuvvetli olduğuna bağlıdır. Eğer $B_{dış} << B_{iç}$ ise, o zaman ince yapı baskındır ve H'_Z küçük bir tedirgeme olarak ele alınabilir. Öte yandan, $B_{dış} >> B_{iç}$ ise o zaman Zeeman etkisi baskındır ve ince yapı gerçek anlamda tedirgemeye dönüşür. Bu iki alanın kıyaslanabilir olduğu ara bölgede, katlı durumların tedirgeme teorisinin tüm araçlarına ihtiyacımız vardır ve Hamiltonyenin ilgili kısmının "elle" köşegenleştirilmesi gerekir. Aşağıdaki kesimlerde bu rejimleri hidrojen atomu için kısaca irdeleyeceğiz.

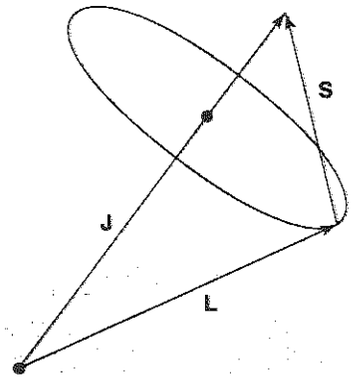
Problem 6.20 6.59 nolu denklemi kullanarak, hidrojen atomundaki iç alanı hesaplayın ve "kuvvetli" ve "zayıf" Zeeman alanının nitel tanımlanmasını yapın.

6.4.1 Zayıf Alanlı Zeeman Etkisi

$B_{dış} << B_{iç}$ olduğu durumda, ince yapı baskındır (6.67 nolu denklem); spin-yörünge çiftlenimi varlığında, **L** ve **S** ayrı ayrı korunmadığından m_l ve m_s "uygun" kuantum sayıları değildir.[18] Ancak n, l, j ve m_j "uygun" kuantum sayılarıdır. Birinci dereceden tedirgeme

[17] Yörüngesel hareket için jiromanyetik oran klasik değer olan $q/2m$'dir. Spin için "fazla" dan 2 çarpanı geldiğini unutmayın.

[18] Bu problemde ince yapıya yol açan tedirgemeye ek olarak bir de Zeeman yarılmasına yol açan başka bir tedirgememiz var. "Uygun" kuantum sayıları baskın olan tedirgemeye karşılık gelenlerdir. Bu durumda ince yapıdır. Zeeman yarılması olan ikincil tedirgeme 6.2.1. Kesimde sunulan teoremdeki A operatörünün üstlendiği rol gibi J_z'deki katlılığı ortadan kaldırır. Teknik olarak J_z, H'_Z ile sıra değiştirmez, fakat 6.73 nolu denklem ile verilen zaman ortalaması bağlamında sıra değiştirebilir.



ŞEKİL 6.10: Spin-yörünge çiftlenimi varlığında L ve S ayrı ayrı korunan büyüklükler değildir; sabit toplam açısal momentum J etrafında presesyon yaparlar.

teorisinde, enerjideki Zeeman düzeltmesi

$$E_Z^1 = \langle nljm_j|H'_Z|nljm_j\rangle = \frac{e}{2m}\mathbf{B}_{\text{dış}}\cdot\langle \mathbf{L}+2\mathbf{S}\rangle \qquad [6.72]$$

ile verilir. Şimdi $\mathbf{L} + 2\mathbf{S} = \mathbf{J} + \mathbf{S}$ olur. Ne yazık ki, S'nin beklenen değeri hemen çıkarılabilecek bir büyüklük değildir. Ancak bunu şöyle hesaplayabiliriz. $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ toplam açısal momentum sabittir (6.10 nolu şekil); L ve S bu sabit vektör etrafında presesyon yaparlar. Özellikle, S'nin zaman *ortalaması* J üzerindeki izdüşümüne eşittir:

$$\mathbf{S}_{\text{ort}} = \frac{(\mathbf{S}\cdot\mathbf{J})}{J^2}\mathbf{J}. \qquad [6.73]$$

Fakat $\mathbf{L} = \mathbf{J} - \mathbf{S}$ olduğundan, $L^2 = J^2 + S^2 - 2\mathbf{J}\cdot\mathbf{S}$ olur ve böylece

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{J} = \frac{1}{2}(J^2 + S^2 - L^2) = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)] \qquad [6.74]$$

şeklini alır. Bu da

$$\langle \mathbf{L}+2\mathbf{S}\rangle = \left\langle\left(1 + \frac{\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}}{J^2}\right)\mathbf{J}\right\rangle = \left[1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)}\right]\langle \mathbf{J}\rangle \qquad [6.75]$$

ifadesini verir. Köşeli parantez içerisindeki terim g_J, **Landé g-çarpanı** olarak tanımlanır.

z-eksenini $\mathbf{B}_{\text{dış}}$ doğrultusunda seçebiliriz. O zaman

$$E_Z^1 = \mu_B g_J B_{\text{dış}} m_j \qquad [6.76]$$

olur. Burada

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} = 5.788 \times 10^{-5}\ \text{eV/T} \qquad [6.77]$$

olup, μ_B **Bohr magnetonu** olarak adlandırılır. *Toplam* enerji 6.67 nolu denklem ile verilen ince yapı ifadesi ile 6.76 nolu denklem ile verilen Zeeman katkısının toplamıdır.

($n = 1$, $l = 0$, $j = 1/2$ ve $g_J = 2$) taban durumu iki düzeye yarılır:

$$-13.6\ \text{eV}(1 + \alpha^2/4) \pm \mu_B B_{\text{dış}}. \qquad [6.78]$$

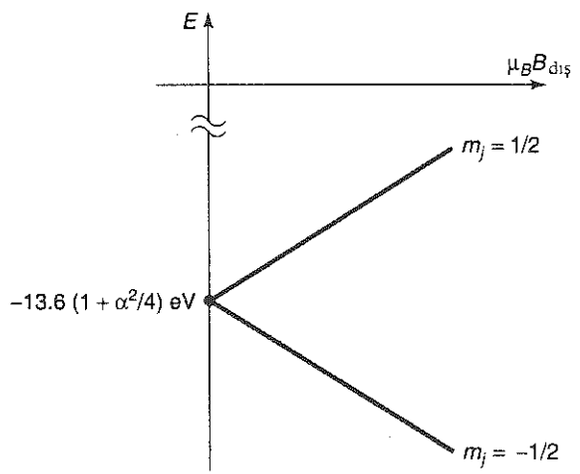
Burada artı işareti $m_j = 1/2$ için ve eksi işareti $m_j = -1/2$ içindir. Bu enerjiler $B_{dış}$ alanın fonksiyonu olarak 6.11 nolu şekilde gösterilmiştir.

***Problem 6.21** $n = 2$ ($|2ljm_j\rangle$, sekiz tane) durumlarını ele alın. Her bir durumun enerjisini zayıf alanlı Zeeman yarılması altında hesaplayın ve 6.11 nolu şekilde gösterildiği gibi $B_{dış}$ artıkça enerjilerin nasıl değiştiğini gösteren bir diyagram çizin. Her bir çizgiyi isimlendirin ve eğimlerini gösterin.

6.4.2 Kuvvetli Alanlı Zeeman Etkisi

$B_{\text{dış}} >> B_{\text{iç}}$ olduğu durumda, Zeeman etkisi baskındır.[19] $B_{\text{dış}}$ manyetik alanı z yönünde olduğunda, "uygun" kuantum sayıları j ve m_j değil, n, l, m_l ve m_s'dir. Çünkü dış torkun varlığında L_z ve S_z *korunurken* toplam açısal momentum *korunmaz*. Zeeman Hamiltonyeni

$$H'_Z = \frac{e}{2m}B_{\text{dış}}(L_z + 2S_z)$$



ŞEKİL 6.11 Hidrojen atomunun taban durumunun zayıf alanlı Zeeman yarılması; $m_j = 1/2$ değerine karşılık gelen üst çizginin eğimi 1 iken, $m_j = -1/2$ değerine karşılık gelen alt çizginin eğimi −1'dir.

---

[19] Bu rejimde Zeeman etkisi **Paschen-Back etkisi** olarak da bilinir.

şeklindedir ve "tedirgenmemiş" enerjiler

$$E_{nm_lm_s} = -\frac{13.6\text{ eV}}{n^2} + \mu_B B_{\text{dış}}(m_l + 2m_s) \qquad [6.79]$$

olarak bulunur. İnce yapıyı tamamıyla görmemezlikten geldiğimizde *yanıt* budur. Fakat bundan daha iyisini yapabiliriz.

Birinci dereceden tedirgeme teorisinde, yukarıdaki enerji düzeylerine ince yapı düzeltmesi

$$E^1_{iy} = \left\langle n l\, m_l\, m_s \middle| (H'_r + H'_{sy}) \middle| n l\, m_l\, m_s \right\rangle \qquad [6.80]$$

şeklinde verilir. Relativistik katkı ise, daha önce 6.57 nolu denklem ile verdiğimiz ifadedir. Spin yörünge terimi (6.61 nolu denklem) için

$$\langle \mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\rangle = \langle S_x\rangle\langle L_x\rangle + \langle S_y\rangle\langle L_y\rangle + \langle S_z\rangle\langle L_y\rangle = \hbar^2 m_l m_s \qquad [6.81]$$

denklemine ihtiyacımız var. Burada S_z ve L_z'nin özdurumları için, $\langle S_x\rangle = \langle S_y\rangle = \langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$ olduğuna dikkat edin. Tüm bunları birleştirdiğimizde (6.22 nolu problem),

$$E^1_{\text{iy}} = \frac{13.6\text{ eV}}{n^3}\alpha^2\left\{\frac{3}{4n} - \left[\frac{l(l+1) - m_l m_s}{l(l+1/2)(l+1)}\right]\right\} \qquad [6.82]$$

sonucunu buluruz. Köşeli parantez içerisindeki terim $l = 0$ için belirsizdir; bu durum için doğru değer 1 olur (6.24 nolu probleme bakın). *Toplam* enerji 6.79 nolu denklem ile verilen Zeeman katkısı ile 6.82 nolu denklem ile verilen ince yapı katkısının toplamıdır.

Problem 6.22 6.80 nolu denklemden başlayarak, 6.57, 6.61, 6.64, 6.81 nolu denklemleri kullanıp 6.82 nolu denklemi elde ediniz.

****Problem 6.23** $n = 2$ ($\left|2lm_lm_s\right\rangle$, sekiz tane) durumlarını göz önüne alın. Her bir durumun enerjisini kuvvetli alanlı Zeeman yarılması altında hesaplayın. Her bir yanıtınızı şu üç terimin toplamı olarak ifade edin: Bohr enerjisi, α^2 ile orantılı olan ince yapı, $\mu_B B_{\text{dış}}$ ile orantılı olan Zeeman katkısı. İnce yapıyı tamamıyla yok saydığımızda, kaç tane ayrık düzey vardır? Bunlara karşılık gelen katlılığı hesaplayın.

Problem 6.24 $l = 0$ olduğunda, $j = s$, $m_j = m_s$ olur ve zayıf *ve* kuvvetli alanlar için aynı "uygun" $\left(\left|nm_s\right\rangle\right)$ durumları vardır. 6.72 nolu denklemi kullanarak E^1_z'i, ince yapı enerjilerini (6.67 nolu denklem) ve de alan şiddeti *ne olursa olsun*, $l = 0$ durumu için Zeeman etkisini veren genel bir ifade bulun. 6.82 nolu denklem ile verilen kuvvetli alan ifadesinde köşeli parantez içindeki belirsiz terim 1 olarak alındığında bu genel ifadeye indirgenebileceğini gösteriniz.

6.4.3 Ara Alan Değerleri İçin Zeeman Etkisi

Ara rejimde ne H'_z ne de H'_{iy} baskındır ve Bohr Hamiltonyenine (6.42 nolu denklem) uygulanan tedirgemeler olarak her ikisini de aynı ölçüde ele almalıyız:

$$H' = H'_Z + H'_{\text{iy}}. \qquad [6.83]$$

Burada sadece $n = 2$ durumuna bakacağım ve l, j ve m_j'nin tanımladığı durumları katlı durumların tedirgeme teorisi için baz olarak kullanacağım[20]. 4.51 nolu problem ya da 4.8 nolu tablodan Clebsch-Gordan katsayılarını alarak, $\left|jm_j\right\rangle$ durumlarını $\left|lm_l\right\rangle\left|sm_s\right\rangle$ durumlarının lineer kombinasyonu olarak ifade edeceğim:

$$l=0\begin{cases}\psi_1 \equiv |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = |0\,0\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle,\\ \psi_2 \equiv |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{-1}{2}\rangle = |0\,0\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{-1}{2}\rangle,\end{cases}$$

$$l=1\begin{cases}\psi_3 \equiv |\tfrac{3}{2}\,\tfrac{3}{2}\rangle = |1\,1\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle,\\ \psi_4 \equiv |\tfrac{3}{2}\,\tfrac{-3}{2}\rangle = |1\,-1\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{-1}{2}\rangle,\\ \psi_5 \equiv |\tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{2/3}|1\,0\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{1/3}|1\,1\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{-1}{2}\rangle,\\ \psi_6 \equiv |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = -\sqrt{1/3}|1\,0\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{2/3}|1\,1\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{-1}{2}\rangle,\\ \psi_7 \equiv |\tfrac{3}{2}\,\tfrac{-1}{2}\rangle = \sqrt{1/3}|1\,-1\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{2/3}|1\,0\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{-1}{2}\rangle,\\ \psi_8 \equiv |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{-1}{2}\rangle = -\sqrt{2/3}|1\,-1\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{1/3}|1\,0\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{-1}{2}\rangle.\end{cases}$$

Bu bazda H'_{iy}'nin sıfır olmayan matris elemanları köşegen üzerindedir ve 6.66 nolu denklem ile verilir. H'_z'nin köşegen olmayan 4 elemanı vardır ve $-\mathbf{W}$ matrisinin tam hali aşağıdaki gibidir (6.25 nolu probleme bakın):

$$\begin{pmatrix}
5\gamma-\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 5\gamma+\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & \gamma-2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & \gamma+2\beta & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & \gamma-\frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma-\frac{1}{3}\beta & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma+\frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma+\frac{1}{3}\beta
\end{pmatrix}$$

---

[20] İsterseniz l, m_j, m_s durumlarını kullanabilirsiniz ve bu H'_z matris elemanlarının oluşturulmasını daha kolaylaştırır. Ancak H'_{iy}'nin elemanlarının oluşturulmasını zorlaştırır. Bu da W matrisini çok daha karmaşık şekil almasına yol açar ama seçilen bazdan bağımsız olan özdeğerler her iki durumda da aynı olur.

burada

$$\gamma \equiv (\alpha/8)^2 13.6 \text{ eV} \quad \text{ve} \quad \beta \equiv \mu_B B_{\text{dış}}$$

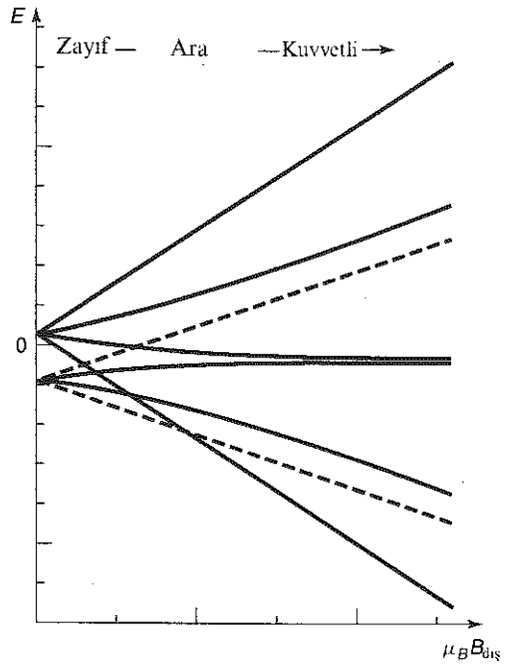
olarak verilir. İlk dört özdeğer köşegen boyunca gösterilen değerlerdir. Geriye sadece 2×2 blokların özdeğerlerini bulmak kaldı. Bunlardan ilkinin karakteristik denklemi;

$$\lambda^2 - \lambda(6\gamma - \beta) + \left(5\gamma^2 - \frac{11}{3}\gamma\beta\right) = 0$$

ve bu ikinci dereceden denklem şu özdeğerleri verir:

$$\lambda_{\pm} = -3\gamma + (\beta/2) \pm \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + (\beta^2/4)}. \qquad [6.84]$$

İkinci bloğun özdeğerleri aynıdır fakat β'nın işareti terstir. Sekiz tane enerji değeri 6.2 nolu tabloda listelenmiştir ve 6.12 nolu şekilde $B_{\text{dış}}$'ın fonksiyonu olarak da çizilmiştir. $\beta = 0$ olduğu sıfır alan limitinde, bu değerler ince yapı değerlerine indirgenir; $\beta << \gamma$ olduğu zayıf alanlarda 6.21 nolu problemde elde edilen sonuçları tekrar elde edilirken, $\beta >> \gamma$ olduğu kuvvetli alanlar için 6.23 nolu problemin sonuçları tekrar elde edilir. 6.23 nolu problemde hesaplandığı gibi çok yüksek alanlarda beş ayrık enerji düzeyinin birbirlerine yakınsandığına dikkat edin.



ŞEKİL 6.12: Hidrojen atomunun $n = 2$ durumlarının zayıf, ara ve kuvvetli alan rejimlerinde Zeeman yarılmaları.

TABLO 6.2: Hidrojen atomunun $n = 2$ durumları için ince yapı ve Zeeman yarılmasını içeren enerji düzeyleri.

$$\begin{aligned}
\epsilon_1 &= E_2 - 5\gamma + \beta \\
\epsilon_2 &= E_2 - 5\gamma - \beta \\
\epsilon_3 &= E_2 - \gamma + 2\beta \\
\epsilon_4 &= E_2 - \gamma - 2\beta \\
\epsilon_5 &= E_2 - 3\gamma + \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4} \\
\epsilon_6 &= E_2 - 3\gamma + \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4} \\
\epsilon_7 &= E_2 - 3\gamma - \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 - (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4} \\
\epsilon_8 &= E_2 - 3\gamma - \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 - (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}
\end{aligned}$$

Problem 6.25 H'_z ve H'_{xy} matris elemanlarını bulun ve $n = 2$ için, konuda verilen W matrisini oluşturun.

***Problem 6.26** Hidrojen atomunun $n = 3$ durumları için Zeeman etkisini zayıf, kuvvetli ve ara alan rejimlerinde çözümleyin. 6.2 nolu tabloya benzer şekilde enerji tablosu oluşturun. 6.2 nolu şekilde gösterildiği gibi enerjileri dış alanın fonksiyonu olarak çizin ve ara alan sonuçlarının uygun bir şekilde iki limit duruma indirgenip indirgenmediğini kontrol edin.

6.5 ÇOK İNCE YARILMA

6.60 nolu denklemdeki paydada bulunan kütle yüzünden (6.60 nolu denklem) elektronun dipol momentine kıyasla çok küçük olmasına rağmen, protonun kendisinin de bir manyetik momenti vardır:

$$\boldsymbol{\mu}_p = \frac{g_p e}{2m_p}\mathbf{S}_p, \quad \boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e}{m_e}\mathbf{S}_e. \qquad [6.85]$$

Proton üç kuarktan oluşmuş bileşik bir yapıya sahiptir ve jiromanyetik oranı elektronunki kadar basit değildir. Proton için g-çarpanı (g_p) 5.59 iken elektron için 2.00'dir. Klasik elektrodinamiğe göre, bir $\boldsymbol{\mu}$ dipol momenti aşağıdaki manyetik alanı oluşturur[21]:

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3}[3(\boldsymbol{\mu} \cdot \hat{r})\hat{r} - \boldsymbol{\mu}] + \frac{2\mu_0}{3}\boldsymbol{\mu}\delta^3(\mathbf{r}). \qquad [6.86]$$

[21] Eğer 6.86 nolu denklem ile verilen delta fonksiyonuna aşina değilseniz, bu ifadeyi dipolu yarıçapın sıfıra ve yükün sonsuza gittiği limit durumunda dönen yüklü küresel bir kabuk olarak düşünüp elde edebilirsiniz. D. J. Griffiths, *Am. J. Phys.*, **50**, 698 (1982)'e bakınız.

Böylece, protonun manyetik dipol momentinin yol açtığı manyetik alanda bulunan elektron için Hamiltonyen (6.58 nolu denklem) aşağıdaki şekilde verilir:

$$H'_{\text{iy}} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \frac{[3(\mathbf{S}_p \cdot \hat{r})(\mathbf{S}_e \cdot \hat{r}) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e]}{r^3} + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3 m_p m_e} \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \delta^3(\mathbf{r}). \quad [6.87]$$

Tedirgeme teorisine göre, enerjiye birinci dereceden olan düzeltme (6.9 nolu denklem) tedirgeme Hamiltonyeninin beklenen değeridir:

$$E^1_{\text{iy}} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \left\langle \frac{3(\mathbf{S}_p \cdot \hat{r})(\mathbf{S}_e \cdot \hat{r}) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3 m_p m_e} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle |\psi(0)|^2. \quad [6.88]$$

Taban durumunda ya da $l = 0$ olan herhangi bir durumda dalga fonksiyonu küresel simetriktir ve ilk beklenen değer sıfır olur (6.27 nolu probleme bakın). Bu arada 4.80 nolu denklemden $|\psi_{100}(0)|^2 = 1/(\pi a^3)$ olduğunu buluruz. Böylece taban durumunda

$$E^1_{\text{iy}} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{3\pi m_p m_e a^3} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle \quad [6.89]$$

olur. İki spinin skalar çarpımını içerdiğinden bu ifadeye **spin-spin çiftlenimi** denir. Buna karşılık spin-yörünge çiftlenimi $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ çarpımını içerir.

Spin-spin çiftleniminde her bir spin açısal momentumu artık korunumlu bir büyüklük değildir. "Uygun" durumlar toplam spinin

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}_e + \mathbf{S}_p \quad [6.90]$$

özvektörleridir. Daha önce yaptığımız gibi, bunu karesini alırız:

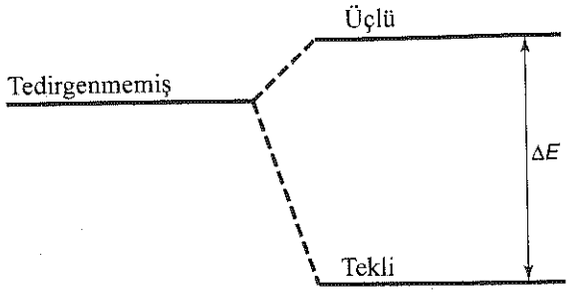
$$\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e = \frac{1}{2}(S^2 - S_e^2 - S_p^2). \quad [6.91]$$

Elektron ve protonun her ikisinin de spini 1/2'dir ve $S_e^2 = S_p^2 = (3/4)\hbar^2$ olur. Spinlerin "paralel" olduğu üçlü durumda toplam spin 1'dir ve $S^2 = 2\hbar^2$ olur. Tekli durumda toplam spin 0 ve $S^2 = 0$ olur. Böylece,

$$E^1_{\text{iy}} = \frac{4 g_p \hbar^4}{3 m_p m_e^2 c^2 a^4} \begin{cases} +1/4, & \text{(üçlü);} \\ -3/4, & \text{(tekli).} \end{cases} \quad [6.92]$$

Spin-spin çiftlenimi üçlü durumu kaldırıp, tekli duruma zorlayarak taban durumundaki katlılığı bozar (6.13 nolu şekle bakın). Enerji aralığı:

$$\Delta E = \frac{4 g_p \hbar^4}{3 m_p m_e^2 c^2 a^4} = 5.88 \times 10^{-6} \text{ eV}. \quad [6.93]$$



ŞEKİL 6.13: Hidrojen atomunun taban durumunun çok ince yarılması.

Üçlü durumdan tekli duruma geçişte salınan fotonun frekansı

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = 1420 \text{ MHz} \quad [6.94]$$

olur. Buna karşılık gelen ve mikrodalga bölgesine düşen dalga boyu $c/\nu = 21$ cm'dir. Bu çok bilinen **21 santimetrelik çizgi,** evrendeki ışıma şekillerinden en yaygını olup, her yerde kolaylıkla rastlanır.

Problem 6.27 a ve b iki sabit vektör olsun;

$$\int (\mathbf{a} \cdot \hat{r})(\mathbf{b} \cdot \hat{r}) \sin\theta \, d\theta \, d\phi = \frac{4\pi}{3}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \quad [6.95]$$

olduğunu gösterin. İntegral bilinen sınırlar üzerinden alınır: $0 < \theta < \pi$, $0 < \phi < 2\pi$. Bu sonucu kullanarak $l = 0$ durumları için,

$$\left\langle \frac{3(\mathbf{S}_p \cdot \hat{r})(\mathbf{S}_e \cdot \hat{r}) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle = 0$$

olduğunu gösterin. *Yardım:* $\hat{r} = \sin\theta\cos\phi\,\hat{i} + \sin\theta\sin\phi\,\hat{j} + \cos\theta\hat{k}$.

Problem 6.28 Hidrojen atomu için türetilen formüllerde uygun değişiklikleri yaparak aşağıdaki sistemlerin taban durumları için çok ince yarılmaları belirleyiniz. (a) **müyonik hidrojen;** bir müyon, elektron ile aynı g-çarpanına ve yüküne sahip fakat elektrondan 207 kez daha ağırdır. (b) **pozitronyum**; bir pozitron, elektron ile aynı g-çarpanı ve kütleye sahip fakat zıt yüklüdür ve protonun yerini alır. (c) **müyonyum**; antimüyon, müyon ile aynı kütle ve g-çarpanına sahip fakat zıt yüklüdür ve protonun yerini alır. *Yardım:* Bu hayali "atom"ların "Bohr yarıçap"larını hesaplarken, indirgenmiş kütleyi (5.1 nolu problem) kullanmayı unutmayın. Aklıma gelmişken, pozitronyum için elde edeceğiniz 4.82×10^{-4} eV yanıtı 8.41×10^{-4} eV'luk deneysel değerden oldukça uzaktır. Bu büyük uyuşmazlık ($e^+ + e^- \to \gamma + \gamma$) çift yok olması yüzündendir. Bu çift yok olması fazladan $(3/4)\Delta E$ katkıda bulunur ve doğal olarak bilinen hidrojen, müyonik hidrojen ve müyoniyum sistemlerinde ortaya çıkmaz.

---

6. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

Problem 6.29 Hidrojen atomunun taban durum enerjisine çekirdeğin sonlu boyutlu olmasından dolayı kaynaklanan düzeltmeyi hesaplayın. Protonu düzgün yüklenmiş b yarıçaplı küresel bir kabuk olarak ele alın ki kabuğun içinde elektronun potansiyel enerjisi *sabit* olsun: $-e^2/(4\pi\epsilon_0 b)$; bu gerçekçi olmasa bile basit bir modeldir ve bize en azından doğru mertebede sonuç verecektir. Sonucunuzu küçük (b/a) parametresinin kuvvetleri şeklinde seriye açın. Burada a Bohr yarıçapıdır ve sadece önemli olan terimleri tutun. Yanıtınızın son şekli

$$\frac{\Delta E}{E} = A(b/a)^n$$

olmalıdır. Buradaki işiniz, A sabitini ve n kuvvetini belirlemektir. En sonunda, b'yi protonun yaklaşık yarı çapı olan 10^{-15} m alın ve yukarıdaki sonucunuzu sayısal olarak verin. Bunun ince yapı ve çok ince yapı ile kıyaslamasını yapın.

Problem 6.30 4.38 nolu problemde verilen 3 boyutlu ve eşyönlü harmonik salınıcıyı göz önüne alın. λ bir sabit olmak üzere, birinci dereceden

$$H' = \lambda x^2 yz$$

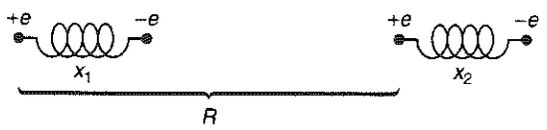
tedirgemesinin

(a) taban durumuna

(b) 3 kez katlı olan ilk uyarılmış duruma olan etkilerini tartışın. *Yardım:* 2.12 ve 3.33 nolu problemlerinde elde edilen yanıtları kullanın.

***Problem 3.31 Van der Waals etkileşimi:** Aralarındaki uzaklık R olan iki atomu ele alın. Elektriksel olarak yüksüz olmaları aralarında hiç bir kuvvet olmadığını varsaymanıza yol açabilir. Ancak kutuplanabilir iseler, aralarında zayıf da olsa bir etkileşim vardır. Bu sistemi modelleyebilmek için, her bir atomu 6.14 nolu şekilde gösterildiği gibi, yay sabiti k olan bir yayla çekirdeğe bağlanmış bir elektron (m kütleli, $-e$ yüklü) ve bir çekirdek ($+e$ yüklü) olarak düşünün. Çekirdekleri ağır ve hareketsiz olarak ele alın. Tedirgenmemiş sistem için Hamiltonyen

$$H^0 = \frac{1}{2m}p_1^2 + \frac{1}{2}kx_1^2 + \frac{1}{2m}p_2^2 + \frac{1}{2}kx_2^2 \qquad [6.96]$$



ŞEKİL 6.14: Kutuplanabilir iki yakın atom (6.31 nolu problem).

şeklindedir. Atomlar arası Coulomb etkileşmesi aşağıdaki gibidir;

$$H' = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{R-x_1} - \frac{e^2}{R+x_2} + \frac{e^2}{R-x_1+x_2}\right). \qquad [6.97]$$

(a) 6.97 nolu denklemi açıklayın. $|x_1|$ ve $|x_2|$'nin her ikisinin de R'den çok küçük olduğunu varsayarak,

$$H' \cong -\frac{e^2 x_1 x_2}{2\pi\epsilon_0 R^3} \qquad [6.98]$$

olduğunu gösterin.

(b) 6.96 ve 6.98 nolu denklemlerin toplamı olan toplam Hamiltonyenin

$$x_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 \pm x_2) \quad \text{ve} \quad p_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 \pm p_2) \qquad [6.99]$$

değişken dönüşümleri altında iki ayrı harmonik salınıcı Hamiltonyenine ayrıştırılabileceğini gösterin:

$$H = \left[\frac{1}{2m}p_+^2 + \frac{1}{2}\left(k - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 R^3}\right)x_+^2\right] + \left[\frac{1}{2m}p_-^2 + \frac{1}{2}\left(k + \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 R^3}\right)x_-^2\right] \qquad [6.100]$$

(c) Bu Hamiltonyen için taban durum enejisi doğal olarak

$$\omega_\pm = \sqrt{\frac{k \mp (e^2/2\pi\epsilon_0 R^3)}{m}} \quad \text{olmak üzere,} \quad E = \frac{1}{2}\hbar(\omega_+ + \omega_-) \qquad [6.101]$$

şeklindedir. Coulomb etkileşmesi olmasaydı, $E_0 = \hbar\omega$ ve $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ olurdu. $k >> (e^2/2\pi\epsilon_0 R^3)$ olduğunu varsayarak,

$$\Delta V \equiv E - E_0 \cong -\frac{\hbar}{8m^2\omega_0^3}\left(\frac{e^2}{2\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{1}{R^6} \qquad [6.102]$$

olduğunu gösterin.

Sonuç: Atomlar arasında, aralarındaki uzaklığın altıncı kuvvetiyle ters orantılı olan çekici bir potansiyeli vardır. Buna iki yüksüz atom arasındaki **van der Waals etkileşmesi** denir.

(d) Şimdi aynı hesaplamaları ikinci dereceden tedirgeme teorisini kullanarak yapın. *Yardım:* Tedirgenmemiş durumlar $\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2)$ şeklindedir ve burada $\psi_n(x)$, m kütleli ve k yay sabitli tek parçacık salınıcı dalga fonksiyonudur. ΔV, 6.98 nolu denklem ile verilen ve taban enerjisine olan ikinci dereceden düzeltme terimidir. Burada *birinci* dereceden düzeltme teriminin sıfır olduğuna dikkat edin.

Problem 6.32 Belli bir kuantum sistemi için olan H Hamiltonyeninin bir λ parametresinin fonksiyonu olduğunu varsayın. $E_n(\lambda)$ ve $\psi_n(\lambda)$ ise sırasıyla $H(\lambda)$'nın

özdeğerleri ve öz fonksiyonları olsun. **Feynman-Hellmann teoremi**[22]

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi_n \right\rangle \qquad [6.103]$$

olduğunu söyler. Burada E_n'nin katlı olmadığı, katlı ise de ψ_n fonksiyonlarının her birinin katlı özfonksiyonların "uygun" lineer kombinasyonları olduğu varsayılmıştır.

(a) Feynman-Hellmann teoremini kanıtlayın. *Yardım:* 6.9 nolu denklemi kullanın.

(b) Bu teoremi bir boyutlu harmonik salınıcı için aşağıda sıralanan durumlara uygulayın. **(i)** $\lambda = \omega$ için (bu, V potansiyelinin beklenen değeri için bir ifade verir) **(ii)** $\lambda = \hbar$ (bu $\langle T \rangle$'yi verir) ve **(iii)** $\lambda = m$ (bu da $\langle T \rangle$ ve $\langle V \rangle$ arasında bir bağıntı verir). Yanıtlarınızı 2.12 nolu problem ve virial teoreminin öngördükleri (3.31 nolu problem) ile kıyaslayın.

** **Problem 6.33** Feynman-Hellman teoremi (6.2 nolu problem) Hidrojen atomu için $1/r$ ve $1/r^2$'nin beklenen değerlerinin belirlenmesinde kullanılabilir.[23] Dalga fonksiyonunun radyal kısmı için etkin Hamiltonyen (4.53 nolu denklem)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$$

şeklindedir ve l cinsinden olan özdeğerler ise (4.70 nolu denklem)[24] şöyledir:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2(j_{\text{mak}} + l + 1)^2}.$$

(a) Feynman-Hellmann teoreminde $\lambda = e$ alıp, $\langle 1/r \rangle$'yi hesaplayın. Sonucunuzun 6.55 nolu denklem ile uyumlu olup olmadığını kontrol edin.

(b) $\lambda = l$ alıp, $\langle 1/r^2 \rangle$'yi hesaplayın. Yanıtınızın 6.56 nolu denklem ile uyumlu olup olmadığını kontrol edin.

***Problem 6.34**:

$$\frac{s+1}{n^2}\langle r^s \rangle - (2s+1)a\langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4}[(2l+1)^2 - s^2]a^2\langle r^{s-2} \rangle = 0. \qquad [6.104]$$

şeklinde verilen **Kramer bağıntısını** kanıtlayın[25]. Bu bağıntı hidrojen atomunun ψ_{nlm}

[22] Feynman 6.103 nolu denklemi MIT'de bitirme tezi üzeride çalışırken elde etti (R. P. Feynman *Phys. Rev.* **56**, 340, 1939); Hellman'ın çalışması ise bundan dört yıl önce ilgisiz bir Rus dergisinde yayınlanmıştı.

[23] C. Sánchez del Rio, *Am. J. Phys.* **50**, 556 (1982); H. S. Valk, *Am. J. Phys.* **54**, 921 (1986).

[24] (b) şıkkında l büyüklüğünü sürekli bir değişken olarak ele aldık; bir tamsayı olması gereken j_{mak} 4.67 nolu denkleme göre sabit olduğundan, n l'nin bir fonksiyonu olur. Karışıklığa yol açmamak ve l'ye olan bağımlılığı daha açık olarak ortaya koyabilmek için n'yi yok ettim.

[25] Bu aynı zamanda ikinci **Pasternack bağıntısı** olarak bilinir. H. Beker, *Am. J. Phys.* **65**, 1118 (1997)'e bakınız. Feynman-Hellmann teoremine dayanan bir kanıt için, S. Balasubramanian, *Am. J. Phys.* **68**, 959 (2000)'e bakınız.

durumunda bulunan bir elektron için r'nin beklenen değerlerinin üç farklı kuvvete (s, $s-1$ ve $s-2$) olan bağlılığını ortaya koyar. *Yardım:* 4.53 nolu denklem ile verilen radyal denklemi

$$u'' = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{ar} + \frac{1}{n^2a^2}\right]u$$

şeklinde tekrar yazın ve bunu kullanarak $\int(ur^s u'')dr$ integralini $\langle r^s \rangle$, $\langle r^{s-1} \rangle$ ve $\langle r^{s-2} \rangle$ cinsinden yazın. Sonra kısmi integral yöntemini kullanarak ikinci türevden kurtulun. $\int(ur^s u')dr = -(s/2)\langle r^{s-1} \rangle$ ve $\int(u'r^s u')dr = -[2/(s+1)]\int(u''r^{s+1}u')dr$ olduğunu gösterin ve buradan devamını yapın.

Problem 6.35

(a) Kramer bağıntısında s = 0, s = 1, s = 2, ve s = 3 alarak, $\langle r^{-1} \rangle$, $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$ ve $\langle r^3 \rangle$ beklenen değerlerini verecek formülleri elde edin. *Herhangi* bir pozitif kuvvet bulmak için sonsuza kadar devam edebileceğinize dikkat edin.

(b) $s = -1$ koyduğunuzda $\langle r^{-2} \rangle$ ile $\langle r^{-3} \rangle$ arasında bir bağıntı bulacağınızı gösterin.

(c) Öte yandan $\langle r^{-2} \rangle$'yi bir *başka* yol ile elde edebilirseniz, Kramer bağıntısını kullanarak geri kalan negatif kuvvetleri elde edebilirsiniz. 6.33 nolu problemde türetilen 6.56 nolu denklemi kullanarak, $\langle r^{-3} \rangle$ beklenen değerini belirleyin ve bulduğunuz sonucun 6.64 nolu denklem ile olan uyumluluğunu kontrol edin.

***Problem 6.36** Bir atom düzgün bir $\mathbf{E}_{\text{dış}}$ dış elektrik alan içine konulduğunda, enerji düzeyleri değişir. Zeeman etkisinin elektrikteki benzeri olan bu olay **Stark etkisi** olarak bilinir. Bu problemde hidrojen atomunun $n = 1$ ve $n = 2$ durumları için Stark etkisine bakacağız. Elektrik alan z doğrultusunda olsun. Bu durumda elektronun potansiyel enerjisi

$$H'_s = eE_{\text{dış}}z = eE_{\text{dış}}r\cos\theta$$

olur. Bunu Bohr Hamiltonyenine (6.42 nolu denklem) bir tedirgeme olarak kabul edin. Bu problem için spin önemsizdir ve görmemezlikten gelinebilir. Ayrıca ince yapıyı da ihmal edin.

(a) Bu tedirgememin taban durumu enerjisine birinci dereceden bir düzeltme yapmadığını gösterin.

(b) İlk uyarılmış durum 4 kez katlıdır. ψ_{200}, ψ_{211}, ψ_{210}, ψ_{21-1} katlı durumları için tedirgeme teorisini kullanarak, enerjiye olan birinci dereceden düzeltme terimlerini hesaplayın. E_2 enerji düzeyi kaç enerji düzeyine yarılır?

(c) (b) şıkkı için "uygun" dalga fonksiyonları hangileridir? Elektrik dipol momentinin ($\mathbf{p}_e = -e\mathbf{r}$) bu her bir "uygun" durum için beklenen değerini hesaplayın.

Sonuçların uygulanan alandan bağımsız olduğuna dikkat edin. İlk uyarılmış durumda bulunan hidrojen atomunun *sürekli* bir elektrik dipolü taşıyabileceği açıkça görülmektedir.

Yardım: Bu problemde birçok integralle karşılaşacaksınız. Fakat bunların neredeyse hepsi sıfırdır. O nedenle herhangi bir hesaplama yapmadan önce her biri üzerinde dikkatlice çalışın. Eğer ϕ integrali sıfır ise, o zaman r ve θ integralleri üzerinde çalışmanın bir anlamı yoktur! *Kısmi yanıt:* $W_{13} = W_{31} = -3eaE_{dış}$ ve diğer tüm elemanlar sıfırdır.

***Problem 6.37** Hidrojen atomunun $n = 3$ durumları için 6.36 nolu problem ile verilen Stark etkisini ele alın. Spin etkisi yok sayıldığında, başlangıçta 9 kez katlı ψ_{3lm} durumları vardır. z doğrultusunda bir elektrik alan uygulayalım.

(a) Tedirgenmiş Hamiltonyeni temsil eden 9×9 boyutlu matrisi oluşturun. *Kısmi yanıt:*
$\langle 300|z|310\rangle = -3\sqrt{6}a$, $\langle 310|z|320\rangle = -3\sqrt{3}a$, $\langle 31\pm1|z|32\pm1\rangle = -(9/2)a$

(b) Özdeğerleri ve bu özdeğerlerin katlılıklarını belirleyin.

Problem 6.38 Döteryum'un $n = 1$ taban durumunda çok ince bir geçiş ile salınan fotonun dalga boyunu *cm* cinsinden hesaplayın. Döteryum, çekirdeğinde fazladan bir nötron'u olan "ağır" hidrojendir. Proton ve nötron bir araya gelerek spini 1 ve manyetik momenti

$$\mu_d = \frac{g_d e}{2m_d}\mathbf{S}_d$$

olan **döteron**'u oluşturur. Döteronun g_d çarpanı 1.71'dir.

***Problem 6.39** Bir kristalde komşu iyonların elektrik alanı atomik enerji düzeylerini tedirger. Kaba bir model olarak, 6.15 nolu şekilde gösterildiği gibi hidrojenin üç noktasal yük çifti ile sarıldığını varsayalım (Bu problemde spin önemsizdir ve ihmal edin).

(a) $r << d_1$, $r << d_2$ ve $r << d_3$ olduğunu varsayarak,

$$H' = V_0 + 3(\beta_1 x^2 + \beta_2 y^2 + \beta_3 z^2) - (\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)r^2$$

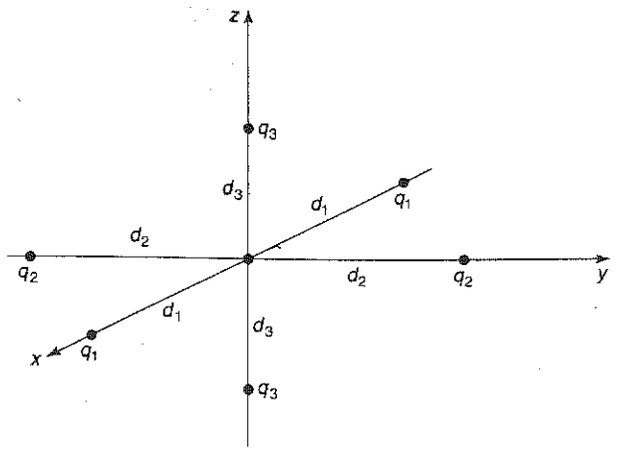
olduğunu gösterin. Burada

$$\beta_i \equiv -\frac{e}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_i}{d_i^3} \quad \text{ve} \quad V_0 = 2(\beta_1 d_1^2 + \beta_2 d_2^2 + \beta_3 d_3^2)$$

dir.

(b) Taban durum enerjisine olan düzeltme terimini en düşük dereceden hesap edin.

(c) $n = 2$ ilk uyarılmış enerji düzeyine birinci dereceden düzeltme terimini hesap edin. Bu 4 kez katlı sistem (i) $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3$ olduğu **kübik simetri** varlığında, (ii) $\beta_1 = \beta_2 \neq \beta_3$ olduğu **tetragonal simetri** varlığında, (iii) $\beta_1 \neq \beta_2 \neq \beta_3$ olduğu **ortorombik simetri** varlığında kaç ayrı enerji düzeyine yarılır?



ŞEKİL 6.15: Kristal örgü için kabaca bir model; etrafı 6 noktasal yük ile çevrilmiş hidrojen atomu; 6.39 nolu problem.

***Problem 6.40** Bazı durumlarda ψ_n^l'i tedirgenmemiş dalga fonksiyonları (6.11 nolu denklem) cinsinden seriye açmadan 6.10 nolu denklemi doğrudan çözebilmek mümkündür. Buna iki güzel örnek:

(a) Taban durumundaki Hidrojen atomuna Stark etkisi

(i) Düzgün bir $E_{dış}$ elektrik alan varlığında hidrojen atomunun taban durumuna olan birinci dereceden düzeltmeyi hesap edin (Stark etkisi – 6.36 nolu problem). *Yardım:*

$$(A + Br + Cr^2)e^{-r/a}\cos\theta$$

şeklinde bir çözüm deneyin. Burada yapmanız gereken şey, 6.10 nolu denklemi çözerek A, B ve C sabitlerini bulmaktır.

(ii) 6.14 nolu denklemi kullanarak taban durum enerjisine ikinci dereceden düzeltme terimini hesaplayın. (6.36 nolu problemin (a) şıkkında bulduğumuz gibi birinci dereceden düzeltme terimi sıfırdır).

Yanıt: $-m(3a^2eE_{dış}/2\hbar)^2$

(b) Eğer proton *p elektrik* dipol momentine sahip olsaydı, hidrojen atomundaki elektronun potansiyel enerjisi

$$H' = -\frac{ep\cos\theta}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

kadar tedirgenmiş olurdu.

(i) 6.10 nolu denklemi çözerek taban durumunun dalga fonksiyonuna birinci dereceden düzeltme terimini hesaplayın.

(ii) Bu mertebede atomun *toplam* dipol momentinin *sıfır* olduğunu gösterin.

(iii) 6.14 nolu denklemi kullanarak, taban durumu enerjisine ikinci dereceden düzeltme terimini hesaplayın. *Birinci* dereceden düzeltme terimi nedir?

7. BÖLÜM

VARYASYON İLKESİ

7.1 TEORİ

H Hamiltonyeni ile tanımlanan bir sistemin E_{td} taban durum enerjisini hesaplamak istediğimizi varsayalım. Ancak, bu sistem için zamandan bağımsız Schrödinger denklemini de çözemediğimizi düşünelim. **Varyasyon ilkesi** size çoğu zaman aranan büyüklük olan E_{td} için bir *üst sınır* verecektir. Üstelik bunu kullanırken dikkatli olunur ise, kesin çözüme çok yakın değerler elde edilir. Çalışma ilkesi şöyledir; *Herhangi bir normlanmış ψ dalga fonksiyonu* seçin ve bu seçim için

$$\boxed{E_{td} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \equiv \langle H \rangle} \qquad [7.1]$$

olduğunu iddia ediyorum. Muhtemelen doğru olmayan bir ψ seçimi durumunda, H'nın bu beklenen değeri şüphesiz *abartılı bir tahmin* verecektir. Eğer ψ bir şekilde *uyarılmış* durumlardan bir tanesi olursa, o zaman $\langle H \rangle$'nin E_{td}'yi *geçeceği açıktır*; burada önemli olan şey, seçilebilecek herhangi bir ψ için aynı şeyin geçerli olmasıdır.

Kanıt: H'nın bilinmeyen özfonksiyonları tam bir takım oluşturduklarından, ψ dalga fonksiyonunu bunların linear kombinasyonları olarak ifade edebiliriz:[1]

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \quad \text{ve} \quad H\psi_n = E_n \psi_n.$$

[1] Eğer Hamiltonyen bağlı durumların yanında saçılma süreçlerini de içeriyor ise, toplamın yanında integrali de koymamız gerekir ancak argüman aynı kalır.

ψ normlanmış bir dalga fonksiyonu olduğundan,

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \left\langle \sum_m c_m\psi_m \middle| \sum_n c_n\psi_n \right\rangle = \sum_m\sum_n c_m^* c_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \sum_n |c_n|^2$$

elde edilir. Burada özfonksiyonların kendilerinin de normlanmış ve birbirlerine ortogonal oldukları kabul edilmiştir: $\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}$. Aynı zamanda,

$$\langle H\rangle = \left\langle \sum_m c_m\psi_m \middle| H\sum_n c_n\psi_n \right\rangle = \sum_m\sum_n c_m^* E_n c_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \sum_n E_n|c_n|^2$$

olur. Tanım gereği, taban durum enerjisi *en küçük* özdeğerdir. Yani $E_{td} \le E_n$ ve bundan dolayı

$$\langle H\rangle \ge E_{\text{td}} \sum_n |c_n|^2 = E_{\text{td}}$$

olur ve bu da kanıtlamaya çalıştığımız şeydir.

Örnek 7.1 Bir boyutlu harmonik salınıcının taban durum enerjisini hesaplamak istediğimiz varsayalım:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

Bu durum için (2.61 nolu denklem) doğru yanıtı zaten biliyoruz: $E_{td} = (1/2)\,\hbar\omega$ Buna rağmen, bu örnek yöntem için iyi bir deneme olacaktır. "Deneme" dalga fonksiyonumuzu Gauss eğrisi olarak seçebiliriz,

$$\psi(x) = Ae^{-bx^2}. \qquad [7.2]$$

Burada b bir sabit ve A ise normlama koşulundan belirlenir:

$$1 = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}\,dx = |A|^2\sqrt{\frac{\pi}{2b}} \;\Rightarrow\; A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}. \qquad [7.3]$$

Şimdi

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle \qquad [7.4]$$

olduğundan, bu örnekte

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2}\frac{d^2}{dx^2}\left(e^{-bx^2}\right)dx = \frac{\hbar^2 b}{2m} \qquad [7.5]$$

ve

$$\langle V\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}x^2\,dx = \frac{m\omega^2}{8b}$$

elde edilir. Böylece $\langle H\rangle$:

$$\langle H\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b}. \qquad [7.6]$$

7.1 nolu denkleme göre, bu *herhangi bir b* değeri için E_{td} değerini geçer; *en yakın* sınırı bulmak için $\langle H\rangle$'nin b'ye göre *en düşük değerini* bulalım:

$$\frac{d}{db}\langle H\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8b^2} = 0 \;\Rightarrow\; b = \frac{m\omega}{2\hbar}.$$

Bu değeri $\langle H\rangle$'ne yerleştirirsek,

$$\langle H\rangle_{\text{ed}} = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad [7.7]$$

olduğunu buluruz.

Bu örnekte, gerçek taban durumu dalga fonksiyonuna (2.59 nolu denklem) benzer bir deneme fonksiyonu seçtiğimden, tam taban durum enerjisini elde ettik. Gauss fonksiyonu ile çalışmak çok kolay olduğundan, gerçek taban durum fonksiyonlarına çok az benzerlik gösterdiği durumlarda bile tercih edilen bir deneme fonksiyonudur.

Örnek 7.2 Delta fonksiyonu potansiyeli için taban durumunu aradığımızı varsayın:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \alpha\delta(x).$$

Yine doğru yanıtı bildiğimiz bir durum (2.129 nolu denklem): $E_{td} = -m\alpha^2/2\hbar^2$. Daha önce yaptığımız gibi, Gauss şeklinde bir deneme fonksiyonu (7.2 nolu denklem) kullanacağız. Daha önce normlama koşulunu uygulayıp, $\langle T\rangle$'ni hesapladık. Yapmamız gereken şey $\langle V\rangle$'ni hesaplamak:

$$\langle V\rangle = -\alpha|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}\delta(x)\,dx = -\alpha\sqrt{\frac{2b}{\pi}}.$$

Aşikar olarak

$$\langle H\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha\sqrt{\frac{2b}{\pi}} \qquad [7.8]$$

olur ve bunun b'nin tüm değerleri için E_{td} değerini geçtiğini biliyoruz. $\langle H\rangle$'ni en düşük kılacak b değerini bulalım:

$$\frac{d}{db}\langle H\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}} = 0 \;\Rightarrow\; b = \frac{2m^2\alpha^2}{\pi\hbar^4}.$$

Böylece,

$$\langle H\rangle_{\text{ed}} = -\frac{m\alpha^2}{\pi\hbar^2} \qquad [7.9]$$

olur. $\pi > 2$ olduğuna göre, bu en düşük değer E_{td} değerinden biraz daha büyüktür.

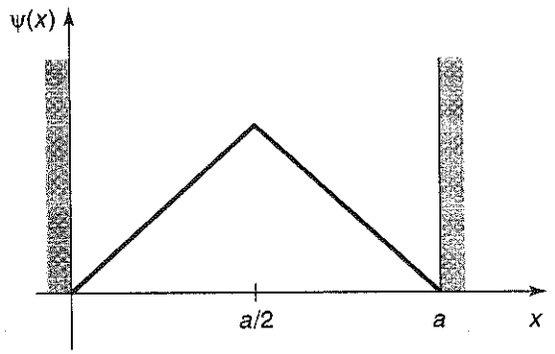
Size normlanmış her hangi bir ψ deneme fonksiyonunu kullanabileceğinizi söyledim ve bu bir bakıma doğrudur da. Fakat *süreksiz* fonksiyonlar durumunda $\langle T\rangle$'ni hesaplamada gerekecek ikinci türeve mantıklı bir anlam yükleyebilmek için, bir takım cambazlıklar yapmak gerekecektir. Kink içeren sürekli fonksiyonlar, dikkatli olduğunuz sürece baş edilebilir fonksiyonlardır. Bir sonraki irdeleyeceğimiz örnek bu tür fonksiyonlarla nasıl baş edebileceğimizi gösteren bir örnek olacaktır.[2]

Örnek 7.3 "Üçgen" deneme fonksiyonu (7.1 nolu şekil)[3] kullanarak, bir boyutlu sonsuz kare kuyu potansiyelinin taban durum enerjisi için bir üst sınır bulun.

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax, & 0 \le x \le a/2, \\ A(a-x), & a/2 \le x \le a, \\ 0, & \text{diğer yerlerde.} \end{cases} \qquad [7.10]$$

Burada A normlama koşulu ile belirlenecek bir sabittir;

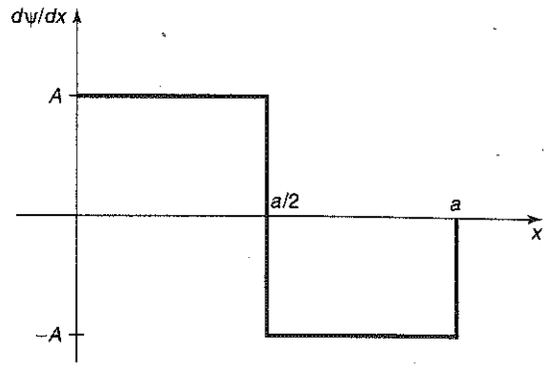
$$1 = |A|^2\left[\int_0^{a/2} x^2\,dx + \int_{a/2}^{a}(a-x)^2\,dx\right] = |A|^2\frac{a^3}{12} \;\Rightarrow\; A = \frac{2}{a}\sqrt{\frac{3}{a}}. \qquad [7.11]$$



ŞEKİL 7.1: Sonsuz kare kuyu potansiyeli için üçgen deneme fonksiyonu (7.10 nolu denklem).

[2] İlginç örneklerin bir derlemesi için, W. N. Mei, *Int. J. Educ. Sci. Tech.* **30**, 513 (1999)'a bakınız.

[3] Gauss gibi kuyunun dışına "sarkan" bir fonksiyon denemenin bir anlamı yoktur. Çünkü $\langle V\rangle = \infty$ elde edersiniz ve 7.1 nolu denklem size hiçbir şey ifade etmeyecektir.



ŞEKİL 7.2. 7.1 nolu şekil ile verilen dalga fonksiyonunun türevi.

Bu durumda 7.2 nolu şekilde gösterildiği gibi

$$\frac{d\psi}{dx} = \begin{cases} A, & 0 < x < a/2, \\ -A, & a/2 < x < a, \\ 0, & \text{diğer yerlerde.} \end{cases}$$

olur. Basamak fonksiyonunun türevi bir delta fonksiyonudur (2.24 nolu problemde (b) şıkkına bakın).

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = A\delta(x) - 2A\delta(x-a/2) + A\delta(x-a) \qquad [7.12]$$

ve böylece

$$\langle H\rangle = -\frac{\hbar^2 A}{2m}\int[\delta(x) - 2\delta(x-a/2) + \delta(x-a)]\psi(x)\,dx$$
$$= -\frac{\hbar^2 A}{2m}[\psi(0) - 2\psi(a/2) + \psi(a)] = \frac{\hbar^2 A^2 a}{2m} = \frac{12\hbar^2}{2ma^2} \qquad [7.13]$$

elde edilir. Taban durumunun doğru enerjisi $E_{td} = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ olur (2.27 nolu denklem). Bu da teorinin çalıştığını gösterir.

Varyasyon ilkesi olağanüstü güçlü ve o derecede kullanımı kolay bir yöntemdir. Bir fiziksel kimyacının karmaşık bir molekülün taban durum enerjisini bulmak için yaptığı şey, çok sayıda ayarlanabilen parametreler içeren bir deneme dalga fonksiyonu yazmak, sonra $\langle H\rangle$ beklenen değerini hesaplamak ve olası en düşük değeri verecek şekilde parametrelerle oynamaktır. Seçilen ψ deneme fonksiyonunun gerçek dalga fonksiyonuna çok az benzediği durumlarda bile, mucizevi derecede doğru E_{td} değerleri elde edebilirsiniz. Şüphesiz, ne kadar çok *gerçeğe yakın* dalga fonksiyonu tahmin etme yollarına sahip iseniz, o kadar iyi sonuç alırsınız. Bu yöntem ile ilgili tek *sorun* hedefe ne kadar yakın olduğunuzu hiçbir zaman bilemezsiniz. *Emin* olduğunuz tek şey bir

üst sınır elde ettiğinizdir.[4] Üstelik, şu hali ile bu teknik sadece taban durumu için uygulanabilir (yine de 7.4 nolu probleme bakın).[5]

***Problem 7.1** (a) $V(x) = \alpha\,|x|$, lineer potansiyel; (b) $V(x) = \alpha\,x^4$, 4. dereceden potansiyel için Gauss deneme fonksiyonu (7.2 nolu denklem) kullanarak, taban durumu enerjisi için elde edebileceğiniz en düşük üst sınırı bulunuz.

****Problem 7.2** Bir boyutlu harmonik salınıcı için aşağıdaki deneme fonksiyonunu kullanarak, E_{td} için en iyi sınırı bulunuz.

$$\psi(x) = \frac{A}{x^2 + b^2}$$

ve burada A normlama koşulu ile belirlenecek bir sabit, b ise ayarlanabilen bir parametredir.

Problem 7.3 $V(x) = -\alpha\delta(x)$ şeklinde verilen delta fonksiyonu potansiyeli için üçgen deneme fonksiyonu (7.10 nolu denklem ile farkı sadece merkeze yerleştirilmiş olmasıdır) kullanarak E_{td} için en iyi sınırı bulunuz. Bu kez a ayarlanabilen bir parametredir.

Problem 7.4

(a) Varyasyon ilkesinin aşağıdaki doğal sonucunu ispatlayın: Eğer $\langle\psi|\psi_{td}\rangle = 0$ ise, $\langle H\rangle \geq E_{iu}$. Burada E_{iu} ilk uyarılmış durumun enerjisidir.

Bu, doğru taban durumuna ortogonal bir deneme fonksiyonu bulabildiğimizde, *ilk uyarılmış durum* için bir üst sınır elde edebileceğimiz anlamına gelir. Taban durumu fonksiyonunu önceden *bilemediğimiz* için, genel olarak ψ_{td}'na ortogonal olan bir ψ seçmek zordur. Öte yandan, eğer $V(x)$ potansiyeli x'in *çift* fonksiyonu ise, taban durumu fonksiyonu benzer şekilde çift fonksiyon olacaktır ve bundan dolayı herhangi bir *tek* deneme fonksiyonu bu sonuç için ortaya konan koşulu otomatik olarak sağlayacaktır.

(b)

$$\psi(x) = Axe^{-bx^2}$$

deneme fonksiyonunu kullanarak, bir boyutlu harmonik salınıcının ilk uyarılmış durumu için en iyi sınırı bulun.

---

[4] Bu pratikte çok fazla bir kısıtlama değil ve bazı durumlarda doğruluğu kestirmenin yolları da vardır. Bu yöntem ile Helyum atomunun taban durum enerjisi virgülden sonra pek çok anlamlı rakama kadar doğru olarak hesaplandı. Örneğin G. W. Drake *et al.*, *Phys. Rev. A* **65**, 054501 (2002) ya da Vladimir I. Korobov, *Phys. Rev. A* **66**, 024501 (2002)'e bakınız.

[5] Varyasyon ilkesinin uyarılmış durum enerjilerinin hesabına yönelik sistematik uzantısı için, Linus Pauling and E. Bright Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics, With Applications to Chemistry*, McGraw-Hill, New York (1935, karton cilt baskısı 1985), 26. Kesime bakınız.

Problem 7.5

(a) Varyasyonel ilkesini kullanarak, birinci dereceden katlı olmayan tedirgeme teorisinin her zaman taban durum enerjisini *olduğundan daha fazla hesapladığını* (ya da asla olduğundan *daha az hesaplayamayacağını*) gösterin.

(b) (a) şıkkına göre taban durumuna ikinci dereceden düzeltme teriminin her zaman negatif olduğunu bekleriz. 6.15 nolu denklemi irdeleyerek bunun gerçekten doğru olduğunu gösterin.

7.2 HELYUM ATOMUNUN TABAN DURUMU

Helyum atomu iki protonlu bir çekirdek ve etrafındaki yörüngede bulunan iki elektrondan oluşur (Elbette çekirdek içinde nötronlar da vardır ama bunlar konumuzun dışındadır). Bu sistem için Hamiltonyen

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right) \qquad [7.14]$$

şeklinde yazılır. Amacımız taban durumu enerjisini (E_{td}) hesaplamaktır. Fiziksel olarak bu her iki elektronu koparmak için gerekli olan enerji miktarıdır (E_{td} verildiğinde, *tek* elektronu koparmak için gerekli olan "iyonlaşma enerjisini" belirlemek sorunsuz hale gelir. 7.6 nolu probleme bakın). Helyum atomunun taban durum enerjisi laboratuvarda büyük bir hassasiyetle

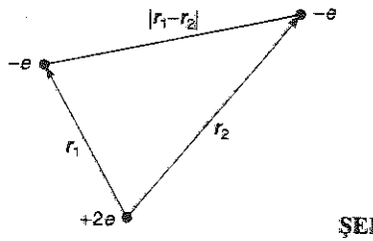
$$E_{gs} = -78.975 \text{ eV} \quad \text{(deneysel)} \qquad [7.15]$$

olarak ölçülmüştür. Teorik olarak tekrar elde etmek istediğimiz sayı budur.

Merak uyandıran konu, böyle basit ve önemli bir problemin bilinen kesin çözümü olmamasıdır.[6] Sorun

$$V_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \qquad [7.16]$$

elektronlar arasındaki itici etkileşmesinden kaynaklanıyor. Bu terimi olduğu gibi görmemezlikten



ŞEKİL 7.3: Helyum atomu.

---

[6] Helyum atomunun nitel özelliklerine sahip ve kesin çözümleri olan üç cisim problemleri var, ancak bunlarda Coulomb potansiyellerine benzemeyen potansiyeller kullanılmıştır (7.17 nolu probleme bakın).

gelirsek, H birbiriden bağımsız iki ayrı hidrojen Hamiltonyenine ayrışır (burada tek farklılık çekirdek yükü için e yerine $2e$ olmasıdır). Kesin çözüm sadece hidrojenimsi dalga fonksiyonların çarpımıdır:

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2(r_1+r_2)/a} \qquad [7.17]$$

ve enerji ise $8E_1 = -109$ eV olur (5.131 nolu denklem)[7]. Bu sonuç -79 eV değerinden çok uzaktır ama bir başlangıçtır.

Daha iyi bir E_{td} değeri elde etmek için ψ_0'ı deneme dalga fonksiyonu olarak kullanıp, varyasyon ilkesini uygulayacağız. Bu seçim *çoğu* Hamiltonyen için bir özfonksiyon olduğundan çok uygun bir seçimdir:

$$H\psi_0 = (8E_1 + V_{ee})\psi_0. \qquad [7.18]$$

Böylece

$$\langle H \rangle = 8E_1 + \langle V_{ee} \rangle \qquad [7.19]$$

olur ve burada[8]

$$\langle V_{ee} \rangle = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \int \frac{e^{-4(r_1+r_2)/a}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3\mathbf{r}_1\, d^3\mathbf{r}_2 \qquad [7.20]$$

olarak verilir. Önce $\mathbf{r}_2$ integralini hesaplayacağım; bu integral için $\mathbf{r}_1$ sabittir ve $\mathbf{r}_2$ koordinat sistemini de kutup ekseni $\mathbf{r}_1$ doğrultusunda olacak şekilde döndürebiliriz (7.4 nolu şekle bakın). Kosinüs teoremi ile

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2} \qquad [7.21]$$

olur ve

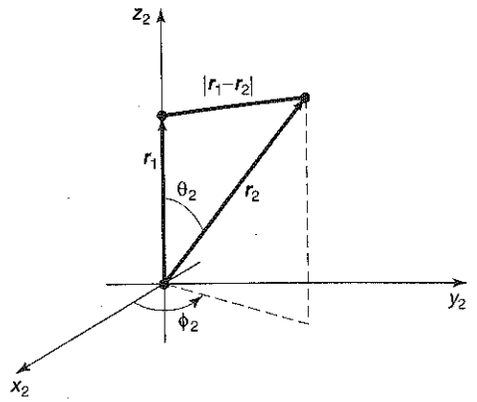
$$I_2 \equiv \int \frac{e^{-4r_2/a}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3r_2 = \int \frac{e^{-4r_2/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2}} r_2^2 \sin\theta_2\, dr_2 d\theta_2 d\phi_2 \qquad [7.22]$$

halini alır. ϕ_2 integrali sıradandır (2π); θ_2 integrali

$$\int_0^\pi \frac{\sin\theta_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2}} d\theta_2 = \frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2}}{r_1 r_2}\Bigg|_0^\pi$$

[7] Burada a bildiğimiz Bohr yarıçapı ve $E_n = -13.6/n^2$ eV ise n-inci Bohr enerjisidir; Z atom numaralı bir çekirdek için, $E_n \to Z^2 E_n$ ve $a \to a/Z$ olduğunu hatırlayın (4.16 nolu problem). 7.17 nolu denklem ile ilgili spin düzeneği antisimetrik (tekli durum) olacaktır.

[8] 7.20 nolu denklemi $H' = V_{ee}$ tedirgemesi için birinci dereceden tedirgeme teorisi olarak yorumlayabilirsiniz. Fakat tedirgeme, tedirgenmemiş potansiyel ile kıyaslanabilir olduğu için, bunu yöntemin yanlış uygulanması olarak değerlendiriyorum. Bu nedenle, bu problemi E_{td} için üst sınır aranılan bir varyasyon hesabı olarak ele almayı tercih ediyorum.



ŞEKİL 7.4: r_2-integrali (7.20 nolu denklem) için koordinat eksenlerinin seçimi.

$$= \frac{1}{r_1 r_2}\left(\sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1 r_2} - \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2}\right)$$

$$= \frac{1}{r_1 r_2}\left[(r_1 + r_2) - |r_1 - r_2|\right] = \begin{cases} 2/r_1, & r_2 < r_1, \\ 2/r_2, & r_2 > r_1. \end{cases} \qquad [7.23]$$

sonucu verir. Böylece

$$I_2 = 4\pi\left(\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} e^{-4r_2/a} r_2^2\, dr_2 + \int_{r_1}^\infty e^{-4r_2/a} r_2\, dr_2\right)$$

$$= \frac{\pi a^3}{8r_1}\left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a}\right)e^{-4r_1/a}\right] \qquad [7.24]$$

elde edilir ve bu da $\langle V_{ee} \rangle$ beklenen değerinin

$$\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)\int\left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a}\right)e^{-4r_1/a}\right]e^{-4r_1/a} r_1 \sin\theta_1\, dr_1 d\theta_1 d\phi_1$$

olmasına yol açar. Açısal integrallerin alınması kolay (4π) ve r_1 integrali

$$\int_0^\infty \left[re^{-4r/a} - \left(r + \frac{2r^2}{a}\right)e^{-8r/a}\right] dr = \frac{5a^2}{128}$$

halini alır. Sonunda

$$\langle V_{ee} \rangle = \frac{5}{4a}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) = -\frac{5}{2}E_1 = 34 \text{ eV} \qquad [7.25]$$

olur ve bunun sonucunda

$$\langle H \rangle = -109 \text{ eV} + 34 \text{ eV} = -75 \text{ eV} \qquad [7.26]$$

elde edilir. Hiç de fena değil (hatırlayın, deneysel değer -79 eV idi). Ama daha da iyisini

yapabiliriz. Bunu için iki elektronu birbirleriyle hiç etkileşmiyormuş gibi ele alan ψ_0 fonksiyonundan çok daha gerçekçi bir deneme fonksiyonu düşünmemiz gerekir. Diğer elektronların etkisini tamamıyla *görmemezlikten gelme* yerine, ortalama olarak her bir elektronun çekirdeği kısmen *kalkanlayan* negatif bir yük bulutunu temsil ettiğini söyleyelim. Bu durumda, diğer elektron 2 değerinden biraz *daha küçük* olan *etkin* çekirdek yükü (Z) görür. Bu da şu deneme fonksiyonunu akla getirir:

$$\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a}. \qquad [7.27]$$

Burada Z'yi H'yı en aza indirgeyen varyasyon parametresi olarak ele alacağız. Varyasyon yönteminde *Hamiltonyenin kendisine hiçbir şekilde dokunmadığımızı* lütfen aklınızdan çıkarmayın. Helyum atomu için Hamiltonyen 7.14 nolu denklem ile verildiği şekilde aynen kalır. Fakat *deneme fonksiyonu seçiminde* yardımcı *yöntem olarak* yaklaşık Hamiltonyen düşünmek yanlış değildir.

Bu dalga fonksiyonu "tedirgenmemiş" Hamiltonyenin (elektronlar arası itici etkileşme yok sayıldığında) bir özfonksiyonudur. Bu Hamiltonyende sadece Coulomb terimlerinde 2 yerine Z koymalıyız. Hamiltonyeni (7.14 nolu denklem) tekrar yazarsak;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2}\right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{(Z-2)}{r_1} + \frac{(Z-2)}{r_2} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\right). \qquad [7.28]$$

H'nın beklenen değeri açıkca

$$\langle H \rangle = 2Z^2 E_1 + 2(Z-2)\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle + \langle V_{ee}\rangle \qquad [7.29]$$

olur. Burada $\langle 1/r \rangle$ beklenen değeri çekirdek yükü Z olan hidrojenimsi (tek parçacık) taban durum fonksiyonu olan ψ_{100} da hesaplanan değerdir. 6.55 nolu denkleme göre

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle = \frac{Z}{a} \qquad [7.30]$$

olur. V_{ee}'nin beklenen değeri 7.25 nolu denklem elde edilen değerdir. Sadece $Z = 2$ yerine, *keyfi* bir Z kullanmak istediğimiz için a'yı $2/Z$ ile çarparız:

$$\langle V_{ee}\rangle = \frac{5Z}{8a}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) = -\frac{5Z}{4}E_1. \qquad [7.31]$$

Hepsini bir araya getirdiğimizde $\langle H \rangle$ için şu sonucu buluruz:

$$\langle H \rangle = \left[2Z^2 - 4Z(Z-2) - (5/4)Z\right]E_1 = [-2Z^2 + (27/4)Z]E_1. \qquad [7.32]$$

Varyasyon ilkesine göre, bu büyüklük *herhangi bir* Z değeri için E_{td} enerjisinden fazladır. *En düşük* üst sınır $\langle H \rangle$'nin en aza indirgendiği durumda ortaya çıkar.

$$\frac{d}{dZ}\langle H \rangle = [-4Z + (27/4)]E_1 = 0$$

ve bu

$$Z = \frac{27}{16} = 1.69 \qquad [7.33]$$

sonucunu verir. Bu mantıklı bir sonuç gibi görünüyor; etkin yükü 2'den 1.69'a düşürerek, diğer elektronun çekirdeği kısmen perdelediğini söylüyor. Z yerine bu değeri koyduğumuzda;

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)^6 E_1 = -77.5 \text{ eV}. \qquad [7.34]$$

Helyum'un taban durumu bu yöntemle çok daha fazla ayarlayabilen parametre içeren karmaşık deneme fonksiyonları kullanılarak çok büyük hassasiyetle hesaplanmaktadır.[9] Fakat elde ettiğimiz sonuç doğru yanıtın % 2'lik kısmındadır ve doğruyu söylemek gerekirse bu noktadan sonra benim için problem ilginçliğini kaybetmeye başlar.[10]

Problem 7.6 Helyum'un taban durumu enerjisini ($E_{td} = -79.0$ eV) kullanarak, sadece *bir* elektronu koparmak için gerekli olan enerjiyi tanımlayan iyonlaşma enerjisini hesaplayın. *Yardım:* önce çekirdek etrafında tek elektronu olan He^+ iyonunun taban durum enerjisini hesaplayın ve sonra bu iki enerjinin farkını alın.

***Problem 7.7** Bu kesimin tekniklerini H^- ve Li^+ iyonlarına uygulayın. H^- ve Li^+'un her ikisinin de helyum gibi 2 elektronu olduğunu fakat çekirdek yüklerinin sırasıyla $Z = 1$ ve $Z = 3$ olduğunu hatırlayın. Her bir durum için etkin çekirdek yükünü ve E_{td} için en iyi üst sınırı belirleyin. *Açıklama:* H^- için $\langle H \rangle > -13.6$ eV bulmalısınız. Enerji bağlamında, elektron için arkasında yüksüz çekirdeği bırakarak uçup gitmek daha tercih edilen bir durum olduğundan, bu sonuç hiçbir bağlı durumun olmadığı anlamına gelir. Hem çekirdeğin elektronları çekme kuvveti helyum'a nazaran daha zayıf hem de elektronlar arası itici kuvvet atomu parçalama eğiliminde olduğundan, bu sonuç tümüyle şaşırtıcı değildir. Ancak bunun hiç de böyle olmadığı ortaya çıktı. Çok daha fazla detay içeren deneme fonksiyonları ile (7.18 nolu probleme bakın) $E_{td} < -13.6$ eV olduğu ve bundan

---

[9] Klasik çalışmalar: E. A. Hylleraas, *Z. Phys.* **65**, 209 (1930); C. L. Pekeris, *Phys. Rev.* **115**, 1216 (1959). Daha yeni çalışmalar için 4. dipnota bakınız.

[10] Helyum atomunun ilk uyarılmış durumu, benzer yolla taban durumuna ortogonal olan bir deneme fonksiyonu kullanılarak elde edilebilir. P. J. E. Peebles, *Quantum Mechanics*, Princeton U. P., Princeton, NJ (1992), 40. Kesime bakınız.

dolayı bağlı bir durumun var *olduğu* gösterilebilir. Ancak bu *çok zayıf* bağlı bir durumdur ve de uyarılmış bağlı durumlar yoktur.[11] Bu nedenle H^-'nin kesikli spektrumu yoktur (bütün geçişler sürekli bölgeye ve sürekli bölgedendir). Bundan dolayı güneşin yüzeyinde bol miktarda bulunmasına rağmen,[12] laboratuvarda çalışılması zor bir elementtir.

7.3 HİDROJEN MOLEKÜL İYONU

Varyasyon ilkesinin bir başka klasik uygulaması ise iki protonun oluşturduğu Coulomb alanında bulunan ve tek bir elektrondan oluşan H_2^+ hidrojen molekül iyonudur (7.5 nolu şekil). Bu yöntemin en ilgi çekici sonuçlarından biri iki proton arasındaki *gerçek R* uzaklığını veriyor olmasıdır. Buna rağmen, şimdilik protonların konumlarının değişmez olduğunu varsayıyorum. r_1 ve r_2 elektronların bağlı bulundukları protona olan uzaklıkları olmak üzere, Hamiltonyen

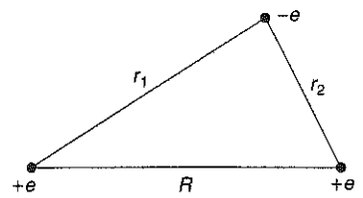
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) \qquad [7.35]$$

şeklindedir. Her zaman olduğu gibi, taktiğimiz mantıklı bir deneme fonksiyonu seçmek ve varyasyon ilkesine başvurarak taban durum enerjisine bir sınır elde etmektir. (Aslında esas amacımız, bu sisteme karşılık gelen enerjinin yüksüz hidrojen atomu ve serbest bir protondan oluşan sisteme karşılık gelen enerjiden daha düşük olup olmadığını bulmaktır). Eğer deneme fonksiyonumuz bağlı bir durum *varlığına* işaret ederse, *daha iyi* bir deneme fonksiyonu sadece bağlanmayı çok daha güçlü kılar.

Deneme fonksiyonunu kurmak için, iyonun şöyle oluşturulduğunu varsayalım: taban durumundaki bir hidrojen atomu (4.80 nolu denklem)

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a} \qquad [7.36]$$

ve "sonsuz"dan bu hidrojen atomuna R kadar bir mesafeye getirilen ikinci bir proton. R uzaklığının Bohr yarıçapından oldukça büyük olduğu durumda, elektronun dalga fonksiyonu çok da fazla değişmeyecektir. Fakat iki protonu da aynı temelde incelemek



ŞEKİL 7.5: H_2^+ Hidrojen molekül iyonu.

[11] Robert N. Hill, *J. Math Phys.* **19**, 2316 (1977).
[12] Daha fazla görüş için, Hans A. Bethe and Edwin E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One and Two-Electron Atoms*, Plenum, New York (1977) 34.Kesime bakınız.

istediğimizden elektronun her iki protona ait olma olasılığı aynı olmalıdır. Bu, aşağıdaki gibi bir deneme fonksiyonu kullanmamızı salık verir:

$$\psi = A\left[\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)\right]. \qquad [7.37]$$

Moleküler dalga fonksiyonu atomik dalga fonksiyonlarının lineer kombinasyonu olarak ifade edildiğinden, kuantum kimyacıları bunu **LCAO** (**L**ineer **C**ombination of **A**tomic **O**rbitals) tekniği olarak adlandırırlar.

İlk işimiz deneme fonksiyonunu *normlamaktır.*

$$1 = \int |\psi|^2\, d^3\mathbf{r} = |A|^2\left[\int |\psi_0(r_1)|^2\, d^3\mathbf{r} + \int |\psi_0(r_2)|^2\, d^3\mathbf{r} + 2\int \psi_0(r_1)\psi_0(r_2)\, d^3\mathbf{r}\right]. \qquad [7.38]$$

ψ_0'ın kendisi normlanmış olduğundan, ilk iki integral 1'dir; üçüncüsü bir parça cambazlık gerektirir.

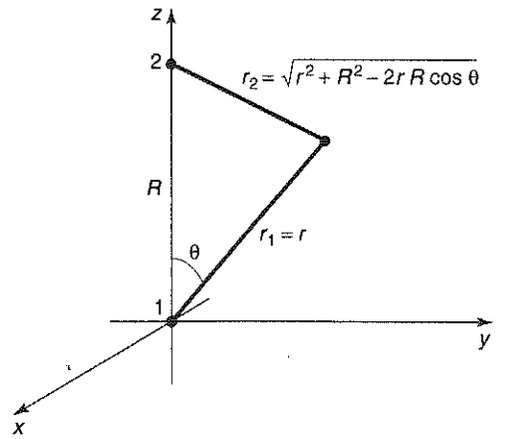
$$I \equiv \langle\psi_0(r_1)|\psi_0(r_2)\rangle = \frac{1}{\pi a^3}\int e^{-(r_1+r_2)/a}\, d^3\mathbf{r}. \qquad [7.39]$$

olsun. 1-inci ve 2-inci protonun koordinatlarını, sırasıyla orijinde ve z ekseni üzerinde bir R noktasında seçersek (7.6 nolu şekil),

$$r_1 = r \quad \text{ve} \quad r_2 = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta} \qquad [7.40]$$

olur ve bu düzenleme ile

$$I = \frac{1}{\pi a^3}\int e^{-r/a}e^{-\sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\theta}/a}r^2\sin\theta\, dr d\theta d\phi \qquad [7.41]$$



ŞEKİL 7.6: I'nın hesabı için seçilen koordinatlar (7.39 nolu denklem).

şeklini alır. ϕ üzerinden integral sıradandır: (2π). θ üzerinden integrali alabilmek için

$y \equiv \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta}$ dönüşümünü yapalım ki $d(y^2) = 2y\,dy = 2rR\sin\theta\,d\theta$ olsun. O zaman,

$$\int_0^\pi e^{-\sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\theta}/a}\sin\theta\,d\theta = \frac{1}{rR}\int_{|r-R|}^{r+R} e^{-y/a}\,y\,dy$$
$$= -\frac{a}{rR}\left[e^{-(r+R)/a}(r+R+a) - e^{-|r-R|/a}(|r-R|+a)\right]$$

olur. Şimdi r üzerinden integral çok kolay alınabilir hale geldi:

$$I = \frac{2}{a^2R}\Big[-e^{-R/a}\int_0^\infty (r+R+a)e^{-2r/a}r\,dr + e^{-R/a}\int_0^R (R-r+a)r\,dr$$
$$+ e^{R/a}\int_R^\infty (r-R+a)e^{-2r/a}r\,dr\Big].$$

Bu integrallerin hesabı bize (bazı sadeleştirmelerden sonra)

$$I = e^{-R/a}\left[1 + \left(\frac{R}{a}\right) + \frac{1}{3}\left(\frac{R}{a}\right)^2\right] \qquad [7.42]$$

sonucunu verir. I **örtüşme** integrali olarak adlandırılır ve $\psi_0(r_1)$'in ne kadar kısmının $\psi_0(r_2)$ ile örtüştüğünün (çakıştığının) bir ölçüsüdür ($R \to 0$ için $I \to 1$ ve $R \to \infty$ için $I \to 0$ olduğuna dikkat edin). I cinsinden normlama çarpanı (7.38 nolu denklem):

$$|A|^2 = \frac{1}{2(1+I)}. \qquad [7.43]$$

Şimdi H'nın beklenen değerini ψ deneme fonksiyonu ile hesaplamalıyız. r_1 için;

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r_1}\right)\psi_0(r_1) = E_1\psi_0(r_1).$$

Burada $E_1 = -13.6$ eV olup, hidrojen atomunun taban durumu enerjisidir ve yukarıdaki denkleme r_1 yerine r_2 yerleştirerek r_2 için olan ifadeyi elde ettiğimizde, toplam Hamiltonyen

$$H\psi = A\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)\right][\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)]$$
$$= E_1\psi - A\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left[\frac{1}{r_2}\psi_0(r_1) + \frac{1}{r_1}\psi_0(r_2)\right]$$

şeklini alır. Bu da

$$\langle H\rangle = E_1 - 2|A|^2\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left[\langle\psi_0(r_1)\left|\frac{1}{r_2}\right|\psi_0(r_1)\rangle + \langle\psi_0(r_1)\left|\frac{1}{r_1}\right|\psi_0(r_2)\rangle\right] \qquad [7.44]$$

olmasına yol açar. Geriye kalan iki interalin hesabını size bırakıyorum. Bunlardan biri **doğrudan integral**,

$$D \equiv a\langle\psi_0(r_1)\left|\frac{1}{r_2}\right|\psi_0(r_1)\rangle \qquad [7.45]$$

ve diğeri de **değiştokuş integrali** olarak adlandırılır,

$$X \equiv a\langle\psi_0(r_1)\left|\frac{1}{r_1}\right|\psi_0(r_2)\rangle. \qquad [7.46]$$

Bu integrallerin sonuçları (7.8 nolu probleme bakınız):

$$D = \frac{a}{R} - \left(1 + \frac{a}{R}\right)e^{-2R/a} \qquad [7.47]$$

ve

$$X = \left(1 + \frac{R}{a}\right)e^{-R/a}. \qquad [7.48]$$

Her şeyi bir araya getirip ve $E_I = -(e^2/4\pi\epsilon_0)(1/2a)$ (4.70 ve 4.72 nolu denklemler) olduğu göz önüne alındığında,

$$\langle H\rangle = \left[1 + 2\frac{(D+X)}{(1+I)}\right]E_1 \qquad [7.49]$$

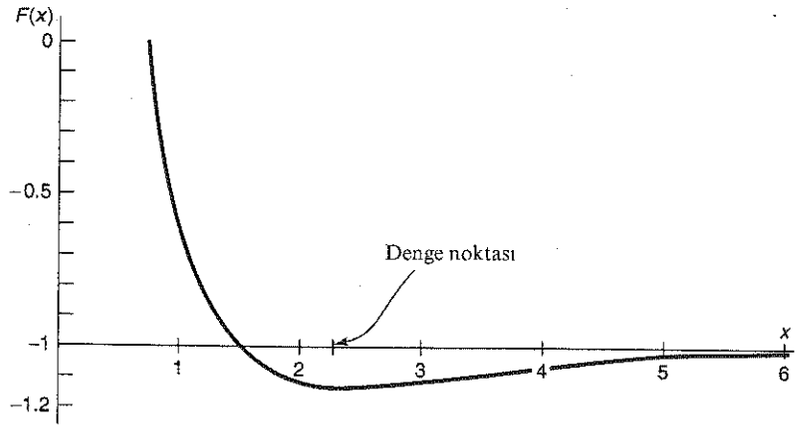
bulunur. Varyasyon ilkesine göre, taban durumu enerjisi $\langle H\rangle$ beklenen değerinden *küçüktür*. Unutmayın bu sadece *elektron'un* enerjisidir. Sistemde ayrıca, protonlar arasındaki etkileşmeyi betimleyen itici potansiyel enerji de var:

$$V_{pp} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{R} = -\frac{2a}{R}E_1. \qquad [7.50]$$

Böylece, sistemin *toplam* enerjisinin, (E_1 biriminde ve $x \equiv R/a$ 'nın fonksiyonu olarak ifade edildiğinde)

$$F(x) = -1 + \frac{2}{x}\left\{\frac{(1-(2/3)x^2)e^{-x} + (1+x)e^{-2x}}{1+(1+x+(1/3)x^2)e^{-x}}\right\} \qquad [7.51]$$

ifadesinden daha düşük olduğu görülür. Bu fonksiyonun grafiği 7.7 nolu şekilde çizilmiştir. Grafiğin $F(x) = -1$ altındaki bölgede var olması (ki bu enerjinin yüksüz bir atom ve serbest bir protondan oluşan sistemin enerjisinden (–13.6 eV) daha küçük olduğunu gösterir), bağlanmanın *var* olduğunun açık bir kanıtıdır. Bu bağlı durum, elektronunun iki proton tarafından eşit olarak paylaşıldığı kovalent bağa karşılık gelmektedir. Denge durumunda protonlar arasındaki mesafe yaklaşık 2.4 Bohr yarıçapı ya da 1.3 Å'dur.



ŞEKİL 7.7: 7.51 nolu denklem ile tanımlanan $F(x)$'in bağlı durumların varlığını gösteren grafiği. x, Bohr yarıçapı biriminde protonlar arası uzaklıktır.

Deneysel değer ise 1.06 Å'dur. Hesaplanan bağlanma enerjisi 1.8 eV iken, deneysel değer 2.8 eV'dir. Varyasyon ilkesi her zaman olduğu gibi taban durum enerjisini *abartılı* verir ve bundan dolayı bağlanmayı daha *düşük* tahmin eder. Fakat şimdi bunu boş verin. Burada önemli olan nokta bağlanmanın olup olmayacağını görebilmek idi; daha iyi bir varyasyon fonksiyonu sadece potansiyel kuyusunu daha derin yapabilir.

***Problem 7.8** 7.45 ve 7.46 nolu denklemler ile verilen D ve X'i hesaplayın ve sonuçlarınızın 7.47 ve 7.48 nolu denklemler ile uyumluluğunu kontrol edin.

****Problem 7.9** 7.37 nolu denklem ile verilen deneme fonksiyonunu, eksi işareti ile kullandığımızı varsayın:

$$\psi = A[\psi_0(r_1) - \psi_0(r_2)]. \qquad [7.52]$$

Herhangi bir integral hesabı yapmadan, bu durum için 7.51 nolu denkleme benzer $F(x)$'i bulun ve grafiğini çizin. Bağlanmanın gerçekleştiğine işaret eden bir kanıtın olmadığını gösterin.[13] Bir noktaya dikkatinizi çekmek isterim: Varyasyon ilkesinin sadece *üst sınırı* veriyor olması böyle bir kuantum durumu için bağlanmanın olamayacağını kanıtlamaz ve bu umut verici bir şey de değildir. *Açıklama:* Aslında

$$\psi = A[\psi_0(r_1) + e^{i\phi}\psi_0(r_2)] \qquad [7.53]$$

[13] Bağlanma, elektronun protonları içe doğru çektiği iki proton arasında bulunmayı "tercih" ettiği zaman oluşur. Fakat 7.52 nolu denklem ile verilen tek lineer kombinasyon merkezde bir *düğüm* noktasına sahiptir. Bu nedenle bu düzeneğin protonları birbirinden uzaklaştırması hiç de şaşırtıcı değildir.

formundaki herhangi bir fonksiyon, elektronun eşit olasılıkla her bir protona ait olabilmesi özelliğini sağlar. Öte yandan 7.35 nolu denklem ile verilen Hamiltonyen P değiştokuş işlemi ($r_1 \leftrightarrow r_2$) altında değişmez olduğundan, özfonksiyonları P'nin de ortak özfonksiyonları olacak şekilde seçilebilirler. 7.37 nolu denklemdeki artı işareti +1 özdeğeri için ve 7.52 nolu denklemdeki eksi işareti ise −1 özdeğeri için alınır. 7.53 nolu denklemdeki gibi daha genel bir durum göz önüne alındığında kazanılacak hiçbir şey yoktur. Fakat istiyorsanız deneyebilirsiniz.

****Problem 7.10** $F(x)$'in denge noktasındaki ikinci türevi hidrojen molekül iyonundaki iki protonun doğal titreşim frekansının (2.3. Kesime bakın) hesaplanması için kullanılabilir. Bu salınıcının taban durumu enerjisi ($\hbar\omega/2$) sistemin bağlanma enerjisini aşarsa sistem ayrışacaktır. Gerçekte, salınıcının enerjisinin bunun olmasını *engelleyebilecek* kadar küçük olduğunu gösterin ve kaç tane bağlı titreşim düzeyinin olduğu hakkında bir öngörüde bulunun. *Not:* En düşük enerji konumunu analitik olarak bulmamız mümkün değil. Bunu sayısal yöntem ile bilgisayarda yapın.

---

7. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

Problem 7.11

(a) Aşağıda verilen deneme fonksiyonunu kullanarak, bir boyutlu harmonik salınıcının taban durum enerjisi için bir sınır elde edin:

$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos(\pi x/a), & (-a/2 < x < a/2), \\ 0 & \text{diğer yerlerde.} \end{cases}$$

a'nın "en iyi" değeri nedir? $\langle H\rangle_{\text{enaz}}$'ı kesin enerji değeri ile karşılaştırın. *Not:* Bu deneme fonksiyonunun türevi $\pm a/2$'de süreksizdir ("kink"). Benim 7.3 nolu örnekte yaptığım gibi, bunu hesaba katmanız gerekir mi?

(b) $(-a, a)$ aralığında $\psi(x) = B \sin(\pi x/a)$ deneme fonksiyonunu kullanarak, ilk uyarılmış durum için bir sınır belirleyin. Bunu kesin sonuç ile karşılaştırın.

***Problem 7.12**

(a) Aşağıdaki deneme fonksiyonunu[14] kullanarak,

$$\psi(x) = \frac{A}{(x^2 + b^2)^n}$$

[14] W. N. Mei, *Int. J. Educ. Sci. Tech.* **27**, 285 (1996).

7.2 nolu problemi keyfi bir n için genelleştirin. *Kısmi yanıt:* b'nin en iyi değeri

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\left[\frac{n(4n-1)(4n-3)}{2(2n+1)}\right]^{1/2}$$

ifadesi ile verilir.

(b)

$$\psi(x) = \frac{Bx}{(x^2+b^2)^n}$$

deneme fonksiyonunu kullanarak, harmonik salınıcının ilk uyarılmış durumu için en düşük üst sınırı bulun.

Kısmi yanıt: b'nın en iyi değeri

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\left[\frac{n(4n-5)(4n-3)}{2(2n+1)}\right]^{1/2}$$

ifadesi ile verilir.

(c) Farkındaysanız $n \to \infty$ iken, sınır değerleri kesin enerji değerlerine yaklaşır. Bu neden böyledir? *Yardım:* $n = 2$, $n = 3$ ve $n = 4$ için deneme fonksiyonunu çizin ve bunları 2.59 ve 2.62 nolu denklemler ile verilen gerçek dalga fonksiyonları ile karşılaştırın. Bunu analitik olarak yapabilmek için aşağıdaki özdeşlik ile başlayın:

$$e^z = \lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{z}{n}\right)^n.$$

Problem 7.13 A normlama sabiti ve b ayarlanabilir bir parametre olmak üzere,

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{-br^2}$$

Gauss deneme fonksiyonu kullanarak, hidrojen atomunun taban durumu için elde edebileceğiniz en düşük sınırı bulun. *Yanıt:* −11.5 eV.

****Problem 7.14** Eğer foton sıfırdan farklı bir kütleye ($m_\gamma \neq 0$) sahip olsaydı, Coulomb potansiyeli yerine **Yukawa Potansiyeli** kullanılabilirdi:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^{-\mu r}}{r} \qquad [7.54]$$

ve burada $\mu = m_\gamma c/\hbar$'dir. Kendinizin oluşturacağı bir deneme fonksiyonu kullanarak, bu potansiyel için "hidrojen" atomunun bağlanma enerjisinin tahmini hesabını yapın. $\mu a << 1$ olduğunu varsayın ve yanıtınızı $(\mu a)^2$'nin doğru mertebesinde verin.

Problem 7.15 Hamiltonyeni H_0 olan bir kuantum durumu verilsin. Ve yine bu Hamiltonyenin ortogonal, normlanmış ve katlı olmayan iki ψ_a (E_a enerjili) ve ψ_b (E_b enerjili) özdurumları olduğunu varsayın. Ayrıca, E_a değerinin E_b değerinden daha küçük olduğunu varsayın. Şimdi aşağıdaki matris elemanlarına sahip H' tedirgemesini uygulayalım:

$$\langle\psi_a|H'|\psi_a\rangle = \langle\psi_b|H'|\psi_b\rangle = 0; \quad \langle\psi_a|H'|\psi_b\rangle = \langle\psi_b|H'|\psi_a\rangle = h, \qquad [7.55]$$

ve burada h belli bir sabittir.

(a) Tedirgenmiş Hamiltonyenin kesin özdeğerlerini bulun.

(b) Tedirgenmiş sistemin enerjilerini ikinci dereceden tedirgeme teorisini kullanarak belirleyin.

(c)

$$\psi = (\cos\phi)\psi_a + (\sin\phi)\psi_b \qquad [7.56]$$

deneme fonksiyonu ile varyasyon ilkesini kullanarak, tedirgenmiş sistemin taban durumu enerjisini hesaplayın. ψ ifadesinde ϕ ayarlanabilir bir parametredir. *Not:* ψ'nin normlanabilir olmasını garantilemenin zekice bir yolu lineer kombinasyonu bu şekilde yazmaktır.

(d) (a), (b) ve (c) şıklarında elde ettiğiniz sonuçları karşılaştırın. Bu durumda varyasyon ilkesi neden bu kadar doğru sonuçlar verir?

Problem 7.16 7.15 nolu problemde geliştirilen yöntemin açık bir örneği olarak, Hamiltonyeni aşağıdaki gibi olan (4.158 nolu denklem), düzgün bir manyetik alan ($\mathbf{B} = B_z\hat{k}$) içinde durgun halde bulunan bir elektronu göz önüne alın:

$$H_0 = \frac{eB_z}{m}S_z. \qquad [7.57]$$

χ_a ve χ_b özspinörleri ve bunlara karşılık gelen E_a ve E_b enerjileri 4.161 nolu denklem ile verildiği gibidir. Şimdi x doğrultusunda düzgün bir manyetik alan olan tedirgemeyi uygulayalım:

$$H' = \frac{eB_x}{m}S_x. \qquad [7.58]$$

(a) H''nün matris elemanlarını bulun ve bunların 7.55 nolu denklemde verilen yapıya sahip olduklarını gösterin. h'nın değerini bulun.

(b) 7.15 nolu problemin (b) şıkkında elde ettiğiniz sonucu kullanarak, yeni taban durumu enerjisini ikinci derece tedirgeme teorisi içinde hesaplayın.

(c) 7.15 nolu problemin (c) şıkkında elde ettiğiniz sonucu kullanarak, taban durumu enerjisi için varyasyon ilkesi sınırını belirleyin.

*****Problem 7.17** Helyum atomunun kendisi için Schrödinger denklemi kesin olarak çözülememesine rağmen, kesin çözümleri olan "helyum benzeri" sistemler var. Basit bir

örnek Coulomb kuvvetlerinin yerine Hook yasası kuvvetlerinin yerleştirildiği "lastik bantlı helyum" dur:[15]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(r_1^2 + r_2^2) - \frac{\lambda}{4}m\omega^2|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2. \qquad [7.59]$$

(a) Aşağıdaki değişken dönüşümünün

$$\mathbf{u} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{v} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \qquad [7.60]$$

Hamiltonyeni üç boyutlu iki tane bağımsız harmonik salınıcı Hamiltonyeninin toplamına dönüştürdüğünü gösterin:

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_u^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 u^2\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_v^2 + \frac{1}{2}(1-\lambda)m\omega^2 v^2\right]. \qquad [7.61]$$

(b) Bu sistem için *kesin* taban durum enerjisinin ne olduğunu bulun.

(c) Kesin çözümü bilmiyor olsaydık, Hamiltonyenin esas şekline (7.59 nolu denklem) 7.2. Kesimdeki yöntemi uygulama eğiliminde olurduk. Kalkanlamayı görmemezlikten gelerek öyle yapın ve sonucunuzu kesin yanıt ile kıyaslayın. *Yanıt:* $\langle H\rangle = 3\hbar\omega(1-\lambda/4)$.

***Problem 7.18** 7.7 nolu problemde, 7.27 nolu denklem ile verilen ve kalkanlama etkisini de içeren deneme fonksiyonunun helyum için çok iyi sonuçlar vermesine rağmen, negatif hidrojen iyonu için bağlı bir durumun varlığını ortaya koymak için yeterli olmadığını gösterdik. Chandrasekhar[16] aşağıdaki deneme fonksiyonunu kullandı:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv A[\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_2(r_1)\psi_1(r_2)], \qquad [7.62]$$

burada

$$\psi_1(r) \equiv \sqrt{\frac{Z_1^3}{\pi a^3}}e^{-Z_1 r/a} \quad \text{ve} \quad \psi_2(r) \equiv \sqrt{\frac{Z_2^3}{\pi a^3}}e^{-Z_2 r/a}. \qquad [7.63]$$

Aslında, Chandrasekhar bir elektronun çekirdeğe nispeten daha yakın ve diğerinin daha dışarıda olduğunu öneren iki *farklı* kalkanlama çarpanı kullandı. Elektronlar özdeş parçacık olduklarından, uzaysal dalga fonksiyonu değiş-tokuş altında simetrik olmak zorundadır. Konumuzun dışında olan *spin* durumu aşikar olarak antisimetriktir. Z_1 ve Z_2

[15] Çok daha gelişimiş bir model için, R. Crandall, R Whitnell, and R. Bettega, *Am. J. Phys.* **52**, 438 (1984)'e bakınız.

[16] S. Chandrasekhar, *Astrophys. J.* **100**, 176 (1944).

ayarlanabilir parametreler için yapılacak kurnaz bir seçim ile $\langle H\rangle$ için −13.6 eV'den daha küçük bir değer elde edebileceğinizi gösterin. *Yanıt:*

$$\langle H\rangle = \frac{E_1}{x^6 + y^6}\left(-x^8 + 2x^7 + \frac{1}{2}x^6y^2 - \frac{1}{2}x^5y^2 - \frac{1}{8}x^3y^4 + \frac{11}{8}xy^6 - \frac{1}{2}y^8\right)$$

ve burada $x \equiv Z_1 + Z_2$ ve $y \equiv 2\sqrt{Z_1 Z_2}$. Chandrasekhar $Z_1 = 1.039$ (1'den büyük olduğundan, etkin çekirdek yükü gibi güdüsel bir yorum artık kullanılamaz ise de boş verin, hala kabul edilebilir bir deneme fonksiyonudur) ve $Z_2 = 0.283$ olarak almıştır.

Problem 7.19 Çekirdek füzyonunu gerçekleştirmede en temel sorun iki parçacığı (örneğin iki döteron) çekici fakat kısa erimli çekirdek kuvvetlerinin itici Coulomb kuvvetlerini yenebileceği bir mesafeye kadar yaklaştırılabilmektir. "Buldozer" yönteminde parçacıklar müthiş sıcaklıklara kadar ısıtılarak onları bir araya getirecek rastgele çarpışmalar yapmaları sağlanır. Daha da çekici bir öneri **müyon katalizidir**. Burada "hidrojen molekül iyonu" protonlar yerine döteronlar ve elektron yerine bir müyon yerleştirilerek oluşturulur. Böyle bir yapıda döteronlar arasındaki denge uzaklığının tahmini hesabını yapın ve bu amaç için neden müyonların elektronlardan daha üstün olduğunu açıklayın.[17]

Problem 7.20 Kuantum noktaları: İki boyutlu uzayda, 7.8 nolu şekil ile gösterilen haç şeklindeki bölgede hareket etmek zorunda bırakılan bir parçacığı ele alın (Haç'ın "kolları" sonsuza kadar uzanıyor). Potansiyel haç içerisinde sıfır ve dışarıdaki taralı bölgelerde sonsuzdur. Şaşırtıcı olmasına rağmen, bu düzeneğin pozitif enerjili bağlı bir kuantum durumu vardır.[18]

(a) Sonsuza kaçabilen en düşük enerjinin

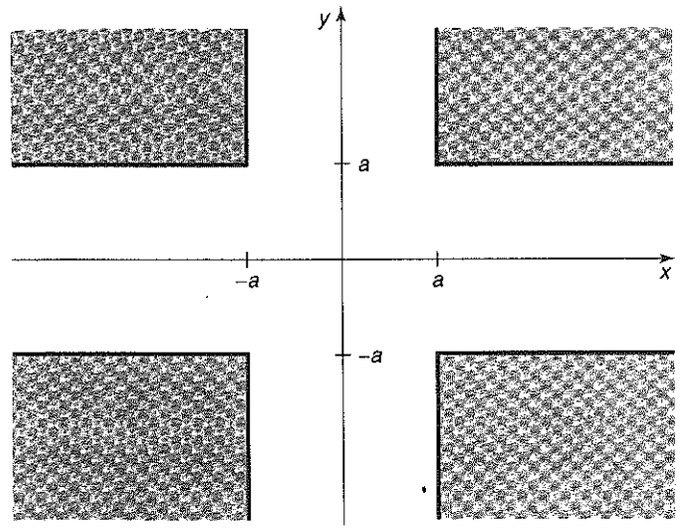
$$E_{eşik} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

olduğunu ve bu enerjiden daha *düşük* herhangi bir çözümün bağlı bir durum olması gerektiğini gösterin. *Yardım:* Bir koldan en uç noktaya kadar gidin (örneğin $x >> a$) ve Schrödinger denklemini değişkenlere ayırma yöntemi ile çözün; dalga fonksiyonu sonsuza ilerliyorsa, x'e olan bağımlılığı $k_x > 0$ olmak üzere $\exp(ik_x x)$ şeklinde olmalıdır.

---

[17] Müyon katalizörlü füzyon olayını açıklayan klasikleşmiş makale için, J. D. Jackson, *Phys. Rev.* **106**, 330 (1957); çok daha yeni ve popüler bir derleme için, J. Rafelski and S. Jones, *Scientific American*, November 1987, 84. sayfaya bakınız.

[18] Bu model R. L. Schult *et al. Phys. Rev. B* **39**, 5476 (1989) makalesinden alınmıştır. Kuantum tünellemesi varlığında, klasik olarak bağlı bir durum bağlı olmaktan çıkar. Öte yandan, klasik olarak bağlı *olmayan* bir durum kuantum mekaniksel olarak *bağlı* bir durumdur.



ŞEKİL 7.8: 7.20 nolu problem için haç şekline sahip bölge.

(b) Şimdi varyasyon ilkesini kullanarak, taban durum enerjisinin $E_{\text{eşik}}$ değerinden küçük olduğunu gösterin. Bunun için Krishna Rajagopal'ın önerdiği aşağıdaki deneme fonksiyonunu kullanın:

$$\psi(x,y) = A \begin{cases} (1-|xy|/a^2)e^{-\alpha}, & |x| \le a \text{ ve } |y| \le a \\ (1-|x|/a)e^{-\alpha|y|/a}, & |x| \le a \text{ ve } |y| > a \\ (1-|y|/a)e^{-\alpha|x|/a}, & |x| > a \text{ ve } |y| \le a \\ 0, & \text{diğer yerlerde.} \end{cases}$$

A'yı belirlemek için dalga fonksiyonunu normlayın ve H'nın beklenen değerini hesaplayın.

Yanıt:

$$\langle H \rangle = \frac{3\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{\alpha^2+2\alpha+3}{6+11\alpha}\right).$$

Şimdi bunun α'ya göre en düşük değerini arayın ve sonucun $E_{\text{eşik}}$ değerinden küçük olduğunu gösterin. *Yardım:* Problemin simetri avantajını kullanın. Yani, açık bölgenin sadece 1/8'i üzerinden integrali almanız gerekecek. Çünkü diğer 7 integral aynı sonucu verecektir. Yalnız deneme fonksiyonu *sürekli* iken, *türevlerinin süreksiz* olduğuna dikkat edin. $x = 0$, $y = 0$, $x = \pm a$ ve $y = \pm a$ noktalarında "çatı hatları" vardır ve bu noktalarda 7.3 nolu örnekte verilen tekniği kullanmak durumunda kalacaksınız.

8. BÖLÜM

WKB YAKLAŞIKLIĞI

WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin)[1] yöntemi bir boyutta zamandan bağımsız Schrödinger denklemine yaklaşık çözümler elde etmek için kullanılan bir tekniktir. Aynı ana fikir başka birçok diferansiyel denkleme ve üç boyutta Schrödinger denkleminin radyal kısmına uygulanabilir. Bu yöntem özellikle bağlı durum enerjilerinin ve potansiyel engellerinden tünelleme hızlarının hesaplanmasında kullanılır.

Ana fikir şöyledir: $V(x)$ potansiyelinin *sabit* olduğu bir bölgede hareket eden E enerjili bir parçacığı düşünün. Eğer $E > V$ ise, dalga fonksiyonunun şekli aşağıdaki gibidir:

$$k \equiv \sqrt{2m(E-V)}/\hbar \quad \text{olmak üzere,} \quad \psi(x) = Ae^{\pm ikx}.$$

Artı işareti parçacığın sağa doğru ve eksi işareti ise parçacığın sola doğru hareket ettiğini belirtir. Genel çözüm, doğal olarak bu iki çözümün lineer kombinasyonudur. Dalga fonksiyonu sabit dalga boylu ($\lambda = 2\pi/k$) ve sabit genlikle (A) salınan bir dalga özelliğine sahip. Şimdi $V(x)$'in sabit *olmadığını*, ancak λ ile karşılaştırıldığında oldukça yavaş değiştiğini, yani birçok tam dalga boyu sığabilen bir bölge üzerinde potansiyelin *esasen* sabit olduğunu varsayalım. Bu durumda, ψ'nin dalga boyu ve genliğinin x ile yavaşça değişen bir sinüs dalgası olarak kaldığını varsaymak akla yatkın bir şeydir. İşte WKB yaklaşıklığındaki ilham kaynağı budur. Aslında, yöntem x'e bağımlılığı iki farklı düzeyde ortaya koyar: yavaşça değişen genlik ve dalga boyu ile *ayarlanmış* (modüle edilmiş) hızlı salınımlar.

[1] Hollanda'da KWB, Fransa'da BWK ve İngiltere'de JWKB (J Jeffres için) olarak bilinir.

Benzer şekilde, eğer $E < V$ (V sabit) ise, ψ üstel fonksiyon şeklindedir:

$$\kappa \equiv \sqrt{2m(V-E)}/\hbar \quad \text{olmak üzere,} \quad \psi(x) = Ae^{\pm \kappa x}.$$

Ve eğer V sabit olmayıp, $1/\kappa$'ya göre yavaşça değişiyor ise, çözüm *pratikte* üstel fonksiyon olarak kalır. Fakat A ve κ bu durumda x'in yavaşça değişen fonksiyonları olur.

Tüm bu planın çökmeye mahkum olduğu bir bölge var ve o da $E \approx V$ olduğu klasik **dönüm noktasının** çok yakın civarıdır. Çünkü bu bölgede λ ya da $1/\kappa$ sonsuza gider ve $V(x)$ için artık λ'ya kıyasla "yavaşça" değiştiğini söylemek mümkün değildir. Biraz sonra göreceğimiz gibi, elde edilecek sonuçları basit ve uygulanması kolay olmasına rağmen, WKB yaklaşımının en zor yönü dönüm noktalarının uygun bir şekilde irdelenmesidir.

8.1 "KLASİK" BÖLGE

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi tekrar yazılabilir:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \qquad [8.1]$$

Burada

$$p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]} \qquad [8.2]$$

dir ve toplam E ve $V(x)$ potansiyel enerjisine sahip bir parçacığın klasik momentum ifadesidir. Şimdilik, $p(x)$'in *reel* olmasını sağlamak için, $E > V(x)$ olduğunu varsayacağım. 8.1 nolu şekilde görüldüğü gibi, klasik olarak parçacık x'in ancak bu aralığında bulunabileceği için, bu koşulun sağlandığı bölge "klasik" bölge olarak adlandırılır. Genel olarak ψ herhangi bir kompleks fonksiyondur. Bu fonksiyonu her ikisi de *reel* olan $A(x)$ *genliği* ve $\phi(x)$ *fazı* cinsinden ifade edebiliriz:

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}. \qquad [8.3]$$

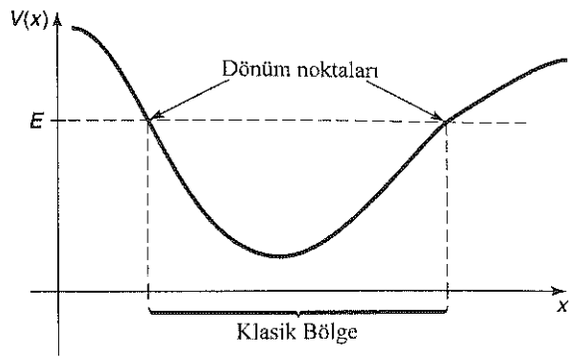
(′) simgesini x'e göre türevi belirtmek için kullanırsak:

$$\frac{d\psi}{dx} = (A' + iA\phi')e^{i\phi}$$

ve

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = [A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2]e^{i\phi} \qquad [8.4]$$

elde ederiz. Bunu 8.1 nolu denkleme yerleştirdiğimizde,



ŞEKİL 8.1: Klasik olarak parçacık $E \geq V(x)$ olduğu bölgede bulunabilir.

$$A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A \qquad [8.5]$$

elde ederiz. Bu, biri reel kısım ve diğeri de sanal kısım için olmak üzere iki ayrı denkleme eşdeğerdir:

$$A'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A \quad \text{ya da} \quad A'' = A\left[(\phi')^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}\right] \qquad [8.6]$$

ve

$$2A'\phi' + A\phi'' = 0, \text{ ya da } \left(A^2\phi'\right)' = 0. \qquad [8.7]$$

8.6 ve 8.7 nolu denklemler asıl Schrödinger denklemine eşdeğerdir. İkinci denklem kolaylıkla çözülebilir:

$$A^2\phi' = C^2 \quad \text{ya da} \quad A = \frac{C}{\sqrt{\phi'}} \qquad [8.8]$$

ve burada C *reel* bir sabittir. Birinci denklem (8.6 nolu denklem) genel olarak çözülebilen bir denklem değildir. Bu nedenle bir yaklaşım yapmak gerekir: A'' terimi göz ardı edilebilsin diye *A genliğinin çok yavaş değiştiğini varsayarız*. Bununla aslında tam olarak A''/A'nın hem $(\phi')^2$'den hem de $p^2/\hbar^2$'den çok daha ufak olduğunu varsayıyoruz. Bu durumda 8.6 nolu denklemin sol tarafını düşürebiliriz ve elimizde

$$(\phi')^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \quad \text{ya da} \quad \frac{d\phi}{dx} = \pm\frac{p}{\hbar}$$

kalır. Böylece

$$\phi(x) = \pm\frac{1}{\hbar}\int p(x)\,dx \qquad [8.9]$$

olur. Şimdilik integrali *belirsiz* integral olarak yazacağım, çünkü herhangi bir sabit C'nin içine dahil edilebilir ve sonunda C kompleks bir sayıya dönüşebilir. Sonuç olarak

$$\boxed{\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{p(x)}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p(x)\,dx}} \qquad [8.10]$$

olur ve yaklaşık genel çözüm bu iki terimin (+, –) lineer kombinasyonu olacaktır.

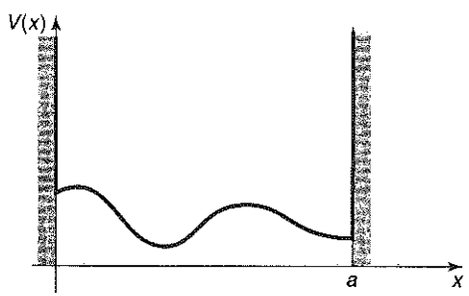
Burada dikkatinizi çekmek istediğim şey,

$$|\psi(x)|^2 \cong \frac{|C|^2}{p(x)} \qquad [8.11]$$

ifadesinin parçacığı x noktasında bulma olasılığının bu noktadaki klasik momentumu ve dolayısıyla hızı ile ters orantılı olduğunu söylemesidir. Bu aynen beklediğimiz bir şeydir. Parçacık hızlı hareket ettiği yerlerde uzun süreli kalmaz ve bu nedenle bu bölgelerde parçacığın yakalanma olasılığı küçüktür. Aslında, bazı durumlarda WKB yaklaşıklığının türetilmesine diferansiyel denklemde A'' terimini düşürerek başlamak yerine doğrudan bu "yarı klasik" gözlemden başlanır. İlk yaklaşım matematiksel olarak daha açık olmasına rağmen, sonraki yaklaşım daha uygun fiziksel açıklamalar sunar.

Örnek 8.1 İki dik duvarlı potansiyel kuyusu: 8.2 nolu şekilde gösterildiği gibi, yamru yumru bir tabanı olan sonsuz kare kuyu potansiyelimiz olsun:

$$V(x) = \begin{cases} \text{herhangi belli bir fonksiyon}, & 0 < x < a \\ \infty & \text{, diğer yerlerde.} \end{cases} \qquad [8.12]$$



ŞEKİL 8.2: Yamru yumru tabanlı sonsuz kare kuyu potansiyeli.

$E > V(x)$ olduğunu varsaydığımız kuyu içerisinde, dalga fonksiyonu

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[C_+e^{i\phi(x)} + C_-e^{-i\phi(x)}\right]$$

şeklindedir. Ya da çok daha uygun şekilde yazmak istersek

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[C_1\sin\phi(x) + C_2\cos\phi(x)\right] \qquad [8.13]$$

olur. Bu ifadede

$$\phi(x) = \frac{1}{\hbar}\int_0^x p(x')\,dx' \qquad [8.14]$$

olarak verilir. Burada integrale uygun bir alt sınır koyabilmek için daha önce bahsedilen serbestlikten faydalandık. $\psi(x)$, $x = 0$'da sıfır olmalı ve bundan dolayı ($\phi(0) = 0$ olduğundan) $C_2 = 0$ olur. Ayrıca, $\psi(x)$, $x = a$'da sıfıra gider, bu da

$$\phi(a) = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \ldots) \qquad [8.15]$$

sonucuna yol açar.

Sonuç:

$$\boxed{\int_0^a p(x)\,dx = n\pi\hbar.} \qquad [8.16]$$

Bu kuantumlama koşulu izin verilen enerji değerlerini yaklaşık olarak belirler.

Örneğin, eğer kuyunun tabanı *düz* ($V(x) = 0$) ise, $p(x) = \sqrt{2mE}$ (bir sabit) olur ve 8.16 nolu denklemden $pa = n\pi\hbar$ bulunur. Ya da

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

olur ve bu da sonsuz kare kuyu potansiyeli için daha önce 2.27 nolu denklem ile elde edilmiş ifadenin aynısıdır. Bu durumda WKB yaklaşıklığı *kesin* çözümü verir. Bu durum için doğru dalga fonksiyonunun genliği *sabittir* ve dolayısıyla A'''nü düşürmek bize hiçbir şeye mal olmaz.

***Problem 8.1** WKB yaklaşıklığını kullanarak, 6.3 nolu şekilde gösterilen, V_0 yüksekliğinde ve kuyunun yarısı boyunca uzanan bir raf içeren sonsuz kare kuyu potansiyeli için izin verilen E_n enerjilerini hesaplayın.

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2, \\ 0, & a/2 < x < a, \\ \infty, & \text{diğer yerlerde.} \end{cases}$$

Yanıtınızı V_0 ve $E_n^0 \equiv (n\pi\hbar)^2/2ma^2$ cinsinden ifade edin. Burada E_n^0 içerisinde *raf olmayan* sonsuz kare kuyu için *n-inci* izin verilen enerji değeridir. $E_1^0 > V_0$ olduğunu ancak $E_n >> V_0$ *olmadığını* varsayın. Sonucunuzu 6.1 nolu örnekte birinci dereceden tedirgeme teorisini kullanarak elde ettiğimiz sonuç ile karşılaştırın. Her iki sonucun V_0'ın çok küçük olduğu (tedirgeme teorisi rejimi) durumda ya da n'nin çok büyük olduğu (WKB–yarı klasik rejim) durumunda birbirleriyle uyumlu olduğuna dikkat edin.

****Problem 8.2** WKB'nın yol gösterici bir başka türetimi $\hbar$'nin kuvvetleri şeklinde bir açılıma dayanır. $\psi = A\exp(\pm ipx/\hbar)$ serbest parçacık dalga fonksiyonundan hareketle, $f(x)$ *kompleks* bir fonksiyon olmak üzere

$$\psi(x) = e^{if(x)/\hbar}$$

yazarız. Sıfır olmayan *herhangi bir* fonksiyon bu şekilde ifade edilebileceğinden, burada genelleştirme açısından hiçbir kaybımızın olmadığına dikkat edin.

(a) Bunu 8.1 nolu denklem ile verilen formdaki Schrödinger denkleminde yerine koyarak,

$$i\hbar f'' - (f')^2 + p^2 = 0$$

olduğunu gösterin.

(b) $f(x)$'i $\hbar$'nin kuvvetleri şeklinde seriye açın:

$$f(x) = f_0(x) + \hbar f_1(x) + \hbar^2 f_2(x) + \cdots$$

ve $\hbar$'nin benzer kuvvetlerini bir araya toplayarak,

$$(f_0')^2 = p^2, \quad if_0'' = 2f_0'f_1', \quad if_1'' = 2f_0'f_2' + (f_1')^2, \text{ vs.}$$

olduğunu gösterin.

(c) $f_0(x)$ ve $f_1(x)$ için çözümü yapın ve $\hbar$'nin birinci dereceden kuvveti için 8.10 nolu denklemi tekrar elde ettiğinizi gösterin.

Not: Negatif bir sayının logaritması, n tek bir tamsayı olmak üzere $ln(-z) = lnz + in\pi$ olarak tanımlanır. Eğer bu ifade sizi için yeni ise, her iki tarafın eksponansiyelini alın ve o zaman nereden geldiğini görürsünüz.

8.2 TÜNELLEME

Şu ana kadar $p(x)$'in reel olmasını sağlamak için, $E > V$ olduğunu varsaydım. Öte yandan, $E < V$ olduğu klasik *olmayan* bölge için sonucu kolaylıkla yazabiliriz. 8.10 nolu

denklemde olduğu gibi aynıdır, sadece $p(x)$ *sanaldır*:[2]

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar}\int |p(x)|\,dx}. \qquad [8.17]$$

Örneğin 8.3 nolu şekilde gösterilen tepesi yamru yumru olan dikdörtgen potansiyel engelinden saçılma problemini ele alın. Engelin sol tarafında ($x < 0$):

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \qquad [8.18]$$

Burada A gelen dalganın genliği, B yansıyan dalganın genliğidir ve $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ (2.5. Kesim). Engelin sağ tarafında ($x > a$),

$$\psi(x) = Fe^{ikx}; \qquad [8.19]$$

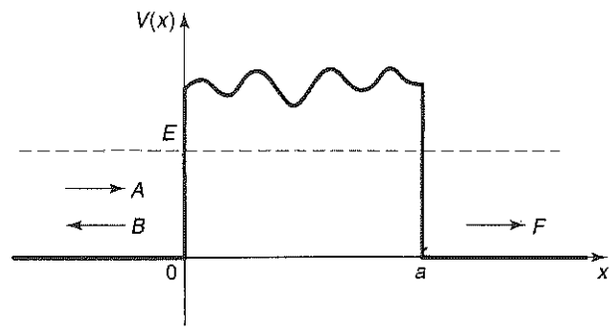
F geçen dalganın genliğidir ve geçiş olasılığı

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \qquad [8.20]$$

olur. $0 \le x \le a$ tünelleme bölgesinde, WKB yaklaşıklığı

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|\,dx'} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|\,dx'} \qquad [8.21]$$

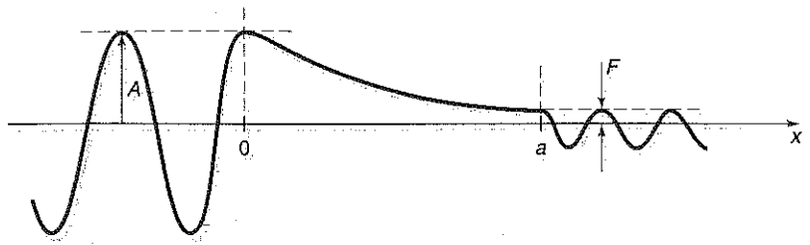
sonucunu verir.



ŞEKİL 8.3: Tepesi yamru yumru olan dikdörtgen potansiyel engelinden saçılma.

---

[2] Bu durumda dalga fonksiyonu *reel* ve *yeterli* olmasına rağmen, 8.6 ve 8.7 nolu denklemlere olan benzerlik 8.5 nolu denklemden kaynaklanmıyor. Eğer bu sizi rahatsız ediyorsa, 8.2 nolu problemde verilen seçenek üzerinde çalışın.



ŞEKİL 8.4: Yüksek ve geniş bir engelden saçılan bir dalganın göz kararı şekli.

Eğer engel çok yüksek ya da çok geniş ise, yani tünelleme olasılığı düşük ise, üstel olarak *artan* terimin katsayısı (C) küçük olmalı (aslında engel *sonsuz* genişlikte olsaydı, bu katsayı *sıfır* olurdu) ve bu durumda dalga fonksiyonu 8.4 nolu şekilde gösterildiği gibi olurdu.[3] Esasen klasik olmayan bölgede üstel fonksiyondaki toplam azalma gelen ve geçen dalgaların bağıl genliklerini belirler:

$$\frac{|F|}{|A|} \sim e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^a |p(x')|\,dx'}.$$

Böylece

$$\boxed{T \cong e^{-2\gamma}, \qquad \gamma \equiv \frac{1}{\hbar}\int_0^a |p(x)|\,dx} \qquad [8.22]$$

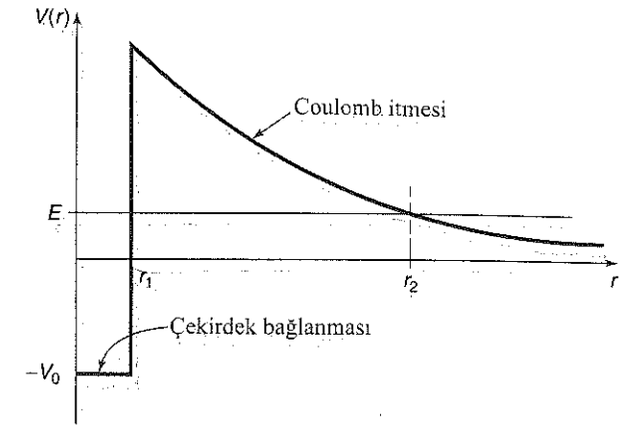
olur.

Örnek 8.2 Alfa bozunmasının Gamow teorisi:[4] 1928 yılında George Gamow ve bundan bağımsız olarak Condon ve Gurney, 8.22 nolu denklemi kullanarak alfa bozunmasının[5] (İki proton ve iki nötron'dan oluşan alfa parçacıklarının belli bir raydoaktif çekirdekten kendiliğinden salınması) ilk başarılı açıklamasını yaptılar. Alfa parçacığı $2e$ pozitif yükü taşıdığından, çekirdek bağ kuvvetlerinden kurtulabileceği bir uzaklığa gittiği anda Ze yüklü çekirdeğin elektrik kuvvetiyle itilecektir. Ama önce, uranyumda olduğu gibi, salınan alfa parçacığı enerjisinden iki kat daha büyük olan bir potansiyel engeliyle muhatap olmak zorunda kalacaktır. Gamow, çekici çekirdek kuvvetini temsil eden bu duvarını çekirdek yarıçapı r_1'e kadar uzanan ve r_1'de itici bir Coulomb potansiyelinin kuyruğu ile birleşen sonlu bir kare kuyu potansiyel duvarına benzetti ve alfa parçacıklarının çekirdekten kaçma mekanizmalarını kuantum tünellemesi olarak tanımladı. Sırası gelmişken bunun kuantum mekaniğinin çekirdek fiziğine ilk uygulaması olduğunu hatırlatmak isterim.

[3] Bu sezgisel argüman çok daha kesin yapılabilir (8.1 nolu probleme bakınız).

[4] Çok daha kapsamlı bir tartışma ve başka formülasyon seçenekleri için, Barry R. Holstein, *Am. J. Phys.* **64**, 1061 (1996)'ya bakınız.

[5] İlgi çekici tarihi bir özet için, Eugen Merzbacher "The Early Hristory of Quantum Tunneling", *Physics Today*, August 2002, 44. sayfaya bakınız.



ŞEKİL 8.5: Radyoaktif bir çekirdekte bulunan alfa parçacığının potansiyel enerjisi için Gamow'un geliştirdiği model.

E salınan alfa parçacığın enerjisi ise, dışarıdaki dönüm noktası (r_2) aşağıdaki ifade ile belirlenir:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2Ze^2}{r_2} = E. \qquad [8.23]$$

8.22 nolu denklemdeki γ üsteli aşikar olarak[6]

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{2m\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2Ze^2}{r} - E\right)}\,dr = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{\frac{r_2}{r} - 1}\,dr$$

olur. Bu integral $r \equiv r_2\sin^2 u$ değişken değişimiyle çözülebilir ve sonuç

$$\gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[r_2\left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right) - \sqrt{r_1(r_2 - r_1)}\right] \qquad [8.24]$$

olur. Genel olarak $r_1 << r_2$ ve bu sonucu küçük açı yaklaşımı ($\sin\epsilon \cong \epsilon$) yaparak daha da sadeleştirebiliriz:

$$\gamma \cong \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[\frac{\pi}{2}r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2}\right] = K_1\frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2\sqrt{Zr_1} \qquad [8.25]$$

[6] Bu durumda potansiyel, engelin sol tarafında sıfıra gitmez (üstelik, bu gerçekte üç boyutlu bir problemdir). Buna rağmen ihtiyacımız olan tek şey, 8.22 nolu denklem ile verilen ana fikirdir.

Burada

$$K_1 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar} = 1.980 \text{ MeV}^{1/2} \qquad [8.26]$$

ve

$$K_2 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^{1/2}\frac{4\sqrt{m}}{\hbar} = 1.485 \text{ fm}^{-1/2}. \qquad [8.27]$$

[Bir fermi (fm) 10^{-5} m'dir ki bu da tipik bir çekirdeğin boyutudur.]

Alfa parçacıklarının çekirdek içerisinde v ortalama hızı ile hareket ettiklerini düşünürsek, "duvar" ile ortalama "çarpışma" zamanı yaklaşık olarak $2r_1/v$'dir ve dolayısıyla çarpışma *frekansı* $v/2r_1$ olur. Her bir çarpışmada kaçış olasılığı $e^{-2\gamma}$'dır. Böylece birim zamanda salınma olasılığı $(v/2r_1)e^{-2\gamma}$ olur ve bu da ana (bozunan) çekirdeğin **yarılanma ömrünün** yaklaşık olarak

$$\tau = \frac{2r_1}{v}e^{2\gamma} \qquad [8.28]$$

olması demektir. Ne yazık ki, v'yi bilmiyoruz. Ancak, bunun hiç de önemi yoktur. Çünkü bir radyoaktif çekirdekten diğerine giderken, üstel fonksiyon *çok uzun* bir mesafe üzerinden değişiyor. Bununla kıyaslandığında, v'de ki değişim önemsiz kalır. Özellikle, deneysel olarak ölçülen yarılanma ömrünün *logaritmasını* $1/\sqrt{E}$'ye göre çizersek, sonuç 8.25 ve 8.28 nolu denklemlerden beklendiği gibi mükemmel bir doğru olur (8.6 nolu şekil).[7]

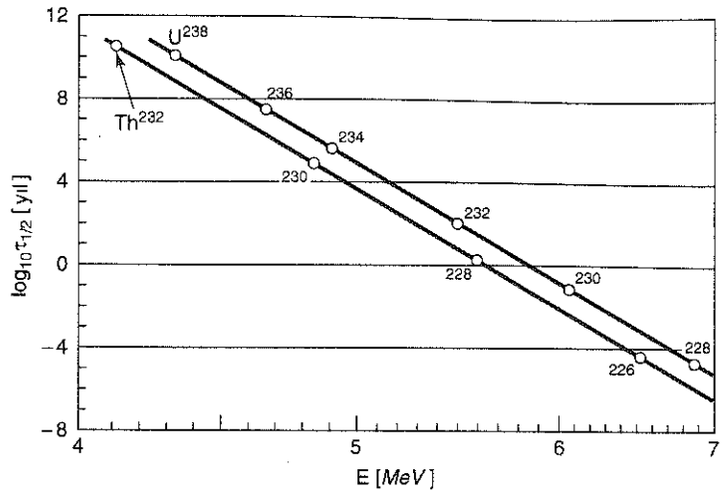
***Problem 8.3** 8.22 nolu denklemi kullanarak, $V_0 > E$ yüksekliğinde ve $2a$ genişliğinde sonlu bir kare potansiyel engelinden E enerjili bir parçacığın yaklaşık geçiş olasılığını hesaplayın. Yanıtınızı 2.33 nolu problemde elde edilen ve $T << 1$ limitinde WKB rejimine dönüşen kesin sonuçla karşılaştırın.

****Problem 8.4** 8.25 ve 8.28 nolu denklemleri kullanarak U^{238} ve Po^{212}'nın yarılanma ömürlerini hesaplayın. *Yardım*: Çekirdeğin yoğunluğu nispeten sabittir (bir başka deyişle bütün çekirdekler için aynıdır). Böylece $(r_1)^3$ nötron ve proton sayısının toplamı olan A ile orantılı olur. Deneysel olarak:

$$r_1 \cong (1.07 \text{ fm})A^{1/3}. \qquad [8.29]$$

---

[7] David Park, *Introduction to the Quantum Theory*, 3rd ed. McGraw-Hill (1992)'den alınmıştır ve I. Perlman and J. O. Rasmussen, "Alpha Radroactivity", *Encyclopedia of Physics*, Vol. **42**, Springer (1957)'den uyarlanmıştır. Bu malzeme The McGraw-Hill şirketinin izni ile tekrar üretilmiştir.



ŞEKİL 8.6: Uranyum ve toryum için yarılanma ömrünün logaritmasının $1/\sqrt{E}$ 'ye göre grafiği. Burada E salınan alfa parçacığının enerjisidir.

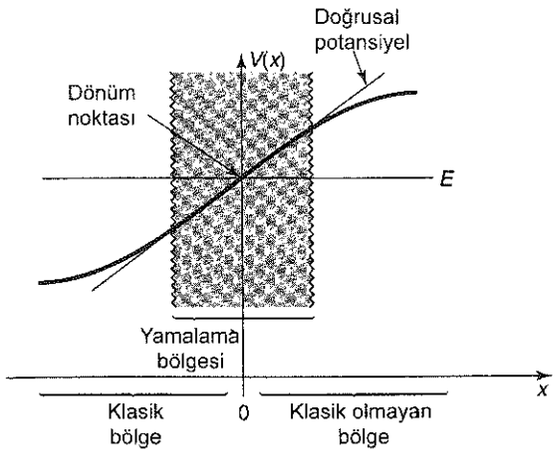
Salınan alfa parçacığın enerjisi, $E = mc^2$ Einstein formülü kullanılarak bulunabilir:

$$E = m_a c^2 - m_k c^2 - m_a c^2. \qquad [8.30]$$

Burada m_a ana çekirdeğin kütlesi, m_k kız çekirdeğin kütlesi ve m_a alfa parçacığının yani He^4 çekirdeğinin kütlesidir. Kız çekirdeğin ne olduğunu belirlemek için alfa parçacığının iki proton ve iki nötron alıp götürdüğünü ve bundan dolayı Z'nin 2 ve A'nın 4 azalması gerektiğine dikkat edin. Bununla birlikte ilgili çekirdek kütlelerine bakın. v'yi belirlemek için, $E = 1/2\ m_a v^2$'yi kullanabiliriz; bu yaklaşım çekirdek içerisindeki negatif potansiyel enerjiyi görmemezlikten gelir ve doğal olarak v için *daha küçük değer* verir. Ancak, şu aşamada yapabileceğimiz en iyi şey budur. Aklıma gelmişken deneysel yarılanma ömürleri sırasıyla, 6×10^9 yıl ve 0.5 μs'dir.

8.3 BAĞLANTI FORMÜLLERİ

Şu ana kadar olan tartışmada, "dış" çözümlerin kolay ve sınır koşullarının sorunsuz olabilmesini sağlayabilmek için, potansiyel kuyusunun (ya da potansiyel engelinin) "duvar"larının *dik* olduklarını varsaydım. 8.16 ve 8.22 nolu denklemlerle elde ettiğimiz temel sonuçlarımızın kenarların o kadar keskin olmadığı durumlarda bile, makul derecede doğru olduğu görüldü (Gamow teorisi içinde böyle bir durum için uygulama yapıldı). Yine de "klasik" bölgenin "klasik olmayan" bölge ile birleştiği ve de WKB yaklaşıklığının çalışmadığı $E = V$ dönüm noktasında dalga fonksiyonunun nasıl bir davranış gösterdiğini



ŞEKİL 8.7: Sağ taraftaki dönüm noktasının büyütülmüş görünüşü.

daha yakından incelemek ilginç olabilir. Bu kesimde, bağlı durum problemini (8.1 nolu şekil) ele alacağım; saçılma problemini (8.10 nolu problem)[8] siz kendiniz yapacaksınız.

İşimizi kolaylaştırmak için sağ taraftaki dönüm noktasını $x = 0$'a yerleşecek şekilde itelim (8.7 nolu şekil). WKB yaklaşıklığında,

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[Be^{\frac{i}{\hbar}\int_x^0 p(x')\,dx'} + Ce^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^0 p(x')\,dx'}\right], & x < 0, \\ \dfrac{1}{\sqrt{|p(x)|}} De^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|\,dx'}, & x > 0 \end{cases} \qquad [8.31]$$

olur. $x > 0$ olan *tüm* x değerleri için $V(x)$'in E'den büyük olduğunu varsaydığımızda bu bölgede pozitif üstelli terimi atabiliriz, çünkü bu terim $x \to \infty$ iken ıraksar. Asıl görevimiz sınırda iki çözümü birleştirmektir. Ancak, burada çok ciddi bir güçlük var: WKB yaklaşıklığında, $p(x) \to 0$ gittiği dönüm noktasında ψ *sonsuza* gider. Tabii ki *gerçek* dalga fonksiyonu böyle vahşi bir davranış göstermez: Beklenildiği gibi, WKB yaklaşıklığı bir dönüm noktası civarında çalışmıyor. Üstelik, izin verilen enerji değerleri tamamıyla dönüm noktalarındaki sınır koşulları ile belirlenir. O zaman yapmamız gereken şey, iki WKB çözümünü dönüm noktasının üzerinde oturan bir "yamalama" dalga fonksiyonu kullanarak birleştirmektir.

Sadece orijin civarında bir ψ_y yamalama dalga fonksiyonuna ihtiyacımız olduğundan, *potansiyeli yaklaşık olarak bir doğru ile ifade edeceğiz*:

$$V(x) \cong E + V'(0)x \qquad [8.32]$$

[8] *Uyarı:* Aşağıdaki argüman oldukça teknik içeriklidir ve ilk okumada bunu geçebilirsiniz.

ve bu doğrusallaştırılmış V için Schrödinger denklemini çözelim:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_y}{dx^2} + [E + V'(0)x]\psi_y = E\psi_y$$

ya da

$$\frac{d^2\psi_y}{dx^2} = \alpha^3 x\psi_y. \qquad [8.33]$$

Burada

$$\alpha \equiv \left[\frac{2m}{\hbar^2}V'(0)\right]^{1/3}. \qquad [8.34]$$

olarak verilir. α'lar

$$z \equiv \alpha x \qquad [8.35]$$

tanımı ile bağımsız değişken içine alınabilirler ve

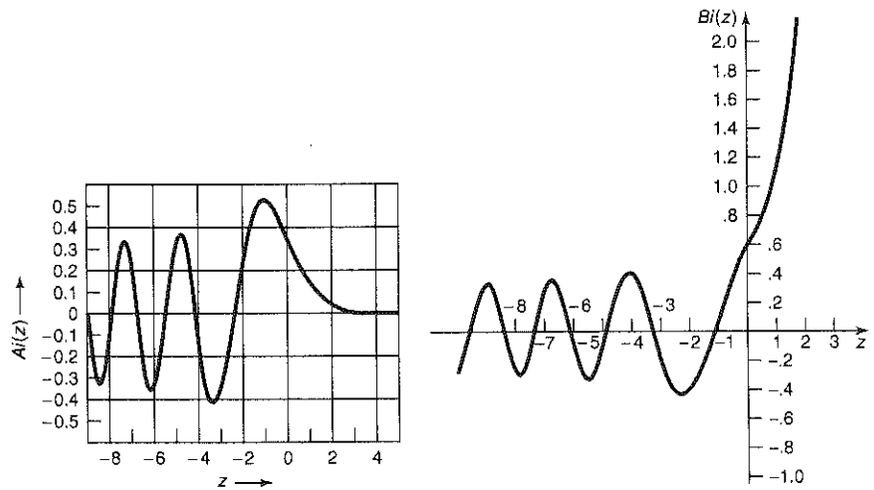
$$\frac{d^2\psi_y}{dz^2} = z\psi_y \qquad [8.36]$$

olur. Bu **Airy denklemi**dir ve çözümleri **Airy fonksiyonları**[9] olarak adlandırılır. Airy denklemi ikinci dereceden bir diferansiyel denklem olduğundan iki tane lineer bağımsız Airy fonksiyonu vardır: $Ai(z)$ ve $Bi(z)$.

TABLO 8.1: Airy fonksiyonlarının bazı özellikleri

Diferansiyel Denklem:	$\dfrac{d^2y}{dz^2} = zy.$
Çözümler:	*Ai(z) ve Bi(z) Airy fonksiyonlarının lineer kombinasyonları*
İntegral Temsili:	$Ai(z) = \dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int_0^\infty \cos\left(\frac{s^3}{3} + sz\right) ds,$
	$Bi(z) = \dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int_0^\infty \left[e^{-\frac{s^3}{3}+sz} + \sin\left(\frac{s^3}{3} + sz\right)\right] ds.$
Asimtotik Şekilleri:	
$Ai(z) \sim \dfrac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}}$ $Bi(z) \sim \dfrac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{\frac{2}{3}z^{3/2}}$	$z \gg 0;$
$Ai(z) \sim \dfrac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin\left[\dfrac{2}{3}(-z)^{3/2} + \dfrac{\pi}{4}\right]$ $Bi(z) \sim \dfrac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos\left[\dfrac{2}{3}(-z)^{3/2} + \dfrac{\pi}{4}\right]$	$z \ll 0.$

[9] *Klasik olarak*, doğrusal bir potansiyel sabit bir kuvvet ve dolayısıyla sabit bir ivme demektir. Bu da sıra dışı olası en basit hareket tipidir ve de temel mekaniğin *başlangıç* noktasıdır. *Kuantum* mekaniğinde aynı potansiyel alışık olunmayan transendental fonksiyonlar verir ve teoride sadece ikincil bir rol oynar.



ŞEKİL 8.8: Airy fonksiyonlarının grafiği.

1/3-üncü dereceden Bessel fonksiyonları ile ilişkili olan bu fonksiyonların bazı özellikleri 8.1 nolu tabloda listelenmiştir ve grafikleri de 8.8 nolu şekilde gösterilmiştir. Yamalama fonksiyonunun $Ai(z)$ ve $Bi(z)$ fonksiyonlarının lineer kombinasyonu olacağı aşikardır ve uygun seçilen a, b sabitleri için:

$$\psi_y(x) = aAi(\alpha x) + bBi(\alpha x). \qquad [8.37]$$

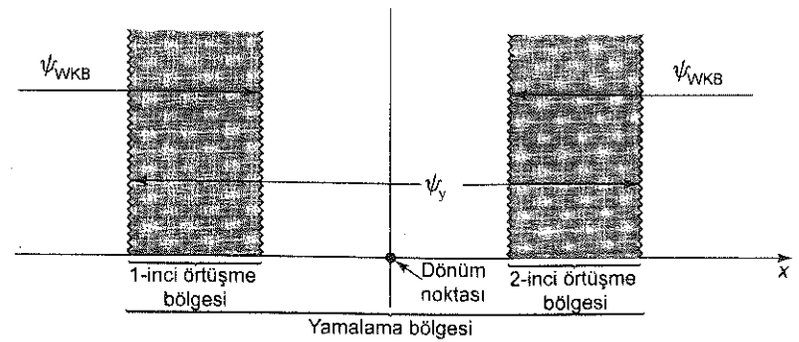
ψ_y orijin civarında yaklaşık dalga fonksiyonudur; şimdiki işimiz, bu fonksiyonu her iki tarafta örtüşmenin olduğu bölgelerdeki WKB çözümlerine benzetmektir (8.9 nolu şekle bakın). Örtüşmenin olduğu bu bölgeler, dönüm noktasına doğrusal potansiyel yaklaşımının makul sonuçlar verebileceği kadar yakın (böylece ψ_y gerçek dalga fonksiyonuna oldukça yakın bir dalga fonksiyonu olur) ve WKB yaklaşıklığını da güvenilir kılabilecek kadar uzaktır.[10] Örtüşme bölgelerinde 8.32 nolu denklem geçerlidir ve bundan dolayı 8.34 nolu denklemde kullanılan notasyonla

$$p(x) \cong \sqrt{2m(E - E - V'(0)x)} = \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{-x} \qquad [8.38]$$

olur. Özellikle 2-inci örtüşme bölgesinde,

$$\int_0^x |p(x')|\,dx' \cong \hbar\alpha^{3/2}\int_0^x \sqrt{x'}\,dx' = \frac{2}{3}\hbar(\alpha x)^{3/2}$$

[10] Bu hassas bir ikili bağ koşuludur ve ayrıca örtüşmenin olmayacağı bölgeleri oluşturabilecek potansiyeller düzenlemek de mümkündür. Ancak pratikte böyle durumlarla nadir karşılanır (8.8 nolu probleme bakın).



ŞEKİL 8.9: Yamalama bölgesi ve iki üst üste binme bölgesi.

ve bu nedenle WKB dalga fonksiyonu (8.31 nolu denklem)

$$\psi(x) \cong \frac{D}{\sqrt{\hbar}\alpha^{3/4}x^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \qquad [8.39]$$

şeklinde yazılabilir. Aynı zamanda, 8.1 nolu tablodan Airy fonksiyonlarının büyük z'ler için asimptotik formunu[11] kullanarak, 2-inci örtüşme bölgesinde yamalama fonksiyonu (8.37 nolu denklem)

$$\psi_y(x) \cong \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}}e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \qquad [8.40]$$

şeklinde elde ederiz. Bu iki çözümleri karşılaştırarak,

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha\hbar}}D \quad \text{ve} \quad b = 0 \qquad [8.41]$$

olduğunu görürüz.

Şimdi geriye dönüp işlemleri 1-inci örtüşmenin bölgesi için tekrarlayacağız. Yine $p(x)$, 8.38 nolu denklemde verildiği gibidir fakat bu kez *negatiftir*. Böylece

$$\int_x^0 p(x')\,dx' \cong \frac{2}{3}\hbar(-\alpha x)^{3/2} \qquad [8.42]$$

olur ve WKB dalga fonksiyonu (8.31 nolu denklem) da

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{\hbar}\alpha^{3/4}(-x)^{1/4}}\left[Be^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + Ce^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}}\right] \qquad [8.43]$$

[11] İlk bakışta bu bölgede *büyük* z yaklaşıklığını kullanmak garip gelebilir. Ne de olsa bu bölge $z = 0$ dönüm noktasına doğrusal potansiyel yaklaşıklığını geçerli kılabilecek kadar yakındır. Fakat burada argümanın αx olduğuna dikkat edin ve olayı dikkatlice incelendiğinizde (8.8 nolu probleme bakın) αx'in büyük olduğu ve de $V(x)$'i doğrusal bir çizgi ile temsil edebileceğiniz bir bölge bulursunuz.

şeklini alır. Aynı zamanda, büyük *negatif* z'ler için Airy fonksiyonunun asimptotik şeklini kullanarak (8.1 nolu tablo), yamalama fonksiyonu (8.37 nolu denklem) için $b = 0$ olmak üzere

$$\psi_\gamma(x) \cong \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right]$$
$$= \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \frac{1}{2i}\left[e^{i\pi/4} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} - e^{-i\pi/4} e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}}\right] \quad [8.44]$$

sonucunu elde ederiz. 1-inci örtüşme bölgesindeki WKB ve yamalama dalga fonksiyonlarının karşılaştırılması ile

$$\frac{a}{2i\sqrt{\pi}} e^{i\pi/4} = \frac{B}{\sqrt{\hbar\alpha}} \quad \text{ve} \quad \frac{-a}{2i\sqrt{\pi}} e^{-i\pi/4} = \frac{C}{\sqrt{\hbar\alpha}}$$

bulunur ya da 8.41 nolu denklem ile bulunan a yukarıda yerine yazılırsa

$$B = -ie^{i\pi/4} D \quad \text{ve} \quad C = ie^{-i\pi/4} D \quad [8.45]$$

sonucu elde edilir. Bunlar dönüm noktasının her iki tarafındaki WKB çözümlerini birleştiren **bağlantı formülleridir.** Ara bölgede köprü görevi yapan yamalama fonksiyonla işimiz bitti. Her şeyi D normlama sabiti cinsinden yazarak ve dönüm noktasını orijinden herhangi bir x_2 noktasına iterek, WKB dalga fonksiyonunu (8.31 nolu denklem) şöyle yazabiliriz:

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \dfrac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^{x_2} p(x')\,dx' + \dfrac{\pi}{4}\right], & x < x_2; \\ \dfrac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x_2}^{x} |p(x')|\,dx'\right], & x > x_2. \end{cases} \quad [8.46]$$

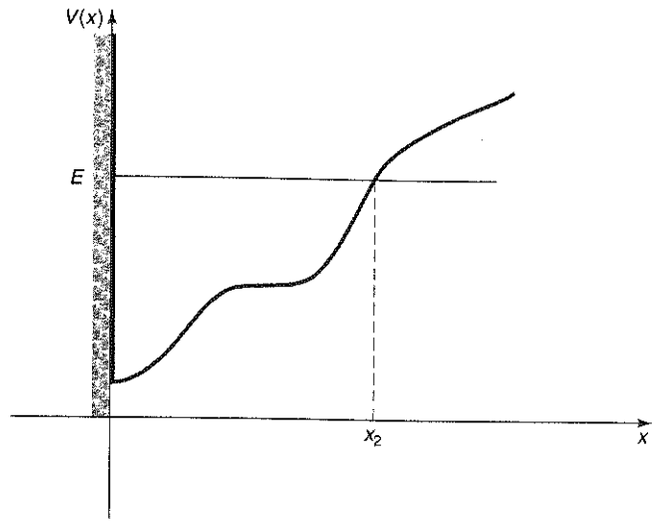
Örnek 8.3 Tek dik duvarlı potansiyel kuyusu: 8.10 nolu şekil ile verilen potansiyel kuyusunu ele alın: $x = 0$'da dik bir duvar var ve diğer taraf eğimli. Bu durumda $\psi(0) = 0$ olur ve böylece 8.46 nolu denklem

$$\therefore \quad \frac{1}{\hbar}\int_0^{x_2} p(x)\,dx + \frac{\pi}{4} = n\pi, \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

ya da

$$\boxed{\int_0^{x_2} p(x)\,dx = \left(n - \frac{1}{4}\right)\pi\hbar} \quad [8.47]$$

olduğunu söyler.



ŞEKİL 8.10: Tek dik duvarlı potansiyel kuyusu.

"Yarım harmonik salınıcı" örneğini göz önüne alalım:

$$V(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2, & x > 0 \\ \infty & \text{diğer yerlerde.} \end{cases} \quad [8.48]$$

Bu durumda

$$p(x) = \sqrt{2m[E - (1/2)m\omega^2 x^2]} = m\omega\sqrt{x_2^2 - x^2}$$

dir ve burada

$$x_2 = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}$$

dönüm noktasıdır. Böylece

$$\int_0^{x_2} p(x)\,dx = m\omega\int_0^{x_2} \sqrt{x_2^2 - x^2}\,dx = \frac{\pi}{4}m\omega x_2^2 = \frac{\pi E}{2\omega}$$

olur ve 8.47 nolu denklem ile verilen kuantumlama koşulu

$$E_n = \left(2n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(\frac{3}{2}, \frac{7}{2}, \frac{11}{2}, \ldots\right)\hbar\omega \quad [8.49]$$

elde edilir. Bu özel durumda WKB yaklaşıklığı aslında izin verilen *kesin* enerji değerlerini verir ve bunlar *tam* olarak harmonik salınıcının *tek* enerji değerleridir. (2.42 nolu probleme bakın).

Örnek 8.4 Dik duvarları olmayan potansiyel kuyusu: 8.46 nolu denklem potansiyel fonksiyonunun eğiminin *yukarıya* doğru olduğu bir dönüm noktasında (8.11 nolu şekil: (a)) WKB dalga fonksiyonlarının birleştirir. Aynı mantık *aşağı doğru* eğimli bir dönüm noktasına (8.11 nolu şekil: (b)) uygulandığında

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \dfrac{D'}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^{x_1} |p(x')|\,dx'\right], & x < x_1; \\ \dfrac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x_1}^{x} p(x')\,dx' + \dfrac{\pi}{4}\right], & x > x_1 \end{cases} \qquad [8.50]$$

sonucu elde edilir. Özellikle 8.11(c) nolu şekilde gösterildiği gibi bir potansiyel *kuyusunu* göz önüne alıyorsak, $x_1 < x < x_2$ "iç" bölgesinde dalga fonksiyonu *ya*

$$\theta_2(x) \equiv \frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')\,dx' + \frac{\pi}{4} \quad \text{olmak üzere,} \quad \psi(x) \cong \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin\theta_2(x).$$

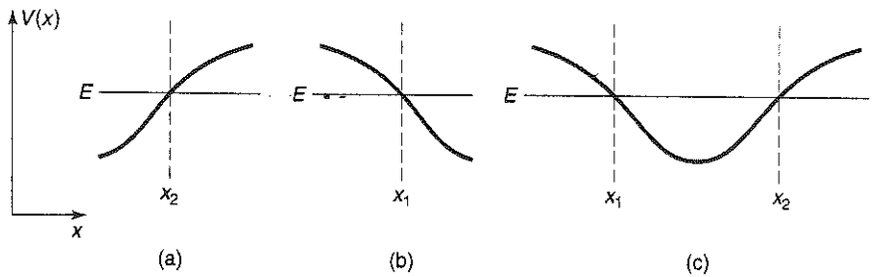
(8.46 nolu denklem) *ya da*

$$\theta_1(x) \equiv -\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')\,dx' - \frac{\pi}{4} \quad \text{olmak üzere,} \quad \psi(x) \cong \frac{-2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin\theta_1(x)$$

şeklinde yazılabilir (8.50 nolu denklem). Sinüs fonksiyonlarının argümanları aşikar olarak modül π'ye göre birbirine eşit olmalı:[12] $\theta_2 = \theta_1 + n\pi$. Bu da

$$\boxed{\int_{x_1}^{x_2} p(x)\,dx = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi\hbar, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots.} \qquad [8.51]$$

sonucuna yol açar.



ŞEKİL 8.11: Yukarı eğimli ve aşağı eğimli dönüm noktaları.

[12] 2π *değil* ve eksi işareti D ve D' normlama çarpanlarına dahil edilebilir.

Bu kuantumlama koşulu ile iki tarafı eğimli olan "tipik" potansiyel kuyusu için izin verilen enerjiler belirlenir. Bunun iki dik duvar (8.16 nolu denklem) ya da tek dik duvar (8.47 nolu denklem) için türettiğimiz formüllerden sadece n'den (0, 1/4, ya da 1/2) çıkartılan sayıda farklılığa yol açtığına dikkatinizi çekerim. WKB yaklaşıklığı en iyi yarı klasik (büyük n) rejimde çalıştığından, farklılık özden çok görünüştedir. Her hangi bir olayda, *Schrödinger denklemini hiç çözmeden* ve sadece tek bir integral hesabı ile izin verilen enerji değerlerini bulmamızı sağladığından, olağanüstü güçlü bir sonuçtur. Dalga fonksiyonunun kendisine de ihtiyacımız yok.

**Problem 8.5 Yerden elastik olarak seken m kütleli top probleminin kuantum mekaniksel benzerini ele alın.[13]

(a) Potansiyel enerjiyi yerden yüksekliğin (x) fonksiyonu olarak yazın? (potansiyel negatif x değerleri için *sonsuzdur*. Yani top hiçbir şekilde o bölgeye geçemez)

(b) Schödinger denklemini bu potansiyel için çözün ve yanıtınızı uygun Airy fonksiyonları cinsinden ifade edin. Burada $Bi(z)$'nin büyük z değerleri için ıraksadığına ve bu nedenle kabul edilir bir çözüm olmadığına dikkat edin. Ayrıca, $\psi(x)$'i normlamaya da gerek yok.

(c) g=9.80 m/s^2 ve m = 0.100 kg değerlerini kullanarak izin verilen ilk dört enerji değerini joule cinsinden üç anlamlı rakama kadar hesaplayın. *Yardım:* Milton Abramowitz and Irene A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1970), 478. sayfaya bakınız; notasyon 450. sayfada tanımlanmıştır.

(d) Bu kütleçekim alanı içindeki bir *elektronun* taban durum enerjisini eV cinsinden hesaplayın. Elektron ortalama olarak yerden ne kadar yüksektedir? *Yardım:* $\langle x\rangle$'i belirlemek için virial teoremini kullanın.

***Problem 8.6** WKB yaklaşıklığını kullanarak seken top problemini (8.5 nolu problem) inceleyin.

(a) İzin verilen E_n enerji değerlerini m, g ve $\hbar$ cinsinden belirleyin.

(b) 8.5 nolu problemin (c) şıkkında verilen özel değerleri yerine koyarak, ilk dört enerji düzeyi için elde edilen WKB yaklaşıklığı sonuçlarını "kesin" yanıtlar ile kıyaslayın.

(c) Topa yerden örneğin 1 metre yükseklik verebilmek için n kuantum sayısının ne kadar büyük olması gerektiğini bulun.

[13] Sıçrayan kuantum topu hakkında daha fazla bilgi için, J. Gea-Banacloche, *Am. J. Phys.* **67**, 776 (1999) ve N. Wheeler, "Classical/quantum dynamics in a uniform gravitational field" yayınlanmamış Reed College Report (2002)'ye bakınız. Bu her ne kadar yapay bir problem gibi görünse de, problem için nötronların kullanıldığı deneyler yapılmıştır. (V. V. Nesvizhevsky *et al.*, Nature **415**, 297 (2002)).

*Problem 8.7 WKB yaklaşıklığını kullanarak harmonik salınıcının izin verilen enerji değerlerini bulunuz.

Problem 8.8 ω frekanslı harmonik salınıcının n-inci durağan durumunda bulunan m kütleli bir parçacığı ele alın.

(a) x_2 dönüm noktasını bulun.

(b) Doğrusal potansiyel yaklaşımında %1'lik hataya varmadan (8.32 nolu denklem fakat bu kez dönüm noktası x_2 noktasında) önce dönüm noktasından ne kadar öteye (d) gidebilirsiniz? Yani

$$\frac{V(x_2+d)-V_{doğ}(x_2+d)}{V(x_2)}=0.01$$

ise, d nedir?

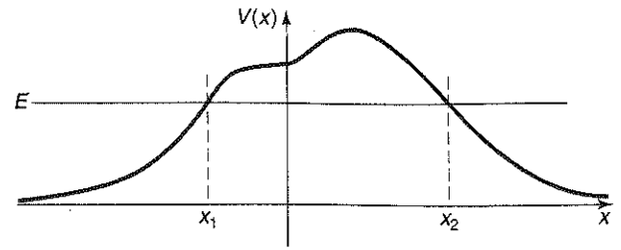
(c) $z \geq 5$ olduğu sürece, $Ai(z)$'nin asimptotik şekli % 1'e kadar doğru sonuç verir. (b) şıkkındaki d için $\alpha d \geq 5$ yapacak en küçük n değerini bulunuz. (Bundan büyük herhangi bir n değeri için doğrusal potansiyel yaklaşımının *ve* Airy fonksiyonunun büyük z şeklinin % 1'e kadar iyi sonuçlar verdiği örtüşme bölgesi vardır.)

**Problem 8.9 Aşağı eğimli bir dönüm noktası için bağlantı formüllerini çıkarın ve 8.50 nolu denklemi doğrulayın.

***Problem 8.10 Uygun bağlantı formülleri kullanarak, eğimli engelden (8.12 nolu şekil) saçılma problemini inceleyin. *Yardım:* WKB dalga fonksiyonunu aşağıdaki şekilde yazarak başlayın.

$$\psi(x)\cong\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[Ae^{\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_1}p(x')dx'}+Be^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_1}p(x')dx'}\right], & (x<x_1);\\ \dfrac{1}{\sqrt{|p(x)|}}\left[Ce^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}|p(x')|dx'}+De^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}|p(x')|dx'}\right], & (x_1<x<x_2);\\ \dfrac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[Fe^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_2}^{x}p(x')dx'}\right], & (x>x_2).\end{cases} \quad [8.52]$$

$C = 0$ olduğunu *varsaymayın*. $T = |F|^2/|A|^2$ tünelleme olasılığını hesaplayın ve sonucunuzun geniş ve yüksek bir engel durumunda 8.22 nolu denkleme indirgendiğini gösterin.



ŞEKİL 8.12: Eğimli duvarları olan bir engel.

8. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

**Problem 8.11 WKB yaklaşıklığını kullanarak, genel bir kuvvet yasasına uyan potansiyeller için izin verilen enerji değerlerini bulun:

$$V(x)=\alpha|x|^{\nu}$$

ve burada ν pozitif bir sayıdır. Sonucunuzu $\nu = 2$ için kontrol edin. *Yanıt:*[14]

$$E_n=\alpha\left[(n-1/2)\hbar\sqrt{\frac{\pi}{2m\alpha}}\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}+\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}+1\right)}\right]^{\left(\frac{2\nu}{\nu+2}\right)}. \quad [8.53]$$

**Problem 8.12 WKB yaklaşıklığını kullanarak, 2.51 nolu problemdeki potansiyel için bağlı durum enerjisini hesaplayın. Sonucu kesin yanıt ile kıyaslayın.

Yanıt: $-[(9/8)-(1/\sqrt{2})]\hbar^2a^2/m$.

Problem 8.13 Küresel simetrik potansiyeller için WKB yaklaşıklığını radyal kısma (4.37 nolu denklem) uygulayabiliriz. $l = 0$ olduğu durumda, 8.47 nolu denklemi

$$\int_0^{r_0}p(r)\,dr=(n-1/4)\pi\hbar \quad [8.54]$$

şeklinde kullanmak makuldür.[15] Burada r_0 dönüm noktasıdır (aslında $r = 0$ noktasını

[14] Her zaman olduğu gibi, WKB sonucu yarı klasik rejimde (büyük n) en doğru olanıdır. Özellikle, 8.53 nolu denklem, $n = 1$ taban durumunda çok iyi değildir. W. N. Mei. *Am. J. Phys.* **66**, 541 (1998)'e bakınız.

[15] WKB yaklaşıklığının radyal denkleme uygulanması burada değinmeyeceğim bazı hassas sorunlar yaratır. Bu konu üzerinde klasikleşmiş bir makale var: R. Langer, *Phys. Rev* **51**, 669 (1937).

sonsuz bir duvar olarak ele alırız). Bu formülü kullanarak

$$V(r) = V_0 \ln(r/a)$$

logaritmik potansiyel (V_0 ve a sabit) içinde bulunan bir parçacık için, izin verilen enerji değerlerini hesaplayın. Sadece $l = 0$ durumuna bakın. Enerji düzeyleri arasındaki farkın kütleden bağımsız olduğunu gösterin. *Kısmi yanıt:*

$$E_{n+1} - E_n = V_0 \ln\left(\frac{n + 3/4}{n - 1/4}\right).$$

****Problem 8.14**

$$\int_{r_1}^{r_2} p(r)\, dr = (n - 1/2)\pi\hbar \qquad [8.55]$$

şeklindeki WKB yaklaşıklığını kullanarak, hidrojen atomu için bağlı durum enerjilerini hesaplayın. 4.38 nolu denklem ile verilen etkin potansiyeldeki merkezkaç terimini unutmayın. Aşağıdaki integral yardımcı olabilir:

$$\int_a^b \frac{1}{x}\sqrt{(x-a)(b-x)}\, dx = \frac{\pi}{2}(\sqrt{b} - \sqrt{a})^2. \qquad [8.56]$$

$n >> l$ ve $n >> 1/2$ olduğu durumlarda Bohr düzeylerini elde etmeniz gerektiğine dikkat edin. *Yanıt:*

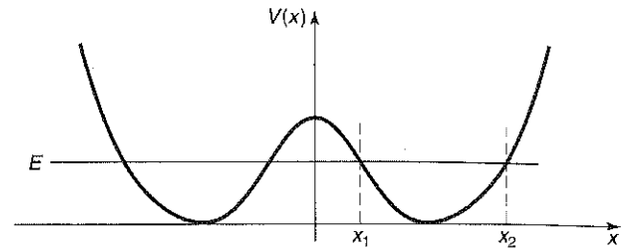
$$E_{nl} \cong \frac{-13.6 \text{ eV}}{[n - (1/2) + \sqrt{l(l+1)}]^2}. \qquad [8.57]$$

*****Problem 8.15** 8.13 nolu şekilde gösterildiği gibi simetrik olan çift kuyuyu ele alın. $E < V(0)$ olan bağlı durumlarla ilgileniyoruz.

(a) WKB dalga fonksiyonlarını (i) $x > x_2$, (ii) $x_1 < x < x_2$ ve (iii) $0 < x < x_1$ bölgeleri için yazın. x_1 ve x_2'de uygun bağlantı formüllerini (x_2 için bu 8.46 nolu denklem ile yapıldı; x_1 için bunu kendiniz yapacaksınız) uygulayarak,

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \dfrac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x_2}^{x} |p(x')|dx'\right], & \text{(i)} \\ \dfrac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x}^{x_2} p(x')\, dx' + \dfrac{\pi}{4}\right], & \text{(ii)} \\ \dfrac{D}{\sqrt{|p(x)|}}\left[2\cos\theta e^{\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1}|p(x')|dx'} + \sin\theta e^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1}|p(x')|dx'}\right] & \text{(iii)} \end{cases}$$

olduğunu gösterin. θ aşağıdaki gibi tanımlanır:



ŞEKİL 8.13: Simetrik çift kuyu; 8.15 nolu problem.

$$\theta \equiv \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p(x)\, dx. \qquad [8.58]$$

(b) $V(x)$ simetrik olduğundan, sadece tek (–) ve çift (+) dalga fonksiyonlarını ele almamız gerekir. Çift dalga fonksiyonları için $\psi'(0) = 0$ ve tek dalga fonksiyonları için $\psi(0) = 0$'dır. Bunun aşağıda verilen kuantumlama koşuluna yol açtığını gösterin:

$$\tan\theta = \pm 2e^{\phi} \qquad [8.59]$$

ve burada

$$\phi \equiv \frac{1}{\hbar}\int_{-x_1}^{x_1} |p(x')|\, dx'. \qquad [8.60]$$

8.59 nolu denklem izin verilen yaklaşık enerjileri belirler. E'nin x_1 ve x_2 ifadelerinde yer alacağına ve bundan dolayı θ ve ϕ'nin E'nin fonksiyonları olacağına dikkat edin.

(c) ϕ'nin büyük ve e^{ϕ}'nin *çok çok* büyük olduğu yüksek ve/veya geniş merkezi bir engelle ilgileniyoruz. 8.59 nolu denklem θ'nın π'nin yarım tamsayı katına çok yakın olması gerektiğini söylüyor. Bunu akılda tutarak, $\theta = (n+1/2)\pi + \epsilon$ olarak yazıp, ($|\epsilon| << 1$) kuantumlama koşulunun

$$\theta \cong \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \mp \frac{1}{2}e^{-\phi} \qquad [8.61]$$

halini aldığını gösterin.

(d) Her bir kuyunun birer parabol olduğunu düşünün:[16]

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2(x+a)^2 & x < 0, \\ \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2 & x > 0. \end{cases} \qquad [8.62]$$

---

[16] Her bir kuyu için, $V(x)$ tam bir parabol olmadığı durumlarda bile, θ'nın hesabı ve dolayısıyla sonuç (8.63 nolu denklem) 2.3. Kesimin başında yapılan tartışma bağlamında *yaklaşık olarak* doğru çıkacaktır. Burada $\omega \equiv \sqrt{V''(x_0)/m}$ ve x_0 en düşük enerji konumudur.

Bu potansiyeli çizin, θ'yı hesaplayın (8.58 nolu denklem) ve

$$E_n^{\pm} \cong \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \mp \frac{\hbar\omega}{2\pi}e^{-\phi} \qquad [8.63]$$

olduğunu gösterin.

Açıklama: Eğer merkezi engel *sızılamaz* yani $\phi \to \infty$ ise, sadece iki ayrı harmonik salınıcımız olurdu ve $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ enerjilerinde parçacık sağ ya da sol kuyuda bulunabileceğinden, enerjiler iki kez katlı olurdu. Ne zaman ki, engel *sonlu* büyüklükte olur yani kuyular "iletişim"e başlar, o zaman katlılık ortadan kalkar. ψ_n^+ çift durumları birazcık daha düşük enerjiye ve ψ_n^- tek durumda birazcık daha yüksek enerjiye sahiptir.

(e) Başlangıçta parçacığın sağ taraftaki kuyuda olduğunu, daha doğrusu sağ taraftaki kuyuda yoğunlaştığını ve aşağıdaki fonksiyon ile tanımlanan bir durumda olduğunu varsayalım:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n^+ + \psi_n^-)$$

Burada fazların "doğal" bir yol ile seçildiğini varsayınız. Parçacığın

$$\tau = \frac{2\pi^2}{\omega}e^{\phi} \qquad [8.64]$$

periyodu ile iki kuyu arasında salınacağını gösterin.

(f) (d) şıkkındaki potansiyel için ϕ'yi hesaplayın ve $V(0) >> E$ için $\phi \sim m\omega a^2/\hbar$ olduğunu gösterin.

Problem 8.16 Stark etkisinde tünelleme: Bir atomu bir dış elektrik alan içine koyduğumuzda atomdaki elektron, genel olarak tünelleyerek atomu iyonlaştırılabilir. *Soru:* Tipik bir Stark etkisi deneyinde bunun gerçekleşmesi olası mıdır? Aşağıda kabaca tanımlanan bir boyutlu modeli kullanarak, bu olasılığı hesaplayabiliriz. Çok derin ve sonlu bir kare kuyuda (2.6. Kesim) bulunan bir parçacığı düşünün:

(a) Kuyunun tabanından ölçülen taban durum enerjisi nedir? $V_0 >> \hbar^2/ma^2$ olduğunu varsayın. *Yardım:* Bu, $2a$ genişliğinde sonsuz bir kare kuyunun taban durum enerjisinden başka bir şey değildir.

(b) Şimdi $H' = -\alpha x$ tedirgemesini uygulayalım. $\mathbf{E} = -E_{\text{dış}}\hat{\imath}$ elektrik alanında bulunan elektron için $\alpha = eE_{\text{dış}}$ olur. Tedirgemenin oldukça zayıf yani $\alpha a << \hbar^2/ma^2$ olduğunu varsayın. Toplam potansiyeli çizin. Parçacığın şimdi pozitif x doğrultusunda dışarıya tünellenebileceğine dikkat edin.

(c) 8.22 nolu denklemdeki γ tünelleme çarpanını hesaplayın ve parçacığın kaçabilmesi için gereken tahmini zamanı bulun (8.28 nolu denklem).

Yanıt: $\gamma = \sqrt{8mV_0^3}/3\alpha\hbar$, $\tau = (8ma^2/\pi\hbar)e^{2\gamma}$.

(d) $V_0 = 20$ eV (dıştaki bir elektron için tipik bağlanma enerjisi), $a = 10^{-10}$ m (tipik atomik yarıçap), $E_{\text{dış}} = 7 \times 10^6$ V/m (güçlü laboratuvar alanı), elektronun e yükü ve m kütlesi gibi bazı sayıları yerine koyup, τ'yı hesaplayın ve bunu evrenin yaşı ile karşılaştırın.

Problem 8.17 Bir bira kutusunun oda sıcaklığında kuantum tünellenmesi sonucunda kendiliğinden devrilmesi yaklaşık ne kadar zaman alır? *Yardım:* Bira kutusunu R yarıçaplı, h yüksekliğinde, m kütleli düzgün bir silindir olarak ele alın. Bira kutusu devrilirken, denge konumundan $(h/2)$ olan yüksekliği x olsun. Bu durumda bira kutusunun potansiyel enerjisi mgx olur ve de x, $x_0 = \sqrt{R^2 + (h/2)^2} - h/2$ kritik değerine ulaştığı zaman kutu devrilir. $E = 0$ için 8.22 nolu denklem ile verilen tünelleme olasılığını hesaplayın. $1/2\, mv^2 = 1/2\, k_B T$ ısıl enerji ve 8.28 nolu denklemi kullanarak hızı hesaplayın. Makul sayısal değerleri yerine koyarak, sonucunuzu yıl cinsinden verin.[17]

---

[17] R. E. Crandall, *Scientific American*, February 1997, 74. sayfa.

9. BÖLÜM

ZAMANA BAĞLI TEDİRGEME TEORİSİ

Bu bölüme kadar, değindiğimiz her şey pratik olarak potansiyel enerji fonksiyonunun *zamandan bağımsız* olduğu $V(\mathbf{r},t) = V(\mathbf{r})$ ve **kuantum statiği** olarak adlandırılabilecek konu ile ilgiliydi. Bu durumda, zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$\mathrm{H}\Psi = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial \mathrm{t}}$$

değişkenlere ayırma yöntemi ile çözülebilir:

$$\Psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) = \psi(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{iEt}/\hbar}$$

ve burada $\Psi(\mathbf{r})$ zamandan bağımsız Schrödinger denklemini

$$\mathrm{H}\psi = \mathrm{E}\psi$$

sağlar. Ayrılabilen çözümlerin zamana bağımlılığı $e^{-iEt/\hbar}$ üstel çarpanı ile verildiğinden ve bu çarpan da fiziksel önemi olan $|\Psi|^2$ büyüklüğünü oluşturduğumuzda yok olduğundan, tüm olasılıklar ve beklenen değerler zaman içinde sabit kalır. Bu durağan (kararlı) durumların *lineer kombinasyonlarını* oluşturarak, çok daha ilginç zaman bağımlılığı gösteren dalga fonksiyonları elde ederiz. Fakat bu durumda bile enerjinin olası değerleri ve bunlara karşılık olan olasılıklar sabit kalır.

Eğer bir enerji düzeyinden başka bir enerji düzeyine **geçişlere** (bazen de **kuantum zıplamaları** olarak adlandırıldığı gibi) izin vermek istiyorsak, mutlaka *zamana bağlı* bir potansiyeli (**kuantum dinamiği**) işin içine sokmamız gerekir. Kuantum dinamiğinde tam olarak çözülebilen çok güzel örnekler vardır. Öte yandan, eğer Hamiltonyen'in

zamana bağlı kısmı zamandan bağımsız kısmına kıyasla küçük ise, bu zamana bağlı kısım bir tedirgeme olarak ele alınabilir. Bu bölümde, amacım zamana bağlı tedirgeme teorisini kurmak ve bunun en önemli uygulaması olan bir atomdan salınan ya da soğrulan ışımayı incelemektir.

9.1 İKİ DÜZEYLİ SİSTEMLER

Başlangıç için, tedirgenmemiş sistemin ψ_a ve ψ_b olmak üzere sadece *iki* durumu olduğunu varsayalım. Bunlar tedirgenmemiş H^0 Hamiltonyeninin özdurumlarıdır:

$$H^0\psi_a = E_a\psi_a \text{ ve } H^0\psi_b = E_b\psi_b \qquad [9.1]$$

ve bunlar ortonormaldir:

$$\langle\psi_a|\psi_b\rangle = \delta_{ab}. \qquad [9.2]$$

Herhangi bir durum, bu iki durumun lineer kombinasyonu olarak yazılabilir. Özellikle:

$$\Psi(0) = c_a\psi_a + c_b\psi_b. \qquad [9.3]$$

ψ_a ve ψ_b durum fonksiyonları konum uzayı dalga fonksiyonu, spinör ya da çok daha acayip bir şey olabilir, fark etmez. Burada bizi ilgilendiren şey, *zamana* bağımlılığıdır. Dolayısıyla, $\Psi(t)$ yazdığımda sadece sistemin herhangi bir t anındaki durumunu ifade ediyorum. Tedirgemenin olmadığı durumda, her bir bileşen kendi üstel çarpanı ile evrimleşir:

$$\Psi(t) = c_a\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + c_b\psi_b e^{-iE_bt/\hbar}. \qquad [9.4]$$

$|c_a|^2$, parçacığın ψ_a durumunda bulunma olasılığıdır. *Gerçekte* söylemeye çalıştığımız şey, bir enerji ölçümünde E_a değerinin elde edilme olasılığıdır. Ψ'nin normlanma koşulu doğal olarak

$$|c_a|^2 + |c_b|^2 = 1 \qquad [9.5]$$

olmasını gerektirir.

9.1.1. Tedirgenmiş Sistemler

Şimdi zamana bağlı $H'(t)$ tedirgemesini başlattığımızı varsayalım. ψ_a ve ψ_b tam bir çözüm takımı oluşturduğundan, $\Psi(t)$ dalga fonksiyonu hala bunların lineer kombinasyonu olarak yazılabilir. Tek bir farkla: c_a ve c_b'ler şimdiki durumda t'nin fonksiyonlarıdır:

$$\Psi(t) = c_a(t)\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + c_b(t)\psi_b e^{-iE_bt/\hbar}. \qquad [9.6]$$

(Bazılarının tercih ettiği gibi üstel çarpanları c_a ve c_b'nin içine dahil edebilirdim. Fakat sistemin *tedirgenmediği* durumda bile var olan bu zamana bağımlı kısmı görünür tutmak daha iyi olur diye düşünüyorum.) Şimdi bütün problem c_a ve c_b katsayılarını

zamanın fonksiyonu olarak belirlemektir. Örneğin, eğer parçacık ψ_a durumunda ($c_a(0) = 1$, $c_b(0) = 0$) başlayıp ve t_1 zaman sonra $c_a(t_1) = 0$, $c_b(t_1) = 1$ olduğunu bulursak, sistemin ψ_a durumundan ψ_b durumuna geçiş yaptığını biliriz.

$\Psi(t)$'nin zamana bağlı Schrödinger denklemini

$$H = H^0 + H'(t) \quad \text{olmak üzere,} \quad H\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad [9.7]$$

sağlaması gerektiği koşulunu uygulayarak $c_a(t)$ ve $c_b(t)$'yi buluruz. 9.6 ve 9. 7 nolu denklemlerden

$$c_a[H^0\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H^0\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} + c_a[H'\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar}$$
$$= i\hbar\left[\dot{c}_a\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + \dot{c}_b\psi_b e^{-iE_bt/\hbar}\right.$$
$$\left. + c_a\psi_a\left(-\frac{iE_a}{\hbar}\right)e^{-iE_at/\hbar} + c_b\psi_b\left(-\frac{iE_b}{\hbar}\right)e^{-iE_bt/\hbar}\right]$$

elde edilir. 9.1 nolu denklem ile soldaki ilk iki terim, sağdaki son iki terimi yok eder ve böylece

$$c_a[H'\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar\left[\dot{c}_a\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + \dot{c}_b\psi_b e^{-iE_bt/\hbar}\right] \qquad [9.8]$$

elde edilir. $\dot{c}_a$'yı yalnız bırakmak için bilinen numarayı kullanalım: ψ_a ile iç çarpımı al ve sonra ψ_a ve ψ_b'nin ortogonalliğini kullan (9.2 nolu denklem):

$$c_a\langle\psi_a|H'|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + c_b\langle\psi_a|H'|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar\dot{c}_a e^{-iE_at/\hbar}.$$

Kısaca

$$H'_{ij} \equiv \langle\psi_i|H'|\psi_j\rangle \qquad [9.9]$$

olarak tanımlayalım. Burada H''nün hermitsel yani $H'_{ji} = (H'_{ij})^*$ olduğunu hatırlayalım. Her iki tarafı $-(i/\hbar)e^{iE_at/\hbar}$ ile çarptığımızda,

$$\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar}\left[c_a H'_{aa} + c_b H'_{ab}e^{-i(E_b-E_a)t/\hbar}\right] \qquad [9.10]$$

sonucunu buluruz. Benzer şekilde, ψ_b ile iç çarpım bizi $\dot{c}_b$'ye götürür:

$$c_a\langle\psi_b|H'|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + c_b\langle\psi_b|H'|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar\dot{c}_b e^{-iE_at/\hbar}$$

ve böylece

$$\dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar}\left[c_b H'_{bb} + c_a H'_{ba}e^{i(E_b-E_a)t/\hbar}\right] \qquad [9.11]$$

sonucunu elde ederiz.

9.10 ve 9.11 nolu denklemler ile $c_a(t)$ ve $c_b(t)$ belirlenir; birlikte ele alındıklarında, iki

düzeyli bir sistem için (zaman bağlı) Schrödinger denklemine tamamen eşdeğer olurlar. Genellikle H''nün köşegen matris elemanları sıfırdır (genel durum için 9.4 nolu probleme bakın);

$$H'_{aa} = H'_{bb} = 0. \qquad [9.12]$$

Durum böyle ise, denklemler aşağıdaki basit şekli alırlar:

$$\boxed{\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar}H'_{ab}e^{-i\omega_0 t}c_b, \quad \dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar}H'_{ba}e^{i\omega_0 t}c_a,} \qquad [9.13]$$

ve burada ω_0

$$\omega_0 \equiv \frac{E_b - E_a}{\hbar}. \qquad [9.14]$$

($\omega_0 \geq 0$ olabilsin diye, $E_b \geq E_a$ olduğunu varsayacağım).

***Problem 9.1** Bir hidrojen atomu zamana bağlı bir $\mathbf{E} = E(t)\hat{k}$ elektrik alanı içine yerleştirilsin. $n = 1$ taban durumu ve 4 kez katlı olan $n = 2$ ilk uyarılmış durum arasındaki $H' = eEz$ tedirgemesine ait H'_{ij} matris elemanlarının tümünü (dört tane) hesaplayın. Ayrıca beş durumun hepsi için $H'_{ij} = 0$ olduğunu gösterin. *Not:* z'ye göre olan tekliği kullanırsanız, alınması gereken sadece tek bir integralin olduğunu görürsünüz. Böyle bir şekle sahip tedirgeme altında, $n = 2$ durumlarından sadece bir tanesi taban durumundan "ulaşılabilir" olur ve bundan dolayı, sistem sanki iki durumlu bir düzenekmiş gibi davranır. Tabii bunu daha yüksek dereceden uyarılmış durumlara geçişi göz ardı ettiğimizde söyleyebiliyoruz.

***Problem 9.2** 9.13 nolu denklemi, $c_a(0) = 1$ ve $c_b(0) = 0$ varsayımı altında *zamandan bağımsız* tedirgeme durumu için çözün. $|c_a(t)|^2 + |c_b(t)|^2 = 1$ olup olmadığını kontrol edin. *Açıklama:* Görünürde, bu sistem "katıksız ψ_a" ve "biraz ψ_b" durumları arasında salınıyor. Bu, zamandan bağımsız tedirgemeler için geçiş olmaz genel değerlendirmesi ile çelişmiyor mu? Hayır, ancak oldukça zor kavranılabilen bir nedeni var: Bu durumda ψ_a ve ψ_b Hamiltonyenin özdurumları değildir ve *hiçbir zaman da* olmadılar. (Bu, enerji ölçüm deneylerinin *hiçbir zaman* E_a ve E_b değerlerini vermeyeceği anlamına gelir). Zamana bağlı tedirgeme teorisinde, sistemi incelemek için genel olarak tedirgemeyi bir süreliğine *açıp*, sonra tekrar *kapatmayı* yeğleriz. Başlangıçta ve sonunda ψ_a ve ψ_b Hamiltonyenin özdurumlarıdır ve sadece bu bağlamda, sistemin birinden diğerine bir geçiş yaptığını söylemenin bir anlamı vardır. O zaman, üzerinde çalıştığımız problem için tedirgemenin $t = 0$ anında açıldığını ve tekrar t anında kapatıldığını varsayalım. Bu varsayım *hesaplamaları* etkilemez fakat sonucun daha akla uygun yorumlanmasına yol açar.

****Problem 9. 3** Tedirgemenin delta fonksiyonu (zaman içinde) şeklinde olduğunu varsayın:

$$H' = U\delta(t)$$

$U_{ab} = U_{ba}^* \equiv \alpha$ ve $U_{aa} = U_{bb} = 0$ olduğunu varsayalım. $c_a(t)$ ve $c_b(t)$ değerlerini $c_a(-\infty) = 1$ ve $c_b(-\infty) = 0$ koşulu altında hesaplayın ve $\left|c_a(t)^2\right| + \left|c_b(t)^2\right| = 1$ olup olmadığını kontrol edin. $t \to \infty$ için, bir geçişin olma olasılığı $(P_{a\to b})$ nedir? *Yardım:* Delta fonksiyonunu sıralanan dikdörtgenlerin limit durumu olarak ele alabilirsiniz. *Yanıt:* $P_{a\to b} = \sin^2\left(|\alpha|/\hbar\right)$.

9.1.2 Zamana Bağlı Tedirgeme Teorisi

Şimdiye kadar her şey *kesindi.* Tedirgemenin *büyüklüğü* hakkında hiçbir varsayımda bulunmadık. Fakat H' "küçük" ise, 9.13 nolu denklemi aşağıda gösterildiği gibi ardışık yaklaşıklıklar süreci ile çözebiliriz. Parçacığın alt düzeyden başladığını varsayalım:

$$c_a(0) = 1, \quad c_b(0) = 0. \tag{9.15}$$

Tedirgeme hiç olmamış olsaydı, c_a ve c_b sonsuza kadar böyle kalırlardı:

Sıfırıncı Derece:

$$c_a^{(0)}(t) = 1, \quad c_b^{(0)}(t) = 0. \tag{9.16}$$

(Parantezlerdeki üst indisleri yaklaşıklığın derecesini göstermek için kullanacağım.)

Birinci dereceden yaklaşıklığı hesaplayabilmek için, sıfırıncı derece için elde edilen değerleri 9.13 nolu denklemin sağ tarafına yerleştiririz:

Birinci Derece

$$\frac{dc_a^{(1)}}{dt} = 0 \Rightarrow c_a^{(1)}(t) = 1;$$
$$\frac{dc_b^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}H'_{ba}e^{i\omega_0 t} \Rightarrow c_b^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{ba}(t')e^{i\omega_0 t'}\,dt'. \tag{9.17}$$

Şimdi de, *bu* ifadeleri sağ tarafa yerleştirerek, *ikinci* derece yaklaşıklığını elde ederiz.

İkinci Derece

$$\frac{dc_a^{(2)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}H'_{ab}e^{-i\omega_0 t}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_0^t H'_{ba}(t')e^{i\omega_0 t'}\,dt' \Rightarrow$$
$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t H'_{ab}(t')e^{-i\omega_0 t'}\left[\int_0^{t'} H'_{ba}(t'')e^{i\omega_0 t''}\,dt''\right]dt', \tag{9.18}$$

c_b değişmeden $\left(c_b^{(2)}(t) = c_b^{(1)}(t)\right)$ kalmıştır. $\left(c_a^{(2)}(t)\right)$'nin sıfırıncı dereceden terimi *içerdiğine* dikkatinizi çekerim; bu durumda, sadece integral kısmı ikinci dereceden *düzeltme* terimi olur.

İlke olarak, her zaman *n-inci* dereceden yaklaşıklığı 9.13 nolu denklemin sağ tarafına yerleştirip $(n + 1)$-inci derece için çözerek sonsuza kadar devam edebiliriz. Sıfırıncı dereceden düzeltme terimi H' çarpanını içermez, birinci dereceden düzeltme terimi *bir* H' çarpanı içerir, ikinci dereceden düzeltme terimi *iki* H' çarpanı içerir ve bu böyle devam eder.[1] $\left|c_a^{(1)}(t)\right|^2 + \left|c_b^{(1)}(t)\right|^2 \neq 1$ olması (*kesin* katsayılar 9.5 nolu denklemi sağlamak zorundadırlar) birinci derece yaklaşıklığında bir hata olduğunun işaretidir. Öte yandan, H' için *birinci dereceden* yaklaşıklık $\left|c_a^{(1)}(t)\right|^2 + \left|c_b^{(2)}(t)\right|^2 \neq 1$ sonucunu verir. Birinci derece yaklaşıklığında bütün beklentimiz de budur. Yüksek dereceler için de bu böyle devam eder.

****Problem 9.4** $H'_{aa} = H'_{bb} = 0$ *olmadığını* varsayın.

(a) $c_a(t)$ ve $c_b(t)$ ifadelerini $c_a(0) = 1$, $c_b(0) = 0$ olması koşulu altında, birinci derece tedirgeme teorisini kullanarak hesaplayın. H' için, birinci derece yaklaşıklığının $\left|c_a^{(1)}(t)\right|^2 + \left|c_b^{(1)}(t)\right|^2 = 1$ verdiğini gösterin.

(b) Bu problemi çözmenin daha güzel bir yolu var.

$$d_a \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{aa}(t')dt'}c_a, \quad d_b \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{bb}(t')dt'}c_b \tag{9.19}$$

olsun.

$$\phi(t) \equiv \frac{1}{\hbar}\int_0^t [H'_{aa}(t') - H'_{bb}(t')]\,dt' \tag{9.20}$$

olmak üzere

$$\dot{d}_a = -\frac{i}{\hbar}e^{i\phi}H'_{ab}e^{-i\omega_0 t}d_b; \quad \dot{d}_b = -\frac{i}{\hbar}e^{-i\phi}H'_{ba}e^{i\omega_0 t}d_a \tag{9.21}$$

olduğunu gösterin. d_a ve d_b için elde edilen denklemler şekil olarak 9.13 nolu denklem ile özdeştirler (H' 'ye eklenen fazladan bir $e^{i\phi}$ çarpanı var).

(c) (b) şıkkındaki yöntemi kullanarak, $c_a(t)$ ve $c_b(t)$ ifadelerini birinci derece tedirgeme teorisi içinde hesaplayın ve yanıtınızı (a) şıkkı ile kıyaslayın. Görebildiğiniz herhangi bir uyuşmazlık varsa açıklayın.

***Problem 9.5** 9.13 nolu denklemi $c_a(0) = a$ ve $c_b(0) = b$ olduğu genel durum için, ikinci derece tedirgeme teorisi içinde çözün.

****Problem 9.6** Zamandan bağımsız tedirgeme için (9.2 nolu probleme bakın) $c_a(t)$ ve $c_b(t)$'yi ikinci dereceye kadar hesaplayın. Yanıtınızı kesin sonuç ile karşılaştırın.

[1] c_a'nın her *çift* derecede ve de c_b'nin her *tek* derecede yenilendiğine dikkat edin. Tedirgeme köşegen terimleri içerseydi ya da sistem iki durumun lineer kombinasyonunda başlasaydı, bu doğru olmazdı.

9.1.3 Sinüzoidal Tedirgemeler

Tedirgemenin zamana bağlılığının sinüzoidal olduğunu varsayalım:

$$H'(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})\cos(\omega t) \qquad [9.22]$$

ve

$$V_{ab} \equiv \langle \psi_a | V | \psi_b \rangle \qquad [9.23]$$

olmak üzere,

$$H'_{ab} = V_{ab}\cos(\omega t) \qquad [9.24]$$

olur. (Daha önce yaptığım gibi, burada da köşegen matris elemanlarının sıfırlandığını varsayacağım.) Bundan sora *sadece* birinci derece yaklaşıklığında çalışacağım ve de üst indisleri kaldıracağım. Birinci derece yaklaşıklığında (9.17 nolu denkiem):

$$c_b(t) \cong -\frac{i}{\hbar}V_{ba}\int_0^t \cos(\omega t')e^{i\omega_0 t'}\,dt' = -\frac{iV_{ba}}{2\hbar}\int_0^t \left[e^{i(\omega_0+\omega)t'} + e^{i(\omega_0-\omega)t'}\right]dt'$$

$$= -\frac{V_{ba}}{2\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t}-1}{\omega_0+\omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}-1}{\omega_0-\omega}\right] \qquad [9.25]$$

elde ederiz.

Yanıt budur, fakat bununla çalışmak biraz can sıkıcıdır. Köşeli parantez içindeki ikinci terimi baskın kılabilmek için dikkatimizi sadece geçiş frekansına (ω_0) yakın olan sürücü frekanslara (ω) verirsek, işimiz epeyce kolaylaşır; yani

$$\omega_0 + \omega \gg |\omega_0 - \omega| \qquad [9.26]$$

olduğunu varsayacağız. Bu çok büyük bir kısıtlama değildir. Çünkü *diğer* frekanslardaki tedirgemeler bir geçişe yol açma olasılıkları göz ardı edilebilecek kadar ufaktır.[2] İlk terimi düşürünce

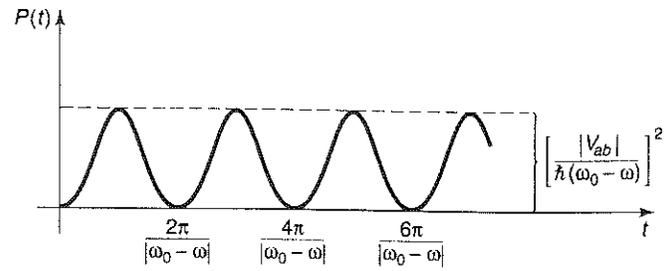
$$c_b(t) \cong -\frac{V_{ba}}{2\hbar}\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t/2}}{\omega_0-\omega}\left[e^{i(\omega_0-\omega)t/2} - e^{-i(\omega_0-\omega)t/2}\right]$$

$$= -i\frac{V_{ba}}{\hbar}\frac{\sin[(\omega_0-\omega)t/2]}{\omega_0-\omega}e^{i(\omega_0-\omega)t/2} \qquad [9.27]$$

sonucuna varırız. Başlangıçta ψ_a durumunda olan bir parçacığın, t anında ψ_b durumunda bulunma olasılığını veren **geçiş olasılığı**:

$$\boxed{P_{a\to b}(t) = |c_b(t)|^2 \cong \frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2[(\omega_0-\omega)t/2]}{(\omega_0-\omega)^2}.} \qquad [9.28]$$

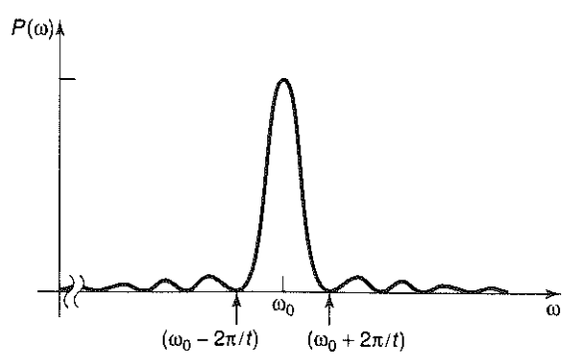
[2] Sonraki kesimlerde, bu teorinin $\omega \sim 10^{15}s^{-1}$ olan *ışık* için uygulamasını yapacağız. Bu durumda ω_0'ın civarı hariç (ikinci terim için) *her iki* terimdeki payda çok büyük olacaktır.



ŞEKİL 9.1 Sinüszoidal tedirgeme (9.28 nolu denklem) için geçiş olasılığının zamana göre değişimi.

Bu sonucun en göze çarpan özelliği, geçiş olasılığının sinüs şeklinde *salınmasıdır* (9.1 nolu şekil). En büyük $|V_{ab}|^2/\hbar^2(\omega_0^2-\omega^2)$ değerine (1'den çok küçük olması gerek, aksi halde tedirgemenin "küçük" olduğu varsayımı geçersiz olurdu) ulaştıktan sonra tekrar sıfıra düşüyor! $n = 1, 2, 3, \ldots$, olmak üzere $t_n = 2n\pi/|\omega_0-\omega|$ zamanlarında parçacığın düşük enerjili duruma döneceği *kesin*. Bir geçiş yapma şansınızı arttırmak istiyorsanız, tedirgemeyi çok uzun zaman diliminde açık *tutmamalısınız*; $\pi/|\omega_0-\omega|$ zaman sonra *kapatıp*, sistemin üst durumu "yakalamasını" bekleyin. 9.7 nolu problem bu "çırpınmanın" tedirgeme teorisinin getirdiği bir sonuç olmadığını ortaya koyar – çırpınma *frekansı* biraz farklı da olsa bu kesin çözümde de ortaya çıkar.

Daha önce de belirttiğimiz gibi sürücü frekansın ω_0 "doğal" frekansına yakın olduğunda geçiş olasılığı en fazladır. Bunu $P_{a\to b}$'nin ω'nın fonksiyonu olarak çizildiği 9.2 nolu şekilde görebilirsiniz. Tepenin yüksekliği $\left(\frac{1}{\hbar}|V_{ab}|t/2\right)^2$ ve genişliği $4\pi/t$'dir. Zaman geçtikçe tepenin yükselip daraldığı aşikardır. (Görünürde, en yüksek değer sınırsız olarak artıyor. Fakat tedirgeme varsayımı en yüksek değer 1'e varmadan önce geçerliliğini



ŞEKİL 9.2: Geçiş olasılığının sürücü frekansın (9.28 nolu denklem) fonksiyonu olarak değişimi.

kaybeder. Bu nedenle sonuç sadece küçük t değerleri için güvenilirdir. 9.7 nolu problemde *kesin* sonucun hiçbir zaman 1'i geçmediğini göreceksiniz.)

****Problem 9.7** 9.25 nolu denklemin ilk terimi $\cos(\omega t)$'nin $e^{i\omega t}/2$ parçasından gelir ve ikinci terim $e^{-i\omega t}/2$'den gelir. Bu yüzden ilk terimi düşürmek $H' = (V/2)\, e^{-i\omega t}$ olarak yazmaya eşdeğerdir. Bu da

$$H'_{ba} = \frac{V_{ba}}{2} e^{-i\omega t}, \quad H'_{ab} = \frac{V_{ab}}{2} e^{i\omega t} \qquad [9.29]$$

olması demektir. (İkinci ifade Hamiltonyen matrisini hermitsel yapmak için gereklidir. Ya da isterseniz şöyle diyebiliriz: $c_a(t)$'yi veren 9.25 nolu denkleme benzer formüldeki baskın terimi çekip çıkarabilmek için gereklidir.) Rabi, **dönen dalga yaklaşıklığı** denilen bu işlem hesabın *başında* yapılırsa, tedirgeme teorisine gerek kalmadan ve de alanın şiddetiyle ilgili bir varsayım yapmadan 9.13 nolu denklemin kesin olarak çözülebileceğini fark etti.

(a) 9.13 nolu denklemi dönen dalga yaklaşıklığı (9.29 nolu denklem) içinde, $c_a(0) = 1$, $c_b(0) = 0$ olağan başlangıç koşulları altında çözün. $c_a(t)$ ve $c_b(t)$ için elde ettiğiniz sonuçları

$$\omega_r \equiv \frac{1}{2}\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + (|V_{ab}|/\hbar)^2} \qquad [9.30]$$

Rabi çırpınma frekansı cinsinden yazın.

(b) $P_{a\to b}(t)$ geçiş olasılığını belirleyin ve bunun hiçbir zaman 1'i geçmediğini gösterin. $|c_a(t)|^2 + |c_b(t)|^2 = 1$ olup olmadığını kontrol edin.

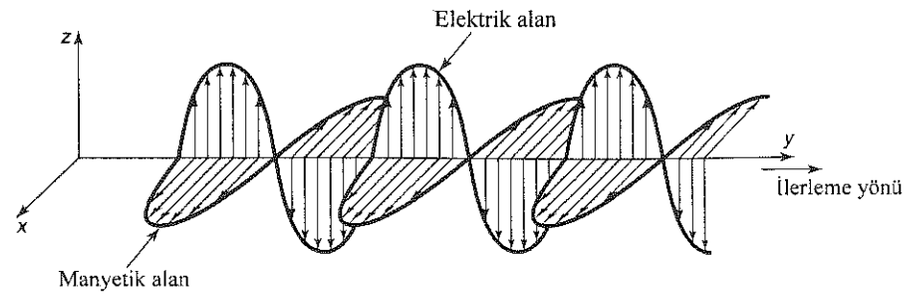
(c) Tedirgemenin küçük olduğu durumda $P_{a\to b}(t)$'nin tedirgeme teorisinden elde edilen sonuca (9.28 nolu denklem) indirgenip indirgenmediğini kontrol edin ve bu bağlamda V'nin üzerine bir bağ koşulu olarak konulan "küçük" tam anlamıyla ne *ifade* eder.

(d) Sistem ilk olarak ne zaman başlangıç durumuna döner?

9.2 IŞIMANIN SALINMASI VE SOĞURULMASI

9.2.1 Elektromanyetik Dalgalar

Bir elektromanyetik dalga enine salınan ve birbirlerine dik olan elektrik ve manyetik alanlardan oluşur (9.3 nolu şekle bakın). Elektromanyetik dalga farklı frekans bölgelerinde kızıl ötesi, mor ötesi, mikrodalga, x ışını vb. gibi farklı isimlendirilmesine rağmen, elektromanyetik dalga yerine "ışık" terimini kullanacağım. İlerleyen bir ışık dalgasının varlığında, bir atom öncelikle dalganın elektrik alan bileşenine tepki verir. Eğer dalga boyu atomun boyutuna göre büyük ise, alanın uzaysal değişimini



ŞEKİL 9.3: Bir elektromanyetik dalga.

görmemezlikten gelebiliriz.[3] Bu durumda atom sinüs dalgası şeklinde salınan elektrik alana maruz kalır:

$$\mathbf{E} = E_0 \cos(\omega t)\, \hat{k} \qquad [9.31]$$

(Şimdilik ışığın tek renkli olduğunu ve de z doğrultusunda kutupladığını varsayacağım). Tedirgeme Hamiltonyeni[4]:

$$H' = -q E_0 z \cos(\omega t) \qquad [9.32]$$

ve burada q elektronun yüküdür.[5] Böylece,[6]

$$\wp \equiv q\langle \psi_b | z | \psi_a \rangle$$

olmak üzere

$$H'_{ba} = -\wp E_0 \cos(\omega t) \qquad [9.33]$$

olur. Ψ genelde z'nin tek ya da çift fonksiyonudur. Her iki durumda da $z|\psi|^2$ tektir ve integrali sıfır verir (bazı örnekler için 9.1 nolu probleme bakın). Bu H'nün köşegen elemanları sıfırlanır varsayımımızı doğrular; sonuç olarak, ışığın madde ile olan

---

[3] Bir atomun çapı yaklaşık 1Å iken, görünür ışık için $\lambda \sim 5000$Å'dur. Bu durumda yapılan yaklaşıklık akla uygundur. Fakat durum X ışınları için böyle *değildir*. Alanın uzaysal değişiminin etkisi 9.21 nolu problemde irdelenmektedir.

[4] Bir q yükünün durgun bir $\mathbf{E}$ alanında enerjisi $-q \int \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r}$ dir. Burada açıkça zamana bağlı bir alan için elektro*statik* formülün kullanılmasına itiraz edebilirsiniz. Ancak ben salınım periyodunun atom içindeki yükün hareket edebilmesi için gereken zamana kıyasla çok uzun olduğu varsayımında bulunuyorum.

[5] Her zaman olduğu gibi, çekirdeğin ağır ve durağan olduğunu varsayıyoruz. Burada bizi ilgilendiren şey *elektronun* dalga fonksiyonudur.

[6] $\wp$ harfi size **elektrik dipol momenti**'ni hatırlatmalı (Elektrodinamik'te bunun için genelde p harfi kullanılır –bu bağlamda momentum ile karıştırılmasın diye kargacık burgacık $\wp$'ye dönüştürüldü). Aslında $\wp$, $q\mathbf{r}$ dipol momenti operatörünün z bileşeninin köşegen olmayan matris elemanıdır. Elektrik dipol momentine olan bağımlılığı yüzünden 9.33 nolu denklem ile verilen ışıma **elektrik dipol ışıması** olarak adlandırılır ve en azından görünür bölgede baskın olan bu ışımadır. Genelleştirmeler ve terminoloji için 9.21 nolu probleme bakın.

etkileşmesi tamamıyla 9.1.3. Kesimde incelediğimize benzer harmonik tedirgemenin tam kontrolü altındadır:

$$V_{ba} = -pE_0. \qquad [9.34]$$

9.2.2 Soğurma, Uyarılmış Salınma ve Kendiliğinden Salınma

ψ_a "alt" durumunda bulunan bir atom kutuplanmış, tek renkli bir ışık demeti ile aydınlatılırsa, ψ_b "üst" durumuna geçiş olasılığı 9.28 nolu denklem ile verilir. Bu geçiş olasılığı 9.34 nolu denklemin yardımı ile

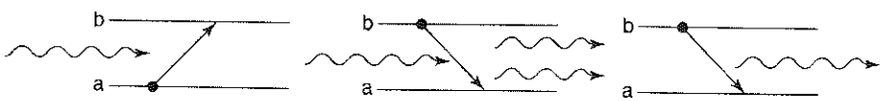
$$P_{a\to b}(t) = \left(\frac{|p|E_0}{\hbar}\right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0-\omega)t/2]}{(\omega_0-\omega)^2} \qquad [9.35]$$

şeklini alır. Bu süreçte, atom elektromanyetik alandan $E_b - E_a = \hbar\,\omega_0$ enerjisini soğurur. Süreçte atomun "bir foton soğurduğunu" söyleriz (9.4(a) nolu şekil). (Daha önce de belirttiğim gibi, "foton" gerçekte elektromanyetik alanın kuantum teorisi olan **kuantum elektrodinamiğine** ait bir sözcüktür. Öte yandan, burada alanın kendisini *klasik olarak* ele alıyoruz. Olduğundan daha faza anlam yüklemediğiniz sürece, bu şekilde ifadede hiçbir sorun yoktur).

Elbette $c_a(0) = 0$, $c_b(0) = 1$ *üst* durumda başlayan bir sisteme dönüp, tüm türetmeyi en baştan başlayarak yapabilirim. İstiyorsanız bunu kendiniz yapabilirsiniz; *aynı* sonucu verecektir. Yalnız, bu kez *alt* duruma geçiş olasılığı olan $P_{b\to a} = |c_a(t)|^2$ 'yi hesaplıyor olacaksınız:

$$P_{b\to a}(t) = \left(\frac{|p|E_0}{\hbar}\right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0-\omega)t/2]}{(\omega_0-\omega)^2}. \qquad [9.36]$$

(Bu sonucu *vermeli*. Yaptığımız tek şey ω_0 yerine $-\omega_0$'ı koyan $a \leftrightarrow b$ değiştokuşunu yapmaktır. 9.25 nolu denkleme geldiğimizde, paydada $-\omega_0 + \omega$ olmak üzere *ilk* terimi tutarız ve gerisi olduğu gibi aynı kalır.) Bu aslında *şaşırtıcı* bir sonuçtur: Bir parçacık *üst* durumdayken, üzerine ışık gönderiyorsunuz ve parçacık *alt* duruma geçiş yapabiliyor ve de üstelik böyle bir geçişi yakalama olasılığı *alt* durumdan *üst* duruma geçişi yakalama olasılığı ile bire bir aynı. İlk olarak Einstein tarafından öngörülen bu olay **uyarılmış salınma** olarak adlandırılır.



(a) Soğurma (b) Uyarılmış salınma (c) Kendiliğinden salınma

ŞEKİL 9.4: Işığın atom ile üç şekilde etkileşmesi: (a) soğurma, (b) uyarılmış salınma, (c) kendiliğinden salınma.

Uyarılmış salınmada, elektromanyetik alan atomdan $\hbar\omega_0$ enerjisini *alır* ve buna bir foton girdi, iki foton çıktı deriz – geçişe neden olan asıl foton ve geçişten gelen bir başka foton (9.4(b) nolu şekil). Bu, ışığı şiddetlendirme olasılığının artması demektir. Çünkü, elimde içi her biri *üst* durumda bulunan atomlarla dolu bir şişe olsaydı ve bunu gelen tek bir foton ile tetikleseydim, ilk fotonun 2 foton ürettiği, sonra bu iki fotonun 4 foton ürettiği ve böylece devam eden bir zincir reaksiyonuna yol açardı. Hemen hemen aynı anda aynı frekansa sahip muazzam sayıda çıkan fotonumuz olurdu. *Lazer*'in (**L**ight **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation (Laser) –uyarılmış ışınım salınması ile ışığın şiddetlendirilmesi) dayandığı ilke işte budur. Yalnız, burada belli bir çoğunluktaki atomu üst durumlarda bulundurmak esastır (bu işleme **ters doluluk** denir). Çünkü bir fotona *mal olan soğurma* bir foton *üreten* uyarılmış salınma ile rekabet etmektedir. İki durum karışımıyla bile başlarsanız, hiçbir şekilde şiddetlendirme elde edemezsiniz.

Soğurmaya ve uyarılmış salınmaya ek olarak, ışığın maddeyle etkileştiği ve **kendiliğinden salınma** olarak adlandırılan üçüncü bir mekanizma daha vardır. Bu süreçte, uyarılmış durumda bulunan bir atom süreci başlatacak herhangi bir elektromanyetik alan olmaksızın bir foton salarak daha düşük bir enerji düzeyine geçiş yapar (9.4(c) nolu şekil). Tipik bir atomik uyarılmış durumun bozunmasından sorumlu olan mekanizma budur. İlk bakışta kendiliğinden salınmanın neden oluştuğu anlaşılır gibi değil. Eğer bir atomun bulunduğu durum uyarılmış durum dahi olsa, durağan ise ve de dış bir tedirgeme yok ise sonsuza kadar aynı durağan durumda *kalırdı*. Öte yandan, kuantum elektrodinamiğinde *taban durumunda bile* alanlar sıfır olamaz– harmonik salınıcı örneğinde olduğu gibi, taban durumu sıfırdan farklı bir enerji değerine sahiptir (yani $\hbar\omega/2$). Işıkları söndürüp odayı mutlak sıfır sıcaklığına kadar soğutabilirsiniz, ancak odada hala elektromanyetik ışıma olacaktır ve kendiliğinden salınmaya neden olan işte bu "sıfır nokta" ışımasıdır. Aslında çok daha derin bakıldığında, *gerçekten* kendiliğinden salınma diye bir şey yok; bu *tamamıyla* uyarılmış salınmadır. Farklılık yaratan tek şey uyarmayı yapan alan *sizin* koyduğunuz mu yoksa *başka birinin* koyduğu alan mı sorusudur. Bu bağlamda bu süreç, uyarılmış salınma diye bir sürecin olmadığı ve her şeyin kendiliğinden olduğu klasik ışıma sürecinin tam tersidir.

Kuantum elektrodinamiği[7] bu kitabın kapsamı dışındadır, fakat Einstein'nın geliştirdiği ve bu üç süreci (soğurma, uyarılmış salınma ve kendiliğinden salınma) birbirine bağlayan çok güzel bir tartışma var. Einstein[8] kendiliğinden salınmaya yol açan *mekanizmayı* (taban durum elektromanyetik alan tedirgemesi) belirleyemedi fakat bulduğu sonuçlar bize kendiliğinden salınma hızını ve bunu takiben uyarılmış bir atomik

[7] Anlaşılabilir bir uygulama için, Rodney Loudan, *The Quantum Theory of Light*, 2nd edition: (Clarendon Press, Oxford, 1983)'e bakınız.

[8] Einstein'ın makalesi 1917 yılında ve Schrödinger denkleminden çok önce yayınlanmıştı. Kuantum elektrodinamiği ise Planck'ın karacisim ışıması (5.113 nolu denklem) ile konuya girer (1900'lu yıllar).

durumun doğal ömrünü hesaplamamızı sağladı.[9] Buna başlamadan önce, bir atomun her yönden gelen, tek renkli olmayan, kutuplanmamış, uyumsuz elektromanyetik dalgalara vereceği tepkiyi ele almamız gerekir. Örneğin atomu ısıl ışınımın içine gömseydik, yukarıda sözü edilen durum ile karşılaşırdık.

9.2.3 Uyumsuz Tedirgemeler

E_0 elektrik alanın genliği olmak üzere bir elektromanyetik dalgada enerji yoğunluğu[10]

$$u = \frac{\epsilon_0}{2} E_0^2 \qquad [9.37]$$

ifadesi ile verilir. O zaman 9.36 nolu denklem ile verilen geçiş olasılığı alanların enerji yoğunlukları ile orantılı olacaktır:

$$P_{b\to a}(t) = \frac{2u}{\epsilon_0 \hbar^2} |\wp|^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}. \qquad [9.38]$$

Fakat bu, ω frekansında **tek renkli** dalgalar için doğrudur. Birçok uygulamada sistem geniş *frekans aralığında* elektromanyetik dalgalara maruz kalır. Bu durumda $\rho(\omega)d\omega$, $d\omega$ frekans aralığındaki enerji yoğunluğu olmak üzere $u \to \rho(\omega)d\omega$ olur ve net geçiş olasılığı integral şeklini alır:[11]

$$P_{b\to a}(t) = \frac{2}{\epsilon_0 \hbar^2} |\wp|^2 \int_0^\infty \rho(\omega) \left\{ \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \right\} d\omega. \qquad [9.39]$$

[9] "İçgüdüsel" kuantum elektrodinamiği kullanılarak geliştirilen ilginç bir başka türetme için 9.9 nolu probleme bakın.

[10] D. Griffiths, *Introdution to Electrodynamics*, 3rd edition (Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 1999), 9.2.3. Kesim. Genel olarak elektromanyetik alan içinde birim hacimdeki enerji

$$u = (\epsilon_0/2)E^2 + (1/2\mu_0)B^2$$

şeklindedir. Elektromanyetik dalgalar için *elektrik* ve manyetik katkılar eşittir. Bu da,

$$u = \epsilon_0 E^2 = \epsilon_0 E_0^2 \cos^2(\omega t)$$

sonucuna götürür. ($\cos^2$ ya da $\sin^2$)'nin ortalaması 1/2 olduğundan, tam bir çevrim üzerinden ortalama $(\epsilon_0/2)E_0^2$ olur.

[11] 9.39 nolu denklem toplam geçiş olasılığı tek tek olasılıkların toplamı olabilsin diye farklı frekanslardaki tedirgemelerin birbirilerinden *bağımsız* olduğunu varsayar. Farklı bileşenler **uyumlu** (faz ilişkili) ise, o zaman $|c_b(t)|^2$ *olasılıklarını* değil $c_b(t)$ *genliklerini* toplamalıyız ve çapraz terimlerimiz de olacaktır. Uygulamalar için her zaman uyumsuz olan tedirgemeleri inceleyeceğiz.

$\rho(\omega)$ oldukça geniş iken, kıvrımlı parantez içindeki terim ω_0 değerinde keskin bir tepe noktasına sahiptir (9.2 nolu şekil). Bu nedenle, $\rho(\omega)$ yerine $\rho(\omega_0)$ yerleştirip integralin dışına alabiliriz:

$$P_{b\to a}(t) \cong \frac{2|\wp|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_0) \int_0^\infty \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} d\omega. \qquad [9.40]$$

$x \equiv (\omega_0 - \omega)t/2$ değişken dönüşümü yapıp, integral sınırlarını $x = \pm\infty$ 'a uzatıp (nasılsa integralimiz uzatılan bölgelerde sıfır) ve de aşağıdaki belirli integrali

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi \qquad [9.41]$$

kullandığımızda,

$$P_{b\to a}(t) \cong \frac{\pi |\wp|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_0) t \qquad [9.42]$$

sonucunu elde ederiz. Bu kez geçiş olasılığı t ile orantılıdır. Sistem uyumsuz frekans dağılımına maruz bırakıldığında, tek renkli tedirgemenin özelliği olan "çırpınma" olgusu "ortadan kaldırılır." **Geçiş hızı** ($R \equiv dP/dt$) şimdi bir *sabittir:*

$$R_{b\to a} = \frac{\pi}{\epsilon_0 \hbar^2} |\wp|^2 \rho(\omega_0). \qquad [9.43]$$

Şimdiye kadar tedirgeyen dalganın y doğrultusunda geldiğini (9.3 nolu şekil) ve z doğrultusunda kutuplandığını varsaydık. Fakat biz *her yönden* gelen, mümkün olan tüm kutuplanma yönlerine sahip ve de alanların enerjisinin ($\rho(\omega)$) bu farklı kipler arasında eşit olarak paylaşıldığı ışımaya gömülmüş bir atomun durumu ile ilgileniyoruz. Yapmamız gereken şey, $|\wp|^2$ yerine $|\wp \cdot \hat{n}|^2$'nin *ortalamasını* almaktır. Burada

$$\wp \equiv q\langle \psi_b | \mathbf{r} | \psi_a \rangle \qquad [9.44]$$

olarak tanımlanır (9.33 nolu denklemin genelleştirilmiş hali) ve ortalama tüm kutuplanma ve ilerleme yönleri üzerinden alınmalı.

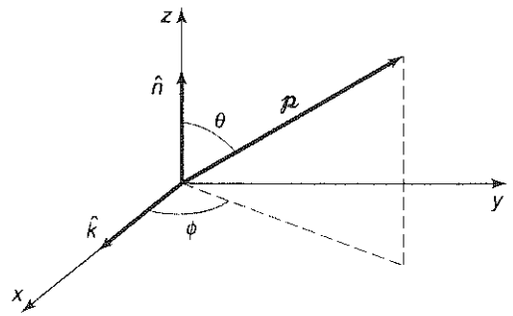
Ortalama şöyle alınabilir: Küresel koordinatları öyle seçin ki ilerleme yönü $(\hat{k})$, x yönünde, kutuplanma $(\hat{n})$, z yönünde olsun. $\wp$ vektörü θ ve ϕ küresel açılarını tanımlasın (9.15 nolu şekil).[12] (Aslında, $\wp$ burada sabitlenmiştir ve $\hat{k} \perp \hat{n}$ ile uyumlu

[12] Genel olarak $\wp$ kompleks bir sayı olmasına rağmen, burada onu reel sayı gibi ele alacağım.

$$|\wp \cdot \hat{n}|^2 = |\mathrm{Re}(\wp) \cdot \hat{n} + i\,\mathrm{Im}(\wp) \cdot \hat{n}|^2 = |\mathrm{Re}(\wp) \cdot \hat{n}|^2 + |\mathrm{Im}(\wp) \cdot \hat{n}|^2$$

olduğundan tüm hesaplamaları reel ve sanal kısımlar için ayrı ayrı yapıp, sonunda bunları toplayabiliriz. 9.47 nolu denklemde mutlak değer işaretinin iki işlevi var: Hem vektör büyüklüğüne hem de kompleks genliğe anlam katar:

$$|\wp|^2 = |\wp_x|^2 + |\wp_y|^2 + |\wp_z|^2.$$



ŞEKİL 9.5: $|\boldsymbol{p}\cdot\hat{n}|^2$'nin ortalamasını alırken kullanılan eksen takımı.

olacak şekilde tüm $\hat{k}$ ve $\hat{n}$'ler, başka bir deyişle tüm θ ve ϕ'ler üzerinden ortalama alıyoruz. Gerçekte değişen şey $\boldsymbol{p}$ vektörü değil, koordinat sistemidir.) O zaman;

$$\boldsymbol{p}\cdot\hat{n} = p\cos\theta \qquad [9.45]$$

ve

$$|\boldsymbol{p}\cdot\hat{n}|^2_{\text{ort}} = \frac{1}{4\pi}\int |\boldsymbol{p}|^2\cos^2\theta\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$
$$= \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{4\pi}\left(-\frac{\cos^3\theta}{3}\right)\Big|_0^{\pi}(2\pi) = \frac{1}{3}|\boldsymbol{p}|^2 \qquad [9.46]$$

olur.

Sonuç: Her yönden gelen uyumsuz, kutuplanmamış ışımanın altında b durumundan a durumuna uyarılmış salınma ile geçiş için geçiş hızı:

$$\boxed{R_{b\to a} = \frac{\pi}{3\epsilon_0\hbar^2}|\boldsymbol{p}|^2\rho(\omega_0).} \qquad [9.47]$$

Burada $\boldsymbol{p}$ iki durum arasındaki elektrik dipol momentinin matris elemanı (9.44 nolu denklem), $\rho(\omega_0)$ ise $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$ değerinde hesaplanan birim frekans başına düşen alan enerji yoğunluğudur.[13]

[13] Geçiş hızının tedirgeme potansiyelinin matris elemanının karesi ve tedirgemenin geçiş frekansındaki şiddeti ile orantılı olduğunu söyleyen bu ifade, Fermi **Altın Kuralının** zamandan bağımsız tedrigeme teorisi için özel bir durumudur.

9.3 KENDİLİĞİNDEN SALINMA

9.3.1 Einstein'ın A ve B katsayıları

İçinde birçok atom bulunan bir kutu düşünün. Bunların N_a tanesi alt durumda (ψ_a) ve N_b tanesi de üst durumda (ψ_b) olsun. Kendiliğinden salınma hızına da A diyelim.[14] Bu durumda bu süreç ile birim zamanda üst durumdan ayrılan parçacıkların sayısı N_bA olur.[15] 9.47 nolu denklemde gördüğümüz gibi, uyarılmış salınma için geçiş hızı elektromanyetik alanın enerji yoğunluğu ile orantılıdır: $B_{ba}\rho(\omega_0)$; o zaman bu mekanizma ile birim zamanda üst durumdan ayrılan parçacıkların sayısı $N_bB_{ba}\rho(\omega_0)$ olur. Soğurma hızı da benzer şekilde $\rho(\omega_0)$ ile orantılıdır. Ona da $B_{ab}\rho(\omega_0)$ diyelim. Bu nedenle birim zamanda üst duruma *katılan* parçacık sayısı $N_aB_{ab}\rho(\omega_0)$ olur. Her şey söylendiğine göre:

$$\frac{dN_b}{dt} = -N_bA - N_bB_{ba}\rho(\omega_0) + N_aB_{ab}\rho(\omega_0). \qquad [9.48]$$

Bu atomların içinde bulunduğu alan ile ısıl dengede olduğunu varsayalım. O zaman her bir düzeyde bulunan parçacık sayısı *sabit* olur. Bu durumda $dN_b/dt = 0$ ve bu da

$$\rho(\omega_0) = \frac{A}{(N_a/N_b)B_{ab} - B_{ba}} \qquad [9.49]$$

sonucuna yol açar. Öte yandan, temel istatistik mekaniğinden[16] biliyoruz ki T sıcaklığında ısıl dengede bulunan E enerjili parçacık sayısı $\exp(-E/k_BT)$ **Boltzmann çarpanı** ile orantılıdır:

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{e^{-E_a/k_BT}}{e^{-E_b/k_BT}} = e^{\hbar\omega_0/k_BT} \qquad [9.50]$$

ve böylece

$$\rho(\omega_0) = \frac{A}{e^{\hbar\omega_0/k_BT}B_{ab} - B_{ba}} \qquad [9.51]$$

olur.

Planck kara cisim ışıması ifadesi ise, bize ısıl ışımanın enerji yoğunluğunun

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2c^3}\frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_BT} - 1} \qquad [9.52]$$

olduğunu söyler. Bu iki ifade karşılaştırılınca,

$$B_{ab} = B_{ba} \qquad [9.53]$$

[14] Normalde geçiş hızı için R'yi kullanırdım. Fakat *der Alte*'ye olan saygıdan, bu bağlamda herkes Einstein gösterimi kullanır.

[15] N_a ve N_b'nin çok büyük olduğunu varsayalım. Bu durumda, bu büyüklükleri zamanın sürekli bir fonksiyonu olarak ele alabilir ve istatistiksel dalgalanmaları göz ardı edebiliriz.

[16] Örneğin, Charles Kittel and Herbert Kroemer, *Thermal Physics*, 2nd ed. (Freeman, New York,1980), 3. Bölüme bakınız.

ve

$$A = \frac{\omega_0^3 \hbar}{\pi^2 c^3} B_{ba} \qquad [9.54]$$

sonucunu elde ederiz. 9.53 nolu denklem zaten bildiğimiz bulguyu doğrular: Uyarılmış salınma için geçiş hızı ile soğurma geçiş hızı aynıdır. Fakat bu 1917 yılında şaşırtıcı bir sonuç idi. Einstein Planck formülünü tekrar çıkarabilmek için uyarılmış salınmayı "icat" etmek zorunda kalmıştı. Bizim burada ilgilendiğimiz şey 9.54 nolu denklemdir. Çünkü, bu bize aradığımız hız olan kendiliğinden salınma hızını (A) zaten bildiğimiz uyarılmış salınma hızı ($B_{ba}\rho(\omega_0)$) cinsinden verir. 9.47 nolu denklemi kullanarak,

$$B_{ba} = \frac{\pi}{3\epsilon_0 \hbar^2} |\boldsymbol{p}|^2 \qquad [9.55]$$

olduğunu buluruz ve bu da kendiliğinden salınma hızını

$$\boxed{A = \frac{\omega_0^3 |\boldsymbol{p}|^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3}} \qquad [9.56]$$

olacak şekilde verir.

Problem 9.8. Aşağı durumlara geçişlerin mekanizması olarak, kendiliğinden salınma, kaynağı kara cisim ışıması olan ısıl olarak uyarılmış salınma ile rekabet halindedir. Oda sıcaklığında (T = 300 K) 5×10^{12} Hz'in çok altındaki frekanslar için ısıl uyarımlar baskın iken, 5×10^{15} Hz'in çok üstündeki frekanslarda kendiliğinden salınmaların baskın olduğunu gösterin. Görünür ışık için hangi mekanizma baskındır?

Problem 9.9 Elektromanyetik alanın taban durum enerji yoğunluğu $\rho_0(\omega)$'yı bilmek, kendiliğinden salınma hızını (9.56 nolu denklem) Einstein'nin A ve B katsayılarını kullanmadan elde etmenizi sağlar. Çünkü, bu durumda problem uyarılmış salınma problemine (9.47 nolu denklem) indirgenmiş olur. Bunu hakkını vererek yapmak kuantum elektrodinamiğini gerektirir. Öte yandan, taban durumunun *her bir kipte (mod) bir fotondan* oluştuğuna inanmaya hazırsanız, türetme çok basitleşir:

(a) 5.111 nolu denklemde N_ω yerine d_k koyup, $(N_\omega = d_k)\ \rho(\omega_0)$'ı bulun. (Muhtemelen yüksek frekanslarda bu ifade çalışmayacaktır. Aksi halde, "boşluk enerjisi" *sonsuz* olurdu ve bu da başka bir günün hikayesi olur).

(b) Sonucunuzu 9.47 nolu denklem ile birlikte kullanarak, kendiliğinden salınma hızını bulun. Elde ettiğinizi 9.56 nolu denklem ile karşılaştırın.

9.2.1 Uyarılmış Bir Durumun Ömrü

9.56 nolu denklem bizim için temel bir sonuçtur. Kendiliğinden salınma için geçiş hızını verir. Şimdi elimizde bir şekilde uyarılmış duruma pompalanmış çok sayıda atomumuz olsun. Kendiliğinden salınma sonucunda, bu sayı zaman geçtikçe azalacaktır. Yani dt zaman aralığı içinde $A dt$ kadarlık bir kesrini kaybedeceğiz:

$$dN_b = -AN_b\, dt, \qquad [9.57]$$

Burada kaybettiğimiz atomların yerini dolduracak bir mekanizmanın olmadığını varsayıyoruz.[17] Yukarıdaki ifadeden $N_b(t)$'i çözersek,

$$N_b(t) = N_b(0)e^{-At} \qquad [9.58]$$

olur. Uyarılmış durumdaki atom sayısı

$$\tau = \frac{1}{A} \qquad [9.59]$$

olarak verilen zaman sabiti ile üstel olarak azalmaktadır. τ'ya uyarılmış durumun **ömrü** denir. Teknik olarak $N_b(t)$'nin başlangıç değerinin $1/e \approx 0.368$ 'sine ulaşması için geçen zamandır.

Başından beri sistemimizde sadece iki durumun olduğunu varsaydım. Bunu sadece ifadelerde notasyon basitliği sağlamak için yaptım. Zaten 9.56 nolu denklem ile verilen kendiliğinden salınma ifadesi, sistem için diğer girilebilen durumların sayısı ne olursa olsun $\psi_b \rightarrow \psi_a$'a geçiş hızını verir (9.15 nolu probleme bakın). Genel olarak uyarılmış bir atom için çok değişik **bozunma kipleri** vardır. Yani ψ_b çok fazla sayıda düşük enerji durumlarına ($\psi_{a_1}, \psi_{a_2}, \psi_{a_3}, \ldots$) bozunabilir. Böyle bir durumda geçiş hızları *toplanır* ve net ömür

$$\tau = \frac{1}{A_1 + A_2 + A_3 + \cdots} \qquad [9.60]$$

şeklini alır.

Örnek 9.1 Sadece x doğrultusunda salınım yapabilen ve bir yayın ucuna tutturulan q yükümüz olsun. Başlangıçta $|n\rangle$ durumunda olan (2.61 nolu denklem) sistemimiz kendiliğinden salınma ile $|n'\rangle$ durumuna bozunsun. 9.44 nolu denklemden

$$\boldsymbol{p} = q\langle n|x|n'\rangle \hat{\imath}$$

olur. 3.33 nolu problemde x'in matris elemanlarını hesaplamıştınız:

$$\langle n|x|n'\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n'}\,\delta_{n,n'-1} + \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right).$$

---

[17] Bu durum daha önceki bölümde ele aldığımız ısıl denge durumu ile karıştırılmamalı. Burada atomların denge durumlarından *çıkarılıp* tekrar denge durumlarına döküldükleri bir süreç içinde olduklarını varsayıyoruz.

Burada ω salınıcının doğal frekansıdır. (Uyarıcı ışımanın frekansını göstermek için artık bu harfe ihtiyacım yok). *Salınma sürecini* incelediğimiz için n' n'den *düşük* değerde olmalı. Bu nedenle

$$\boldsymbol{p} = q\sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\delta_{n',n-1}\,\hat{\imath} \qquad [9.61]$$

alabiliriz. Geçişler "merdiven" üzerinde sadece bir düşük basamağa olabilir ve bu süreçte yayınlanan fotonun frekansı ise;

$$\omega_0 = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \frac{(n+1/2)\hbar\omega - (n'+1/2)\hbar\omega}{\hbar} = (n-n')\omega = \omega. \qquad [9.62]$$

Sistem klasik salınıcı frekansında ışıma yapar. Geçiş hızı (9.56 nolu denklem)

$$A = \frac{nq^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} \qquad [9.63]$$

ve n-inci durağan durumun ömrü

$$\tau_n = \frac{6\pi\epsilon_0 mc^3}{nq^2\omega^2} \qquad [9.64]$$

olarak verilir. Bu arada ışımanın her bir fotonu $\hbar\omega$ enerjisini taşır. Böylece ışımanın *gücü* $A\hbar\omega$ olur:

$$P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3}(n\hbar\omega)$$

ya da n-inci durumda bulunan salınıcının enerjisi $E = (n + 1/2)\,\hbar\omega$ olduğundan, güç

$$P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3}\left(E - \frac{1}{2}\hbar\omega\right) \qquad [9.65]$$

halini alır. Bu, başlangıçtaki enerjisi E olan bir kuantum salınıcının ışımasının ortalama gücüdür. Kıyaslama yapabilmek için aynı enerjiye sahip *klasik* salınıcının ışımasının ortalama gücünü belirleyelim. Klasik elektrodinamiğe göre, ivmelenen bir q yükünün ışımasının gücü **Larmor formülü**[18] ile belirlenir:

$$P = \frac{q^2a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}. \qquad [9.66]$$

x_0 genlikli bir harmonik salınıcı için, $x(t) = x_0\cos(\omega t)$ ve ivme $a = -x_0\omega^2\cos(\omega t)$'dir. Tam bir devir üzerinden ortalama alındığında

$$P = \frac{q^2x_0^2\omega^4}{12\pi\epsilon_0 c^3}$$

[18] Griffiths (10. Dipnot), 11.2.1. Kesime bakınız.

elde edilir. Öte yandan, salınıcının *enerjisi* $E = (1/2)\,m\omega^2 x_0^2$ olduğundan, $x_0^2 = 2E/m\omega^2$ olur ve bundan dolayı

$$P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3}E \qquad [9.67]$$

şeklinde elde edilir. Bu ise E enerjili *klasik* harmonik salınıcının ışımasının ortalama gücüdür. Klasik limitte $(\hbar \to 0)$ klasik ve kuantum formülleri uyumludur.[19] Fakat, 9.65 nolu denklem ile verilen kuantum formülü taban durumunu korur. Yani $E = (1/2)\,\hbar\omega$ ise, salınıcı ışıma yapmaz.

Problem 9.10 Uyarılmış bir durumun **yarı ömrü** ($t_{1/2}$) çok büyük bir örnekteki atomların yarısının bir geçiş yapması için geçen zamandır. $t_{1/2}$ ile durumun ömrü τ arasındaki ilişkiyi bulun.

***Problem 9.11** Hidrojen atomunun $n = 2$ durumlarının (dört) her birinin ömrünü (*saniye* olarak) hesaplayın. *Yardım:* $\langle\psi_{100}|x|\psi_{200}\rangle$, $\langle\psi_{100}\,|y|\psi_{211}\rangle$ vb şeklindeki matris elemanlarını hesaplamalısınız. Unutmayın, $x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$ ve $z = r\cos\theta$. Bu integrallerin çoğu sıfırdır. Bu nedenle hesaplamaya başlamadan önce integrallere şöyle bir göz atın. *Yanıt:* ψ_{200} dışında hepsi için 1.60×10^{-9} saniye ve ψ_{200} için sonsuz.

9.3.3 Seçim Kuralları

Kendiliğinden salınma hızlarının hesabı $\langle\psi_b|\mathbf{r}|\psi_a\rangle$ şeklinde matris elemanları hesabına indirgenmiştir:

$$\langle\psi_b|\mathbf{r}|\psi_a\rangle.$$

9.11 nolu problem üzerine çalıştığınızda fark etmiş olacağınız gibi (*çalışmadıysanız*, hemen şimdi 9.11 nolu probleme dönün ve *çözmeye çalışın*), bu büyüklüklerin çoğu *sıfır* olur ve işin başında bunun ne zaman sıfır olacağını kestirebilirsek, bu gereksiz integralleri hesaplamak için vakit kaybetmemiş oluruz. Hamiltonyenleri küresel simetriye sahip, hidrojen atomuna benzer sistemlerle ilgilendiğimizi varsayalım. Böyle bir durumda, bilinen kuantum sayıları n, l, ve m ile kuantum durumlarını belirleyebiliriz. Böylece matris elemanları

$$\langle n'l'm'|\mathbf{r}|nlm\rangle$$

şeklini alır. Açısal momentum operatorlerinin hermitsel olmaları gerçeğinin ve açısal

[19] Aslında, P'yi *taban durumunun üzerindeki* enerjiler cinsinden ifade edersek, bu iki formül özdeş olur.

momentum sıra değiştirme bağıntılarının akıllıca kullanımı bu büyüklük üzerine çok kuvvetli bağ koşullarının oluşmasına yol açar.

---

m ve m' için seçim kuralları: Önce 4. Bölümde üzerinde çalıştığımız L_z'nin x, y ve z ile komütatörlerine bakalım (4.122 nolu denkleme bakın):

$$[L_z, x] = i\hbar y, \quad [L_z, y] = -i\hbar x, \quad [L_z, z] = 0. \tag{9.68}$$

Üçüncü bağıntıdan

$$0 = \langle n'l'm'|[L_z, z]|nlm\rangle = \langle n'l'm'|(L_z z - zL_z)|nlm\rangle$$
$$= \langle n'l'm'|[(m'\hbar)z - z(m\hbar)]|nlm\rangle = (m' - m)\hbar\langle n'l'm'|z|nlm\rangle$$

bulunur.

Sonuç:

$$\text{Ya} \quad m' = m \quad \text{ya da} \quad \langle n'l'm'|z|nlm\rangle = 0. \tag{9.69}$$

Yani; $m' = m$ olmadığı sürece, z'nin matris elemanları her zaman sıfır olur.

Bu arada L_z'nin x ile olan komütatöründen

$$\langle n'l'm'|[L_z, x]|nlm\rangle = \langle n'l'm'|(L_z x - xL_z)|nlm\rangle$$
$$= (m' - m)\hbar\langle n'l'm'|x|nlm\rangle = i\hbar\langle n'l'm'|y|nlm\rangle$$

elde ederiz.

Sonuç:

$$(m' - m)\langle n'l'm'|x|nlm\rangle = i\langle n'l'm'|y|nlm\rangle. \tag{9.70}$$

Yani; y'nin matris elemanlarını hiçbir zaman hesaplamak zorunda değilsiniz. Bunları her zaman x'in ilgili matris elemanlarından elde edebilirsiniz.

En son olarak, L_z'nin y ile komütatörü

$$\langle n'l'm'|[L_z, y]|nlm\rangle = \langle n'l'm'|(L_z y - yL_z)|nlm\rangle$$
$$= (m' - m)\hbar\langle n'l'm'|y|nlm\rangle = -i\hbar\langle n'l'm'|x|nlm\rangle.$$

sonucu verir.

Sonuç:

$$(m' - m)\langle n'l'm'|y|nlm\rangle = -i\langle n'l'm'|x|nlm\rangle. \tag{9.71}$$

9.70 ve 9.71 nolu denklemleri bir araya getirdiğimizde

$$(m' - m)^2\langle n'l'm'|x|nlm\rangle = i(m' - m)\langle n'l'm'|y|nlm\rangle = \langle n'l'm'|x|nlm\rangle$$

olur ve böylece

$$(m' - m)^2 = 1 \quad \text{ya da} \quad \langle n'l'm'|x|nlm\rangle = \langle n'l'm'|y|nlm\rangle = 0. \tag{9.72}$$

9.69 ve 9.72 nolu denklemleri kullanarak, m için **seçim kuralını**

$$\boxed{\Delta m = \pm 1 \text{ ya da } 0 \text{ olmadıkça, geçişler yasak}} \tag{9.73}$$

şeklinde elde ederiz. Bu kolay anlaşılabilecek bir sonuçtur. Fotonun spini 1'dir ve bundan dolayı m değerleri 1; 0 ya da -1 olur.[20] Açısal momentumun z bileşeninin korunumu fotonun kazandığını atomun bırakması zorunluluğunu getirir.

---

l ve l' için seçim kuralları: 9.12 nolu problemde aşağıdaki sıra değiştirme bağıntısını çıkarmanız istenir:

$$\left[L^2, [L^2, \mathbf{r}]\right] = 2\hbar^2(\mathbf{r}L^2 + L^2\mathbf{r}). \tag{9.74}$$

Daha önce yaptığımız gibi, seçim kuralını çıkarabilmek için bu komütatörü $\langle n'l'm'|$ ve $|nlm\rangle$ arasında sandviç yaparız:

$$\langle n'l'm'|[L^2, [L^2, \mathbf{r}]]|nlm\rangle = 2\hbar^2\langle n'l'm'|(\mathbf{r}L^2 + L^2\mathbf{r})|nlm\rangle$$
$$= 2\hbar^4[l(l+1) + l'(l'+1)]\langle n'l'm'|\mathbf{r}|nlm\rangle = \langle n'l'm'|(L^2[L^2, \mathbf{r}] - [L^2, \mathbf{r}]L^2)|nlm\rangle$$
$$= \hbar^2[l'(l'+1) - l(l+1)]\langle n'l'm'|[L^2, \mathbf{r}]|nlm\rangle$$
$$= \hbar^2[l'(l'+1) - l(l+1)]\langle n'l'm'|(L^2\mathbf{r} - \mathbf{r}L^2)|nlm\rangle$$
$$= \hbar^4[l'(l'+1) - l(l+1)]^2\langle n'l'm'|\mathbf{r}|nlm\rangle. \tag{9.75}$$

Sonuç:

$$\text{Ya } 2[l(l+1) + l'(l'+1)] = [l'(l'+1) - l(l+1)]^2$$
$$\text{ya da} \quad \langle n'l'm'|\mathbf{r}|nlm\rangle = 0. \tag{9.76}$$

Fakat

$$[l'(l'+1) - l(l+1)] = (l' + l + 1)(l' - l)$$

ve

$$2[l(l+1) + l'(l'+1)] = (l' + l + 1)^2 + (l' - l)^2 - 1$$

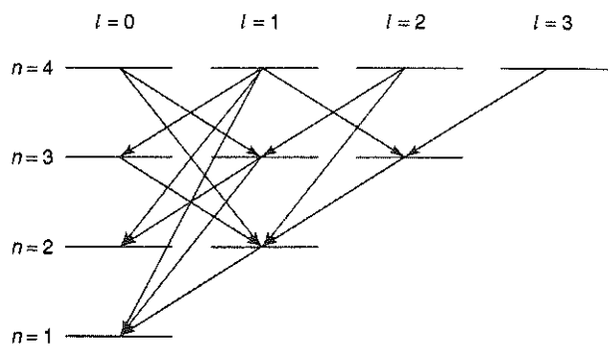
olduğundan, 9.76 nolu denklem ile verilen ilk koşul

$$[(l' + l + 1)^2 - 1][(l' - l)^2 - 1] = 0 \tag{9.77}$$

şeklinde yazılabilir. $l' = l = 0$ olmadıkça ilk çarpan sıfır *olamaz*. ($l' = l = 0$ gediği

---

[20] Kutup eksenini ilerleme yönünde aldığımızda, foton $m = 0$ değerini almaz. Ayrıca sadece lineer bağımsız foton durumlarının *sayısı* ile ilgileniyorsanız, yanıt 3 değil 2 olur. Öte yandan, bu durumda foton z doğrultusunda olmak zorunda değildir ve bu üç değer m'nin olası değerleri olur.



ŞEKİL 9.6: Hidrojen atomunun ilk dört Bohr düzeyleri için izin verilen geçiler.

9.13 nolu problemde kapatılmıştır). O zaman, koşul $l' = l \pm 1$ basit şeklini alır. Böylece, l için seçim kuralını da elde etmiş olduk:

$$\boxed{\Delta l = \pm 1 \text{ olmadıkça, geçişler yasak}} \qquad [9.78]$$

Bu, *türetmesi* zor olsa bile *yorumlanması* kolay bir sonuçtur: Fotonun spini 1 olduğuna göre, açısal momentum toplama kuralı $l' = l+1$, $l' = l$ ya da $l' = l-1$ değerlerine izin verir (açısal momentum korunumuna uygun olmasına rağmen, elektrik dipol ışıması için $l' = 1$ geçişi oluşmaz).

Düşük enerji düzeylerine olan tüm geçişlerin kendiliğinden salınma süreci ile gerçekleşmediği açık. Bazıları seçim kuralları ile yasaklanmıştır. Hidrojen atomunun ilk dört Bohr enerji düzeyi için izin verilen geçişler şematik olarak 9.6 nolu şekilde gösterilmiştir. 2S (ψ_{200}) durumunun "çıkmazda" olduğuna dikkat edin: Bozunamıyor çünkü $l = 1$ olan daha düşük enerji düzeyi yok. Bu, **yarı kararlı** bir durumdur ve ömrü örneğin 2P durumlarından (ψ_{211}, ψ_{210} ve ψ_{21-1}) çok daha uzun olur. Yarı kararlı durumlar eninde sonunda ya çarpışmalarla ya da yanlış da olsa **yasak** (9.21 nolu problem) geçişler olarak adlandırılan süreçlerle ya da çoklu foton salınmaları ile bozunurlar.

***Problem 9.12** 9.74 nolu denklem ile verilen sıra değiştirme bağıntısını kanıtlayın. *Yardım:* Önce

$$[L^2, z] = 2i\hbar(xL_y - yL_x - i\hbar z)$$

olduğunu gösterin. Bunu ve de $\mathbf{r} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{r} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = 0$ olduğunu kullanarak,

$$[L^2, [L^2, z]] = 2\hbar^2(zL^2 + L^2 z)$$

sonucuna varın. z'den $\mathbf{r}$'ye genelleştirme sıradandır.

Problem 9.13. 9.78 nolu denklemde var olan "gediği" $l' = l = 0$ olduğu durumda $\langle n'l'm'|r|nlm\rangle = 0$ olduğunu göstererek kapatın.

****Problem 9.14** Hidrojen atomunun $n = 3$, $l = 0$, $m = 0$ durumunda bulunan bir elektron ardışık geçişlerle (elektrik dipol) taban durumuna bozunsun.

(a) Bu elektron için mümkün olan bozunma kanalları hangileridir? Bunları aşağıda gösterildiği gibi belirtin.

$$|300\rangle \to |nlm\rangle \to |n'l'm'\rangle \to \cdots \to |100\rangle.$$

(b) Bu kuantum durumunda bulunan bir şişe dolusu atomunuz olsaydı, her bir kanal için bunların kaçta kaçı bozunurlardı?

(c) Bu durumun ömrü ne kadardır? *Yardım:* Bir kez ilk geçişi yaptı mı, elektron artık $|300\rangle$ durumunda olamaz. Demek ki, ömrü hesaplamada önemli olan şey her bir sıradaki ilk adımdır. Birden fazla bozunma kanalı mümkün olduğunda geçiş hızları toplanır.

9. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

****Problem 9.15** 9.1 ve 9.2 nolu denklemlerin genelleştirilmesinden başlayarak, çok düzeyli bir sistem için zamana bağlı tedirgeme teorisi geliştirin:

$$H_0\psi_n = E_n\psi_n, \quad \langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}. \qquad [9.79]$$

$t = 0$ anında, $H'(t)$ tedirgemesini başlatalım. Bu durumda Hamiltonyen

$$H = H_0 + H'(t) \qquad [9.80]$$

olur.

(a) 9.6 nolu denklemi

$$\Psi(t) = \sum c_n(t)\psi_n e^{-iE_n t/\hbar} \qquad [9.81]$$

verecek şekilde genelleştirin ve

$$\dot{c}_m = -\frac{i}{\hbar}\sum_n c_n H'_{mn} e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \qquad [9.82]$$

olduğunu gösterin. Burada

$$H'_{mn} \equiv \langle\psi_m|H'|\psi_n\rangle \qquad [9.83]$$

olarak verilir.

(b) Sistem başlangıçta ψ_N durumunda ise, birinci dereceden tedirgeme teorisi kapsamında

$$c_N(t) \cong 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{NN}(t')\,dt' \qquad [9.84]$$

ve

$$c_m(t) \cong -\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{mN}(t')e^{i(E_m-E_N)t'/\hbar}\,dt', \quad (m \neq N) \qquad [9.85]$$

olduğunu gösterin.

(c) H' 'nün $t = 0$ anında açılıp daha sonraki bir t anında kapatıldığı zaman aralığı hariç *sabit* olduğunu varsayın. N durumundan M durumuna $(M \neq N)$ geçiş olasılığını t'nin fonksiyonu olarak bulun. *Yanıt:*

$$4|H'_{MN}|^2\,\frac{\sin^2[(E_N - E_M)t/2\hbar]}{(E_N - E_M)^2}. \qquad [9.86]$$

(d) Şimdi H' zamanın sinüzoidal bir fonksiyonu olsun: $H' = V\cos(\omega t)$. Genel varsayımları yaparak, geçişlerin sadece enerjileri $E_M = E_N \pm \hbar\omega$ olan durumlara olabileceğini ve geçiş olasılığının

$$P_{N\to M} = |V_{MN}|^2\frac{\sin^2[(E_N - E_M \pm \hbar\omega)t/2\hbar]}{(E_N - E_M \pm \hbar\omega)^2} \qquad [9.87]$$

olduğunu gösterin.

(e) Çok fazla enerji düzeyi olan bir sistemin uyumsuz elektromanyetik ışımaya gömüldüğünü varsayın. 9.2.3. Kesimi kılavuz olarak kullanarak, uyarılmış salınma için geçiş hızının iki düzeyli sistem için elde edilen ifade (9.47 nolu denklem) ile aynı olduğunu gösterin.

Problem 9.16 9.15 nolu problemin (c) ve (d) şıklarında verilen örnekler için $c_m(t)$'yi birinci dereceye kadar hesaplayın.

$$\sum_m |c_m(t)|^2 = 1 \qquad [9.88]$$

normlama koşulunun sağlanıp sağlanmadığına bakın ve uyumsuzluk var ise nedenlerini açıklayın. Başlangıçtaki ψ_N durumunda *kalma* olasılığını hesaplamak istediğinizi varsayın. Bu durumda $|c_N(t)|^2$ ifadesini mi yoksa $1 - \sum_{m\neq N}|c_m(t)|^2$ ifadesini mi hesaplarsanız daha iyi olur?

Problem 9.17: Bir parçacık $t = 0$ anında sonsuz kare kuyu potansiyelinin N-inci durumunda olsun. Şimdi, kuyunun "tabanı" kuyu içindeki potansiyeli düzgün fakat zamana bağlı olarak değiştirecek şekilde geçici olarak yükselsin (örneğin kuyunun içine su sızıyor ve sonra da boşalıyor olabilir). $V_0(t)$ potansiyeli $V_0(0) = V_0(T) = 0$ koşullarına uysun.

(a) 9.82 nolu denklemi kullanarak, *kesin* $c_m(t)$ ifadesini elde edin. Ayrıca, dalga fonksiyonunun *fazı* değiştirdiğini fakat hiçbir geçişin olmadığını gösterin. $\phi(T)$ faz değişimini $V_0(t)$'nin fonksiyonu olarak bulun.

(b) Aynı problemi birinci dereceden tedirgeme teorisi içinde inceleyin ve sonuçlarınızı kıyaslayın.

Açıklama: Her ne zaman tedrigeme potansiyeline sadece bir sabit (x'de sabit, t'de değil) eklense de, aynı sonuç elde edilir. Bunun sonsuz kare kuyu potansiyeli ile hiçbir ilişkisi yoktur.1.8 nolu problemle kıyaslayın.

***Problem 9.18** m kütleli bir parçacık başlangıçta bir boyutlu sonsuz kare kuyu potansiyelinin taban durumundadır. $t = 0$ anında kuyu içerisine potansiyele

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \le x \le a/2, \\ 0, & a/2 < x \le a, \\ \infty, & \text{diğer durumlar.} \end{cases}$$

şeklini verecek bir "tuğla" atılır. Burada $V_0 << E_1$'dir. T zaman sonra tuğla kuyudan çıkarılır ve parçacığın enerjisi ölçülür. Birinci dereceden tedirgeme teorisini kullanarak, ölçümün E_2 verme olasılığını bulun.

Problem 9.19 Uyarılmış salınma, soğurma (uyarılmış) ve kendiliğinden salınma ile karşılaştık. Nasıl olur da kendiliğinden *soğurma* diye bir süreç yok?

***Problem 9.20 Manyetik rezonans:** $B_0\,\hat{k}$ statik manyetik alanı içinde durgun olan γ jiromanyetik oranlı ve $1/2$ spinli bir parçacık $\omega_0 = \gamma B_0$ Larmor frekansı ile presesyon yapar (4.3 nolu örnek). Toplam alanı

$$\mathbf{B} = B_{\text{rf}}\cos(\omega t)\,\hat{\imath} - B_{\text{rf}}\sin(\omega t)\,\hat{\jmath} + B_0\,\hat{k} \qquad [9.89]$$

kılacak şekilde küçük bir enine $B_{\text{rf}}[\cos(\omega t)\,\hat{\imath} - \sin(\omega t)\,\hat{\jmath}]$ radyo frekansını (rf) açalım.

(a) Bu sistem için 2×2'lik satır ve sütunlu Hamiltonyen matrisini (4.158 nolu denklem) oluşturun.

(b) t anındaki spin durumu $\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$ ise,

$$\dot{a} = \frac{i}{2}\left(\Omega e^{i\omega t}b + \omega_0 a\right); \quad \dot{b} = \frac{i}{2}\left(\Omega e^{-i\omega t}a - \omega_0 b\right) \qquad [9.90]$$

olduğunu gösterin. Burada $\Omega \equiv \gamma B_{\text{rf}}$, rf alanının şiddeti ile ilgili bir büyüklüktür.

(c) $a(t)$ ve $b(t)$ için genel çözümün a_0 ve b_0 başlangıç değerleri cinsinden

$$a(t) = \left\{a_0\cos(\omega' t/2) + \frac{i}{\omega'}[a_0(\omega_0 - \omega) + b_0\Omega]\sin(\omega' t/2)\right\}e^{i\omega t/2}$$

$$b(t) = \left\{b_0\cos(\omega' t/2) + \frac{i}{\omega'}[b_0(\omega - \omega_0) + a_0\Omega]\sin(\omega' t/2)\right\}e^{-i\omega t/2}$$

olduğunu gösterin. Buradaki ω' aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$\omega' \equiv \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2}. \qquad [9.91]$$

(d) Parçacığın başlangıçta spin durumu yukarı ($a_0 = 1$, $b_0 = 0$) ise, aşağı spin durumuna geçiş olasılığını zamanın fonksiyonu olarak bulun.
Yanıt: $P(t) = \left\{\Omega^2/[(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2]\right\} \sin^2(\omega' t/2)$

(e)

$$P(\omega) = \frac{\Omega^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2} \qquad [9.92]$$

rezonans eğrisini sürücü frekansı ω'nın fonksiyonu olarak çizin (ω_0 ve Ω sabit). Maksimumun $\omega = \omega_0$ değerinde oluştuğuna dikkat edin. $\Delta\omega$ "yarı maksimumda tüm genişlik" değerini bulun.

(f) $\omega_0 = \gamma B_0$ olduğundan, deneysel olarak ölçülmüş rezonansı kullanıp, parçacığın manyetik dipol momentini hesaplayabiliriz. Durgun alanı 10.000 gauss ve genliği 0.01 gauss rf alanının kullanıldığı bir **nükleer manyetik rezonans** (nmr) deneyinde protonun g-çarpanı ölçülecektir. Resonans frekansı ne olacaktır? (protonun manyetik momenti için 6.5. Kesime bakın). Rezonans eğrisinin genişliğini bulun. Tüm yanıtlarınızı *Hz* cinsinden veriniz.

***Problem 9.21** 9.31 nolu denklemde ışığın dalga boyuna kıyasla atom çok küçük olduğundan, alanın uzay koordinatlarındaki değişimin göz ardı edilebileceğini varsaydım. *Gerçek* elektrik alan

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \qquad [9.93]$$

ile verilir. Atom orijine yerleştirilir ise, ilgilenilen hacim için $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \ll 1$ ($|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$, ve böylece $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \sim r/\lambda \ll 1$) olur ve bundan dolayı bu terimi yok saymayı göze alabiliriz. Sadece birinci dereceden düzeltmeyi göz önüne alalım:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0[\cos(\omega t) + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \sin(\omega t)]. \qquad [9.94]$$

İlk terim, bu konuda ele aldığımız **izin verilen (elektrik dipol)** geçişleri, ikinci terim ise **yasak** olarak adlandırılan **(manyetik dipol** ve **elektrik kuadrapol)** geçişlerini verir. ($\mathbf{k}.\mathbf{r}$'nin daha yüksek dereceden kuvvetleri daha yüksek çok kutuplu (multipole) momentlerle ilgili *daha da* "yasak" geçişlere götürür).[21]

(a) Yasak geçişler için kendiliğinden salınma hızını elde edin (kesin hesap için gerekli olmasına rağmen, kutuplanma ve ilerleme yönleri üzerinden ortalama almakla uğraşmayın). *Yanıt:*

$$R_{b\to a} = \frac{q^2\omega^5}{\pi\epsilon_0\hbar c^5} |\langle a|(\hat{n} \cdot \mathbf{r})(\hat{k} \cdot \mathbf{r})|b\rangle|^2. \qquad [9.95]$$

[21] Sistematik bir inceleme için, David Park, *Introduction to the Quantum Theory*, 3rd ed. (Mc Graw Hill, New York, 1992), 11. Bölüme bakınız.

(b) Bir boyutlu salınıcı için yasak geçişlerin n düzeyinden $n-2$ düzeyine olduğunu ve geçiş hızının $\hat{n}$ ve $\hat{k}$ üzerinden uygun bir şekilde ortalama alındığında

$$R = \frac{\hbar q^2 \omega^3 n(n-1)}{15\pi\epsilon_0 m^2 c^5} \qquad [9.96]$$

olarak verildiğini gösterin (*Dikkat:* Burada ω salınıcının değil *foton*'un frekansıdır). "Yasak" geçiş hızının "izin verilen" geçiş hızına *oranını* bulun ve terminoloji üzerine yorumunuzu yapın.

(c) Hidrojen atomunda $2S \to 1S$ geçişinin "yasak" bir geçiş ile bile mümkün olmadığını gösterin. (Aslında bu tüm yüksek çok kutuplar için de doğrudur: Baskın bozunma iki foton salınmasıdır ve ömrü yaklaşık olarak saniyenin onda biridir.[22])

***Problem 9.22** Hidrojen atomunda n, l durumundan n', l' durumuna geçiş için kendiliğinden salınma hızının (9.56 nolu denklem)

$$I \equiv \int_0^\infty r^3 R_{nl}(r) R_{n'l'}(r)\, dr \qquad [9.98]$$

olmak üzere,

$$\frac{e^2\omega^3 I^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} \times \begin{cases} \dfrac{l+1}{2l+1}, & l' = l+1, \\ \dfrac{l}{2l-1} & l' = l-1, \end{cases} \qquad [9.97]$$

şeklinde olduğunu gösterin. (Atom başlangıçta belli bir m değerine sahiptir ve seçim kuralına uyan herhangi bir m' değerine sahip bir duruma gider: $m' = m + 1$, m ya da $m - 1$. Yanıtın m'den bağımsız olduğuna dikkat edin). *Yardım*: Önce $l' = l + 1$ durumu için $|nlm\rangle$ ve $|n'l'm'\rangle$ arasında sıfır olmayan x, y, z matris elemanlarını hesaplayın. Bunları kullanarak

$$|\langle n', l+1, m+1|\mathbf{r}|nlm\rangle|^2 + |\langle n', l+1, m|\mathbf{r}|nlm\rangle|^2 + |\langle n', l+1, m-1|\mathbf{r}|nlm\rangle|^2$$

büyüklüğünü belirleyin. Sonra aynı işlemleri $l' = l - 1$ için tekrarlayın.

[22] Masataka Mizushima, *Quantum Mechanics of Atomic Spectra and Atomic Structure*, Benjamin, New York (1970), 5.6. Kesime bakınız.

10. BÖLÜM

ADYABATİK YAKLAŞIM

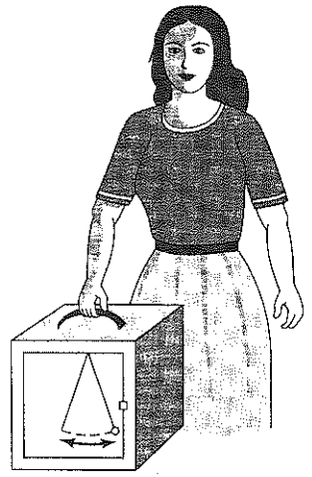
10.1 ADYABATİK TEOREM

10.1.1 Adyabatik Süreçler

Sürtünmenin ya da hava direncinin olmadığı durumda düşey düzlemde ileri geri salınan ideal bir sarkacı düşünün. Destek noktasını tutup silkelercesine sarsarsanız, sarkaç topu kaotik bir şekilde salınır. Onun yerine destek noktasını 10.1 nolu şekilde gösterildiği gibi *çok yumuşak ve kararlı bir şekilde* hareket ettirirseniz, sarkaç aynı düzlemde (ya da paralel düzlemde) ve aynı genlikle pürüzsüz bir şekilde salınımına devam eder. *Dış koşulların bu yavaşça değişimi* **adyabatik** bir süreci tanımlar. Yalnız burada iki karakteristik zaman olduğuna dikkat edin: T_i, sistemin kendi hareketini temsil eden "iç" zaman (bizim durumumuzda sarkaç salınımının periyodu) ve T_d, sistemin parametrelerinin fark edilir bir şekilde değiştiği "dış" zaman (örneğin, sarkaç titreşim yapan bir platform üzerine sabitlenmiş olsaydı, T_d *platform* hareketinin periyodu olurdu). Adyabatik bir süreç için $T_d \gg T_i$ olur.[1]

Adyabatik bir sürecin analizindeki en temel strateji, problemi önce dış parametrelerin *sabit* alındığı hali ile çözmek ve hesaplamaların *sonunda* bu parametrelerin zamanla yavaşça değişimine izin vermektir. Örneğin, sabit L uzunluğundaki bir sarkacın klasik periyodu: $2\pi\sqrt{L/g}$; eğer boy yavaşça *değişiyorsa*, o zaman periyot tahminen $2\pi\sqrt{L(t)/g}$ olurdu. Daha zor bir örnek ise, 7.3. Kesimde

[1] Klasik adyabatik süreçler üzerine ilgi çekici görüşler için Frank S. Crawford, *Am. J. Phys.* **58**, 337 (1990)'a bakınız.



ŞEKİL: 10.1: Adyabatik hareket: eğer kutu çok yavaş bir şekilde taşınırsa, içindeki sarkaç aynı genellikle ve salındığı düzleme paralel olan bir düzlemde salınmasına devam edecektir.

tartıştığımız hidrojen molekül iyonudur. Önce elektronun hareketini, çekirdeklerin birbirlerinden sabit bir R uzaklığında *durgun* oldukları varsayımı altında çözmüştük. Sistemin taban durum enerjisini R'nin fonksiyonu olarak bulduktan sonra, çekirdeklerin denge uzaklığını belirledik ve grafiğin eğriliğinden de çekirdeklerin titreşim frekanslarını elde ettik (7.10 nolu problem). Molekül fiziğinde, bu teknik **Born Oppenheimer yaklaşımı** olarak adlandırılır; Durgun haldeki çekirdeklerle başlayarak, elektronik dalga fonksiyonlarını hesapla ve bunları kullanarak çekirdeklerin konumları ve hareketleri hakkında bilgi edin.

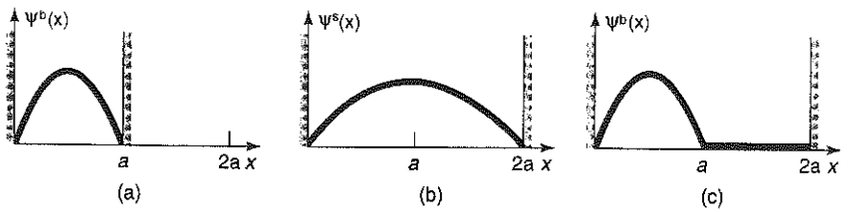
Kuantum mekaniğinde, **adyabatik yaklaşımın** esas içeriği bir teorem şeklinde sunulabilir. Hamiltonyenin H^b başlangıç halinden, H^s son haline *yavaşça* değiştiğini varsayalım. **Adyabatik teorem** şöyle der: Eğer parçacık başlangıçta H^b'nin n. öz durumunda ise, o zaman Schrödinger denklemi altında H^s'nin n. özdurumuna taşınacaktır. Burada durumların sıralanmasında muğlâklık olmasın diye H^b'den H^s'ye olan geçişte, spektrumun ayrık ve katlı olmadığı varsayıldı; özfonksiyonları "izleyecek" uygun bir süreç tanımlandığı takdirde, bu koşullar biraz gevşetilebilir ancak burada buna değinmeyeceğim.

Örnek olarak, sonsuz kare kuyu potansiyelinin taban durumunda bulunan bir parçacığı ele alalım (10.2(a) nolu şekil):

$$\psi^b(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right). \qquad [10.1]$$

Şimdi sağ taraftaki duvarı yavaşça $2a$ konumuna getirirsek, adyabatik teorem bize parçacığın sonunda genişletilmiş kuyunun taban durumunda (belki bir faz çarpanı kadar farkla) bulunacağını söyler. (10.2 (b) nolu şekil):

$$\psi^s(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{2a}x\right). \qquad [10.2]$$



ŞEKİL: 10.2: (a) Başlangıçta, parçacık sonsuz kare kuyu potansiyelin taban durumunda olsun. (b) Duvar *yavaşça* hareket ederse, parçacık taban durumunda kalacaktır. (c) Duvar *hızlı* bir şekilde hareket ederse, parçacık başlangıç durumunda anlık olarak kalacaktır.

Tedirgeme teorisinin aksine, burada Hamiltonyen'de *küçük bir* değişiklikten bahsetmiyoruz. Bu *büyük* bir değişikliktir. Şart konulan tek şey, bu değişimin *yavaşça* olmasıdır. Burada enerji korunmaz: Duvarı her kim hareket ettiriyor ise, yavaşça genleşen silindirik gazın üzerindeki piston gibi, sistemden enerji çekmektedir. Bunun tersi yani duvar *ani bir şekilde* ötelenirse, son durum hala yeni Hamiltonyen'in (2.38 nolu problem) özdurumlarının karmaşık lineer bir kombinasyonu olan $\psi^b(x)$ olur (10.2(c) nolu şekil). Engel ani olarak kaldırıldığında, bir gazın *serbestçe* genleşmesinde olduğu gibi, enerji (en azından *beklenen değeri*) *korunur* ve yapılan bir iş yoktur.

***Problem 10.1** Sağ duvarı *sabit* bir v hızıyla ötelenen sonsuz kare kuyu problemi *kesin olarak* çözülebilen bir problemdir.[2] Çözümlerin tam takımı:

$$\Phi_n(x,t) \equiv \sqrt{\frac{2}{w}} \sin\left(\frac{n\pi}{w}x\right) e^{i(mvx^2 - 2E_n^b at)/2\hbar w}. \qquad [10.3]$$

Burada, $w(t) \equiv a + v\,t$ kuyunun anlık genişliğidir ve $E_n^b = n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$ ise a genişliğindeki *orijinal* kuyunun n-inci izin verilen enerji değeridir. *Genel* çözüm Φ'lerin lineer kombinasyonudur:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(x,t) \qquad [10.4]$$

Buradaki c_n katsayıları t'den *bağımsızdır*.

(a) 10.3 nolu denklemin zamana bağımlı Schrödinger denklemini uygun sınır koşullarıyla sağlayıp sağlamadığını kontrol edin.

[2] S. W. Doescher and M. H. Rice, *Am. J. Phys.* **37**, 1246 (1969).

(b) Parçacığın $t = 0$ anında, ilk kuyunun taban durumunda olduğunu varsayın:

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right).$$

Seri açılımındaki katsayıların

$$c_n = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} e^{-i\alpha z^2} \sin(nz)\sin(z)\,dz \qquad [10.5]$$

şeklinde yazılabileceğini gösterin. Burada $\alpha \equiv mva / 2\pi^2\hbar$ olup, duvarın ötelenme hızının boyutsuz bir ölçüsüdür. Ama ne yazık ki, bu integral temel fonksiyonlar cinsinden hesaplanamaz.

(c) Şimdi, kuyunun genişliğini orijinal genişliğinin iki misli artıralım ki "dış" zaman $w(T_d)=2a$ ifadesi ile verilebilsin. "İç" zaman, taban durumunda (başlangıç) zamana bağlı üstel çarpanın *periyodudur*. T_d ve T_i'i belirleyin ve adyabatik rejimin, integral bölgesinde $\exp(-i\alpha z^2) \cong 1$ kılan $\alpha \ll 1$'e karşılık geldiğini gösterin. Bunu kullanarak, c_n açılım katsayılarını belirleyin. $\Psi(x,t)$'yi oluşturun ve bunun adyabatik teoremle uyuştuğunu gösterin.

(d) $\Psi(x,t)$ içindeki faz çarpanının

$$\theta(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_1(t')\,dt' \qquad [10.6]$$

şeklinde yazılabileceğini gösterin. Burada $E_n(t) \equiv n^2\pi^2\hbar^2/2mw^2$, t anındaki *anlık* özdeğerdir. Bu sonucu açıklayın.

10.1.2 Adyabatik Teoremin Kanıtı

Adyabatik teoremin ifadesi kolay ve mantıklı görünüyor olmasına rağmen, kanıtlanması kolay değildir.[3] Hamiltonyen zamandan *bağımsız* ise ψ_n, n-inci özdurumdan[4] başlayan bir parçacık için

$$H\psi_n = E_n\psi_n. \qquad [10.7]$$

[3] Teorem genelde eski kuantum teorilerindeki adyabatik süreçleri inceleyen Ehrenfest'e atfedilir. Modern kuantum mekaniğinde, ilk kanıt Born ve Fock tarafından yapılmıştır; (*Zeit. f. Physik* **51**, 165 (1928)). Diğer kanıtlar için, Messiah, *Quantum Mechanics*, Wiley, New York (1962), Vol. II, Chapter XVII, Section 12; J-T Hwang and Philip Pechukas, *J. Chem. Phys.* **67**, 4640, (1977) ve Gasiorowicz, *Quantum Physics*, Wiley, New York (1974), Chapter 22, Problem 6'ya bakınız. Burada verilen kanıt B. H. Bransden and C.J. Joachain, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd edition, Addison-Wesley, Boston, MA (2000), 9.4. Kesimde verilen kanıtı takip eder.

[4] Burada konuma ya da spine bağlılığı hasır altı edeceğim. Konumuz sadece zamana bağlılıktır.

olur ve parçacık sadece bir faz çarpanı alarak n-inci özdurumda kalır:

$$\Psi_n(t) = \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}. \qquad [10.8]$$

Eğer Hamiltonyen zamanla *değişir* ise, o zaman özfonksiyonlar ve özdeğerler de zamana bağlı olurlar:

$$H(t)\psi_n(t) = E_n(t)\psi_n(t) \qquad [10.9]$$

ve bununla beraber hala ortonormal bir takım oluştururlar (herhangi bir anda)

$$\langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle = \delta_{nm} \qquad [10.10]$$

ve de çözümler tamdır. Bu nedenle zamana bağlı Schrödinger denkleminin

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H(t)\Psi(t) \qquad [10.11]$$

genel çözümü bu özfonksiyonların lineer kombinasyonu olarak yazılabilirler:

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(t)e^{i\theta_n(t)}. \qquad [10.12]$$

Burada

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\,dt' \qquad [10.13]$$

ifadesi "standart" faz çarpanının E_n'nin zamanla değiştiği durum için genelleştirilmiş şeklidir. Her zaman yapıldığı gibi bunu açılımdaki $c_n(t)$ katsayısı içine dahil edebilirdim, ancak zamandan bağımsız bir Hamiltonyen için bile bu şekilde zamana bağlılık söz konusu olabileceğinden, bunu ayrı tutmak daha uygundur.

10.12 nolu denklemi 10.11 nolu denkleme yerleştirdiğimizde

$$i\hbar \sum_n \left[\dot{c}_n\psi_n + c_n\dot{\psi}_n + ic_n\psi_n\dot{\theta}_n\right]e^{i\theta_n} = \sum_n c_n(H\psi_n)e^{i\theta_n} \qquad [10.14]$$

elde ederiz. Bu ifadede nokta zaman türevini belirtir. 10.9 ve 10.13 nolu denklemleri kullanarak, son iki terimi yok ederiz:

$$\sum_n \dot{c}_n\psi_n e^{i\theta_n} = -\sum_n c_n\dot{\psi}_n e^{i\theta_n}. \qquad [10.15]$$

ψ_m ile iç çarpımı alıp ve de anlık özfonksiyonların (10.10 nolu denklem) ortonormallik koşulunu kullanırsak:

$$\sum_n \dot{c}_n\delta_{mn}e^{i\theta_n} = -\sum_n c_n\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle e^{i\theta_n}$$

ya da

$$\dot{c}_m(t) = -\sum_n c_n\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle e^{i(\theta_n-\theta_m)} \qquad [10.16]$$

elde edilir. 10.9 nolu denklemin zamana göre türevi

$$\dot{H}\psi_n + H\dot{\psi}_n = \dot{E}_n\psi_n + E_n\dot{\psi}_n$$

verir ve tekrar ψ_m ile iç çarpımını alarak

$$\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle + \langle\psi_m|H|\dot{\psi}_n\rangle = \dot{E}_n\delta_{mn} + E_n\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle \qquad [10.17]$$

sonucu elde edilir. H'nın hermitselliğini kullanarak, $\langle\psi_m|H|\psi_n\rangle = E_m\langle\psi_m|\psi_n\rangle$ yazabiliriz. Bu da $n \neq m$ için

$$\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle = (E_n - E_m)\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle \qquad [10.18]$$

olmasına yol açar. Bunu 10.16 nolu denklemde kullanarak ve de enerjilerin katlı olmadığı varsayımını hatırlayarak

$$\dot{c}_m(t) = -c_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle - \sum_{n\neq m} c_n\frac{\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle}{E_n - E_m}e^{(-i/\hbar)\int_0^t[E_n(t')-E_m(t')]dt'} \qquad [10.19]$$

sonucuna varırız. Bu kesin bir sonuçtur. Adyabatik yaklaşım şimdi devreye girer: $\dot{H}$ 'nın son derece küçük olduğunu varsayın ve ikinci terimi[5] düşürün. O zaman

$$\dot{c}_m(t) = -c_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle \qquad [10.20]$$

ve çözüm

$$c_m(t) = c_m(0)e^{i\gamma_m(t)} \qquad [10.21]$$

şeklinde olur. Burada[6]

$$\gamma_m(t) \equiv i\int_0^t \left\langle\psi_m(t')\left|\frac{\partial}{\partial t'}\psi_m(t')\right.\right\rangle dt' \qquad [10.22]$$

olarak verilir. Parçacık özellikle n-inci özdurumda yani $m \neq n$'ler için $c_n(0) = 1$ ve $c_m(0) = 0$ ise (10.12 nolu denklem);

$$\boxed{\Psi_n(t) = e^{i\theta_n(t)}e^{i\gamma_n(t)}\psi_n(t).} \qquad [10.23]$$

Böylece parçacık yavaşça değişen Hamiltonyenin n-inci özdurumunda kalır. Bu süreçte sadece birkaç faz çarpanı alır.

---

[5] Bu adımın tam kanıtı kolay değildir. Bunun için, A. C. Aguiar Pinto *et al. Am. J. Phys.* **68**, 955 (2000)'e bakınız.

[6] ψ_m'nin normlanması $(d/dt)\langle\psi_m|\psi_m\rangle = \langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle + \langle\dot{\psi}_m|\psi_m\rangle = 2\mathrm{Re}(\langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle) = 0$ kıldığından, γ *reel* bir sayıdır.

Örnek 10.1 Orijinde ve durgun halde bulunan $-e$ yüklü ve m kütleli bir elektronu ele alın. Bu elektron *büyüklüğü* sabit (B_0) fakat *yönü* ω sabit açısal hızı ile α açılı bir koninin yan yüzeyini süpüren bir manyetik alanın içinde olsun (10.3 nolu şekil):

$$\mathbf{B}(t) = B_0[\sin\alpha\cos(\omega t)\hat{\imath} + \sin\alpha\sin(\omega t)\hat{\jmath} + \cos\alpha\hat{k}]. \qquad [10.24]$$

Bu durumda Hamiltonyen (4.158 nolu denklem)

$$H(t) = \frac{e}{m}\mathbf{B}\cdot\mathbf{S} = \frac{e\hbar B_0}{2m}[\sin\alpha\cos(\omega t)\sigma_x + \sin\alpha\sin(\omega t)\sigma_y + \cos\alpha\sigma_z]$$

$$= \frac{\hbar\omega_1}{2}\begin{pmatrix}\cos\alpha & e^{-i\omega t}\sin\alpha\\ e^{i\omega t}\sin\alpha & -\cos\alpha\end{pmatrix} \qquad [10.25]$$

şeklini alır ve burada

$$\omega_1 \equiv \frac{eB_0}{m} \qquad [10.26]$$

olarak tanımlanmıştır. $H(t)$'nin normlanmış özspinörleri

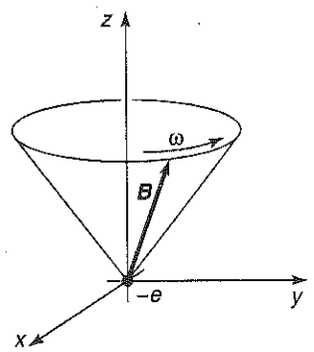
$$\chi_+(t) = \begin{pmatrix}\cos(\alpha/2)\\ e^{i\omega t}\sin(\alpha/2)\end{pmatrix} \qquad [10.27]$$

ve

$$\chi_-(t) = \begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\sin(\alpha/2)\\ -\cos(\alpha/2)\end{pmatrix} \qquad [10.28]$$

şeklindedir. Bunlar sırasıyla $\mathbf{B}(t)$'nin *anlık doğrultusu boyunca* yukarı ve aşağı spin durumlarını temsil ederler (4.30 nolu probleme bakın). Bunlara karşılık gelen özdeğerler:

$$E_\pm = \pm\frac{\hbar\omega_1}{2}. \qquad [10.29]$$



ŞEKİL 10.3: Bir koninin etrafını ω sabit açısal hızı ile süpüren manyetik alan (10.24 nolu denklem).

Elektron $\mathbf{B}(0)$ doğrultusunda yukarı spinle başlasın[7]:

$$\chi(0) = \begin{pmatrix}\cos(\alpha/2)\\ \sin(\alpha/2)\end{pmatrix}. \qquad [10.30]$$

Zamana bağlı Schrödinger denkleminin kesin çözümü (10.2 nolu problem):

$$\chi(t) = \begin{pmatrix}\left[\cos(\lambda t/2) - i\frac{(\omega_1-\omega)}{\lambda}\sin(\lambda t/2)\right]\cos(\alpha/2)e^{-i\omega t/2}\\ \left[\cos(\lambda t/2) - i\frac{(\omega_1+\omega)}{\lambda}\sin(\lambda t/2)\right]\sin(\alpha/2)e^{+i\omega t/2}\end{pmatrix}. \qquad [10.31]$$

Burada

$$\lambda \equiv \sqrt{\omega^2 + \omega_1^2 - 2\omega\omega_1\cos\alpha} \qquad [10.32]$$

olarak tanımlanmıştır. Ya da, çözümü χ_+ ve χ_-'nin lineer kombinasyonu olarak yazarsak,

$$\chi(t) = \left[\cos\left(\frac{\lambda t}{2}\right) - i\frac{(\omega_1-\omega\cos\alpha)}{\lambda}\sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right)\right]e^{-i\omega t/2}\chi_+(t)$$

$$+ i\left[\frac{\omega}{\lambda}\sin\alpha\sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right)\right]e^{+i\omega t/2}\chi_-(t) \qquad [10.33]$$

elde edilir. Böylece, $\mathbf{B}$ doğrultusunda spin aşağı durumuna geçiş olasılığı:

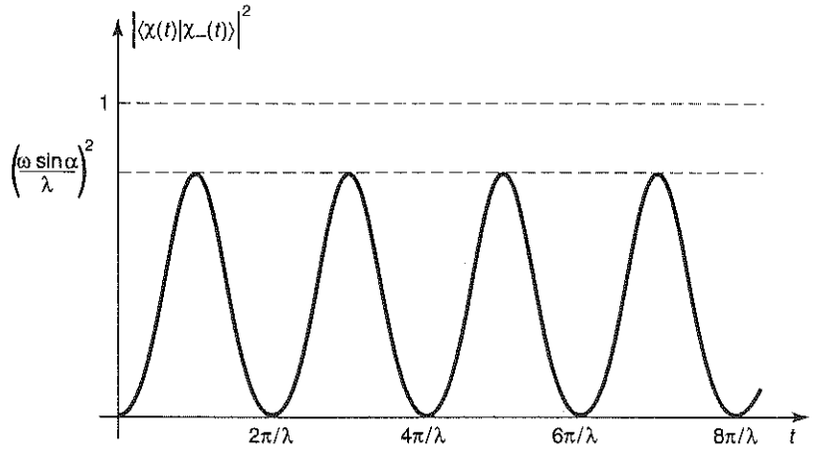
$$|\langle\chi(t)|\chi_-(t)\rangle|^2 = \left[\frac{\omega}{\lambda}\sin\alpha\sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right)\right]^2. \qquad [10.34]$$

Adyabatik teorem bu geçiş olasılığının $T_d \gg T_i$ limit durumunda sıfır olduğunu söyler. Burada T_d Hamiltonyendeki değişimin karakteristik zamanı (bu durumda $1/\omega$'dır) ve T_i dalga fonksiyonundaki değişimin karakteristik zamanıdır (bu durumda $\hbar/(E_+ - E_-) = 1/\omega_1$). Böylece adyabatik yaklaşım $\omega \ll \omega_1$ kılar ki bu da manyetik alanın tedirgenmemiş dalga fonksiyonlarının fazına kıyasla çok yavaş dönmesi demektir. Adyabatik rejimde, $\lambda \cong \omega_1$ ve bundan dolayı;

$$|\langle\chi(t)|\chi_-(t)\rangle|^2 \cong \left[\frac{\omega}{\omega_1}\sin\alpha\sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right)\right]^2 \to 0 \qquad [10.35]$$

olur. Elektronun hareketi, spini her zaman $\mathbf{B}$ yönünde olacak şekilde manyetik alan vektörünün ucu tarafından yönlendirilir. Bunun aksine, eğer $\omega \gg \omega_1$ ise $\lambda \cong \omega$ olur ve sistem spin aşağı ve yukarı durumları arasında gider gelir (10.4 nolu şekil).

[7] Bu esas olarak 9.20 nolu problem ile aynıdır. Burada elektron $\mathbf{B}$ yönünde yukarı spin ile başlarken, 9.20 (d) nolu denklemde z doğrultusunda yukarı spinle başlar.



ŞEKİL 10.4: Adyabatik *olmayan* rejimde ($\omega \gg \omega_1$) 10.34 nolu denklem ile verilen geçiş olasılığının grafiği.

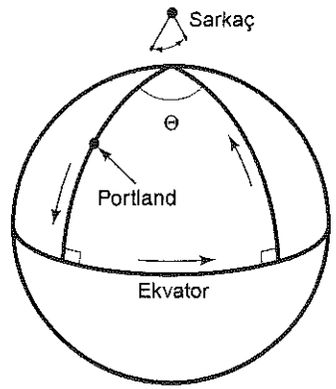
** **Problem 10.2** 10.31 nolu denklemin 10.25 nolu denklem ile verilen Hamiltonyen için yazılan zamana bağlı Schrödinger denklemini sağlayıp sağlamadığını kontrol edin. Ayrıca, 10.33 nolu denklemi doğrulayın ve normlama koşulunun gerektirdiği gibi katsayıların mutlak değer karelerinin toplamının 1 olduğunu gösterin.

10.2 BERRY FAZI

10.2.1 Holonomik Olmayan Süreçler

Adyabatik süreci anlatabilmek için 10.1.1. Kesimde kullandığım klasik modele dönelim: Destek noktasının sürekli olarak yer değiştirdiği, sürtünmesiz bir sarkaç. Destek noktasının hareketi sarkacın periyoduna kıyasla *çok yavaş* olduğu sürece (yani, destek noktası dikkate değer bir yerdeğiştirme yapmadan önce sarkacın birçok salınım gerçekleştirdiği durum) sarkacın salınımına aynı düzlemde (ya da paralel düzlemde), aynı genlikle ve doğal olarak aynı frekansla devam edeceğini söylemiştik.

Fakat bu ideal sarkacı Kuzey Kutbuna götürüp ve Portland doğrultusunda salınacak şekilde de düzeneği kurarsak ne olur (10.5 nolu şekil)? Şimdilik dünyanın dönmediğini varsayın. Şimdi sarkacı Portland'dan geçen boylam çizgisi boyunca ekvatora doğru yavaşça (*adyabatik olarak*) taşıyalım. Bu noktada, sarkaç kuzey-güney doğrultusunda salıncaktır. Şimdi, kuzey-güney doğrultusunda salınırken, sarkacı ekvator boyunca taşıyalım. Sonunda da sarkacı yeni bir boylam boyunca Kuzey Kutubuna taşıyalım. Sarkacın daha



ŞEKİL 10.5: Bir sarkacın yerküre yüzeyi üzerinde adyabatik taşınma güzergahı.

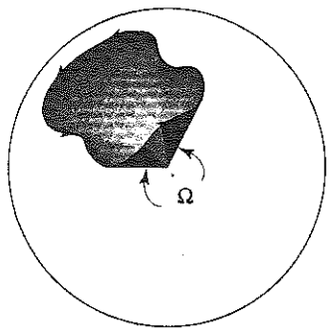
önce kurulan düzenekteki düzlemde salınmayacağı açıktır. Aslında, yeni salınım düzlemi eski düzlem ile Θ açısı yapar. Burada Θ kuzey'e ve güney'e yönelen boylam çizgileri arasındaki açıdır.

Θ aynı zamanda yerkürenin merkezine oturan ve sarkacın yolunu çevrelediği alanı gören Ω *katı açısına* da eşittir. Bu yol kuzey yarımkürenin $\Theta/2\pi$ kesrini çevrelediğinden, alanı, R yerkürenin yarıçapı olmak üzere $A = (1/2)(\Theta/2\pi)4\pi R^2 = \Theta R^2$ şeklinde yazabiliriz ve böylece

$$\Theta = A/R^2 \equiv \Omega \qquad [10.36]$$

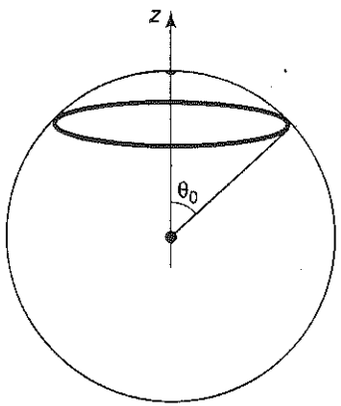
olur. Sonucun yolun *şeklinden* bağımsız olması (10.6 nolu şekil),[8] bu yöntemin güzelliğini gösterir.

Foucault sarkacı bu çeşit bir küre üzerinde kapalı bir çevrim etrafında adyabatik olarak taşınma sürecine uyan iyi bir örnektir. Bu olayda sarkacı taşıma görevini bizim yerimize



ŞEKİL 10.6: Küre yüzeyi üzerinde Ω katı açısını gören keyfi bir yol.

[8] İstiyorsanız, kanıtı kendiniz yapabilirsiniz. Turun büyük çemberlerin (küre üzerinde jeodezikler) çok küçük parçalarından oluştuğunu düşünün; Sarkaç her bir jeodezik parça ile sabit bir açı yapar. Bu da net açısal sapmayı küresel çokgen'in köşe açılarının toplamıyla ilişkilendirir.



ŞEKİL 10.7: Bir günlük turda Foucault sarkacının izlediği yol.

dönen dünya yapıyor. θ_0 enlem çizgisinin belirlediği (10.7 nolu şekil) katı açı:

$$\Omega = \int \sin\theta \, d\theta d\phi = 2\pi(-\cos\theta)\Big|_0^{\theta_0} = 2\pi(1-\cos\theta_0). \qquad [10.37]$$

Aynı zamanda 2π açısı kadar dönmüş dünyaya göre Foucault sarkacının günlük presesyonu $2\pi\cos\theta_0$'dır. Bu, dönen referans sistemlerinde Coriolis kuvvetlerinden elde edilebilen bir sonuç iken[9], burada tamamıyla *geometrik* bir yorum olarak ortaya çıktı.

Kapalı bir çevrim etrafında taşındığında, orijinal durumuna dönmeyen bu tip sistemlere **holonomik olmayan** sistemler denir. Bu bağlamda "taşınma" fiziksel bir hareket anlamına gelmez: Aklımızdan geçen şey, sistemin parametreleri öyle bir şekilde değişsin ki sonunda sistem parametreleri başlangıçtaki değerlerine dönsün. Holonomik olmayan sistemleri her tarafta görebiliriz. Bir anlamda, her devirli makine holonomik olmayan bir alettir: Her bir devrin sonunda araba bir parça ileri gitmiştir, ya da bir ağırlık yavaşça kaldırılmıştır, ya da başka bir şey. Hatta bu, düşük Reynolds sayısında akışkanlardaki mikropların hareketlerine de uygulandı.[10] Bir sonraki kesimde *holonomik olmayan adyabatik süreçlerin kuantum mekaniğini* inceleyeceğiz. Buradaki temel soru: Hamiltonyen parametreleri kapalı bir çevrim etrafında adyabatik bir şekilde değiştiğinde, sistemin son durumunun ilk durumuna göre nasıl değiştiğidir?

[9] Örneğin, Jerry B. Marion and Stephen T. Thornton, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, 4th edition, Saunders, Fort Worth. TX (1995), Örnek 10.5'e bakınız. Coğrafyacılar, enlemi (λ) kutup yerine ekvatordan ölçerler ve bu nedenle, $\cos\theta_0 = \sin\lambda$.

[10] Sarkaç örneği Berry fazının klasik karşılığı olan **Hanney açısının** bir uygulamasıdır. Her iki konu üzerine yapılmış yayınlar için, Alfred Shapere and Frank Wilczek, eds, *Geometric Phases in Physics*, World Screntific, Singapore (1989)'a bakınız.

10.2.2. Geometrik Faz

10.1.2. Kesimde $H(0)$'ın n-inci özdurumundan başlayan bir parçacığın, adyabatik koşullar altında sadece zamana bağlı bir faz çarpanı alarak $H(t)$'nin n-inci özdurumunda kalacağını gösterdik. Özellikle de dalga fonksiyonunun (10.23 nolu denklem)

$$\Psi_n(t) = e^{i[\theta_n(t)+\gamma_n(t)]}\psi_n(t) \qquad [10.38]$$

şeklinde yazılabileceğini ve burada

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\,dt' \qquad [10.39]$$

bilinen $\exp(-iE_nt/\hbar)$ çarpanının E_n'nin zamana bağlı olduğu durum için genelleştirilmesiyle elde edilen **dinamik faz** olduğunu ve

$$\gamma_n(t) \equiv i\int_0^t \left\langle \psi_n(t') \middle| \frac{\partial}{\partial t'}\psi_n(t') \right\rangle dt' \qquad [10.40]$$

ifadesinin de **geometrik faz** olduğunu göstermiştik.

Şimdi $\psi_n(t)$ zamana bağlıdır çünkü Hamiltonyende zamanla değişen bazı $R(t)$ parametreleri var. (Örneğin 10.1 nolu problemde $R(t)$ genişleyen kare kuyunun enidir.) Böyle bir durumda,

$$\frac{\partial\psi_n}{\partial t} = \frac{\partial\psi_n}{\partial R}\frac{dR}{dt} \qquad [10.41]$$

olur ve böylece

$$\gamma_n(t) = i\int_0^t \left\langle \psi_n \middle| \frac{\partial\psi_n}{\partial R} \right\rangle \frac{dR}{dt'}\,dt' = i\int_{R_b}^{R_s} \left\langle \psi_n \middle| \frac{\partial\psi_n}{\partial R} \right\rangle dR \qquad [10.42]$$

şeklini alır. Burada R_b ve R_s $R(t)$'nin başlangıç ve son değerleridir. Özellikle Hamiltonyen T kadar bir zaman sonra $R_s = R_b$ olacak şekilde orijinal haline dönerse, o zaman $\gamma_n(T) = 0$ olur ve hiç de ilgi çekici bir şey olmaz.

Ancak, 10.41 nolu denklemi yazarken Hamiltonyenin sadece *bir* parametresinin zamanla değiştiğini varsaydım. N tane parametrenin değiştiğini varsayarsak: $R_1(t)$, $R_2(t)$, ..., $R_N(t)$; bu durumda

$$\frac{\partial\psi_n}{\partial t} = \frac{\partial\psi_n}{\partial R_1}\frac{dR_1}{dt} + \frac{\partial\psi_n}{\partial R_2}\frac{dR_2}{dt} + \cdots + \frac{\partial\psi_n}{\partial R_N}\frac{dR_N}{dt} = (\nabla_R\psi_n)\cdot\frac{d\mathbf{R}}{dt} \qquad [10.43]$$

olur. Burada $\mathbf{R} \equiv (R_1, R_2, \ldots\ldots R_N)$ ve ∇_R bu parametrelere göre olan gradyenttir. $\gamma_n(t)$ ise

$$\gamma_n(t) = i\int_{\mathbf{R}_b}^{\mathbf{R}_s} \langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle\cdot d\mathbf{R} \qquad [10.44]$$

halini alır. Hamiltonyen T kadar bir zaman sonra orijinal şekline dönerse, net geometrik faz değişimi

$$\gamma_n(T) = i \oint \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R} \qquad [10.45]$$

olur. Bu, parametre uzayında kapalı bir çevrim etrafında bir çizgisel integraldir ve genel olarak sıfır *değildir*. 10.45 nolu denklemi 1984 yılında [11] ilk olarak elde eden Michael Berry olduğundan, $\gamma_n(T)$ **Berry fazı** olarak bilinir. Burada $\gamma_n(T)$'nin *sadece alınan yola* bağlı olduğuna dikkatinizi çekerim. Yolun ne kadar *hızlı* alındığının (elbette adyabatik hipotezi geçerli kılacak kadar yavaş olma koşulu ile) önemi yoktur. Bunun aksine, toplanan *dinamik* faz

$$\theta_n(T) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^T E_n(t')\,dt'$$

önemli ölçüde geçen zamana bağlıdır.

Dalga fonksiyonunun fazının hep gelişi güzel seçildiğini düşünürüz. Çünkü her hangi bir fiziksel büyüklük $|\Psi|^2$'yi içerir ve bu da faz çarpanını yok eder. Bu nedenle, çoğu kişi son zamana kadar geometrik fazı fiziksel önemi olmayan bir çarpan olarak varsaydı. Ne de olsa, $\psi_n(t)$'nin fazının kendisi keyfidir. Bunun keyfi olmadığını ve ölçülebilir olduğunu anlayan Berry oldu. Eğer Hamiltonyeni kapalı bir *çevrim* etrafında taşıyarak başlangıçtaki şekline getirirsek, sürecin başındaki ve sonundaki bağıl faz keyfi *değil* ve üstelik ölçülebilir bir büyüklüktür.

Örneğin, hepsi Ψ durumunda olan parçacıklardan oluşan bir parçacık demeti ele alalım ve bu demeti ikiye bölelim. Bir demet adyabatik olarak değişen bir potansiyelden geçsin diğeri ise geçmesin. Bu iki demet tekrar bir araya geldiğinde toplam dalga fonksiyonu

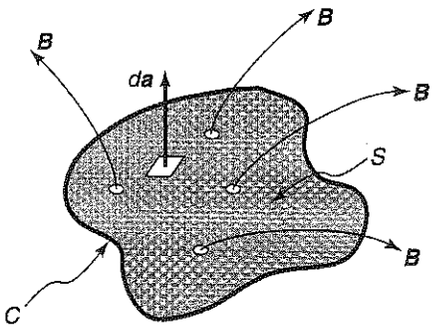
$$\Psi = \frac{1}{2}\Psi_0 + \frac{1}{2}\Psi_0 e^{i\Gamma} \qquad [10.46]$$

şeklini alacaktır. Burada Ψ_0 "doğrudan" demet dalga fonksiyonu ve Γ kısmen dinamik, kısmen geometrik olan ve değişen Hamiltonyene maruz kalan demetin oluşturduğu *ek* fazdır. Bu durumda;

$$|\Psi|^2 = \frac{1}{4}|\Psi_0|^2\left(1 + e^{i\Gamma}\right)\left(1 + e^{-i\Gamma}\right)$$
$$= \frac{1}{2}|\Psi_0|^2(1 + \cos\Gamma) = |\Psi_0|^2\cos^2(\Gamma/2). \qquad [10.47]$$

Böylece; Γ'nın sırasıyla π'nin çift ve tek katları olduğu yapıcı ve yıkıcı girişim noktalarını arayarak, Γ'nın ölçümü kolaylıkla gerçekleştirilebilir. Berry ve diğer eski

[11] M.V. Berry, *Proc. R. Soc. Lond.* A **392**,45 (1984), Wilczek ve Shapere de tekrar basıldı (10. dipnot). Geçmişe baktığımızda, bu sonucun 60 yıl gözden kaçması çok ilginç.



ŞEKİL 10.8: C eğrisi ile çevrelenen S yüzeyinden geçen manyetik akı.

yazarlar geometrik fazın daha büyük olan dinamik faz tarafından yutulacağından endişe etmişlerdi. Fakat, bu iki ayrı katkının ayrıştırılarak düzenleme yapılabileceği kanıtlandı.

Parametre uzayı üç boyutlu olduğunda ($\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3)$) 10.45 nolu denklemdeki Berry formülü **manyetik akının A** vektör potansiyeli cinsinden yazılan ifadesine benzemektedir. C eğrisi ile sınırlanan S yüzeyinden geçen Φ akısı (10.8 nolu şekil);

$$\Phi \equiv \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a}. \qquad [10.48]$$

Manyetik alanı vektör potansiyeli cinsinden ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$) yazıp Stokes teoremini uygularsak,

$$\Phi = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{a} = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}. \qquad [10.49]$$

elde edilir. Böylece, Berry fazı parametre uzayında kapalı çevrimden geçen "manyetik alan"nın "akı" sı olarak düşünülebilir:

$$\text{"}\mathbf{B}\text{"} = i\nabla_R \times \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle. \qquad [10.50]$$

Bunu bir başka şekilde ortaya koyarsak: üç boyutlu durumda Berry fazı yüzey integrali olarak yazılabilir:

$$\gamma_n(T) = i \int [\nabla_R \times \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle] \cdot d\mathbf{a}. \qquad [10.51]$$

Bu manyetik benzetme daha da ileri götürülebilir, ancak buradaki amacımız için 10.51 nolu denklem $\gamma_n(T)$ için uygun bir seçenektir.

***Problem 10.3**

(a) 10.42 nolu denklemi kullanarak eni ω_1'den ω_2'ye adyabatik olarak genişleyen sonsuz kare kuyu potansiyeli için geometrik fazı hesaplayın. Bu sonucu açıklayın.

(b) Eğer genişleme sabit bir $dw/dt = v$ hızı ile gerçekleşirse, bu süreç için dinamik faz değişimi ne olur?

(c) Şimdi kuyu daralarak ilk genişliğine dönsün. Bu süreçteki Berry fazı'nı hesaplayın.

Problem 10.4 2.114 nolu denklemle verilen delta fonksiyonlu kuyu tek bir bağlı durum (2.129 nolu denklem) içerir. α'nın α_1'den α_2'ye yavaşça değiştiği durumda geometrik fazdaki değişimi hesaplayın. Eğer bu artış sabit bir $d\alpha/dt = c$ hızı ile gerçekleşirse, süreç içinde dinamik fazdaki değişim ne olur?

Problem 10.5 $\psi_n(t)$'nin *reel* bir fonksiyon olduğu durumda geometrik fazın sıfır olduğunu gösterin (10.3 ve 10.4 nolu problemler bunun örnekleridir). Bunu, özfonksiyonların önüne hiç de gerekli olmayan bir faz çarpanı koyarak göstermeye çalışabilirsiniz: $\psi_n'(t) \equiv e^{i\phi_n}\psi_n(t)$. Burada $\phi_n(\mathbf{R})$ keyfi ve reel bir fonksiyondur. Denerseniz, sıfır olmayan geometrik bir faz elde edersiniz. Bunu 10.23 nolu denklemde yerine koyduğunuzda ne olacağına bir bakın. *Kapalı* bir çevrim için *sıfır* verir. *Alınacak ders:* Sıfır olmayan Berry fazı için, (*i*) Hamiltonyende birden fazla zamana bağlı parametreye ve (*ii*) göz ardı edilmeyecek kadar karmaşık özfonksiyonlar veren bir Hamiltonyene ihtiyacınız var.

Örnek 10.2 Berry fazı uygulamasının klasik bir örneği büyüklüğü sabit fakat yönü değişebilen manyetik alana maruz kalan ve orijine yerleştirilmiş bir elektrondur. Önce 10.1 nolu örnekte incelenen özel durumu ele alın: $\mathbf{B}(t)$, z ekseni etrafında sabit bir α açısı ve ω açısal hızı ile presesyon yapsın. $\mathbf{B}$ doğrultusunda "yukarı spin" durumu ile başlayan bir elektron için *tam* çözüm 10.33 nolu denklem ile verilir. $\omega \ll \omega_1$ olduğu adyabatik rejimde,

$$\lambda = \omega_1\sqrt{1 - 2\frac{\omega}{\omega_1}\cos\alpha + \left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^2} \cong \omega_1\left(1 - \frac{\omega}{\omega_1}\cos\alpha\right) = \omega_1 - \omega\cos\alpha \quad [10.52]$$

olur ve 10.33 nolu denklem

$$\chi(t) \cong e^{-i\omega_1 t/2}e^{i(\omega\cos\alpha)t/2}e^{-i\omega t/2}\chi_+(t) + i\left[\frac{\omega}{\omega_1}\sin\alpha\sin\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right)\right]e^{+i\omega t/2}\chi_-(t) \quad [10.53]$$

şeklini alır. $\omega/\omega_1 \to 0$ olduğunda, ikinci terim tamamıyla düşer ve sonuç 10.23 nolu denklemde verilen adyabatik formla uyumlu hale gelir. Dinamik faz:

$$\theta_+(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_+(t')\,dt' = -\frac{\omega_1 t}{2}. \quad [10.54]$$

Burada 10.29 nolu denklemden $E_+ = \hbar\omega_1/2$ 'dir. Böylece, geometrik faz

$$\gamma_+(t) = (\cos\alpha - 1)\frac{\omega t}{2} \quad [10.55]$$

şeklini alır. Tam bir çevrim için $T = 2\pi/\omega$ olur ve Berry fazı

$$\gamma_+(T) = \pi(\cos\alpha - 1) \quad [10.56]$$

olarak elde edilir.

Şimdi daha genel bir durumu ele alalım: Manyetik alanın ucu 10.9 nolu şekilde gösterildiği gibi $r = B_0$ yarıçaplı bir kürenin üzerinde *keyfî* kapalı bir eğriyi süpürsün. $\mathbf{B}(t)$ doğrultusunda yönelmiş yukarı spin durumlarını temsil eden özdurumlar

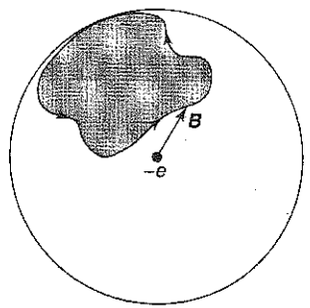
$$\chi_+ = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi}\sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad [10.57]$$

şeklindedir (4.30 nolu probleme bakın). Burada $\mathbf{B}$'nin küresel koordinatları olan θ ve ϕ'nın *her ikisi* de zamanın fonksiyonudur. Küresel koordinatlarda gradyent operatörüne baktığımızda

$$\nabla\chi_+ = \frac{\partial\chi_+}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial\chi_+}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\chi_+}{\partial\phi}\hat{\phi} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} -(1/2)\sin(\theta/2) \\ (1/2)e^{i\phi}\cos(\theta/2) \end{pmatrix}\hat{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\begin{pmatrix} 0 \\ ie^{i\phi}\sin(\theta/2) \end{pmatrix}\hat{\phi} \quad [10.58]$$

olduğunu görürüz. Bundan dolayı,

$$\langle\chi_+|\nabla\chi_+\rangle = \frac{1}{2r}\left[-\sin(\theta/2)\cos(\theta/2)\,\hat{\theta} + \sin(\theta/2)\cos(\theta/2)\,\hat{\theta} + 2i\frac{\sin^2(\theta/2)}{\sin\theta}\hat{\phi}\right] = i\frac{\sin^2(\theta/2)}{r\sin\theta}\hat{\phi} \quad [10.59]$$



ŞEKİL 10.9: Kapalı bir çevrimi süpüren sabit bir büyüklüğe sahip fakat yönelimi değişen manyetik alan.

olarak bulunur. 10.51 nolu denklem için bu büyüklüğün *rotasyoneline* ihtiyacımız var:

$$\nabla \times \langle \chi_+ | \nabla \chi_+ \rangle = \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin\theta \left(\frac{i \sin^2(\theta/2)}{r \sin\theta} \right) \right] \hat{r} = \frac{i}{2r^2} \hat{r}. \qquad [10.60]$$

10.51 nolu denkleme göre,

$$\gamma_+(T) = -\frac{1}{2} \int \frac{1}{r^2} \hat{r} \cdot d\mathbf{a} \qquad [10.61]$$

olur. İntegral çevrim boyunca **B**'nin süpürdüğü kürenin yüzeyi üzerinden olduğundan, $d\mathbf{a} = r^2\, d\Omega\, \hat{r}$ ve

$$\gamma_+(T) = -\frac{1}{2} \int d\Omega = -\frac{1}{2}\Omega \qquad [10.62]$$

sonucuna varırız. Burada, Ω orijinde tanımlanan katı açıdır. Bu keyif verici derecede basit bir sonuçtur ve işin başında tartıştığımız klasik problemi (yerküre yüzeyi üzerinde kapalı bir yol boyunca taşınan sürtünmesiz sarkaç) çağrıştırıyor. Bu şunu söyler: Bir mıknatıs alıp elektronun spinini keyfi kapalı bir yol boyunca adyabatik olarak yönlendirirseniz, net geometrik faz değişimi manyetik alan vektörünün süpürdüğü katı açının yarısının negatifi olacaktır. 10.37 nolu denklemin yardımı ile bu genel sonucun 10.56 nolu denklem ile verilen özel durum ile uyumlu olduğu görülür.

*** **Problem 10.6** Spini 1 olan parçacık için 10.62 nolu denkleme karşılık gelen sonucu bulun. *Yanıt:* $-\Omega$ (s spinli parçacık için sonuç tesadüfen $-s\Omega$ olur.)

10.2.3 Aharonov-Bohm Etkisi

Klasik elektrodinamikte φ ve **A** potansiyelleri doğrudan ölçülebilir büyüklükler değildir.[12] *Fiziksel* büyüklükler elektrik ve manyetik *alanlardır:*

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \qquad [10.63]$$

[12] Genel olarak kuantum mekaniğinde *potansiyel enerji* için V harfi kullanılır. Fakat elektrodinamikde aynı harf skalar potansiyel için kullanılır. Karışıklığı önlemek için skaler potansiyeli φ ile gösterdim. Bu bölüme bir alt yapı oluşturmak için 4.59, 4.60 ve 4.61 nolu problemlere bakın.

Temel yasalar (Maxwell denklemleri ve Lorentz kuvveti) sadece teorik ve işlemleri kolaylaştırıcı kurgu olan bu potansiyelleri doğrudan içermez. Aslında bu potansiyelleri rahatlıkla *değiştirebilirsiniz:*

$$\varphi \to \varphi' = \varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \mathbf{A} \to \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\Lambda. \qquad [10.64]$$

Burada Λ konumun ve zamanın herhangi bir fonksiyonudur ve **ayar dönüşümü** olarak adlandırılır ve de alanlar üzerine hiçbir etkisi yoktur. 10.63 nolu denklemi kullanarak, bunun doğruluğunu kolaylıkla kontrol edebilirsiniz.

Kuantum mekaniğinde bu potansiyellerin önemi çok daha fazladır. Çünkü Hamiltonyen **E** ve **B** yerine φ ve **A** cinsinden yazılır:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 + q\varphi. \qquad [10.65]$$

Yine de, teori ayar dönüşümleri altında hala değişmezdir (4.61 nolu probleme bakın) ve uzunca bir süre **E** ve **B**'nin sıfır olduğu bölgelerde doğal olarak elektromanyetik etkilerin olmadığı varsayılmıştır. Fakat 1959 yılında Aharonov ve Bohm[13] yüklü bir parçacığın kuantum davranışının, parçacığın alanın sıfır olduğu bölgede hareket etse bile vektör potansiyelinden *etkilenebileceğini* gösterdiler. Önce basit bir örnek üzerine çalışacağım, sonra Aharonov-Bohm etkisini anlatacağım ve en sonunda tüm bunların Berry fazı ile nasıl ilişkilendirilebileceğini göstereceğim.

b yarıçaplı bir daire üzerinde hareket etmeye zorlanan bir parçacığı (halka üzerindeki boncuk olabilir) ele alın. 10.10 nolu şekilde gösterildiği gibi, yarıçapı $a < b$ olan ve içinden durağan bir I akımı geçen bir solenoid eksen boyunca yerleştirilsin. Solenoidin boyunun sonsuz olduğu durumda, solenoid içinde manyetik alan düzgündür ve dışarıdaki alan sıfırdır. Fakat solenoidin dış bölgesinde vektör potansiyeli sıfır *değildir*. $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$[14] ayar koşulu seçildiğinde

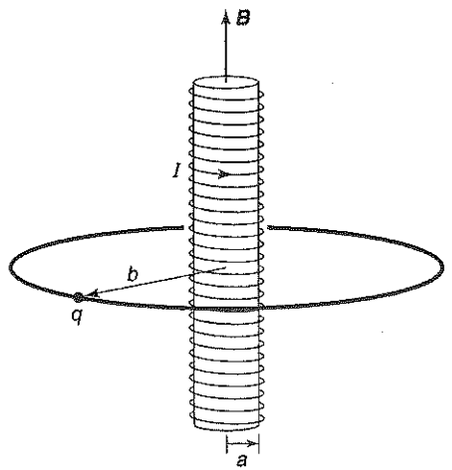
$$\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\phi}, \quad (r > a) \qquad [10.66]$$

olur. Burada, $\Phi = \pi a^2 B$ solenoid'in içinden geçen **manyetik akıdır**. Aynı zamanda, solenoidin kendisi yüksüz olduğundan, φ skalar potansiyel sıfırdır. Bu durumda, 10.65 nolu denklemdeki Hamiltonyen

$$H = \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \nabla^2 + q^2 A^2 + 2i\hbar q \mathbf{A} \cdot \nabla \right] \qquad [10.67]$$

[13] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **114**, 845 (1959). Ön hazırlık için, W. Ehrenberg and R.E. Siday, *Proc. Phys. Soc. London* **B62**, 8 (1949)'a bakınız.

[14] Örnek olarak, D.J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 3rd ed., Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ (1999) 5.71 nolu denkleme bakınız.



ŞEKİL 10.10: İçinden uzun bir solenoid geçen bir halka üzerinde yüklü boncuk.

şeklini alır. Öte yandan, dalga fonksiyonu sadece ϕ ($\theta = \pi/2$ ve $r = b$) açısına bağlıdır. Bu da $\nabla \to (\hat{\phi}/b)(d/d\phi)$ kılar ve Schrödinger denklemi

$$\frac{1}{2m}\left[-\frac{\hbar^2}{b^2}\frac{d^2}{d\phi^2} + \left(\frac{q\Phi}{2\pi b}\right)^2 + i\frac{\hbar q\Phi}{\pi b^2}\frac{d}{d\phi}\right]\psi(\phi) = E\psi(\phi) \qquad [10.68]$$

şeklini alır. Bu bir sabit katsayılı lineer diferansiyel denklemdir:

$$\frac{d^2\psi}{d\phi^2} - 2i\beta\frac{d\psi}{d\phi} + \epsilon\psi = 0 \qquad [10.69]$$

ve burada

$$\beta \equiv \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \quad \text{ve} \quad \epsilon \equiv \frac{2mb^2E}{\hbar^2} - \beta^2. \qquad [10.70]$$

Çözümler

$$\lambda = \beta \pm \sqrt{\beta^2 + \epsilon} = \beta \pm \frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE} \qquad [10.72]$$

olmak üzere,

$$\psi = Ae^{i\lambda\phi} \qquad [10.71]$$

şeklindedir. $\psi(\phi)$'nin $\phi = 2\pi$ değerinde sürekli olması koşulu λ'nın bir *tamsayı* olmasını gerektirir:

$$\beta \pm \frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE} = n \qquad [10.73]$$

ve buradan

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mb^2}\left(n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots). \qquad [10.74]$$

elde edilir.

Solenoid halka üzerindeki boncuğun iki kez katlılığını ortadan kaldırır (2.46 nolu problem). Solenoid'in sarımları üzerinden geçen akım ile *aynı* yönde hareket eden parçacığı temsil eden pozitif n'ye karşılık gelen enerji değerleri *ters* yönde hareket eden parçacığı tanımlayan negatif n'nin enerji değerlerine nazaran bir parça *daha* düşüktür (q'yu pozitif kabul edersek). Daha da önemlisi, *parçacığın bulunduğu konumda alanın sıfır*[15] *olmasına rağmen,* izin verilen enerji düzeyleri açık olarak solenoidin içindeki alana bağlıdır.

Daha genel bir durum için, **B**'nin sıfır olduğu (ve böylece $\nabla \times \mathbf{A} = 0$), fakat **A**'nın kendisinin sıfır *olmadığı* bir bölgede hareket eden bir parçacığı ele alalım. Bu yöntem zamana bağlı potansiyeller için de genelleştirilebiliyor olmasına rağmen, burada **A**'nın statik olduğunu varsayacağım. Zamana bağlı Schrödinger denklemi:

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 + V\right]\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \qquad [10.75]$$

Bu denklem potansiyelin varlığında ($q\varphi$ elektrik katkısını içeriyor ya da içermiyor olabilir),

$$\Psi = e^{ig}\Psi' \qquad [10.76]$$

dönüşümü yaparak daha sade yazılabilir. Burada

$$g(\mathbf{r}) \equiv \frac{q}{\hbar}\int_{\mathcal{O}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}')\cdot d\mathbf{r}' \qquad [10.77]$$

ve $\mathcal{O}$ keyfi seçilen herhangi bir referans noktasıdır. Bu tanımın *sadece* söz konusu olan bölgede $\nabla\times\mathbf{A} = \mathbf{0}$ olduğu zaman bir anlamı olduğuna dikkat edin. Aksi halde, çizgisel integral $\mathcal{O}$'den **r**'ye alınan *yola* bağlı olurdu ve bundan dolayı **r**'nin bir fonksiyonunu tanımlamazdı. Ψ' cinsinden Ψ 'nın gradyenti

$$\nabla\Psi = e^{ig}(i\nabla g)\Psi' + e^{ig}(\nabla\Psi');$$

fakat $\nabla g = (q/\hbar)\,\mathbf{A}$ olduğundan

$$\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right)\Psi = \frac{\hbar}{i}e^{ig}\nabla\Psi' \qquad [10.78]$$

---

[15] Çevrelenen akının, n' bir tamsayı olmak üzere, $\Phi = (2\pi\hbar/q)\,n'$ şeklinde *kuantumlanmış* olması **süper iletken** halkaların özgün bir özelliğidir. Bu durumda, $n + n'$ sadece başka bir tamsayı olmak üzere, $E_n = (\hbar^2/2mb^2)(n+n')^2$ olduğundan, bu etki fark edilebilir değildir. (Sırası gelmişken, burada q yükü elektronun yükünün *iki* katı olarak çıkar; süperiletken elektronlar çiftler oluşturacak şekilde birbirlerine kilitlenmişlerdir.) Öte yandan, **akı kuantumlanması** solenoid ya da elektromanyetik alan sonucu değil, farklılığa neden olan dairesel akımları oluşturan *süper iletkenin* neden olduğu bir sonuçtur. Bu nedenle burada ele aldığımız ve süperiletken olmayan örneğimizde bu sonuç ortaya çıkmaz.

olur ve bu da

$$\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 \Psi = -\hbar^2 e^{ig}\nabla^2\Psi' \qquad [10.79]$$

sonucu verir. Bunu 10.75 nolu denkleme yerleştirip, e^{ig} ortak çarpanını yok ettiğimizde,

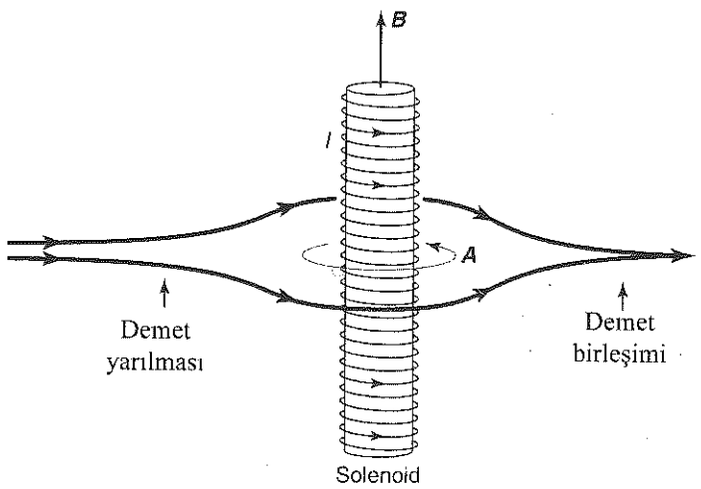
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi' + V\Psi' = i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} \qquad [10.80]$$

elde ederiz. Yani, Ψ', **A**'yı *içermeyen* Schrödinger denklemini sağlar. Eğer 10.80 nolu denklemi çözebilirsek, rotasyoneli sıfır olan vektör potansiyeli varlığında düzeltmeyi yapmak hiç de zor olmayacaktır: Sadece e^{ig} faz çarpanını ekle.

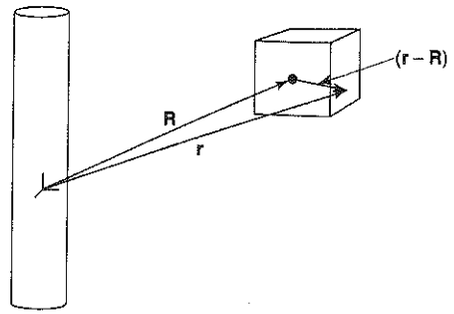
Aharonov ve Bohm şöyle bir deney tasarladı: 10.11 nolu şekilde gösterildiği gibi bir elektron demeti ikiye ayrılır ve tekrar bir araya gelmeden önce uzun bir solenoid'in her iki tarafından geçer. Elektron demetleri sadece $\mathbf{B} = 0$ olduğu bölgelerden geçebilsinler diye solenoidden yeterince uzakta tutulur. Fakat 10.66 nolu denklem ile verilen **A** sıfır değildir ve iki demet *farklı fazlarla* bir araya gelir (her iki tarafta da V'nin aynı potansiyel olduğu varsayılıyor):

$$g = \frac{q}{\hbar}\int \mathbf{A}\cdot d\mathbf{r} = \frac{q\Phi}{2\pi\hbar}\int\left(\frac{1}{r}\hat{\phi}\right)\cdot(r\hat{\phi}\,d\phi) = \pm\frac{q\Phi}{2\hbar}. \qquad [10.81]$$

Artı işareti **A** ile aynı yönde, bir başka deyişle solenoid akımı ile aynı yönde hareket



ŞEKİL 10.11: Aharonov-Bohm etkisi: Elektron demeti ikiye ayrılır ve uzun bir solenoidin farklı yanlarından geçer.



ŞEKİL 10.12: V(r–R) potansiyeli ile bir kutuya hapsedilmiş parçacık.

eden elektronlar içindir. Elektron demetleri kendi yollarının çevrelediği manyetik akı ile orantılı olan bir miktarda faz farkı ile tekrar bir araya gelirler:

$$\text{faz farkı} = \frac{q\Phi}{\hbar}. \qquad [10.82]$$

Bu faz farkı ölçülebilir girişime (10.47 nolu denklem) yol açar. Bu girişimin deneysel olarak varlığı Chambers ve diğerleri[16] tarafından ortaya konmuştur.

Berry'nin bu konu üzerinde yazdığı ilk makalesinde belirttiği gibi, Aharonov-Bohm etkisi geometrik faza bir örnek olarak gösterilebilir. Yüklü bir parçacığın $V(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ potansiyeli ile solenoid'in dışında **R** noktasına oturtulan bir kutuya hapsedildiğini varsayın–10.12 nolu şekile bakın. (Kısa bir süre sonra kutuyu solenoidin etrafında hareket ettireceğiz. Yani **R** zamanın fonksiyonu olacak, fakat şimdilik **R**'yi sabit bir vektör olarak ele alacağız). Hamiltonyenin özfonksiyonları

$$\left\{\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r})\right]^2 + V(\mathbf{r}-\mathbf{R})\right\}\psi_n = E_n\psi_n \qquad [10.83]$$

denklemi ile belirlenir. Bu formdaki denklemleri nasıl çözeceğimizi biliyoruz:

$$\psi_n = e^{ig}\psi_n' \qquad [10.84]$$

olsun. Burada[17]

$$g \equiv \frac{q}{\hbar}\int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}')\cdot d\mathbf{r}'. \qquad [10.85]$$

---

[16] R.G. Chambers, *Phys. Rev. Lett.* **5**,3 (1960).

[17] Referans noktası $\mathcal{O}$'yu kutunun merkezinde almak akıllıca olur. Çünkü bu seçim solenoid etrafında yolculuğu tamamladığımızda, başlangıçtaki faz düzenini yeniden elde etmemizi garanti eder. Örneğin, sabit *uzayda* bir nokta kullandığınız zaman fazı en uç noktada "elle" ayarlamak zorunda kalırsınız. Çünkü yol solenoid'in etrafında **A**'nın rotasyonelinin yok olmadığı dairesel bölgeler üzerinden sarmalanmak zorunda kalır. Bu seçim bizi aynı yanıta götürür, ancak bu kaba bir yol olur. Genel olarak, 10.9 nolu denklem ile verilen özfonksiyonlar için faz düzenini seçerken, $\psi_n(x,T) = \psi_n(x,0)$ olması sağlanmalı ki gerçekte olmayan faz değişimleri ile karşılaşmayalım.

ψ' aynı özdeğer denklemini sadece $\mathbf{A} \to 0$ zaman sağlar:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}-\mathbf{R})\right]\psi'_n = E_n\psi'_n. \qquad [10.86]$$

Yalnız burada ψ'_n ayrı ayrı $\mathbf{r}$ ve $\mathbf{R}$'nin fonksiyonu değil sadece $(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ yerdeğiştirme vektörünün fonksiyonu olduğuna dikkat edin.

Şimdi kutuyu solenoid etrafında taşıyalım. Bu uygulamada süreç adyabatik olmak zorunda bile değildir. Berry fazını belirlemek için önce $\langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle$ büyüklüğünü hesaplamak zorundayız.

$$\nabla_R\psi_n = \nabla_R\left[e^{ig}\psi'_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})\right] = -i\frac{q}{\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{R})e^{ig}\psi'_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}) + e^{ig}\nabla_R\psi'_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})$$

olduğunu hatırlayarak

$$\begin{aligned}\langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle &= \int e^{-ig}[\psi'_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})]^* e^{ig}\left[-i\frac{q}{\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{R})\psi'_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}) + \nabla_R\psi'_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})\right]d^3\mathbf{r} \\ &= -i\frac{q}{\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{R}) - \int[\psi'_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})]^*\nabla\psi'_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})\,d^3\mathbf{r} \qquad [10.87]\end{aligned}$$

elde ederiz. Burada alt indissiz ∇, $\mathbf{r}$'ye göre gradyenti belirtir. Ayrıca $(\mathbf{r}-\mathbf{R})$'nin bir foksiyonuna uygulandığında, $\nabla_R = -\nabla$ olduğu bilgisini de kullandım. Öte yandan, en son integral momentumun $-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V$ Hamiltonyeninin bir özdurumunda beklenen değerinin $i/\hbar$ ile çarpımıdır. Bu da 2.1. Kesimde öğrendiğimiz üzere *sıfırdır*. Böylece,

$$\langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle = -i\frac{q}{\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{R}). \qquad [10.88]$$

olur. Bunu 10.45 nolu denklem ile verilen Berry formülünde yerine koyduğumuzda,

$$\gamma_n(T) = \frac{q}{\hbar}\oint\mathbf{A}(\mathbf{R})\cdot d\mathbf{R} = \frac{q}{\hbar}\int(\nabla\times\mathbf{A})\cdot d\mathbf{a} = \frac{q\Phi}{\hbar} \qquad [10.89]$$

sonucunu buluruz. Bu sonuç Aharonov-Bohm etkisinin çok güzel bir şekilde geçerli olduğunu gösterir ve Aharonov-Bohm etkisinin geometrik fazın özel bir örneği olduğunu ortaya koyar.[18]

Aharonov-Bohm etkisi ile ne yapacağız? Belli ki klasik önyargılarımız *yanıltıcı*: Alanların sıfır olduğu bölgelerde elektromanyetik etkiler *olabilir*. Ama, bu etkilerin A'nın kendisini ölçülebilir kılmadığına dikkat edin. Sonuçta sadece çevrelenmiş *akı* elde edilir ve teori ayar değişmez kalır.

[18] Sırası gelmişken, bu durumda Berry fazı ve manyetik akı (10.50 nolu denklem) arasındaki benzeşim *hemen hemen* bir özdeşliktir. "$\mathbf{B}$" = $(q/\hbar)\mathbf{B}$.

Aharonov-Bohm etkisi ile ne yapacağız? Belli ki klasik önyargılarımız *yanıltıcı*: Alanların sıfır olduğu bölgelerde elektromanyetik etkiler *olabilir*. Ama, bu etkilerin A'nın kendisini ölçülebilir kılmadığına dikkat edin. Sonuçta sadece çevrelenmiş *akı* elde edilir ve teori ayar değişmez kalır.

Problem 10.7

(a) 10.65 nolu denklemi kullanarak, 10.67 nolu denklemi elde edin.

(b) 10.79 nolu denklemi 10.78 nolu denklemden başlayarak elde edin.

10. KONU İÇİN EK PROBLEMLER

*** **Problem 10.8** $0 \le x \le a$ aralığında sonsuz kare kuyu potansiyelinin taban durumunda bulunan bir parçacığı ele alın. Şimdi kuyunun merkezinden birazcık ötede bir duvarı yavaşça yükseltelim:[19]

$$V(x) = f(t)\delta\left(x - \frac{a}{2} - \epsilon\right).$$

Burada, $f(t)$, 0'dan ∞'a yavaş yavaş artan bir fonksiyondur. Adyabatik teoreme göre, parçacık evrimleşen Hamiltonyenin taban durumunda kalacaktır.

(a) $t \to \infty$ iken, taban durumunu bulun ve çizin: *Yardım:* Bu durum $a/2 + \epsilon$ konumunda sızılamaz engeli olan sonsuz kuyu potansiyelinin taban durumu olmalıdır. Ayrıca, parçacığın kuyunun daha büyük "yarı" sına sıkıştırıldığına da dikkat edin.

(b) t zamanındaki Hamiltonyenin taban durumu için transendental denklemi elde edin. *Yanıt:* $z \equiv ka$, $T \equiv maf(t)/\hbar^2$, $\delta \equiv 2\epsilon/a$ ve $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ olmak üzere,

$$z\sin z = T[\cos z - \cos(z\delta)].$$

(c) $\delta = 0$ alarak, denklemin z için grafik çözümünü bulun ve T, 0'dan ∞'a giderken en küçük z'nin π'den 2π'ye gittiğini gösterin. Bu sonucu açıklayın.

(d) Şimdi $\delta = 0.01$ alın ve $T = 0$, 1, 5, 20, 100 ve 1000 değerlerini kullanarak, denklemin z için sayısal çözümlerini elde edin.

(e) Parçacığın kuyunun sağ "yarı"sında bulunma olasılığı $P_{sağ}$'ı z'nin ve δ'nin fonksiyonu olarak hesaplayın. *Yanıt:* $I_\pm \equiv \left[1 \pm \delta - (1/z)\sin z(1 \pm \delta)\right]\sin^2\left[z(1 \mp \delta)/2\right]$ olmak üzere, $P_{sağ} = 1/\left[1 + (I_+/I_-)\right]$. Bu ifadeyi (d) şıkkındaki T değerleri için sayısal olarak hesaplayın. Sonuçlarınızı açıklayın.

[19] Dikdörtgen engel için, Julio Gea-Banacloche, *Am. J. Phys.* **70**, 307 (2002); Delta fonksiyonu uyarlaması için, M. Lakner and J. Peternelj *Am. J. Phys.* **71**, 519 (2003)'e bakınız.

(f) Taban durum fonksiyonunu aynı T ve δ değerleri için çizin ve ayrıca engel yükseldikçe dalga fonksiyonunun nasıl kuyunun sol yarısına sıkıştığını gözleyin.[20]

*** **Problem 10.9** m kütleli, ω frekanslı, bir boyutlu harmonik salınıcının $F(t) = m\omega^2 f(t)$ şeklinde sürücü bir kuvvete maruz kaldığını varsayın. Burada $f(t)$ belli bir fonksiyondur ve *uzunluk* boyutundadır. Hamiltonyen

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - m\omega^2 x f(t). \qquad [10.90]$$

şeklindedir. Kuvvetin $t = 0$ anında açıldığını varsayın: $t \le 0$ için, $f(t) = 0$. Bu sistem hem klasik mekanikte hem de kuantum mekaniğinde tam olarak çözülebilir.[21]

(a) Salınıcının, orijinde durgun $(x_c(0) = \dot{x}_c(0) = 0)$ durumdan harekete başladığını varsayarak, konumunu *klasik* olarak belirleyin. *Yanıt:*

$$x_c(t) = \omega \int_0^t f(t') \sin[\omega(t - t')]\, dt'. \qquad [10.91]$$

(b) Bu salınıcı için, zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümünün, bir dış kuvvet etkisinde *olmayan* salınıcının n-inci durumundan başladığı ($\Psi(x, 0) = \psi_n(x)$ ve $\psi_n(x)$ 2.61 nolu denklemde verildiği gibidir) varsayımı altında

$$\Psi(x, t) = \psi_n(x - x_c) e^{\frac{i}{\hbar}\left[-(n+\frac{1}{2})\hbar\omega t + m\dot{x}_c(x - \frac{x_c}{2}) + \frac{m\omega^2}{2}\int_0^t f(t')x_c(t')dt'\right]} \qquad [10.92]$$

şeklinde yazılabileceğini gösterin.

(c) $H(t)$'nin özfonksiyonlarının ve özdeğerlerinin

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x - f); \quad E_n(t) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 f^2 \qquad [10.93]$$

şeklinde olduğunu gösterin.

(d) 10.91 nolu denklem ile verilen klasik konum ifadesinin adyabatik yaklaşıklığı içinde $x_c(t) \cong f(t)$'ye indirgeneceğini gösterin.

---

[20] 19. dipnotta Gea-Banacloche, dalga fonksiyonunun evrimini adyabatik teoremi kullanmadan ele alır ve bu sonuçları adyabatik limit içinde doğrular.

[21] Y. Nogami, *Am. J. Phys.* **59**, 64 (1991) ve bu çalışmada sunulan diğer kaynaklara bakınız.

(e) Bu örnek için adyabatik teoremin doğruluğunu (c) ve (d) şıklarından elde edilen sonuçları kullanarak,

$$\Psi(x, t) \cong \psi_n(x, t) e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} \qquad [10.94]$$

olduğunu gösterip ortaya koyun. Dinamik fazın doğru forma (10.39 nolu denklem) sahip olup olmadığını kontrol edin. Geometrik faz beklediğiniz gibi midir?

Problem 10.10 Adyabatik yaklaşımı 10.12 nolu denklemdeki $c_m(t)$ katsayıları için açılan **adyabatik serinin** ilk terimi olarak düşünülebilir. Sistemin n-inci durumdan başladığını varsayalım: Adyabatik yaklaşımda, sistem sadece zamana bağlı bir geometrik faz çarpanı (10.21 nolu denklem) alarak n-inci durumda *kalacaktır:*

$$c_m(t) = \delta_{mn} e^{i\gamma_n(t)}.$$

(a) Adyabatikliğe "ilk düzeltme" terimini elde etmek için, $c_m(t)$'yi 10.16 nolu denklemin sağ tarafında yerine koyun:

$$c_m(t) = c_m(0) - \int_0^t \left\langle \psi_m(t') \middle| \frac{\partial}{\partial t'} \psi_n(t') \right\rangle e^{i\gamma_n(t')} e^{i(\theta_n(t') - \theta_m(t'))}\, dt'. \qquad [10.95]$$

Bu bize *neredeyse* adyabatik rejimde geçiş olasılıklarını hesaplama olanağını verir. "İkinci düzeltme" terimini elde etmek için 10.95 nolu denklemi 10.16 nolu denklemin sağ tarafında yerine koyar ve öylece devam ederdik.

(b) Örnek olarak 10.95 nolu denklemi bir dış kuvvet etkisi altında sürülen salınıcıya (10.9 nolu probleme) uygulayın. Neredeyse adyabatik yaklaşımında geçişlerin sadece birbirlerine çok yakın komşu düzeyler arasında olası olduğunu gösterin. Bu düzeyler için:

$$c_{n+1}(t) = -\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\sqrt{n+1}\int_0^t \dot{f}(t')e^{i\omega t'}\, dt',$$

$$c_{n-1}(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\sqrt{n}\int_0^t \dot{f}(t')e^{-i\omega t'}\, dt'.$$

(Geçiş *olasılıkları* doğal olarak bunların mutlak değer kareleridir.)

---

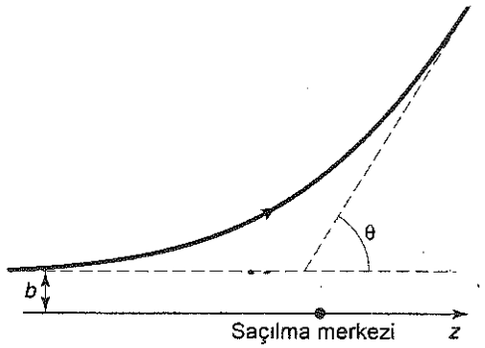
11. BÖLÜM

SAÇILMA

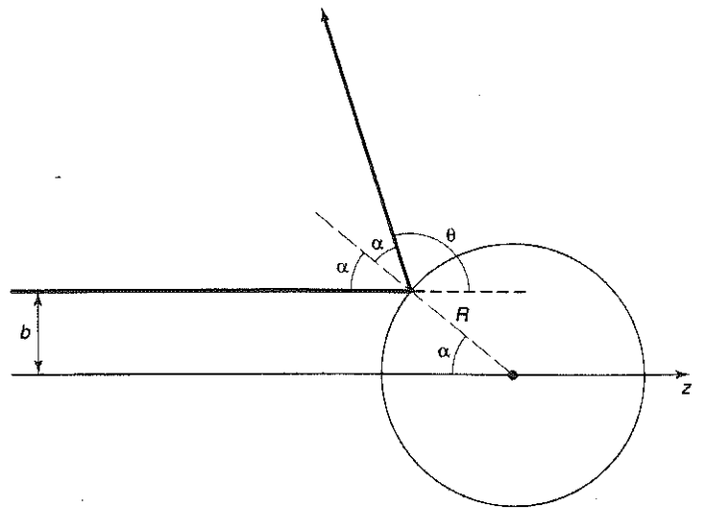
11.1 GİRİŞ

11.1.1. Klasik Saçılma Teorisi

Belli bir saçılma merkezine gelen bir parçacığı düşünün. Örneğin, ağır bir çekirdeğe doğru ateşlenen bir proton; parçacık E enerjisi ve b **çarpma parametresi** ile gelir ve belli bir θ **saçılma açısı** ile gider (11.1 nolu şekile bakın). Basit olsun diye hedefin azimutal simetriye sahip olduğunu varsayacağım. Böylelikle, saçılan parçacığın izleyeceği yol bir düzlem içinde kalacak ve hedef ağır olduğundan geri tepme yok sayılacak. Klasik saçılma teorisinin temel problemi *çarpma parametresi verildiğinde, saçılma açısının hesaplanmasıdır.* Doğal olarak çarpma parametresi ne kadar küçük olursa, saçılma açısı o kadar büyük olur.



ŞEKİL 11.1: b çarpma parametresi ve θ saçılma açısını gösteren klasik saçılma problemi.



ŞEKİL 11.2: Elastik katı küre saçılması.

Örnek 11. 1 Katı küreden saçılma: Hedefin R yarıçaplı bir bilardo topu ve gelen parçacığın da elastik olarak geri saçılabilen bir BB (saçma tanesi) olduğunu varsayalım (11.2 nolu şekil). α cinsinden çarpma parametresi $b = R \sin \alpha$ ve saçılma açısı $\theta = \pi - 2\alpha$ olur. Böylece,

$$b = R \sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) = R \cos\left(\frac{\theta}{2}\right). \qquad [11.1]$$

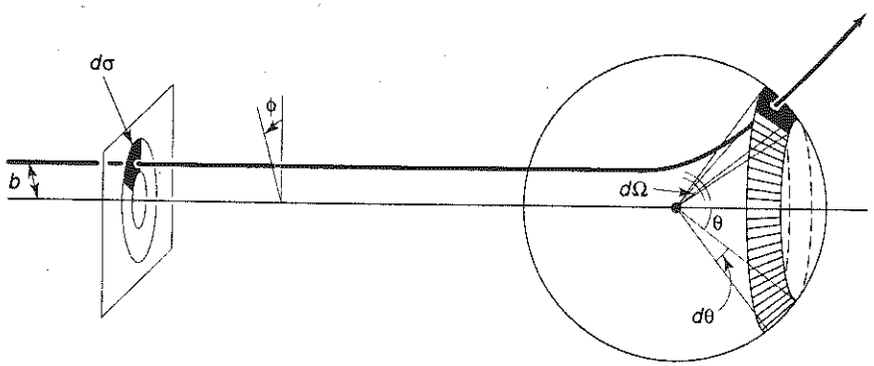
Aşikar olarak

$$\theta = \begin{cases} 2\cos^{-1}(b/R), & b \le R, \\ 0, & b \ge R. \end{cases} \qquad [11.2]$$

bulunur.

Daha genel biçimde, sonsuz küçük $d\sigma$ kesit alanlı bir parça içinden gelen parçacıklar bu kesit alana karşılık gelen $d\Omega$ katı açısı içinde saçılacaklardır (11.3 nolu şekil). $d\sigma$ ne kadar büyük olursa $d\Omega$ o kadar büyük olacaktır. $D(\theta) \equiv d\sigma / d\Omega$ orantı katsayısı **diferansiyel saçılma kesiti olarak**[1] adlandırılır.

[1] Bu kötü bir tanımlamadır. D ne *diferansiyeldir* ne de kesittir. Bana göre, "diferansiyel kesit" kelimeleri daha çok $d\sigma$'yı çağrıştırıyor. Fakat, bu terminolojiyi kullanmak zorunda kaldık. Ayrıca, bir noktada daha sizi uyarmalıyım: $D(\theta)$ genel kabul gören bir gösterim değildir. Çoğu kişi 11.3 nolu denklemdeki gibi gereksiz yere tekrar içeren $d\sigma/d\Omega$'yi kullanır. Sanırım diferansiyel kesit kendine özel bir simge ile gösterilirse, çok daha az kafa karıştırıcı olacaktır.



ŞEKİL 11.3: $d\sigma$ kesit alanı içinde gelen parçacıklar $d\Omega$ katı açısı içinde saçılırlar.

$$d\sigma = D(\theta)\, d\Omega. \qquad [11.3]$$

Çarpma parametresi ve ϕ azimut açısı cinsinden $d\sigma = bdbd\phi$'ye $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$'ye eşittir. Böylece $D(\theta)$ için

$$D(\theta) = \frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{db}{d\theta}\right| \qquad [11.4]$$

sonucunu elde ederiz. (θ genelde b'nin *azalan* bir fonksiyonu olduğu için türev gerçekte negatiftir. Bu nedenle mutlak değer işaretini kullanırız.)

Örnek 11. 2 Katı küreden saçılma (devamı): Katı küreden saçılma durumunda (11.1 nolu örnek)

$$\frac{db}{d\theta} = -\frac{1}{2}R\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \qquad [11.5]$$

olur ve bu da

$$D(\theta) = \frac{R\cos(\theta/2)}{\sin\theta}\left(\frac{R\sin(\theta/2)}{2}\right) = \frac{R^2}{4} \qquad [11.6]$$

olmasına yol açar. Diferansiyel kesit θ'dan bağımsız olduğu için, bu örnek alışılmış örneklerden değildir.

Toplam Kesit $D(\theta)$'nın tüm katı açılar üzerinden *integraline* eşittir:

$$\sigma \equiv \int D(\theta)\, d\Omega; \qquad [11.7]$$

Kabaca, hedeften saçılan ışık demetin toplam alanıdır. Örneğin, katı küreden saçılma durumunda,

$$\sigma = (R^2/4)\int d\Omega = \pi R^2 \qquad [11.8]$$

olur. Tam beklediğimiz gibi: Kürenin kesit alanı. Bu alan içinde olan BB'ler küreye çarpacaklar, ancak bu alanın çok dışında olanlar küreye isabet edemeyecekler. Öte yandan, burada geliştirilen formalizmin önemli özelliği sadece "vur - ya da - ıskala" hedefleri için *değil* "yumuşak" hedefler için de gayet iyi çalışıyor olmasıdır.

En son olarak, düzgün şiddete (ya da parçacık fizikçilerin kullandıkları gibi **parlaklığa**) sahip gelen bir parçacık *demetimiz* olsun:

$$\mathcal{L} \equiv \text{birim zamanda birim alan başına gelen parçacık sayısı.} \qquad [11.9]$$

Birim zamanda $d\sigma$ alanına giren parçacık sayısı (ve bundan dolayı $d\Omega$ katı açısı içine saçılan paracık sayısı) $dN = \mathcal{L}\, d\sigma = \mathcal{L}\, D(\theta) d\Omega$ olur. Bu da $D(\theta)$ için

$$D(\theta) = \frac{1}{\mathcal{L}}\frac{dN}{d\Omega} \qquad [11.10]$$

sonucunu verir. Sadece laboratuvarda kolaylıkla ölçülebilen büyüklükleri içerdiği için, bu ifade sıklıkla diferansiyel kesitin *tanımı* olarak kabul görür. Dedektör herhangi bir $d\Omega$ katı açısı içine saçılan parçacıkları toplarsa, birim zamanda kayıt edilen parçacık *sayısı* bölü $d\Omega$'yı saymış ve de gelen demetin parlaklığı ile normlamış oluruz.

*****Problem 11.1 Rutherford Saçılması:** q_1 yükü ve E kinetik enerjisi ile gelen bir parçacık, yükü q_2 olan ağır ve durgun bir parçacık tarafından saçılsın:

(a) Çarpma parametresini saçılma açısına bağlayan formülü çıkarın.[2]
Yanıt: $b = (q_1q_2/8\pi\epsilon_0 E)\cot(\theta/2)$.

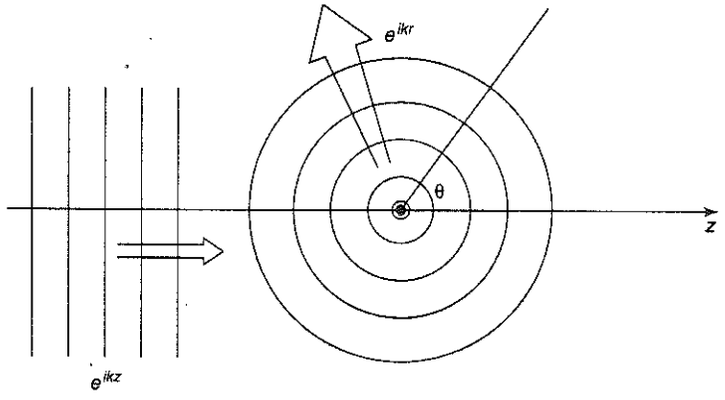
(b) Diferansiyel saçılma kesitini belirleyin. *Yanıt:*

$$D(\theta) = \left[\frac{q_1q_2}{16\pi\epsilon_0 E\sin^2(\theta/2)}\right]^2. \qquad [11.11]$$

(c) Rutherford saçılması için toplam kesitin *sonsuz* olduğunu gösterin. $1/r$ potansiyelinin "sonsuz erime" sahip olduğunu söyleriz; yani Coulomb potansiyelinden kaçış yok.

---

[2] Bu kolay bir şey değil ve belki de klasik mekanik üzerine bir kitaba bakmak isteyebilirsiniz. Örneğin, Jerry B. Marion ve Stephen T. Thornton, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, 4 th. ed., Saunders, Forth Worth, Tx (1995), 9.10. Kesim.



ŞEKİL 11.4: Dalgaların saçılması; gelen düzlem dalga giden küresel dalga üretir.

11.1.2 Kuantum Saçılma Teorisi

Saçılmanın kuantum teorisinde gelen dalga $\psi(z) = Ae^{ikz}$ şeklinde, z yönünde ilerleyen bir *düzlem* dalga olarak düşünülür. Bu dalga saçıcı bir potansiyel ile karşılaşır ve saçıcı merkez giden *küresel* bir dalga üretir (11.4 nolu şekil).[3] Yani, Schrödinger denkleminin

$$\boxed{\text{büyük } r\text{'ler için, } \psi(r,\theta) \approx A\left\{e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right\}} \qquad [11.12]$$

formundaki genel çözümlerini ararız. (Olasılığın korunabilmesi için $|\psi|^2$'nin küresel kısmı $1/r^2$ şeklinde değişim göstermek zorundadır. Bu nedenle, küresel dalga $1/r$ çarpanını içerir.) k **dalga sayısının** gelen parçacığın enerjisiyle ilişkisi bilinen bağıntıyla verilir:

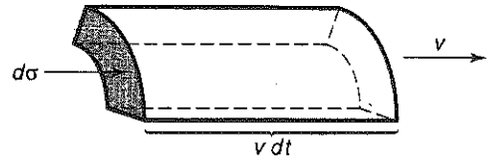
$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \qquad [11.13]$$

Daha önce yaptığım gibi, hedefin azimutal simetriye sahip olduğunu varsayacağım; genel durumda, giden küresel dalganın f genliği hem ϕ'ye hem de θ'ya bağlı olur.

[3] Şimdilik, bu olayda fazlaca *kuantum* mekaniksel bir şey yok: söylemeye çalıştığımız şey klasik *parçacıkların* değil, *dalgaların* saçılmasıdır. Ve hatta daha da ileri gidip, 11.4 nolu şekli bir kaya parçasıyla karşılaşan su dalgası ya da bir basketbol topundan geri seken ses dalgaları (üç boyutlu saçılma problemi ile ilgilendiğimizden belki bu daha iyi bir örnek) olarak düşünebilirsiniz. Bu durumda dalga fonksiyonunun sadece reel kısmını

$$A\left[\cos(kz) + f(\theta)\cos(kr + \delta)/r\right]$$

formunda yazarız ve $f(\theta)$ saçılan ses dalgasının θ yönünde genliğini veren ifade olur.



ŞEKİL 11.5: dt zamanı içinde $d\sigma$ alanından geçen demetin dV hacmi.

Bütün problem $f(\theta)$ **saçılma genliğini** belirlemektir. $f(\theta)$, *verilen bir θ yönünde saçılma olasılığını* verdiğinden, diferansiyel kesit ile $f(\theta)$ arasında bir ilişki olması gerek. Aslında, v hızı ile gelen parçacıkların dt zamanı içinde sonsuz küçük $d\sigma$ alanını geçme olasılığı aşağıdaki ifadeye eşittir (11.5 nolu şekile bakın):

$$dP = |\psi_{\text{gelen}}|^2 dV = |A|^2 (v\,dt)\,d\sigma.$$

Öte yandan, bu ifade parçacıkların ilgili $d\Omega$ katı açısından saçılma olasılığına da eşittir.

$$dP = |\psi_{\text{saçılan}}|^2 dV = \frac{|A|^2|f|^2}{r^2}(v\,dt)r^2\,d\Omega$$

Bu ifadeden $d\sigma = |f|^2 d\Omega$ bulunur ve bundan dolayı

$$\boxed{D(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2} \qquad [11.14]$$

olur. Açıkça görülüyor ki diferansiyel kesit (deneycilerin ilgilendiği büyüklük) saçılma genliğinin (Schrödinger denkleminin çözümü ile elde edilen) mutlak değer karesine eşittir. Önümüzdeki kesimlerde, saçılma genliğinin hesabında kullanılan iki tekniği inceleyeceğiz. Bunlar **kısmi dalga analizi** ve **Born Yaklaşımıdır**.

Problem 11.2 Bir ve iki boyutlu saçılma olayı için 11.12 nolu denkleme benzer çözümleri oluşturun.

11.2 KISMİ DALGA ANALİZİ

11.2.1. Formülasyon

4. Bölümde gösterdiğimiz gibi, küresel simetriye sahip $V(r)$ potansiyeli için

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_l^m(\theta,\phi) \qquad [11.15]$$

formunda ayrılabilen çözümler Schrödinger denklemini sağlar. Burada Y_l^m küresel

harmonik (4.32 nolu denklem) ve $u(r) = r\,R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u = Eu \qquad [11.16]$$

radyal denklemi (4.37 nolu denklem) sağlayan çözümdür. *Çok* büyük r değerlerinde potansiyel sıfıra gider ve merkezkaç terimi göz ardı edilir:

$$\frac{d^2u}{dr^2} \approx -k^2u.$$

Bu durumda genel çözüm

$$u(r) = Ce^{ikr} + De^{-ikr}$$

şeklindedir. İlk terim *giden* küresel dalga ve ikinci terim *gelen* dalgadır. Saçılan dalga için çözüm aradığımızda, doğal olarak $D = 0$ olmasını isteriz. Çok büyük r değerleri için önceki kesimde çıkarttığımız gibi (11.12 nolu denklem)

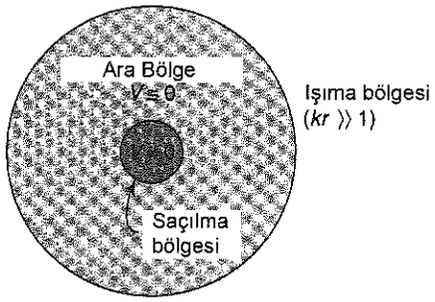
$$R(r) \sim \frac{e^{ikr}}{r}$$

olur.

Bunu *çok* büyük r değerleri için, yani $kr >> 1$ olduğu **ışıma bölgesi** için bulduk. Bir boyutlu saçılma teorisinde olduğu gibi, potansiyelin "yerelleşmiş" olduğunu varsayacağız. Bir başka deyişle, sonlu saçılma bölgesinin dışındaki noktalarda potansiyelin sıfır olduğunu kabul edeceğiz (11.6 nolu şekil). V'nin göz ardı edilebileceği fakat merkezkaç terimin yok sayılamayacağı[4] ara bölgede radyal denklem

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}u = -k^2u \qquad [11.17]$$

şeklini alır ve genel çözüm (4.45 nolu denklem) küresel Bessel fonksiyonlarının



ŞEKİL 11.6: Yerelleşmiş bir potansiyelden saçılma: saçılma bölgesi (koyu gölgelendirilmiş), ara bölge (hafif gölgelendirilmiş) ve ışıma bölgesi ($kr >> 1$).

[4] $1/r$, $r \to \infty$ iken $1/r^2$'ye kıyasla daha yavaş sıfıra gittiğinden ve merkezkaç terim bu bölgede baskın *olmadığından*, burada izlenen yol Coulomb potansiyeline uygulanamaz. Coulomb potansiyeli bu anlamda yerelleşmemiştir ve kısmi dalga analizi uygulanamaz.

TABLO 11.1: Küresel Hankel fonksiyonları: $h_l^{(1)}(x)$ ve $h_l^{(2)}(x)$.

$$h_0^{(1)} = -i\frac{e^{ix}}{x} \qquad h_0^{(2)} = i\frac{e^{-ix}}{x}$$
$$h_1^{(1)} = \left(-\frac{i}{x^2} - \frac{1}{x}\right)e^{ix} \qquad h_1^{(2)} = \left(\frac{i}{x^2} - \frac{1}{x}\right)e^{-ix}$$
$$h_2^{(1)} = \left(-\frac{3i}{x^3} - \frac{3}{x^2} + \frac{i}{x}\right)e^{ix} \qquad h_2^{(2)} = \left(\frac{3i}{x^3} - \frac{3}{x^2} + \frac{i}{x}\right)e^{-ix}$$
$$\left.\begin{aligned} h_l^{(1)} &\to \frac{1}{x}(-i)^{l+1}e^{ix} \\ h_l^{(2)} &\to \frac{1}{x}(i)^{l+1}e^{-ix} \end{aligned}\right\}, \quad x \gg 1$$

lineer bir kombinasyonudur:

$$u(r) = Arj_l(kr) + Brn_l(kr). \qquad [11.18]$$

Öte yandan, ne j_l (sin fonksiyonuna benzer) ne de n_l (bir çeşit genelleştirilmiş cos fonksiyonu gibidir) giden (ya da gelen) bir dalgayı temsil eder. İhtiyacımız olan şey, e^{ikr} ve e^{-ikr} fonksiyonlarına benzeyen lineer kombinasyonlardır. Bunlar **küresel Hankel fonksiyonları** olarak bilinirler:

$$h_l^{(1)}(x) \equiv j_l(x) + in_l(x); \quad h_l^{(2)}(x) \equiv j_l(x) - in_l(x). \qquad [11.19]$$

İlk birkaç Hankel fonksiyonu 11.1 nolu tabloda listelenmiştir. Büyük r değerleri için $h_l^{(1)}(kr)$ (birinci tip Hankel fonksiyonu) e^{ikr}/r şeklini alırken, $h_l^{(2)}(kr)$ (ikinci tip Hankel fonksiyonu) e^{-ikr}/r şeklini alır. O zaman giden dalgalar için *birinci tip küresel Hankel fonksiyonlarını* kullanmamız gerekir:

$$R(r) \sim h_l^{(1)}(kr). \qquad [11.20]$$

Böylece, $V(r) = 0$ olduğu saçılma bölgesi dışındaki bölge için kesin dalga fonksiyonu:

$$\psi(r, \theta, \phi) = A\left\{e^{ikz} + \sum_{l,m} C_{l,m}\, h_l^{(1)}(kr)\, Y_l^m(\theta, \phi)\right\}. \qquad [11.21]$$

İlk terim gelen düzlem dalgayı ve $C_{l,m}$ katsayılarını içeren toplam terimi saçılan dalgayı temsil eder. Öte yandan, potansiyelin küresel simetriye sahip olduğunu varsaydığımızdan, dalga fonksiyonunun ϕ'ye bağımlılığı olamaz.[5] Böylece, sadece $m = 0$

[5] Şüphesiz θ bağımlılığında bir sorun yok, çünkü gelen dalga küresel simetriyi bozacak bir z yönü tanımlar. Fakat *azimutal* simetri olduğu gibi kalır; gelen dalganın ϕ bağımlılığı olmadığından, saçılma sürecinde giden dalgaya ϕ bağımlılığı verecek hiçbir şey yoktur.

terimleri kalacaktır ($Y_l^m \sim e^{im\phi}$ olduğunu hatırlayın). 4.27 ve 4.32 nolu denklemleri kullanarak,

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta). \qquad [11.22]$$

bulunur. Burada P_l, l-inci Legendre polinomudur. $C_{l,0} \equiv i^{l+1} k\sqrt{4\pi(2l+1)}a_l$ alıp, açılımın katsayılarını yeniden düzenlemek alışılagelmiş bir uygulamadır:

$$\psi(r, \theta) = A\left\{e^{ikz} + k\sum_{l=0}^{\infty} i^{l+1}(2l+1)\, a_l\, h_l^{(1)}(kr)\, P_l(\cos\theta)\right\}. \qquad [11.23]$$

Biraz sonra neden bu garip gösterim biçiminin kullanışlı olduğunu göreceksiniz. a_l, l-inci **kısmi dalga genliği** olarak adlandırılır.

Çok büyük r değerleri için Hankel fonksiyonu $(-i)^{l+1}\, e^{ikr}/kr$ şeklindedir (11.1 nolu tablo). Böylece,

$$\psi(r, \theta) \approx A\left\{e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right\} \qquad [11.24]$$

olur ve burada

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, a_l\, P_l(\cos\theta) \qquad [11.25]$$

olarak verilir. Bu, genel yapıyla ilgili 11.12 nolu denklemde yapılan önermenin doğrulanmasından başka bir şey değildir ve bize $f(\theta)$ saçılma genliğinin kısmi dalga genlikleri (a_l) cinsinden nasıl hesaplanacağını da söyler. Diferansiyel kesit

$$D(\theta) = |f(\theta)|^2 = \sum_{l}\sum_{l'}(2l+1)(2l'+1)\, a_l^*\, a_{l'}\, P_l(\cos\theta)\, P_{l'}(\cos\theta) \qquad [11.26]$$

şeklindedir ve toplam kesit

$$\sigma = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,|a_l|^2 \qquad [11.27]$$

şeklini alır. (Açısal integrali alabilmek için Legendre polinomlarını ortogonallik bağıntısını (4.34 nolu denklem) uyguladım).

11.2.2 Taktik

Geriye kalan şey, verilen bir potansiyel için a_l kısmi dalga genliklerini belirlemektir. Bu da Schrödinger denkleminin *V(r)* potansiyelinin *sıfırdan farklı* olduğu *iç* bölgede çözüp, uygun sınır koşullarını uygulayıp, bu çözümün dış bölgedeki çözüm (11.23 nolu denklem) ile uyumlu hale getirilmesiyle gerçekleştirilebilir. Buradaki tek problem şu

hali ile kullandığım notasyonun karışık olmasıdır. Saçılan dalga için *küresel* koordinatları kullanmışken, gelen dalga için *kartezyen* koordinatları kullandım. Dalga fonksiyonunu çok daha tutarlı bir notasyon kullanarak yeniden yazmalıyız.

Şüphesiz e^{ikz}, $V = 0$ olduğu durumda, Schrödinger denklemini sağlar. Öte yandan, $V = 0$ olduğu durumda, Schrödinger denkleminin *genel* çözümünün aşağıdaki gibi yazılabileceğini de söylemiştim:

$$\sum_{l,m}\left[A_{l,m}\, j_l(kr) + B_{l,m}\, n_l(kr)\right] Y_l^m(\theta, \phi).$$

O zaman e^{ikz}'yi bu şekilde ifade edebilmenin mutlaka bir yolu olmalı. e^{ikz} orijinde sonlu bir sayıdır. $n_l(kr)$ Neumann fonksiyonları $r = 0$'da ıraksak olduğundan çözüm olamaz. Ayrıca $z = r\cos\theta$'nın ϕ'ye bağımlılığı olmadığından, toplamda sadece $m = 0$ terimleri kalır. Bir düzlem dalganın küresel dalgalar cinsinden açılımı **Rayleigh formülü** olarak bilinir:[6]

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)\, j_l(kr) P_l(\cos\theta). \qquad [11.28]$$

Bu kullanılarak, dış bölge için dalga fonksiyonu sadece r ve θ cinsinden yazılabilir:

$$\psi(r, \theta) = A\sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)\left[j_l(kr) + ik\, a_l\, h_l^{(1)}(kr)\right] P_l(\cos\theta). \qquad [11.29]$$

Örnek 11.3 Kuantum katı küre saçılması:

$$V(r) = \begin{cases}\infty, & r \le a,\\ 0, & r > a\end{cases} \qquad [11.30]$$

olduğunu varsayın. Sınır koşulu:

$$\psi(a, \theta) = 0 \qquad [11.31]$$

olur. O zaman tüm θ'lar için

$$\sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)\left[j_l(ka) + ik\, a_l\, h_l^{(1)}(ka)\right] P_l(\cos\theta) = 0 \qquad [11.32]$$

olur. Buradan

$$a_l = i\frac{j_l(ka)}{k\, h_l^{(1)}(ka)} \qquad [11.33]$$

elde edilir (11.3 nolu probleme bakın). Toplam kesit için

[6] Kanıt için, George Arfken and Hans-Jurgen Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 5 th. ed., Academic Press, Orlando (2000), 12.4.7 ve 12.4.8. problemlere bakınız.

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left|\frac{j_l(ka)}{h_l^{(1)}(ka)}\right|^2 \qquad [11.34]$$

ifadesi elde edilir. Bu sonuç *kesin* olmasına rağmen, çok aydınlatıcı değildir. Bu nedenle, $ka << 1$ olduğu *düşük enerjili saçılma* limitine bakalım. $k = 2\pi/\lambda$ olduğundan, bu limit durumu dalga boyunun kürenin yarıçapından çok daha büyük olduğu anlamına da gelir. 4.4 nolu tabloya baktığımızda, küçük z'ler için $n_l(z)$'nin $j_l(z)$'den çok daha büyük olduğunu görürüz. Öyleyse,

$$\frac{j_l(z)}{h_l^{(1)}(z)} = \frac{j_l(z)}{j_l(z)+in_l(z)} \approx -i\frac{j_l(z)}{n_l(z)}$$

$$\approx -i\frac{2^l l!z^l/(2l+1)!}{-(2l)!z^{-l-1}/2^l l!} = \frac{i}{2l+1}\left[\frac{2^l l!}{(2l)!}\right]^2 z^{2l+1} \qquad [11.35]$$

olur ve bu da

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{2l+1}\left[\frac{2^l l!}{(2l)!}\right]^4 (ka)^{4l+2}$$

sonucunu verir. Öte yandan, $ka << 1$ olduğunu varsaydığımızdan, yüksek dereceden terimler göz ardı edilebilir. Yani düşük enerji yaklaşımında, saçılmada $l = 0$ terimleri baskındır. Bu da diferansiyel kesitin klasik durumda olduğu gibi, θ'dan bağımsız olduğu anlamına gelir. Katı küreden düşük enerji ile saçılma için diferansiyel kesit

$$\sigma \approx 4\pi a^2 \qquad [11.36]$$

şeklini alır. Şaşırtıcı şekilde diferansiyel kesit geometrik kesitin *dört katıdır*. Aslında, σ *kürenin toplam yüzey alanıdır*. "Daha büyük etkin boyut" uzun dalgaboylu saçılmaya ait bir özelliktir (bu optikte de doğru olurdu). Bu bir anlamda klasik *parçacıklar* sadece kafa kafaya vuruşacakları kesit alanı görebiliyorken, bu dalgaların kürenin etrafından geçen kendi yollarını sezebiliyor olmaları gibi bir şey.

Problem 11.3 11.32 nolu denklem ile başlayarak 11.33 nolu denklemi kanıtlayın. *Yardım*: Legendre polinomlarının ortogonallik bağıntısını kullanarak, farklı l değerlerine sahip katsayıların ayrı ayrı sıfır olması gerektiğini gösterin.

**** Problem 11.4**

$$V(r) = \alpha\delta(r-a)$$

şeklinde bir küresel delta fonksiyonundan düşük enerji ile saçılma durumunu ele alın. Burada α ve a birer sabittir. $f(\theta)$ saçılma genliğini, $D(\theta)$ diferansiyel kesiti ve σ toplam kesiti hesaplayın. $ka << 1$ olduğunu varsayın ki, sadece $l = 0$ terimlerinden kayda değer bir katkı gelsin (problemi daha da kolaylaştırmak için, işin başında tüm $l \neq 0$ terimlerini atın.) Buradaki esas problem a_0'ı belirlemektir. Yanıtınızı boyutsuz büyüklük olan $\beta \equiv 2ma\alpha/\hbar^2$ cinsinden verin. *Yanıt*: $\sigma = 4\pi a^2\beta^2/(1+\beta)^2$.

11.3 FAZ KAYMALARI

Önce, $x < 0$ olduğu yarım çizgi üzerinde yerelleşmiş $V(x)$ potansiyelinden *bir* boyutlu saçılma problemini ele alalım (11.7 nolu şekil). $x = 0$ konumuna bir "tuğla duvar" koyacağım. Bu durumda soldan gelen dalga

$$\psi_g(x) = Ae^{ikx} \quad (x < -a) \qquad [11.37]$$

tamamıyla yansıyacaktır:

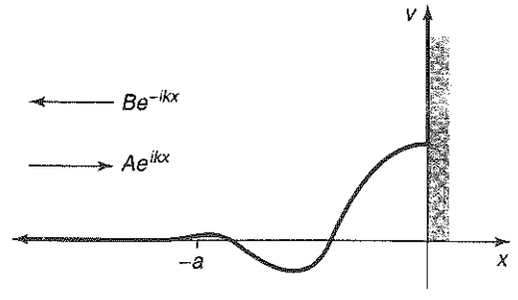
$$\psi_y(x) = Be^{-ikx} \quad (x < -a). \qquad [11.38]$$

$-a < x < 0$ etkileşim bölgesinde ne olursa olsun, yansıyan dalganın genliği olasılığın korunumu gereği gelen dalganın genliği ile aynı olmak *zorundadır*. Fakat, aynı *faza* sahip olmak zorunda değildir. Eğer potansiyel olmamış olsaydı (sadece $x = 0$'da duvar olsaydı), o zaman $B = -A$ olurdu, çünkü toplam dalga fonksiyonu (gelen ve yansıyan dalganın toplamı) orijinde sıfır olmak zorundadır:

$$\psi_0(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) \quad (V(x) = 0). \qquad [11.39]$$

Potansiyel sıfır *değil* ise, $x < -a$ için dalga fonksiyonu aşağıdaki şekli alır:

$$\psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{i(2\delta - kx)}\right) \quad (V(x) \neq 0). \qquad [11.40]$$



ŞEKİL 11.7: Sağ taraftan sonsuz bir duvar ile sınırlandırılmış yerelleşmiş potansiyelden bir boyutlu saçılma.

Tüm saçılma teorisi verilen bir potansiyel için δ **faz kaymasının**[7] (k'nın ve dolayısıyla $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ 'nin fonksiyonu olarak) hesabına indirgenir. Bunu Schrödinger denklemini $-a < x < 0$ saçılma bölgesinde uygun sınır koşulları altında çözerek gerçekleştiriyoruz (11.5 nolu probleme bakın). Kompleks B genliği ile çalışmak yerine faz kayması ile çalışmanın iki faydası vardır: (1) fiziğe anlam katar (olasılığın korunumu yüzünden potansiyelin yapabileceği *tek* şey yansıyan dalganın fazını kaydırmaktır) ve (2) kullanılan matematiği basitleştirir (iki reel sayı içeren bir kompleks büyüklük yerine tek bir reel büyüklük kullanılır).

Şimdi üç boyutlu duruma geri dönelim. Gelen düzlem dalga (Ae^{ikz}) z doğrultusunda açısal momentum taşımamasına rağmen (Rayleigh formülü $m \neq 0$ terimlerini içermez), tüm *toplam* açısal momentum değerlerini ($l = 0, 1, 2, \ldots$) içerir. Potansiyel küresel simetrik olduğundan, açısal momentum korunur ve bundan dolayı belli bir l ile etiketlenmiş her bir **kısmi dalga** birbirlerinden bağımsız olarak saçılacaktır. Yine genliklerinde değil,[8] sadece fazlarında bir değişiklik olacaktır. Eğer ortada potansiyel olmamış olsaydı, o zaman $\psi_0 = Ae^{ikz}$ olurdu ve l-inci kısmi dalga (11.28 nolu denklem)

$$\psi_0^{(l)} = Ai^l (2l+1)\, j_l(kr)\, P_l(\cos\theta) \quad (V(r) = 0) \qquad [11.41]$$

şeklini alırdı. 11.19 nolu denklem ve 11.1 nolu tablodan;

$$j_l(x) = \frac{1}{2}\left[h^{(1)}(x) + h_l^{(2)}(x)\right] \approx \frac{1}{2x}\left[(-i)^{l+1}e^{ix} + i^{l+1}e^{-ix}\right] \quad (x \gg 1). \quad [11.42]$$

Bu durumda büyük r değerleri için

$$\psi_0^{(l)} \approx A\frac{(2l+1)}{2ikr}\left[e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right] P_l(\cos\theta) \quad (V(r) = 0) \qquad [11.43]$$

yazabiliriz. Köşeli parantez içindeki ikinci terim gelen küresel dalgayı temsil eder ve saçıcı bir potansiyel olduğu durumda da değişmez. İlk terim giden dalgadır ve δ_l faz kaymasını alır:

$$\psi^{(l)} \approx A\frac{(2l+1)}{2ikr}\left[e^{i(kr+2\delta_l)} - (-1)^l e^{-ikr}\right] P_l(\cos\theta) \quad (V(r) \neq 0). \qquad [11.44]$$

Bunu fazı $2\delta_l$ kadar kaymış (7. dipnota bakın) yakınsayan küresel bir dalga (e^{ikz} terimindeki $h_l^{(2)}$ bileşeninin yol açtığı) ve giden küresel bir dalga olarak (saçılan dalganın yanında e^{ikz} terimindeki $h_l^{(1)}$ kısmı) ortaya çıkan bir dalga gibi düşünebilirsiniz.

[7] δ'nın önündeki 2 çarpanı bir alışkanlıktır. Gelen dalganın fazının bir gelirken bir de giderken kaydığını kabul ederiz. δ ise "tek yön" deki faz kaymasını tanımlandığından *toplam* 2δ'dır.

[8] Bu konunun bu kadar kafa karıştırıcı olmasının bir sebebi neredeyse her şeyin "genlik" olarak adlandırılmasıdır. $f(\theta)$ *saçılma* genliği, a_l "kısmi dalga genliği" gibi. Bunların ilki θ'nın fonksiyonudur ve her ikisi de kompleks sayıdır. *Şimdi* "genliği" gerçek *anlamında* kullanacağım: Bir sinüs dalgasının yüksekliği.

11.2.1. Kesimde tüm teori a_l kısmi dalga genliği cinsinden ifade edildi. Bu kez δ_l faz kayması cinsinden yazıldı. Bu iki ifade arasında bir bağlantı olmalı. Aslında 11.23 nolu denklemin asimptotik (büyük r değerleri için) şekli;

$$\psi^{(l)} \approx A\left\{\frac{(2l+1)}{2ikr}\left[e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right] + \frac{(2l+1)}{r}\, a_l\, e^{ikr}\right\} P_l(\cos\theta) \qquad [11.45]$$

δ_l cinsinden yazılan genel ifade (11.44 nolu denklem) ile kıyaslandığında

$$a_l = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right) = \frac{1}{k}e^{i\delta_l}\sin(\delta_l) \qquad [11.46]$$

olduğunu buluruz[9]. Buradan (11.25 nolu denklem)

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin(\delta_l)\, P_l(\cos\theta) \qquad [11.47]$$

ve (11.27 nolu denklem)

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2(\delta_l) \qquad [11.48]$$

olduğu görülür. Tekrarlarsak, kısmi dalga genliği yerine faz kayması ile çalışmanın avantajı fiziksel olarak yorumlamak daha kolay ve çok daha basit matematik içeriyor olmasıdır. Faz kayması formülasyonu, açısal momentumun korunumunu kullanarak kompleks bir büyüklük olan a_l'yi (iki reel sayı) tek bir reel δ_l büyüklüğüne indirger.

Problem 11.5 m kütleli ve E enerjili bir parçacık

$$V(x) = \begin{cases} 0, & (x < -a), \\ -V_0, & (-a \leq x \leq 0), \\ \infty, & (x > 0) \end{cases}$$

şeklindeki bir potansiyele soldan yaklaşmaktadır.

(a) Eğer gelen dalga Ae^{ikx} ise (burada $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$), yansıyan dalgayı bulun. *Yanıt:*

$$Ae^{-2ika}\left[\frac{k - ik'\cot(k'a)}{k + ik'\cot(k'a)}\right]e^{-ikx} \text{ ve burada } k' = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar.$$

[9] a_l ve δ_l arasında bağlantı kurabilmek için dalga fonksiyonunun asimptotik şeklini kullanmış olmama rağmen, 11.46 nolu denklem ile verilen sonuç için hiçbir yaklaştırma yoktur. Her ikisi de r'den bağımsız bir *sabittir* ve δ_l asimptotik bölgede faz kaymasını *verir*. Bu bölgede Hankel fonksiyonları e^{ikr}/kr formundadır.

(b) Yansıyan dalganın genliğinin gelen dalga ile aynı olduğunu gösterin.

(c) Derin bir kuyu için ($E << V_0$) δ faz kaymasını (11.40 nolu denklem) bulun. *Yanıt:* $\delta = -ka$.

Problem 11.6 11.3 nolu örnekte verilen katı küre saçılması için kısmi dalga faz kayması (δ_l) nedir?

Problem 11.7 Bir delta fonksiyonlu kabuktan (11.4 nolu problem) saçılma olayı için S – dalgasının ($l = 0$) kısmi dalga faz kaymasını ($\delta_0(k)$) bulun. $u(r)$ radyal dalga fonksiyonunun $r \to \infty$ iken, 0'a gittiğini varsayın. *Yanıt:*

$$\beta \equiv \frac{2m\alpha a}{\hbar^2} \text{ olmak üzere, } -\cot^{-1}\left[\cot(ka) + \frac{ka}{\beta \sin^2(ka)}\right].$$

11.4 BORN YAKLAŞIMI

11.4.1 Schrödinger Denkleminin İntegral Şekli

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \qquad [11.49]$$

zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = Q. \qquad [11.50]$$

şeklinde çok daha kısa ve öz olarak yazılabilir. Burada

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{ve} \quad Q \equiv \frac{2m}{\hbar^2}V\psi. \qquad [11.51]$$

Bu **Helmholtz denkleminin** yüzeysel şeklidir. Fakat, burada "homojen olmayan" Q teriminin kendisinin ψ'ye bağlı olduğuna dikkat edin.

"Kaynak" fonksiyonu bir *delta fonksiyonu* olan Helmholtz denklemini çözen bir $G(\mathbf{r})$ fonksiyonu bulduğumuzu varsayalım:

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}). \qquad [11.52]$$

Bu durumda ψ'yi bir integral şeklinde ifade edebiliriz:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\,Q(\mathbf{r}_0)\,d^3\mathbf{r}_0. \qquad [11.53]$$

Bunun 11.50 nolu denklemde verilen formdaki Schrödinger denklemini sağladığını göstermek kolay:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \int \left[(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\right] Q(\mathbf{r}_0)\,d^3\mathbf{r}_0$$
$$= \int \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\,Q(\mathbf{r}_0)\,d^3\mathbf{r}_0 = Q(\mathbf{r}).$$

$G(\mathbf{r})$, Helmholtz denkleminin **Green fonksiyonudur**. Genel olarak, bir lineer diferansiyel denklemin Green fonksiyonu bir delta fonksiyonlu kaynağa olan "tepki"yi temsil eder.

İlk işimiz[10] $G(\mathbf{r})$'yi bulmak için 11.52 nolu denklemi çözmektir. Bu en kolay şekilde, *diferansiyel* denklemi *cebirsel* denkleme dönüştüren Fourier dönüşümü ile gerçekleştirilebilir:

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}} g(\mathbf{s})\,d^3\mathbf{s} \qquad [11.54]$$

olsun. O zaman,

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \left[(\nabla^2 + k^2)e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}\right] g(\mathbf{s})\,d^3\mathbf{s}.$$

Öte yandan,

$$\nabla^2 e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}} = -s^2 e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}} \qquad [11.55]$$

ve (2.144 nolu denkleme bakın)

$$\delta^3(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}\,d^3\mathbf{s} \qquad [11.56]$$

olduğundan, 11.52 nolu denklem

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int (-s^2 + k^2)e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}} g(\mathbf{s})\,d^3\mathbf{s} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}\,d^3\mathbf{s}$$

eşitliğini verir. Buradan[11]

$$g(\mathbf{s}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}(k^2 - s^2)} \qquad [11.57]$$

sonucuna ulaşılır.

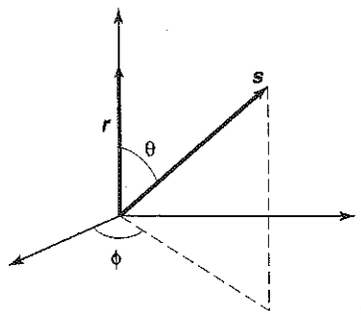
Bunu 11.54 nolu denklemde yerine koyarsak,

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{(k^2 - s^2)}\,d^3\mathbf{s}. \qquad [11.58]$$

---

[10] *Uyarı:* Çerçeve (kontur) integrallerini de içeren iki sayfalık ağır matematiksel işlemlere doğru gidiyorsunuz. İsterseniz bunları atlayıp, doğrudan 11.65 nolu denklem ile verilen yanıta geçin.

[11] Bu şüphesiz *yeter* ve aynı zamanda *gerek* koşuldur. Bunu, bu iki terimi tek bir integrale dönüştürüp, Plancherel teoremi kullanarak gösterebilirsiniz.



ŞEKİL 11.8: 11.58 nolu denklem ile verilen integral için uygun koordinat takımı.

olur. **s** integrali sözkonusu olduğu sürece **r** sabittir. Böylece çok doğal olarak kutup ekseni **r** boyunca uzanan bir (s, θ, ϕ) küresel koordinat takımı seçebiliriz (11.8 nolu şekil). O zaman $\mathbf{s}.\mathbf{r} = sr\cos\theta$ ve ϕ'nin integrali sıradandır (2π) ve de θ integrali;

$$\int_0^{\pi} e^{isr\cos\theta}\sin\theta\, d\theta = -\frac{e^{isr\cos\theta}}{isr}\bigg|_0^{\pi} = \frac{2\sin(sr)}{sr}. \qquad [11.59]$$

Böylece,

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{2}{r}\int_0^{\infty}\frac{s\sin(sr)}{k^2-s^2}ds = \frac{1}{4\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{s\sin(sr)}{k^2-s^2}ds \qquad [11.60]$$

halini alır. Kalan integral o kadar kolay değildir. Üstel gösterime dönmek ve de paydayı çarpanlarına ayırmak gerek:

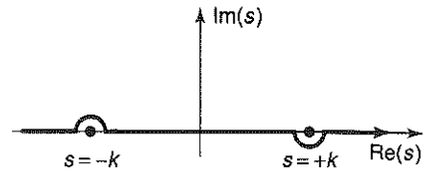
$$G(\mathbf{r}) = \frac{i}{8\pi^2 r}\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{se^{isr}}{(s-k)(s+k)}ds - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{se^{-isr}}{(s-k)(s+k)}ds\right\}$$
$$= \frac{i}{8\pi^2 r}(I_1 - I_2). \qquad [11.61]$$

Bu iki integral **Cauchy integral formülü** kullanılarak hesaplanabilir: z_0 çerçeve içinde ise

$$\oint\frac{f(z)}{(z-z_0)}dz = 2\pi i f(z_0), \qquad [11.62]$$

yoksa integral sıfırdır. Üzerinde çalıştığımız integral reel eksen üzerinden alınıyor ve tam $\pm k$'da bulunan kutup tekilliklerinin üzerinden geçer. Kutup noktalarının etrafından nasıl dolaşacağımıza karar vermek zorundayız. $-k$ noktasında bulunan kutbun *üstünden* ve $+k$ noktasında bulunan kutbun *altından* dolanacağım (11.9 nolu şekil). İstediğiniz *başka bir* dolanım şekli seçmekte özgürsünüz. Buna her bir kutbun etrafını yedi kez dolanmak da dahil. Her defasında farklı bir Green fonksiyonu elde edeceksiniz, fakat biraz sonra göstereceğim gibi bunların her biri eşit ağırlıkta kabul edilebilirdir.

11.61 nolu denklemdeki her bir integral için çerçeveyi öyle bir şekilde "tamamlamalıyız" ki sonsuzdaki yarım daireden hiçbir katkı gelmesin. I_1 için s büyük bir *pozitif* sanal



ŞEKİL 11.9: Çerçeve integrallerinde (11.61 nolu denklem) kutupları dolanma.

kısma sahip olduğu zaman, e^{isr} çarpanı sıfıra gider. Bu nedenle çerçeveyi üstten kapatırız (11.10(a) nolu şekil). Çerçeve sadece $s = +k$'daki tekilliği çevreler. Böylece,

$$I_1 = \oint\left[\frac{se^{isr}}{s+k}\right]\frac{1}{s-k}ds = 2\pi i\left[\frac{se^{isr}}{s+k}\right]\bigg|_{s=k} = i\pi e^{ikr} \qquad [11.63]$$

olur. I_2 integrali için, s büyük bir *negatif* sanal kısma sahip olduğu zaman, e^{-isr} çarpanı sıfıra gider. Bu nedenle çerçeveyi *alttan* kapatırız (11.10(b) nolu şekil). Bu kez çerçeve $s = -k$'daki tekilliği çevreler ve *saat yönünde* dolandığı için – işareti alır:

$$I_2 = -\oint\left[\frac{se^{-isr}}{s-k}\right]\frac{1}{s+k}ds = -2\pi i\left[\frac{se^{-isr}}{s-k}\right]\bigg|_{s=-k} = -i\pi e^{ikr}. \qquad [11.64]$$

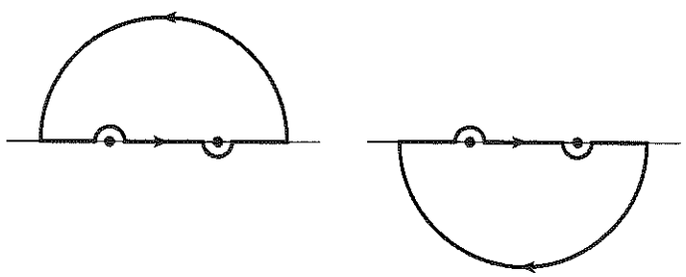
Sonuç:

$$G(\mathbf{r}) = \frac{i}{8\pi^2 r}\left[\left(i\pi e^{ikr}\right) - \left(-i\pi e^{ikr}\right)\right] = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}. \qquad [11.65]$$

Bu, Helmholtz denklemi için Green fonksiyonudur ve aynı zamanda 11.52 nolu denklemin çözümüdür. Eğer tüm bu işlemler içinde kaybolduysanız, sonucun doğrudan türev alarak *kontrolünü* yapabilirsiniz (11.8 nolu probleme bakın). Ya da, $G(\mathbf{r})$ Helmholtz denklemi için Green fonksiyonu olduğundan, *homojen* Helmholtz denklemini

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\mathbf{r}) = 0; \qquad [11.66]$$

sağlayan bir $G_0(\mathbf{r})$ fonksiyonu ekleyebiliriz. Yani $(G+G_0)$ fonksiyonunun da 11.52 nolu



ŞEKİL 11.10 11.63 ve 11.64 nolu denklemlerdeki çerçevelerinin kapatılması.

denklemi sağladığı açıktır. Belirsizlik tamamıyla kutupların nasıl çerçeveleneceği ile ilgilidir. Farklı bir seçim farklı bir $G_0(\mathbf{r})$ fonksiyon seçimi demektir.

11.53 nolu denkleme dönersek, Schrödinger denkleminin genel çözümü aşağıdaki şekli alır:

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} V(\mathbf{r}_0)\psi(\mathbf{r}_0)\, d^3\mathbf{r}_0.} \qquad [11.67]$$

Burada ψ_0

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_0 = 0 \qquad [11.68]$$

serbest parçacık Schrödinger denklemini sağlar. 11.67 nolu denklem **Schrödinger denkleminin integral şeklidir**. Bu tamamıyla Schrödinger denkleminin bilinen diferansiyel şekli ile özdeştir. İlk bakışta, bu her hangi bir potansiyel için Schrödinger denkleminin açık bir *çözümü* gibi *görünüyor*. Buna aldanmayın: denklemin sağ tarafında integralin içinde ψ var. Yani, çözümü bilmedikçe integrali alamazsınız. Yine de integral şekli çok etkin olabilecek bir araçtır. Özellikle biraz sonra göreceğimiz gibi, saçılma problemleri için çok uygundur.

Problem 11.8 Doğrudan yerine koyarak, 11.65 nolu denklemin 11.52 nolu denklemi sağlayıp sağlamadığını kontrol edin. *Yardım:* $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta^3(\mathbf{r})$.[12]

****Problem 11.9** Hidrojen atomunun taban durumunun (4.80 nolu denklem) uygun bir V ve E için Schrödinger denkleminin integral şeklini sağladığını gösterin. Burada E'nin *negatif* ve dolayısıyla $\kappa \equiv \sqrt{-2mE}\,/\,\hbar$ olmak üzere $k = i\kappa$ olduğuna dikkat edin.

11.4.2 Birinci Born Yaklaşımı

$V(\mathbf{r}_0)$'ın $\mathbf{r}_0 = 0$ civarında yerelleştiğini (yani, potansiyel tipik bir saçılma probleminde olduğu gibi, belli bir sonlu bölge dışında sıfıra düşüyor) ve saçılma merkezinden *çok uzak* noktalarda $\psi(\mathbf{r})$'yi hesaplamak istediğimizi varsayalım. O zaman, 11.67 nolu denklem ile verilen integrale katkı yapan tüm noktalar için, $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}_0|$. Öyleyse,

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2 = r^2 + r_0^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_0 \cong r^2\left(1 - 2\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_0}{r^2}\right) \qquad [11.69]$$

ve bundan dolayı

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| \cong r - \hat{r}\cdot\mathbf{r}_0 \qquad [11.70]$$

olur.

---

[12] Örneğin, D. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 3 rd ed., (Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 1999), 1.5.3. Kesime bakınız.

$$\mathbf{k} \equiv k\hat{r} \qquad [11.71]$$

olsun. O zaman

$$e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} \cong e^{ikr}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0} \qquad [11.72]$$

olur ve bundan dolayı

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} \cong \frac{e^{ikr}}{r}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0} \qquad [11.73]$$

elde edilir (*payda*da $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| \cong r$ şeklinde radikal bir yaklaştırma yapabiliriz. *Üstel* kısımda bir sonraki terimi tutmak zorundayız. Eğer bu kafanızı karıştırıyor ise, paydadaki açılımda bir sonraki terimi de yazın. Yaptığımız şey; küçük (r_0/r)'nin kuvvetleri şeklinde seriye açıp, bütün küçük terimleri düşürmektir).

Saçılma durumunda, gelen düzlem dalgayı temsilen

$$\psi_0(\mathbf{r}) = Ae^{ikz} \qquad [11.74]$$

olmasını isteriz. Büyük r'ler için;

$$\psi(\mathbf{r}) \cong Ae^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}V(\mathbf{r}_0)\psi(\mathbf{r}_0)\, d^3\mathbf{r}_0 \qquad [11.75]$$

olur. Bu, 11.12 nolu denklem ile verilen standart forma sahiptir ve buradan saçılma genliğini

$$f(\theta,\phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 A}\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}V(\mathbf{r}_0)\psi(\mathbf{r}_0)\, d^3\mathbf{r}_0 \qquad [11.76]$$

şeklinde elde ederiz.

Şimdiye kadar yapılanlarda bir yaklaştırma yok. Şimdi **Born yaklaşımına** başvuracağız: Gelen düzlem dalganın *potansiyel tarafından çok fazla değiştirilmediğini* varsayalım. O zaman, integral içinde

$$\psi(\mathbf{r}_0) \approx \psi_0(\mathbf{r}_0) = Ae^{ikz_0} = Ae^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_0} \qquad [11.77]$$

şeklinde almakta fayda var. Burada

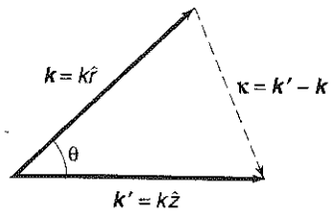
$$\mathbf{k}' \equiv k\hat{z} \qquad [11.78]$$

olarak tanımlanır. ($V = 0$ olsaydı, bu *kesin* çözüm olurdu. Bu, özünde *zayıf potansiyel* yaklaşımıdır.[13]) Born yaklaşımında:

$$\boxed{f(\theta,\phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_0}V(\mathbf{r}_0)\, d^3\mathbf{r}_0.} \qquad [11.79]$$

---

[13] Genel olarak, gelen parçacığın enerjisinin düşük olduğu durumda, serideki sadece birkaç terimin kayda değer katkısı olacağından kısmi dalga analizini kullanmakta fayda vardır. Born yaklaşımı gelen parçacığın enerjisine kıyasla potansiyelin zayıf ve dolayısıyla sapmanın az olduğu durumlarda kullanılır.



ŞEKİL 11.11: Born yaklaşımında iki dalga vektörü: k′ *geliş* yönünü, k *saçılma* yönünü gösterir.

(Olur ya, k′ ve **k**'nın tanımlarını kaçırmış olursunuz: bunların her ikisi de k büyüklüğüne sahip, ilki gelen demetin yönünü ve ikincisi de dedektöre doğru olan yönü gösterir–11.11 nolu şekile bakınız. $\hbar(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ saçılma sürecindeki **momentum aktarımıdır**).

Özellikle **düşük enerjili** (uzun dalgaboylu) **saçılma** için, üstel çarpan saçılma bölgesinde sabittir ve Born yaklaşımı

$$f(\theta,\phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})\,d^3\mathbf{r}, \quad \text{(düşük enerji)} \qquad [11.80]$$

gibi basit bir şekil alır. (Bu noktada karışıklığa yol açabilecek bir şey kalmadığından, **r** üzerindeki alt indisi kullanmadım.)

Örnek 11.4 Düşük enerjide yumuşak küreden saçılma[14]

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} V_0, & r \le a, \\ 0, & r > a \end{cases} \qquad [11.81]$$

olduğunu varsayalım. Düşük enerji durumunda, saçılma genliği

$$f(\theta,\phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}V_0\left(\frac{4}{3}\pi a^3\right) \qquad [11.82]$$

(θ ve ϕ'den bağımsızdır), diferansiyel kesit

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \cong \left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\right)^2 \qquad [11.83]$$

ve toplam kesit

$$\sigma \cong 4\pi\left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\right)^2 \qquad [11.84]$$

olur.

[14] Born yaklaşımını *katı* küre potansiyeline ($V_0 = \infty$) uygulayamazsınız. İntegral ıraksar. Burada potansiyelin *zayıf* olduğunu ve de saçılma bölgesinde dalga fonksiyonunu fazlaca değiştirmediğini varsaydık. Ancak *katı* küre dalga fonksiyonunu *radikal* bir şekilde değiştirir: Ae^{ikz}'den *sıfıra*.

Küresel simetrik $V(\mathbf{r}) = V(r)$ potansiyeli için Born yaklaşımı tekrar basit şekle indirgenir.

$$\boldsymbol{\kappa} \equiv \mathbf{k}' - \mathbf{k} \qquad [11.85]$$

olarak tanımlayalım ve $\mathbf{r}_0$ integrali için kutup ekseni $\boldsymbol{\kappa}$ doğrultusunda olsun. O zaman,

$$(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_0 = \kappa r_0 \cos\theta_0 \qquad [11.86]$$

ve

$$f(\theta) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\kappa r_0\cos\theta_0}V(r_0)r_0^2\sin\theta_0\,dr_0\,d\theta_0\,d\phi_0 \qquad [11.87]$$

olur. ϕ integrali sıradandır (2π) ve θ integrali ise daha önce karşılaştığımız bir integraldir (11.59 nolu denkleme bakın). r üzerindeki alt indisleri düşürürsek

$$f(\theta) \cong -\frac{2m}{\hbar^2\kappa}\int_0^\infty rV(r)\sin(\kappa r)\,dr, \quad \text{(küresel simetri)} \qquad [11.88]$$

elde ederiz. f'nin açısal bağımlılığı $\boldsymbol{\kappa}$'nın içindedir. 11.11 nolu şekilde gösterildiği gibi

$$\kappa = 2k\sin(\theta/2). \qquad [11.89]$$

Örnek 11.5 Yukawa Saçılması: Bir atomik çekirdekte bağlanma kuvveti için kaba bir model olan **Yukawa potansiyeli** β ve μ birer sabit olmak üzere,

$$V(r) = \beta\frac{e^{-\mu r}}{r} \qquad [11.90]$$

şeklindedir. Born yaklaşımı

$$f(\theta) \cong -\frac{2m\beta}{\hbar^2\kappa}\int_0^\infty e^{-\mu r}\sin(\kappa r)\,dr = -\frac{2m\beta}{\hbar^2(\mu^2+\kappa^2)} \qquad [11.91]$$

sonucunu verir. (11.11 nolu problemde buradaki integrali hesaplayacaksınız).

Örnek 11.6 Rutherford saçılması: Yukawa potansiyelinde $\beta = q_1q_2/4\pi\epsilon_0$, $\mu = 0$ koyarsak, iki nokta yük arasındaki elektriksel etkileşmeyi tanımlayan Coulomb potansiyelini elde ederiz. Saçılma genliği de

$$f(\theta) \cong -\frac{2mq_1q_2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa^2} \qquad [11.92]$$

ya da 11.89 ve 11.51 nolu denklemleri kullanarak,

$$f(\theta) \cong -\frac{q_1 q_2}{16\pi\epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)} \qquad [11.93]$$

şeklini alır. Bunun karesi diferansiyel kesiti verir:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{q_1 q_2}{16\pi\epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)}\right]^2. \qquad [11.94]$$

Bu, tam olarak Rutherford formülüdür (11.11 nolu denklem). Coulomb potansiyeli için klasik mekanik, Born yaklaşımı ve kuantum alan teorisinin hepsi aynı sonucu verir. Bilgisayar iş dünyasında söylenildiği gibi Rutherford formülü şaşırtıcı şekilde "gürbüz" dür.

***Problem 11.10** Yumuşak küre saçılması için saçılma genliğini Born yaklaşımını kullanarak herhangi bir enerji değeri için hesaplayın. Elde ettiğiniz formülün düşük enerji limitinde 11.82 nolu denkleme indirgendiğini gösterin.

Problem 11.11 11.91 nolu denklem ile verilen integrali alarak, denklemin sağ tarafındaki ifadeyi elde edin.

****Problem 11.12** Born yaklaşımı içinde, Yukawa potansiyeli saçılması için toplam kesiti hesap edin. Yanıtınızı E'nin fonksiyonu olarak verin.

***Problem 11.13** 11.4 nolu problem ile verilen potansiyel için;

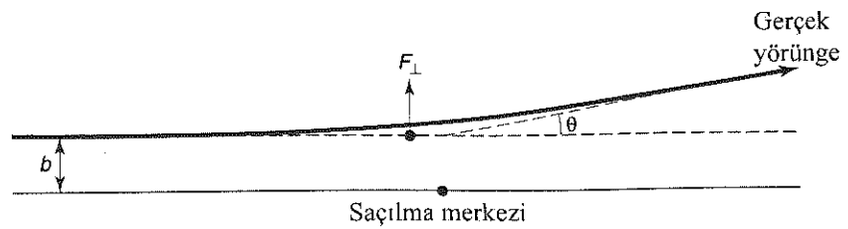
(a) Born yaklaşımı içinde düşük enerji ile gelen dalga için $f(\theta)$, $D(\theta)$ ve σ'yı hesaplayın,

(b) Born yaklaşımı içinde herhangi bir enerji için $f(\theta)$'yı hesaplayın,

(c) Uygun bir rejimde sonuçlarınızın 11.4 nolu problemde elde edilen yanıt ile uyumlu olduğunu gösterin.

11.4.3 Born Serileri

Born yaklaşımı özü itibariyle klasik saçılma teorisindeki **anlık itme yaklaşımına** benzer. Anlık itme yaklaşımında parçacığı doğru bir çizgi üzerinde yoluna devam



ŞEKİL 11.12: Anlık itme yaklaşımında, parçacık sapmaya uğramamış yörüngede hareket eder ve aktarılan enine momentum hesaplanır.

ediyormuş gibi ele alırız (11.12 nolu şekil) ve bu durumda ona aktarılan enine anlık itmeyi hesaplarız:

$$I = \int F_\perp \, dt. \qquad [11.95]$$

Yörüngeden sapmanın nispeten çok küçük olduğu durumda, 11.95 nolu denklem parçacığa aktarılan enine momentum için iyi bir yaklaşım olur. Bu durumda, saçılma açısı, p gelen momentum olmak üzere

$$\theta \cong \tan^{-1}(I/p) \qquad [11.96]$$

şeklini alır. Bunu, "birinci dereceden" anlık itme yaklaşımı olarak alabiliriz (*sıfırıncı* derece *ilk başta* ele aldığımız ve hiçbir sapmanın olmadığı durumdur). Benzer şekilde, sıfırıncı dereceden Born yaklaşımında, gelen düzlem dalga hiçbir değişikliğe uğramadan geçer ve bir önceki kesimde incelediğimiz konu bu olaya olan birinci dereceden düzeltmedir. Aynı düşünce sistemi daha yüksek dereceden düzeltme terimlerini üretebilmek için tekrar kullanılabilir ve sonunda kesin sonuca yakınsaması beklenir.

Schrödinger denkleminin integral formu ψ_0 gelen dalgayı temsil etmek üzere

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) V(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) \, d^3\mathbf{r}_0 \qquad [11.97]$$

sonucunu verir. Burada

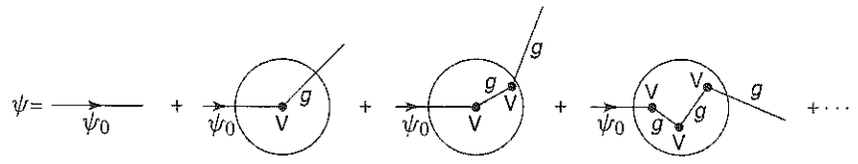
$$g(\mathbf{r}) \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r} \qquad [11.98]$$

Green fonksiyonudur (daha uygun olduğu için $2m/\hbar^2$ çarpanını ifadenin içine dahil ettim) ve V saçıcı potansiyeldir. Şematik olarak:

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi. \qquad [11.99]$$

ψ için bu ifadeyi aldığımızı varsayalım ve bunu integralin içine yerleştirelim:

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \iint gVgV\psi. \qquad [11.100]$$



ŞEKİL 11.13: Born serilerinin (11.101 nolu denklem) şematik yorumu.

Bu süreci tekrarlayarak ψ için formal bir seri takımı elde ederiz:

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \int\int gVgV\psi_0 + \int\int\int gVgVgV\psi_0 + \cdots. \quad [11.101]$$

Her bir integrandın içinde kuvvetleri gittikçe artan gV ile birlikte ψ_0 gelen dalga fonksiyonu var. *Birinci* Born yaklaşımı seriyi ikinci terimden sonra kesmesine rağmen, daha yüksek dereceden düzeltme terimlerinin nasıl elde edilebileceği çok açıktır.

Born serileri şematik olarak 11.13 nolu şekilde gösterildiği gibi tanımlanabilir. Sıfırıncı derecede potansiyel ψ'de her hangi bir değişiklik yapmaz; birinci derecede ψ bir kez "tekmelenir" ve sonra yeni bir doğrultuda ilerler; ve böylece devam eder. Bu bağlamda Green fonksiyonu bazen **ilerletici** olarak adlandırılır ve bize bir etkileşim ile bir sonraki etkileşim arasında karmaşanın nasıl ilerlediğini söyler. Born serileri **Feynman diyagramları** ile birbirlerine bağlanan **köşe çarpanları** (V) ve g ilerleticileri ile ifade edilen Feynman'ın relativistik kuantum mekanik formülasyonunun da ilham kaynağı idi.

Problem 11.14 Rutherford saçılması için anlık itme yaklaşımı içinde θ'yı çarpma parametresinin fonksiyonu olarak hesaplayın. Elde ettiğiniz sonucun uygun bir limit durumunda 11.1 nolu problemin (a) şıkkı ile verilen kesin sonuç ile uyumlu olduğunu gösterin.

***Problem 11.15** Düşük enerji ile gelen dalganın yumuşak küreden saçılmasında, saçılma açısını *ikinci* Born yaklaşımı içinde hesaplayın.

Yanıt: $-(2mV_0a^3/3\hbar^2)[1-(4mV_0a^2/5\hbar^2)]$.

---

11. BÖLÜM İÇİN EK PROBLEMLER

***Problem 11.16** *Bir* boyutlu Schrödinger denklemi için Green fonksiyonunu bulun ve bunu kullanarak 11.67 nolu denkleme benzer şekilde integral şeklini oluşturun. *Yanıt:*

$$\psi(x) = \psi_0(x) - \frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-x_0|}V(x_0)\psi(x_0)\,dx_0. \quad [11.102]$$

Problem 11.17 11.16 nolu problemde elde ettiğiniz sonucu kullanarak, Born yaklaşımını bir boyutlu saçılma (ortada "tuğla duvar" olmayan $-\infty < x < \infty$ aralığında) için oluşturun. Yani, $\psi_0(x) = Ae^{ikx}$ olarak seçin ve integrali hesaplamak için $\psi(x_0) \cong \psi_0(x_0)$ olduğunu varsayın. Yansıma katsayısının aşağıdaki şekli aldığını gösterin:

$$R \cong \left(\frac{m}{\hbar^2 k}\right)^2 \left|\int_{-\infty}^{\infty} e^{2ikx}V(x)\,dx\right|^2. \quad [11.103]$$

Problem 11.18 Bir boyutlu Born yaklaşımını (11.17 nolu problem) kullanarak, bir delta fonksiyonundan (2.114 nolu denklem) ve sonlu bir kare kuyudan (2.145 nolu denklem) saçılma için geçme katsayısını ($T = 1 - R$) hesaplayın. Sonuçlarınızı 2.141 ve 2.169 nolu denklemlerle verilen kesin sonuçlarla kıyaslayın.

Problem 11.19 Toplam kesit ile ileri saçılma genliğinin sanal kısmını birbirine bağlayan **optik** teoremi kanıtlayın:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}(f(0)). \quad [11.104]$$

Yardım: 11.47 ve 11.48 nolu denklemleri kullanın.

Problem 11.20 Born yaklaşımını kullanarak,

$$V(\mathbf{r}) = Ae^{-\mu r^2}$$

Gauss potansiyelinden saçılma için toplam kesiti belirleyin. Yanıtınızı A, μ ve m (gelen parçacığın kütlesi) sabitleri ve de E gelen parçacığın enerjisi olmak üzere $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ cinsinden ifade edin.

---

12. BÖLÜM

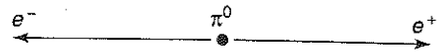
SONSÖZ

Şimdi, kuantum mekaniğinin ne *söylediğini* anladığımıza göre, (en azından öyle umuyorum) ne *anlama* geldiği sorusuna dönebiliriz. Yani, 1.2. Kesimde başladığımız hikayenin devamını getireceğiz. Sorunun kaynağı dalga fonksiyonunun istatistiksel yorumundaki belirsizliktir. Ψ ya da daha genel olarak bir *kuantum durumu* (örneğin bir spinör) bir ölçümün sonucunu tek başına belirleyemez; sağladığı şey olası sonuçların istatistiksel dağılımıdır. Bu beraberinde derin bir soruyu da getirir: Fiziksel sistem sorudaki niteliğe ölçümden önce "gerçekten sahip" miydi (**gerçekçi** bakış açısı)? Yoksa dalga fonksiyonundan gelen istatistiksel bağ koşulunun sınırladığı bu nitelik, ölçme eyleminin kendisi tarafından mı "yaratıldı" (**Ortodoks** tavır) ya da bu soruyu "metafiziksel" bir sorudur deyip, tamamıyla savuşturabilir miyiz (**bilinemezci** yanıt)?

Gerçekçi bakış açısına göre, kuantum mekaniği *tamamlanmamış* bir teoridir. Çünkü *dalga fonksiyonu aracılığı ile kuantum mekaniginin sistem hakkında söyleyebileceği her şeyi biliyor olsak bile*, sistemin tüm özelliklerini belirleyemeyiz. Fiziksel gerçeğin eksiksiz bir tanımı için gerekli olan ancak kuantum mekaniğinin sağlayamadığı *başka* bilgilerin olduğu açıktır.

Ortodoks tavır daha da kafa karıştırıcı sorulara yol açar. Eğer ölçme eylemi daha önce sistemde olmayan bir özelliği *yaratmak* için sistemi "taraf olmaya" zorluyor ise, o zaman ölçme sürecinde çok garip bir şey olmalı.[1] Üstelik ardı ardına yapılan ölçümlerin

[1] Bu *garip* olabilir, ama bazı populistlerin önerdiği gibi *gizemsel* değildir. Niels Bohr'un kozmik ilke statüsüne yükselttiği *dalga parçacık ikiliği* elektronları bazen yetişkin gibi davranan ve bazen de hiçbir sebep yok iken çocuk gibi davranan bir ergene benzetir. Böyle bir dil kullanmak istemem. Bir parçacığın ölçümden önce belli bir özelliği yoktur dediğimde kafamda olan şey, örneğin, $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ spin durumunda olan bir elektron için açısal momentumunun x bileşeninin ölçümü eşit olasılıkla ya $\hbar/2$ ya da $-\hbar/2$ değerini verecektir. Fakat ölçüm tamamlanana kadar elektron iyi tanımlanmış bir S_x değerine *sahip olmayacaktır.*



ŞEKİL 12.1: EPR deneyinin Bohm uyarlaması: Durgun durumdaki bir π^0 elektron-pozitron çiftine bozunuyor.

aynı sonucu vermelerini açıklayabilmek için, ölçme eyleminin dalga fonksiyonunu **çöktürdüğünü** varsaymak zorunda kalıyoruz, ki bu Schrödinger denklemi ile tanımlanan normal evrim süreci ile uzlaşması çok güç olan bir kabuldür.

Bu nedenle, kuşaklar boyu fizikçilerin bilinmezci tavrı benimsemelerinde ve öğrencilerine teorinin kavramsal temelleri hakkında düşünerek vakit kaybetmemelerini önermelerinde şaşılacak bir şey yoktur.

12.1 EPR ÇELİŞKİSİ

Einstein, Podolsky ve Rosen[2] çok bilinen **EPR çelişkisi** ile ilgili makalelerini 1935 yılında yayınladılar. Bu, savunulabilir bakış açısının sadece gerçekçi bakış açısı olduğunu teorik tabanda kanıtlayabilmek için tasarlanmış bir deneydir. Burada David Bohm'un geliştirdiği EPR çelişkisini anlatacağım. Bir elektron ve bir pozitrona bozunan yüksüz pi mezon parçacağını ele alalım:

$$\pi^0 \rightarrow e^- + e^+.$$

Piyonun durgun olduğu varsayımı altında, elektron ve pozitron zıt yönlere uçup giderler (12.1 nolu şekil). Piyonun spini sıfırdır. Bu nedenle, açısal momentum korunumu elektron ve pozitronun tekli düzenekte olmaları gerektiğini söyler:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_-\downarrow_+ - \downarrow_-\uparrow_+). \qquad [12.1]$$

Eğer elektronun spini yukarı doğru ise, protonun spini aşağı olmak zorundadır (ya da bunun tam tersi). Kuantum mekaniği belli bir piyon bozunmasında *hangi* kombinasyonu elde edeceğinizi söylemez. Fakat, ölçümlerin birbirleriyle *bağdaşık olduğunu* ve ortalama her bir kombinasyonu yarı sürede elde edeceğinizi söyler.

[2] A Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, *Phys Rev.* **47**, 777 (1935).

Şimdi elektron ve pozitronun uçup gittiklerini (10 metre– gerçek deneyde 10 ışık yılı) varsayıp, elektronun spinini ölçelim. Yukarı spin bulduğumuzu düşünelim. 20 metre (ya da 20 ışık yılı) ötede pozitronun spinini ölçen birinin aşağı spin bulacağını hemen söyleyebiliriz.

Gerçekçi bakışa göre, bunda şaşılacak hiçbir durum yok. Ortaya çıktıklarından beri elektron *gerçekten* yukarı spine ve de pozitron aşağı spine *sahipti*. Sadece, kuantum mekaniği bunu bilmiyordu. Öte yandan, "Ortodoks" bakış açısı ölçme eylemi araya girene kadar her iki parçacığın ne yukarı ne de aşağı spine sahip olduğunu söyler: Elektronun spinini ölçme deneyimiz dalga fonksiyonunu çöktürür ve 20 metre (ya da 20 ışık yılı) ötede bulunan pozitronun spininin anlık "oluşmasına" neden olur. Einstein, Podolsky ve Rosen böyle "acayip uzaktan etkiyi" (Einstein'in kendi deyimi) saçma buldular. Ortodoks bakış açısının savunulamaz olduğu sonucuna vardılar; kuantum mekaniğinin spinleri hesaplayabiliyor olup olmamasından bağımsız olarak, elektron ve pozitron tüm bu süreç içinde çok iyi tanımlanmış spinlere sahip olmalıydılar.

EPR argümanının dayandığı temel varsayım ışık hızından daha hızlı ilerleyebilecek bir etkinin olmayışıdır. Bu **yerellik** ilkesi olarak adlandırılır. Burada, dalga fonksiyonunun çöküşünün anlık *olmadığını* ve sonlu bir hızla ilerlediğini önerebilirsiniz. Bu da açısal momentum korunumunun ihlali demektir. Çünkü dalga fonksiyonunun çökme haberi pozitrona ulaşmadan önce spini ölçtüğümüzde, *her iki* parçacığın yukarı spin ile bulunma olasılığı yarı yarıya olurdu. Böyle bir soyut teori için kim ne düşünürse düşünsün, deneyler net olarak böyle bir ihlalin söz konusu olmadığını ve spinler arası bağdaşıklığın mükemmel olduğunu gösteriyor. Öyle görünüyor ki dalga fonksiyonunun çöküşü (geçerlilik statüsü ne olursa olsun) anlıktır.

Problem 12.1 Dolanık durumlar: Tekli spin düzeneği (12.1 nolu denklem) *dolanık bir durum* için klasik bir örnektir: İki ayrı tek parçacık durumlarının çarpımı olarak ifade edilemeyen bir iki parçacıklı durum ve bundan dolayı her bir parçacık için ayrı bir "durum"un söz konusu olmadığı özel bir durum. Bunun, bir şekilde kötü notasyonun sonucu olup olmadığını merak ediyor olabilirsiniz. Belki de, tek parçacık durumlarının belli bir lineer kombinasyonu sistemdeki dolanıklığı kaldırabilir mi diye kafanızdan geçiriyor olabilirsiniz. Aşağıdaki teoremi kanıtlayın:

İki düzeyli bir sistemi ele alın. Bu düzeylere karşılık gelen dalga fonksiyonları $|\phi_a\rangle$ ve $|\phi_b\rangle$ ve $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$ olsun (Örneğin, $|\phi_a\rangle$ yukarı spin ve $|\phi_b\rangle$ aşağı spini temsil edebilir). Aşağıda verilen iki parçacıklı durum

$$\alpha|\phi_a(1)\rangle|\phi_b(2)\rangle + \beta|\phi_b(1)\rangle|\phi_a(2)\rangle$$

($\alpha \neq 0$ ve $\beta \neq 0$ olmak üzere) *her hangi* bir tek parçacık $|\psi_r\rangle$ ve $|\psi_s\rangle$ durumları için

$$|\psi_r(1)\rangle|\psi_s(2)\rangle$$

şeklinde çarpım olarak ifade *edilemez*.

Yardım: $|\psi_r\rangle$ ve $|\psi_s\rangle$'yi $|\phi_a\rangle$ ve $|\phi_b\rangle$'nın lineer kombinasyonu olarak yazın.

12.2 BELL TEOREMİ

Aslında, Einstein, Podolsky ve Rosen kuantum mekaniğinin doğruluğu hakkında kuşku duymadılar ama fiziksel gerçeği tanımlamada *yetersiz* olduğunu öne sürdüler: Dalga fonksiyonu tüm hikayeyi veremez ve sistemin eksiksiz tanımlanabilmesi için Ψ dalga fonksiyonuna ek olarak λ gibi *başka* büyüklüklere de gerek vardır. Bu aşamada, λ'yı nasıl hesaplayabileceğimize ya da ölçebileceğimize dair hiçbir fikrimiz olmadığından "gizli değişken" olarak adlandırırız.[3] Yıllarca kuantum mekaniğini tamamlayabilmek için birçok sayıda gizli değişken teorisi ortaya atıldı;[4] Bunlar bir şekilde hantaldı ve inandırıcı olamadılar. 1964 yılına kadar problem müthiş bir ilgi odağı oldu. Fakat, aynı yıl J.S. Bell *her hangi bir* yerel gizli değişken teorisinin kuantum mekaniği ile *uyumlu olamayacağını* gösterdi.[5]

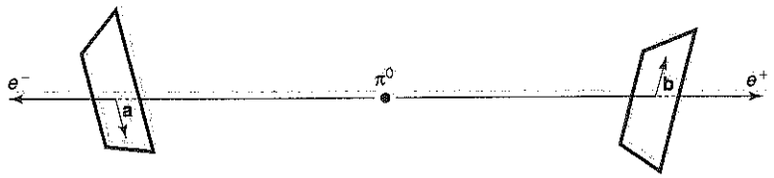
Bell, EPR/Bohm deneyi için şöyle bir genelleştirme önerdi: Elektron ve pozitron dedektörlerini *aynı* yöne yönlendirmek yerine, birbirlerinden bağımsız olarak dönebilme serbestliğe sahip olacak şekilde yerleştirelim (12.2 nolu şekil). İlk dedektör elektron spininin **a** birim vektör yönündeki bileşenini ölçsün ve ikincisi pozitron spininin **b** yönündeki bileşenini ölçsün. Basit olsun diye, spinlerin kaydını $\hbar/2$ cinsinden yapalım. O zaman her bir dedektör sorudaki yön doğrultusunda yukarı spin için +1, aşağı spin için −1 kaydını yapacaktır. Birçok π^0 bozunması için sonuç tablosu aşağıdaki gibi olabilir:

elektron	pozitron	çarpım
+1	−1	−1
+1	+1	+1
−1	+1	−1
+1	−1	−1
−1	−1	+1
.	.	.
.	.	.
.	.	.

[3] Gizli değişken tek bir sayı ya da bir sayı *topluluğu* olabilir; λ belki bazı temel nedenlerden dolayı özde hesaplanabilir bir büyüklük değil ya da belki de gelecekte bazı teoriler içinde hesaplanabilecek bir büyüklük olacak. Fakat, bunun bir önemi yok. Burada üstüne basarak belirtmeye çalıştığım şey herhangi bir ölçümden önce ortada sistemle ilgili *bir şeylerin* (sadece her olası deneyin sonuçlarını içeren *liste* bile olsa) olması koşuludur.

[4] D. Bohm, *Phys. Rev.* **85**, 166, 180 (1952).

[5] Bell'in orijinal makalesi (*Physics* **1**, 195 (1965)) bir cevherdir: öz, anlaşılabilir ve çok güzel yazılmış.



ŞEKİL 12.2: EPR – Bohm deneyinin Bell versiyonu: dedektörler birbirlerinden bağımsız bir şekilde a ve b doğrultularında yönelirler.

Bell, verilen herhangi bir dedektör yönelim kümesi için spinlerin çarpımlarının *ortalama* değerini hesaplamak istedi. Bu ortalamaya $P(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ diyelim. Dedektörlerin birbirlerine paralel ($\mathbf{b} = \mathbf{a}$) olduğu durumda, orijinal EPRB düzeneğini elde etmiş oluruz: bu durumda bir spin yukarı ve diğer spin aşağı yönelmiş olur ve bu nedenle çarpımları her zaman -1 verir. O zaman ortalama:

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = -1. \qquad [12.2]$$

Aynı şekilde, spinler antiparalel ($\mathbf{b} = -\mathbf{a}$) ise, çarpımları $+1$ olur ve bundan dolayı

$$P(\mathbf{a}, -\mathbf{a}) = +1 \qquad [12.3]$$

olur. Rastgele yönelimler için, kuantum mekaniği

$$\boxed{P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}} \qquad [12.4]$$

olduğunu öngörür (4.50 nolu probleme bakın). Bell'in ortaya koyduğu şey *bu sonucun hiçbir yerel gizli değişken teorisi ile uyumlu olamayacağıdır.*

Öne sürülen tez şaşırtıcı derecede basit. Elektron ve pozitrondan oluşan sistemin "tam" durumunun λ gizli değişkeni ile tanımlandığını varsayın (burada, λ anlayamadığımız ve kontrol edemediğimiz bir yol ile bir piyon bozunmasından diğer bir piyon bozunmasına değişen bir büyüklüktür). Dahası *elektron* ölçüm sonuçlarının *pozitron* dedektörünün **b** yöneliminden bağımsız olduğunu da varsayın. Zaten, *pozitron* dedektörünün **b** yönelimi, deneyin pozitron ucunda bulunan kişi tarafından elektron ölçümlerinden hemen önce belirlenebilir ve bu da ışık altı herhangi bir mesajın elektron dedektörüne ulaşamaması demektir. O zaman elektron ölçüm sonuçlarını veren bir $A(\mathbf{a}, \lambda)$ fonksiyonu ve pozitron ölçüm sonuçlarını veren bir $B(\mathbf{b}, \lambda)$ fonksiyonu olmalı. Bu fonksiyonlar sadece ± 1 değerlerini alabilirler:[6]

$$A(\mathbf{a}, \lambda) = \pm 1; \quad B(\mathbf{b}, \lambda) = \pm 1 \qquad [12.5]$$

[6] Bu, parçacıkların eş zamanlı belli bileşenli ve iyi tanımlı açısal momentum vektörlerine sahip olabileceği düşüncesinden uzaklaşmak olduğu için, *klasik* belirlenimci (deterministik) akımını benimseyen bir kişinin kabul edebileceği sınırı çoktan aşar. Neyse, boş verin. Bell'in öne sürdüğü tezin ortaya koymak istediği şey kuantum mekaniğinin *herhangi* bir yerel belirlenimci teori ile uyumlu olamayacağıdır.

Dedektörler aynı doğrultuda oldukları zaman, sonuçlar tamamıyla bağdaşıktır (ya da değildir): Bütün λ değerleri için

$$A(\mathbf{a}, \lambda) = -B(\mathbf{a}, \lambda) \qquad [12.6]$$

olur. $g(\lambda)$ gizli değişken olasılık yoğunluğu olmak üzere, ölçümlerin çarpım ortalaması

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \int \rho(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) B(\mathbf{b}, \lambda)\, d\lambda \qquad [12.7]$$

şeklindedir. ($\rho(\lambda)$ herhangi bir olasılık yoğunluğunun olması gerektiği gibi negatif olmayan ve $\int \rho(\lambda)\, d\lambda = 1$ normlama koşulunu sağlayan bir yoğunluktur. $\rho(\lambda)$ hakkında bunun ötesinde bir varsayımda bulunmuyoruz. Farklı gizli değişken teorileri ρ için oldukça farklı ifadeler verebilirler.) 12.6 nolu eşitliği kullanarak B'yi yok edebiliriz:

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = -\int \rho(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda)\, d\lambda \qquad [12.8]$$

ve $\mathbf{c}$ *başka* bir birim vektör olmak üzere,

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) = -\int \rho(\lambda)\big[A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda) - A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda)\big]\, d\lambda \qquad [12.9]$$

yazılabilir. Ya da, $[A(\mathbf{b}, \lambda)]^2 = 1$ olduğu için,

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) = -\int \rho(\lambda)\big[1 - A(\mathbf{b}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda)\big] A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda)\, d\lambda \qquad [12.10]$$

olur. Öte yandan, 12.5 nolu denklem $-1 \le [A(\mathbf{a}, \lambda)\, A(\mathbf{b}, \lambda)] \le +1$ olduğunu söyler; ayrıca $\rho(\lambda)\,[1 - A(\mathbf{b}, \lambda)\, A(\mathbf{c}, \lambda)] \ge 0$ olduğundan

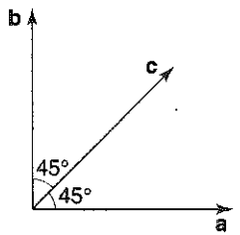
$$|P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \le \int \rho(\lambda)\big[1 - A(\mathbf{b}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda)\big]\, d\lambda, \qquad [12.11]$$

ya da daha sade bir şekilde

$$\boxed{|P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \le 1 + P(\mathbf{b}, \mathbf{c})} \qquad [12.12]$$

olarak yazılabilir. Bu, çok iyi bilinen **Bell eşitsizliğidir** ve *herhangi* bir yerel gizli değişken teorisi için geçerlidir (12.5 ve 12.6 nolu denklemleri sağlaması koşulu ile). Çünkü, gizli değişkenlerin sayısı ve doğası ya da onların dağılım fonksiyonları (ρ) hakkında bir varsayımda bulunmadık.

Bununla beraber, kuantum mekaniğinin öngördüğü 12.4 nolu denklem ile ifade edilen sonucun Bell eşitsizliği ile uyumsuz olduğunu göstermek kolaydır. Örneğin, bu



ŞEKİL 12.3: Bell eşitsizliğinin kuantum ihlalini gösteren detektörlerin bir yönelimi.

üç vektör bir düzlem içinde olsun ve **c** vektörü **a** ve **b** vektörleri ile 45° açı yapsın (12.3 nolu şekil). Bu durumda, kuantum mekaniği

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 0, \quad P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) = P(\mathbf{b}, \mathbf{c}) = -0.707$$

olduğunu söyler ki bu Bell eşitsizliği ile net bir şekilde uyumsuzdur:

$$0.707 \not\leq 1 - 0.707 = 0.293.$$

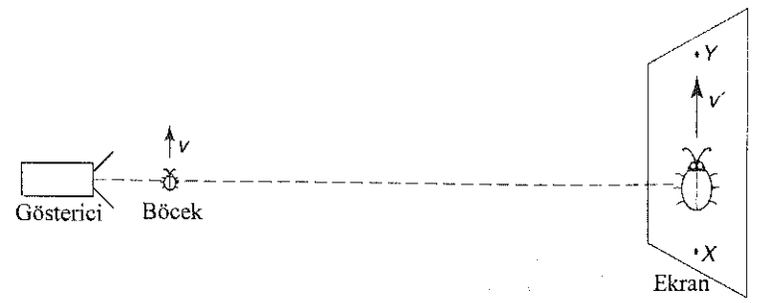
Bell yaptığı değişiklik ile, EPR çelişkisi yazarlarının tahmin edebileceğinden çok daha köklü bir şeyi kanıtladı: Eğer yazarlar haklı iseler, kuantum mekaniği sadece *tamamlanmamış* bir teori değil, tamamıyla *yanlış* bir teoridir. Öte yandan, kuantum mekaniğinin söylediği doğru ise, o zaman Einstein'in akıl almaz bir şekilde tasarladığı yerel olmama olayından bizi kurtaracak bir gizli değişken teorisi olamaz. Üstelik, bu konuyu sonunda ve de sonsuza kadar çözecek çok basit bir deneye de kavuşmuş olduk.

60'lı ve 70'li yıllarda Bell eşitsizliğini test edecek birçok deney yapıldı ve Aspect, Grangier ve Roger'in çalışmalarında en tepe noktasına ulaşıldı.[7] Burada deneyin detayları bizi ilgilendirmiyor (piyon bozunması yerine, iki-foton atomik geçişleri kullandılar). Çok uzak bir olasılık da olsa, pozitron dedektörünün elektron dedektörünün yönelimini "algılama" olasılığını ortadan kaldırabilmek için, her ikisinin yönelimi fotonlar salındıktan *sonra* neredeyse ratgele olarak ayarlandı. Sonuçlar kuantum mekaniğinin öngörüleri ile mükemmel bir uyum gösterdi ve doğal olarak Bell eşitsizliği ile uyuşmadı.[8]

Kuantum mekaniğinin deneysel olarak doğrulanması bilim dünyasında büyük bir şok yarattı. Bunun nedeni bu deneysel doğrulamanın "gerçekçilik" bakış açısının ölümü anlamına gelmesinden değildi (çoğu fizikçi çok önceden bu fikre alışmışlardı ve alışmayanlar için de Bell teoreminin uygulanamayacağı olası *yerel olmayan* gizli değişken

[7] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, *Phys. Rev, Lett.* **49**, 91 (1982). Çok daha yeni deneyler için G. Weish *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5039 (1998)'e bakınız.

[8] Bell teoremi *ortalamaları* içerir. Aspect deneyinde kullanılan deneysel aygıt gibi, herhangi bir aygıtın temsil edilmemiş bir örneği sezme özelliği gösteren bilinmeyen bir eğilimi olduğu düşünülebilir. Bu ortalamanın anlamını bozar. Bell teoreminin geliştirilmiş biçimi 1989 yılında önerildi. Bu önermede kuantum öngörüsü ile herhangi bir yerel gizli değişken teorisinin öngörüsü arasındaki zıtlık çok daha derinlemesine ortaya konur. D. Greenberger, M. Horne, A. Shimony, and A. Zeilinger, *Am. J. Phys.* **58**, 1131 (1990) ve N. David Mermin, *Am. J. Phys.* **58**, 731 (1990)'a bakınız.



ŞEKİL 12.4: Böceğin gölgesi ekran yeterince uzak olduğunda, ekran üzerinde c hızından daha büyük bir v' hızı ile hareket eder.

teorileri olasılığı vardı)[9]. Gerçek şok *doğanın kendisinin esas itibari ile yerel olmayışıdır*. Dalga fonksiyonunun anlık çöküşü (ve bu bağlamda özdeş parçacıklar için simetrileştirme koşulu) şeklinde yerel olmama her zaman Ortodoks yorumun bir özelliği olmuştur. Fakat Aspect deneyinden önce, kuantum mekaniğinde yerel olmama durumu teorinin formülasyonundan kaynaklanan fiziksel ve gözle görülebilen etkileri olmayan bir sonuç olarak görülüyordu. Artık bu mümkün değil ve uzaktan anlık etkiye olan itirazımızı gözden geçirmek zorundayız.

Neden fizikçiler ışık üstü etkiler hakkında bu kadar çok titiz olurlar? Ne de olsa ışık hızından daha büyük hızlarda hareket eden birçok şey bulundu. Bir böcek bir film göstericisinin ışık demetinin içinden geçtiğinde, gölgesinin hızı kendisinin ekrana olan uzaklığı ile orantılı olur; ilke olarak bu uzaklığı istediğiniz kadar büyütebilirsiniz ve bu da *gölgenin* keyfi derecede yüksek hızla hareket etmesi anlamına gelir (12.4 nolu şekil). Öte yandan gölge *enerji* taşımaz; ekran üzerinde bir noktadan diğerine *mesaj* da taşıyamaz. X noktasında bulunan bir kişi dolanan gölge ile oynayarak Y noktasında *herhangi bir şeyin oluşmasına neden* olamaz.

Diğer yandan, ışık hızından daha büyük bir hızla ilerleyen *sıradan* bir etki kabul edilemez sonuçları beraberinde taşırdı. Özel görelilik teorisine göre, böyle bir sinyalin *zaman içinde* geriye doğru ilerleyebileceği eylemsizlik sistemleri vardır – Sonucun deneyden önce gelmesi. Bu da kaçınılmaz mantıksal aykırılıklara yol açar. Örneğin, dedeniz bebek iken onu öldürebilecek bir plan yapabilir durumda olurdunuz. Bu hiç de güzel bir fikir olmazdı, değil mi? Sorun, ışık üstü etkileri kuantum mekaniğinin öngördüğü ve Aspect nedenselliğinin ortaya koyduğu bir şey midir yoksa filozofik

[9] Gerçekçi bakış açısını *kanıtlayabilmek* için yerelliği *varsayan* EPR ikileminin yerelliğin ölümüne yol açması ve gerçekçilik sorununu belirsiz halde bırakması kaderin garip bir cilvesidir. Bu sonuç Bell'in ifadesiyle Einstein'ın *en son* isteyebileceği bir şey idi. Günümüzde çoğu fizikçi eğer *yerel* gerçekçilik sağlanamıyor ise, gerçekçiliğin *hiçbir* anlamı olmayacağını düşünürler ve bu nedenle yerel olmayan gizli değişken teorisi geniş bir yelpazede ilgi görür. Yine de, *Kuantum Mekaniğinde Konuşulabilenler ve Konuşulamayanlar* isimli kitapta (Cambridge Universitesi Basım evi, 1987) bazı yazarlar ve özellikle Bell bu tür teorilerin ölçülen sistemler ve ölçen aletler arasındaki kavramsal boşluğu dolduracak ve dalga fonksiyonu çöküşü için anlaşılabilir mekanizmalar sağlayabilecek en umut verici teoriler olduklarını söylerler.

itirazlardan kurtulabilecek kadar hayali bir şey midir?

Bell deneyini ele alalım. Elektron ölçüm deneyi pozitron ölçüm deneyinin sonucunu *etkiler mi?* Kesinlikle *etkiler*. Aksi takdirde, verilerdeki bağdaşıklığı açıklayamazdık. O zaman, elektron ölçüm deneyi pozitron için belli bir sonuç yaratır mı? Hayır. Elektron dedektörünü tutan deneycinin kendi ölçümünün sonuçları üzerinde bir kontrolü olmadığı için (X noktasındaki bir kişinin önünden geçen bir böceğin gölgesi üzerine hiçbir şey yapamayacağı gibi, deneycimiz verilen bir elektronun ölçüm sonunda yukarı spinli olmasını *sağlayamaz*) kendi ölçümünü kullanarak, pozitron dedektörünü tutan deneyciye bir sinyal gönderebilme olanağı yoktur. Deneycimiz *hiç ölçüm yapmamaya da karar verebilir*. Deney düzeneğinin pozitron tarafındaki verileri toplayan pozitron ekranı elektron için ölçümün yapılmış ya da yapılmamış olduğu hakkında hiçbir bilgi veremez. Çünkü deney düzeneğinin her iki ucunda ayrı ayrı derlendiği varsayılan veri listeleri tamamıyla rastgeledir. Biz bu iki ayrı veri listesini daha sonra *kıyasladığımızda*, aralarındaki olağanüstü bağdaşıklığın farkına varırız. Bir başka referans sisteminde pozitron ölçümleri elektron ölçümlerinden daha *önce* gerçekleşir ve bu hiçbir mantık çelişkisine yol açmaz. Bu işlemde gözlenen bağdaşıklık tamamen simetriktir ve elektron deneyinin pozitron ölçümünü etkilediğini söylememiz ile bunun tam tersini söylememiz arasında fark yoktur. Bu öyle bir hassas bir etkidir ki kendini gösterdiği tek şey, aksi halde sadece rastgele veri olabilecek iki veri listesi arasında ince bağdaşıklığın olmasıdır.

O zaman, iki çeşit etki arasındaki farkı ayırt etmemiz gerekir. "Nedensel" tip: Sadece algılayıcının bulunduğu alt sistemde yapılacak ölçümlerle fark edilebilecek ve algılayıcının fiziksel özelliklerini gerçek anlamda değiştirebilecek etkilerdir. "Hayali" tip: Hiçbir enerji ya da bilgi aktarımı olmayan etkidir ve varlığını gösteren tek kanıt iki alt sistemde alınan veriler arasındaki bağdaşıklıktır. Bu öyle bir bağdaşıklıktır ki doğası gereği veri listelerinin ayrı ayrı incelenmesi ile belirlenemez. Nedensel etkiler ışık hızından daha hızlı *ilerleyemez*. Öte yandan, hayali etkilerin neden daha hızlı olmaması için inandırıcı bir sebep yoktur. Dalga fonksiyonun çökmesi ile ilgili etkiler hayali etkilerdir ve ışık hızından daha hızlı hareket etmeleri şaşırtıcı olabilir fakat dünyanın sonu da değildir.[10]

12.3. KOPYA YOK TEOREMİ

Kuantum ölçümleri esas itibarı ile **yıkıcıdır** çünkü ölçüm yapılan sistemin durumunu değiştirirler. Bu, laboratuvarda belirsizlik ilkesinin nasıl uygulandığını açıklar. Belki de, orijinal durumun birçok özdeş kopyasını yaparak, sistemin kendisine zarar vermeden bu kopya durumlar üzerinde ölçümlerimizi yapıp, yapmayacağımızı merak ediyor

[10] Bell teoremi hakkında çok yazıldı. Benim tercihim David Mermin'in *Physics Today*'de (Nisan 1985, 38. sayfa) yazdığı yaratıcı denemedir. Çok kapsamlı bir kaynakça için L. E Ballentine, *Am. J. Phys.* **55**, 785 (1987)'e bakınız.

olabilirsiniz. Bu yapılamaz. Aslında, eğer bir kopyalama makinesi (bir "kuantum fotokopi makinesi") yapılabilseydi, kuantum mekaniği çöpe atılırdı.

Örneğin, EPRB deneyini kullanarak ışık üstü mesajları göndermek mümkün olurdu. Diyelim ki, pozitron dedektörü teknisyeninden elektron dedektörü teknisyenine gönderilecek mesaj ya "evet" ya da "hayır" olsun. Mesaj "evet" ise, mesajı gönderen pozitron için S_z değerini ölçer. Elde edilecek sonuç önemli değildir. Burada önemli olan ölçümün yapılmasıdır ve bu, elektronun belli bir $\uparrow$ ya da $\downarrow$ durumunda (*hangisi* olduğu önemli değil) olması demektir. Alıcı hemen elektronun milyon kez kopyasını yapar ve her biri için S_z değerini ölçer. Tüm ölçümler aynı sonucu (hangisi olduğu önemli değil) verirse, elektronun spininin ölçüldüğünden emin olabiliriz ve bundan dolayı mesaj "evet" dir. Eğer yarısı aşağı spin ve diğer yarısı yukarı spin sonucunu veriyorsa, o zaman elektronun spini kesinlikle ölçülmemiştir ve mesaj "hayır" olur.

Öte yandan, Wooters, Zurek ve Dieks'in 1982 yılında kanıtlandıkları gibi,[11] bir kuantum Xerox fotokopi makinesi yapmamız mümkün değil. Şematik olarak, makinenin girdi olarak $|\psi\rangle$ durumunda bulunan bir parçacık (kopyalanacak olan) ve $|X\rangle$ durumunda bulunan ikinci bir parçacığı ("boş kağıt") almasını ve *iki* parçacığı $|\psi\rangle$ durumunda basmasını (orijinal artı kopya) istiyoruz:

$$|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle. \qquad [12.13]$$

$|\psi_1\rangle$ durumunu başarıyla kopyalayabilen böyle bir makine yapabildiğimizi varsayalım:

$$|\psi_1\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle \qquad [12.14]$$

ve bu makine $|\psi_2\rangle$ durumunu da kopyalasın:

$$|\psi_2\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle. \qquad [12.15]$$

(Örneğin, parçacık elektron ise $|\psi_1\rangle$ ve $|\psi_2\rangle$ durumları yukarı spin ve aşağı spin durumlarını gösteren durum fonksiyonları olabilir). Şu ana kadar her şey güzel gidiyor. Şimdi $|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$ lineer kombinasyonunu oluşturduğumuzda ne olur ona bakalım. Aşikar olarak,[12]

$$|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow \alpha|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle \qquad [12.16]$$

sonucunu elde ederiz. Fakat, sadece bunu elde etmek istemiyoruz. *İstediğimiz* şey:

$$\begin{aligned}|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle &= [\alpha|\psi_1\rangle+\beta|\psi_2\rangle][\alpha|\psi_1\rangle+\beta|\psi_2\rangle] \\ &= \alpha^2|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle+\beta^2|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle+\alpha\beta[|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle+|\psi_2\rangle|\psi_1\rangle]. \qquad [12.17]\end{aligned}$$

[11] W. K. Wootters and W. H. Zurek, *Nature* **299**, 802 (1982); D. Dieks, *Phys. Lett.* A **92**, 271 (1982).

[12] Bu, aletin $|\psi\rangle$ durumu üzerine *lineer* olarak etki ettiğini varsayar. Ve öyle de olmalı, çünkü zamana bağlı Schrödinger denklemi (muhtemelen sürece hakim olan denklem) lineerdir.

Yukarı spinli ve aşağı spinli elektronları kopyalabilecek bir makine yapabilirsiniz, fakat herhangi bir sıra dışı lineer kombinasyon başarısızlığa mahkumdur. Bu durumu, dikey ve yatay çizgileri sorunsuz kopyalayan ama çapraz çizgileri tamamen bozan bir fotokopi makinesine benzetebilirsiniz.

12.4 SCHRÖDİNGER KEDİSİ

Kuantum mekaniğinde ölçüm sürecinin zarar verici bir rolü vardır: Belirsizlik, yerel olmama, dalga fonksiyonun çöküşü ve beraberinde gelen kavramsal zorluklar bu noktada ortaya çıkar. Ölçüm yokluğunda, dalga fonksiyonu yavaşça ve belirlenimciliğe uyumlu bir şekilde Schrödinger denklemine uygun olarak evrimleşir ve kuantum mekaniği oldukça sıradan bir alan teorisine benzer (örneğin, klasik elektrodinamiğe kıyasla çok daha basittir. Çünkü **E** ve **B** gibi *iki* vektör alanı yerine *tek bir* Ψ alanı vardır ve o da *skalardır*). Kuantum mekaniğine olağanüstü zenginliği ve inceliği veren ölçüm sürecinin üstlendiği bu garip roldür. O zaman, bir ölçüm tam olarak nedir? Bunu diğer fiziksel süreçlerden ayıran şey nedir?[13] Ve bir ölçümün ne zaman gerçekleştiğini nasıl söyleyebiliriz?

Schrödinger temel sorunu en yalın hali ile ünlü **kedi çelişkisinde** şöyle ortaya koyar:[14]

> Bir kedi çelikten yapılmış bir oda içerisine içinde çok az miktarda radyoaktif madde bulunan Geiger sayıcısı ile birlikte konulur. Bu madde o kadar azdır ki belki bir saatte bir atom bozunabilir fakat aynı olasılıkla hiçbir atom bozunmayabilir de. Bir atom bozunduğunda, sayıcı çalışır ve bir röle ile siyanür kutusunu kıracak çekici hareket geçirir. Bu sistem bir saat süre için kendi haline bırakıldığı durumda, hiçbir atom bozunmamış ise kedinin yaşadığı söylenir. İlk bozunma kediyi zehirlemiş olurdu. Tüm sistemin dalga fonksiyonu bu olayı canlı ve ölü kedi durumlarını eşit olasılıkla içerecek şekilde ifade ederdi.

Bir saatin sonunda, kedinin dalga fonksiyonu şematik olarak

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{\text{canlı}} + \psi_{\text{ölü}}) \qquad [12.18]$$

şeklinde ifade edilir.

[13] Bu farklılığı kabul etmeyen bir düşünce ekolü var. Bu ekole göre, sistem ve ölçüm aletleri tek büyük bir dalga fonksiyonu ile tanımlanmalı ve bu dalga fonksiyonu Schrödinger denklemine uygun bir değişim göstermeli. Bu tür teorilerde, dalga fonksiyonunun çökmesi diye bir şey olamaz ve olayları tek tek tanımlama umudundan da vazgeçmeliyiz. Bu bakış açısında, kuantum mekaniği sadece tamamıyla özdeş olarak hazırlanmış sistemler *topluluğu* için uygulanabilir. Bunun için, Philip Pearle *Am. J. Phys.* **35**, 742 (1967) ya da Leslie E. Ballentine, *Quantum Mechanics: A Modern Development*, 2nd ed., World Scientific, Singapore (1998)'e bakınız.

[14] E. Schrödinger, *Naturwiss.* **48**, 52 (1935); Josef M. Jauch'un çevirisi, *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison–Wesley, Reading (1968), 185. sayfa.

Kedi ne canlı ne de ölüdür. Ölçüm yapılana kadar (yani pencereden gizlice gözetleyene kadar) iki durumun eşit ağırlıklı bir lineer kombinasyonundadır. Ölçümünüz o anda, kediyi ölü ya da canlı durumdan birisini almaya zorlar. Ve kediyi ölü bulursanız, onu öldüren camdan baktığınız için *siz* olursunuz.

Schrödinger bunu saçma buldu ve sanırım çoğu fizikçi de onunla aynı düşüncededir. *Makroskopik* bir nesnenin birbirlerinden açıkça farklı olan iki ayrı durumun lineer kombinasyonunda bulunma fikrinde anlaşılmaz bir nokta var. Elektron yukarı ve aşağı spinlerin lineer kombinasyonunda bulunabilirken, bir kedi canlı ve ölü durumların lineer kombinasyonunda bulunamıyor. Bunu kuantum mekaniğinin Ortodoks yorumu ile nasıl uzlaştıracağız?

En çok kabul gören yanıt, Geiger sayıcısının tetiklenmesi gözlemcinin müdahelesi olarak değil, istatistiksel yorum anlamında "ölçüm"ü oluşturmasıdır. *Makroskopik* sistemin etkilenmesi ölçümün özünü oluşturur (bu örnekte Geiger sayıcısı). Ölçüm, kuantum mekaniğinin yasaları ile tanımlanan mikroskopik sistemin klasik mekaniğin yasaları ile tanımlanan makroskopik sistemle etkileştiği zaman, kalıcı bir sonuç bırakacak şekilde oluşur. Makroskopik sistem ayrık durumların lineer kombinasyonu olan durumu alamaz.[15]

Bunun tatmin edici bir uzlaşma olduğunu iddia edemem. Ama en azından bu yaklaşım kuantum mekaniğinde bir ölçümü oluşturan etmenin insan benliğinin olaya karışması olduğu konusunda ikna olan Winger ve diğer fizikçileri küçük düşürmüyor. Sorunun bir kısmı insan faktörünü beraberinde taşıyan "ölçüm" kelimesinin kendisidir. Heisenberg bunun yerine daha tercih edilebilir olan "olay" kelimesini önerdi. Fakat korkarım "ölçüm" kelimesi o kadar yerleşti ki onunla devam etmek durumundayız. Ve sonunda bu gizemli hayaleti tamamıyla ortadan kaldıracak terminolojik bir manevra da yok.

12.5 KUANTUM ZENO ÇELİŞKİSİ

Dalga fonksiyonunun çökmesi şüphesiz ki bu garip hikayenin en anlaşılmaz özelliğidir. Ardı ardına tekrarlanan ölçümlerin aynı sonucu verdiğini gösterebilmek için tamamıyla teorik bazda geliştirilmiştir. Tabii ki böyle bir köklü önerme doğrudan gözlenebilir

[15] Gayet tabii ki eninde sonunda makroskopik sistemin *kendisi de* kuantum mekaniğinin yasaları ile tanımlanır. Öte yandan, ilk örnekteki dalga fonksiyonları tek tek temel parçacıkları tanımlar; makroskopik bir nesnenin dalga fonksiyonu 10^{23} tane bileşen parçacığın dalga fonksiyonlarından oluşturulmuş devasa karmaşık bir birleşik olurdu. Büyük sayıların istatistiğinde makroskopik lineer kombinasyonlar elde etme olasılığı bir noktada son derece düşük hale gelir. Gerçekten, sönümlü bir sarkacı iki ayrı makroskopik kuantum durumunun lineer bir kombinasyonu olarak yazılabiliyor *olsaydık*, sönüm zamanının küçücük bir kesrinde sıradan klasik duruma geri dönerdi. Bu olgu **eşevreli olmama** olarak bilinir. R. Omnes, *The Interpretation of Quantum Mechanics* (Princeton, 1994), 7. Bölüme bakınız.

sonuçları da beraberinde getirmeli. 1977 yılında Misra ve Sudarshan[16] dalga fonksiyonunun deneysel olarak çöküşünü gösteren ve **kuantum Zeno etkisi** olarak adlandırdıkları bir önermede bulunurlar. Düşünceleri şu idi: Kararlı olmayan bir sistemi alın (örneğin, uyarılmış durumda bulunan bir atom) ve bunun üzerinde ardışık ölçümler yapın. Her bir ölçüm dalga fonksiyonunun çökmesine ve böylece tekrar başa dönülmesine neden olacaktır; bu şekilde daha düşük enerji durumuna beklenen geçiş sonsuza kadar ertelenebilir.[17]

Örneğin, sistemin başlangıçta ψ_2 uyarılmış durumunda olduğunu varsayalım. ψ_2 durumunun ψ_1 taban durumuna geçiş zamanı τ olsun. Normal olarak τ'dan çok çok küçük zamanlar için geçiş olasılığı t ile orantılıdır (9.42 nolu denkleme bakın). Aslında, geçiş hızı $1/\tau$ olduğundan,

$$P_{2\to 1} = \frac{t}{\tau} \qquad [12.19]$$

olur. Eğer t süresi kadar sonra bir ölçüm yaparsak, sistemin hala *üst* durumda bulunma olasılığı

$$P_2(t) = 1 - \frac{t}{\tau} \qquad [12.20]$$

olur. Sistemi *üst* durumda bulduğumuzu varsayalım. Bu durumda dalga fonksiyonu ψ_2 durumuna çöker ve süreç baştan tekrarlanır. $2t$ zamanında *ikinci* bir ölçüm yaparsak, sistemin *hala üst* durumda bulunma olasılığı

$$\left(1 - \frac{t}{\tau}\right)^2 \approx 1 - \frac{2t}{\tau} \qquad [12.21]$$

olacağı açıktır. t zamanında birinci ölçümü hiç yapamamış olsaydık da $2t$ zamanında bulacağımız olasılık bu olurdu. İlk bakışta, beklenen şey bu gibi görünüyor. Hikayenin tümü bu olmuş olsaydı, sistem üzerinde tekrar tekrar gözlem yaparak kazanılan bir şey olmazdı ve kuantum Zeno etkisini de göremezdik.

Öte yandan, zamanın *son derece* küçük olduğu durumlarda geçiş olasılığı t ile *değil* t^2 ile orantılıdır (9.39 nolu denkleme bakın)[18]:

$$P_{2\to 1} = \alpha t^2. \qquad [12.22]$$

Bu durumda, iki ölçümden sonra sistemin hala üst durumda bulunma olasılığı

$$\left(1 - \alpha t^2\right)^2 \approx 1 - 2\alpha t^2 \qquad [12.23]$$

[16] B. Misra and E. C. G. Sudarshan, *J. Math Pyhs.* **18**, 756 (1977).

[17] Bunun Zeno ile hiçbir ilgisi yok fakat eski bir atasözünü hatırlatır: "yanında beklenilen tencere asla kaynamaz". Bu nedenle, bazen **beklenen tencere olayı** olarak adlandırılır.

[18] Lineer zaman bağımlılığına götüren argüman için 9.39 nolu denklemde $\sin^2(\Omega t/2)\Omega^2$ fonksiyonunu keskin bir tepe olarak aldık. Öte yandan, "tepenin" *genişliği* $\Delta\omega = 4\pi/t$ mertebesindedir ve *son derece* küçük t değerlerinde, bu yaklaşıktırma çalışmaz ve integral $(t^2/4)\int g(\omega)d\omega$ şeklini alır.

iken, ilk ölçümü yapmamış olsaydık bu

$$1 - \alpha(2t)^2 \approx 1 - 4\alpha t^2 \qquad [12.24]$$

şeklini alırdı. Yani, t zaman sonra sistem üzerinde yaptığımız ölçüm alt duruma geçiş olasılığını azaltıyor!

Aslında, sistemi $t = 0$'dan $t = T$'ye kadar n tane düzenli aralıklarda incelersek, yani ölçümleri T/n, $2T/n$, $3T/n$,..., T anlarında yaparsak, sistemin en sonunda hala üst durumda bulunma olasılığı

$$\left(1 - \alpha(T/n)^2\right)^n \approx 1 - \frac{\alpha}{n}T^2 \qquad [12.25]$$

olur. Bu $n \to \infty$ limit değerine giderken 1 değerine yaklaşır: *Sürekli* olarak gözlenen kararsız bir sistem asla bozunmaz! Bazı yazarlar bunu anlamsız bir sonuç olarak kabul eder ve dalga fonksiyonunun çöktüğünü gösterecek bir kanıtın da temelsiz olduğunu düşünürler. Öte yandan, argümanları da oldukça şüpheli bir "gözlem" yorumuna dayanır. Bir kabarcık odasında parçacığın bıraktığı iz "sürekli bir gözlem" olarak kabul edilirse, o zaman mesele kapanmış olur. Çünkü bu tür parçacıklar şüphesiz bozunurlar (aslında, dedektörün varlığı parçacıkların ömürlerinde ölçülebilir bir değişikliğe yol açmaz). Fakat, böyle bir parçacık odadaki atomlarla sadece aralıklı olarak etkileşir ve kuantum Zeno etkisinin oluşabilmesi için ardışık ölçümlerin *son derece* hızlı yapılması gerekir ki sistem t^2 rejiminde yakalanabilsin.

Kendiliğinden geçiş için deneyin pratik olmadığı fakat *tetiklenmiş* geçişler için yapılabilir olduğu ve elde edilen sonuçların teorik öngörülerle mükemmel uyumlu olduğu görüldü[19]. Ne yazık ki bu deney tasarımcıların beklediği dalga fonksiyonunun çöküşünün bir kanıtı olamadı. Gözlenen etki başka yöntemlerle açıklanabilir[20].

****

Bu kitapta uyumlu ve tutarlı bir hikaye sunmaya çalıştım: Ψ dalga fonksiyonu bir parçacığın ya da sistemin durumunu temsil eder ve parçacıkların genel olarak bir ölçüm yapılana kadar konum, momentum, enerji, açısal momentum gibi belli dinamik özellikleri yoktur. Her hangi bir deneyde herhangi bir değeri elde etme olasılığı Ψ'nin istatistiksel yorumu ile belirlenir; ölçüm sonucunda, dalga fonksiyonu çöker ve böylece ölçümden hemen sonra ardı ardına yapılan ölçümlerin aynı sonucu vermesi sağlanır. Yerel olmayan gizli değişken teorileri, "birden fazla dünya" bakış açısı, "tutarlı geçmiş", topluluk modelleri ve daha diğerleri gibi başka yorumlamalar da var.

[19] W. M. Itano, D. J. Heinzen, J. J. Bollinger, and D. J. Wineland, *Phys. Rev. A* **41** 2295 (1990).

[20] L. E. Ballentine, *Found. Phys.* **20**, 1329 (1990); T. Petrosky, S. Tasaki. And I. Prigogine, *Phys. Lett. A* **151**, 109 (1990).

Ancak kavramsal olarak *en basit* olanı ve kesinlikle günümüzde çoğu fizikçinin benimsediği az önce özetlediğim yorumdur[21]. Bu yorum deneme dönemini başarı ile geçirdi ve tüm deneysel mücadelelerden yara almadan çıktı. Öte yandan, bunun hikayenin sonu olduğuna da inanmıyorum; en azından ölçümün ve çökme mekanizmasının doğası hakkında öğreneceğimiz daha çok şey var. Büyük bir olasılıkla çok daha gelişmiş bir teoriye sahip olacak gelecek nesiller geriye dönüp baktıklarında bizim nasıl bu kadar saf olduğumuzu merak edeceklerdir.

[21] Daniel Styer *et al.*, *Am. J. Phys.* 70, 288 (2002)'e bakınız.

EK

LİNEER CEBİR

Lineer cebir birinci sınıftaki fizik derslerinde gördüğümüz vektör hesabını soyutlayıp genelleştirir. Genelleştirme iki koldan yapılır: (1) skalar sayıların *kompleks* sayı olmalarına izin verilir ve (2) kendimizi üç boyut ile kısıtlamayız.

E.1. VEKTÖRLER

Bir **vektör uzayı**, vektör toplaması ve bir skalar ile çarpma işlemleri altında **kapalı**[1] olan, $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, $|\gamma\rangle$ **vektörler** kümesi ile (a, b, c, ...) **skalar**[2] kümesinden oluşur.

- **Vektörlerin toplanması**

İki vektörün "toplamı" yine bir vektördür:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle. \qquad [E.1]$$

Vektörlerin toplama işlemi **sıra değiştirebilirdir** (komütatiftir):

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle, \qquad [E.2]$$

[1] Yani bu işlemler iyi tanımlanmış olup, bizi asla vektör uzayının dışına atmazlar.

[2] Buradaki amacımız için, skalarları sıradan kompleks sayılar olarak alacağız. α, β, γ...'ların sıradan sayılar *olmadığına* dikkat edin. Bunlar *isim* ya da etikettir. Örneğin; göz önüne alınan vektörü tanımlamak için "Charlie", "F43A-9GL", ya da dilediğiniz başka bir ismi ya da simgeyi kullanabilirsiniz.

Ayrıca **birleşme** (assosiyatiflik) özelliğine sahiptir:

$$|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle. \qquad [E.3]$$

Her $|\alpha\rangle$ vektörü için

$$|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle \qquad [E.4]$$

özelliğini sağlayan $|0\rangle$ **sıfır vektörü**[3] vardır. Ayrıca

$$|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |0\rangle \qquad [E.5]$$

olmak üzere her $|\alpha\rangle$ vektörüne karşılık olan bir **ters** $|-\alpha\rangle$ **vektörü**[4] vardır.

- **Bir Skalar ile Çarpma**

Bir "skalar" ile bir vektörün çarpımı yine bir vektördür:

$$a|\alpha\rangle = |\gamma\rangle. \qquad [E.6]$$

Skalarla çarpma, vektörlerin toplanması ve skalarların toplanması işlemlerine göre **dağılma** (distribütif) özelliğine sahiptir. Yani

$$a(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = a|\alpha\rangle + a|\beta\rangle \qquad [E.7]$$

ve

$$(a + b)|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle + b|\alpha\rangle \qquad [E.8]$$

dir. Skalarların çarpma işlemine göre de **birleşme** (assosiyatiflik) özelliği sözkonusudur:

$$a(b|\alpha\rangle) = (ab)|\alpha\rangle. \qquad [E.9]$$

0 ve 1 skalarlarıyla çarpma işlemi sonucunda

$$0|\alpha\rangle = |0\rangle; \quad 1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle \qquad [E.10]$$

elde edilir. Böylece $|-\alpha\rangle = (-1)\,|\alpha\rangle$ olur (bundan sonra $-|\alpha\rangle$ notasyonunu kullanacağız).

Bu aşamaya kadar yaptığımız, vektör hesaplarıyla ilgili bildiğimiz kuralları soyut bir dille tekrar yazmaktan ibaret idi. Bu tür bir soyutlamanın avantajı şudur: Sıradan vertörlerin davranışları hakkındaki bilgi ve önsezilerimizi aynı biçimsel özellikleri gösteren başka sistemlere uygulayabiliriz.

[3] Sıfır vektörünü, $|0\rangle$ şeklinde yazmak yerine 0 olarak yazmak alışılmış bir kullanım şeklidir. Yani $|0\rangle \to 0$ alacağız.

[4] α bir sayı olmadığından bu tuhaf bir notasyondur. İsmi "Charlie" olan bir vektörün tersini "–Charlie" şeklinde seçmekteyiz. Daha uygun bir terminolojiyi daha sonra göreceğiz.

$|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \ldots$. vektörlerinin **lineer kombinasyonu**

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle + \cdots \qquad [E.11]$$

şeklinde yazılır. Bir $|\lambda\rangle$ vektörü, $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \ldots$, vektörlerinin lineer bir kombinasyonu olarak yazılamıyorsa bu vektör $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \ldots$, vektörlerinin oluşturduğu kümeden **lineer bağımsızdır** denir (örneğin, üç boyutta $\hat{k}$ birim vektörü $\hat{\imath}$ ve $\hat{\jmath}$ birim vektörlerinden lineer bağımsızdır, ancak *xy* düzlemindeki herhangi bir vektör $\hat{\imath}$ ve $\hat{\jmath}$ birim vektörlerine lineer *bağımlıdır*). Bir vektörler kümesi düşünelim. Bu kümedeki her bir vektör geriye kalan vektörlerden lineer bağımsızsa bu küme "lineer bağımsız" dır. Eğer herhangi bir vektör bu kümenin elemanlarının lineer bir kombinasyonu olarak yazılabiliyorsa bu küme vektör uzayını **örter** diyoruz.[5] Bir vektör uzayını örten *lineer bağımsız* vektörler kümesine bu **uzayın bazı** denir. Herhangi bir bazdaki vektörlerin sayısı vektör uzayının **boyutunu** belirler. Bir an için uzayın boyutunu sonlu (n) alalım:

$$|e_1\rangle, \ |e_2\rangle, \ldots, |e_n\rangle \qquad [E.12]$$

ile belirlenen bir **baza** göre herhangi bir vektör

$$|\alpha\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + \cdots + a_n|e_n\rangle \qquad [E.13]$$

olarak yazılabilir. Yani herhangi bir vektör bu baza göre *n* tane sıralı sayıyla tam ve tek olarak belirlenir:

$$|\alpha\rangle \leftrightarrow (a_1, a_2, \ldots, a_n). \qquad [E.14]$$

Buradaki $a_1, a_2, \ldots, a_n$ sayılarına $|\alpha\rangle$ vektörünün **bileşenleri** denir. Çoğu zaman, soyut vektörlerle çalışmak yerine bunların bileşenleriyle çalışmak daha kolaydır. Vektörleri toplamak için karşılıklı bileşenlerini cebirsel olarak toplarız:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle \leftrightarrow (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \ldots, a_n + b_n). \qquad [E.15]$$

Bu vektörü bir skalarla çarpmak için her bir bileşeni bu skalarla çarparız:

$$c|\alpha\rangle \leftrightarrow (ca_1, ca_2, \ldots, ca_n). \qquad [E.16]$$

Sıfır vektör *n* tane sıfırdan oluşan bir dizidir:

$$|0\rangle \leftrightarrow (0, 0, \ldots, 0). \qquad [E.17]$$

Ters vektörün bileşenleri, vektörün bileşenlerinin işareti değiştirilerek elde edilir:

$$|-\alpha\rangle \leftrightarrow (-a_1, -a_2, \ldots, -a_n). \qquad [E.18]$$

[5] Vektör uzayını örten vektörler kümesi aynı zamanda tamlık özelliğini sağlar. Ancak kişisel olarak tamlık kavramını, yakınsaklık konusunda zekice soruların ortaya çıktığı sonsuz boyutlu duruma saklayacağım.

Bileşenlerle çalışmanın tek *dezavantajı* şudur; bu durumda kendimizi sadece belirli bir bazla sınırlarız. Çoğu zaman aynı işlemler farklı bazlarda farklı şekilde gözükürler.

Problem E.1 Bileşenleri kompleks olabilen, 3 boyutta sıradan olan ($a_x\hat{\imath} + a_y\hat{\jmath} + a_z\hat{k}$) vektörlerini göz önüne alalım:

(a) $a_z = 0$ olan tüm vektörlerin meydana getirdiği alt küme bir vektör uzayı oluşturur mu? Eğer oluşturuyorsa bu uzayın boyutu nedir? Oluşturmuyorsa sebebini açıklayınız.

(b) Aynı soruyu z-bileşenleri 1 olan tüm vektörlerin alt kümesi için yanıtlayın. *Yardım:* Böyle iki vektörün toplamı da aynı alt kümede midir? Sıfır vektör ne olur?

(c) Aynı soruyu tüm bileşenleri birbirine eşit olan vektörlerin alt kümesi için yanıtlayın.

***Problem E.2** Katsayıları kompleks olabilen ve x'e göre derecesi N'den küçük olan tüm polinomların oluşturduğu topluluğu göz önüne alalım:

(a) Polinomları "vektörler" olarak düşünürsek, bu topluluk bir vektör uzayı oluşturur mu? Eğer oluşturuyorsa uygun bir baz ne olabilir? Uzayın boyutu nedir? Eğer oluşturmuyorsa, hangi özellik sağlanmamıştır?

(b) Polinomların çift fonksiyon olmalarını istersek, ne olurdu?

(c) x'in en büyük kuvvetinin, yani x^{N-1}'in, katsayısının 1 olmasını istersek, ne olurdu?

(d) Polinomların $x = 1$'de 0 olmasını istersek, ne olurdu?

(e) Polinomların $x = 0$'da 1 olmasını istersek, ne olurdu?

Problem E.3 Bir vektörün verilen bir bazdaki bileşenlerinin *tek* olduğunu kanıtlayınız.

E.2 İÇ ÇARPIM

Üç boyutta, iki çeşit vektör çarpım işlemi söz konusudur; noktasal çarpım (skalar çarpım) ve vektörel çarpım. Vektörel çarpım kolaylıkla n-boyutlu vektör uzaylarına genelleştirilemezken noktasal çarpım genelleştirilebilir ve bu genelleme **iç çarpım** olarak adlandırılır. $|\alpha\rangle$ ve $|\beta\rangle$ gibi iki vektörün iç çarpımı $\langle\alpha|\beta\rangle$ olarak gösterilir ve sonuç bir kompleks sayıdır. $\langle\alpha|\beta\rangle$ iç çarpımının özellikleri şunlardır:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*, \qquad [E.19]$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0, \quad \text{ve} \quad \langle\alpha|\alpha\rangle = 0 \Leftrightarrow |\alpha\rangle = |0\rangle, \qquad [E.20]$$

$$\langle\alpha|(b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle) = b\langle\alpha|\beta\rangle + c\langle\alpha|\gamma\rangle. \qquad [E.21]$$

Kompleks sayılara genellemenin ötesinde burada verdiğimiz iç çarpım aksiyomları noktasal çarpımın bilinen özelliklerini sistematik olarak düzenlemekte. Üzerinde bir iç çarpımın tanımlı olduğu vektör uzayına **iç çarpım uzayı** diyoruz.

Bir vektörün kendisiyle iç çarpımı pozitif olduğundan (E.20 nolu denklem), bu çarpımın karekökü reel olacaktır. Buna göre bir vektörün **normu**

$$\|\alpha\| \equiv \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} \qquad [E.22]$$

olarak tanımlanır. Norm, üç boyuttaki "büyüklük (şiddet, boy)" kavramının genelleştirmesidir. Normu 1'e eşit olan **birim vektöre normlanmıştır** diyoruz (bana kalırsa doğru sözcük "normal" olmalı). İç çarpımları sıfır olan iki vektör **ortogonaldir** (ortogonallik, üç boyuttaki "diklik" kavramının genelleştirmesidir). Karşılıklı olarak ortonogonal ve normlanmış vektörlerden oluşan bir topluluk

$$\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij} \qquad [E.23]$$

bağıntısını sağlar ve bu topluluğa **ortonormal** küme denir. Bir vektör uzayında çalışırken *ortonormal* bir baz seçmek her zaman mümkündür (E.4 nolu probleme bakınız) ve çoğu zaman da daha kullanışlıdır. Bu durumda iki vektörün iç çarpımı, bu vektörlerin bileşenleri cinsinden

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + \cdots + a_n^*b_n \qquad [E.24]$$

şeklinde yazılır. Vektörün normunun karesi de

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = |a_1|^2 + |a_2|^2 + \cdots + |a_n|^2. \qquad [E.25]$$

olur. Ortonormal bazda bir vektörün bileşenleri

$$a_i = \langle e_i|\alpha\rangle \qquad [E.26]$$

olarak verilir (burada verdiğimiz ifadeler, üç boyutta ortonormal $\hat{\imath},\hat{\jmath},\hat{k}$ bazındaki, $\mathbf{a}.\mathbf{b} = a_xb+a_yb_y+a_zb_z$, $|\mathbf{a}|^2 = a_x^2 + a_y^2 + a_z^2$ ve $a_x = \hat{\imath}.\mathbf{a}$, $a_y = \hat{\jmath}.\mathbf{a}$, $a_z = \hat{k}.\mathbf{a}$ ifadelerinin genelleştirmesidir). Bu aşamadan itibaren aksi belirtilmedikçe ortonormal bazda çalışacağız.

Genelleştirmek isteyeceğimiz diğer geometrik büyüklük iki vektör arasındaki *açıdır*. Sıradan vektörler için açı $\cos\theta = (\mathbf{a}.\mathbf{b})/|\mathbf{a}||\mathbf{b}|$ olarak verilir. Ancak genel olarak iç çarpım kompleks bir sayı olduğundan, keyfi bir iç çarpım uzayında benzer formül gerçek bir

θ açısını tanımlamaz. Buna rağmen, bu büyüklüğün *mutlak değeri* 1'den büyük olmayan bir sayı olacağı açıktır:

$$|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \leq \langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle. \qquad \text{[E.27]}$$

(Bu önemli sonuç **Schwarz eşitsizliği** olarak bilinir ve kanıtı E.5 nolu problemde verilecektir). Eğer dilerseniz, $|\alpha\rangle$ ve $|\beta\rangle$ vektörleri arasındaki açıyı

$$\cos\theta = \sqrt{\frac{\langle\alpha|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle}} \qquad \text{[E.28]}$$

formülüyle tanımlayabilirsiniz.

***Problem E.4** $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$,...,$|e_n\rangle$ vektörlerinden oluşan fakat ortonormal olmayan bir bazı göz önüne alalım. **Gram-Schmidt yöntemi** adı verilen sistematik bir yöntemle bu bazdan ortonormal bir baz $(|e_1'\rangle, |e_2'\rangle, \ldots, |e_n'\rangle)$ elde etmek mümkündür. Yöntemin aşamaları şöyledir:

(i) İlk baz vektörünü normlayınız (yani vektörü normuna bölünüz):

$$|e_1'\rangle = \frac{|e_1\rangle}{\||e_1\|}.$$

(ii) İkinci baz vektörünün ilk vektör boyunca olan izdüşümünü bulunuz ve bunu ikinci vektörden çıkarınız:

$$|e_2\rangle - \langle e_1'|e_2\rangle|e_1'\rangle.$$

Bu vektör $|e_1'\rangle$ vektörüne ortogonaldir ve bunu normlayarak $|e_2'\rangle$'yü elde ediniz.

(iii) $|e_3\rangle$ baz vektöründen bunun $|e_1'\rangle$ ve $|e_2'\rangle$ vektörleri boyunca olan izdüşümlerini çıkararak,

$$|e_3\rangle - \langle e_1'|e_3\rangle|e_1'\rangle - \langle e_2'|e_3\rangle|e_2'\rangle.$$

vektörünü elde ediniz. Bu vektör $|e_1'\rangle$ ve $|e_2'\rangle$'ye ortogonaldir. Bunu normlayarak $|e_3'\rangle$'yü elde ediniz. Ve benzer şekilde devam edin.

Gram-Schmidt yöntemini kullanarak, $|e_1\rangle = (1+i)\hat{\imath} + (1)\hat{\jmath} + (i)\hat{k}$, $|e_2\rangle = (i)\hat{\imath} + (3)\hat{\jmath} + (1)\hat{k}$, $|e_3\rangle = (0)\hat{\imath} + (25)\hat{\jmath} + (0)\hat{k}$ bazını ortonormal hale getiriniz.

Problem E.5 Schwarz eşitsizliğini (E.27 nolu denklem) kanıtlayın. *Yardım:* $|\gamma\rangle = |\beta\rangle - (\langle\alpha|\beta\rangle/\langle\alpha|\alpha\rangle)|\alpha\rangle$ olarak tanımlansın ve $\langle\gamma|\gamma\rangle \geq 0$ olduğunu kullanın.

Problem E.6 E.28 nolu denklem yardımıyla, $|\alpha\rangle = (1+i)\hat{\imath} + (1)\hat{\jmath} + (1)\hat{\jmath} + (i)\hat{k}$ ve $|\beta\rangle = (4-i)\hat{\imath} + (0)\hat{\jmath} + (2-2i)\hat{k}$ vektörleri arasındaki açıyı bulun.

Problem E.7 $\|(|\alpha\rangle + |\beta\rangle)\| \leq \|\alpha\| + \|\beta\|$ **üçgen eşitsizliğini** kanıtlayın.

E.3 MATRİSLER

Üç boyutlu uzaydaki her vektörü 17 ile çarptığımızı, ya da her vektörü z-ekseni etrafında 39° döndürdüğümüzü veya her vektörü xy düzlemi üzerine izdüşürdüğümüzü varsayalım. Tüm bu işlemler birer **lineer dönüşüm** örneğidir. Lineer bir dönüşüm[6] $(\hat{T})$ bir vektör uzayındaki her bir vektörü başka bir vektöre "dönüştürür" $(|\alpha\rangle \to |\alpha'\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle)$. Dönüşümün (işlemin) *lineer* olma koşulu şudur; herhangi iki $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ vektörleri ve a, b gibi herhangi iki skalar için

$$\hat{T}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a(\hat{T}|\alpha\rangle) + b(\hat{T}|\beta\rangle) \qquad \text{[E.29]}$$

olmalıdır.

Eğer belirli bir lineer dönüşümün baz vektörleri üzerindeki etkisini biliyorsanız, bunun *herhangi* bir vektör üzerindeki etkisini kolaylıkla hesaplayabilirsiniz.

$$\begin{aligned}
\hat{T}|e_1\rangle &= T_{11}|e_1\rangle + T_{21}|e_2\rangle + \cdots + T_{n1}|e_n\rangle,\\
\hat{T}|e_2\rangle &= T_{12}|e_1\rangle + T_{22}|e_2\rangle + \cdots + T_{n2}|e_n\rangle,\\
&\cdots\\
\hat{T}|e_n\rangle &= T_{1n}|e_1\rangle + T_{2n}|e_2\rangle + \cdots + T_{nn}|e_n\rangle
\end{aligned}$$

olduğunu varsayalım. Ya da kapalı formda

$$(j = 1, 2, \ldots, n) \quad \text{olmak üzere,} \quad \hat{T}|e_j\rangle = \sum_{i=1}^{n} T_{ij}|e_i\rangle \qquad \text{[E.30]}$$

olsun. Herhangi bir $|\alpha\rangle$ vektörünü

$$|\alpha\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + \cdots + a_n|e_n\rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j|e_j\rangle \qquad \text{[E.31]}$$

şeklinde yazmak mümkündür. O zaman

$$\hat{T}|\alpha\rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j\left(\hat{T}|e_j\rangle\right) = \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} a_j T_{ij}|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n} T_{ij}a_j\right)|e_i\rangle \qquad \text{[E.32]}$$

olur. Buradan da açıkça görüldüğü gibi $\hat{T}$ lineer dönüşümü, bileşenleri a_1, a_2,..., a_n ile verilen $|\alpha\rangle$ vektörünü, bileşenleri[7]

$$a_i' = \sum_{j=1}^{n} T_{ij}a_j. \qquad \text{[E.33]}$$

olarak verilen bir vektöre dönüştürmektedir.

---

[6] Bu bölümde lineer dönüşümleri göstermek için şapka (^) sembolünü kullanacağız. Bu gösterim kitap boyunca kullandığımız notasyonla (operatörleri şapka sembolüyle gösterme) uyumludur. Daha sonra göreceğimiz gibi kuantum mekanik operatörleri lineer dönüşümlerdir.

[7] E.30 ve E.33 nolu denklemlerde indislerin tersine çevrildiğine dikkat edin. Bu baskı hatası değildir. Bunu şöyle ifade edebiliriz: E.30 nolu denklemde $i \leftrightarrow j$ değişimi yapılarak *bileşenler* T_{ij} ile dönüşürlerse, *baz* vektörleri de T_{ji} ile dönüşürler.

Böylece, n^2 tane T_{ij} **elemanı** verilen bir baza göre $\hat{T}$ lineer dönüşümünü tek olarak karakterize etmektedir. Tıpkı n tane a_i bileşeninin aynı baza göre $|\alpha\rangle$ vektörünü tümüyle ve tek olarak karakterize etmesi gibi. Yani

$$\hat{T} \leftrightarrow (T_{11}, T_{12}, \ldots, T_{nn}) \qquad [E.34]$$

dir. Ortonormal bir baz için E.30 nolu denklemden

$$T_{ij} = \langle e_i|\hat{T}|e_j\rangle \qquad [E.35]$$

olduğu gösterilebilir.

Bu n^2 tane kompleks sayıyı bir **matris**[8] formunda ifade etmek daha kullanışlıdır.

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \ldots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \ldots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \ldots & T_{nn} \end{pmatrix}. \qquad [E.36]$$

Böylece lineer dönüşümlerle yapılacak hesaplar matris hesabına indirgenmiş oldu. İki lineer dönüşümün *toplamı*

$$(\hat{S} + \hat{T})|\alpha\rangle = \hat{S}|\alpha\rangle + \hat{T}|\alpha\rangle \qquad [E.37]$$

olarak tanımlanır ve bu tanımlama matrislerin toplamı kuralıyla (karşılıklı matris elemanlarının cebirsel toplamı) uyumludur.

$$\mathbf{U} = \mathbf{S} + \mathbf{T} \Leftrightarrow U_{ij} = S_{ij} + T_{ij}. \qquad [E.38]$$

İki lineer dönüşümün *çarpımı* $(\hat{S}\hat{T})$ bu dönüşümlerin ardı ardına uygulanmasıyla ifade edilir yani önce $\hat{T}$ etki eder ardından $\hat{S}$ etki eder:

$$|\alpha'\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle; \quad |\alpha''\rangle = \hat{S}|\alpha'\rangle = \hat{S}(\hat{T}|\alpha\rangle) = \hat{S}\hat{T}|\alpha\rangle. \qquad [E.39]$$

İki lineer dönüşümün çarpımını betimleyen $\hat{U} = \hat{S}\hat{T}$ döşümünü hangi $\mathbf{U}$ matrisi temsil edecek? Bunu hesaplamak çok zor değil:

$$a_i'' = \sum_{j=1}^{n} S_{ij} a_j' = \sum_{j=1}^{n} S_{ij} \left(\sum_{k=1}^{n} T_{jk} a_k \right) = \sum_{k=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{n} S_{ij} T_{jk} \right) a_k = \sum_{k=1}^{n} U_{ik} a_k.$$

Böylece

$$\mathbf{U} = \mathbf{S}\mathbf{T} \Leftrightarrow U_{ik} = \sum_{j=1}^{n} S_{ij} T_{jk} \qquad [E.40]$$

elde edilir.

[8] Kare matrisleri koyu renk büyük harflerle göstereceğiz.

E.40 nolu denklemden görüldüğü gibi U_{ik} ifadesi standart matris çarpım kuralıdır. **ST** çarpımının ilk elemanını bulmak için **S**'nin i-inci satırındaki elemanlarla **T**'nin k-inci sütunundaki elemanları karşılıklı olarak çarpar ve toplarız. Bu kural *dikdörtgen* matrislerin çarpımı için de geçerlidir. Yalnız bu durumda çarpımdaki ilk matrisin sütun sayısı ikinci matrisin satır sayısına eşit olmalıdır. Özellikle, n bileşenli $|\alpha\rangle$ vektörünü n x 1'lik bir **sütun matrisi** (ya da "sütun vektör")[9] olarak

$$\mathbf{a} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \qquad [E.41]$$

şeklinde yazarsak E.33 nolu denklemle verilen dönüşüm kuralı bir matris çarpımı olarak ifade edilebilir:

$$\mathbf{a}' = \mathbf{T}\mathbf{a}. \qquad [E.42]$$

Bu aşamada matrislerle ilgili bazı tanımlar verelim:

- $\tilde{\mathbf{T}}$ ile gösterilen bir matrisin **transpozesi** (transpozu) matrisin kendisiyle aynı eleman kümesine sahiptir, ancak satırlarla sütunlar yerdeğiştirmiştir. Özellikle, bir *sütun* matrisin transpozesi bir **satır matristir**:

$$\tilde{\mathbf{a}} = (a_1 \quad a_2 \quad \ldots \quad a_n). \qquad [E.43]$$

Kare bir matrisin transpozesi, matrisi **ana köşegeni** etrafında döndürerek elde edilir:

$$\tilde{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{21} & \ldots & T_{n1} \\ T_{12} & T_{22} & \ldots & T_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{1n} & T_{2n} & \ldots & T_{nn} \end{pmatrix}. \qquad [E.44]$$

Kare bir matrisin transpozesi kendisine eşitse bu matrise **simetriktir** denir ve eğer bu işlem işaret değiştiriyorsa matrise **antisimetriktir** diyoruz:

$$\text{Simetrik matris: } \tilde{\mathbf{T}} = \mathbf{T} \text{ ; antisimetrik matris } \tilde{\mathbf{T}} = -\mathbf{T}. \qquad [E.45]$$

- $\mathbf{T}^*$ ile gösterilen bir matrisin **kompleks eşleniği** matrisin her bir elemanının kompleks eşleniği alınarak elde edilir:

$$\mathbf{T}^* = \begin{pmatrix} T_{11}^* & T_{12}^* & \ldots & T_{1n}^* \\ T_{21}^* & T_{22}^* & \ldots & T_{2n}^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{n1}^* & T_{n2}^* & \ldots & T_{nn}^* \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}^* = \begin{pmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{pmatrix}. \qquad [E.46]$$

[9] Satır ve sütun matrisleri küçük harflerle göstereceğiz.

Tüm elemanları reel sayılar olan matrise **reel matris**, tüm elemanları sanal olan matrise **sanal matris** denir. Yani,

$$\text{reel} : \mathbf{T}^* = \mathbf{T}; \qquad \text{sanal} : \mathbf{T}^* = -\mathbf{T}. \tag{E.47}$$

- $\mathbf{T}^\dagger$ ile gösterilen bir matrisin **hermitsel eşleniği** (ya da **adjointi**) matrisin transpozesinin kompleks eşleniği alınarak elde edilir.

$$\mathbf{T}^\dagger \equiv \tilde{\mathbf{T}}^* = \begin{pmatrix} T_{11}^* & T_{21}^* & \dots & T_{n1}^* \\ T_{12}^* & T_{22}^* & \dots & T_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{1n}^* & T_{2n}^* & \dots & T_{nn}^* \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}^\dagger \equiv \tilde{\mathbf{a}}^* = \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* & \dots & a_n^* \end{pmatrix}. \tag{E.48}$$

  Hermitsel eşleniği kendisine eşit olan kare matrise **hermitsel** (ya da **self-adjoint**) denilir. Hermitsel eşleniğinin negatifi kendisine eşit olan matris **antihermitseldir** (ya da **tershermitsel**):

$$\text{hermitsel matris: } \mathbf{T}^\dagger = \mathbf{T}; \text{ antihermitsel matris: } \mathbf{T}^\dagger = -\mathbf{T}. \tag{A.49}$$

Bu notasyonda, ortonormal bir baza göre iki vektörün iç çarpımı (E.24 nolu denklem) bir matris çarpımı olarak yazılabilir:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{b}. \tag{E.50}$$

Bu paragrafta tanımlanan her üç işlemin ardı ardına iki kez uygulandığında orijinal matrisi verdiğine dikkat ediniz.

Genel olarak matris çarpımı sıra değiştirmez (komütatif değildir) yani $\mathbf{ST} \neq \mathbf{TS}$; değişik sıradaki iki çarpma işlemi arasındaki *fark* **komütatör**[10] olarak adlandırılır:

$$[\mathbf{S}, \mathbf{T}] \equiv \mathbf{ST} - \mathbf{TS}. \tag{E.51}$$

İki matrisin çarpımının transpozesi, matrislerin transpozelerinin *ters sıradaki* çarpımına eşittir. Yani

$$(\widetilde{\mathbf{ST}}) = \tilde{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{S}} \tag{E.52}$$

dir (E.11 nolu probleme bakınız). Aynı kural iki matrisin çarpımının hermitsel eşleniği için de geçerlidir:

$$(\mathbf{ST})^\dagger = \mathbf{T}^\dagger \mathbf{S}^\dagger. \tag{E.53}$$

Birim matris, her vektörü kendi üzerine gönderen liner dönüşümü temsil eder ve ana köşegen üzerindeki elemanları 1, diğer elemanları 0 olan matristir:

$$\mathbf{I} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}. \tag{E.54}$$

[10] Dikdörtgen matrislerin farklı sıradaki çarpımları aynı boyutta olmayacağından, komütatör yalnız kare matrisler için tanımlıdır.

Diğer bir deyişle, birim matrisin elemanları

$$\mathbf{I}_{ij} = \delta_{ij} \tag{E.55}$$

dir. Bir kare matrisin **tersi** $\mathbf{T}^{-1}$ ile gösterilir ve

$$\mathbf{T}^{-1}\mathbf{T} = \mathbf{T}\mathbf{T}^{-1} = \mathbf{I} \tag{E.56}$$

olarak tanımlanır.[11] Bir matrisin tersinin olabilmesi için, bu matrisin **determinantı**[12] sıfırdan farklı olmalıdır. Matrisin tersi şöyle bulunur:

$$\mathbf{T}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{T}} \tilde{\mathbf{C}}; \tag{E.57}$$

burada $\mathbf{C}$ **kofaktörler** (T_{ij} elemanının kofaktörü = $(-1)^{i+j}$ çarpı ($\mathbf{T}$ matrisinde T_{ij} elemanının bulunduğu i-inci satırla j-inci sütunun silinmesiyle elde edilen altmatrisin determinantı)) matrisidir. Tersi olmayan matrise **tekil** matris denir. İki matrisin çarpımının tersi, matrislerin terslerinin *ters sıradaki* çarpımına eşittir. Yani

$$(\mathbf{ST})^{-1} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{S}^{-1} \tag{E.58}$$

dir.

Tersi hermitsel eşleniğine eşit olan matrise **üniter matris**[13] denir.

$$\text{Üniter matris; } \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}. \tag{A.59}$$

Ortonormal bir bazı göz önüne aldığımızda üniter bir matrisin satırlarıyla sütunları ortonormal bir küme oluştururlar (E.12 nolu probleme bakın). Üniter bir $\mathbf{U}$ matrisi için

$$\langle \alpha' | \beta' \rangle = \mathbf{a}'^\dagger \mathbf{b}' = (\mathbf{Ua})^\dagger (\mathbf{Ub}) = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} \mathbf{b} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{b} = \langle \alpha | \beta \rangle \tag{E.60}$$

olduğundan, üniter matrislerle temsil edilen lineer dönüşümler iç çarpımı korurlar.

***Problem E.8** Aşağıdaki gibi verilen $\mathbf{A}$ ve $\mathbf{B}$ matrisleri için;

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & i \\ 2 & 0 & 3 \\ 2i & -2i & 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

[11] Sol ve sağ terslerin birbirine eşit olduğuna dikkat ediniz. $\mathbf{AT} = \mathbf{I}$ ve $\mathbf{TB} = \mathbf{I}$ ise, ikinci ifadeyi sol taraftan $\mathbf{A}$ ile çarpıp, ilk ifadeyi kullanırsak $\mathbf{B} = \mathbf{A}$ elde edilir.

[12] Determinantın nasıl hesaplandığını bildiğinizi varsayıyorum. Bilmiyorsanız, M. Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, 2nd. ed. (John Wiley, New York, 1983), 3.3. Kesime bakınız.

[13] Skalarların reel olduğu bir reel vektör uzayında hermitsel eşlenik ile transpoze işlemi aynıdır. Üniter matris **ortogonal** matris, $\tilde{\mathbf{O}} = \mathbf{O}^{-1}$ olur. Örneğin, sıradan 3 boyutlu uzayda dönmeler ortogonal matrislerle temsil edilirler.

(a) $\mathbf{A}+\mathbf{B}$, (b) $\mathbf{AB}$, (c) $[\mathbf{A},\mathbf{B}]$, (d) $\tilde{\mathbf{A}}$, (e) $\mathbf{A}^*$, (f) $\mathbf{A}^\dagger$ve (g) $\mathbf{B}^{-1}$'i hesaplayınız. $\mathbf{BB}^{-1}=\mathbf{I}$ olup olmadığını kontrol ediniz. $\mathbf{A}$ matrisinin tersi var mıdır?

***Problem E.9** E.8 nolu problemde verilen kare matrislerle aşağıdaki sütun matrisleri kullanarak

$$\mathbf{a}=\begin{pmatrix} i \\ 2i \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}=\begin{pmatrix} 2 \\ (1-i) \\ 0 \end{pmatrix},$$

(a) $\mathbf{Aa}$, (b) $\mathbf{a}^\dagger\mathbf{b}$, (c) $\tilde{\mathbf{a}}\,\mathbf{Bb}$, (d) $\mathbf{ab}^\dagger$'yi hesaplayınız.

Problem E.10 Herhangi bir $\mathbf{T}$ matrisinin

(a) simetrik bir $\mathbf{S}$ matrisiyle antisimetrik bir $\mathbf{A}$ matrisinin,

(b) reel bir $\mathbf{R}$ matrisiyle sanal bir $\mathbf{M}$ matrisinin,

(c) hermitsel bir $\mathbf{H}$ matrisiyle antihermitsel bir $\mathbf{K}$ matrisinin, toplamı olarak yazılabileceğini gösteriniz.

***Problem E.11** E.52, E.53 ve E.58 nolu denklemleri kanıtlayınız. Üniter iki matrisin çarpımının üniter olduğunu gösteriniz. Hangi koşullar altında hermitsel iki matrisin çarpımı hermitsel olur? İki üniter matrisin toplamı üniter olmak zorunda mıdır? Hermitsel iki matrisin toplamı da hermitsel midir?

Problem E.12 Üniter bir matrisin satırlarıyla sütunlarının ortonormal kümeler oluşturduklarını gösteriniz.

Problem E.13 $\det(\tilde{\mathbf{T}})=\det(\mathbf{T})$ olduğunu anımsayarak, hermitsel bir matrisin determinantının reel olduğunu, üniter bir matrisin determinantının mutlak değer karesinin 1'e eşit olduğunu ve ortogonal bir matrisin determinantının +1 veya −1'e eşit olduğunu gösteriniz.

E.4 BAZ DEĞİŞİMİ

Bir vektörün bileşenleriyle lineer bir dönüşümü temsil eden matrisin elemanları seçilen baza bağımlıdır. Farklı bir baza geçtiğimizde bu sayıların nasıl değiştiğini araştıralım.

$|e_i\rangle$ eski baz vektörleri, tıpkı diğer tüm vektörler gibi yeni baz vektörleri $|f_i\rangle$'lerin lineer bir kombinasyonu olarak yazılabilir. Yani

$$\begin{aligned} |e_1\rangle &= S_{11}|f_1\rangle + S_{21}|f_2\rangle + \cdots + S_{n1}|f_n\rangle, \\ |e_2\rangle &= S_{12}|f_1\rangle + S_{22}|f_2\rangle + \cdots + S_{n2}|f_n\rangle, \\ &\cdots \\ |e_n\rangle &= S_{1n}|f_1\rangle + S_{2n}|f_2\rangle + \cdots + S_{nn}|f_n\rangle \end{aligned}$$

dir. Buradaki S_{ij}'ler kompleks sayılardır. Daha kapalı bir formda

$$|e_j\rangle = \sum_{i=1}^{n} S_{ij}|f_i\rangle, \quad (j=1,2,\ldots,n) \qquad \text{[E.61]}$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifadenin kendisi bir lineer dönüşümdür (E.30 nolu denklemle karşılaştırınız)[14] ve bu durumda bileşenlerin nasıl dönüştüğünü biliyoruz:

$$a_i^f = \sum_{j=1}^{n} S_{ij} a_j^e. \qquad \text{[E.62]}$$

Buradaki e ve f üstsimgeleri bazı temsil etmektedir. Matris formunda ise

$$\mathbf{a}^f = \mathbf{S}\mathbf{a}^e \qquad \text{[E.63]}$$

şeklinde yazılır. $\hat{\mathbf{T}}$ lineer dönüşümünü temsil eden matris baz değişimi altında nasıl dönüşecek? Eski bazda

$$\mathbf{a}'^e = \mathbf{T}^e\mathbf{a}^e$$

olduğunu biliyoruz (E.42 nolu denklem). E.63 nolu denklem sol taraftan $\mathbf{S}^{-1}$ ile çarpılırsa, $\mathbf{a}^e = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{a}^f$ olur.[15] O zaman

$$\mathbf{a}'^f = \mathbf{S}\mathbf{a}'^e = \mathbf{S}(\mathbf{T}^e\mathbf{a}^e) = \mathbf{S}\mathbf{T}^e\mathbf{S}^{-1}\mathbf{a}^f$$

elde edilir. Böylece;

$$\mathbf{T}^f = \mathbf{S}\mathbf{T}^e\mathbf{S}^{-1}. \qquad \text{[E.64]}$$

Genel olarak tekil olmayan bir $\mathbf{S}$ matrisi için $\mathbf{T}_2 = \mathbf{S}\mathbf{T}_1\mathbf{S}^{-1}$ ise, $\mathbf{T}_1$ ve $\mathbf{T}_2$ matrislerine **benzer** matrisler denir. Yani *aynı lineer dönüşümü farklı bazlarda temsil eden matrisler benzer matrislerdir.* Burada yeri gelmişken belirtelim: eğer ilk baz

---

[14] Aslında buradaki temel farka dikkat etmek gerekir. Burada iki farklı *bazda* temsil edilen bir *vektör* hakkında konuşuyoruz. Oysa önceden *aynı* bazda temsil edilen iki *farklı* vektöre bakmıştık.

[15] $\mathbf{S}^{-1}$ matrisinin mevcut olduğuna dikkat ediniz. Eğer $\mathbf{S}$ matrisi tekil olsaydı $|f_i\rangle$'ler vektör uzayını geremezler ve bu durumda bir baz oluşturamazlardı.

ortonormal ise, ikinci baz ancak ve ancak **S** matrisi üniterse ortonormal olur (E.16 nolu probleme bakınız). Burada yalnızca ortonormal bazlarla çalıştığımızdan, esas olarak *üniter* benzerlik dönüşümleriyle uğraşacağız.

Verilen bir lineer dönüşümü temsil eden matrisin *elemanları* yeni bazda farklı olmasına rağmen, matrise ait iki büyüklük baz değişiminden etkilenmez. Bunlar matrisin determinantı ve **izidir**. Bir çarpımın determinantı determinantların çarpımına eşit olduğundan,

$$\det(\mathbf{T}^f) = \det(\mathbf{S}\mathbf{T}^e\mathbf{S}^{-1}) = \det(\mathbf{S})\det(\mathbf{T}^e)\det(\mathbf{S}^{-1}) = \det\mathbf{T}^e \qquad [E.65]$$

dir. Bir matrisin izi, matrisin *köşegen elemanlarının toplamıdır*:

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{T}) \equiv \sum_{i=1}^{m} T_{ii}. \qquad [E.66]$$

İz alma işleminin bir özelliği şudur (E.17 nolu probleme bakınız):

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_1\mathbf{T}_2) = \mathrm{Tr}(\mathbf{T}_2\mathbf{T}_1). \qquad [E.67]$$

Bu bağıntı herhangi iki $\mathbf{T}_1$ ve $\mathbf{T}_2$ matrisi için geçerlidir. E.67 nolu denklem kullanılarak

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{T}^f) = \mathrm{Tr}(\mathbf{S}\mathbf{T}^e\mathbf{S}^{-1}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{T}_e\mathbf{S}^{-1}\mathbf{S}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{T}^e) \qquad [E.68]$$

elde edilir.

Problem E.14 Üç boyutta standart $(\hat{i},\hat{j},\hat{k})$ bazını kullanarak,

(a) z ekseni etrafında θ açısı kadar dönmeyi temsil eden matrisi kurunuz.

(b) (1,1,1) noktasından geçen bir eksen etrafında 120°'lik dönmeyi temsil eden matrisi kurunuz.

(c) xy-düzlemine göre yansımayı temsil eden matrisi kurunuz.

(d) Kurduğunuz tüm matrislerin ortogonal olup olmadığını kontrol ediniz ve determinantlarını hesaplayınız.

Problem E.15 Standart $(\hat{i},\hat{j},\hat{k})$ bazında, x-ekseni etrafında θ açısı kadar dönmeyi temsil eden $\mathbf{T}_x$ matrisini ve y-ekseni etrafında θ açısı kadar dönmeyi temsil eden $\mathbf{T}_y$ matrisini kurunuz. Yeni bir baza geçtiğimizi düşünelim. Yeni baz vektörleri $\hat{i}' = \hat{j}, \hat{j}' = -\hat{i}$ ve $\hat{k}' = \hat{k}$ olsun. Baz değişimini ifade eden **S** matrisini kurunuz ve $\mathbf{S}\mathbf{T}_x\mathbf{S}^{-1}$ ile $\mathbf{S}\mathbf{T}_y\mathbf{S}^{-1}$'in etkilerini kontrol ediniz.

Problem E.16 Benzerlik dönüşümünün matris çarpımını *koruduğunu* (yani $\mathbf{A}^e\mathbf{B}^e = \mathbf{C}^e$ ise, $\mathbf{A}^f\mathbf{B}^f = \mathbf{C}^f$ dir) gösteriniz. Genel olarak, benzerlik dönüşümü, simetri, reellik ya da hermitsellik gibi özellikleri korumaz. Bununla birlikte, **S** üniter ve $\mathbf{H}^e$ hermitsel ise $\mathbf{H}^f$'nin de hermitsel olacağını gösteriniz. **S** yalnız ve yalnızca üniter ise, ortonormal bir bazı diğer bir ortonormal baza taşıyacağını gösteriniz.

***Problem E.17** $\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_1\mathbf{T}_2)=\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_2\mathbf{T}_1)$ olduğunu kanıtlayınız. Bunu kullanarak $\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_1\mathbf{T}_2\mathbf{T}_3)=\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_2\mathbf{T}_3\mathbf{T}_1)$ olduğu gösterilebilir. O zaman, genel olarak, $\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_1\mathbf{T}_2\mathbf{T}_3)=\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_2\mathbf{T}_1\mathbf{T}_3)$ yazabilir miyiz? Bunu ya da aksini kanıtlayınız. *Yardım:* Aksini kanıtlamanın en iyi yolu karşıt bir örnek vermektir. Daha basit olan daha iyidir.

E.5 ÖZDEĞERLER VE ÖZVEKTÖRLER

Üç boyutlu uzayda belirli bir eksen etrafında θ açısı kadar dönmeyi betimleyen bir lineer dönüşüm düşünelim. Çoğu vektör karmaşık bir tarzda değiştiği halde (genellikle eksen etrafındaki bir koni üzerinde yer alırlar) söz konusu eksen üzerindeki vektörlerin davranışı oldukça basittir. Bu vektörler hiç değişmezler; yani $\hat{T}|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$ dır. θ 180°'ye eşit olursa vektörler ekvatoral düzlemde bulunurlar ve işaret değiştirirler $(\hat{T}|\alpha\rangle = -|\alpha\rangle)$. Kompleks bir vektör uzayında[16] her lineer dönüşüm, buradaki gibi kendisinin bir skalar katı kadar değişen "özel" vektörlere sahiptir. Bu özel vektörler için

$$\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle \qquad [E.69]$$

dir. Sözkonusu bu özel vektörlere dönüşümün **özvektörleri**, kompleks λ'ya dönüşümün **özdeğeri** denilir (*sıfır* vektör, *herhangi* bir $\hat{T}$ ve λ için E.69 nolu denklemi sağlasa da özvektör olarak sayılmaz; teknik olarak özvektör E.69 nolu denklemi sağlayan sıfırdan farklı bir vektördür). Özvektörü sıfırdan farklı bir skalarla *çarptığımızda* bu vektörün de aynı özdeğere karşılık olan bir özvektör olduğuna dikkat ediniz.

Belirli bir baza göre özvektör denklemini, sıfırdan farklı bir **a** için

$$\mathbf{T}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{a} \qquad [E.70]$$

şeklinde matris formunda yazabiliriz. Ya da

$$(\mathbf{T} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{a} = \mathbf{0}. \qquad [E.71]$$

olarak yazılabilir (burada **0**, tüm elemanları sıfır olan **sıfır matrisidir**). $(\mathbf{T}-\lambda\mathbf{I})$ matrisinin *tersi* varsa, E.71 nolu denklemin her iki tarafını $(\mathbf{T}-\lambda\mathbf{I})^{-1}$ matrisiyle çarparak $\mathbf{a} = 0$

[16] Tüm skalarların reel olduğu reel vektör uzayında bu her zaman doğru değildir. E.18 nolu probleme bakınız.

sonucuna ulaşırız. Ancak **a**'nın *sıfırdan farklı* olduğunu kabul ettiğimizden ($\mathbf{T}-\lambda\mathbf{I}$) matrisi tekil olmalı, yani determinantı sıfıra eşit olmalıdır:

$$\det(\mathbf{T}-\lambda\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} (T_{11}-\lambda) & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & (T_{22}-\lambda) & \cdots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \cdots & (T_{nn}-\lambda) \end{vmatrix} = 0. \qquad [E.72]$$

Determinantın açılımından λ için cebirsel bir denklem elde edilir:

$$C_n\lambda^n + C_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + C_1\lambda + C_0 = 0. \qquad [E.73]$$

Buradaki C_i katsayıları $\mathbf{T}$'nin elemanlarına bağlıdır (E.20 nolu probleme bakınız). E.73 nolu denkleme matrisin **karakteristik denklemi** denir. Bu denklemin çözümünden özdeğerler elde edilir. Karekteristik denklem n-inci dereceden olduğundan (temel cebir teoreminden) n tane (kompleks) kök[17] olduğuna dikkatinizi çekmek isterim. Bununla beraber, bu köklerin bazıları eşit olabilir. Bu yüzden tüm söyleyebileceğimiz; $n \times n$'lik bir matrisin *en az bir* ve *en fazla n* tane farklı özdeğeri vardır. Bir matrisin özdeğerlerinin oluşturduğu topluluğa matrisin **özdeğer spektrumu** denir. Aynı özdeğere karşılık olan iki ya da daha fazla lineer bağımsız özvektör varsa, spektruma **çokkatlı** (katlı, çakışık) denir.

Özdeğerler bulunduktan sonra karşılık olan özvektörleri bulmak için λ değerleri E.70 nolu denklemde yerine yazılır ve **a**'nın bileşenleri için çözülür. Bunu bir örnek üzerinde görelim:

Örnek E.1

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad [E.74]$$

olarak verilen matrisin özdeğerlerini ve özvektörlerini bulunuz.

Çözüm: Karakteristik denklem:

$$\begin{vmatrix} (2-\lambda) & 0 & -2 \\ -2i & (i-\lambda) & 2i \\ 1 & 0 & (-1-\lambda) \end{vmatrix} = -\lambda^3 + (1+i)\lambda^2 - i\lambda = 0. \qquad [E.75]$$

Karakteristik denklemin kökleri 0,1 ve i'dir. İlk özvektörün bileşenleri (a_1, a_2, a_3) olsun. Böylece

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

[17] Reel vektör uzaylarında sıkıntı yaratan kısım burasıdır. Çünkü karakteristik denklemin hiçbir kökü reel olmayabilir. E.18 nolu probleme bakınız.

olur. Buradan bileşenler için

$$2a_1 - 2a_3 = 0,$$
$$-2ia_1 + ia_2 + 2ia_3 = 0,$$
$$a_1 - a_3 = 0$$

denklemleri elde edilir. İlk denklemden a_3, a_1 cinsinden $a_3 = a_1$ olarak bulunur. İkinci denklemden a_2 bulunur: $a_2 = 0$; son denklem yeni bir şey vermez. Bir özvektörün herhangi bir katı da özvektör olduğundan $a_1 = 1$ seçebiliriz. Böylece ilk özvektör

$$\lambda_1 = 0 \quad \text{için,} \quad \mathbf{a}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad [E.76]$$

olarak elde edilir. Bileşenler için aynı notasyonu kullanarak ikinci özvektörü belirleyelim:

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

Bileşenleri veren denklemler:

$$2a_1 - 2a_3 = a_1,$$
$$-2ia_1 + ia_2 + 2ia_3 = a_2,$$
$$a_1 - a_3 = a_3.$$

Bu denklemlerden a_3 ve a_2, a_1 cinsinden çözülürse, $a_3 = (1/2)a_1$ ve $a_2 = [(1\text{-}i)/2]a_1$ olarak bulunur. $a_1 = 2$ seçilirse

$$\lambda_2 = 1 \quad \text{için,} \quad \mathbf{a}^{(2)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1-i \\ 1 \end{pmatrix} \qquad [E.77]$$

olur. Üçüncü özvektör için:

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ia_1 \\ ia_2 \\ ia_3 \end{pmatrix}$$

olur ve buradan

$$2a_1 - 2a_3 = ia_1,$$
$$-2ia_1 + ia_2 + 2ia_3 = ia_2,$$
$$a_1 - a_3 = ia_3$$

elde edilir.

Bu denklemlerin çözümleri $a_3 = a_1 = 0$, a_2 belirsizdir. $a_2 = 1$ seçilerek

$$\lambda_3 = i \qquad \text{için,} \qquad \mathbf{a}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{E.78}$$

elde edilir.

Önceki örnekte olduğu gibi özvektörler tüm uzayı örterse, bu özvektörleri baz olarak seçebiliriz:

$$\begin{aligned} \hat{T}|f_1\rangle &= \lambda_1|f_1\rangle, \\ \hat{T}|f_2\rangle &= \lambda_2|f_2\rangle, \\ &\cdots \\ \hat{T}|f_n\rangle &= \lambda_n|f_n\rangle. \end{aligned}$$

Bu bazda $\hat{T}$ 'yi temsil eden matrisin formu oldukça basittir: ana köşegendeki elemanlar özdeğerler ve kalan diğer tüm elemanlar sıfırdır. Yani

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} \tag{E.79}$$

dir. Normlanmış özvektörler

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \ldots, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \tag{E.80}$$

dir. Bir baz değişimiyle **köşegen forma** (E.79 nolu denklem) getirilebilen bir matrise **köşegenleştirilebilir** denir (açıkcası, bir matris, yalnız ve yalnızca özvektörleri uzayı örterse köşegenleştirilebilir olur). Köşegenleştirmeyi yapacak benzerlik matrisi eski bazda özvektörler $\mathbf{S}^{-1}$'in sütunları alınarak kurulur:

$$(\mathbf{S}^{-1})_{ij} = (\mathbf{a}^{(j)})_i. \tag{E.81}$$

Örnek E.2 E.1 nolu örnekteki özvektörler yardımıyla

$$\mathbf{S}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & (1-i) & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

bulunur

E.57 nolu denklem kullanılarak,

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & -1 \\ (i-1) & 1 & (1-i) \end{pmatrix}$$

elde edilir. $\mathbf{S}$ ve $\mathbf{S}^{-1}$ kullanılarak,

$$\mathbf{S}\mathbf{a}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}\mathbf{a}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}\mathbf{a}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ve

$$\mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{S}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & i \end{pmatrix}$$

olduğu gösterilebilir.

Bir matrisi köşegen forma getirmenin birçok yararı var. Öncelikle köşegen matrislerle hesap yapmak daha kolay. Ne yazık ki, her matrisi köşegenleştirmek mümkün değil. Özvektörlerin uzayı örtmesi gerekli. Bir matrisin karakteristik denkleminin n tane ayrık kökü varsa bu matris köşegenleştirilebilir. Ancak karekteristik denklemin çakışık kökleri olması durumunda dahi köşegenleştirilebilecek matrisler vardır (kesin olarak köşegenleştirilemeyecek bir matris örneği için E.19 nolu probleme bakınız). Bu yüzden tüm özvektörlerini hesaplamadan önce verilen bir matrisin köşegenleştirilip köşegenleştirilemeyeceğini bilmek kolaylık sağlayacaktır. Bunun için gerekli olmasa da yeterli bir koşul şudur: hermitsel eşleniği ile sıra değiştiren bir matrise **normal matris** denir:

$$\text{normal}: \quad [\mathbf{N}^\dagger, \mathbf{N}] = \mathbf{0}. \tag{E.82}$$

Her normal matris köşegenleştirilebilir (özvektörleri uzayı örter). Özellikle her hermitsel matris ve her üniter matris köşegenleştirilebilir.

İki tane köşegenleştirilebilir matrise sahip olduğumuzu düşünelim (kuantum mekaniksel uygulamalarda oldukça sık rastlanır): bu matrisler *aynı* benzerlik matrisi $\mathbf{S}$ yardımıyla aynı anda köşegenleştirilebilir mi? Yani bu iki matrisin de köşegen olduğu bir baz var mıdır? Bu sorunun yanıtı *ancak ve ancak iki matris sıra değiştiriyorsa* evettir (E.22 nolu probleme bakınız).

***Problem E.18** xy düzleminde dönmeyi temsil eden 2×2'lik bir matris

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{E.83}$$

şeklindedir. Belli, özel açılar dışında (bu açıları bulunuz) bu matrisin reel özdeğerleri olmadığını gösteriniz. Bu sonuç geometrik olarak bir düzlem üzerinde hiçbir vektörün

böyle bir dönme işlemi altında kendi üzerine taşınamayacağı gerçeğini yansıtmaktadır. *Üç* boyutta durum böyle değildir. Öte yandan bu matrisin *kompleks* özdeğer ve özvektörleri *mevcuttur*. Bunları bulunuz. **T**'yi köşegenleştirecek **S** matrisini kurunuz. $\mathbf{STS}^{-1}$ benzerlik dönüşümünü açık olarak gerçekleştirerek **T**'nin köşegen forma indirgendiğini gösteriniz.

Problem E.19 Aşağıdaki matrisin özdeğer ve özvektörlerini belirleyiniz. Bu matris köşegenleştirilebilir mi?

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Problem E.20 E.73 nolu denklem ile verilen karakteristik denklemde birinci, ikinci ve sonuncu katsayıların

$$C_n = (-1)^n, \quad C_{n-1} = (-1)^{n-1}\mathrm{Tr}(\mathbf{T}) \quad \text{ve} \quad C_0 = \det(\mathbf{T}) \qquad [E.84]$$

şeklinde olduğunu gösteriniz. Elemanları T_{ij} ile verilen 3×3'lük bir matris için C_1 nedir?

Problem E.21 *Köşegen* bir matrisin izi özdeğerlerinin toplamına, bu matrisin determinantı özdeğerlerinin çarpımına eşittir (E.79 nolu denkleme bakınız). E.65 ve E.68 nolu denklemlerden görüleceği gibi, bu sonuç herhangi bir *köşegenleştirilebilir* matris için de geçerlidir. Herhangi bir matris için

$$\det(\mathbf{T}) = \lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n, \quad \mathrm{Tr}(\mathbf{T}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n \qquad [E.85]$$

olduğunu kanıtlayınız. Buradaki λ'lar karakteristik denklemin n tane köküdür. Çakışık kökler olması durumunda çözümlerden daha az sayıda lineer bağımsız özvektör olacaktır. Yine de tüm λ'lar sayılmalıdır. *Yardım:* Karakteristik denklemi aşağıdaki formda yazınız ve E.20 nolu problemin sonuçlarını kullanın.

$$(\lambda_1 - \lambda)(\lambda_2 - \lambda)\cdots(\lambda_n - \lambda) = 0.$$

Problem E.22

(a) Belirli bir bazda verilmiş iki matris sıra değiştiriyorsa, bu iki matrisin herhangi bir bazda da sıra değiştirdiğini gösteriniz. Yani,

$$[\mathbf{T}_1^e, \mathbf{T}_2^e] = \mathbf{0} \;\Rightarrow\; [\mathbf{T}_1^f, \mathbf{T}_2^f] = \mathbf{0}. \qquad [E.86]$$

Yardım: E.64 nolu denklemi kullanın.

(b) İki matris aynı anda köşegenleştirilebiliyorsa, bunların sıra değiştirdiğini gösteriniz. [18]

Problem E.23

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & i \end{pmatrix}$$

matrisini gözönüne alalım

(a) Bu matris normal midir?

(b) Bu matris köşegenleştirilebilir mi?

E.6 HERMİTSEL DÖNÜŞÜMLER

E.48 nolu denklemde, *bir matrisin* hermitsel eşleniğini (ya da "adjointini") matrisin transpozesinin kompleks eşleniği olarak tanımlamıştık: $\mathbf{T}^\dagger = \bar{\mathbf{T}}^*$. Bu kesimde, bir *lineer dönüşümün* hermitsel eşleniği için daha temel bir tanım vereceğiz. Tüm $|\alpha\rangle$ ve $|\beta\rangle$ vektörleri için

$$\langle \hat{T}^\dagger\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle \qquad [E.87]$$

bağıntısını sağlayan $\hat{T}^\dagger$ dönüşümüne $\hat{T}$ lineer dönüşümünün hermitsel eşleniği denir.[19] Yani $\hat{T}$ dönüşümünün iç çarpımın *ikinci* vektörüne etkisi $\hat{T}^\dagger$'nın iç çarpımın *ilk* elemanına etkisine eşit. Herkes tarafından kullanılmasına rağmen, bunun kötü bir notasyon olduğunu hatırlatmak isteriz. Çünkü α ve β *vektör* değil yalnızca *isimdir*, vektör olanlar $|\alpha\rangle$ ve $|\beta\rangle$ dır. Özellikle bu isimler hiçbir matematiksel özelliğe vurgu yapmazlar ve "$\hat{T}\beta$" ifadesi kelimenin tam anlamıyla saçmadır. Lineer dönüşümler *vektörlerin* üzerine etki ederler, *etiketlerin* üzerine değil. Yine de bu notasyonun ne demek istediği oldukça açık: $\hat{T}\beta$, $\hat{T}|\beta\rangle$ vektörünün ismidir. $\langle\hat{T}^\dagger\alpha|\beta\rangle$ da $\hat{T}^\dagger|\alpha\rangle$ vektörüyle $|\beta\rangle$ vektörünün iç çarpımıdır. Özellikle, herhangi bir c skaları için,

$$\langle\alpha|c\beta\rangle = c\langle\alpha|\beta\rangle \qquad [E.88]$$

ve

$$\langle c\alpha|\beta\rangle = c^*\langle\alpha|\beta\rangle \qquad [E.89]$$

olduğuna dikkat ediniz.

---

[18] Bunun tersinin (yani, iki tane köşegenleştirilebilen matris sıra değiştiriyorlarsa bu matrisler aynı anda köşegenleştirilebilirler) kanıtı çok basit değildir. Örneğin, Eugen Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd ed., Wiley, New York (1998), 10.4. Kesime bakınız.

[19] Böyle bir dönüşümün var olup olmadığını merak edebilirsiniz. Güzel bir soru! Yanıt: "evet". Örneğin, P.R. Halmos, *Finite Dimensional Vector Spaces*, 2nd ed., van Nostrand, Princeton (1958). 44. Kesime bakınız.

Ortonormal bir bazda çalışıyorsanız (her zaman böyle bir bazda çalışıyoruz) lineer bir dönüşümün hermitsel eşleniği, dönüşüme karşılık olan matrisin hermitsel eşleniği ile temsil edilir. E.50 ve E.53 nolu denklemleri kullanarak

$$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \mathbf{a}^\dagger\mathbf{T}\mathbf{b} = (\mathbf{T}^\dagger\mathbf{a})^\dagger\mathbf{b} = \langle\hat{T}^\dagger\alpha|\beta\rangle \qquad \text{[E.90]}$$

olduğu gösterilebilir. Yani terminoloji uyumludur ve matrislerin ya da dönüşümlerin dilini birbirlerinin yerine kullanabiliriz.

Kuantum mekaniğinde en sık karşılaşılan ve temel bir rol oynayan dönüşümler **hermitsel dönüşümlerdir** $(\hat{T}^\dagger = \hat{T})$. Hermitsel bir dönüşümün özdeğer ve özvektörlerinin üç önemli özelliği vardır:

1. **Hermitsel bir dönüşümün özdeğerleri reeldir.**

   Kanıt: λ, $\hat{T}$ 'nin bir özdeğeri olsun. O zaman, $|\alpha\rangle \neq 0$ için $\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$ dır.

   $$\langle\alpha|\hat{T}\alpha\rangle = \langle\alpha|\lambda\alpha\rangle = \lambda\langle\alpha|\alpha\rangle$$

   olur, $\hat{T}$ hermitsel olduğundan

   $$\langle\alpha|\hat{T}\alpha\rangle = \langle\hat{T}\alpha|\alpha\rangle = \langle\lambda\alpha|\alpha\rangle = \lambda^*\langle\alpha|\alpha\rangle$$

   elde edilir. $\langle\alpha|\alpha\rangle \neq 0$ olacağından (E.20 nolu denklem), $\lambda = \lambda^*$ dır. Yani λ reeldir.

2. **Hermitsel bir dönüşümün farklı özdeğerlere karşılık olan özvektörleri ortogonaldir.**

   Kanıt: $\lambda \neq \mu$ olmak üzere $\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$ ve $\hat{T}|\beta\rangle = \mu|\beta\rangle$ olsun. Bu durumda

   $$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \langle\alpha|\mu\beta\rangle = \mu\langle\alpha|\beta\rangle.$$

   Aynı zamanda, $\hat{T}$ hermitsel olduğundan

   $$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \langle\hat{T}\alpha|\beta\rangle = \langle\lambda\alpha|\beta\rangle = \lambda^*\langle\alpha|\beta\rangle$$

   yazılır. 1-inci özellik nedeniyle $\lambda = \lambda^*$ ve $\lambda \neq \mu$ olduğundan, $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$ olur.

3. **Hermitsel bir dönüşümün özvektörleri uzayı örterler**

   Daha önceden gördüğümüz gibi, bu özellik herhangi bir hermitsel matrisin köşegenleştirilebileceğini belirten ifadeye denktir. Bu oldukça teknik ifade, bir bakıma, kuantum mekaniğinin üzerine oturduğu matematiksel temeldir. Ancak kanıt sonsuz boyutlu vektör uzaylarına taşınamadığından düşünüldüğünden biraz daha güçsüz bir temeldir.

Problem E.24 Hermitsel bir lineer dönüşüm, tüm $|\alpha\rangle$ ve $|\beta\rangle$ vektörleri için $\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \langle\hat{T}\alpha|\beta\rangle$ koşulunu sağlamalıdır. Bunun için $\langle\gamma|\hat{T}\gamma\rangle = \langle\hat{T}\gamma|\gamma\rangle$ koşulunun yeterli olduğunu kanıtlayınız. *Yardım:* Önce $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle$, sonra da $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + i|\beta\rangle$ olduğunu varsayın.

***Problem E.25**

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix}$$

matrisini gözönüne alalım.

(a) $\mathbf{T}$'nin hermitsel olduğunu gösterin.

(b) $\mathbf{T}$'nin özdeğerlerini (reel olduklarına dikkat ediniz) bulun.

(c) $\mathbf{T}$'nin özvektörlerini bulunuz ve normlayınız (özvektörlerin ortogonal olduğuna dikkat edin).

(d) $\mathbf{T}$'yi köşegenleştirecek üniter $\mathbf{S}$ matrisini kurun ve bunun $\mathbf{T}$'yi köşegen hale getirdiğini açıkça hesaplayarak kontrol edin.

(e) $\mathbf{T}$ matrisi için det($\mathbf{T}$) ve Tr($\mathbf{T}$)'yi hesaplayın ve bunların $\mathbf{T}$'nin köşegenleştirilmiş formundaki "det" ve "Tr" değerlerine eşit olduğunu gösterin.

****Problem E.26**

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix}$$

olarak verilen hermitsel matrisi göz önüne alalım.

(a) det($\mathbf{T}$) ve Tr($\mathbf{T}$)'yi hesaplayın.

(b) $\mathbf{T}$'nin özdeğerlerini bulun. Bunların çarpımlarının ve toplamlarının, E.85 nolu denklem yardımıyla, (a)'da bulunanlarla uyumlu olduğunu gösterin. $\mathbf{T}$'nin köşegen formunu yazın.

(c) $\mathbf{T}$'nin özvektörlerini bulun. Çokkatlı özdeğer için birbirlerinden lineer bağımsız iki tane özvektörü kurun (*keyfi* bir matristen farklı olarak, bu adım *hermitsel* bir matris için daima mümkündür). Bu özvektörleri ortogonal hale getiriniz ve bunların üçüncü özvektöre ortogonal olduğunu kontrol edin. Her üç özvektörü de normlayın.

(d) $\mathbf{T}$'yi köşegenleştirecek $\mathbf{S}$ üniter matrisini kurun. $\mathbf{S}$'yi kullanarak benzerlik dönüşümünün $\mathbf{T}$'yi köşegen forma getirdiğini açıkça hesap yaparak gösterin.

Problem E.27 *Üniter bir dönüşüm* $\hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$ olarak tanımlanır.

(a) Üniter dönüşümlerin iç çarpımları koruduğunu yani tüm $|\alpha\rangle$ ve $|\beta\rangle$ vektörleri için $\langle\hat{U}\alpha|\hat{U}\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle$ olduğunu gösterin.

(b) Üniter bir dönüşümün her özdeğerinin mutlak değer karesinin 1 olduğunu gösterin.

(c) Üniter bir dönüşümün farklı özdeğerlere karşılık olan özvektörlerinin ortogonal olduğunu gösterin.

*****Problem E.28** Matris *fonksiyonları* Taylor açılımı yardımıyla tanımlanırlar. Örneğin

$$e^{\mathsf{M}} \equiv \mathsf{I} + \mathsf{M} + \frac{1}{2}\mathsf{M}^2 + \frac{1}{3!}\mathsf{M}^3 + \cdots \qquad [E.91]$$

dir.

$$\text{(i) } \mathsf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \text{(ii) } \mathsf{M} = \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ -\theta & 0 \end{pmatrix}$$

matrisleri için $\exp(\mathsf{M})$'yi bulunuz.

(b) M köşegenleştirilebilir bir matris ise,

$$\det\left(e^{\mathsf{M}}\right) = e^{\mathrm{Tr}(\mathsf{M})} \qquad [E.92]$$

olduğunu gösteriniz.

Açıklama: Bu bağıntı M'nin köşegenleştirilebilen bir matris *olmaması* durumunda da doğrudur, ancak genel hal için kanıt biraz daha zordur.

(c) M ve N matrisleri sıra değiştiriyorsa,

$$e^{\mathsf{M}+\mathsf{N}} = e^{\mathsf{M}}e^{\mathsf{N}} \qquad [E.93]$$

olduğunu gösteriniz. Bulacağınız en basit karşıt örnek yardımıyla E.93 nolu denklemin, genel olarak, *sıra değiştirmeyen* matrisler için *doğru olmadığını* kanıtlayınız.

(d) H hermitsel ise $e^{i\mathsf{H}}$'nin üniter olduğunu gösteriniz.

DİZİN

21 santimetrelik çizgi, 285

A

açısal denklem, 135-140, 169
açısal momentumların toplanması, 184-189
açısal momentum, 160-171
  toplanması, 184-189
  sıra değiştirme bağıntısı, 161, 166-167,171
  korunum, 167
  özfonksiyonlar, 167-171
  özdeğerler, 160-167
  iç 171
  yörüngesel, 171
  spin, 171-190
adjoint, 98, 444
adyabatik seriler, 396
adyabatik süreç, 368-371
adyabatik teorem, 368-376
adyabatik yaklaşım, 368-393
agnostik (bilinemezci), 4, 420
Aharonov-Bohm etkisi, 384-391
Airy denklemi, 327
Airy fonksiyonu, 327-330
akı kuantumlanması, 387
alfa
  bozunması, 322-324
  parçacığı, 322-325
alfa bozunmasının Gamow teorisi, 322-324
Altın kural, 354
anlık itme yaklaşımı, 416-417
anormal manyetik moment, 273
anti hermitsel matris, 444
anti hermitsel operatör, 124
antisimetrik matris, 443
aralık, 227-228
Aspect, A., 426
assosiye Laguerre polinomu, 152-153
assosiye Legendre fonksiyonu, 136, 138, 196
çok ince yapı yarılması, 267, 283-285
atomik yörüngelerin lineer kombinasyonu, 305
atomlar, 210-218
ayar değişmezliği, 200
ayar dönüşümü, 200, 385
Ayılma zamanı, 85
ayırt edilebilir parçacıklar, 207
ayırtedilemeyen parçacıklar, 204
aynı anda köşegenleştirme, 453
ayrılabilen çözüm, 24-29, 60-65
azimutal açı, 134, 136, 150
azimutal kuantum sayısı, 139

B

bağ oluşturmama, 210
bağlanma enerjisi, 151, 203
Bağlanma, 210
bağlantı formülleri, 325-335
bağlı durumlar, 68-69, 71-73
  için varyasyon ilkesi, 299-304
  katlı, 87
  sonlu kare kuyu, 79-81
Balmer serisi, 158
band yapısı, 224-229
baryon, 189
basamak fonksiyonu, 77, 297
basit harmonik salınıcı denklemi, 31
baz, 437, 446-449
beklenen değer, 7, 15-16
  Ehrenfest teoremi, 18
  genelleştirilmiş istatistiksel yorum, 107-108
  Hamiltonyen, 37
  harmonik salınıcı, 50
  kararlı durumlar, 26
  zaman türevi, 115-116
beklenen tencere olayı, 432
belirsizlik, 3, 176-177, 428
belirsizlik ilkesi, 12-20, 110-118, 133
  enerji-zaman, 114-118
  genişletilmiş, 128
  genelleştirilmiş, 110-113
  minimum belirsizliğe sahip dalga paketi, 113
Bell eşitsizliği, 425-426
Bell teoremi, 423-428
Bell, John, 4, 423
benzer matrisler, 447-448

Berry fazı, 376-391
Berry, Michael, 380
Bessel fonksiyonu, küresel, 142-144, 401
beyaz cüce, 246
bileşen, 437
binomial katsayı, 234
Biot-Savart yasası, 271
bir vektörün normu, 439
birim matris, 444-445
birim operatör, 123
birim vektör,439
birinci dereceden düzeltme, 250, 299
Bloch teoremi, 224-227
Bloch, Felix, 2
Bohm David, 4, 421, 423-424
Bohr formülü, 150
Bohr magnetonu, 278-279
Bohr yarıçapı, 150, 269
Bohr enerjileri, 150, 267, 269
Bohr, Niels, 4, 112
Boltzmann çarpanı, 355-356
Boltzmann sabiti, 23, 240
Born serisi, 416-418
Born yaklaşımı, 399, 408-418
Born'un istatiksel yorumu, 2-5
Born-Oppenheimer yaklaşımı, 369
Bose yoğunlaşması, 243
Bose-Einstein dağılımı, 241
Boşluk, 229
boyut, 437
Bozon, 203-210, 232
bozunma kipleri, 357-359
bra, 122
Buffon'un iğnesi, 21
bulk (hacim) modülü, 223-224

C-Ç

Cauchy integral formülü, 410
cebrin temel teoremi, 450
Chambers, R.G, 389
Chandrasekhar limiti, 247
Chandrasekhar, S, 312-313
Clebsch-Gordan katsayıları, 187-189, 194
Coulomb engeli,322-323
Coulomb itmesi, 322-323
Coulomb potansiyeli, 145, 152-153, 211, 214, 400, 415
çakışkan spektral çizgiler, 193
çekirdek hareketi, 202-203, 211
çerçeve integrali, 410-412
çarpma parametresi, 394
çift fonksiyonu, 30, 32, 79-80
çift kuyu, 87-88, 336-338
çoklu dünyalar yorumu, 4, 443
Çökme, 5, 106, 176-177, 420-422, 428-429, 431, 433,

D

"diffuse"(d), 215
d'Espagnat, Bernard, 3
dağılım, 70
dağınım bağnıtısı, 65
dalga boyu, 18-19, 158
dalga fonksiyonu, 1-5, 12-14
  çökmesi, 5, 106, 176-177, 420-421, 428-429, 433
  serbest parçacık, 60-65
  hidrojen, 152-156
  sonsuz kare kuyu, 32
  momentum uzayı, 108-109, 191-192
  normlanması, 12-15
  konum uzayı, 108
  radyal, 133-134, 140-141, 146-157
  istatistiksel yorum, 2-5, 106-109
  deneme, 312-313
  kararsız parçacığın, 22
dalga sayısı, 398
dalga vektörü, 220, 414
dalga-parçacık ikilemi, 420
dalga paketi, 61-66
  Gauss, 67, 86, 113, 130
  minimum belirsizliğe sahip, 113
Darwin terimi, 274
de Broglie dalga boyu, 19, 23
de Broglie formülü,19, 60, 104
değerlik elektronu, 218
değişkenler,
  sürekli, 9-12
  kesikli, 5-9
  gizli, 3-4, 423-428
  ayırma, 24-25, 133-135
değişkenlere ayırma, 24-25, 133-135
değiştokuş integrali, 307
değiştokuş kuvveti, 207-210
değiştokuş operatörü, 205
delta fonksiyonu potansiyeli, 68-78, 224
  engeli, 76
  bağlı durum, 71-73
  çıkıntısı, 245, 256, 265
  hareketli, 89
  saçılma durumları, 73-76
  kabuk, 404, 408
  kaynak, 408
  kuyu, 70-76
denge, 230, 232
determinant, 445
dışarlama ilkesi, 204, 214, 218, 221, 228
Dieks, D., 429
diferansiyel saçılma kesidi, 395-396
dinamik faz, 379
dipol momenti,
  elektrik, 349
  manyetik, 178-179, 273-275

Dirac delta fonksiyonu, 68-78, 83, 89, 103-105, 254-256, 404, 408
Dirac denklemi, 276
Dirac notasyonu, 118-124
Dirac ortonormalliği, 103, 105
Dirac tarağı, 224-229
Dirac, P.A.M, 273
Dirichlet teoremi, 34, 66
doğrudan integral, 307
dolanık durum, 203, 422-423
doluluk sayısı, 231
donanımlı Hilbert uzayı, 104
dönen dalga yaklaşımı, 348
dönmelerin üreteci, 196-197
dönüm noktaları, 68, 316-317, 325-326, 332-333
dönüşüm
  hermitsel, 455, 458
  lineer, 93, 455
  üniter, 457-458
döteron, 290
döteryum, 290
dual uzay, 122, 236-137
düğüm noktası, 33
Düzenek, 216-217, 231

E

Ehrenfest teoremi, 18, 51, 89, 133, 167, 180, 371
Einstein, Albert, 3 ,351, 421-423, 427
  A ve B katsayıları, 355-356
  Bohr ve, 112
  EPR çelişkisi, 421-423.
  kütle-enerji formülü, 325
elektrik dipol geçişleri, 366-367
elektrik dipol ışıması, 349
elektrik kuadrupol geçişi, 366-367
elektromanyetik alan, 198-200, 349
elektromanyetik dalga, 348, 350
elementler, 442
elektron
  düzeneği, 216-217
  gaz, 218-224
  g-çarpanı, 273, 283
  manyetik dipol momenti, 272-273
elektrik dipol momenti, 291-292, 349
en olası düzenek, 7, 236-239
enerji
  bağlanma, 151
  korunum, 37, 118
  iyonlaşma, 151, 299, 303
  foton, 157-158, 243-244
  potansiyel, 384-391
  relativistik, 268
  ikinci dereceden, 255-257
enerji-zaman belirsizlik ilkesi, 114-118
EPR çelişkisi, 421-423, 426
eşbölüşüm teoremi, 248
eşlenik, 443-444
Etkin çekirdek yükü, 301-302
Etkin potansiyel, 140-141
Euler formülü, 29
Euler gamma fonksiyonu, 243

F

faz
  Berry, 380
  Dinamik, 379
  Geometrik, 379
  dalga fonksiyonu, 18, 26, 32, 39, 200, 380
faz hızı, 64
faz kayması, 405-408
Fermi Dirac dağılımı, 241-242
Fermi enerjisi, 221, 246
Fermi sıcaklığı, 223
Fermi yüzeyi, 221
Fermi Altın Kuralı, 354
Fermiyon, 203-206, 221, 232, 234-235
Feynman diyagramı, 418
Feynman-Hellmann teoremi, 288
foton, 158, 243-244, 350, 356
Foucault sarkacı, 377-378
Fourier dönüşümü, 61, 77, 108
  ters, 61
Fourier serisi, 34
Fourier numarası, 34, 104
Frobenius yöntemi, 52
fundamental (*f*), 215
füzyon, 313

G

g-çarpanı, 273, 285
  döteron, 290
  elektron, 273, 283
  Lande, 278
  Müyon, 285
  Pozitron, 285
  Proton, 283
Gamma fonksiyonu, 543
Gamow, George, 322
Gauss dalga paketi, 67, 86, 113, 130
Gauss fonksiyonu, 12, 68, 77, 113, 294-298, 310
geçen dalga, 74-75
geçiş, 157-158, 340-341
  izinli, 366-367
  yasak, 362, 366-367
geçiş olasılığı, 346-348
geçiş hızı, 353-354, 356
geçme katsayısı, 75, 82
gelen dalga, 74-75
genelleştirilmiş belirsizlik ilkesi, 110-113
genelleştirilmiş fonksiyon, 70
genelleştirilmiş istatistiksel yorum, 106-109
genişletilmiş belirsizlik ilkesi, 128

genlik, saçılma, 339
geometrik faz, 379-384, 390
geometrik seriler, 247-248
gerçekçi bakış açısı, 3-4, 176, 420-422
Örtme, 437
gözlemci, 5, 431
gözlenebilirler, 96-100, 102
  belirli durumlar, 98-100
  hermitsel operatöler, 96-98
  uyuşumsuz, 111-112
grafik çözümü, 80-81, 144
Green-Schmidt ortogonalleştirme işlemi, 102, 440
Green fonksiyonu, 408-412, 417-418
grup hızı, 64
grup teorisi, 188-189

H

halka üzerindeki boncuk, 87, 99, 260-261, 386-387
Hamiltonyen, 26-27, 42
  kesikli ve sürekli spektrum, 105-106
  helyum, 212-214
  hidrojen, 145
  relativistik düzeltme, 267-271
Hankel fonksiyonu, 401
Hannay açısı, 378
hayali etki, 428
hayali atom, 285
Heisenberg belirsizlik ilkesi, 18-20, 110-118, 133
Heisenberg resmi, 130
Helmholtz denklemi, 408-408, 411
Helyum, 212-214
  taban durumu, 299-304
  iyon, 214
  lastik bantlı, 311-312
Hermite polinomu, 56-57, 59
Hermitsel dönüşüm, 455, 458
Hermitsel eşlenik, 47, 98, 444
Hermitsel matris, 444, 448
hız, 16
  klasik, 60, 64-66
  grup, 64
  faz, 64
hidrojen iyonu (H^-), 303-304, 312-313
hidrojen molekül iyonu, 304-309
hidrojen molekülü, 209-210
hidrojenik atom, 158-159
Hilbert uzayı, 93-96, 104, 119
holonomik olmayan süreç, 376-378
Hooke yasası, 40
Hund kuralı, 216, 218
harmonik salınıcı, 40-59
  cebirsel yöntem, 42-51
  izin verilen enerjiler, 46, 334
  analitik yöntem, 51-59
  uyumlu durumlar, 127-128
  özdurumlar, 46
  tedirgenmiş, 254-255, 392-393
  üç boyutlu, 190
Hermitsel operatör, 96-98, 269-271
  sürekli spektrum, 100-101, 103-106
  kesikli spektrum, 100-103
  özfonksiyonlar, 100-106, 456
  özdeğerler, 100-106, 456
hidrojen atomu, 145-160
  izin verilen enerjiler, 145, 146
  bağlanma enerjisi, 151
  ince yapı, 266-276
  taban durumu, 150-151
  çok ince yapı, 283-285
  müyonik, 203, 285
  radyal dalga fonksiyonu, 146-157
  yarıçap, 149-151
  spektrum, 157-160
  Stark etkisi, 289-290, 297-298
  dalga fonksiyonları, 152, 154
  Zeeman etkisi, 146-157

I-İ

ısıl denge, 230, 232, 236-239
ısıl enerji, 222
ışıma bölgesi, 400
Işıma, 348-354
iç açısal momentum, 171
iç çarpım uzayı, 439
iç çarpım, 94-95, 438-440
ideal gaz, 239
idempotent operatör, 123
iki düzeyli sistemler, 341-348
iki kez katlılık, 257-261
ikinci dereceden düzeltme, 250-251,255-257,299,344-345
ilerletici, 418
indirgenmiş kütle, 202
indirme operatörü, 44-45, 162, 168-169
İnce yapı, 266-276
  sabiti, 267
  hidrojen, 266-276
  relativistik düzeltme, 267-271
  spin-yörünge çiftlenimi, 267, 271-276
istatistik, spin ve, 204
istatistiksel mekaniğin temel varsayımı, 230
istatistiksel mekanik, 230-245
istatistiksel yorum, 2-5, 106-109
iz, 448
izdüşüm operatörü, 122-123
izin verilen enerji, 27-28, 227-228
  bandları, 227-228
  sıçrayan top, 333
  delta fonksiyonlu kuyu, 73
  sonlu kare kuyu, 80-81
  harmonik salınıcı, 46, 54, 190, 334
  helyum atomu, 212-214
  hidrojen atomu, 145-146, 149, 274-275, 336

  sonsuz kübik kuyu, 135, 218-220, 262-263
  sonsuz küresel kuyu, 141-144
  sonsuz kare kuyu, 32
  potansiyel kuyusu, 319, 330-332
  kuvvet yasası potansiyeli, 335
izinli geçiş, 362, 366-367

J

jiromanyetik oran, 178-179
Jordan, Pascual, 3-4

K

"kopya yok" teoremi, 428-430
kararlı durumlar, 24-30
  delta fonksiyonlu kuyu, 76
  serbest parçacık, 60
  harmonik salınıcı, 49
  sonsuz kare kuyu, 30-32
  virial teoremi, 126
kabuklar, 214, 215
kaldırma operatörü, 44-45, 162, 168-169
kanonik momentum, 200
kanonik sıra değiştirme bağıntısı, 43, 133
kara cisim spektrumu, 243-245, 355
karakteristik denklem, 450, 454
kararsız parçacık, 22
karesi integre edilebilen fonksiyon, 13,94-95
kare kuyu
  çift, 87-88
  sonlu, 78-84
  sonsuz, 30-40
katlı (çakışık) durumlar, 87
katlı spektrum, 99, 102, 405
katlı olmayan tedirgeme teorisi, 249-257
katlı tedirgeme teorisi, 254, 257-266
katlılığın kaldırılması, 265
katlılık
  elektron , 205-206
  yüksek dereceden, 261-266
  basınç, 223, 247
  iki katlı, 257-261
Katı döner, 170
katılar, 23, 218-229
  bant yapısı, 224-229
  serbest elektron gazı, 219-224
katı küreden saçılma, 395-397, 403-404
katkılama, 229
katsayılar,
  Clebsh-Gordon, 187, 189, 194
  yansıma, 75
  geçme, 75
kendiliğinden salınma, 350-352, 355-363, 367
  uyarılmış durumların ömrü, 357-359
  seçim kuralları, 359-363
kedi çelişkisi, 430-431
kesikli değişken, 5-9
kesikli spektrum, 100-103
kesin durumlar, 290
kesit, 396-398
Ket, 122
Kısmi dalga analizi, 399-408
kısmi dalga genliği, 402
kısmi integrasyon, 16
kimyasal potansiyel, 241
kinetik enerji, 17, 267-271
klasik bölge, 316-320, 325-326
klasik elektron yarıçapı, 172
klasik hız, 60, 64-66
klasik saçılma teorisi, 394-397, 416-417
kofaktör, 445
komütatör, 43, 112
  açısal momentum, 161-162, 197-198, 276, 360-362
  kanonik, 43, 133
  matris, 444
  belirsizlik ilkesi ve, 111-112
konum
  özfonksiyonlar/özdeğerler, 104-105
  genelleştirilmiş istatistiksel yorum, 108-109
  operatör, 17
konum uzayı dalga fonksiyonu, 108
konum-momentum belirsizlik ilkesi, 111-113
Kopenhag yorumu, 4
korunumu
  açısal momentum, 167
  enerji, 37, 118
  olasılık, 22, 191
korunumlu sistem, 1
kovalent bağ, 209-210
köşe çarpanı, 418
köşegen form, 452-453
köşegenleştirme, 261-262, 452-453, 455
Kramer bağıntısı, 288-289
kristal , 225, 290
kritik sıcaklık, 243
Kronecker deltası, 33-34
Kronig-Penney modeli, 226-227
kuantum dinamiği, 340-341
kuantum elektrodinamiği, 273, 350-352
kuantum istatistiksel mekaniği, 230-245
kuantum noktaları, 313-314
kuantum sayısı, 139, 142
  açısal momentum, 160
  azimutal, 139
  uygun, 270, 277-279
  manyetik, 139
  temel, 149
kuantum sıçraması, 158, 340-341
kuantum statiği, 340-341
kuantum Xerox makinesi, 429
kuantum Zeno etkisi, 431, 434
kuark, 189

kutuplanma, 348, 353
kutupsal açı, 150-151
kuvvet serisi yöntemi, 42, 52, 147-149
kuvvet yasası potansiyeli, 335
kübik simetri, 290
küresel Bessel fonksiyonu, 142-144, 401
küresel Hankel fonksiyonu, 401
küresel harmonik, 139, 169
küresel koordinatlar, 133-145
  açısal denklem, 135-140
  radyal denklem, 140-145
  değişkenlere ayırma, 133-135
küresel Neumann fonksiyonu, 142-144
küresel simetrik potansiyel, 133, 415

L

Laguerre polinomu, 152-153
Lamb kayması, 267
Landau düzeyleri, 198
Lande'g çarpanı, 278
Langrange çarpanı, 236-237
Laplasyen, 132
Larmor formülü, 358-359
Larmor frekansı, 180
Larmor presesyonu, 179
Lazer, 351
LCAO tekniği, 305
Legendre fonksiyonu, 138
Legendre polinomu, 124, 136-137
Levi-Civita sembolü, 177
lineer bağımsızlık, 437
lineer cebir, 93-94, 435-458
  baz değişimi, 446-449
  özvektörler ve özdeğerler, 449-458
  iç çarpımlar, 438-440
  matrisler, 441-446
  vektörler, 435-438
lineer dönüşüm, 93, 96-97, 441-444
lineer kombinasyon, 27-28, 437
lineer öperatör, 96
Lorentz kuuvet yasası, 198-199, 385
Lyman serisi, 158

M

Mandelstam-Tamm formülasyonu, 116
manyetik akı, 380-382, 385-391
manyetik alan, 271-272, 349
manyetik dipol
  anormal moment, 273
  enerjisi, 179, 271
  üzerindeki kuvvet, 181-183
  momenti, 178-179, 272, 275
  geçişi, 366-367
manyetik kuantum sayısı, 139
manyetik rezonans, 365-366
matris, 94, 441-446
karakteristik denklem, 450
sütun, 443
eşlenik, 443-444
determinant, 445
köşegen form, 452-453
özvektörler ve özdeğerler, 449-455
elemanı, 120, 126, 442
fonksiyonu, 458
hermitsel eşlenik (adjoint), 444
hermitsel dönüşüm, 455-458
sanal, 444
ortogonal, 445
reel, 444
satır, 443
benzer, 447-448
aynı anda köşegenleştirilen, 453
tekil, 445
ters hermitsel, 444
spektrum, 450
spin, 173-174, 195
transpoze, 443
birim, 444-445
üniter, 445, 448
sıfır, 449
Maxwell denklemleri, 385
Maxwell-Boltzmann dağılımı, 241
medyan, 7-8
merdiven operatörleri, 42, 44-45, 162-164, 168-169
merkezkaç terimi, 141
Mermin, N. David, 4, 428
mezon, 172, 189, 421
minimum belirsizliğe sahip dalga paketi, 113
Misra, B., 432
molekül, 87, 209-210
momentum, 15-18
  açısal, 160-171
  kanonik, 200
  de Broglie formülü, 19-23
  özfonksiyonlar/özdeğerler, 103-104
  operatörü, 17-18, 42, 97-98, 103, 132
  aktarımı, 414
momentum uzayı dalga fonksiyonu, 108-109, 191-192
müyon katalizi, 313
müyon, 313
müyonik hidrojen, 203, 285
müyonyum, 285

N

nedensel etki, 427-428
Neumann fonksiyonu, 142-144, 401
noktasal çarpım, 438-440
normal matris, 453
normlama, 12-15, 37, 95
  serbest parçacık, 60
  harmonik salınıcı, 46-49
  hidrojen, 152

küresel koordinatlar, 138-139
iki parçacıklı sistemler, 201, 206
varyasyon ilkesi, 293-299
vektör, 439
dalga fonksiyonu, 12-15
normlanamayan fonksiyon, 13, 60, 68
nötrino salınımı, 122
nötron yıldızı, 247
ters doluluk, 351
nükleer manyetik rezonans, 366
nükleer yarı ömür, 324-325

O-Ö

olasılık, 5- 12
  Born'un istatistiksel yorumu, 2-5
  korunumu, 22, 191
  sürekli değişkenler, 9-12
  akımı, 21, 66, 191
  yoğunluğu, 10-11
  kesikli değişkenler, 5-9
  genelleştirilmiş istatistiksel yorum, 106-109
  yansıma, 75
  geçişi, 346-348
  geçme, 75
operatör, 17
  antihermitsel, 124
  sıra değiştiren, 24
  Dirac notasyonu, 120
  değiştokuş, 205
  Hamiltonyen, 27
  hermitsel, 96-98
  birim, 123
  merdiven, 42, 44-45, 162-164, 168-169
  lineer, 96
  indirme, 44-46, 162, 168-169
  momentum, 17-18, 42
  konum, 17, 104-105
  izdüşüm, 123
  kaldırma, 44-46, 162
optik teorem, 419
ortalama
  yönler üzerinden, 353-354
  polarizasyonlar üzerinden, 353-354
  değer, 7-8
ortalama değer, 7-9
ortodoks tavır, 3-4, 420-422
ortogonal matris, 445
ortogonallik, 33
  özfonksiyonlar, 101-102
  fonksiyonlar, 95
  Gram-Schmidt işlemi, 95
  hidrojen dalga fonksiyonları, 102, 440
  küresel harmonikler, 153
  vektörler, 439
ortohelyum, 213
ortonormal küme, 439
ortonormallik, 33, 49
  Dirac, 105, 123
  özfonksiyonlar, 103
  fonksiyonlar, 95
  vektörler, 439
ortorombik simetri, 290
ölçüm, 2-5, 36-37
  kedi çelişkisi, 430-431
  yıkıcı, 428-430
  genelleştirilmiş istatistiksel yorum, 106-109
  belirsizlik, 98
  ardışık, 125
  belirsizlik ilkesi, 112
ömür
  uyarılmış durum,357-359
örtüşme intagrali, 306
özdeğerler, 99, 261, 449-455
  açısal momentum, 160-167
  kesin durumlar, 99
  genelleştirilmiş istatistiksel yorum, 106-109
  hermitsel dönüşümler, 456
özdeş parçacıklar, 201-248
  katılar, 218-229
  istatistiksel mekanik, 230-245
  iki parçacıklı sistemler, 201-210
Özfonksiyonlar, 99
  açısal momentum, 167-171
  sürekli spektrum, 100-101, 103-106
  kesin durumlar, 99
  Dirac notasyonu, 118-124
  kesikli spektrum, 100-103
  hermitsel operatörler, 100-106
  uyuşumsuz gözlenebilirler, 111-112
  konum, 104-105
  momentum, 103-104
özspinörler, 174-175
özvektörler, 449-455, 456-458

P

parahelyum, 213
parlaklık, 397
Paschen serisi, 158
Paschen-Back etkisi, 279
Pasternack bağıntısı, 288
Pauli dışarlama ilkesi, 204, 214, 218-221, 228
Pauli spin matrisleri, 174, 177
Pauli, Wolfgang, 4
Perdeleme, 215
Periyodik Tablo, 214-218
Plancherel teoremi, 61, 66-67, 77, 104
Planck formülü, 158, 243-244, 285
Planck sabiti, 2
Planck siyah cisim formülü, 244-245, 355-356
principal (p), 215
potansiyel, 24
  kimsayal, 241
  Coulomb, 152-153

delta fonksiyonu, 68-78
etkin, 140-141
sonlu kare kuyu, 78-84
sonsuz kare kuyu, 30-31
Kronig-Penney, 227
Yansımasız, 90
Skalar, 384
küresel simetrik, 415
basamak, 83-84
vektör, 198-200
Yukawa, 310, 415
potansiyel kuyusu
dik duvarları olmayan, 332-333
tek dik duvarlı, 330-331
iki dik duvarlı, 318-319
pozitronyum, 203, 285
proton
g-çarpanı, 283
manyetik alan, 271

R

Rabi ters dönme frekansı, 347-348, 353
Radyal dalga fonksiyonu, 133-,134, 140-141, 146-157
Radyal denklem, 140-145
Ramsauer-Townsend etkisi, 82
Rayleigh formülü, 403
relativistik düzeltme, 247, 267-271
Rezonans eğrisi, 366
Riemann zeta fonksiyonu, 38, 243
Rodrigues formülü, 57, 136-137
Rutherford saçılması, 397, 415-416
Rydberg formülü, 158
Rydberg sabiti, 158

S-Ş

saçılma, 394-419
genliği, 399
açısı, 394-395
Born yaklaşımı, 408-418
klasik teori, 394-397
katı küreden, 394-395
düşük enerji, 414
matrisi, 90-91
kısmi dalga analizi, 399-405
faz kaymaları, 405-408
Rutherford, 397, 415-416
yumuşak küreden, 414
Yukawa, 415
saçılma süreçleri, 68-69, 73-76, 90-91
delta fonksiyonu, 73-74
sonlu kare kuyu, 81-84
tünelleme, 320-325
Saklı değişken, 3-4, 423-424
salma, 348-352, 356
satır matris, 443
Schrödinger denklemi, 1-2, 131-132
Helyum atomunun, 311-312
Hidrojen atomunun, 145
integral formu, 408-412
momentum uzayı, 130
normlama ve, 12-15
küresel koordinatlar, 131-145
zamana bağlı, 1-3,13,24-26,28,147-149,201-248
zamandan bağımsız,25-26, 132, 147, 202, 330
WKB yaklaşıklığı, 315, 339
Schrödinger kedisi, 430-431
Schrödinger resmi, 130
Schwarz eşitsizliği, 95, 113, 440
sech-kare potansiyeli, 89-90, 335
seçim kuralları, 359-363
self-adjoint matrisler, 444
serbest elektron gazı, 218-224
serbest elektron yoğunluğu, 221, 228
serbest parçacık, 59-67, 116-118
serbestlik derecesi, 248
sharp (s), 214, 215
Sıcaklık, 230, 240
sıçrayan top, 333
sıfır matris, 449
sıfır vektör, 99, 436
sınır koşulları, 31, 48, 71-72
delta fonksiyonlu kuyu, 71-73
sonlu kare kuyu, 79-81
sıra değiştiren operatörler, 42-43, 133
siklotron hareketi, 198
simetri
kübik, 290
ortorombik, 290
tetrogonal, 290
simetrik matris, 443
simetrileştirme, 205, 233
sinüzoidal dalga, 61
sinüzoidal tedirgeme, 346-348
spin-yörünge etkileşmesi, 273
skalar potansiyel, 384
skalarla çarpım, 436-437
skalarlar, 435-436
Slater determinantı, 210
S-matrisi, 90-91
soğurma, 348-351, 365
solenoid, 385-391
Sommerfeld, A., 218
sonsuz kare kuyu, 30-40
hareket eden duvar, 85, 370-371, 391-392
tedirgeme teorisi, 249-255
varyasyon ilkesi, 296-297
WKB yaklaşıklığı, 317-320
sonsuz kübik kuyu, 135, 219-221
sonsuz küresel kuyu, 141-142
spektral açılım, 124
spektrum, 450
kara cisim, 243-245

çakışan spektral çizgiler, 193
katlı, 99, 450
hidrojen, 243-245
bir matrisin, 193
spin, 171-190
aşağı, 173
dolanık durumlar, 422, 423
değiştokuş kuvvetleri, 210
matrisi, 173-174, 179, 195
bir, 178, 187
yarım, 173-178
tekli, 185
istatistik ve, 204
üçlü, 185
yukarı, 204
sıfır, 187
spinörler, 173, 196-197
spin-spin çiftlenimi, 284-285
spin-yörünge çiftlenimi, 267, 271-276
"soğuk" katı, 221, 223
sonlu kare kuyu, 78-84
sığ, dar, 80-81
geniş, derin, 80
standart sapma, 8-9
Stark etkisi, 289-291, 338-339
Stefan-Boltzmann formülü, 245
Stern-Gerlach deneyi, 181-183
Stirling serisi, 237
Stirling yaklaşıklığı, 237-238
Sudarshan, E.C.G., 432
süperiletken, 387
süpersimetrik kuantum mekaniği, 42
sürekli değişkenler, 9-12
sürekli spektrum, 100-101, 103-106
süreklilik denklemi, 191
sütun matrisi, 443

T

taban durumu, 32, 150-151
elementler, 217
helyum, 299-304
hidrojen atomu, 151, 192, 284, 412
hidrojen iyonu, 303-304, 312-313
hidrojen molekül iyonu, 304-309
sonsuz küresel kuyu, 142
sonsuz kare kuyu, 32, 296-297
lityum iyonu, 303-304
üst sınır, 293, 299
varyasyon ilkesi, 293-298
tam bir vektör kümesi, 437
tam iç çarpım uzayı, 94
tam olmama, 3, 423, 426
tamlığı,
özfonksiyonların, 33, 102-103
fonksiyonların, 33-36, 95-96
Hilbert uzayının, 94
kuantum mekaniğinin, 3
Taylor serisi, 41, 458
Taylor teoremi, 52
tedirgeme teorisi
birinci dereceden, 250-251
zamana bağımlı, 340-367
zamandan bağımsız, 249-292
tek fonksiyon, 32
tekil matris, 445
tekrarlama bağıntısı, 53-55, 148, 150
tekli durum, 185-186, 194, 210, 284-285, 422
temel kuantum sayısı, 149
terminoloji, atomik, 215-216
ters beta bozunumu, 247
ters doluluk, 351
ters Fourier dönüşümü, 61
ters matris, 445
tetragonal simetri, 290
Thomas presesyonu, 273
toplam kesit, 396-397, 402, 404
topluluk, 15
transfer matrisi, 91-92
transpoze, 443
tünelleme, 68, 76, 320-325
Stark etkisi, 338-339
türev oparetörü, 93

U-Ü

uyarılmış durumlar, 32
helyum, 21-214
sonsuz kare kuyu, 32
ömür, 357-359
uyarılmış salınma, 350-352
uygun durum, 257-261, 265
uygun kuantum sayısı, 270, 277-279
uyumlu durumlar, 127-128
uyumlu olmayan tedirgeme, 352-354
uyumsuzluk, 431
uyuşumlu gözlenebilirler, 111-112
uyuşumsuz gözlenebilirler, 111-112
uzayda ötelemelerin üreteci, 129-130
üçgen eşitsizliği, 440
üçlü durum, 185, 284-285
üniter matris, 445, 448
üretici fonksiyon, 59
üstün ışık etkisi, 427, 428

V

van der Waals etkileşmesi, 286-287
varyans, 9
varyasyon ilkesi, 293-314
helyumun taban durumu, 299-304
hidrojen molekül iyonu, 304-309
vektör, 93, 435-438
baz değişimi, 446-449
Dirac notasyonu, 118-119

birim, 439
sıfır, 436
vektör çarpım, 438-440
vektör potansiyel, 198-200
vektör uzayı, 435
virial teoremi, 126, 190-191

W

Wien yerdeğiştirme yasası, 244
Wigner Eugene, 5, 431
WKB yaklaşıklığı, 315-339
"klasik" bölge, 316-320
bağlantı formülleri, 325-335
tünelleme, 320-325
Wootters, William, 429

Y

Yalıtkan, 229
yansıma katsayısı, 75
yansımasız potansiyel, 90
yansıyan dalga, 74-75
yarıçap
Bohr, 150, 269
klasik elektron, 172
yarı iletken, 229
yarı ömür, 359
yarı kararlı durum, 362
yarılma, çok ince, 283-285
yarım harmonik salınıcı, 86, 331
yarım tamsayılı açısal momentum, 165, 169, 197-198, 203
yasak enerjiler, 227-228
yasak geçişler, 362, 366-367
Yerdeğiştirme operatörü, 129-130, 225
yerel olmama, 426-428
yerellik, 422, 424, 426-428
yıkıcı ölçüm, 428, 430
yoğunluk grafikleri, 153, 156
yörünge, 214
yörüngesel açısal momentum, 171
Yukawa potansiyeli, 310, 415-416
Yukawa saçılması, 415-416
yumuşak küreden saçılma, 414

Z

zamana bağlı tedirgeme teorisi, 273
Altın kural, 354
iki düzeyli sistemlerde, 341-348
zamana bağlı Schrödinger denklemi, 1-3, 13, 24-26, 28, 147-149, 201-248
zamandan bağımsız tedirgeme teorisi, 249-292, 299
katlı, 257-266
katlı olmayan, 249-257
zamandan bağımsız Schrödinger denklemi, 25-26, 132, 147, 202, 330
kararlı durumlar, 18-30
zamanda ötelemelerin üreteci, 129-130
Zeeman etkisi, 277-283
ara alan değerleri için, 281-283
kuvvetli alanlı, 279-280
zayıf alanlı, 277-279
Zeno etkisi, 431-434
Zurek, W. H., 429