A.Ü.F.F. Döner Sermaye
İşletmesi Yayınları No:1

Stephen
Gasiorowicz

kuantum fiziği

Stephen Gasiorowicz
Minnesota Universitesi

kuantum fiziği

Çeviri: Prof. Dr. Ayla Çelikel
Redaksiyon: Yrd. Doç. Dr. Hanash Gür
Ankara Üniv. Fen Fakültesi, Fizik Müh. Bölümü

Çevirenin Önsözü

1970 'lerin ilk yıllarında Ankara Üniversitesi Fizik Bölümü öğrencileri, Berkeley Üniversitesi'nde hazırlanmış beş ciltlik diziyi, o zamanki tüm ögretim üyeleri ve yardımcılarının büyük bir özveri ile tıpkı basımını Türkçe'ye kazandırmaları sonucunda, bölük pörçük ders notlarından kurtulup düzeyli ve kendi içinde tutarlı ders kitaplarına kavuşmuşlardı. S. Gasiorowicz'in 1974 yılında John Wiley & Sons yayınları arasında çıkan *Quantum Physics* kitabı , elden geldiğince basit tutulmuş matematiksel yapısı ile lisans düzeyindeki boşluğu doldurmak üzere, o yılların heyacanı ile Türkçe'ye çevrilmiş, ancak telif ücreti ödenemediğinden uzun yıllar teksir halinde kullanılmıştır. İlk baskısı Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Döner Sermaye Yayınları arasında 1991 yılında yapılan kitap , ögrenciyi ileri düzeydeki konuları işlemeye hazırlama özelliği ile diğer üniversitelerde de kullanılmaya başlayınca 1995 yılında ikinci ve şimdi 2000 yılında üçüncü baskıya gereksinim doğmustur.

Soyut kavramların en kolay kişinin ana dilinde özümsendiği gerçeği, geride kalan çeyrek yüzyılda yayınlanan pek çok değerli kitabın da Türkçe'ye kazandırılmasının önemini ortaya koymaktadır. Fizik ögrencilerinin uzak olmayan bir gelecekte dünyada yayınlanan kitapları Türkçe okuma olanağına kavuşmaları dileğiyle...

Ocak, 2000
Ankara

İÇİNDEKİLER

Bölüm 1: Klasik Fiziğin Sınırları 7
Siyah cisim ışıması: Wien ve Rayleigh-Jeans yasalar; Planck formülü. Fotoelektrik olay. Compton olayı. Elektron kırınımı - Bohr atomu: postülatlar; denel sonuçlar; Karşılığı bulunma ilkesi. Dalga-Parçacık problemi.

Bölüm 2: Dalga paketleri ve Kesinsizlik Bağıntıları 27
Gaussiyen dalga paketi; paketlerin yayılması; grup hızı; De Broglie bağıntısı. Kesinsizlik bağıntıları; Bir elektronun konumunun ölçülmesi; çift yarık deneyi; Bohr atomundaki yörüngelerin 'gerçekliği'; enerji-zaman kesinsizlik bağıntısı Sayısal kestirimler için bağıntıların kullanılması.

Bölüm 3: Schrödinger Dalga Denklemi 45
Özgür parçacık denklemi. Olasılık yorumu. Akı korunumu. Beklenen değerler. Momentum işlemcisi. Beklenen değerin gerçekliği. Bir potansiyel içindeki parçacığın denklemi.

Bölüm 4: Özfonksiyonlar ve Özdeğerler 57
Enerji özdeğer denklemi. Kutu içinde parçacık. Özdeğer ve özfonksiyonlar; özfonksiyonların dikliği; açılım postülatları ve açılım katsayılarının yorumu. Parite. Momentum özfonksiyonları; boylandırılamaz durumlar; katmerlilik ve eş zamanlılık özfonksiyonları.

Bölüm 5: Bir Boyutlu Potansiyeller 75
Potansiyel basamağı; yansıma ve geçiş katsayıları. Potansiyel kuyusu ve bağlı durumlar. Potansiyel engeli; sızıp geçme; Soğuk yayım: ince tabakalardan sızıp geçme; alfa bozunumu. Moleküllerin bir boyutlu modeli ve delta fonksiyonu potansiyeli. Kronig-Penney modeli. Harmonik salıngan.

Bölüm 6: Dalga Mekaniğinin Genel Yapısı 111
Özfonksiyonlar ve açılım teoremi; vektör uzayları ile benzerlik. Çizgisel işlemciler; hermitik işlemciler; tamlık katmerlilik; değiş edebilen gözlenebilirlerin tam kümesi. Kesinsizlik bağıntıları. Kuantum kuramının klasik sınırı.

Bölüm 7: Kuantum Mekaniğinde İşlemci Yöntemleri 127
Harmonik salıngan problemi; arttırma ve eksiltme işlemcileri; özdurum ve özdeğerler. Dalga fonksiyonunun olasılık genliği olarak yorumu. İçlemciler cinsinden bir sistemin zaman içindeki gelişimi; Schrödinger ve Heisenberg görünüleri.

Bölüm 8: N Parçacık Sistemleri 141

N parçacık sistemleri için Schrödinger denklemi. Momentum korunumu; kütle merkezi hareketinin ayrılması; indirgenmiş kütle. Özdeş parçacıklar; yer değiştirme altında bakışım. Pauli ilkesi. Bir kutu içinde Fermiyonlar ve Bozonlar; Fermi enerjisi.

Bölüm 9: Üç Boyutlu Schrödinger Denklemi 155
Kütle merkezi hareketinin ayrılması; dönmeler altında değişmezlik; açısal momentumun ayrılması. Radyal denklem. Üç boyutlu kutu için Fermi enerjisi.

Bölüm 10: Açısal Momentum 167
L^2 nin ifadesi; L_z ve L^2 nin özdeğer probleminin çözümü için cebirsel yöntem. Arttırma ve eksiltme işlemcileri; Legendre fonksiyonları.

Bölüm 11: Radyal Denklem 179
Başlangıçtaki davranış; büyük r'ler için davranış. Özgür parçacık; küresel Bessel fonksiyonları; gelen ve giden küresel dalgalar; evre kaymaları. Kare kuyu: bağlı durumlar: derin kuyular; kabuk yapısı; sürekli çözümler.

Bölüm 12: Hidrojen Atomu 195
Radyal denklemin basitleştirilmesi. Kuantum sayıları; katmerlilik. Dalga fonksiyonları ve "yörüngelerle" bağıntıları.

Bölüm 13: Elektronların Elektrik Alanda Etkileşmesi 209
Maxwell denklemleri. Elektronların vektör potansiyel bağlaşımı. Biteviye bir mağnetik alan içindeki elektronların denlemi. Normal Zeeman olayı. Biteviye bir mağnetik alanda elektron hareketi. Karşılığı bulunma ilkesinin açıklanması. Akı kuantumlanması. Bohm-Aharanov olayı.

Bölüm 14: İşlemciler, Matrisler ve Spin 227
Harmonik salıngan işlemcilerinin matris gösterimi. 1 açısal momentum işlemcisinin matris gösterimi. Spin 1/2 matrisleri; spinörler. Bir mağnetik alan içindeki spinin presesyonu. Paramağnetik rezonans.

Bölüm 15: Açısal Momentumların Toplanması 243
İki spin 1/2 nin toplamı; tekli ve üçlü fonksiyonları. Spin yörünge açısal momentum toplamı. Dışarlama ilkesi ve açısal momentum durumları.

Ekler A: Fourier Tümlemi ve Delta Fonksiyonları
B: İşlemciler

Not: Kitabın kalan bölümleri ikinci cilt olarak basılacaktır.

Bölüm 1

KLASİK FİZİĞİN SINIRLARI

Ondokuzuncu yüzyılın sonları ve yirminci yüzyılın başları fizikte bir bunalıma tanık oldu.Bir dizi deneysel sonuç klasik fizik ile bağdaşması tamamıyla olanaksız kavramlar gerektiriyordu.Sonunda,köklü varsayımlar ve parlak deneylerin büyüleyici etkileşimiyle bu kavramların gelişmesi Kuantum kuramına yol açtı[1].Bu bölümdeki amacımız,sözünü ettiğimiz bunalımın nedenlerini anlatmak ve sonradan anlaşılan önemlerini gözönünde tutarak,bu yeni kavramları sergilemektir.Tarihsel sıra bakımından doğru olmamakla birlikte,sergilememiz kuantum kuramına geçişi okur için daha az gizemli yapacaktır.Işınımın parçacık özelikleri,maddenin dalga özelikleri ve fiziksel niceliklerin kuantumlanması gibi yeni kavramlar inceleyeceğimiz aşağıdaki olaylardan çıkacaktır.

A. Siyah Cisim Işıması

Bir cismin,ısıtıldığında ışıma yaptığı görülür.Denge halinde,yayınlanan ışık ν frekanslarının bütün spektrumunu kaplar; spektrumsal dağılım hem frekansa ya da eşdeğer olarak ışığın λ dalgaboyuna,hem de sıcaklığa bağlıdır. Birim zamanda birim yüzeyden yayınlanan λ dalgaboyundaki enerji olarak,yayınlama gücü denen bir $E(\lambda,T)$ niceliği tanımlanabilir. λ dalgaboyundaki gelen ışınımdan cismin soğurduğu kesir de,A soğurganlığı olarak tanımlanır.Isıl ışıma alanındaki kuramsal araştırma 1859'da Kirchhoff'un çalışmasıyla başladı.Kirchhoff verilen bir λ için,E yayınlama gücünün A soğurganlığına oranının tüm cisimler için aynı olduğunu gösterdi.Kirchhoff yayınlayıcı ve soğurucu olarak paralel iki levha gözönüne aldı; ve denge koşulundan,yayınlanan enerjinin soğurulan enerjiye eşit olduğunu (her λ için),dolayısıyla da E/A oranlarının her iki levha için aynı olması gerektiğini gösterdi.Bundan kısa bir süre

[1] Kuantum kuramının gelişiminin ilginç bir öyküsü,M.Jammer,The Conceptual Development of Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York, 1966'da bulunabilir.

sonra da,bir siyah cisim için,E (λ, T) fonksiyonunun evrensel bir fonksiyon olduğunu gözledi; siyah cisim , üstüne düşen tüm ışınımı tamamen soğuran(yani A = 1) bir yüzey olarak tanımlanır.

Bu fonksiyonu inceleyebilmek için olabilecek en iyi siyah cisim ışınımı kaynağını elde etmek zorunludur.Bu sorunun kılgın bir çözümü bir T sıcaklığına kadar ısıtılmış kapalı bir hacımdaki küçük bir delikten çıkan ışınımı dikkate almaktır.Kovuğun iç yüzeyinin pürüzleri gözönüne alındığında,deliğe düşen herhangi bir ışınımın yeniden ortaya çıkma şansı olmadığı açıktır.Böylece delikle gösterimlenen yüzey hemen hemen bir "tam soğurucu"dur ve sonuç olarak bu delikten gelen ışınım gerçekten "siyah cisim ışınımı"dır.Deliğin yeterince küçük olması koşuluyla,bu ışınım kovuğun duvarlarına düşen ışınım kadar olacaktır.Bundan dolayı,önce duvarları T sıcaklığında olan bir kovuğun içindeki ışınım dağılımını anlamamız zorunludur.

Kirchhoff termodinamiğin ikinci yasası uyarınca kovuk içindeki ışınımın, eşyönlü olacağını,yani akının yöne bağlı olmayacağını gösterdi.Ayrıca ışınımın tekdüze yani her noktada aynı olacağını;ve bunların tümünün,aynı sıcaklıktaki kovuklarda her dalgaboyu için aynı olacağını gösterdi.[2] Yayınlama gücünün kovuk içindeki $u(\lambda, T)$ enerji yoğunluğuna bağlı olduğu,basit geometrik düşünceler kullanılarak gösterilebilir.Bu bağıntı,

$$u(\lambda, T) = \frac{4\, E(\lambda, T)}{c} \qquad (1\text{-}1)$$

dir.Enerji yoğunluğu kuramsal ilgiye konu olan bir niceliktir ve daha iyi anlaşılabilmesi,1894'de genel düşüncelerden hareket ederek[3],enerji yoğunluğunun

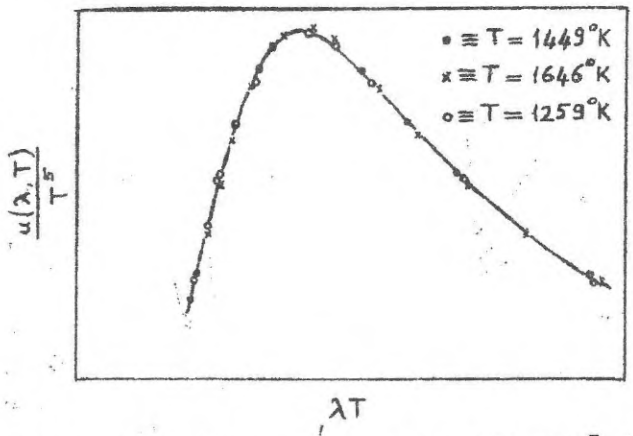
$$u(\lambda, T) = \lambda^{-5} f(\lambda T) \qquad (1\text{-}2)$$

biçiminde olacağını gösteren Wien'nin çalışmaları ile mümkün olmuştur.Burada f hâlâ bir tek değişkenin bilinmeyen bir fonksiyonudur.Daha elverişli olduğundan, λ yerine frekansın fonksiyonu olan $u(\nu, T)$ enerji yoğunluğu kullanılırsa,

$$u(\nu, T) = u(\lambda, T) \left| \frac{d\lambda}{d\nu} \right| = \frac{c}{\nu^2} \; u(\lambda, T) \qquad (1\text{-}3)$$

[2] Bu konulara bir çok modern fizik ve istatistik fizik ders kitabında yer verilmiştir.Kaynaklar bu bölümün sonunda bulunmaktadır.

[3] Wien adyabatik olarak büzülen kusursuz yansıtıcı küresel bir kovuğu gözönüne aldı. λ'nın fonksiyonu olarak,enerjinin yeniden dağılımı yansımadaki Doppler kaymasının sonucu olmalıydı.Bak. F.K. Richtmyer,E.H.Kennard and J.N. Cooper,Introduction to Modern Physics, McGraw-Hill,New York,1969, Bölüm V .



Şek.1-1. Denk.1-2'nin denel doğrulaması; $u(\lambda,T)/T^5$ 'i λT 'nin evrensel bir fonksiyonu olarak verir.

olması gerçeğinden,Wien yasası

$$u(\nu,T) = \nu^3 g\left(\frac{\nu}{T}\right) \qquad (1\text{-}4)$$

biçimini alır.Deneyle doğrulanan bu yasanın (Şek.1-1) sonuçları iki tanedir:

1. Siyah cisim ışınımının herhangi bir sıcaklıktaki spektrumsal dağılımı verilirse,başka herhangi bir sıcaklıktaki dağılım yukardaki ifade yardımıyla bulunabilir.

2. f (x) — ya da eşdeğer olarak g(x) — fonksiyonunun herhangi bir $x > 0$ değeri için bir maksimumu varsa,enerji yoğunluğu ve dolayısıyla yayınlama gücünün maksimum olduğu λ_{mak} dalgaboyu

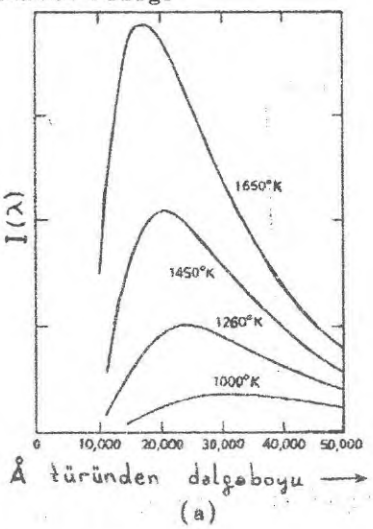
$$\lambda_{mak} = \frac{b}{T} \qquad (1\text{-}5)$$

biçimindedir,burada b evrensel bir sabittir.

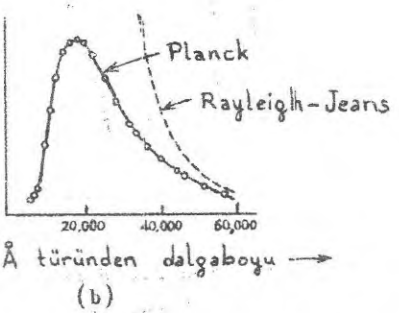
Wien, $g(\nu/T)$ 'nin biçimini öngörmek için,artık tarihçilerden başkasını ilgilendirmeyen bir model kullandı.Bulduğu biçim

$$g(\nu/T) = Ce^{-\beta\nu/T} \qquad (1\text{-}6)$$

idi,ve çok dikkate değer olarak,iki ayarlanabilir parametresi olan bu biçim yüksek frekans(alçak dalgaboyu) verilerine çok iyi uyuyordu.Ancak bu formül



(a)



(b)

Şek.1-2. (a) Çeşitli sıcaklıklardaki bir siyah cismin ışıdığı gücün dağılımı. (b) 1600° K 'deki verilerin, Planck ve Rayleigh-Jeans formülleri ile karşılaştırılması.

klasik fiziğin bazı çok genel kavramları ile uyuşmuyordu. 1900 yılında Rayleigh,

$$u(\nu,T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \qquad (1\text{-}7)$$

sonucunu çıkardı. Burada $k = 1{,}38 \times 10^{-16}$ erg/derece Boltzmann sabiti ve $c = 3.00 \times 10^{10}$ cm/sn ışık hızıdır. Formülün çıkarılmasında kullanılan dayanaklar şunlardı : (1) Enerji eşbölüşümünün klasik yasası ; buna göre dengede bulunan sözkonusu dinamik sistem için serbestlik derecesi başına ortalama enerji kT dir[4], ve (2) Bir kovuğa hapsedilmiş (ν , $\nu + d\nu$) frekans aralığındaki elektromagnetik ışınımın kip sayısının (yani serbestlik dereceleri sayısının) hesaplanması.[5]

[4] Eşbölüşüm yasası serbestlik derecesi başına enerjinin kT/2 olacağını öngörür. Bir salınan için-ki elektromagnetik alanın kipleri basit harmonik salınanlardır-kinetik enerjiden gelen kT/2 katkısına, aynı büyüklükte bir potansiyel enerji katkısı eşlik eder ve sonuç kT olur.

[5] Bu sonuç bize yine gerekecek ve Böl. 23'te çıkaracağız. Kip sayısı $4\pi\nu^2/c^3$ dür, ve enine elektromagnetik dalgaların iki boyutlu harmonik salınama karşılık gelmesi nedeni ile, bu sayı fazladan bir 2 çarpanı ile çarpılır.

(1-7) Rayleigh-Jeans yasası (yasanın çıkarılmasında, Jeans'in katkısı azdır) yüksek frekanslarda deneye uymaz, fakat alçak frekanslardaki denel eğriler (Şek.1-2) ile uyuşur; Wien formülü ise yüksek frekanslarda iyi çalışmaktadır. Rayleigh-Jeans yasası, öngördüğü toplam enerji yoğunluğunun (tüm frekanslar üzerinden tümlenen ı) sonsuz olmasından dolayı, genel anlamda doğru değildir.

1900'de Max Planck, yüksek frekans Wien formülü ile alçak frekans Rayleigh-Jeans yasasının arasını zekice doldurarak, bir formül buldu. Bu formül

$$u(\nu,T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} \tag{1-8}$$

dir, burada h Planck sabiti ayarlanabilir bir parametredir, sayısal değeri $h = 6.63 \times 10^{-27}$ erg-sn olarak bulunmuştur. Bu yasa, $\nu \to 0$ olduğunda Rayleigh-Jeans yasasına yaklaşır; ve frekans büyük iken, ya da daha doğrusu, $h\nu \gg kT$ olduğu zaman

$$u(\nu,T) = \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-h\nu/kT} \left(1 - e^{-h\nu/kT}\right)^{-1}$$

$$\cong \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-h\nu/kT} \tag{1-9}$$

biçimine indirgenir. Planck'ın (1-8) formülünü, kip sayısı [bunu (1-7)'den, enerji yoğunluğunu kT 'ye bölerek elde ederiz] ile, serbestlik derecesi başına ortalama enerji olarak yorumlanabilen başka bir çarpanın çarpımı biçiminde,

$$u(\nu,T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

$$= \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \frac{h\nu / kT}{e^{h\nu/kT} - 1} \tag{1-10}$$

olarak yeniden yazalım. Böylece, frekansların kT/h ile karşılaştırıldığında küçük o madıkları zaman klasik eşbölüşüm yasasının değiştiğini görürüz. Eşbölüşüm yasasındaki bu değişim, kiplerin frekanslarına bağlı bir ortalama enerjisi olduğunu, ve yüksek frekans kiplerinin ortalama enerjisinin çok küçük olduğunu gösterir. Bu etkin kesilim Rayleigh-Jeans yoğunluk formülündeki güçlüğü ortadan kaldırır: birim hacımlı bir kovuktaki toplam enerji artık sonsuz değildir, ve

$$U(T) = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty d\nu \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

$$= \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^\infty \frac{(h\nu/kT)^3 \, d(h\nu/kT)}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

$$= \frac{8\pi k^4}{h^3 c^3} T^4 \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} \tag{1-11}$$

buluruz.Bu tümlev hesaplanabilir,[6] ve sonuç olarak birim hacım başına toplam ışınım enerjisinin,Stefan-Boltzmann ifadesi olan

$$U(T) = \alpha T^4 \qquad (1\text{-}12)$$

elde edilir;burada a = 7,56 x 10^{-15} erg/cm^3 derece^4, dir.Bu sonuç,baştaki sayısal sabit dışında termodinamik usłamlama ile çok önceden de çıkartılmıştır. Asıl eşbölüşüm yasasından uzaklaşma hiç beklenmedik birşey değildi.Bunun bir sonucu öz ısıların Dulong-Petit yasasıydı.Tüm katılar için,atom(ya da molekül) ağırlıkları ile öz ısıların çarpımının sabit olduğunu deyimleyen bu yasa ile uyuşmazlıkların gözlenmesi 1872 yılına kadar uzanıyordu.[7] Bu uyuşmazlıklar öz ısının alçak sıcaklıklarda azaldığını gösteriyordu.[8]

Formülünün bu kesin başarısı Planck'ı,onun kaynağını araştırmaya yöneltti; ve iki ay içinde,elektromagnetik alanın her bir kipine karşılık gelen enerjinin(kT ortalama değeri ile) sürekli olarak değil,bunun yerine bir ε en küçük enerji kuantumunun tam katları olarak değiştiğini varsayarsa,formülü çıkarabileceğini buldu.Bu koşullar altında,T sıcaklığında dengede olan bir sistem için,

$$P(E) = \frac{e^{-E/kT}}{\sum_E e^{-E/kT}} \qquad (1\text{-}13)$$

Boltzmann olasılık dağılımı kullanılarak,her bir kipe karşılık gelen ortalama enerjinin hesabı,

$$\bar{E} = \sum_E EP(E) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\varepsilon\, e^{-n\varepsilon/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\varepsilon/kT}}$$

[6] $$\int_0^\infty dx\, x^3 (e^x - 1)^{-1} = \int_0^\infty dx\, x^3 e^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+1)^4} \int_0^\infty dy\, y^3 e^{-y} = 6 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{15}$$

[7] Eş bölüşüm yasasına göre N salınganlı bir topluluğun (aralarında esnek kuvvetler olan atomların oluşturduğu bir örgü bu şekilde düşünülür) enerjisi 3NkT dir; katı içindeki salınganlar,kapalı bir ortamdaki ışınım gibi iki boyutlu değil üç boyutlu olduğundan 3 çarpanı vardır.Bir molün öz ısısı ise,T'ye göre türev alınıp N = N_0 Avagadro sayısının konulmasıyla elde edilir.Böylece $C_v = 3N_0 k = 3R$ olur,burada R = 8,28 x 10^7 erg/derece 'dir.

[8] Öz ısılar,Bölüm 20'de kısaca tartışılacaktır.

$$= \frac{-\varepsilon \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}} \Bigg|_{x = \varepsilon/kT}$$

$$= \varepsilon \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} \Bigg|_{x = \varepsilon/kT}$$

$$= \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/kT} - 1} \qquad (1\text{-}14)$$

sonucunu verir. Bu sonuç,

$$\varepsilon = h\nu \qquad (1\text{-}15)$$

özdeşlemesini yapmak ve kip sayısını değiştirmemek koşuluyla (1-10) ile uyuşur. Planck kovuk duvarlarındaki atomların, bilinmeyen bir nedenle, $nh\nu$ ($n = 1,2,3,\ldots$) enerjili "kuantumlar" halinde ışıma yaptığı savını öne sürdü. Bir kaç yıl sonra Einstein elektromagnetik ışınımın, $h\nu$ enerjili enerji kuantumlarının bir topluluğu gibi davrandığını ortaya koydu.[9] Planck'ın savının tutarlılığı da böylece sağlandı.

Kuantum başına taşınan enerji son derece küçüktür. Optik bölgedeki ışık, örneğin $\lambda = 6000\ \text{Å}$ için,

$$h\nu = h\frac{c}{\lambda} = \frac{6{,}63 \times 10^{-27} \times 3{,}00 \times 10^{10}}{6 \times 10^{-5}} \simeq 3.3 \times 10^{-12}\ \text{erg}$$

dir. Buna göre, 100 watt'lık bir kaynağın yayınladığı, bu dalgaboyundaki ışık kuantumlarının sayısı

$$N = \frac{100 \times 10^{7}}{3.3 \times 10^{-12}} \simeq 3 \times 10^{20}\ \text{kuantum/sn}$$

dir. Bu kadar çok sayıda kuantum bulunduğundan, ışığın parçacık doğasını doğrudan doğruya göremeyişimizin şaşılacak bir yanı olmasa gerekir ; makroskopik boyutlarda klasik optikten bir sapmanın beklenemiyeceğini göreceğiz. Yine de, Planck'ın kendi formülüne verdiği anlam, bizim ışınım konusundaki görüşlerimizi kökünden değiştiriyor.

B. Fotoelektrik Olay

Planck formülü ne kadar başarılı olduysa, bunun sonucu olan ışınımın kuantumlu doğasını anlamak da o kadar zor oldu. Bu kavramın benimsenmesine önemli bir katkı Albert Einstein'ın çalışmasından geldi ; Einstein 1905'de, görünür ve mor-

[9] Verilen bir ν frekansında istenen her tam sayı kadar kuantum bulunabilir, dolayısıyla $n = 0,1,2,3,\ldots\ldots$ olmak üzere enerji $nh\nu$ değerlerini alabilir.

ötesi ışık ile aydınlatılan metallerde gözlenen bazı değişik özelikleri açıklamak için,ışığın kuantumlu doğası kavramını kullandı.

Fotoelektrik olayını,1887'de Hertz bulguladı.Hertz,elektromagnetik dalgalar konusundaki ünlü deneyleri ile uğraşırken,ikincil devredeki kıvılcım aralığının uçları birincil devredeki kıvılcımdan gelen morötesi ışıkla perdelendiği zaman,ikincil devredeki indüklenmiş kıvılcımın uzunluğunun kısaldığını buldu.Hertz'in gözlemleri büyük ilgi çekti ve yapılan başka deneyler ile aşağıdaki gerçekler ortaya çıkarıldı:

1. Parlatılmış metal levhalar ışınlandığında elektron yayınlarlar[10]; pozitif iyon yayınlamazlar.

2. Levhaların elektron yayınlayıp yayınlamamaları ışığın dalgaboyuna bağlıdır.Genel olarak metalden metale değişen bir eşik değeri vardır: Yalnız, frekansı verilen eşik frekansından büyük olan ışık bir fotoelektrik akımı doğurur.

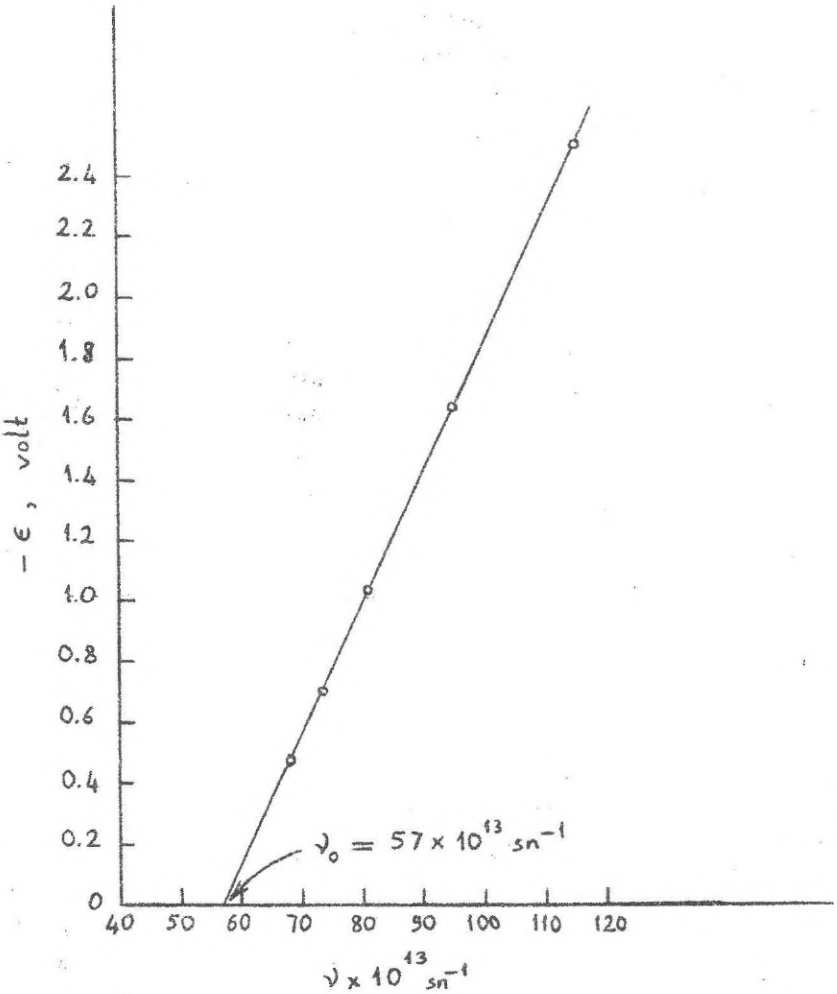
3. Akım oluşuyorsa,onun büyüklüğü ışık kaynağının yeğinliği ile orantılıdır.

4. Fotoelektronların enerjileri ışık kaynağının yeğinliğinden bağımsızdır,fakat gelen ışığın frekansına çizgisel olarak bağlıdır.

Fotoelektrik olay klasik elektromagnetik kuram çerçevesinde anlaşılabilmelidir; çünkü metallerde elektronların bulunduğu bilinir,ve bunların ışınım soğurarak ivmeleneceği düşünülebilir.Bununla birlikte,olayın frekans bağımlılığı bu çerçeve içinde anlaşılamaz.Bir elektromagnetik dalganın taşıdığı enerji, kaynağın yeğinliği ile orantılıdır ve frekansın enerji ile hiçbir ilgisi yoktur.Bundan başka,olayın klasik bir açıklaması,tek tek fotoelektronlarda toplanan enerji yoğunlaşmalarını kapsamalıdır.Ayrıca da bu açıklamada,bu yoğunlaşmalar nedeni ile,yeğinlik azaldıkça gecikme artmak üzere,ışınımın gelişi ile elektronun ayrılışı arasında bir zaman gecikmesi bulunmalıdır.Gerçekte ise böyle bir gecikme,gelen ışınım çok düşük yeğinlikteyken bile gözlenmemiştir; böyle bir gecikme varsa da,10^{-9} sn'den daha büyük değildir.

Einstein, ν ışığın frekansı olmak üzere,ışınımı $h\nu$ enerjili kuantumlardan oluşan bir topluluk olarak düşündü.Bir tek kuantum bir elektron tarafından yutulursa—yukarda sözünü ettiğimiz 10^{-9} saniyelik üst sınırdan daha kısa zaman alan bir süreçle—,elektronun enerjisi bir $h\nu$ miktarı kadar artar.Bu enerjinin bir kısmı elektronu metalden ayırmaya harcanacaktır.W iş fonksiyonu denen bu enerji miktarının metalden metale değişmesi beklenebilir,ancak elektron enerjisinden bağımsız olmalıdır.Geri kalan enerji elektronun kinetik enerjisini sağlar.Olay böyle betimlendiğinde,elektronun v hızı ile ışığın ν frekansı

[10] Böyle olduğu , e/m ölçümü ile saptanmıştı.



Şek.1-3 Metalden(lityum) çıkan elektron akımını durdurmak için gerekli geciktirici potansiyelin,ya da eşdeğer olarak,elektron kinetik enerjisinin,gelen ışığın frekansına göre değişimini gösteren fotoelektrik olay verileri.Doğrunun eğimi h/e 'dir.

arasında

$$\frac{1}{2} mv^2 = h\nu - W \qquad (1\text{-}16)$$

bağıntısının olması beklenir.Bu formül,eşik etkisini ve elektronun kinetik enerjisi ile,frekans arasındaki çizgisel bağıntıyı kapsar.Akım ile kaynak yeğinliği arasındaki orantı da,foton denilegelen ışık kuantumlarına dayanarak anlaşılabilir:

Daha yeğin bir ışık kaynağı daha çok foton yayınlar ve bunlar da daha çok elektron açığa çıkarırlar.

Kapsamlı deneyler yapan Millikan,Einstein'in formülünün doğruluğunu kanıtladı(Şek.1-3).Millikan deneyleri ve daha önceki deneyler şu gerçeği gösterdi: Işık bazen bir parçacıklar topluluğu gibi davranır ve bu "parçacıklar" bireysel olarak davranış gösterebilirler.Böyle olunca,tek bir fotonun varlığını düşünebilme ve özeliklerini araştırma olanağı doğmaktadır,Bu deneylerin bir yan ürünü ise metaller konusunda elde edilen bilgiler oldu.W'nin birkaç elektron volt(1 eV = 1,6 x 10^{-12} erg) basamağında olduğu ve bunun metallerin öteki özelikleri ile uygunluk sağladığı bulundu.

C. Compton Olayı

Işınımın parçacık doğası konusunda en dolaysız kanıtı veren deney Compton olayı denilen deneydir.Compton verilen bir dalgaboyundaki ışınımın(X-ışınları bölgesinde),bir metal yapraktan geçirildiğinde,klasik ışınım kuramıyla bağdaşmayan bir şekilde saçıldığını bulguladı.Klasik kurama göre olayın işleyişi,gelen ışınımla zorunlu salınıma geçen elektronun yeniden ışınım yapmasıdır ; ve bu işleyiş,bir θ açısında,gelen ışınımın dalgaboyuna bağlı olmayan ve $(1 + \cos^2 \theta)$ gibi değişen bir yeğinlik gözlenmesini öngörür.Compton verilen bir açıdan saçılan ışınımın iki bileşeni olduğunu buldu: Bunlardan birinin dalgaboyu gelen ışınımınki ile aynı,öbürünün dalgaboyu gelen ışınımın dalgaboyuna göre açıya bağlı bir miktar kadar kaymıştır(Şek.1.4).Compton,gelen ışınımı $h\nu$ enerjili fotonların bir demeti olarak aldı ; ve saçılan ışınımın "değişmiş" bileşenini,tek tek fotonların tek tek elektronlarla esnek saçılma yaptığını düşünerek açıklayabildi.Esnek bir çarpışmada enerji gibi momentum da korunmalıdır ve dolayısıyla önce foton için bir momentum tanımlanmalıdır.Göreli parçacık kinematiğine benzeterek,

$$p = h\nu / c \qquad (1\text{-}17)$$

olduğunu kanıtlayalım.Bu değer,enerji ve momentum arasındaki göreli bağıntıdan çıkar:

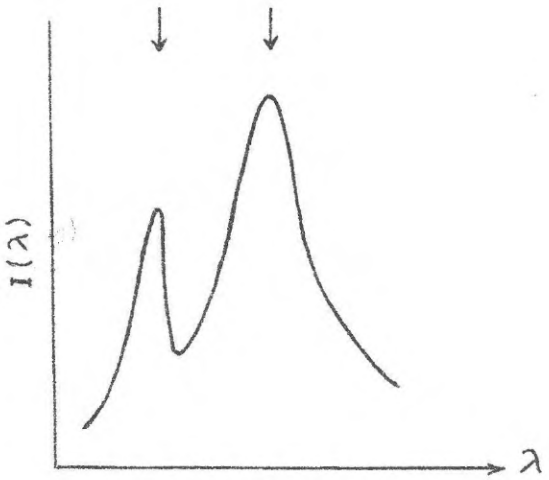
$$E = \left[(m_o c^2)^2 + (pc)^2 \right]^{1/2} \qquad (1\text{-}18)$$

Burada m_o parçacığın durgun kütlesidir.Bu momentumdaki hız

$$v = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{(m_o^2 c^4 + p^2 c^2)^{1/2}} \qquad (1\text{-}19)$$

dır.Fotonun hızı her zaman c olduğuna göre,<u>fotonun durgun kütlesi sıfır olmalıdır</u>. Böylece (1.18) bağıntısı

$$E = pc \qquad (1\text{-}20)$$



Şek.1-4. Karbondan saçılan ışınımın spektrumu.Solda 0,7078 Å 'de değişmemiş çizgi ve sağda 0,7314 Å 'de kaymış çizgi görülüyor.İlki, ilk gelen ışınımın dalgaboyudur.

verir,ve burada $E = h\nu$ konulduğunda,(1-17) elde edilir.(1-20) bağıntısı,bir elektromagnetik dalganın enerji ve momentumunun incelenmesinden de çıkarılabilir,ancak buradaki benzeşim tartışması daha basittir.

Şimdi ilk momentumu $\vec{p}$ olan bir fotonun,durgun bir elektron üzerine geldiğini düşünelim.Çarpışmadan sonra,fotonun momentumu $\vec{p}'$'dür,ve elektron $\vec{P}$ momentumu ile geri teper.Momentumun korunumu(Şek.1-5),

$$\vec{p} = \vec{p}' + \vec{P} \tag{1-21}$$

verir,buradan da

$$\vec{P}^2 = (\vec{p} - \vec{p}')^2 = \vec{p}^2 + \vec{p}'^2 - 2\vec{p} \cdot \vec{p}' \tag{1-22}$$

çıkar.Enerji korunumu ise,

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + (m^2c^4 + P^2c^2)^{1/2} \tag{1-23}$$

olduğunu gösterir,burada m elektronun durgun kütlesidir.Böylece,

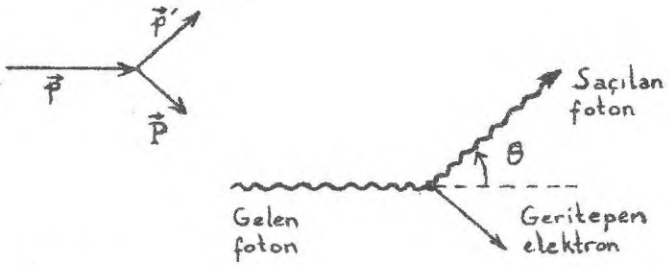
$$m^2c^4 + P^2c^2 = (h\nu - h\nu' + mc^2)^2$$

$$= (h\nu - h\nu')^2 + 2mc^2(h\nu - h\nu') + m^2c^4$$

olur.Öte yandan (1-22),

$$P^2 = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\,\frac{h\nu}{c} \cdot \frac{h\nu'}{c} \cos\theta$$

biçiminde yeniden yazılabilir.Bu ise,



Şek.1-5 Compton olayının kinematiği.

$$p^2c^2 = (h\nu - h\nu')^2 + 2(h\nu)(h\nu')(1-\cos\theta) \qquad (1\text{-}24)$$

demektir;burada θ,fotonun saçılma açısıdır.Böylece

$$h\nu\nu'(1-\cos\theta) = mc^2(\nu - \nu')$$

veya eşdeğer olarak,

$$\lambda - \lambda' = \frac{h}{mc}(1-\cos\theta) \qquad (1\text{-}25)$$

elde edilir.Değişmiş bileşenin ölçümleri yukardaki öngörü ile çok iyi uyuşur. Değişmemiş çizginin atomun bütününden saçılarak oluştuğu sanılır.Çünkü bir atom elektrondan binlerce kez daha kütleli olduğundan, m yerine atom kütlesini koyacak olursak dalgaboyundaki kayma çok küçük olacaktır.Uzunluk boyutunda olan h/mc niceliğine elektronun Compton dalgaboyu denir ve büyüklüğü

$$\frac{h}{mc} \cong 2.4 \times 10^{-10} \text{ cm} \qquad (1\text{-}26)$$

dir.Elektronun geri tepmesi de ölçülmüş ve kuram ile uyuştuğu görülmüştür.Bundan başka,çıkan foton ve geri tepen elektronun eşzamanlı olarak ortaya çıktığı da,yüksek zaman çözme güçlü düşündeş deneylerle belirlenmiştir.Öyleyse çarpışmanın bayağı "bilardo topu" tipinde bir çarpışma olarak yorumlanmasında,yani fotonun parçacık gibi davranışı konusunda herhangi bir şüphe yoktur.Ancak ışınım dalga özelikleri de gösterdiğinden,ve kırınım ve girişim oluşturduğundan bazı kavramsal güçlüklerin çıkmasını beklemeliyiz.Gerçekten var olan bu güçlükleri bölümün sonunda tartışacağız.

D. Elektron Kırınımı

Optikteki Fermat ilkesi ile mekanikteki en az eylem ilkesi arasındaki benzeşimden yola çıkan De Broglie,1923'de şu savı öne sürdü : Işınımın dalga-parçacık ikili doğasının karşılığı olarak maddenin de bir parçacık-dalga ikili doğası bulunmalıdır.Buna göre belli koşullar altında parçacıklar dalga özeliği taşımalıdır. De Broglie parçacığa bağlanan dalgaboyu için şu ifadeyi öne sürdü:[11]

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (1\text{-}27)$$

Burada h Planck sabiti,ve p parçacığın momentumudur.De Broglie'nin çalışması büyük ilgi gördü ,ve bir çok kimse elektron kırınımını gözleyerek,formülün doğrulanabileceğini öne sürdü.[12] Bu olayın denel gözlemi,Davisson ve Germer'in deneyleriyle oldu.Davisson ve Germer elektronların bir kristal yüzeyinden saçılmasında,belli doğrultulardaki saçılmaların yeğlendiğini buldular.

Şekil 1-6,ne olup bittiğinin basitleştirilmiş bir görüntüsüdür.Dönemsel bir yapıdan dalgaların saçılmasında komşu saçılma"düzlemleri"nden gelen dalgalar arasında,büyüklüğü $(2\pi/\lambda)\ 2\ a \sin\theta$ olarak verilen bir evre farkı bulunur.Bu evre farkı, n bir tamsayı olmak üzere, $2\pi n$ 'e eşit olduğunda,yani

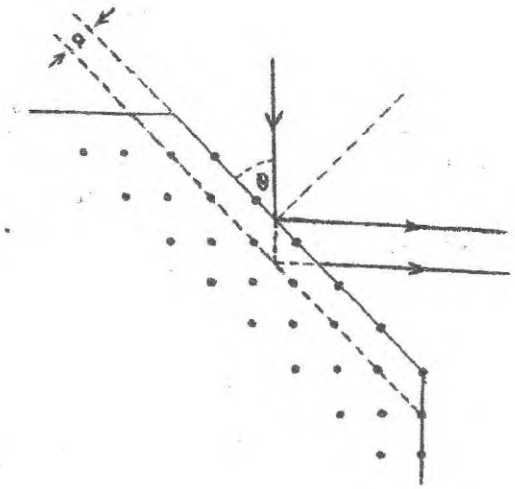
$$\lambda = \frac{2\,a \sin\theta}{n} \qquad (1\text{-}28)$$

için,yapıcı girişim oluşacaktır.(1-27) bağlantısının kurulması koşuluyla,Davisson ve Germer'in gözledikleri girişim deseni yukardaki formül ile uygunluk sağlayabilir.Bu doğrulama dalga mekaniğinin gelişmesinde önemli bir adım oluşturmuştur.

Parçacık kırınım deneyleri o zamandan beri hidrojen ve helyum molekül demetleri ve yavaş nötronlarla yapılmaktadır.Nötron kırınımı özellikle kristal yapısının incelenmesinde yararlıdır.Kırınım deneyleri için gerekli enerji konusunda kabaca bir bilgi edinmek için,kristal aralıklarının Angström basamağında olduğunu belirtelim.Nikel kullanarak yapılan Davisson-Germer deneyinde ağ sabiti $a = 2.15$ Å idi.Bundan dolayı λ, 10^{-8} cm basamağında ve bunun sonucu $p = h/\lambda \cong 6.6 \times 10^{-19}$ gr.cm/sn 'dir.Böylece elektronlar için kinetik enerji $p^2/2m_e = (6.6 \times 10^{-19})^2/$

[11] De Broglie bağıntısı,Bölüm 2'deki dalga tartışmasından akla çok yatkın bir sonuç olarak çıkar.

[12] De Broglie önerisinin doğrulanmasının tarihçesi Jammer,The Conceptual Development of Quantum Mechanics adlı kitapta bulunabilir.



Şek.1-6. Elektron saçılması geometrisinin şematik çizimi.

$(2 \times 0.9 \times 10^{-27}) \cong 2.5 \times 10^{-10}$ erg,ve nötronlar için $p^2/2m_n = (m_e/m_n) \times$(elektron enerjisi) $\cong (1/1840) \times 2.5 \times 10^{-10}$ erg $\cong 1.3 \times 10^{-13}$ erg olur.Bu enerjiler, daha uygun olan elektron volt cinsinden yaklaşık olarak sırasıyla 160 eV ve 0.08 eV 'dir.

Makroskobik ölçekte,parçacıkların dalga görünümü bizim onları gözleme yeteneklerimizin dışındadır.10 cm/s hızla giden, 0,1 mm büyüklüğünde bir damlanın De Broglie dalgaboyu $\lambda = 6.6 \times 10^{-27}/4 \times 10^{-5} \cong 1.6 \times 10^{-22}$ cm 'dir.Protonun "büyüklüğü" 10^{-14} cm kadar olduğuna göre,boyutları 10^{-4} cm'den önemli ölçüde büyük olan bir nesnenin dalga özeliklerini gözleyebilmenin bir yolu olmadığı açıktır.Işınımın parçacık özeliklerinde olduğu gibi,ikili görünüm yalnızca,momentum ve boyutun çarpımı h basamağında olduğu zaman ortaya çıkar.Bu anlamda,klasik özelikleri belirleyen h'nin küçüklüğüdür.Kuantum mekaniğinin yapısının,bu durumu çok iyi betimlediğini göreceğiz.

E. Bohr Atomu

α parçacıklarının ince levhalardan saçılması konusunda,1908'de Geiger ve Marsden'in yaptığı deneyler büyük açı saçılmasının önemini gösterdi.Büyük açı saçılması,atomun Thomson modelinden beklenenlerle hiç uyuşmuyordu.Bu modele göre elektronlar,sürekli bir artı yük dağılımının içine gömülmüşlerdi.Rutherford verileri açıklayan yeni bir model önerdi: Artı yükün tümü ve atomun hemen hemen tüm

kütlesi,atomun boyutlarına göre küçük olan bir bölgede,yani atomun çekirdeğinde toplanıyordu.Bir $1/r^2$ kuvveti ile çekirdeğe doğru çekilen elektronlar,çekirdek çevresinde gezegensel yörüngelerde dolanıyordu.Model her ne kadar α parçacığı saçılmasını nicel olarak açıkladıysa da iki aşılmaz güçlükle karşı karşıya idi. Model elektronlar için periyodik bir hareket öngördüğünden,atomlarının ışınım spektrumlarının nedenini açıklıyamıyordu.Spektrumlar beklenen harmonik yapıyı (titreşen bir yay gibi) taşımıyordu,bunun yerine

$$\frac{1}{\lambda} = \text{sbt.}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (1\text{-}29)$$

yapısını gösteriyordu,burada n_1 ve n_2 tam sayılardır.Ayrıca atomlara dayanıklı yapı kazandıracak bir işleyişten de yoksundu: Dairesel ya da eliptik bir yörüngedeki elektron sabit ivme kazanır,ve elektromagnetik kurama göre,ışıma yapmalıdır.Böylece doğan sabit enerji yitiği yüzünden,çok kısa bir zamanda (10^{-10} sn basamağında),elektronların çekirdeğe gömülmesiyle atom çökmelidir.

Bu modelin önerilmesinden tam iki yıl sonra,1913'de Niels Bohr bir dizi postülat ileri sürdü.Bu postülatlar klasik fiziğe kesin olarak uymamakla birlikte, spektrum yapısını açıkladı ve atomun dayanıklılığı konusundaki problemi ortadan kaldırdı.Bohr'un önerileri şunlardı:

1. Elektronlar yalnızca,belli yörüngelerde dolanabilirler; bu yörüngelerde açısal momentum, $h/2\pi$ 'nin tam katı olmalıdır,Yani,r yarıçaplı dairesel yörüngeler için elektron hızı

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \qquad (1\text{-}30)$$

ile kısıtlanmıştır,ve ayrıca bu yörüngelerdeki elektronlar ivmelerine karşın ışıma yapmazlar.Bu elektronların kararlı durumlarda oldukları söylenir.

2. Elektronlar izin verilen yörüngelerin birinden öbürüne kesikli geçişler yapabilirler ve enerjideki $E-E'$ değişimi,

$$\nu = \frac{E - E'}{h} \qquad (1\text{-}31)$$

frekanslı ışınım olarak ortaya çıkar.Ayrıca bir atom,elektronlarını daha yüksek enerjili bir yörüngeye geçirterek,ışınım soğurabilir.

Dairesel yörüngelerle ilgileniyorsak,hidrojen,bir defa iyonlaşmış helyum ve bunun gibi bir elektronlu atomlar için,bu postülatların sonuçları çok kolayca çıkarılabilir.[13] Çekirdeğin yükü Ze , elektronunki $-e$ ve yörüngenin yarıçapı r

[13] Eliptik yörüngeler için çok daha zengin bir yapı ortaya çıkar.Bölüm 12'de bunun üstünde durulacaktır.

ise,çekirdeğin kütlesini sonsuz alarak,Coulomb kuvvetini merkezkaç kuvvetle

$$\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \tag{1-32}$$

şeklinde dengeleriz.Bu,(1-30) ile birleştirilince

$$v = \frac{2\pi e^2 Z}{hn} \tag{1-33}$$

ve

$$r = \frac{1}{4\pi^2} \frac{n^2 h^2}{Ze^2 m} \tag{1-34}$$

verir.Enerji ise,

$$E = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{2\pi^2 e^4 Z^2 m}{h^2 n^2} \tag{1-35}$$

dir; ve 2.postülat ile hemen,(1.29) genel biçimine götürür(Şek.1. 7).

Bu niceliklerin büyüklükleri hakkında bilgi edinmek için bunların hesabına girmeden önce,yararlı olacak bazı yazım biçimleri ileri süreceğiz.Kuantum mekaniğindeki birçok formülde h'den çok $h/2\pi$ gözükür.Bunun için

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0545 \times 10^{-27} \text{ erg-sn} \tag{1-36}$$

tanımlarız.Enerji ifadelerinde basit olsun diye, ν yerine ω açısal frekansın kullanacağız.Burada

$$\omega = 2\pi\nu \tag{1-37}$$

dür.Böylece (1-31),

$$\omega = \frac{E - E'}{\hbar} \tag{1-38}$$

olur.Benzer olarak,ışınım kuantumu

$$E = \hbar\omega \tag{1-39}$$

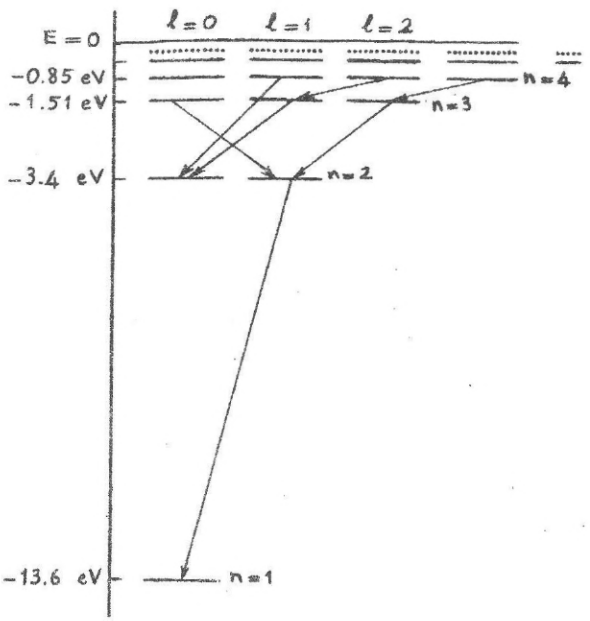
enerjisini taşır.Ayrıca "indirgenmiş dalgaboyu" için,

$$\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{c}{\omega} \tag{1-40}$$

bağıntısının tanımlanması uygundur;böylece De Broglie bağıntısı,

$$p = \frac{\hbar}{\lambda\!\!\!^{-}} \tag{1-41}$$

olduğunu gösterir.



Şek.1-7. Hidrojen atomunun Bohr atom modelinden çıkarılan spektrumu. ℓ kuantum sayılarının varlığı eliptik yörüngelerin incelenmesinden çıkar. Enerji düzeylerini birleştiren çizgiler başat atomik geçişleri gösterimler.

Bohr'un açısal momentum kuantumlama koşulu,

$$mvr = n\hbar \quad (n = 1,2,3,.....) \tag{1-42}$$

verir. Ayrıca,

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.0388} \tag{1-43}$$

boyutsuz"ince yapı sabitinin" ortaya atılması da çok uygundur, ve bunu yaklaşık

olarak,1/137 alacağız.Bu nicelikler türünden,çok daha basit ifadeler elde ederiz, bunlar:

$$\frac{v}{c} = \frac{Z\alpha}{n} \qquad r = \frac{n^2}{Z\alpha}\ \frac{\hbar}{mc} \tag{1-44}$$

ve

$$E = -\frac{1}{2}\, mc^2\ \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \tag{1-45}$$

Dikkat edilirse,uzunluk boyutunda olan yarıçap,elektronun indirgenmiş Compton dalgaboyu; ve enerji, mc^2 türünden yazılmıştır.Tüm atomik hesaplarda enerji, uzunluk,zaman ve momentumu sırayla mc^2, $\hbar/mc$, $\hbar/mc^2$ ve mc türünden yazacağız.Açısal momentum her zaman $\hbar$ 'nin katı olarak ortaya çıkacaktır.

Şimdi Bohr kuramından çıkan bazı nicelikleri hesaplayalım:

$$\begin{aligned} mc^2 &\cong 0.51 \times 10^6 \text{ eV} \\ &\cong 0.51 \text{ MeV} \\ \frac{\hbar}{mc} &\cong 3.9 \times 10^{-11} \text{ cm} \\ \frac{\hbar}{mc^2} &\cong 1.3 \times 10^{-21} \text{ sn} \end{aligned} \tag{1-46}$$

ve böylece şu sonuçlar bulunur:

(a) En düşük (n=1) Bohr yörüngesinin yarıçapı,

$$a_0 = \frac{137\,\hbar}{Z\ mc} = \frac{0.53}{Z}\ \text{Å} \tag{1-47}$$

(b) En düşük Bohr yörüngesindeki elektronun bağlanma enerjisi,yani elektronu E = 0 (n = ∞ 'a karşılık) düzeyine koymak için gerekli enerji,

$$E = \frac{1}{2}\, mc^2 (Z\alpha)^2 = 13.6Z^2 \text{eV} \tag{1-48}$$

dur.Böylece,örneğin hidrojende (Z = 1) , n=2 düzeyinden n=1 düzeyine geçiş $13.6(1-\frac{1}{4})$ eV = 10.2 eV 'luk enerji değişimine karşılık gelir.Bunu erg'e çevirerek,yayınlanan ışınımın frekansı hesaplanabilir,fakat bunu

$$\omega = \frac{mc^2\alpha^2\left(1-\frac{1}{4}\right)}{2\hbar} = \frac{3\alpha^2}{8}\ \frac{1}{1.3 \times 10^{-21}} \text{ rad/sn}$$

$$\cong 1.5 \times 10^{16} \text{ rad/sn}$$

biçiminde kullanmak daha uygundur.Eşdeğer olarak,

$$\lambda = 2\pi \frac{c}{\omega} = \frac{16\pi}{3\alpha^2} \frac{\hbar}{mc}$$

$$\cong 1200 \text{ Å}$$

elde edilir ve bu morötesi bölgeye düşmektedir.

Bohr kuramının hidrojen gibi atomlardaki başarısı,"Bohr atomu" üzerindeki başka araştırmalara hız kazandırdı.Bohr[14] ve başkalarının olağanüstü bazı başarılarına karşın,kuramın eğreti olduğu açıktı.Elektronların ne zaman atlama yapacağı konusunda bir şey söylemediği gibi,kuantumlama kuralı da dönemsel sistemlere kısıtlanmıştı.Sommerfeld ve Wilson'un daha genel olan,

$$\int_{\substack{\text{kapalı} \\ \text{yörünge}}} p\,dq = n\hbar \qquad (1\text{-}49)$$

ifadesi,hidrojen atomunun düzeyleri ile ilgili olanlar dışındaki problemlerin çözümünde yararsızdı.Burada p, q koordinatına karşılık gelen momentumdur.Bohr kuramından şu sonuçlar çıktı:

1. Karşılığı bulunma ilkesi. Bu ilke başlıca şunu söyler : Klasik fiziğin sonuçları,kuantum mekaniği sonuçlarının sınır hali olarak kapsanmalıdır.Bu sınıra,"kuantum sayıları" büyük olduğunda,örneğin Bohr atomunda büyük n için,ulaşılır.Bir kez kuantum olaylarının tutarlı bir kuramı kuruldu mu,bu kuram kendiliğinden klasik fiziği bir sınır olarak kapsıyordu.Gene de ilke,kuramsal sanılara kılavuzlukta çok yararlı oldu; ve Heisenberg kuantum mekaniğine dev sıçramasını bu ilkeden yaptı.Bohr atom modelinde karşılığı bulunma ilkesinin nasıl sağlandığını görmek için, n çok büyük olduğunda,bir elektronun $n+1$ kuantum sayılı bir yörüngeden n kuantum sayılı bir yörüngeye "atladığı" zaman yayınladığı ışınımın frekansını düşünelim. $n\hbar$ açısal momentumu $\hbar$'den çok büyük olduğundan,bu frekans bölgesi klasik sınırı aramak için iyi bir bölgedir.Klasik olarak, v hızı ile bir dairesel yörüngede dolanan elektronun,kendi hareketinin frekansı ile ışıması beklenir; bu frekans,

$$\nu_{kl} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{Z\alpha c}{n} \frac{Z\alpha mc}{2\pi n^2 \hbar} = \frac{(Z\alpha)^2 mc^2}{2\pi\hbar} \frac{1}{n^3} \qquad (1\text{-}50)$$

olmalıdır.Öte yandan geçişe eşlik eden ışınımın frekansı,(1-31)'e göre

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{mc^2}{2} (Z\alpha)^2 \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] \qquad (1\text{-}51)$$

[14] Bak S.Rozental(basan), Niels Bohr, North Holand Publishing, Amsterdam,1967.

olur ve $n \gg 1$ için ν_{kl} 'ye yaklaşır.Bunun anlamlı bir sonuç olduğuna dikkat ediniz.Çünkü yalnız,bir $n+1 \rightarrow n$ geçişine eşlik eden frekans temel frekansa karşılık gelir. n büyük de olsa,$n+2 \rightarrow n$ atlamasına eşlik eden ışınımın klasik karşılığı yoktur.Kuantum mekaniğinde,"dairesel yörüngeler" için $n+2 \rightarrow n$ geçişinin bulunmadığını Bölüm 22'de göreceğiz.[15]

2. Açısal momentumun kuantumlanması öteki durumlarda da geçerlidir.Bunun eliptik yörüngelere uygulanması,hidrojen gibi atomların spektrumunun daha tam bir anlatımını verir.Açısal momentumun kuantumlu oluşu,1922'de Stern ve Gerlach[16]ın deneylerinde doğrudan gözlenmiştir.

F. Dalga-Parçacık Problemi

Işınımın dalga ve parçacık özeliklerinden ikisini de sergilemesi gerçeği, aşağıdaki düşüncelerden görüleceği gibi,derin bir kavramsal güçlük doğurur:

1. Fotoelektrik olay üzerindeki incelememiz,özellikle yayınlanan elektron sayısı ile ışınım yeğinliği arasındaki ilişki,elektromagnetik ışınımın yeğinliğinin kaynağın yayınladığı foton sayısı ile orantılı olduğunu kuvvetle öngörür.Şimdi bir Düşünce Deneyi[17] üzerinde duralım.Bu deneyde ışınım,bir çift yarık sisteminde kırınıma uğrasın.Kaynağın yeğinliğinin,ekrana ortalama olarak,saat başına bir foton ulaşacak biçimde azaltıldığını varsayalım.Bölünmemiş fotonlarla uğraşmamız gerektiğini belirtelim: Compton olayı da,fotoelektrik olay gibi bir fotonu, ω frekanslı fakat enerjisi $\hbar\omega$'dan küçük olan parçalara ayırmanın olanaksız olduğunu gösterir.Gelen ışınımın yeğinliğini azaltmak,klasik kırınım desenini etkilememelidir.Çünkü aslında,kaynaktan fotoğraf levhasına çok büyük sayıda foton gelecek biçimde,yalnızca zaman ölçeğini uzatmış oluyoruz.Levhaya bir saat ara ile gelen fotonlar arasında bir ilişki olamaz,onun için bu süreçte,herhangi bir anda bir foton bulunduğunu düşünebiliriz.Bir fotonun,bir parçacık olarak,yarıkların birinden ya da öbüründen geçeceği sanılır.Düşünce Deneyi aygıtımıza fotonun

[15] Eliptik yörüngeler için böyle geçişler oluşabilir(burada gözönüne alınmadı); ve bu,karşılığı bulunma ilkesi ile uyuşur.

[16] Bu konular,her modern fizik ders kitabında tartışılır(bu bölümün sonundaki kaynaklara bakınız).

[17] Bir Düşünce Deneyi,tasarlanabilen bir deneydir.Teknik yönden yapılamasa da,bilinen fizik yasaları ile uyuşur.Böylece,güneş yüzeyindeki çekim ivmesinin ölçülmesi bir Düşünce Deneyidir; oysa,ışık hızının iki katı hızla giden bir uzay gemisinden görünen,güneş ışığının Doppler kaymasının ölçülmesi saçmadır.Bölüm 2'de bir Düşünce Deneyi kurarken,bunun fizik yasalarıyla tutarlı olmasına ne kadar özen göstermemiz gerektiğini göreceğiz.

yarık"1" 'den mi yoksa "2" 'den mi geçtiğini söyleyen küçük bir izleyici eklersek, fotonları geçtiği yarığa bağlı olarak iki sınıfa ayırabiliriz.Birinci sınıf için 2. yarığı kapatabiliriz,çünkü foton bundan geçmez.İkinci sınıf için de 1. yarığı kapatabiliriz.Böylece,zamanın bir yarısı için bir yarık,öteki yarısı için öbür yarık kapalı olarak deneyi yinelersek fotoğraf levhasındaki desenin aynı kalacağını bekleyebiliriz.Bununla birlikte ikinci deney bir girişim deseni vermediğinden desen aynı kalamaz.Öyleyse,fotonun hangi yarıktan geçtiğini bildiren izleyicinin varlığının deneyi etkilemiyeceği varsayımı ile bir tutarsızlık vardır. Heisenberg belirsizlik ilkesini incelerken göreceğiz ki,izleyicinin etkisi girişim desenini yıkar,sonuç olarak da bir tutarsızlık yoktur.Bu aşamada,bir izleyici yokken her fotonun bir dalga gibi davranacağını,ve fotonun hangi yarıktan geçtiğini sormanın anlamsız olduğunu,belirtmek yeterlidir.Gene de her yarık için,ışınımın bir ortalama yeğinliğinden söz edebiliriz: Bu durum tek tek fotonlar için, sadece bir yarıktan ya da öbüründen geçme olasılığından söz edebileceğimiz anlamına gelmelidir.

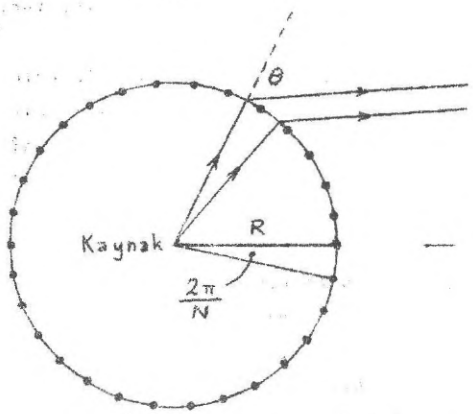
2. Kutuplanmış ışınımın bir çözümleyiciden geçişini anlamada,yine olasılık kavramına başvurmak gerekir.Bilindiği gibi I_0 yeğinliğindeki bir ışınım,$I_0\cos^2\alpha$ yeğinliğine düşecektir; burada α, kutuplayıcı ile çözümleyicinin eksenleri arasındaki açıdır.Tek tek fotonların bölünemez olduğunu kullanarak,böyle bir zayıflama yalnızca şöyle açıklanabilir: Bir foton,aygıtın yapısına,yani α açısına bağlı bir geçme olasılığı ile ya geçer ya da sistem tarafından engellenir.

3. Aynı şekilde,uzak bir yıldızdan gelen ışınımı gözönüne alınız.Yıldız, c hızı ile yayılan,uyarılmış bir elektromagnetik alan küresel dalgasının kaynağıdır. Bireysel fotonlar türünden,fotonun ct (burada t fotonun yayınlanmasından beri geçen süredir) yarıçaplı bir küre üzerinde ince bir tabaka olarak yayıldığını düşünmek akla uygun değildir; çünkü "gerçekten" böyle olsaydı,fotonun fotoğraf levhasında ya da gözün ağtabakasında bir tek noktaya düşmesi sağduyuya aykırı olurdu. Bununla birlikte küresel dağılımı,bir fotonun verilen bir katı açıda bulunma olasılığı olarak yorumlayabiliriz.

4. Bazen verilen bir deneyi hem parçacık hem de dalga dilinde yorumlamak olağandır,fakat gene de klasik olmayan bir görünüm işe karışır.Dicke ve Wittke[18] aşağıdaki Düşünce Deneyini önerdiler(Şek.1-8).Telleri düzgün aralıklarla dizilmiş, silindirik bir kuş kafesini gözönüne alalım ve aralık

$$\alpha = 2\pi \frac{R}{N}$$

[18] R.H.Dicke ve J.P.Wittke, Introduction to Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1960.



Şek.1-8. Eşit aralıklı telleri ve ilgili geometrik nicelikleri gösteren Dicke-Wittke "kafesi"nin kesiti.

olsun,burada R silindirin yarıçapı ve N tel sayısıdır.Silindirin ekseni üzerindeki bir kaynağın yayınladığı ışınımı düşünelim.Teller bir kırınım ağı gibi etkir. Demek ilk doğrultusu ile bir θ açısı yaparak çıkarsa,ve açı ile dalgaboyu arasında

$$a \sin\theta = n\lambda \qquad (n= 1,2,3,.....)$$

ya da

$$\lambda = \frac{2\pi R \sin\theta}{Nn} \qquad (1\text{-}52)$$

bağıntısı varsa,maksimum yeğinlik elde ederiz.Yeğinlik tepesini,parçacıkların kuş kafesinin tellerinden θ açısı boyunca saçıldıklarını varsayarak da açıklayabiliriz.Kafese aktarılan momentum $p \sin\theta$ 'dır,ve böylece kafese aktarılan açısal momentum

$$L = pR \sin\theta \qquad (1\text{-}53)$$

olur.Şimdi $p = 2\pi\hbar/\lambda$ De Broglie bağıntısı kullanılırsa,

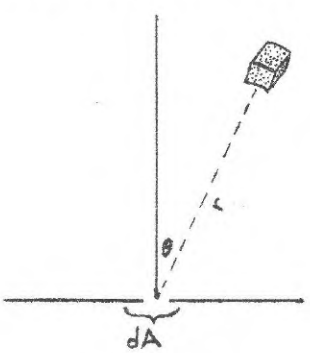
$$L = \frac{2\pi\hbar Nn}{2\pi R \sin\theta} \cdot R \sin\theta = Nn\hbar \qquad (1\text{-}54)$$

elde edilir,yani açısal momentum kuantumludur! N çarpanı,kuş kafesinin bir $2\pi/N$ açısı kadar döndürüldüğünde yine aynı görünmesi ile ilgilidir,ve bu ilerde anlaşılacaktır.

Kuantum Mekaniğinin modern kuramı 1925'de Heisenberg, Born, Schrödinger ve Dirac'ın çalışmaları ile başladı. Bu kuram, klasik düşünüşün bir kısmını bir yana bırakmak karşılığında, çekişmeli kavramların tümünü uzlaştırmanın bir yolunu bulur. Fizik öğrencisi olmanın sevinilecek yanlarından biri, bu güzel kuramı ve onun aracılığı ile maddenin özeliklerini anlamadaki görkemli ilerlemeleri değerlendirebilmektir.

Problemler

1. Bir koğukdaki enerji yoğunluğu ile yayınlama gücü arasındaki (1-1) bağıntısını tanıtlayınız. [Yardım. Aşağıdaki şekle bakınız. Gölgeli hacım elemanının bü-



yüklüğü $r^2 \, dr \sin\theta \, d\theta \, d\phi = dV$ 'dir; burada r, dA alanı açıklığının başlangıca uzaklığıdır; θ düşeyle yapılan açı ve ϕ açıklık boyunca dik eksen ile yapılan başucu açısıdır. Hacım elemanındaki enerji, dV ile enerji yoğunluğunun çarpımıdır. Işınım eşyönseldir, böylece çıkan ışınım, $dA \cos\theta / 4\pi r^2$ katı açısının enerji ile çarpımı olarak verilir. Bu nicelik θ ve ϕ açıları üzerinden tümlenecektir. Eğer, Δt zaman aralığındaki ışınım akısı aranıyorsa, dr üzerinden de 0'dan $c\Delta t$ 'ye kadar tümlenecektir, burada $c\Delta t$, verilen zaman aralığında ışınımın gideceği uzaklıktır.]

2. (1-1) ve (1-12)'yi kullanarak, bir siyah cismin birim alanı başına toplam ışıma hızı için bir formül bulunuz. Güneşin bir siyah cisim gibi ışıdığını

varsayınız.Güneşin yarıçapı $R_\odot = 7 \times 10^{10}$ cm,güneşin dünyaya ortalama uzaklığı $d_\odot = 1{,}5 \times 10^{13}$ cm, ve güneş sabiti yani güneş tepede iken dünya üzerine düşen enerji $1{,}4 \times 10^{6}$ erg/cm^{2}sn olarak verilmiş olsun.Bu bilgileri kullanarak güneşin yüzey sıcaklığını kestiriniz.

3. (1-9) verildiğinde bir $\Delta\lambda$ dalgaboyu aralığındaki enerji yoğunluğunu hesaplayınız.Bulduğunuz ifadeyi kullanarak enerji yoğunluğunu en büyük yapan $\lambda = \lambda_{mak}$ değerini bulunuz. λ_{mak}'ın b/T biçiminde olduğunu gösteriniz, b'yi hesaplayınız ve güneşin yüzey sıcaklığı için kestirdiğiniz değeri kullanarak güneş ışınımı için λ_{mak}'ı bulunuz.[Yardım. b'yi hesaplarken $(5-x) = 5e^{-x}$ denkleminden x'i çözmeniz gerekecektir.Bunu çizgel olarak ya da ardışık yaklaşımlar yöntemi ile çözünüz; ardışık yaklaşımlar yönteminde,önce $\epsilon \ll 1$ için $x = 5-\epsilon$ alınız.]

4. Güneş enerjisinin ne kadarı 4000 Å - 7000 Å dalgaboyları arasında ışınmıştır? Problem 1'de kestirilen T'yi kullanınız.Sayısal sonuçlar elde etmek için enerji yoğunluğunu çizge kağıdına çiziniz.

5. Evrende,3°K denge sıcaklığına karşılık gelen kara cisim ışınımının varlığını gösteren bazı denel kanıtlar vardır.Bu sıcaklığa karşılık gelen λ_{mak} dalgaboyundaki bir fotonun enerjisi hesaplayınız.

6. 3500 Å dalgaboyundaki morötesi ışık bir potasyum yüzeyine düşüyor.Fotoelektronların en büyük enerjisi 1.6 eV 'dur.Potasyumun iş fonksiyonu nedir?

7. Alüminyumun fotoelektronlarının en büyük enerjisi,2000 Å 'lık ışınım için 2.3 eV ve 3130 Å için 0.90 eV'dur.Bu verileri kullanarak Planck sabitini ve alüminyumun iş fonksiyonunu hesaplayınız?

8. 100 MeV 'lik bir foton duran bir protonla çarpışıyor.Foton için olabilecek en büyük enerji yitiği nedir?

9. 100 keV'lik bir foton duran bir elektronla çarpışıyor.90° 'lik açıyla saçılıyor.Fotonun çarpışmadan sonraki enerjisi nedir? Elektronun çarpışmadan sonraki kinetik enerjisi eV olarak nedir ve hangi doğrultuda geri teper?

10. 100 MeV enerjili bir elektron,3×10^{7} Å dalgaboylu bir foton (kara cisim ışınımının evrensel doğal fonuna karşılıktır) ile çarpışıyor.Elektronun yitirdiği en büyük enerji ne kadardır?

11. Bir X ışınları demeti duran elektronlardan saçılıyor.Demet eksenine göre 60° açıyla saçılan X ışınlarının dalgaboyu 0.035 Å ise,X ışınlarının enerjisi nedir?

12. Azot çekirdeği(kütlesi $\cong$ 14× proton kütlesi) 6.2 MeV enerjili bir foton yayınlıyor.Çekirdek başlangıçta durgunsa,çekirdeğin geri tepme enerjisi eV olarak nedir?

13. (a) 1 eV'luk bir elektronun (b) 10 MeV'luk bir protonun (c) 100 MeV'luk

bir elektronun (Uyarı! Görsel enerji formülünü kullanın),(d) ısıl bir nötronun (kinetik enerjisi, $T = 300^0$ K için, 3 kT/2 olan bir nötron olarak tanımlanır) De Broglie dalgaboyu nedir?

14. Düzlemsel aralığı 3,2 Å olan bir kristali gözönüne alın.3 girişim maksimumu görebilmek ereğiyle (a) elektronlar,(b) helyum çekirdekleri (kütlesi $\cong$ 4 x proton kütlesi) için gerekli enerjinin büyüklük basamağı nedir?

15. Bir mikroskobun çözebileceği en küçük aralık kullanılan dalgaboyunun büyüklük basamağındadır.(a) 150 Å 'lık,(b) 5 Å 'lik aralıkları bir elektron mikroskobunda ayırmak için hangi enerjili elektronlar gereklidir?

16. Hidrojen atomunun duraklı bir durumunda,elektronun tam sayıda dalgaboyuna karşılık gelen dairesel bir yörüngeye oturduğu varsayılırsa,Bohr kuramının sonuçları yeniden elde edilebilir.Bunu gösteriniz.

17. Bir kristalde komşu düzlemler arası uzaklık ölçülecektir. 5^0'lik bir açıda 0,5 Å dalgaboyundaki X ışınları gözlenmişse,aralık ne kadardır? Hangi açıda ikinci maksimum ortaya çıkar?

18. Bohr kuantumlama kurallarını kullanarak,bir harmonik salınganın enerji düzeylerini hesaplayınız; harmonik salıngan için enerji $p^2/2m + m\omega^2r^2/2$ 'dir; yani kuvvet $m\omega^2r$ 'dir.Kendinizi dairesel yörüngelere kısıtlayınız.Rydberg formülünün benzeri nedir? Açısal momentumun kuantumlanmasında kullanılan n kuantum sayısının bütün değerleri için karşılığı bulunma ilkesinin sağlandığını gösteriniz.

19. Çok büyük k için, $V(r) = V_o(\frac{r}{\alpha})^k$ ile verilen bir potansiyel için Bohr kuantumlama kurallarını kullanarak enerji durumlarını hesaplayınız.Potansiyelin biçimini çiziniz ve enerji değerlerinin $E_n \cong Cn^2$ 'ye yaklaştığını gösteriniz.

20. İvmeli bir e yükünün yayınladığı enerji demek olan güç,klasik olarak

$$P = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}a^2 \text{ erg/sn}$$

ile verilir,burada a ivmedir.Dairesel bir yörüngede $a = v^2/r$ 'dir.n kuantum sayısı ile belirtilen bir Bohr yörüngesindeki bir elektronun yayınladığı gücü bulunuz.Bulunan sonuç,karşılığı bulunma ilkesine göre,n çok büyük olduğunda öz kuantum mekaniksel sonuçla uyuşmalıdır.

21. Bir yörüngedeki bir elektronun bozunum hızı,P ışınım gücünün bozunumda yayınlanan enerjiye bölümü ile tanımlanabilir.Işınım enerjisi için Bohr kuramındaki ifadeyi ve P için problem 20'deki ifadeyi kullanarak,elektron n yörüngesinden n-1 yörüngesine bir geçiş yaptığı zaman,bozunum hızının "karşılık gelen" değerini hesaplayınız. Bu bozunum hızının değeri n = 2 iken nedir?(Kuantum sayılarının böyle küçük değerleri için karşılığı bulunma ilkesi geçerli olmayacağından

bu değer,gerçek kuantum mekaniksel sonuçla uyuşmaz.)Geçiş,n yörüngesinden n-m yörüngesine olduğu zaman bozunum hızı nedir?Ömür = (bozunum hızı)$^{-1}$ ne kadardır?

22. Düzlemsel bir dönerin klasik enerjisi,

$$E = L^2/2\ I$$

ile verilir,burada L açısal momentum ve I eylemsizlik momentidir.Dönerin enerji düzeylerini elde etmek için Bohr kuantumlama kurallarını uygulayınız.n_1 ile gösterilen durumlardan n_2 ile gösterilen durumlara geçişlerdeki ışınım için Bohr frekans koşulu varsayılırsa,(a) karşılığı bulunma ilkesinin geçerli olduğunu ve (b) bunun,yanlızca $\Delta n = \mp 1$ geçişlerinin olacağını bildirdiğini gösteriniz.

23. Bazen moleküller,dönerler gibi davranır.Dönme spektrumu 10^7 Å basamağındaki dalgaboylu ışınımla belirtilirse,ve bu H_2 gibi bir moleküldeki atomlararası uzaklığı kestirmede kullanılırsa,ne çeşit ayrılmalar(Å olarak) elde edilir?

Kaynaklar

F.K.Richtmyer,E.H.Kennard ve J.N.Cooper,Introduction to Modern Physics, McGraw-Hill,New York,1969.

Robert Martin Eisberg,Fundamentals of Modern Physics,Wiley,New York,1961.

Arthur Beiser,Perspectives of Modern Physics,McGraw-Hill,New York,1969.

John D.McGervey,Introduction to Modern Physics,Academic Press,New York,1971.

Robert B.Leighton,Principles of Modern Physics,McGraw-Hill,New York,1959.

Martin Karplus ve Richard N.Porter,Atoms and Molecules,W.A.Benjamin, New York,1970.

Eyvind H.Wichmann,Quantum Physics,McGraw-Hill,New York,1969.*

Richard P.Feynman,Robert B.Leighton ve Matthew Sands,The Feynman Lectures on Physics,Addison-Wesley,Reading,Mass.,1963.

Listedeki ilk beş kitap modern standart bir fizik dersinin konularını kapsar, yalnız düzeyleri ve önem verdikleri konular farklıdır.Onun için bunlara fazla kuramsal olmayan bir inceleme için başvurulabilir.Wichmann'ın kitabı,kuantum kuramına alışılmamış bir giriş verir.Tüm önemli noktaları vurgular,nitel uygulamaların geniş bir alanını kapsar ve konuyu biraz bilen okura yeni bir bakış açısı sağlar.The Feynman Lectures kolayca nitelendirilemez.Pırlanta gibidir ve lisans ve lisans üstündeki her öğrenci tarafından okunmalıdır.Öğretmenler durumu bildiğinden,hepsini bol bol okurlar.

* Berkeley Fizik Programı Cilt 4.

Bölüm 2

Dalga Paketleri ve Belirsizlik Bağıntıları

Kuantum mekaniği, Bölüm 1'de tartışılan tüm olayları anlamamızı sağlar. Bundan başka atomlar, moleküller, atom çekirdekleri ve bunların kümelerinin anlaşılması için zorunludur. Kuantum mekaniğini incelemeye Schrödinger denklemi ve onun çözümlerinin uygun yorumu ile başlayacağız.[1] Bu denklem klasik fiziğin alanı dışında kaldığından, onu klasik fizikten elde etmenin bir yolu yoktur. Bu denklem ancak, Schrödinger'in yaptığı gibi, De Broglie'nin daha önceki kavrayış yolunu izliyerek kestirilebilir. Biz bu kestirimi, elektronların dalga ve parçacık özeliklerinin nasıl uzlaştırılabildiğini görerek, biraz değişik bir yoldan yürüteceğiz.

Davranışları her bakımdan dalga gibi olan parçacıkların şekillenimlerini düşünmek zordur. Bu nedenle Fresnel ve Young'ın kırınım deneyleri, ışığın dalga kuramının tam olarak benimsenmesi ile sonuçlanmıştır. Öte yandan, çok iyi yerelleşmiş olan dalgaların şekillenimleri düşünülebilir. (Bir gök gürültüsü, dalgaların üstüste gelmesiyle zaman içinde yerelleşmiş bir olay oluşmasına bir örnektir.) Böyle yerelleşmiş "dalga paketleri", farklı frekanslı dalgaları verilen bir uzay bölgesinin dışında birbirini hemen hemen tam olarak söndürecek biçimde, üstüste getirerek yapılabilir. Bunun yapılması Fourier tümlevlerini gerektirir, ve bunlar Ek A'da Fourier serilerini bilen ve işin matematiği üzerinde durmayan bir okur için özetlenmiştir.

Örnek olarak,

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k)\, e^{ikx} \qquad (2\text{-}1)$$

[1] Değişik bir yaklaşım R.P.Feynman, R.B.Leighton, ve M.Sands, The Feynman Lectures on Physics, Cilt III, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1964' de bulunabilir.

ile tanımlanan fonksiyonu gözönüne alalım.f(x)'in gerçel kısmı $\int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k) \cos kx$ ile verilir,ve bu $\lambda = 2\pi/k$ dalgaboyundaki dalgaların bir çizgisel üstüste gelmesidir; çünkü verilen bir k için x, $x + 2\pi/k$ olarak değiştirilince dalga kendisini yeniden üretir.

$$g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2} \tag{2-2}$$

seçelim.0 zaman tümlev alınabilir: $k' = k-k_0$ olmak üzere,

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k)\, e^{i(k-k_0)x}\, e^{ik_0x}$$

$$= e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{\infty} dk'\, e^{ik'x}\, e^{-\alpha k'^2}$$

$$= e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{\infty} dk'\, e^{-\alpha[k'-(ix/2\alpha)]^2}\, e^{-(x^2/4\alpha)}$$

buluruz,burada son basamakta kareleri tamamladık. Bu,$k'-(ix/2\alpha) = q$ yazmak, ve tümlevi gene gerçel eksen boyunca bırakmak için yapılmıştır.[2] Burada,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-\alpha k^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{2-3}$$

olduğu kullanılırsa,

$$f(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\, e^{ik_0x}\, e^{-(x^2/4\alpha)} \tag{2-4}$$

elde edilir. $|e^{ik_0x}|^2 = 1$ olduğundan, e^{ik_0x} çarpanı bir "evre çarpanı" olarak bilinir.Böylece f(x)'in mutlak karesi,

$$|f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha}\, e^{-x^2/2\alpha} \tag{2-5}$$

olur. α küçük seçildiği zaman,bu fonksiyon çok belirgin bir tepe gösterir.x=0 çevresinde,$2\sqrt{\alpha}$ basamağında bir genişlikle yerelleşmiş bir fonksiyonu gösterimler;çünkü $x = \pm\sqrt{2\alpha}$ olduğunda,fonksiyon tepe değerinin 1/e 'sine düşer.x-uzayındaki genişlik k-uzayındaki ile ilintilidir.g(k)'nın karesi,k_0 dolayında $2/\sqrt{2\alpha}$ genişliğinde bir tepesi olan bir fonksiyondur.Burada bir ters karşılıklılık vardır: x'de çok iyi yerelleşmiş bir fonksiyon k'da yayılmıştır,ve bunun tersidir.İki "genişlik"in çarpımı,

$$\Delta k\, \Delta x \sim \frac{2}{\sqrt{2\alpha}} \cdot 2\sqrt{2\alpha} = 4 \tag{2-6}$$

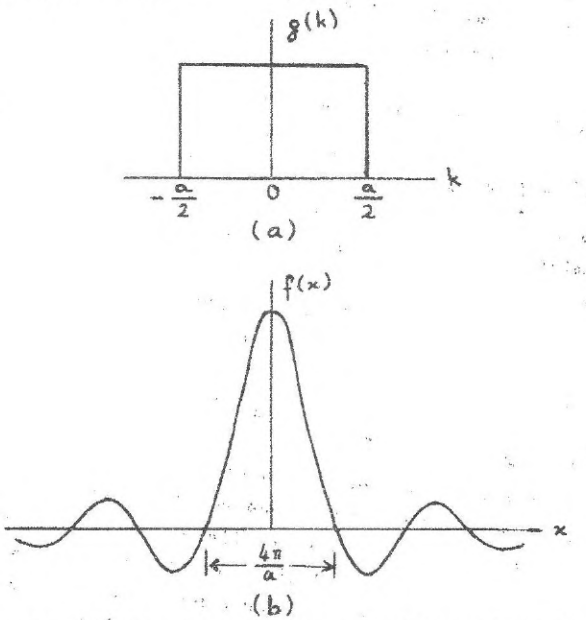
[2] Karmal değişkenler kuramına **alışkın** bir **okur**, kendisini buna kolayca inandırabilir.

olur.Sayısal sabitin gerçek değeri önemli değildir: önemli olan α'dan bağımsız olmasıdır.Bu,birbirlerinin Fourier dönüşmüşü olan fonksiyonların genel bir özeliğidir(Şek. 2.1).Bunu

$$\Delta x \, \Delta k \gtrsim O(1) \qquad (2\text{-}7)$$

formülü ile gösteririz,burada Δx ve Δk iki dağılımın "genişlik"leridir; ve bu çarpımın,ilgilendiğimiz fonksiyonlara bağlı olabilen bir sayı olduğunu ve 1'den çok küçük olmadığını $O(1)$ ile anlatıyoruz. Δx ve Δk 'nın ikisini birden küçük yapmak olanaksızdır. Bu dalga paketlerinin genel bir özeliğidir, fakat hemen göreceğimiz gibi kuantum mekaniğinde bazı çok derin içerimleri vardır.

Denk.2-1'de, e^{ikx} basit dalgalarının sürekli bir üstüste gelmesinden oluşmuş bir f(x) fonksiyonunu gözönüne aldık.Böyle bir dalga paketi zaman içinde nasıl yayılır? Bunun



Şek.2-1. Kare biçimli bir dalga paketi için,dalga paketi ile onun Fourier dönüşmüşü arasındaki ilgi.

yanıtı tek tek dalgaların nasıl yayıldığına bağlıdır.Genel olarak basit bir düzlem dalga (yalnızca x doğrultusunda bir uzaysal değişimi bulunduğundan,fakat y ve z doğrultusunda bulunmadığından böyle adlandırılır),

$$e^{ikx - i\omega t} \tag{2-8}$$

biçiminde yazılabilir.Burada $\omega = 2\pi\nu$ açısal frekanstır. k niceliği dalgaboyuna $k = 2\pi/\lambda$ ile bağlı olduğundan,bu basit dalga başka bir biçimde yazılabilir:

$$e^{2\pi i[(x/\lambda) - \nu t]} \tag{2-9}$$

Boşluktaki bir ışık dalgasının yayılmasını düşünüyorsak,o zaman ν ile λ arasında $\nu = c/\lambda$ basit bağıntısı bulunur.Böylece basit dalga

$$e^{2\pi i(x-ct)/\lambda} = e^{ik(x-ct)}$$

olur.Şimdi bu basit dalgaların g(k) genliği ile üstüste gelmesini alırsak,t anında

$$f(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k)\, e^{ik(x-ct)} = f(x-ct) \tag{2-10}$$

elde ederiz.Bu,başladığımız biçimin aynısıdır.Yalnızca x = 0 'da yerelleşme yerine x - ct = 0 'da yerelleşmiştir.Öyleyse ışık dalgalarının bir dalga paketi,bozulmadan c ışık hızı ile yayılır.

Fakat biz,parçacıkları betimlemesi düşünülen dalgalarla ilgileniyoruz,ve bu yüzden $\omega = kc$ olmasına gerek duymayabiliriz.Genel olarak ω, k'nın bir fonksiyonu olacaktır,böylece

$$f(x,t) = \int dk\, g(k)\, e^{ikx - i\omega(k)t} \tag{2-11}$$

olur.Şimdilik $\omega(k)$'nın biçimini bilmiyoruz ; fakat onu,f(x,t)'nin özgürce hareket eden klasik bir parçacığa benzemesi gereğinden belirlemeye çalışacağız.

k-uzayında bir k_0 değeri dolayında iyice yerelleşmiş bir dalga paketini gözönüne alalım.Bu, α büyük olmak üzere (2-2) gibi bir seçime karşılıktır.Bunun x-uzayında keskince yerelleşmiş bir f(x) fonksiyonunu gösterimlemeyeceği doğrudur, fakat bu biçim hesaplarımızı kolaylaştırır,ve kısacası gene zekice kestirimler yapmayı deneyebiliriz.(2-11)'deki tümlev $k=k_0$ 'da merkezlendiğinden ,$\omega(k)$'yı k_0 komşuluğunda seriye açarız ve $\omega(k)$'yı k'nın çok hızlı değişmeyen bir fonksiyonu olarak düşünürüz.Böylece

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + (k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} + \frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0} \tag{2-12}$$

yazabiliriz.Kesin olsun diye (2-2) biçimi kullanılır ve $k-k_0=k'$ yazılırsa,

$$f(x,t) = e^{ik_0x}\, e^{-i\omega(k_0)t} \int dk'\, e^{-\alpha k'^2}\, e^{-i(k'^2/2)[(d^2\omega/dk^2)]_0 t}\, e^{ik'\{x - [(d\omega/dk)]_0 t\}} \tag{2-13}$$

elde ederiz.Öndeki evre çarpanı bir yana bırakılırsa,x ve t koordinatlarının biçimi paketin yayılma hızının,yani grup hızının

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} \tag{2-14}$$

olduğunu kuvvetle öne sürer.[3] Böylece,

$$\frac{1}{2}\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0} = \beta \tag{2-15}$$

tanımını yaparak

$$f(x,t) = e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} \int dk' e^{ik'(x - v_g t)} e^{-(\alpha + i\beta t)k'^2} \tag{2-16}$$

buluruz.Bu gene,(2-4)'e götüren tümlevdir;şöyle ki,x yerine $x - v_g t$ ve α yerine $\alpha + i\beta t$ konursa,

$$f(x,t) = e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} \left(\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}\right)^{1/2} e^{-[(x - v_g t)^2/4(\alpha + i\beta t)]}$$

elde edilir ve bu fonksiyonun mutlak karesi,

$$|f(x,t)|^2 = \left(\frac{\pi^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2}\right)^{1/2} e^{-[\alpha(x - v_g t)^2/2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)]} \tag{2-17}$$

dir.Bu,tepesi v_g hızı ile giden bir dalga paketini gösterir,fakat onun belirli bir genişliği yoktur: $t = 0$ 'da α olan nicelik şimdi $\alpha + (\beta^2 t^2 / \alpha)$ olur, demek ki paket açılmaktadır. Genişlik

$$\left(\alpha + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha}\right)^{1/2} = \sqrt{\alpha}\left(1 + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha^2}\right)^{1/2}$$

ile orantılı olduğundan, α büyükse yani uzaysal olarak geniş bir paket ile başlanırsa, açılma oranı küçük olacaktır.

En önemli sonuç şudur: (2-11), momentumu p ve kinetik enerjisi $p^2/2m$ olan bir parçacığı gösteriyorsa,

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} \tag{2-18}$$

olması gerekir.Ayrıca ışınımın kuantum bağıntısınca önerilen

[3] Bu,ışığın yayılması özel halinde bulduğumuz $\omega = kc$ ile kesinlikle uyuşur.Daha genel olarak,kullanılan uslamlama bir paketin tepesinin nerede olunacağı olgusuna bağlıdır; tepe, $kx - \omega t$ evresinin k'nın fonksiyonu olarak minimum olduğu, yani $x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)t = 0$ olduğu yerde oluşma eğilimindedir.

$$E = \hbar\omega \tag{2-19}$$

bağıntısı kurulursa, öyle ki

$$\omega = \frac{p^2}{2m\hbar} \tag{2-20}$$

olsun; Tutarlı olmak için

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \tag{2-21}$$

bağıntısını yazmamız gerekir. Bu bağıntı benzer bir yoldan, ilk önce De Broglie tarafından çıkarılmıştır.

(2-11)ifadesi p cinsinden

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \phi(p)\, e^{i(px - Et)/\hbar} \tag{2-22}$$

biçiminde yazılabilir. Yukarıda yaptığımız gibi, $E = p^2/2m$ olduğu, potansiyelden bağımsız bölgede bir "parçacık" ı hareketini betimliyorsak, $\psi(x,t)$ dalga paketi

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \phi(p)\, E\, e^{i(px - Et)/\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \phi(p) \frac{p^2}{2m} e^{i(px - Et)/\hbar} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \end{aligned} \tag{2-23}$$

parçal diferansiyel denkleminin bir genel çözümüdür. Bu denklem ve onun bir potansiyel içinde hareket eden bir parçacık haline genellenmesi, yukarıda ana çizgileri verilen tartışmalardan önemli ölçüde soyutlanma gösterir. Denklemin bir sanıyı gösterimlediği üzerinde durulmalıdır: Klasik fizik düzeyinde ne ω yerine $E/\hbar$, ne de k dalga sayısı yerine $p/\hbar$ koymayı haklı çıkaracak bir neden yoktur.

Gene dalga paketlerinin açılması güçlüğü ile karşı karşıyayız. Bir (2-17) Gauss paketini gözönüne alırsak, α 'nın ne kadar büyük olduğuna bakmadan, açılmanın göze çarpıcı bir ölçüye ulaşacağı bir an bulunacaktır. Bu deneyimle çelişir; çünkü deneyimler örneğin çok küçük çekirdeklerin 3×10^9 yıllık (10^{20} sn) bir dönem süresince değişmediğini açıkça gösterir. Bölüm 1'de biraz çıtlatılan olasılık kavramları, Bölüm 3'de göreceğimiz gibi, burada önemli bir rol oynar; ve gerçekte açılma, parçacığın t= 0 'da yerelleştiği yerden uzakta bulunması olasılığının büyüdüğü anlamına gelir.

Dalga paketi tartışmamızdan çıkardığımız en önemli nitel gözlemlerin biri, x ve k uzaylarındaki genişlikler arasında bulunan

$$\Delta k \Delta x \gtrsim 1 \qquad (2\text{-}24)$$

ters karşılıklılık bağıntısıdır.Bunu $\hbar$ ile çarpar ve $\hbar k = p$ kullanırsak

$$\Delta_p \Delta x \gtrsim \hbar \qquad (2\text{-}25)$$

Heisenberg belirsizlik bağıntılarını elde ederiz.Genişlikler x-uzayı veya momentum uzayında parçacığın bulunabileceği bölgeyi gösterimlediğinden,x-uzayında iyice yerelleşmiş bir dalga paketi kurmak istenirse,o zaman (2-25)'e göre,klasik fizikte benimsenenle çelişik olarak,pakete iyi tanımlanmış bir momentum bağlamak olanaksızdır.Aynı nedenle,dar sınırlar içinde tanımlanmış bir momentumla belirlenen bir dalga paketi uzaysal olarak çok geniş olmak zorundadır.Bu,momentum ve yerin ikisinin birden belirlenebileceğini vurgulayan klasik betimleme üzerine konulan sınırlamalardan biridir.Kuantum fiziğinde bir sistemin parçacık davranışı ve dalga görünümü gibi,momentum ve yer de sistemin tamamlayıcı özelikleridir; ve kuramda bunların ikisinin birden eşzamanlı olarak saptanabileceği bir deney olanaksızdır. $\hbar$'nin küçüklüğü,klasik fiziğin alışılmış kavramlarının yalnızca mikroskobik sistemler için başarısız olacağını güvenceler.Örneğin 10^{-4} gr kütleli bir toz parçası 10^{4} cm/sn hızla hareket ediyor olsun; çarpımdaki belirsizliklerin biri milyonda bir ise, o zaman $\Delta p \sim 10^{-6}$ olması, $\Delta x \sim 10^{-21}$ cm olması demektir; bu bir protonun yarıçapından 10^{-7} kez daha küçüktür.Oysaki bir Bohr yörüngesindeki elektron için durum böyle değildir. $\Delta p \sim p \sim mc\alpha/n$ alırsak, o zaman $\Delta x \sim \hbar n/mc\alpha$ büyüklüğü yörüngelerin yarıçapları basamağında olur.

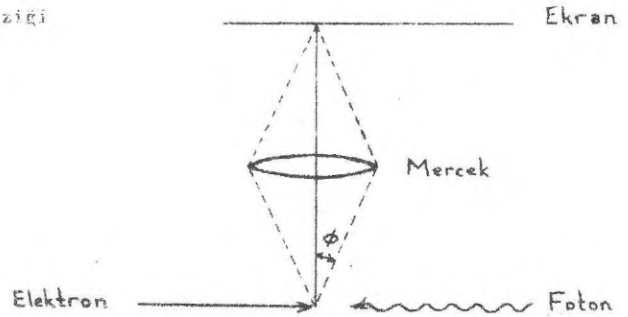
Aşağıda,birkaç Düşünce Deneyi üzerinde duracağız; bu deneylerde parçacık-dalga ikiliğinin,(2-25) bağıntısındaki bir bozulmayı önlemek için nasıl işlediğini ayrıntılı olarak göstereceğiz.

(a) Bir elektronun yerini ölçme: Bir elektronun yerini ölçmeyi amaçlayan Şek.2-2'deki denel düzeneği düşünelim.Elektronlar,iyi belirlenmiş p_x momentumu ile artı x doğrultusunda giden bir demet oluştursunlar.Elektrondan saçılan ışığı gözleyerek elektronun nerede yerelleştiğini görmek için mikroskop(mercek+ekran) kullanılır.Işığı eksi x doğrultusunda göndeririz; belli bir elektron belli bir fotonu saçacak ve foton mikroskoptan geçecek biçimde geri tepecektir.Optikten bilindiği gibi mikroskobun çözmesi,elektronun yerelleşebilmesindeki kesinliktir.Bu,

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \phi} \qquad (2\text{-}26)$$

dır ve burada λ ışığın dalgaboyudur.

λ yeteri kadar küçültülür ve $\sin \phi$ de büyütülürse, Δx'in istenildiği kadar küçük yapılabileceği görülebilir.Bu ise şimdi göreceğimiz gibi,elektron



Şek. 2-2. Elektronun yerini ölçecek Heisenberg mikroskobunun şematik çizimi.

momentumunun x-bileşeni ile ilgili bilgiyi yitirme karşılığında yapılabilir.Kuantum kuramı bize,merceğin arkasındaki ekran üzerine yazılanların aslında,elektronlardan saçılarak oraya vuran bireysel fotonlar olduğunu söyler.Fotonun saçılmadan sonraki doğrultusu,açıklığın saptadığı açının sınırları ölçüsünde belirsizdir.bu nedenle elektronun geri tepme momentumunun büyüklüğü,

$$\Delta p_x \sim 2 \frac{h\nu}{c} \sin \phi \qquad (2\text{-}27)$$

kadar belirsizdir.Bundan dolayı

$$\Delta p_x \, \Delta x \sim 2 \frac{h\nu}{c} \sin \phi \, \frac{\lambda}{\sin \phi} \sim 4\pi\hbar \qquad (2\text{-}28)$$

olur.Bu güçlükten kurtulabilir miyiz? Kısacası,fotonun doğrultusu onun momentumu ile ilintilidir,ve bir yolunu bulup ekranın geri tepmesini ölçebilirsek,fotonun(ve dolayısıyla elektronun) momentumunu daha iyi belirleyebiliriz.Bu doğrudur,fakat mikroskobu bir defa "gözlenen" sistemin bir parçası olarak içerdiysek,onun momentumu belirlendiğinden,bu defa da yeri için tasalanmalıyız.Çünkü mikroskop da belirsizlik bağıntısına uymalıdır; ve momentumu belirlenmiş ise,yeri daha az kesinlikle saptanabilir.Sonuncu "klasik" gözlem aygıtları daima kesinsizlikle karşı karşıya kalacaktır.

(b) Çift-yarık deneyi : Bölüm 1'de,bir elektronun[4] iki yarıktan geçerek verdiği girişim deseninin,elektronun hangi delikten geçtiğini bilmek isteyişimize

[4] Aslında,orada fotonlar için tartışmıştık,fakat güçlük kırınıma uğrayan elektronlar için de aynıdır.

mantık bakımından uymadığını ortaya koymuştuk.Böyle bir bilgi desenin,yarıkların birinden veya öbüründen gelen elektronların bir üstüste gelmesiyle oluşacağını söylüyordu.Fakat bu bir girişim deseni vermez.Elektronların hangi yarıktan geçtiğini belirleyen bir "izleyici"nin,girişim desenini yıktığını göstermek için belirsizlik bağıntısını kullanabiliriz.Yarıklar arası uzaklık a ve yarıkların ekrana uzaklığı d olsun.Yapıcı girişim koşulu

$$\sin\theta = n\frac{\lambda}{a} \tag{2-29}$$

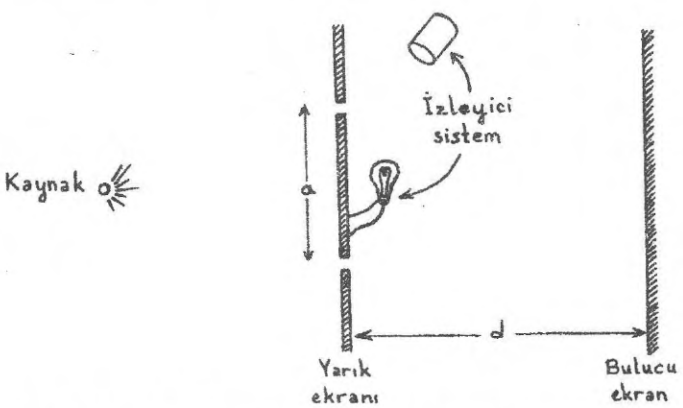
dır,böylece ekranda bitişik maksimumlar arasındaki uzaklık $d\sin\theta_{n+1} - d\sin\theta_n = d\lambda/a$ dir. Şimdi bir elektronun yerini, ekranın hemen arkasında,bir $\Delta y < a/2$ kesinliğiyle belirleyen bir izleyicinin bulunduğunu düşünelim; bu bize elektronun hangi yarıktan geçtiğini söyler (Şek.2-3). Bu durum, elektronun y doğrultusundaki momentumuna

$$\Delta p_y > \frac{2h}{a} \tag{2-30}$$

büyüklüğünde bir belirsizlik vermelidir. Böylece

$$\frac{\Delta p_y}{p} > \frac{2}{a}\frac{h}{p} = \frac{2\lambda}{a} \tag{2-31}$$

olur. Böyle bir belirsizlik elektronun ekrandaki yerinde, en azından $2\lambda d/a$ büyüklüğünde bir belirlenemezlik verir. Ve bu, maksimumlar arası uzaklıktan daha



Şek.2-3. İzleyicisi bulunan çift yarık deneyi.

büyüktür; böylece çalışan bir izleyicinin girişim desenini sileceği ve hiçbir mantık çelişkisi olmadığı sonucuna varırız.Kuşkusuz,tam tersine mantıksal tutarlılığın

$$\Delta p_y \, \Delta y > h \tag{2-32}$$

olmasını zorladığını tartışabiliriz.

(c) Bohr atomundaki yörüngelerin"gerçekliği". Bölüm 1'de belirtildiği gibi Bohr atom modeli yarıçapları $R_n = \hbar n^2 / \alpha mc$ ile verilen yörüngelerle ilgilidir. Öyleyse verilen bir yörünge taslağının ölçülerini belirleyecek bir deney şöyle olmalıdır: Atomdaki elektronun yeri,

$$\Delta x \ll R_n - R_{n-1} \cong \frac{2\hbar n}{\alpha mc} \tag{2-33}$$

kesinliğiyle ölçülmelidir.Bu,elektrona $\Delta p \gg mc\alpha/2n$ büyüklüğünde denetlenemez bir momentum aktarılması demektir.Bu ise,elektronun enerjisinde

$$\Delta E \simeq \frac{p\Delta p}{m} \gg \frac{mc\alpha}{n} \cdot \frac{\alpha c}{2n} = \frac{1}{2} \frac{mc^2\alpha^2}{n^2} \tag{2-34}$$

büyüklüğünde bir belirsizlik olması demektir; ve bu,yörüngedeki elektronun bağlanma enerjisinden çok büyüktür.Öyleyse böyle bir ölçüm,elektronu yörüngesinden dışarı atacak ve sonuçta yörüngenin taslağını çizmek olanağı kalmayacaktır.

(d) Enerji-zaman belirsizlik bağıntısı. (2-25) bağıntısını alır ve onu,

$$\frac{p\Delta p}{m} \cdot \frac{\Delta x m}{p} \gtrsim \hbar$$

biçiminde yazarsak,ilk çarpanı sistemin enerjisindeki belirsizliğin bir ölçümü olarak; ve $\Delta x/v$ ikinci çarpanını,sistemin zaman içinde yerelleşebilmesinin Δt belirsizliği olarak yorumlayabiliriz.Bu,enerji-zaman belirsizlik bağıntısının

$$\Delta E \; \Delta t \gtrsim \hbar \tag{2-35}$$

olduğunu söyler.Böyle bir bağıntı,dalga paketinin (2-22) biçiminden de çıkarılabilir; çünkü E ve t, p ve x gibi,aynı ters karşılıklılık bağıntısı ile ortaya çıkarlar.Bu bağıntı görelilik kuramı ile de öne sürülmüştür; çünkü momentum ve enerji gibi,uzay ve zaman da birbirine çok sıkı bağlıdır.[5] Gerçekte göresiz kuantum mekaniğinde uzay ve zaman biraz farklı bir rol oynar; ve bizim (2-25)'i kuantum mekaniğinin anlatımından çıkarabilmemizin tersine,bu durum (2-35) için doğru değildir. Gene de enerji-zaman belirsizlik bağıntısı (2-25) gibi,kuantum mekaniğinin nitel yapısının bir parçasıdır.

[5] $(ct,\vec{r})$ ve $(E/c,\vec{p})$'nin ikisi de,Lorentz dönüşümleri altında kendi içlerinde dönüşen dörtlü vektörlerdir.

Einstein,kuantum mekaniğinin gelişmesindeki temel katkılarına karşın,onun sonuçları için her zaman endişe duymuştur; ve 1930'daki Solvay Kongresi'nde[6], (2-35)'in ortaya attığı sınırlamalardan görünüşte kaçınan bir Düşünce Deneyi öne sürmüştür. Einstein içinde ışınım bulunan bir kutu ve kutu içinde bulunan bir saatle denetlenen bir kapak önermiştir.Kapak mekanizması bir deliği,istenildiği kadar kısa bir Δt zamanı için açık tutacak biçimde düzenlenmiştir.Kutudan çıkan fotonun enerjisi,kutuyu kapağın açılışından önce ve sonra tartarak tam doğrulukla belirlenebilir.

Bu uslamlamanın Bohr tarafından çürütülmesi,bir Düşünce Deneyinin fizik yasalarına uyması gereğinin güzel bir açıklamasıdır.Bohr,Şek.2-4'de gösterilen aygıtı gözönüne alarak şu noktaları vurguladı:

1. Bir tartı,bir ölçek göstergesinin bir Δx doğruluğu ile okunması demektir.Bu ise,kutunun momentumunda $\Delta p \gtrsim \hbar / \Delta x$ ile verilen bir belirsizlik olması demektir.

2. Bir Δm kütle değişimi bulgulanacaksa,tartı bir T zamanı almalıdır.Bu süre,kütledeki değişimden gelen $gT\,\Delta m$ itmesinin(g = çekim ivmesi), Δp 'den çokça büyük olmasını sağlayacak kadar uzun olmalıdır; yani

$$gT\,\Delta m \gg \hbar / \Delta x \qquad (2\text{-}36)$$

3. Geçerliliği iyi bilinen eşdeğerlik ilkesine[7] göre,bir çekim alanında düşey konumdaki bir Δx değişimi,saatin hızında

$$\frac{\Delta T}{T} = \frac{g \Delta x}{c^2} \qquad (2\text{-}37)$$

ile verilen bir değişim gerektirir.Bu

$$\frac{\Delta T}{T} \gg \frac{g}{c^2} \frac{\hbar}{gT\Delta m}$$

verir,bu da

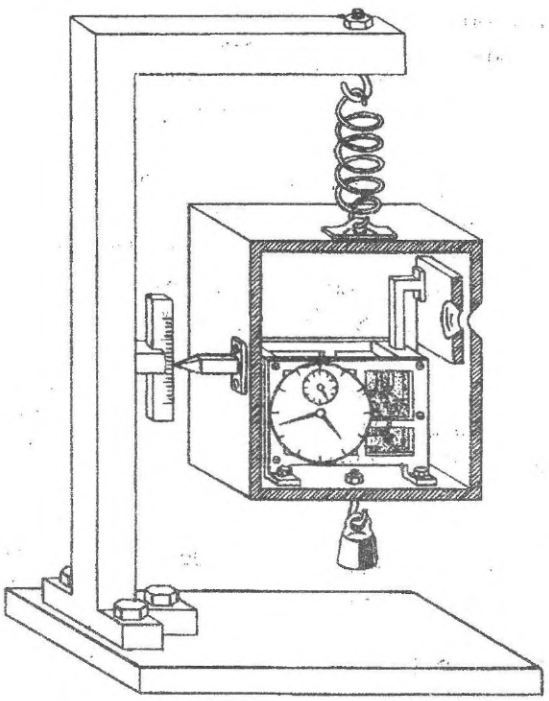
$$\Delta mc^2 \; \Delta T = \Delta E \; \Delta T \gtrsim \hbar \qquad (2\text{-}38)$$

demektir. Bu enerji-zaman belirsizlik bağıntısının geçerliliğini gösterir.

Belirsizlik bağıntıları makroskobik fizikte kaba sayısal kestirimlerde kullanılabilir.Bunu birkaç örnekle açıklayalım,bunların ilki hidrojen atomudur. Atom

6. Bk. Niels Bohr'un güzel denemesi : Einstein ile Atom Fiziğindeki Bilgikuramsal Problemler Konusunda Tartışmalar" , Atomic Physics and Human Knowledge, John Wiley & Sons (1958)'de basılmıştır.

7. Eşdeğerlik ilkesi,bu kitabın sonundaki Özel Konular kesim 2'de tartışılmıştır.Ayrıca da,ilkenin Einstein tarafından biçimlendirilmiş olması hoştur!



Şek.2-4. $\Delta E\ \Delta t > h$ bağıntısının bozuluşunu göstermek için düzenlenmiş Einstein deneyinin yarı-gerçekci çizimi.North Holland Publishing Company, Amsterdam'ın izni ile,Niels Bohr,Atomic Physics and Human Knowledge,John Wiley (1958)'den alınarak burada yeniden basılmıştır.

içindeki elektronun konumunun bilinmediğini ve kutupsal koordinatının r olduğunu düşünürsek,o zaman

$$pr \sim \hbar \qquad (2\text{-}39)$$

olur.Bu,enerjiyi r cinsinden ifade etmemize verir:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \qquad (2\text{-}40)$$

Enerjinin minimum değeri,

$$\frac{\partial E}{\partial r} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0$$

dan elde edilir,bu denklem

$$r = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar}{mc\alpha} \qquad (2\text{-}41)$$

verir,ve karşılık gelen E enerji değeri

$$E = -\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \qquad (2\text{-}42)$$

dir.Enerjinin gerçek değerini elde etmemiz olgusu bir düzendir,çünkü (2-39) yerine rahatlıkla $pr \sim h$ yazabilirdik ve o zaman değişik bir sonuç elde ederdik. Gene de E,doğru değerinden yalnızca bir sayısal sabit kadar ayrılırdı ve genel büyüklük basamağı yine aynı olurdu.Önemli olan klasik kuramın tersine,belirsizlik ilkesi nedeniyle enerjinin aşağıdan sınırlanmış olmasıdır: r'yi küçülterek,yani elektronu çekirdeğin daha yakınına koyarak(eksi) potansiyel enerjide bir artma elde edilir;fakat bu,kendisiyle birlikte kinetik enerjinin artması zorunluluğunu da taşır.

Başka bir örnek olarak çekirdek kuvvetleri problemini gözönüne alalım.Bunların erimleri bir fermi,yani 10^{-13} cm basamağındadır.Bu $p \sim \hbar/r \sim 10^{-14}$ gr cm/s olması demektir.Bu momentuma karşılık olan kinetik enerji,

$$\frac{p^2}{2M} \sim \frac{10^{-28}}{3.2 \times 10^{-24}} \sim 3 \times 10^{-5} \text{ erg} \qquad (2\text{-}43)$$

dir.Burada M nükleon(proton ya da nötron) kütlesi $1,6 \times 10^{-24}$ gr'dır.Potansiyel bunu karşıladığı gibi bağlanmayı da sağlamalıdır,bu yüzden

$$|V| \sim 3 \times 10^{-5} \text{ erg} \sim 20 \text{ MeV} \qquad (2\text{-}44)$$

olmalıdır.Gene bu,kabaca bir büyüklük basamağıdır;fakat potansiyel enerjinin atomlardaki gibi eV ile değil,MeV ile ölçüleceğini gösterir.

Bir başka açıklama da çekirdek kuvvetlerinin Yukawa mezonu kuramından gelir.1935'de Yukawa çekirdek kuvvetlerinin,nükleonlardan birinin yeni bir kuantum yayınlaması ve öbürünün bunu soğurması ile doğacağını öne sürdü; bu yeni kuantum, pi-mezonu(pion da denilen)dur.[8] Bu kuantumun kütlesi μ ile gösterilirse,o zaman

[8] Bu kısaca,Özel Konular'daki Yukawa kuramı ile ilgili olan kesim 5'de tartışılmıştır.

onun yayınlanması bir $\Delta E \sim \mu c^2$ enerji dengesizliği ortaya çıkarır ve bu yalnızca bir $\Delta t \sim \hbar/E \sim \hbar/\mu c^2$ zamanı içinde olur.Parçacığın bu sürede gideceği uzaklık $c\,\Delta t \sim \hbar/\mu c$ basamağındadır.Uzaklık için $r_o = 1.4 \times 10^{-13}$ cm alırsak,

$$\mu c^2 \cong \frac{\hbar c}{r_o} = \frac{10^{-27} \times 3 \times 10^{10}}{1.4 \times 10^{-13}} \text{ erg} \simeq 130 \text{ MeV} \qquad (2\text{-}45)$$

buluruz.En sonunda pionun bulunması ile,bu kestirimin çok doğru olduğu anlaşıldı; çünkü pion için $\mu c^2 \simeq 140$ MeV 'dir.

Özet olarak,parçacık ve dalga özeliklerini birleştirmek için deneme türündeki en çocuksu girişimimiz bile deneyle tutarlıdır ve bizi atomik görüngülerin klasik düzeydeki betimlenmesinde bir belirsizliğe götürmüştür.Bu belirsizlik hem Düşünce Deneylerinin tutarlı bir betimlenmesi için gereklidir,hem de gözlenenlerle uyum sağlar.

Problemler

1. (2-1) ile tanımlanan bir dalga paketini gözönüne alınız,burada g(k)

$$\begin{aligned} g(k) &= 0 && k < -K \\ &= N && -K < k < K \\ &= 0 && K < k \end{aligned}$$

olarak verilmiş olsun.

(a) f(x)'in biçimini bulunuz.

(b) $\int_{-\infty}^{\infty} dx \; |f(x)|^2 = 1$

olmasını sağlayan N değerini bulunuz.

(c) Bu değer,N'nin $\int_{-\infty}^{\infty} dk \; |g(k)|^2 = \frac{1}{2\pi}$

olmasını sağlayan seçimine nasıl bağlıdır?

(d) (a)'daki yanıtınız için Δx'in akla yatkın bir tanımının,K'nın değerinden bağımsız olarak

$$\Delta k \; \Delta x > 1$$

verdiğini gösteriniz.

2.

$$g(k) = \frac{N}{k^2 + \alpha^2}$$

olarak verildiğinde f(x)'in biçimini bulunuz.Gene,iki fonksiyonu çiziniz ve

$$\Delta k \quad \Delta x > 1$$

nin, sizin α seçiminizden bağımsız olduğunu gösteriniz.

3. $$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

bağıntısının geçerli olduğu,özgür bir parçacığın Gauss dalga paketinin yayılma problemini gözönüne alınız.

(a) Dalga paketinin büyüklüğü 10^{-4} cm ve 10^{-8} cm olmak üzere,paket bir elektronu gösteriyorsa,

(b) Paket 1 gr kütleli bir cismi gösteriyor ve büyüklüğü 1 cm ise,(2-17)'yi kullanarak,dalga paketinin büyüklüğünde 1 sn'de oluşan kesirsel değişimi hesaplayınız.

Genişliği $\hbar/nc$ birimi ile anlatmak uygundur,burada m paketin gösterdiği parçacığın kütlesidir.

4. Bir elektron demeti 10^4 km. uzağa gidecek biçimde püskürtülmüştür.İlk paketin büyüklüğü 1 mm ve kinetik enerjisi (a) 13.6 eV,(b)100 MeV ise,vardığı yerdeki büyüklüğü ne olacaktır?

(Uyarı. Kinetik enerji ve momentum arasındaki bağıntı her zaman K.E. = $p^2/2m$ değildir!)

5. Bir dalga kılavuzunda dalgaboyu ile frekans arasındaki bağıntı,

$$\lambda = \frac{c}{\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}}$$

ile veriliyor.Böyle bir dalganın grup hızı nedir?

6. Sığ sudaki yüzey gerilim dalgaları için,frekans ve dalgaboyu arasındaki bağıntı

$$\nu = \left(\frac{2\pi T}{\rho\lambda^3}\right)^{1/2}$$

ile veriliyor.Burada T yüzey gerilimi ve ρ yoğunluktur.Dalgaların grup hızı ve bu hızla, $v_p = \lambda\nu$ olarak tanımlanan evre hızı arasındaki bağıntı nedir? Yerçekimi dalgaları (derin su) için,bağıntı

$$\nu = \left(\frac{g}{2\pi\lambda}\right)^{1/2}$$

ile veriliyor.Grup ve evre hızları nedir?

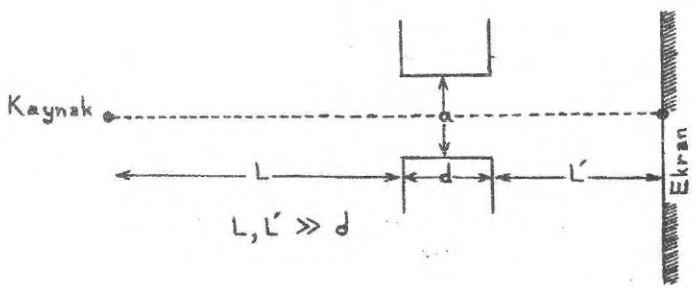
7. Enerjisi, $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

ile verilen bir harmonik salınganın taban durum enerjisini kestirmek için belirsizlik bağıntısını kullanınız.

8. Bir n=2 Bohr yörüngesindeki elektronun Bölüm 1,problem 21'de hesaplanan "yarı ömrünü" kullanarak,n=2 enerji düzeyinin enerjisindeki belirsizliği hesaplayınız.Bulduğunuz sonuç bu düzeyin enerjisi ile ne ölçüde karşılaştırılabilir?

9. Tipik büyüklüğü 10^{-12} cm olan çekirdekler,sık sık 1-10 MeV tipik enerjili elektronlar yayınlar.Belirsizlik ilkesini kullanarak 1 MeV enerjili elektronların, bozunumdan önce çekirdek içinde bulunamayacağını gösteriniz.

10. Taslağı aşağıda gösterilen aygıt,belirsizlik bağıntısında bir bozulma olacağını gösterir.Yanlamasına olan yer $\Delta y \sim a$ kesinliği ile belirlenebilir,ve L'yi istenildiği kadar büyütürek gelen demetin enine momentumu olabildiğince küçültülebilir.Aygıtı ayrıntılı biçimde çözümleyerek,yukarda yapılan kapalı varsayımı ortaya çıkarınız ve belirsizlik ilkesinin bozulmadığını gösteriniz.



KAYNAKLAR

Dalga paketleri birçok ders kitabında tartışılmıştır.Bu düzeyde en yararlı olanlar şunlardır:

S.Borowitz,Fundamentals of Wave Mechanics,W.A.Benjamin,Inc.,New York,1967.

J.L.Powell ve B.Crasemann,Quantum Mechanics,Addison-Wesley,Reading,Mass., 1961.

D.Bohm,Quantum Theory, Prentice-Hall,Englewood Cliffs,N.J.,1951.

Kuantum mekaniği ders kitaplarının hepsinde belirsizlik ilkesine yer verilmiştir. Oldukça ayrıntılı tartışmalar, Bohm'un yukarıda adı geçen kitabında ve W.Heisenberg,The Physical Principles of the Quantum Theory, Dover Publications, Inc.,1930 'da bulunabilir.

Belirsizlik bağıntılarının tartışmaları,bu kitabın sonunda listelenmiş olan daha ileri düzeydeki kitaplarda da bulunabilir.

BÖLÜM 3

Schrödinger Dalga Denklemi

Bölüm 2'de, özgürce hareket eden bir parçacığı belli yaklaşımlar içinde betimleyen bir dalga paketinin sağladığı bir parçal diferansiyel denklem elde etmiştik.Bu bakımdan,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \qquad (3\text{-}1)$$

denklemini,bir özgür parçacığın betimlenmesi için uygun denklem olarak alacağız. (2-23)'ün çıkarılmasındaki sırayı tersine çevirerek,bu denklemin en genel çözümünün

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \phi(p)\, e^{i[px - (p^2/2m)t]/\hbar} \qquad (3\text{-}2)$$

olduğunu görürüz.[Türkçevin önündeki boylandırma çarpanının nedeni Denk.(3-26)'da görülecektir.]Bu denklemin $\psi(x,y)$ çözümünün yorumlanması can alıcı bir noktadır; bu yoruma geçmeden önce,denklemin zaman türevi bakımından birinci basamaktan olması gerçeğine dikkat edelim.Bu,bir kez ψ'nin $\psi(x,0)$ başlangıç değeri verildiyse öteki bütün zamanlardaki değerlerinin bulunabileceğini belirtir.Bunun böyle olduğu denklemin ya da en genel çözümün biçiminden bellidir; sayısal bir bilgisayarın[1] gördüğü gibi

$$\psi(x,t+\Delta t) = \psi(x,t) + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \Delta t \qquad (3\text{-}3)$$

olmaktadır. $\psi(x,0)$ verildiğinde $\phi(p)$ fonksiyonu (3-2)'den bulunabilir,$t = 0$ için

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \phi(p)\, e^{ipx/\hbar} \qquad (3\text{-}4)$$

denklemi tersine çevrilebilir ve bir kez $\phi(p)$ bilinirse,çözüm tüm t değerleri

[1] Ayrık bir ağda Δt küçük fakat sıfır olmamak üzere, $\partial\psi(x,t)/\partial t$ yerine $[\psi(x,t+\Delta t) - \psi(x,t)] / \Delta t$ alınmalıdır.

için bilinir.Diferansiyel denklemde hiç bir "belirsizlik" olmadığına dikkat ediniz: Bir kez dalga paketinin başlangıç durumu belirlendiyse — buraya kadar $\psi(x,0)$ üzerinde hiç bir kısıtlama yoktur—daha sonraki tüm anlarda dalga paketi tam olarak belirlidir.

$\psi(x,t)$ için bir yorum ararken şunları akılda tutmalıyız: (1) Genel olarak $\psi(x,t)$ karmal bir fonksiyondur [örneğin (2-16)], ve (2) $|\psi(x,t)|$ fonksiyonu, parçacığın bulunduğunu sandığımız yerde büyük, onun dışında küçüktür.Bu, Bölüm 2'de tartışılan **açılma** özeliğine de bağlıdır.Max Born'nun önerdiği,

$$P(x,t)\,dx = |\psi(x,t)|^2\,dx \qquad (3\text{-}5)$$

denklemi, $\psi(x,t)$ dalga fonksiyonu ile betimlenen parçacığın t anında x ile x+dx arasında bulunabilmesi olasılığını tanımlar,ve bu öneri dalga fonksiyonunun uygun yorumunu sağlamış olur.$P(x,t)$ olasılık yoğunluğu gerçeldir,parçacığın bulunduğu sanılan yerde büyüktür ve bu yoğunluğun **açılması** belli bir parçacığın **açıldığı** anlamına gelmez; bu,zaman ilerledikçe parçacığın t=0 ikeıı bırakıldığı yerde daha az olasılıkla bulunması demektir.

Bu yorumun geçerli olması için,

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)\,dx = 1 \qquad (3\text{-}6)$$

olmasını istemeliyiz,çünkü parçacık bir yerde bulunmalıdır.(3-1) gibi çizgisel bir denklemde, $\psi(x,t)$ çözümü bir sabitle çarpılabilir,ve bu gene bir çözüm olarak kalır.Böylece Denk.(3-6), $\psi(x,t)$ çözümlerini kareleri tümlenebilen bir fonksiyonlar sınıfına sınırlar.Aşağıda göreceğimiz gibi,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\psi(x,0)|^2 < \infty \qquad (3\text{-}7)$$

olmasını istemek yeterlidir,yani başlangıç durumu dalga fonksiyonlarının karesi tümlenebilir olmalıdır.Bu şu demektir: Sonsuz bir tümlev aralığında $\psi(x,0)$, sonsuzda en azından $x^{-1/2-\epsilon}$ 'un hızıyla sıfıra gitmelidir; burada ϵ istenildiği kadar küçük olabilir,fakat pozitif bir sayı olmalıdır.Ayrıca, $\psi(x,t)$ dalga fonksiyonlarının x'e göre sürekli olması da gereklidir.

Fiziksel bakımdan anlamlı nicelik $|\psi(x,t)|^2$ olduğundan,denklemin çözümünün evresi pek önemli görünmeyebilir.Bu yanlıştır! Denk.(3-1) çizgisel olduğundan, $\psi_1(x,t)$ ve $\psi_2(x,t)$ çözüm ise,

$$\psi(x,t) = \alpha_1\psi_1(x,t) + \alpha_2\psi_2(x,t) \qquad (3\text{-}8)$$

de çözümdür; burada α_1 ve α_2 istekse karmal sayılardır.(3-8)'deki $\psi(x,t)$'nin mutlak karesi,açıkça görüldüğü gibi,iki terimin bağıl evresine bağlı olacaktır;bu çok önemlidir.Bunu görmenin daha fiziksel bir yolu klasik optikteki çift-yarık deneyine bakmaktır;girişim desenini,bu deneyde bu iki yarığa eşlenen dalga fonksiyonunun iki parçası arasındaki evre bağıntısı belirler.Kuşkusuz,tüm terimlerin ortak bir evre çarpanının önemsiz olduğu doğrudur.

Şimdi,t=0 'da konulan (3-6) koşulunun her zaman geçerli olduğunu göstereceğiz. Bunun için bize,Denk.(3-1) ve onun karmaşık eşleniği olan,

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*(x,t)}{\partial x^2} \qquad (3\text{-}9)$$

denklemi gerekir. Böylece

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi\right)\right]$$

olur.Akıyı

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi\right) \qquad (3\text{-}10)$$

ile tanımlarsak,

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) = 0 \qquad (3\text{-}11)$$

olduğunu görürüz. Tümlersek

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, P(x,t) = -\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) = 0 \qquad (3\text{-}12)$$

buluruz; çünkü karesi tümlenebilen fonksiyonlar için, $j(x,t)$ sonsuzda sıfır olur. Ayrıca $\psi(x)$'de süreksizlikler bulunsaydı,bu bizi akıda ve dolayısıyla olasılık yoğunluğunda delta-fonksiyonu[2] tekilliklerine götürürdü.Oysa,fiziksel olarak gözlenebilen bir nicelik için böyle tekillikler olamaz.

(3-11) bağıntısı bir korunum yasasıdır.Bu,bir x bölgesindeki yoğunlukta oluşan bir değişmenin,o bölgeye giren akıdaki net bir değişmeyle karşılandığı olgusunu anlatır:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b dx\, P(x,t) = -\int_a^b dx \frac{\partial}{\partial x} j(x,t)$$

$$= j(a,t) - j(b,t) \qquad (3\text{-}13)$$

[2] Delta fonksiyonları için bkz.Ek A.

V(x)'in gerçel olması koşuluyla,(3-1) denklemi,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) \qquad (3\text{-}14)$$

olarak değiştirilirse,P(x,t)'nin tanımı, $j(x,t)$ ve korunum yasası yine geçerlidir.Bu önemlidir;çünkü ilerde tartışacağımız gibi (3-14),bir V(x) potansiyelindeki bir parçacık için Schrödinger denklemidir.Üç boyuta genelleştirme kolayca yapılır ve Denk.(3-14)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,y,z,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z,t) + V(x,y,z)\,\psi(x,y,z,t)$$

olur,bu kısaca

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\,\psi(\vec{r},t) \qquad (3\text{-}15)$$

olarak yazılır.Denk.(3-11)'in genelleştirilmesi,

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{r},t) = 0 \qquad (3\text{-}16)$$

verir,burada

$$P(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 \qquad (3\text{-}17)$$

ve

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(\vec{r},t)\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) - \vec{\nabla}\psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)\right] \qquad (3\text{-}18)$$

dir.

P(x,t) olasılık yoğunluğu verildiğinde,x'in fonksiyonlarının beklenen değerleri hesaplanabilir.Genel olarak,

$$\langle f(x)\rangle = \int dx\, f(x)\, P(x,t) = \int dx\, \psi^*(x,t) f(x) \psi(x,t) \qquad (3\text{-}19)$$

olur[3].Bunun yalnızca,tümlev yakınsaksa anlamı vardır.Momentumu x cinsinden nasıl yazacağımızı bilmediğimizden,momentumun beklenen değerini hesaplamak istersek bu denklem bize yardımcı olmaz.Şöyle yapmaya çalışalım: Klasik olarak,

$$p = mv = m\frac{dx}{dt} \qquad (3\text{-}20)$$

olduğundan,

[3] Sonlu,ayrık,p_i olasılıklı bir "örnek uzay" için $\sum p_i = 1$'dir; herhangi bir değişkenin bu uzay üzerinden ortalama değeri ise, $\langle f\rangle = \sum f_i p_i$ olur.

$$\langle p\rangle = m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = m\frac{d}{dt}\int dx\ \psi^*(x,t)\,x\,\psi(x,t) \qquad (3\text{-}21)$$

yazacağız, bu

$$\langle p\rangle = m\int_{-\infty}^{\infty} dx\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\,x\psi + \psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)$$

verir. Tümlev işareti altında hiç bir dx/dt olmadığına dikkat ediniz. Zamanla değişen tek nicelik $\psi(x,t)$'dir, ve x'in zamana göre değişmesini bu değişim sağlar. Denk.(3-1)'i ve karmal eşleniğini kullanarak,

$$\langle p\rangle = \frac{\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\,x\psi - \psi^* x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)$$

elde ederiz. Burada

$$\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\,x\psi = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\,x\psi\right) - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\,x\,\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\,x\psi\right) - \frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\psi) + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$- \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi^* x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

olduğundan, tümlenen

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\,x\psi - \psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\psi\right) + 2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

biçimini alır, ve bunun sonucu olarak

$$\langle p\rangle = \int dx\ \psi^*(x,t)\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x}\,\psi(x,t) \qquad (3\text{-}22)$$

olur; çünkü karesi tümlenebilen fonksiyonlarda türevin tümlevi sıfırdır.

Bu, momentumun

$$p = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x} \qquad (3\text{-}23)$$

işlemcisi ile gösterileceğini ve daha genel olarak,

$$\langle f(p)\rangle = \int dx\ \psi^*(x,t)\,f\left(\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t) \qquad (3\text{-}24)$$

olacağını söyler.

Bu gösterimle donanmış olarak şimdi, Denk.(3-2)'de ortaya çıkan $\phi(p)$'nin fiziksel anlamını tartışabiliriz. Öncelikle, $\phi(p)$ zamana bağlı olmadığından, bu denklemi t=0'da incelemek yeterlidir.

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\ \phi(p) e^{ipx/\hbar} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \int dk\ \phi(\hbar k) e^{ikx}$$

olduğunu ve bir Fourier tümlevi için tersine çevirme formülünü kullanarak,

$$\phi(\hbar k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx\ \psi(x) e^{-ikx}$$

buluruz. Bunu

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx\ \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \qquad (3\text{-}25)$$

olarak da yazabiliriz. Böylece

$$\int dp\ \phi^*(p)\ \phi(p) = \int dp\ \phi^*(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx\ \psi(x) e^{-ipx/\hbar}$$

$$= \int dx\ \psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\ \phi^*(p) e^{-ipx/\hbar}$$

$$= \int dx\ \psi(x)\ \psi^*(x) = 1 \qquad (3\text{-}26)$$

buluruz. Bu sonuç matematiksel yazında Parseval teoremi olarak bilinir. Bu teorem, bir fonksiyon 1'e boylandırıldıysa onun Fourier dönüşmüşünün de 1'e boylandırıldığını söyler.

Bundan sonra,

$$\langle p \rangle = \int dx\ \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx}$$

$$= \int dx\ \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\ \phi(p) e^{ipx/\hbar}$$

$$= \int dp\ \phi(p)\ p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx\ \psi^*(x) e^{ipx/\hbar}$$

$$= \int dp\ \phi(p)\ p\ \phi^*(p) \qquad (3\text{-}27)$$

yi göz önüne alalım. Bu sonuç, Denk.(3-26) ile birlikte, $\phi(p)$'nin momentum uzayındaki dalga fonksiyonu olarak yorumlanabileceğini kuvvetle düşündürür. Böylece $|\phi(p)|^2$, parçacığı p momentumunda bulmanın olasılık yoğunluğunu verir. $\psi(x,t)$ Denk.(3-14)'ün bir çözümü olduğundan, $\phi(p,t)$'yi

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \phi(p,t) e^{ipx/\hbar} \qquad (3\text{-}28)$$

ile tanımlayabiliriz.Gerçekten,genel olarak $\phi(p,t)$'nin (3-26)'yı,(3-27)'yi ya da onların yorumunu değiştirmeyen bir zaman bağımlılığı vardır.Okur,x- ve p-uzayı arasındaki bu bakışıma karşın,$p = (\hbar/i)(\partial/\partial x)$'in bir işlemci olduğunu,oysa x'in işlemci olmadığını düşünmesin diye,x'in de gerçekten bir işlemci olduğunu söyleyelim.x-uzayında özellikle basit bir biçim ortaya çıkar,fakat $\langle f(x)\rangle$ 'i momentum uzayında hesaplamak istersek,yukarda kullanılanlara çok benzer yöntemlerle

$$\langle f(x)\rangle = \int dp\ \phi^*(p,t)\ f\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) \phi(p,t) \qquad (3\text{-}29)$$

olduğunu gösterebiliriz.Başka bir deyişle,x işlemcisinin momentum uzayındaki gösterimi

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \qquad (3\text{-}30)$$

olur.

İşlemcilerin,kuantum mekaniğinde temel bir rol oynadıklarını bulacağız,ve yavaş yavaş onlarla ilgili bir çok şey öğreneceğiz.Bu noktada,yalnızca şunları belirteceğiz:

1. Alışılmış sayıların tersine,işlemciler her zaman sıradeğiştirmezler.

$$[A,B] = AB - BA \qquad (3\text{-}31)$$

'yı tanımlarsak,o zaman

$$[p,x]\psi(x,t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x\psi(x,t) - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \psi(x,t) \qquad (3\text{-}32)$$

olur,yani

$$[p,x] = \frac{\hbar}{i} \qquad (3\text{-}33)$$

değişme bağıntısını elde ederiz.Bu,klasik bir $f(x,p)$ fonksiyonunu işlemci biçiminde yazarken bir belirsizlik verir.Biz,$f(x,p)$'yi x ve p'ye göre bakışımlaştırma kuralını benimseyeceğiz.Böylece,

$$xp \rightarrow \frac{1}{2}(xp+px)$$

$$x^2p \rightarrow \frac{1}{4}(x^2p+2xpx+px^2) \qquad (3\text{-}34)$$

ve benzerleri,bulunur.

Daha sonra göreceğimiz gibi,x ve p değişkenlerini bağlayan belirsizlik bağıntısının arkasında da,bu iki değişkenin sıradeğiştiremeyişleri vardır.

2. p işlemcisinin,başındaki i ile ortaya çıkışı,p'nin beklenen değerinin gerçelliği konusunda canımızı sıkabilir.Bununla birlikte,p'nin gerçel olduğu olgusunu doğrulayabiliriz.Dalga fonksiyonunun sonsuzda sıfır olması koşuluyla,ki karesi tümlenebilen fonksiyonlar için bu böyledir,

$$\langle p\rangle - \langle p\rangle^* = \int dx\ \psi^*(x)\ \frac{\hbar}{i}\ \frac{\partial \psi}{\partial x} - \int dx\ \psi(x)\ \left(-\frac{\hbar}{i}\ \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int dx \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int dx\ \frac{\partial}{\partial x}\ (\psi^*\psi)$$

$$= 0 \qquad (3\text{-}35)$$

elde ederiz.Arasıra karesi tümlenemeyen,fakat belli periyodiklik koşulları bulunan fonksiyonları kullanmak gerekir,örneğin:

$$\psi(x) = \psi(x+L) \qquad (3\text{-}36)$$

Kendimizi $0 \leq x \leq L$ bölgesinde çalışmaya sınırlarsak, $\hbar/i\ (d/dx)$ gene hermitien bir işlemcidir,çünkü Denk.(3-35)'te,

$$\langle p\rangle - \langle p\rangle^* = \frac{\hbar}{i} \int_0^L dx\ \frac{\partial}{\partial x}\ (\psi^*(x)\ \psi(x))$$

$$= \frac{\hbar}{i}\ |\psi(L)|^2 - \frac{\hbar}{i}\ |\psi(0)|^2 = 0 \qquad (3\text{-}37)$$

olur.Akla yatkın tüm dalga fonksiyonları için,beklenen değeri gerçel olan bir işlemciye hermitien işlemci denir,ve dolayısıyla p de x gibi hermitien bir işlemcidir[4].

Bu bölümü şu noktayı belirterek bitirelim: $(\hbar/i)(\partial/\partial x) = p_{op}$ özdeşleşmesi ile,

$$i\hbar\ \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\ \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2}$$

denklemini

$$i\hbar\ \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{p_{op}^2}{2m}\ \psi(x,t) \qquad (3\text{-}38)$$

biçiminde yazabiliriz.Sağ yandaki işlemci tam olarak,özgür bir parçacığın enerjisidir.Bunu,bir potansiyel içindeki parçacığa genelleştirirsek,

$$i\hbar\ \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left[\frac{p_{op}^2}{2m} + V(x)\right] \psi(x,t) \qquad (3\text{-}39)$$

[4] İşlemcilerle ilgili bazı matematiksel geritemeller Ek-B'de tartışılmıştır.

ya da daha açıkça,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) \qquad (3\text{-}40)$$

yazarız.(3-1)'i genelleştiren bu denklem,göresiz kuantum mekaniğinin temel denklemidir,ve ilk olarak Schrödinger tarafından önerilmiştir.Yukarda elde edilen Schrödinger denklemi,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H \quad \psi(x,t) \qquad (3\text{-}41)$$

biçiminde de yazılabilir,burada H enerji işlemcisidir.H'ye çoğu zaman Hamiltonien denir,çünkü o,klasik mekaniksel Hamilton fonksiyonunun işlemci dilindeki anlatımıdır. V(x) gerçel bir potansiyel ise,p ve dolayısıyla p^2 birer hermitien işlemci olduğundan,[5]

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \qquad (3\text{-}42)$$

de hermitiendir.

Özet olarak:

1. Dalga fonksiyonlarının zaman bağımlılığı,birinci basamaktan olan

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H \ \psi(x,t)$$

parçal diferansiyel denklemi ile verilir; burada $H, p^2/2m + V(x)$ işlemcisidir.

2. Dalga fonksiyonları,karesi tümlenebilen fonksiyonlar olarak sınırlanmıştır.

3. Parçacığın x noktasında bulunmasının olasılık yoğunluğu

$$P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$$

dir.

4.

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \ \phi(p,t) e^{ipx/\hbar}$$

ile tanımlanan $\phi(p,t)$ fonksiyonu momentum uzayındaki dalga fonksiyonudur,ve parçacığın p momentumunda bulunmasının olasılık yoğunluğu $|\phi(p,t)|^2$'dir.

5. p momentumu ve x konumu işlemcilerdir,yani sıra değiştirme özelikleri bulunmadığı için,sayılardan ayrılan niceliklerdir.x-uzayında,momentum işlemcisi

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

[5] Artık p_{op}'deki op indisini bırakıyoruz.Onu yalnızca,p harfi ile betimlenen bir sayı ile karıştırma tehlikesi olduğu zaman kullanacağız.

biçimini alır;ve p uzayında,x işlemcisi

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$$

biçimini alır;ikisi de,x ve p arasındaki

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

temel değişme bağıntısı ile tutarlıdır.

Şimdi artık kuantum mekaniğinin nicel bir tartışması için hazırız.Dalga paketinin bir parçacığı gösterimlemesi kavramından da vaz geçtik.Bu kavram Schrödinger denkleminin akla yatkın olmasını sağlamak için yararlıydı;fakat şimdi,parçacığı "dalgalardan yapılmış" gibi düşünmeden,bize parçacığın nerede olduğunu söyleyen, $\psi(x,t)$ ve onun olasılıkla ilgili yorumudur.

Problemler

1. Denk.(3-2) ve (3-4)'ü kullanarak özgür parçacık Schrödinger denkleminin çözümünü,

$$\psi(x,t) = \int dx' K(x,x';t)\,\psi(x',0)$$

biçiminde yazınız.$K(x,x';t)$ için,bir tümlev biçiminde bir gösterim elde ediniz,ve tümlevi değerlendiriniz.

$$K(x,x';0) = \delta(x-x')$$

olduğunu gösteriniz.

2. Bir $V(x)$ potansiyeli bulunan,(3-14) Schrödinger denklemini düşününüz. $V(x)$'in gerçel olması koşuluyla, $\psi(x,t)$ bu denklemin bir çözümü ise,(3-11) korunum yasasının gene geçerli olduğunu gösteriniz.

3. $V(x)$'in karmal olduğunu varsayınız. $\partial P(x,t)/\partial t$ ve $d/dt \int dx P(x,t)$ için birer ifade elde ediniz.Soğurma durumunda sonuncusu negatif olmalıdır.Bu, $V(x)$ için ne söyler?

4.

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial t^2} - \frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + \left(\frac{\mu c}{\hbar}\right)^2 \psi(x,t) = 0$$

Klein-Gordon denklemini göz önüne alınız. $j(x,t)$'nin biçimi,

$$j(x,t) = -\frac{\hbar}{2i\mu}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

olarak verildiğine göre,(3-11) biçiminde bir korunum yasası bulunduğunu gösteriniz.

$P(x,t)$'nin biçimi nedir? Klein-Gordon denkleminin, bir tek-parçacık denklemi için (yani Schrödinger denklemi için bir başka seçenek) neden iyi bir aday olmadığı konusunda bir tartışma verebilir misiniz?

5. $$\psi(x) = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{-1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

verildiğine göre, şunları hesaplayınız:

(a) $\langle x^n \rangle$

(b) $\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \equiv \Delta x$

6. Prob.5'teki dalga fonksiyonu ile betimlenen bir sistem için, momentum uzayı dalga fonksiyonunu hesaplayınız. Bunu kullanarak,

(a) $\langle p^n \rangle$

(b) $\sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \equiv \Delta p$

yi hesaplayınız. Bu sonucu ve Prob.5(b)'deki sonucu kullanarak, $\Delta x \ \Delta p$ 'nin değerini bulunuz.

7. $$\psi(x) = \frac{N}{x^2 + a^2}$$

dalga fonksiyonu verildiğine göre,

(a) $\psi(x)$'i boylandırmak için gereken N'yi hesaplayınız.

(b) Yukardaki dalga fonksiyonunu, $\langle x^n \rangle$ 'yi hesaplamak için kullanınız. n'nin hangi değerleri yakınsak tümlevlere götürür?

(c) $\langle p^2 \rangle$ 'yi doğrudan doğruya, ve momentum uzayı dalga fonksiyonunu kullanarak hesaplayınız.

(d) $$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$$

tanımlarını kullanarak, bu problem için $\Delta x \ \Delta p$ 'yi hesaplayınız.

8. $$e^{ipa/\hbar} \, x \, e^{-ipa/\hbar} = x + a$$

işlemci bağıntısının doğruluğunu gösteriniz. e^A işlemcisi,

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} A^n/n!$$

olarak tanımlanmıştır. [Yol gösterme. $f(p)$, p'nin herhangi bir fonksiyonu olmak üzere $e^{ipa/\hbar} x e^{-ipa/\hbar} f(p)$ 'yi hesaplayınız, ve $x = i\hbar \left(d/dp\right)$ gösterimini kullanınız.]

9. $-\pi \leq \theta \leq \pi$ aralığına sınırlanmış olan θ açısal değişkeninin, $\psi(\theta)$

fonksiyonunu gözönüne alınız.Eğer dalga denklemleri $\psi(\pi) = \psi(-\pi)$ koşulunu sağlarsa,

$$L = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\theta}$$

işlemcisinin hermitien olduğunu gösteriniz.

10. Bir parçacığın $\phi(p)$ momentum uzayı dalga fonksiyonunu göz önüne alınız. Eğer bu fonksiyon p'nin yalnız pozitif değerleri için tanımlanmışsa,x'in hermitien bir işlemci olması için $\phi(p)$ hangi koşulları sağlamalıdır? [(3-30)'u kullanınız.]

BÖLÜM 4

Özfonksiyonlar ve Özdeğerler

Bölüm 3'de elde edilen zamana bağlı Schrödinger denklemini göz önüne alalım:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) \qquad (4\text{-}1)$$

ve bunu, tek değişkenli bir çift adi diferensiyel denkleme indirgeyerek çözmeyi deneyelim. Bunun için,

$$\psi(x,t) = T(t)u(x) \qquad (4\text{-}2)$$

yazalım; bu yazış,

$$i\hbar\, u(x) \frac{dT(t)}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) \right] T(t)$$

olmasını içerir. Bunu $u(x)T(t)$ ile bölerek,

$$i\hbar \frac{dT(t)/dt}{T(t)} = \frac{-(\hbar^2/2m)(d^2u(x)/dx^2) + V(x)\, u(x)}{u(x)} \qquad (4\text{-}3)$$

elde ederiz. Bu bağıntı, yalnız her iki yanı aynı sabite eşitse sağlanır. Bu sabite E diyelim.

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t) \qquad (4\text{-}4)$$

denkleminin çözümü, C bir sabit olmak üzere

$$T(t) = C\, e^{-iEt/\hbar} \qquad (4\text{-}5)$$

olur. Öbür denklem,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \qquad (4\text{-}6)$$

dir. Bu denkleme çoğu kez, zamandan bağımsız Schrödinger denklemi denir. Bunun yapısı gerçekten (4-1)'inkinden değişiktir. (4-1) denklemi $\psi(x,t)$'nin zaman içindeki

gelişimini betimler; Denk.(4-6) ise bir özdeğer denklemidir.Bunun ne demek istediğini açıklamak için,geçen bölümde kısaca değindiğimiz fakat tanımlamadığımız işlemci kavramına dönmeliyiz.

En genel olarak,bir fonksiyon üzerine etkiyen bir işlemci,onu başka bir fonksiyona dönüştürür.Birkaç örnek üzerinde düşünelim:

$$\begin{aligned} 0f(x) &= f(x) + x^2 \\ 0f(x) &= [f(x)]^2 \\ 0f(x) &= f(3x^2 + 1) \\ 0f(x) &= [df(x)/dx]^3 \\ 0f(x) &= df(x)/dx - 2f(x) \\ 0f(x) &= \lambda f(x) \end{aligned} \qquad (4\text{-}7)$$

Bu örneklerin tümünün ortak özeliği şudur: Bir f(x) fonksiyonu verildiğinde, 0f(x)'i belirleyen bir kural vardır.Bir de,çizgisel işlemciler denilen özel bir işlemciler sınıfı bulunmaktadır(genel 0 işlemcilerinden ayırmak için bu işlemcileri L ile göstereceğiz).Bunlar,

$$L[f_1(x)+f_2(x)] = Lf_1(x)+Lf_2(x) \qquad (4\text{-}8)$$

özeliğini taşırlar ve c isteksel bir karmaşık sayı olmak üzere,

$$Lcf(x) = cLf(x) \qquad (4\text{-}9)$$

dir[1].Böylece,listemizdeki yalnız son iki işlemci çizgisel işlemcidir.

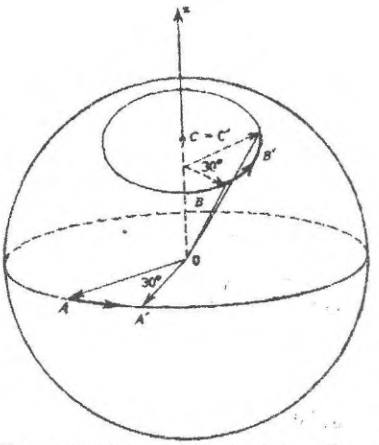
Örnekte olduğu gibi,çizgisel bir işlemci bir fonksiyonu başka bir fonksiyona dönüştürecektir:

$$Lf(x) = \frac{df(x)}{dx} - 2f(x)$$

Fonksiyonları üç-boyutlu uzaydaki vektörlere benzer olarak düşünmek öğreticidir. Bir işlemcinin işi bir vektörü başka vektöre dönüştürmektir.Tüm vektörlerin birim uzunlukta olması özel halinde,bir işlemci birim küre üzerindeki bir noktayı bir başkasına dönüştürecektir.Bu özel (fakat çok uygun) örnekte,bir işlemci bir eksen çevresinde bir dönme olabilir(şek.4-1).İşlemci,x ekseni çevresinde örneğin 30° lik bir dönme olsun.Bu işlem altında çeşitli vektörlere ne olacağını gözümüzde canlandırmak kolaydır.Özel bir özeliği olan iki vektör bulunacaktır: Kuzey ve güney kutupları gösteren birim vektörler,dönme altında yine kendilerine dönüşeceklerdir.Bu,(4-6) gibi bir işlemci denklemine özel bir örnektir;(4-6) denklemi,

$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \qquad (4\text{-}10)$$

[1] Bir de, karşıtçizgisel işlemciler vardır; bunlar için (4-9) denklemi $Lcf(x) = c^* Lf(x)$ biçimini alır.



Şek.4-1. Tüm vektörleri,birim küre üzerinde bulunan vektörler yardımı ile, 30^{o} döndüren işlemcinin bir çizimle betimlenmesi: Ekvator üstündeki vektörler için($A \rightarrow A'$), bir orta enlem üstündekiler için ($B \rightarrow B'$),ve bir kutuptaki bir vektör için ($C \rightarrow C' = C$)'dir.

olarak yazılabilir.Bu denklem,özel bir fonksiyonlar sanıfına etkiyen H Hamiltonien işlemcisinin,etkidiği fonksiyonu bir sabitle çarpılmış olarak geri vereceğini söyler.Bu sabite <u>özdeğer</u> denir.Denklemin çözümü E'ye bağlıdır,ve bundan dolayı çözümü bir E ile etiketliyoruz.H işlemcisinin E özdeğerine karşılık gelen $u_E(x)$ çözümüne <u>özfonksiyon</u> denir.Özdeğerlerin sürekli veya kesikli olabildiklerini göreceğiz.

(4-2) çözümü $u_E(x)e^{-iEt/\hbar}$ biçimindedir.(4-1) çizgisel bir denklem olduğundan,E'nin izin verilen değerleri için bu biçimdeki çözümlerin bir toplamı da bir çözümdür.Böylece (4-1)'in en genel çözümü,

$$\psi(x,t) = \left(\sum + \int dE\right) C(E)\, u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \qquad (4\text{-}11)$$

olur.Burada,C(E) özdeğerlerin isteksel bir fonksiyonudur ve toplam E'nin kesikli değerleri üzerinden,tümlev ise sürekli özdeğerleri üzerinden alınır.H işlemcisinin

özdeğerlerine enerji özdeğerleri denir;bunu,H'nin

$$H = \frac{p_{op}^2}{2m} + V(x) \qquad (4\text{-}12)$$

biçiminde olması da düşündürür.Çok basit fakat öğretici bir örneği tartışmadan önce,eğer V potansiyeli açık olarak zamana bağlı ise,denklemin ayrılmasının yapılamıyacağını belirtelim.Daha sonra,böyle bir durumda enerjinin bir hareket sabiti olmadığını göreceğiz.

A. Bir Kutu İçindeki bir Parçacık için Özdeğer Problemi.

Denk.4-6'yı,

$$V(x) = 0 \qquad |x| < a$$

$$= \infty \qquad \text{başka yerde} \qquad (4\text{-}13)$$

potansiyeli için inceleyelim.Bu,dalga fonksiyonunun $|x| > a$ için sıfır olması gerektiğini söyler,bu ise

$$u(a) = u(-a) = 0 \qquad (4\text{-}14)$$

demektir.Kutunun içinde,

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}u(x) = 0 \qquad (4\text{-}15)$$

olur.Önce,$E < 0$ olduğu zaman (4-15) denkleminin,

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - K^2u(x) = 0 \qquad (4\text{-}16)$$

biçimini alacağına dikkat edelim,burada $K^2 = 2m|E|/\hbar^2$'dir.En genel çözüm e^{Kx} ve e^{-Kx}'in çizgisel bir birleştirimidir,ve bu çözümlerin (4-14) sınır koşullarını sağlaması olanaksızdır.Öyleyse enerji özdeğerleri pozitif olmalıdır.

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (4\text{-}17)$$

yazdığımızda,(4-15) denklemi

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2u(x) = 0 \qquad (4\text{-}18)$$

biçimini alır,ve bunun çözümleri sin kx ve cos kx'tir.$u_n^{(-)}(x)$ ile göstereceğimiz sinüs çözümü için,sınır koşulları

$$k\alpha = n\pi \qquad n = 1,2,3,\ldots \qquad (4\text{-}19)$$

olacağını söyler ve böylece,

$$E_n^{(-)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2} \tag{4-20}$$

olur.Boylandırılmış çözümün,

$$u_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \tag{4-21}$$

olduğunu doğrulamak kolaydır. $u_n^{(+)}(x)$ ile gösterilen kosinüs çözümü için,

$$ka = (n - \frac{1}{2})\pi \qquad n = 1,2,3,\ldots. \tag{4-22}$$

olmalıdır,bu ise

$$E_n^{(+)} = \frac{[n-(1/2)]^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2} \tag{4-23}$$

demektir.Bu yüzden boylandırılmış çözüm,

$$u_n^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{[n-(1/2)]\pi x}{a} \tag{4-24}$$

biçimindedir. ($\pm$) işaretlerinin,$x \rightarrow -x$ yansıması altında çift/tek olma özeliği ile ilgili olduğunu göreceğiz.

Çözümler,

$$\int_{-a}^{a} dx u_m^{(+)}(x)^* \, u_n^{(+)}(x) = \int_{-a}^{a} dx u_m^{(-)}(x)^* \, u_n^{(-)}(x) = \delta_{mn}$$

$$\int_{-a}^{a} dx u_m^{(+)}(x)^* \, u_n^{(-)}(x) = 0 \tag{4-25}$$

özeliğini taşırlar,yani dikeyboyluluk koşullarını sağlarlar.Çözümler gerçel olduğundan,karmal eşlenik alma aslında gerekli değildir,fakat ilerdeki kullanımla tutarlı olması için konulmuştur.

En alçak enerji durumu olan taban durumu $u_1^{(+)}(x)$ ile gösterimlenir,ve bunun enerjisi

$$E_1^{(+)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m a^2} \tag{4-26}$$

dir.Çözümler gerçeldir ve bundan dolayı,

$$\langle p \rangle = 0 \tag{4-27}$$

sonucuna varılır.Bu,doğrudan hesapla veya bir bakışım düşüncesiyle çıkarılabilir:Gerçel olan çözümlerden herhangi biri için $\langle p \rangle$, $(\hbar/i) \times$ (tümlev) biçimindedir. $\langle p \rangle$'nin gerçel olması gerektiğinden,yalnız gerçel fonksiyonları kapsayan bu tümlev sıfır olmalıdır; veya eşdeğer olarak tümlev,aralarına d/dx'in konulduğu iki tane çift veya

iki tane tek fonksiyonunun bir çarpımını kapsar.Böylece toplam tümlenen,x'in bir tek fonksiyonudur;ve bakışımlı bir aralık üzerinden tümlendiğinde ,tümlevin değeri sıfır olmalıdır.

Çeşitli çözümler için $\langle p^2 \rangle$ 'yi hesaplayabiliriz.Kutunun içinde $p^2 = 2mE$ olduğundan,

$$\langle p^2 \rangle = 2mE_n^{(\pm)} \tag{4-28}$$

buluruz.Burada,

$$2a\sqrt{\langle p^2 \rangle} \sim 2n\pi\hbar > \hbar \tag{4-29}$$

bağıntısının belirsizlik bağıntısı ile tutarlı olduğuna dikkat ediniz[2].Ayrıca,bir çözümdeki düğüm sayısı ne kadar çoksa,enerjisinin de o kadar yüksek olacağını belirtelim(Şek.4-2).Böyle olduğu,bir çözümün d^2u/dx^2 ile ölçülen eğriliği büyükse, kinetik enerjisinin de büyük olacağından anlaşılabilir.Özel olarak,fonksiyondaki değişim büyükse,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int dx u^*(x)\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{\hbar^2}{2m}\int dx \frac{du^*}{dx}\frac{du}{dx} = \frac{\hbar^2}{2m}\int dx \left|\frac{du}{dx}\right|^2$$

nin değeri de büyük olur.

B. Açılım Postülatları

$\psi(a) = \psi(-a) = 0$ sınır koşullarını sağlayan,isteksel bir $\psi(x)$ fonksiyonu bizim çözümlerimizden kurulabilir.Bu,tüm çözümlerin

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty}\left[A_n^{(+)}u_n^{(+)}(x) + A_n^{(-)}u_n^{(-)}(x)\right] \tag{4-30}$$

biçiminde bir üstüstegelmesi olacaktır.$A_n^{(\pm)}$ katsayılarını belirlemek için dikeyboyluluk bağıntıları kullanılabilir.Örneğin,(4-25)'ten yararlanarak

$$\int dx u_n^{(+)*}(x)\psi(x)$$

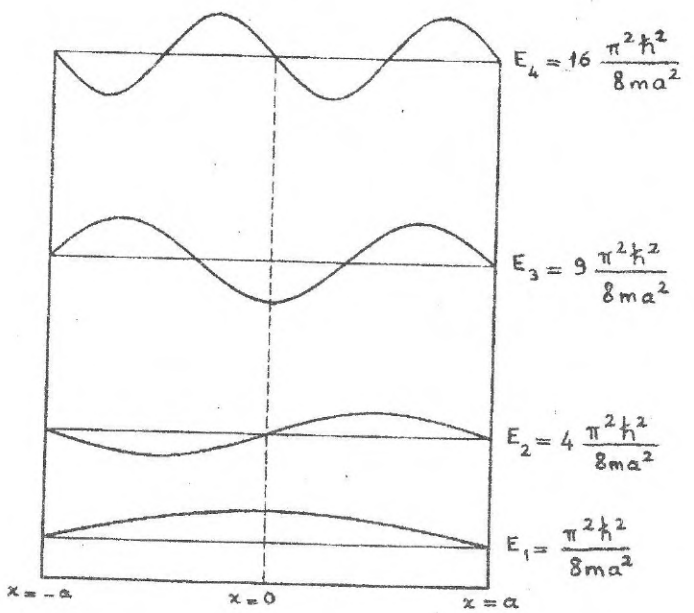
$$= \sum_{m=1}^{\infty}\left[A_m^{(+)}\int u_n^{(+)*}(x)u_m^{(+)}(x)dx + A_m^{(-)}\int u_n^{(+)*}(x)u_m^{(-)}(x)\,dx\right]$$

$$= A_n^{(+)}$$

olduğunu hesaplayabiliriz;böylece

$$A_n^{(\pm)} = \int dx u_n^{(\pm)*}(x)\,\psi(x) \tag{4-31}$$

[2] Daha üst özfonksiyonlar için, $\Delta x\,\Delta p$ 'nin özdeğerle birlikte büyümesi genel bir özeliktir.



Şek.4-2 Bir kutu içindeki parçacığın özçözümleri.

buluruz.Özgür dalga paketi tartışmamızdaki gibi,bu isteksel başlangıç paketinin zaman gelişimini hesaplayabiliriz.$u_n^{(\pm)}(x)$ çözümlerinin her biri $e^{-iE_n^{(\pm)}t/\hbar}$ zaman bağımlılığını kazandığından [Bkz.(4-11)] , genel olarak

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[A_n^{(+)} u_n^{(+)}(x)\, e^{-iE_n^{(+)}t/\hbar} + A_n^{(-)} u_n^{(-)}(x)\, e^{-iE_n^{(-)}t/\hbar} \right] \qquad (4\text{-}32)$$

elde ederiz.$A_n^{(\pm)}$ katsayılarının fiziksel anlamı konusunda bir düşünce kazanmak için, enerjinin bir isteksel durumdaki beklenen değerini hesaplayalım.Kutunun içinde $H = p^2/2m$ olduğundan,ve kutu dışından hiçbir katkı gelmediğinden ve

$$Hu_n^{(\pm)}(x) = E_n^{(\pm)} u_n^{(\pm)}(x) \qquad (4\text{-}33)$$

olduğundan,(4-25) dikeyboyluluk bağıntılarını kullanarak

$$\langle H\rangle = \int dx\, \psi^*(x)\, H\, \psi(x)$$

$$= \int dx \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \left[A_n^{(+)*} u_n^{(+)}(x)^* + A_n^{(-)*} u_n^{(-)}(x)^* \right] \right\}$$

$$\times \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \left[E_m^{(+)} A_m^{(+)} u_m^{(+)}(x) + E_m^{(-)} A_m^{(-)} u_m^{(-)}(x) \right] \right\}$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} \left(E_m^{(+)} |A_m^{(+)}|^2 + E_m^{(-)} |A_m^{(-)}|^2 \right) \qquad (4\text{-}34)$$

elde ederiz.Tam olarak aynı yoldan,

$$\int dx\, \psi^*(x)\, \psi(x) = 1$$

olduğu da gösterilebilir,ve bu

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(|A_n^{(+)}|^2 + |A_n^{(-)}|^2 \right) = 1 \qquad (4\text{-}35)$$

olmasını içerir.(4-34) denklemi (4-35) boylandırma koşulu ile birlikte,şu sonucu düşündürür: $|A_n^{(\pm)}|^2$, <u>isteksel bir durum için enerji ölçümünün $E_n^{(\pm)}$ vermesi olasılığı olarak yorumlanabilir</u>.Enerjinin olabilen değerlerinin yalnızca $E_n^{(\pm)}$ değerleri olduğunu belirtelim,bu yüzden belli bir ölçüm yalnızca $E_n^{(\pm)}$ değerlerinden birini verebilir.

Ölçüm,hangi paket için her zaman bir $E_k^{(+)}$ enerjisi (bir özdeğer) verecektir? Açıkca görüldüğü gibi,ancak

$$|A_n^{(+)}|^2 = \delta_{nk} \qquad (4\text{-}36)$$

ise böyle olacaktır;bu $\psi(x) = u_k^{(+)}(x)$ olması demektir;burada $u_k^{(+)}(x), E_k^{(+)}$ özdeğerine karşılık gelen özfonksiyondur.Bu,bizi çok önemli bir sonuca götürür: $\psi(x)$ ile betimlenen genel bir paketimiz olsun.Bir enerji ölçümü yapılırsa,sonuçta yalnızca H Hamiltonien işlemcisinin bir özdeğeri çıkabilir;bu özdeğerin çıkma olasılığı

$$P(E_n) = \left| \int dx u_n^*(x)\, \psi(x) \right|^2 \qquad (4\text{-}37)$$

dır(burada genel olması için $(\pm)$ işaretlerini bıraktık).<u>Ayrıca,E_n özdeğerini veren ölçümden sonra sistemin durumu $u_n(x)$ özfonksiyonu ile betimlenir</u>;çünkü böyle olmazsa,ölçümün yinelenmesinin aynı sonucu vermesi gerekmeyecektir,oysa ölçümün bir anlamı olması için,verilen bir sistemin bir ölçüsünün yeniden elde edilebilir olması temeldir.Burada söylenenler,bir kutu içindeki parçacık problemine özgü değildir.Tekrar tekrar görüleceği gibi,daha genel sistemler [bir V(x) bulunan] için,ve Hamiltonienler dışındaki başka hermitien işlemçiler için de geçerlidir; ve bu söylenenler kuantum mekaniğinin özünde yatar.

C. Parite

Bir kutu içindeki parçacığın özfonksiyonları iki sınıfa ayrılmıştı: x'e göre çift olanlar (+) ile gösterilmişti, ve x'e göre tek olanlar (-) ile gösterilmişti. Örneğin x'e göre çift olan bir $\psi(x)$ dalga paketiyle başlarsak, o zaman (4-30)'daki tüm $A_n^{(-)}$'ler sıfır olmalıdır. Böylece denklem (4-32), paketin her zaman x'e göre çift kalacağını gösterir. Aynı şey başlangıçta tek olan bir paket için de geçerlidir. Böylece $x = 0$ çevresinde bakışımlı olarak merkezlenmiş olan kutumuz için, "teklik" ve "çiftlik"in zamandan bağımsız olduğunu buluruz. Bizim için, herhangi bir hareket sabiti ilginç olduğundan, tartışmayı biraz daha geliştireceğiz.

Bunun için P <u>parite işlemcisini</u> tanıtalım; bu işlemcinin rolü, $x \to -x$ yansımasını yapmaktır. Böylece, herhangi bir $\psi(x)$ paketi için,

$$P\,\psi(x) = \psi(-x) \tag{4-38}$$

olur. Çift bir paket için,

$$P\,\psi^{(+)}(x) = \psi^{(+)}(x) \tag{4-39}$$

ve tek bir paket için,

$$P\,\psi^{(-)}(x) = -\,\psi^{(-)}(x) \tag{4-40}$$

buluruz. Bu iki denklem özdeğer denklemleridir; ve gösterdiğimiz gibi, çift fonksiyonlar P'nin +1 özdeğerli özfonksiyonları, tek fonksiyonlar ise P'nin -1 özdeğerli özfonksiyonlarıdır. Bir kutu içindeki parçacık probleminde, $u_n^{(\pm)}(x)$ fonksiyonları yalnızca H'nin özfonksiyonları değildir; <u>aynı zamanda P'nin de özfonksiyonlarıdır</u>.

Özdeğerler yalnızca ± 1 olabilir:

$$Pu(x) = \lambda\, u(x) \tag{4-41}$$

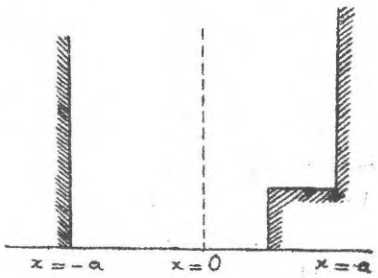
olduğunu düşünelim. P'yi yeniden uygularsak,

$$P^2 u(x) = P\,\lambda\, u(x) = \lambda^2 u(x) \tag{4-42}$$

buluruz. Fakat $P^2 u(x) = u(x)$'dir, çünkü iki yansıma hiç bir şeyi değiştirmeyecektir. Bu yüzden $\lambda^2 = 1$, yani $\lambda = \pm 1$ olur. İstenilen bir $\psi(x)$ fonksiyonu her zaman, bir çift ve bir tek fonksiyonun bir toplamı olarak yazılabilir:

$$\psi(x) = \frac{1}{2}\left[\psi(x) + \psi(-x)\right] + \frac{1}{2}\left[\psi(x) - \psi(-x)\right] \tag{4-43}$$

Öyleyse, önceki örneğimizde tartışılan H'nin özfonksiyonlarının tam benzeri olarak, herhangi bir fonksiyon bu yeni işlemcinin özfonksiyonları türünden de açılabilir. Bu da Hermitien işlemcilerin genel bir özeliğidir: <u>Herhangi bir Hermitien işlemcinin özfonksiyonları bir tam küme oluşturur, ve herhangi bir fonksiyon bu özfonksiyonlar türünden açılabilir</u>. Herhangi bir $\psi(x)$ durumu için $\langle P \rangle$'nin gerçel olduğunun gösterilmesini okura bırakıyoruz; bu özelik, P işlemcisinin hermitien olmasını içerir.



Şek.4-3. Yansımalar altında hiç bir bakışımı olmayan kutu.

Kutuyu x = 0'da merkezlediğimiz için,teklik ve çiftlik açıkca ortaya çıkmıştır.Kutuyu 0 ile 2a arasına koysaydık,yine bir şey değişmeyecekti; ve bu kez ise x = a'ya göre yansımalar için,bakışım bulunacaktı.Ancak böyle bir bakışım çok açık değildir.Buradan alınacak ders,bir kuantum mekaniği problemini çözerken,her zaman Hamiltonien'deki bakışımlara dikkat etmek ve bakışımları en açık biçimde sergileyecek koordinatları seçmektir.Kutu düzgün değilse (Şek.4-3),koordinatları ne kadar değiştirirsek değiştirelim ortaya bir bakışım çıkmaz.Hamiltonien'de bakışım bulunması önemli bir olgudur[3].Bir çift fonksiyonun hangi koşullar altında her zaman çift kalacağı araştırılırsa,bakışım belki daha açıkca görülebilir.

$$\psi(x,0) = \psi(-x,0) \equiv \psi^{(+)}(x) \tag{4-44}$$

olsun.Zaman içindeki gelişim,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H\,\psi(x,t) \tag{4-45}$$

ile verilir.Bu denkleme P'yi uygularsak,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} P\,\psi(x,t) = PH\,\psi(x,t) \tag{4-46}$$

elde ederiz.Ancak özel koşullar altında,

$$PH\,\psi(x,t) = HP\,\psi(x,t) \tag{4-47}$$

[3] Kutu problemini çözerken,duvarları potansiyelin,dolayısıyla Hamiltonien'in bir parçası olarak düşünürüz.Hamiltonien yerine sınır koşullarından söz etmemizin nedeni budur.

olabilir;bu bağıntı,$x \rightarrow -x$ için H çift ise sağlanır,bu da $V(x)$'in çift bir fonksiyon olması demektir(d^2/dx^2 çifttir).Böylece

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [P\,\psi(x,t)] = H[P\,\psi(x,t)] \tag{4-48}$$

yazabiliriz.Bu nedenle,

$$\psi^{(+)}(x,t) = \frac{1}{2}(1 + P)\,\psi(x,t) \tag{4-49}$$

ve

$$\psi^{(-)}(x,t) = \frac{1}{2}(1 - P)\psi(x,t) \tag{4-50}$$

fonksiyonları ayrı ayrı Schrödinger denklemini sağlarlar,ve başlangıç durumunun çift (veya tek) olmasına bağlı olarak birbirlerine karışmazlar.Paritenin zamandan bağımsız olması koşulu yanlızca,olabilen tüm durumlar için

$$(PH - HP)\psi(x,t) = 0 \tag{4-51}$$

ise sağlanır.Bu P ve H işlemcilerinin sıra değiştirmesi demektir:

$$[P,H] = 0 \tag{4-52}$$

Bu önemli koşulun oldukça genel olduğu görülecektir: Zamana açıkça bağlı olmayan ve H Hamiltonien'i ile sıra değiştiren herhangi bir işlemci bir hareket sabitidir.Özel olarak,eğer potansiyel zamanla değişiyorsa,yani $V(x,t)$ ise,klasik mekanikte olduğu gibi,enerjinin kendisi de bir hareket sabiti değildir: V,t'ye bağlıysa,denklemi bir zaman bağımlılığı denklemine ve bir enerji özdeğer denklemine ayırmanın olanaksız olduğunu düşününüz.

D. Momentum Özfonksiyonu ve Özgür Parçacık

Parite konusundaki tartışmalar,özfonksiyonları ve özdeğerleri bulunan işlemcinin yalnızca H enerji işlemcisi olmadığını göstermişti.Şimdi momentum işlemcisi için,özdeğer denklemini çözelim:

$$p_{op}u_p(x) = pu_p(x) \tag{4-53}$$

$p_{op} = (\hbar/i)(d/dx)$ olduğundan,bu denklem

$$\frac{du_p(x)}{dx} = \frac{ip}{\hbar}\,u_p(x) \tag{4-54}$$

verir.Bu denklemin çözümü,

$$u_p(x) = Ce^{ipx/\hbar} \tag{4-55}$$

dir.Burada C boylandırmayla belirlenecek bir sabittir;ve p özdeğeri gerçeldir,böylece özfonksiyon $+\infty$ 'da veya $-\infty$ 'da patlamaz. Bu,p üzerindeki tek bağ koşuludur:p_{op}'nin

sürekli bir spektrumu vardır deriz.(4-25)'e benzer olarak,özfonksiyonların dikeyboyluluk koşullarına uymasını bekleyebiliriz.

$$\int dx\, u^{*}_{p'}(x)\, u_p(x) = |C|^2 \int dx\, e^{i(p-p')x/\hbar}$$

$$= 2\pi\, |C|^2 \hbar\ \delta(p-p') \qquad (4\text{-}56)$$

olduğunu göz önüne alalım.

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx/\hbar} \qquad (4\text{-}57)$$

seçimiyle,(4-56) denklemi

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u^{*}_{p'}(x)\, u_p(x) = \delta(p-p') \qquad (4\text{-}58)$$

verir.Bu denklemin (4-25)'ten tek değişikliği,kesikli indisler için uygun olan δ_{mn} Kroenecker deltası yerine,sürekli indisler için $\delta(p-p')$ Dirac delta fonksiyonunun gelmesidir.

Herhangi bir $\psi(x)$ dalga paketinin,özfonksiyonların bir tam kümesi türünden açılabilmesi burada da geçerlidir.Burada (4-30) denkleminin benzeri,sürekli bir p indisi üzerinden toplam yaptığımızı yansıtmalıdır,böylece

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\ \phi(p)\, \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \qquad (4\text{-}59)$$

yazarız.(4-57)'deki kapalı yoruma göre $|\phi(p)|^2$,isteksel bir $\psi(x)$ paketi için bir momentum ölçümünün p özdeğerini vermesi olasılığıdır,burada

$$\phi(p) = \int dx \left(\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)^{*} \psi(x) \qquad (4\text{-}60)$$

dir.Böylece,Bölüm 3'de $\phi(p)$ için yapılan varsayımı doğrulamış oluruz(Bkz.Denk. 3-30).

Şimdi özgür parçacık Hamiltonien'ine dönelim.V(x) her yerde sıfır olunca,enerji özdeğer denklemi

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2u(x) = 0 \qquad (4\text{-}61)$$

verir,burada $k^2=2mE/\hbar^2$ dir.Çözümler e^{ikx} ve e^{-ikx} , veya bunların çizgisel birleştirimidir,örneğin cos kx ve sin kx biçiminde.Bu çözümlerin tümünün güçlüğü şudur: Bunların kareleri tümlenemez;çünkü $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |A e^{ikx} + B e^{-ikx}|^2$, A ve B'nin tüm değerleri için ıraksar.

Bu güçlükten kurtulmanın üç yolu vardır.

(a) (4-61) ile tanımlanan problemi,bir kutu içindeki parçacığın sınır durumu olarak düşünebiliriz;bu sınır durumda kutunun duvarları sonsuza gider,yani $a \to \infty$ olur.Bu sınırda,n'nin çok büyük olmaması ve böylece,

$$\frac{n\pi}{a} = k \qquad (4\text{-}62)$$

nin sonlu[4] olması koşuluyla,(4-21) ve (4-24) çözümleri $1/\sqrt{a}$ boylandırma çarpanlarının dışında tam olarak bellidir.O zaman (4-24) çift çözümlerinde,$(n - \frac{1}{2})$'deki $\frac{1}{2}$'yi atabiliriz,ve

$$\frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx \qquad \frac{1}{\sqrt{a}} \cos kx \qquad (4\text{-}63)$$

çözümlerini elde ederiz.$1/\sqrt{a}$ çarpanlarını koruyabiliriz: Sistem için sorabileceğimiz herhangi bir fiziksel sorunun yanıtında,bu çarpanlar düşecektir[5].Bunları korumak bazen yararlıdır; çünkü onların sonuçta bulunmaları,bir yanlışlık yapıldığını gösterir.

(b) Dalga paketleri ile de çalışabiliriz.

$$\psi(x) = e^{ikx} \qquad (4\text{-}64)$$

biçimindeki bir çözüm,(4-59)'un özel bir durumudur;bu özel durum için

$$\phi(p) = \sqrt{2\pi\hbar}\ \delta(p - \hbar k) \qquad (4\text{-}65)$$

dır.Bu,tepesi sonsuz(yüksek) olan bir momentum-uzayı dağılımı demektir.Bu sınırlayıcı $\phi(p)$ yerine,çok keskin bir tepesi olan $\sqrt{2\pi\hbar}\, g(p-\hbar k)$ fonksiyonunu aldığımızı düşünelim.O zaman e^{ikx} yerine,

$$\psi(x) = \int dp\, e^{ipx/\hbar}\, g(p - \hbar k)$$

$$= e^{ikx} \int dq\, e^{iqx/\hbar}\, g(q) \qquad (4\text{-}66)$$

gelir;bu,x'in çok geniş bir fonksiyonu ile çarpılmış olan e^{ikx} düzlem dalgasıdır.Bu fonksiyonu,fiziksel bakımdan ilginç olan bölge boyunca hemen hemen sabit olacak kadar geniş yapabiliriz.Şimdi momentumdaki belirsizlik $\hbar$/(x-paketinin boyu) büyüklük basamağında olacaktır,ve payda makroskobik büyüklükteyse bu belirsizlik önemsiz sayılabilir.Böylece,fiziği hiç değiştirmeden matematiksel gerekleri sağlarız.Gerçekten dalga paketi betimlemesi,aslında fiziksel olarak neler olduğuna en yakın bir betimlemedir.Çünkü başlangıç durumunu hazırlamanın herhangi bir yo-

[4] x'i de sonlu tutuyoruz,ve a'nın sonlu bir kesri olan x'in değerleri ile özel olarak ilgilenmiyoruz.

[5] Duvarların varlığına bağlı olan bir soru fiziksel olarak anlamsızdır.Örneğin, "Bir dalga paketinin duvarlara gitmesi ve x = 0'a dönmesi ne kadar sürer?" sorusu,fiziksel bakımdan ilgisiz diye sınıflandırdığımız bir sorudur.

lu,örneğin bir elektron tabancasının ateşlenmesi,hiç bir zaman uygulanmada tam bir momentum-özdurumu yaratamaz.

(c) e^{ikx} gibi bir dalga fonksiyonu için,parçacık uzayın herhangi bir bölgesine kapatılmamıştır,bu yüzden parçacığı herhangi bir yerde bulma olasılığı sıfırdır; güçlük bu olgudan gelir.Parçacığı uzayın herhangi bir sonlu bölgesinde bulma olasılığını kapsayan sorular sormazsak,ortaya hiç bir sorun çıkmaz.Boylandırma güçlüğünden kaçınmanın bir yolu,olasılık akımı ya da akı ile çalışmaktır; Bölüm 3'ün başında tartışılmış olan akı ,

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d\psi^*(x)}{dx}\psi(x)\right] \qquad (4\text{-}67)$$

dir.$Ce^{ipx/\hbar}$ biçimindeki bir dalga fonksiyonu için akı $|C|^2$ p/m ; $Ce^{-ipx/\hbar}$ biçimindeki dalga fonksiyonu için ise akı $-|C|^2$ p/m 'dir.Bir-boyutlu bir problem için v = p/m hızı ile giden parçacıkların,1 parçacık/cm yoğunluğundaki akısının tam olarak v olduğunu belirtelim—bu bir x = x_0 noktasından saniye başına geçen parçacık sayısıdır—; böylece $|C|^2$'nin,cm başına düşen parçacık yoğunluğunu gösterimlediğini anlarız.Öyleyse (4-57),cm başına $1/2\pi\hbar$ yoğunluğundaki parçacıkları gösterimler.

Üç boyutta,

$$u_{\vec{p}}(\vec{r}) = Ce^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \qquad (4\text{-}68)$$

olmak üzere akı $|C|^2\ \vec{p}/m$ olacaktır ve bu,parçacıkların $\vec{v} = \vec{p}/m$ hızıyla giderken, $\vec{p}$'ye dik bir birim yüzeyden cm^3 başına $|C|^2$ yoğunluğuyla geçen parçacıkların bir akışına karşılık gelir(Şek.4-4).

(4-61) enerji özdeğer denkleminin e^{ikx} ve e^{-ikx} biçiminde iki bağımsız çözümü vardır; eşdeğer olarak,cos kx ve sin kx gerçel çözümleri çifti de bağımsızdır.Hangi çifti seçersek seçelim,bir kutu içindeki bir parçacık probleminin tersine,enerjileri aynı olan iki çözüm bulunduğunu belirtelim.Bu,sık sık ortaya çıkan bir duruma örnektir: Hermitien bir işlemcinin aynı özdeğerine karşılık gelen birden fazla bağımsız özfonksiyon bulunabilir.Böyle olduğunda,bir katmerlilik vardır.

Yukarıdaki iki halde,iki çözüm diktir: k ≠ 0 için,

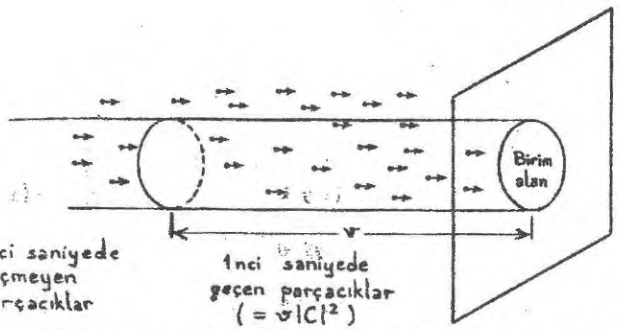
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,(e^{-ikx})^* e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{2ikx} = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \sin kx \cos kx = 0 \qquad (4\text{-}69)$$

dir.Her zaman,buradaki gibi,doğru olan çizgisel birleştirimler yapma olanağı vardır. Kuşkusuz,böyle çizgisel birleştirimler,özdeğerin(örneğin enerji) farklı değerlerine karşılık gelen özfonksiyonlara diktir[6].

Katmerli iki özfonksiyonu ayırt eden nedir? (e^{-ikx} , e^{ikx}) kümesi için

[6] Bak. Ek B.



Şekil 4-4. Parçacıkların hızı ve akı arasındaki bağıntı;akı,hıza dik bir birim yüzeyden birim zamanda geçen parçacık sayısıdır.

ayrım şöyledir: Bunlar momentum işlemcisinin özfonksiyonlarıdır,ve

$$p_{op}\, e^{\pm ikx} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} e^{\pm ikx} = \pm \hbar k\, e^{\pm ikx} \qquad (4\text{-}70)$$

olduğundan farklı momentum özdeğerlerine karşılık gelirler.Benzer olarak,(cos kx, sin kx) çifti ise,parite işlemcisinin farklı özdeğerlerine karşılık gelen özfonksiyonlarıdır:

$$P \cos kx = \cos kx$$

$$P \sin kx = -\sin kx \qquad (4\text{-}71)$$

Her iki halde de,katmerli özfonksiyonları ayıran,onların aynı zamanda başka bir hermitien işlemcinin de özfonksiyonları olmalarıdır. p_{op} ve P işlemcilerinin ikisinin de,bu problemdeki $p_{op}^2/2m$ Hamiltonien'i ile değişme özeliği vardır.İlerde bunun, ortak özfonksiyonların varlığı için gerekli bir koşul olduğunu göreceğiz.Örneğin, p_{op} ve P'nin değişme özeliği yoktur[çünkü $(\hbar/i)(d/dx), x \rightarrow -x$ altında işaret değiştirir], ve bu yüzden bu işlemcilerden birinin özfonksiyonları hiç bir zaman,öbürünün de özfonksiyonları olamaz.

İncelediğimiz bu iki basit problemden kuantum mekaniği konusunda pek çok şey öğrenmiş olduk.Bu konulara ilerdeki bölümlerde döneceğiz ve bunları genelleştireceğiz.Bölüm 5'te gene bazı çok basit problemleri göz önüne alacağız,fakat bu kez matematiksel özeliklerden çok fiziksel sistemler üzerinde duracağız;öyle ki,bu problemleri bu fiziksel sistemlerin basit modelleri olarak inceleyeceğiz.

Problemler

1. Aşağıdaki işlemciler veriliyor:

(a) $O_1\psi(x) = x^3\psi(x)$ (b) $O_2\psi(x) = x\frac{d}{dx}\psi(x)$

(c) $O_3\psi(x) = \lambda\psi^*(x)$ (d) $O_4\psi(x) = e^{\psi(x)}$

(e) $O_5\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} + a$ (f) $O_6\psi(x) = \int_{-\infty}^{x} dx'(\psi(x')x')$

Bunlardan hangileri çizgisel işlemcidir?

2.

$$O_6\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

özdeğer problemini çözünüz. λ özdeğerinin hangi değerleri, karesi tümlenebilen özfonksiyonlara götürür? (İpucu: Denklemin iki yanının x'e göre türevini alınız.)

3. Aşağıdaki değişme bağıntılarını hesaplayınız:

(a) $[O_2, O_6]$

(b) $[O_1, O_2]$

$[A,B]$'yi hesaplamanın yolu, $A(B\psi)-B(A\psi)$'yi $C\psi$ biçiminde yazmaktır.

4. (4-21) ve (4-24) denklemleriyle verilen $u_n^{(\pm)}(x)$ için,

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle}$$

yi hesaplayınız. (4-28)'de verilen $\langle p^2\rangle$'yi kullanarak,

$$\Delta p \ \Delta x$$

i hesaplayınız. Bu, daha üst durumlar için belirsizliğin n ile arttığını belirten özeliktir.

5. Kenarları $x = 0$ ve $x = L$'de olan bir kutudaki bir parçacık için Schrödinger denklemini

$$\psi(0) = \psi(L)$$

sınır koşulu ile çözünüz. Özdeğerler ve boylandırılmış özfonksiyonlar nelerdir?

6. Bir parçacık, kenarları $x = \pm a$ 'da olan bir kutuda taban durumunda bulunuyor. Kutunun kenarları birden bire $x = \pm b$ 'ye $(b > a)$ gidiyor. Yeni potansiyel için, parçacığın taban durumunda bulma olasılığı nedir? İlk uyarılmış durumda bulma olasılığı nedir? İkinci durumdaki basit yanıtın basit bir açıklaması vardır. Bu nedir?

7. Bir parçacığın, kenarları $x = \pm a$ 'da olan kutunun sol yarısında yerelleşmiş olduğu biliniyor. Eğer sol yarıdaki tüm x değerleri eşit olasılıklıysa,

parçacığı t=0'da betimleyen dalga fonksiyonu nedir? Daha sonraki anlardaparçacık yerelleşmiş olarak kalacak mıdır?

Bir enerji ölçümünün,taban durumu enerjisini ve ilk uyarılmış durumun enerjisini vermesi olasılığını hesaplayınız.

8. Bir parçacık kenarları x = 0 ve x = L'de olan bir kutunun taban durumundadır.Kutunun duvarları birdenbire $\pm\infty$ 'a gidiyor,böylece parçacık özgür oluyor.Parçacığın momentumunun (p,p+dp) aralığında olması olasılığı nedir? Duvarların kaldırılmasından sonra parçacığın enerjisi $p^2/2m$ dir,ve bunun taban durumu enerjisine eşit olması gerekmez.Enerji korunumunun bu görünür eksikliği için bir açıklama verebilir misiniz?

9. Yukardaki hesaplamaları,başlangıçta n'yinci özdurumda bulunan parçacık için yineleyiniz.Karşılık gelen olasılığın,

$$\frac{2n^2\pi}{\hbar L^3}\,\frac{1-(-1)^n\cos pL/\hbar}{\left[(p/\hbar)^2-(n\pi/L)^2\right]^2}$$

olarak verildiğini gösteriniz.Dağılımı çiziniz.Dağılımın belirsizlik bağıntısına uyduğunu,ve n büyük olduğu zaman,sonucun karşılığı bulunma ilkesiyle uyuştuğunu gösteriniz.

10. Özgür uzaydaki bir parçacık başlangıçta,

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

dalga paketi ile betimleniyor.

(a) Momentumunun (p,p+dp) aralığında olması olasılığı nedir?

(b) Enerjinin beklenen değeri nedir? Yanıt neden oldukça kabacadır; dalga fonksiyonunun "boyutlarına" ve belirsizlik ilkesine dayalı kaba bir uslamlama verebilir misiniz?

11. Bir parçacığın dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}$$

ile veriliyor.Bunun gösterimlediği akı nedir?

12.

$$\psi(x) = u(x)\,e^{ikx}$$

dalga fonksiyonu ile betimlenen bir parçacığın akısı nedir? Burada u(x) gerçel bir fonksiyondur.

13. Kenarları $x = \pm a$ 'da olan bir kutu için özfonksiyonları göz önüne alalım. Tümlev işlemi yapmadan,

$$x^2p^3 + 3xp^3x + p^3x^2$$

niceliğinin beklenen değerinin,tüm özfonksiyonlar için sıfır olduğunu kanıtlayınız.

14.

$$P\,\psi(x) = \psi(-x)$$

ile tanımlanan parite işlemcisinin hermitien bir işlemci olduğunu kanıtlayınız. Ayrıca P'nin +1 ve -1 özdeğerlerine karşılık gelen özfonksiyonlarının dik olduğunu da kanıtlayınız.

Kaynaklar

İkinci basamaktan diferansiyel denklemlerin özeliklerinin kuantum mekaniğine bağlı olarak ayrıntılı bir tartışması, J.L.Powell ve B.Crasemann, Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Inc., Reading Mass., 1961, ve D.S. Saxon, Elementary Quantum Mechanics, Holden-Day, San Francisco (1968)'de bulunabilir.

Ayrıca, kitabın arkasında listelenmiş olan daha ileri ders kitaplarından herhangi birine bakınız.

BÖLÜM 5

BİR-BOYUTLU POTANSİYELLER

Burada tek boyutlu hareketin bazı basit problemlerini çözeceğiz.Bunlar,bazı klasik olmayan etkileri açıkladığından ilginçtir; ayrıca da,biz üç-boyutlu bir dünyada yaşıyorsak bile birçok fiziksel durum etkin olarak bir-boyutludur.

A. Potansiyel Basamağı

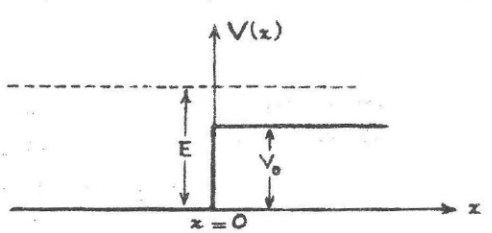
Bu problem için V(x)'in biçimini,

$$V(x) = 0 \qquad x < 0$$
$$= V_o \qquad x > 0 \tag{5-1}$$

olarak alıyoruz(Şek.5-1).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)\,u(x) = Eu(x) \tag{5-2}$$

Schrödinger denklemini,



Şekil 5-1. Potansiyel basamağı.

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right] u(x) = 0 \qquad (5\text{-}3)$$

olarak yazalım.Alışıldığı gibi,

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \qquad (5\text{-}4)$$

diyelim,ve

$$\frac{2m(E - V_o)}{\hbar^2} = q^2 \qquad (5\text{-}5)$$

niceliğini de tanımlayalım.$V(x) = 0$ olduğu $x<0$ için,(5-3)'ün en genel çözümü

$$u(x) = e^{ikx} + R\, e^{-ikx} \qquad (5\text{-}6)$$

biçimindedir.Bu,artı x doğrultusunda giden bir akıya karşılık gelir,ve bu akımın büyüklüğü

$$j = \frac{\hbar}{2im}\left[(e^{-ikx} + R^* e^{ikx})(ik e^{ikx} - ikR e^{-ikx}) - \text{karmal eşleniği}\right]$$

$$= \frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) \qquad (5\text{-}7)$$

dir. e^{ikx}'i,akısı $\hbar k/m$ olan bir <u>gelen dalga</u> olarak görebiliriz.Hiçbir potansiyel olmasaydı, e^{ikx}'i bütün x'ler için çözüm olarak seçebilirdik,bu yüzden R'yi potansiyelin varlığına bağlarız.Bu potansiyel,R e^{-ikx} yansıyan dalgasının doğmasına neden olur; yansıyan akı ise $\hbar k|R|^2/m$'dir.

$x > 0$ için,çözümü

$$u(x) = T\, e^{iqx} \qquad (5\text{-}8)$$

olarak yazalım.$x > 0$ için en genel çözüm, e^{iqx} ve e^{-iqx} 'in bir çizgisel birleştirimidir;fakat e^{-iqx} 'in bulunduğu bir terim,$+\infty$ 'dan eksi yönde gelen bir dalgayı betimleyecektir.Oysa,kurduğumuz"deney"de,sağ yandaki dalga yalnızca geçen dalga olabilir.(5-8)'e karşılık olan akı,

$$j = \frac{\hbar q}{m}|T|^2 \qquad (5\text{-}9)$$

dir.Problemde zamana bağlılık olmadığından,(3-11) korunum yasası $j(x)$'in x'den bağımsız olmasını içerir.Bu yüzden soldaki akı sağdaki akıya eşit olmalıdır,böylece

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}|T|^2 \qquad (5\text{-}10)$$

olmasını bekleriz.

Dalga fonksiyonunun sürekliliği,

$$1 + R = T \tag{5-11}$$

olmasını içerir;bu bağıntı $x = 0$'da iki çözümün eşitlenmesiyle elde edilir.Potansiyelin süreksiz olmasına karşın,dalga fonksiyonunun eğimi de süreklidir; böyle olduğu,(5-3)'ün $-\epsilon$ 'dan $+\epsilon$ 'a kadar (ϵ istendiği kadar küçük ve pozitif) tümleyerek ve dalga fonksiyonunun sürekliliğini kullanarak görülebilir:

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{\epsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{-\epsilon} = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d}{dx}\frac{du}{dx}$$

$$= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right] u(x) = 0 \tag{5-12}$$

İlerde döneceğimiz bir durumu da belirtelim: Eğer potansiyelde $V_0\,\delta(x-a)$ gibi bir terim bulunursa,o zaman denklemin $a-\epsilon$ 'dan $a+\epsilon$ 'a kadar tümlenmesi ,

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{a+\epsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{a-\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx\, V_0\, \delta(x-a)\, u(x)$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2}\, V_0\, u(a) \tag{5-13}$$

verir.

Bizim potansiyelimiz için türevin sürekliliği,

$$ik(1 - R) = iqT \tag{5-14}$$

olmasını içerir.Böylece R ve T'yi çözebiliriz ve

$$R = \frac{k - q}{k + q}\,, \qquad T = \frac{2k}{k + q} \tag{5-15}$$

elde edebiliriz.Buradan da yansıyan ve geçen akılar hesaplanabilir:

$$\frac{\hbar k}{m}|R|^2 = \frac{\hbar k}{m}\left(\frac{k - q}{k + q}\right)^2$$

$$\frac{\hbar q}{m}|T|^2 = \frac{\hbar k}{m}\,\frac{4kq}{(k + q)^2} \tag{5-16}$$

Bir de,şunları belirtelim :

1. Klasik mekaniğe göre,bir potansiyel basamağına gelen bir parçacık yavaşlar(enerjiyi korumak için),fakat hiçbir zaman yansımaz.Burada ise,bu durumun tersine,gelen parçacıkların belli bir kesri yansır.Kuşkusuz bu,parçacıkların dalga

özeliklerinin bir sonucudur; ışığın iki ortamın arayüzeyinden parçal yansıması bilinen bir olaydır.

2. (5-16) yardımıyla,(5-10) korunum yasasının gerçekten sağlandığını kolayca doğrulayabiliriz.

3. $E \gg V_o$ için,$q \to k$'dır ve yansıyan akının gelen akıya oranı olan $|R|^2$ sıfıra yaklaşır.Bu durum,şu sezgi ile uyuşur: Çok yüksek enerjilerde,basamağın varlığı dalganın yayılmasında küçük bir tedirgeme oluşturur.

4. E enerjisi V_o'dan küçükse,o zaman q sanal olur.Şimdi,$x > 0$ için çözümün, $+\infty$ 'da patlamasın diye,

$$u(x) = T\, e^{-|q|x} \tag{5-17}$$

biçiminde olması gerektiğine bakarsak,

$$|R|^2 = \left(\frac{k - i|q|}{k + i|q|}\right)\left(\frac{k - i|q|}{k + i|q|}\right)^* = 1 \tag{5-18}$$

olduğunu görürüz.Böylece klasik mekanikteki gibi, bu durum için tam yansıma vardır. Ancak

$$T = \frac{2k}{k + i|q|} \tag{5-19}$$

nun sıfır olmadığını,ve dalganın bir parçasının yasak bölgeye sızdığını belirtelim. Bu sızma olayı,yine dalgaların belirtgenidir;ve biraz ilerde göreceğimiz gibi bu olay,klasik bir betimlemede parçacıkları tam olarak durduran engellerin,bir "tünel yolu ile geçilmesine" izin verir.Önündeki katsayı karmal alınsa bile,gerçel bir çözüm için $j(x)$ sıfır olduğundan,sağ yanda hiçbir akı bulunmaz.

B. Potansiyel Kuyusu

Şimdi de,

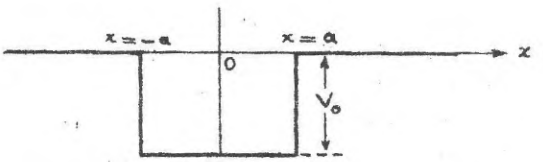
$$\begin{aligned} V(x) &= 0 && x < -a \\ &= -V_o && -a < x < a \\ &= 0 && a < x \end{aligned} \tag{5-20}$$

potansiyelini gözönüne alalım(Şek.5-2).Yine,

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{5-21}$$

ve

$$q^2 = \frac{2m(E + V_o)}{\hbar^2} \tag{5-22}$$



Şek.5-2. Potansiyel kuyusu.

yazalım.Şu çözümleri hemen yazabiliriz:

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{ikx} + R e^{-ikx} && x < -a \\ u(x) &= A e^{iqx} + B e^{-iqx} && -a < x < a \\ u(x) &= T e^{ikx} && a < x \end{aligned} \tag{5-23}$$

Bunlar,soldan gelen bir $\hbar k/m$ akısına,yansıyan bir $\hbar k |R|^2/m$ akısına ve sağa geçen bir $\hbar k |T|^2/m$ akısına karşılık gelirler. $\pm a$ 'daki her iki süreksizlikte oluşan yansımalar nedeniyle,kuyu içinde her iki yönde giden dalgalar bulunur.Akı korunumuna göre,

$$\frac{\hbar k}{m}(1-|R|^2) = \frac{\hbar q}{m}(|A|^2 - |B|^2) = \frac{\hbar k}{m}|T|^2 \tag{5-24}$$

elde etmemiz gerekir.Dalga fonksiyonları ve türevlerinin birbirine uydurulması şu dört denklemi verir:

$$\begin{aligned} e^{-ika} + R e^{ika} &= A e^{-iqa} + B e^{iqa} \\ ik(e^{-ika} - R e^{ika}) &= iq(A e^{-iqa} - B e^{iqa}) \\ A e^{iqa} + B e^{-iqa} &= T e^{ika} \\ iq(A e^{iqa} - B e^{-iqa}) &= ikT e^{ika} \end{aligned} \tag{5-25}$$

Biraz da cebir,

$$\begin{aligned} R &= i e^{-2ika} \frac{(q^2-k^2)\sin 2qa}{2kq\cos 2qa - i(q^2+k^2)\sin 2qa} \\ T &= e^{-2ika} \frac{2kq}{2kq\cos 2qa - i(q^2+k^2)\sin 2qa} \end{aligned} \tag{5-26}$$

sonuçlarını verir.Yine,$E \gg V_o$ ise, $q^2-k^2 \ll 2kq$ olduğundan hemen hemen hiçbir yansıma yoktur;ve $E \to 0$ iken geçirim sıfıra gider.Özel ilgi çeken bir durum vardır: $\sin 2qa = 0$ olduğu özel durumda,yani

$$E = -V_o + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \qquad n = 1,2,3,\ldots \tag{5-27}$$

enerjileri için,hiçbir yansıma yoktur.Bu aslında,alçak enerjili elektronların (0,1 eV) soy gaz atomlarından saçılmasında neler olduğunu açıklayan bir modeldir; örneğin,olağandışı büyük geçirim veren neon ve argon.İlk olarak Ramsauer ve Townsend'in gözlediği bu olay bir geçirim rezonansı olarak betimlenir.Daha tam bir tartışma,kuşkusuz üç-boyutlu düşünceleri kapsamalıdır.Dalga dilinde bu olay,$x=a$'dan yansıyan dalga ile $x=-a$ kıyısından bir,iki,üç,..... kez yansıyan dalgalar arasındaki yıkıcı girişime bağlanır.$2q\,a = n\pi$ rezonans koşulu,

$$\lambda = \frac{2\pi}{q} = \frac{4a}{n} \tag{5-28}$$

biçiminde yazılabilir;ve bu,Fabry-Perot girişimölçerini betimleyen koşuldur.

$E > 0$ için yukarıda verilen çözümlere ek olarak,$E < 0$ için de potansiyelin eksi olması koşuluyla [bu (5-20)'de $V_0 > 0$ demektir] göze çarpan çözümler vardır. Bu çözümler kesikli olarak ortaya çıkarlar.

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = -\kappa^2 \tag{5-29}$$

yazalım.Kuyunun dışındaki,sonsuzda sınırlanmış olan çözümler,

$$\begin{aligned} u(x) &= C_1 e^{\kappa x} \qquad x < -a \\ u(x) &= C_2 e^{-\kappa x} \qquad a < x \end{aligned} \tag{5-30}$$

dir.Gerçel fonksiyonlarla uğraştığımızdan,kuyu içindeki çözümleri

$$u(x) = A\cos qx + B\sin qx \qquad -a < x < a \tag{5-31}$$

biçiminde yazmak daha uygundur.

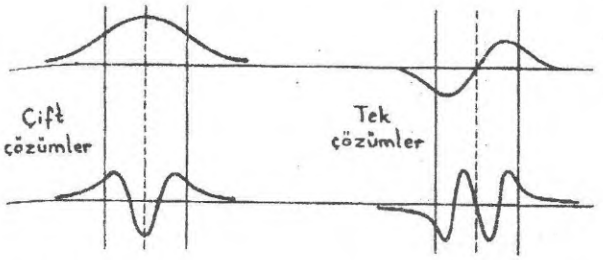
$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|) > 0 \tag{5-32}$$

olduğunu dikkat ediniz. $x = \pm a$ kıyılarında,çözümlerin ve türevlerinin eşitlenmesi

$$\begin{aligned} C_1 e^{-\kappa a} &= A\cos qa - B\sin qa \\ \kappa C_1 e^{-\kappa a} &= q(A\sin qa + B\cos qa) \\ C_2 e^{-\kappa a} &= A\cos qa + B\sin qa \\ -\kappa C_2 e^{-\kappa a} &= -q(A\sin qa - B\cos qa) \end{aligned} \tag{5-33}$$

verir.Bunlar,

$$\begin{aligned} \kappa &= q\,\frac{A\sin qa - B\cos qa}{A\cos qa + B\sin qa} \\ &= q\,\frac{A\sin qa + B\cos qa}{A\cos qa - B\sin qa} \end{aligned} \tag{5-34}$$



Şek.5-3. Çekici potansiyel kuyusunda,kesikli spektrum çözümleri.

vermek üzere birleştirilebilirler.Bunlar birarada,AB = 0 olmasını içerirler;bu da, çözümlerin x'e göre ya çift (B = 0) ya da tek (A = 0) olması demektir.Bu,sonsuz kutuda karşılaşılan bir durumdur.Dalga fonksiyonları,kabaca Şek.5-3'de gösterilen biçimdedir.Hiç düğüm bulunmayan taban durumu,çifttir.Bu basit sistemlerin genel bir özeliğidir.Enerjiyi belirleyen koşullar,(5-34)'den

$$\kappa = q \tan qa \qquad \text{çift çözümler}$$

$$\kappa = -q \cot qa \qquad \text{tek çözümler} \tag{5-35}$$

olarak bulunur.Bunları ayrı ayrı inceleyelim.

(a) Çift çözümler :

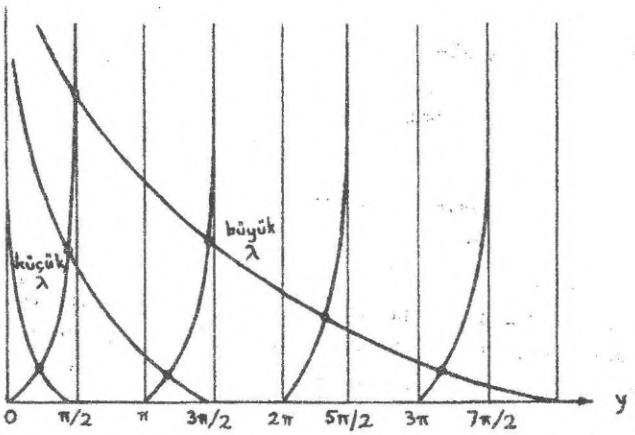
$$\lambda = \frac{2mV_o a^2}{\hbar^2}$$

$$y = qa \tag{5-36}$$

yazımı ile,(5-35)'deki ilk bağıntı,

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan y \tag{5-37}$$

verir.tan y ve $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ 'yi,y'nin fonksiyonu olarak çizersek(Şek.5-4),kesişme noktaları özdeğerleri belirler.Bunlar kesikli bir küme oluşturur. λ büyüdükçe,$\sqrt{\lambda - y^2}/y$ eğrileri daha öteye gider; demek ki,potansiyel daha derin ve/veya daha geniş olduğu zaman daha çok bağlı durum bulunur.Şekil ayrıca, λ ne kadar küçük olursa olsun,her zaman en az bir bağlı durum bulunacağını da gösterir.Bu,bir-boyutlu çekici potansiyellerin belirtgenidir ve üç-boyutlu potansiyeller için doğru değildir.Üç-boyutlu potansiyeller daha çok,aşağıda tartışacağımız tek-çözüm problemi gibi davranırlar. λ



Şek.5-4. Kare kuyuda çift çözümler için,kesikli özdeğerlerin yerleşimi.Artan eğriler tan y'yi,azalan eğriler λ'nın farklı değerleri için $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ eğrilerini gösterirler.

büyüdükçe,özdeğerler y'ye göre eşit aralıklı olmaya başlarlar,ve kesişme noktaları yaklaşık olarak,

$$y \simeq (n + \frac{1}{2})\pi \qquad n = 0,1,2,... \tag{5-38}$$

ile verilir.Bu tam olarak,sonsuz kutudaki çift çözümler için özdeğer koşuludur;ve öngörülebildiği gibi bu,potansiyelin dibinde-uzanan durumlar için,kuyunun gerçekten sonsuz derin olmasının çok önemli olmadığını gösterir.

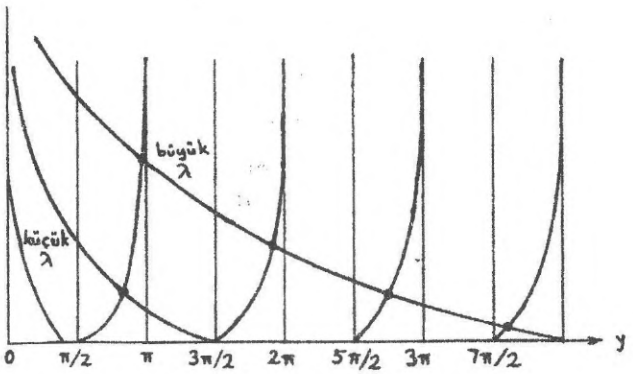
(b) Tek çözümler:

Burada özdeğer koşulu,

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = -\cot y \tag{5-39}$$

verir.$-\cot y = \tan(\pi/2 + y)$ olduğundan Şek.5-5'deki çizim,tanjant eğrilerinin $\pi/2$ kadar kayması dışında Şek.5-4'dekinin aynısıdır.Büyük λ'lardaki davranış hemen hemen aynıdır,yalnız (5-38) yerine

$$y \simeq n\pi \qquad n = 1,2,3,... \tag{5-40}$$



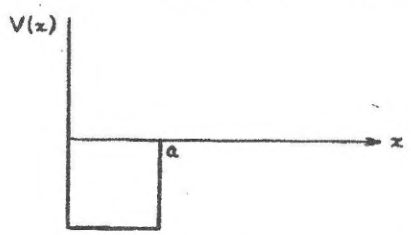
Şek.5-5. Kare kuyuda tek çözümlerin kesikli özdeğerlerinin yerleşimi.Artan eğriler -cot y'yi; azalan eğriler, λ'nın farklı değerleri için $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ 'yi gösterirler. $\lambda < (\pi/2)^2$ için hiçbir özdeğer bulunmadığına dikkat ediniz.

gelir.Çift çözümlerin tersine,burada ancak $\sqrt{\lambda - \pi^2/4} > 0$ ise,yani

$$\frac{2mV_o a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4} \qquad (5\text{-}41)$$

ise,bir kesişim vardır.

Bütün tek çözümler x = 0'da,sıfır olur; ve bu yüzden tek çözümler için bağlı durum problemi,Şek.5-6'da gösterilen potansiyel kuyusundaki ile aynı olacaktır, çünkü Şek.5-6'daki potansiyel kuyusu için de,u(0) = 0 koşulu konulacaktır.Üç-boyutlu evrendeki dalga fonksiyonları için de,böyle koşullar konulduğunu göreceğiz.



Şek.5-6. Kare kuyu bağlı durum probleminin tek çözümleri için eşdeğer potansiyel.

C. Potansiyel Engeli

Şimdi,

$$V(x) = 0 \qquad x < -a$$
$$= V_0 \qquad -a < x < a$$
$$= 0 \qquad a < x \tag{5-42}$$

potansiyelini gözönüne alalım.Tartışmamızı,$E < V_0$ enerjilerine sınırlayalım;klasik fizikte,bu enerjiler için engelden hiç bir sızma olmaz(Şek.5-7).Engelin içinde,

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\,u(x) = 0$$

denklemini buluruz,ve bunu

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = 0 \tag{5-43}$$

olarak yazabiliriz.Bu denklemin,

$$u(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} \qquad |x| < a \tag{5-44}$$

genel çözümü,

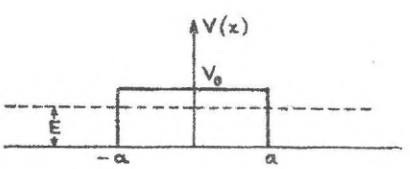
$$u(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx} \qquad x < -a$$
$$= T e^{ikx} \qquad x > a \tag{5-45}$$

çözümlerine uydurulmalıdır.Fakat bizim,bu problemi çözme sıkıntısına girmemiz gerekmez;çünkü sonuçlar,(5-26)'dan

$$q \to i\kappa = i\sqrt{(2m/\hbar^2)(V_0 - E)} \tag{5-46}$$

konularak elde edilebilir.Böylece,örneğin

$$T = e^{-2ika}\,\frac{2k\kappa}{2k\kappa\cosh 2\kappa a - i(k^2 - \kappa^2)\sinh 2\kappa a} \tag{5-47}$$



Şek.5-7. Potansiyel engeli.Enerji,bir klasik parçacığın engelden tam olarak yansıyacağı büyüklüktedir.

bulunur,ve bu

$$|T|^2 = \frac{(2k\kappa)^2}{(k^2+\kappa^2)^2 \sinh^2 2\kappa a + (2k\kappa)^2} \qquad (5\text{-}48)$$

verir.Enerji,engelin tepesinden aşağıda bile bulunsa geçirim vardır.Bu bir dalga olayıdır,ve kuantum mekaniğinde parçacıklar da bu olayı gösterirler.Bir parçacığın bir engeli,tünel olayı ile geçmesine sık sık rastlanır; bu yüzden biz,bazı uygulamaları tartışacağız.Ayrıca κa büyük iken,geçen akının gelen akıya oranının,

$$|T|^2 \simeq \left(\frac{2k\kappa}{k^2+\kappa^2}\right)^2 e^{-4\kappa a} \qquad (5\text{-}49)$$

olduğunu da belirtelim.

$$\kappa a = \left[\frac{2m a^2}{\hbar^2}(V_o - E)\right]^{1/2} \qquad (5\text{-}50)$$

olduğundan $|T|^2$ çok duyarlı olarak,engelin genişliğine ve engelin geliş enerjisinden ne kadar büyük olduğuna bağlı bir fonksiyondur.

Genel olarak,fiziksel olaylardaki engeller karesel değildir; böylece bazı uygulamaları tartışmak için,önce biçimi düzgün olmayan bir engel için $|T|^2$ geçirim katsayısının yaklaşık bir ifadesini elde etmeliyiz.Çoğu potansiyel için tam çözümler olmadığına göre,geçirim katsayısını hesaplamanın yolu,Wentzel-Kramers-Brillouin(WKB) yaklaşım tekniğini kullanmaktır[1].Tartışmamız çok matematiksel olmayacaktır.

(5-49)'un iki çarpandan oluştuğunu ve bunlardan ikincisinin çok daha önemli olduğunu gözlüyoruz.Eğer

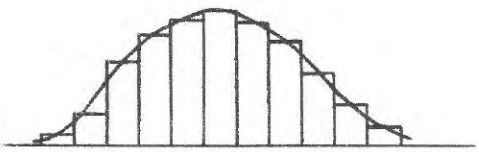
$$\log|T|^2 \simeq -2\kappa(2a) + 2\log\frac{2(ka)(\kappa a)}{(ka)^2+(\kappa a)^2}$$

yazarsak, κa'nın akla yatkın değerleri için,birçok durumda ilk terimin ikinciden baskın olduğunu görüyoruz.Yumuşak bir eğri engeli,kare biçimli engelleri yanyana koyarak oluşturmayı yeğliyoruz. Geçirim katsayıları küçük olduğu zaman,bunlar birbirinin çarpımı olurlar[2](gerçekten,akının çoğu yansıdığından,herbir dilimdeki geçirim bağımsız ve olasılığı çok çok küçük bir olaydır).Böylece yaklaşık olarak,

$$\log|T|^2 \approx \sum_{\substack{\text{parçal}\\ \text{engeller}}} \log|T_{\substack{\text{parçal}\\ \text{engeller}}}|^2$$
$$\approx -2\sum \Delta x \langle\kappa\rangle$$

[1] WKB yaklaşımı için,bkz. Özel Konular kesim 3.

[2] Bu söylenenler,yalnızca en önemli olan üstel kısım için doğrudur.Böyle olduğu,engel genişliği iki kat yapıldığında,$|T|^2$ geçirim katsayısının karesinin elde edilmesinden anlaşılabilir.



Şek.5-8. Yumuşak bir engeli yanyana konulmuş kare potansiyel engellerle oluşturma yaklaşıklığı.

$$\approx -2\int_{engel} dx\,\sqrt{(2m/\hbar^2)\,[V(x)-E]} \qquad (5\text{-}51)$$

yazabiliriz.Parçal engellerde Δx genişlik ve $\langle K\rangle$ bu engeldeki ortalama K değeridir.Sonra,engel genişliginin en dar olabileceği limite geçilmiştir. .Bu deyimden, enerji ile potansiyelin hemen hemen eşit olduğu"dönüm noktaları" yakınında,yaklaşımın çok doğru olmadığı görülebilir; çünkü burada,(5-49) denklemi (5-48) için iyi bir yaklaşım değildir.Ayrıca da $V(x)$,x'in yavaş değişen bir fonksiyonu olmalıdır,yoksa eğri bir engel ancak dar dikdörtgenlerin bir yığını olarak düşünülebilir.Burada yine, (5-49) kötü bir yaklaşımdır.WKB yaklaşımını kullanan özel bir inceleme,dönüm noktaları yakınındaki davranışın bir tartışmasını da kapsar.Çoğu amaç için,

$$|T|^2 \approx e^{-2\int dx\sqrt{(2m/\hbar^2)[V(x)-E]}} \qquad (5\text{-}52)$$

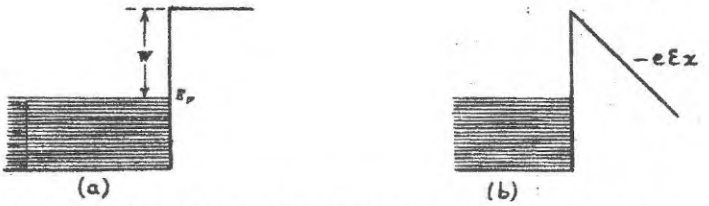
yazmak,gene uygun bir yaklaşımdır; burada tümlev,kare kökün gerçel olduğu bölge üzerindendir.

D. Tünel Olayı

Atom ve çekirdek fiziğinde parçacığın tünel yolu ile geçmesi olayı oldukça yaygındır; ve biz bunu,iki örnek üzerinde tartışacağız.

(a) Bir metaldeki elektronları düşünümüz.Bölüm 1'deki fotoelektrik olay tartışmamızda belirtildiği gibi,elektronlar metal içinde bir potansiyel ile tutulurlar; bu potansiyel,Şek.5-9a'da gösterilen sonlu derinlikte bir kutu ile betimlenebilir. Gerçekte elektronlar,kutunun çok geniş olması yüzünden,çok yoğun olan enerji düzeylerinde kümelenmişlerdir.Verilen herhangi bir enerji düzeyinde ikiden fazla elektron yer alamaz;bu,elektronların bir özeliğidir[3].Böylece metalin en küçük enerjili durumu için,Fermi enerjisi denilen(bu özgür elektron sayısına bağlıdır)belli bir enerjiye

[3] Elektronların bu özeliği Pauli dışarlama ilkesi ile betimlenir.Bu ilke Bölüm 8'de tartışılacaktır.



Şek.5-9. (a) Metaldeki,elektron enerji düzeyleri.E_F Fermi enerjisi ve W iş fonksiyonudur.(b) Bir dış elektrik alanının değiştirdiği potansiyel.

kadar olan tüm düzeyler dolmuştur.Sıcaklık 0^oK'in üzerinde olduğu zaman,birkaç elektron ısısal olarak yüksek düzeylere uyarılır,fakat oda sıcaklığında bile bu sayı küçüktür.Fermi enerjisi ile kuyunun tepesi arasındaki fark,elektronu dışarı çıkarmak için gereken enerjidir; bu,fotoelektrik olayla ilgili olarak tartışılan iş fonksiyonudur.Ya fotonlarla ya da ısıtılarak,enerji aktarılmasıyla elektronlar dışarı çıkarılabilirler.Ayrıca bir dış elektrik alanı uygulanması ile de çıkarılabilirler.Elektron düzeyler "denizi"nin yüzünde ise,dış alan elektronun gördüğü W potansiyelini $(W-e\mathcal{E}x)$ olarak değiştirdiğinden (Şek.5-9),soğuk yayma oluşur.Geçirim katsayısı,

$$|T|^2 = e^{-2\int_0^a dx\,[2m(W-e\mathcal{E}x)/\hbar^2]^{1/2}} \qquad (5\text{-}53)$$

dir.Burada,

$$\int dx(A+Bx)^{1/2} = \frac{(A+Bx)^{3/2}}{3B/2}$$

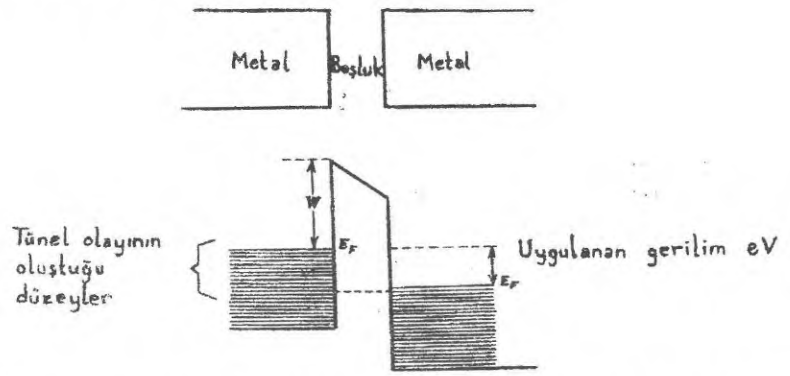
olduğundan,

$$|T|^2 = e^{-(4\sqrt{2}/3)\sqrt{mW}/\hbar^2(W/e\mathcal{E})} \qquad (5\text{-}54)$$

bulunur.Fowler-Nordheim formülü denilen (5-54),yaymayı yalnızca nitel olarak betimler.Kolayca hesaba katılabilen bir etki,görüntü yük nedeniyle elektronun,bir de ek olarak metal yaprağa doğru,geri çekilmesidir.İncelenmesi zor olan öbür etki,metal yüzeyinde bulunan yüzey kusurlarıdır.Bunlar,elektrik alanını yerel olarak değiştirirler; ve $\mathcal{E}$ üs teriminde göründüğünden,bu durum büyük bir fark doğurabilir.İyi bir rastlantı olarak,üs terimi Fermi denizinin yüzündeki engel kalınlığı türünden yazılabilir;çünkü bu kalınlık,

$$a = \frac{W}{e\mathcal{E}} \qquad (5\text{-}55)$$

olarak verilir.



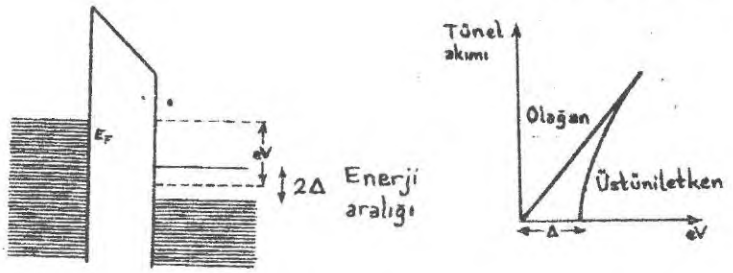
Şek.5-10. Boşlukla ayrılmış iki metal arasındaki tünel olayı için enerji diyagramı. Metaller arası tünel olayı,ancak sağ yanda boş durumlar varsa olabilir.Böyle boş durumlar,sağ yandaki Fermi düzeyini alçaltan eV basamağında bir gerilim uygulandığı zaman yaratılır.

İki metal yaprak birbirine yakın konursa,gene aynı etki ortaya çıkar.Şek.5-10'da,bir potansiyel farkı yokken ve varkenki durumlar gösterilmiştir.Potansiyel farkı yoksa tünel olayı oluşamaz,çünkü engelin iki yanındaki düzeyler doludur.Zayıf bir elektrik alanının etkisi bile,engelin biçimini biraz değiştirir(Şek.5-10)—bu önemsiz bir etkidir—ve engelin bir yanındaki Fermi denizini aşağı indirir.Gerçekten bu,engelin bir yanında,öbür yandaki dolmuş düzeylere karşılık olarak bazı boş düzeyler verir; ve böylece,

$$|T|^2 \simeq e^{-2\sqrt{(2mW/\hbar^2)}\,a} \qquad (5\text{-}56)$$

geçirim katsayısı ile,tünel olayı oluşabilir.Böyle bir çarpan,bir direnç gibi davranır.Yazık ki,bu deyim aralık genişliği a'ya çok duyarlıdır,ve iş fonksiyonu birkaç elektron volt basamağında olduğundan genişlik birkaç angström basamağında olmalıdır; fakat metal yaprakların yeterince düz ve koşut yapılması olanaksızdır.Bu yüzden bu formül,aralarında bir oksit tabakası bulunan iki yaprak (Ni-NiO-Pb) arasındaki akımların yorumunda uygulanır;buradaki aralık 50 Å kadar küçük yapılabilir,ve yorum nitel olarak doğrudur.

Sağdaki metal bir üstüniletkenlik durumunda ise,ilginç bir olay ortaya çıkar. Böyle bir durumun bir belirtgeni şudur : Fermi düzeyinin üzerindeki düzeyler için,

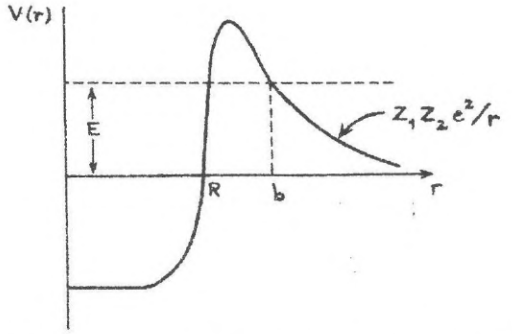


Şek.5-11. Metal ile üstüniletken arasındaki tünel olayı için enerji diyagramı. Şek.5-10'da gösterilen metalden metale tünel olayının tersine,buradaki enerji aralığı için tünel olayına izin verilmemiştir.Bu durum,akım-gerilim belirtgenini,gösterildiği biçimde değiştirir.

düzey yoğunluğunda bir aralık bulunur;bunun anlamı,$E_F-\Delta$ ve $E_F+\Delta$ enerjileri arasında hiçbir izinli durum olmaması demektir; burada Δ , 10^{-3} eV basamağındadır ve bu 10 eV basamağındaki E_F Fermi enerjisi ile karşılaştırılmalıdır.Bu düzeyler ortadan kalkmamışlardır,fakat aşağıya ve yukarıya sıkışmışlardır;bu yüzden,aralığın hemen üstünde ve altında düzey yoğunlukları çok büyüktür.Elektrik alanı yeterince küçükse,yani $\alpha\mathcal{E} \leq \Delta/e$ ise,elektronların gideceği bir yer bulunmadığından hiçbir tünel olayı oluşmaz.Akım-gerilim bağıntısının nitel özelikleri ve enerji diyagramı Şek.5-11'de gösterilmiştir.Bu özelikler deneyle iyi uyuşur.

(b) Tünel olayı çekirdek fiziğinde de önemlidir.Çekirdekler çok karmaşık nesnelerdir,fakat belirli durumlarda onları bir potansiyel kuyusunun düzeylerini dolduran bağımsız parçacıklar olarak görmek uygun olur.Bu görünüm akılda tutularak,bir çekirdeğin bir α-parçacığı (Z =2'li bir Helyum çekirdeği) ve bir yavru çekirdeğe bozunması şöyle betimlenebilir: α-parçacığı,yavru çekirdek ile α-parçacığı arasındaki Coulomb potansiyelinden doğan engeli,tünel olayı ile geçer. α-parçacığı bir bağlı durumdaymış gibi düşünülmez: Böyle olsaydı,çekirdek bozunamazdı.Daha doğrusu α-parçacığı pozitif enerjili olarak alınmış ve bozunumu yalnızca engelin varlığıyla yasaklanmıştır[4].

[4] İtici bir kuvvetin,iki nesnenin ayrılmasını nasıl önlendiğini kavramak güç geliyorsa,bu sürecin tersi olan α yakalanmasını düşününüz.Engelin, α-parçacığını dışarı çıkarmaya yönelik olduğu açıktır.



Şek.5-12. α bozunumu için potansiyel engeli.

$$|T|^2 = e^{-G} \tag{5-57}$$

yazarsak,o zaman

$$G = 2\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_R^b dr \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - E\right)^{1/2} \tag{5-58}$$

olur; burada,R çekirdeğin yarıçapı[5] ve b dönüm noktasıdır; b'nin değeri,tümlenen sıfıra eşitlenerek bulunur(Şek.5-12).Z_1 yavru çekirdeğin ve Z_2(burada 2'ye eşit) yayınlanan parçacığın yüküdür.Tümlev,tam olarak bulunabilir:

$$\int_R^b dr \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{b}\right)^{1/2} = \sqrt{b}\left[\cos^{-1}\left(\frac{R}{b}\right)^{1/2} - \left(\frac{R}{b} - \frac{R^2}{b^2}\right)^{1/2}\right] \tag{5-59}$$

Düşük enerjilerde(Coulomb engelinin,r=R'deki yüksekliğine göre),$b \gg R$ olur,ve sonuç olarak

$$G \simeq 2\left(\frac{2mZ_1Z_2e^2b}{\hbar^2}\right)^{1/2}\left[\frac{\pi}{2} - \left(\frac{R}{b}\right)^{1/2}\right] \tag{5-60}$$

[5] Gerçekten,çekirdek yarıçapının ilk kestirimleri α-bozunumuna göre yapılmıştır.Şimdi ise,çekirdek yarıçaplarını bulmak için yük dağılımının büyüklüğü kullanılıyor; bu büyüklük,elektronların çekirdeklerden saçılması ile ölçülüyor.

elde edilir,burada $b = Z_1 Z_2 e^2/E$'dir.v son hızı olmak üzere, α-parçacığının enerjisi için $E = mv^2/2$ yazılırsa,o zaman

$$G \simeq \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} = 2\pi \alpha Z_1 Z_2 \left(\frac{c}{v}\right) \qquad (5\text{-}61)$$

olur.

Bir α-parçacığının çekirdekten dışarı çıkması için geçen zaman şöyle hesaplanabilir: Bir tek karşılaşmada engelden geçme olasılığı e^{-G}'dir.Öyleyse geçiş için gerekli karşılaşma sayısı $n \simeq e^G$'dir.Karşılaşmalar arasındaki zaman $2R/v$ basamağındadır,burada R yine çekirdeğin yarıçapı,v ise α-parçacığının çekirdek içindeki hızıdır.Böylece yarı ömür,

$$\tau \simeq \frac{2R}{v} e^G \qquad (5\text{-}62)$$

olur. α-parçacığının çekirdek içindeki hızı oldukça belirsiz bir kavramdır,ve bu bütünüyle çok klasik bir betimlemedir;bu yüzden e^G'nin önündeki çarpan,daha elverişli bir kuram olmadan kestirilemez.Buradaki düşünceler bize,onun büyüklük basamağı konusunda bilgi vermek içindir.1 MeV'lik bir α-parçacığı için,

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = c\sqrt{\frac{2E}{mc^2}} = 3 \times 10^{10}\sqrt{\frac{2}{4 \times 940}} \simeq \frac{3}{43} \times 10^{10} \text{ cm/sn}$$

dir.Ayrıca R için,

$$R \simeq 1.5 \times 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm} \qquad (5\text{-}63)$$

alırsak,A = 216 olduğunda öndeki çarpanın değerini,2.6×10^{-21} olarak buluruz.Ayrıca G'yi,

$$G \simeq 4 \frac{Z_1}{\sqrt{E(\text{MeV})}} \qquad (5\text{-}63)$$

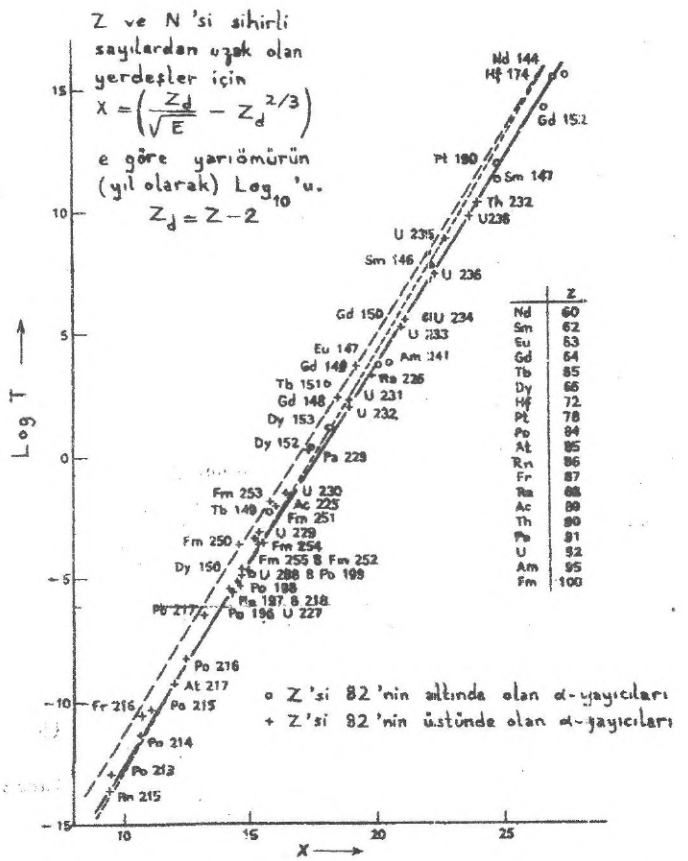
biçiminde yeniden yazabiliriz.Böylece alçak enerjili α'lar için,

$$\log_{10} \frac{1}{\tau} \simeq \text{sabit} - 1.73 \frac{Z_1}{\sqrt{E(\text{MeV})}} \qquad (5\text{-}64)$$

düz-çizgi grafiği öngörülür.Burada, τ saniye yerine yıl olarak ölçüldüğünde,öndeki sabitin büyüklük basamağı 27-28 'dir.Şek.5-13,çok sayıda α yayıcısının yarı ömür verileri ile iyi bir uyumun elde edildiğini gösterir.Bu uyum,

$$\log_{10} \frac{1}{\tau} = C_2 - C_1 \frac{Z_1}{\sqrt{E}}$$

formülü ile sağlanmıştır,burada $C_1 = 1.61$ ve $C_2 = 28.9 + 1.6 Z_1^{2/3}$ 'dir.Böylece,çok basit düşünceler,verilerle oldukça çarpıcı bir uyum sağlar.



Şek.5-13. $\log_{10} 1/\tau$ 'nun, $C_2 - C_1 Z_1/\sqrt{E}$ 'ye göre çizimi; burada $C_1 = 1.61$ ve $C_2 = 28.9 + 1.6\ Z_1^{2/3}$'dür, C_2'nin yavaş bir değişimi vardır. (E.K. Hyde, I.Perlman ve G.T.Seaborg, The Nuclear Properties of the Heavy Elements, Cilt 1, Prentice-Hall, Inc. (1964)'den alınarak, izinle basılmıştır.)

Enerjisi daha çok olan α'ların yayınlanmasında, G çarpanı R'ye bağlıdır; ve $R = r_0 A^{1/3}$ ise, r_0'ın bir sabit olduğu bulunur. Böylece çekirdek yarıçapının dışında, potansiyelin yerine bir Coulomb engelinin gelmesi geçerli bir kavramdır. Yine, basit nitel düşünceler verileri açıklamıştır.

Çekirdekler arası bir tepkimenin (örneğin yakalanma) olasılığı,

$$e^{-2(Z_1 Z_2/\sqrt{E})} \qquad (5\text{-}65)$$

çarpanı ile azalır. Bu olgu, düşük enerjilerde ve/veya yüksek Z'ler için böyle tepkimelerin seyrek olduğunu gösterir. Bu nedenle, ısılçekirdek reaktörlerinin yapımında tüm girişimler, hidrojenin (aslında ağır hidrojen-Döteryum) yanmasına dayanır:

$$_1H^2 + {}_1H^2 \longrightarrow {}_2He^3 + n \qquad (3.27\ MeV)$$

$$_1H^2 + {}_1H^2 \longrightarrow {}_1H^3 + p \qquad (4.03\ MeV)$$

$$_1H^2 + {}_1H^3 \longrightarrow {}_2He^4 + n \qquad (17.6\ MeV)$$

Çünkü Z'si daha büyük elementleri kapsayan tepkimeler, çok daha yüksek enerjiler yani çok daha yüksek sıcaklıklar gerektirir; buna karşılık olarak da, daha büyük kapatma problemleri doğar. Aynı nedenle, çekirdek reaktörlerinde ağır elementleri ikiye bölmek için, nötronlar kullanılır. Düşük enerjilerde, protonlar da kullanılabilir; çünkü bu enerjilerdeki protonlar, çekirdeğe tepkime verecek kadar yaklaşamazlar.

E. Bir-Boyutlu Molekül Modeli

Bir çift potansiyel kuyusundaki bir parçacık örneği, moleküllerin nasıl oluştuğu konusunda bazı görüşler ortaya koyar. $V_0 a$ sabit kalmak üzere büyük derinlik ve sıfır genişlikle sınırlanmış bir kare kuyuyu incelersek, cebirsel işimiz çok kolaylaşır. Bu durumda, bir delta-fonksiyonu kuyusu elde ederiz; bu potansiyel kuyusu ile işlem yapmak kolaydır. Böyle olduğunu göstermek için önce tek bir çekici potansiyel kuyusunu gözönüne alalım:

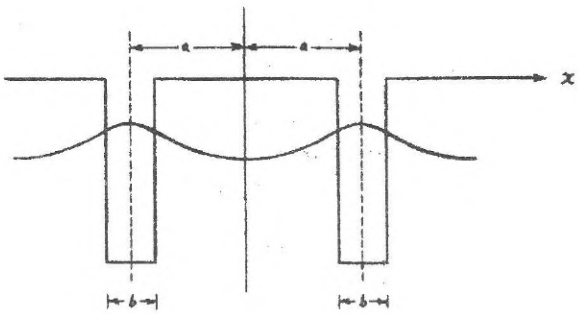
$$(2m/\hbar^2)\, V(x) = -\frac{\lambda}{a}\, \delta(x) \qquad (5\text{-}66)$$

$E < 0$ iken, çözülecek olan denklem,

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = -\frac{\lambda}{a}\, \delta(x)\, u(x) \qquad (5\text{-}67)$$

dir, burada $\kappa^2 = 2m|E|/\hbar^2$ 'dir.
$x = 0$'ın dışındaki her yerde, çözüm $d^2u/dx^2 - \kappa^2 u = 0$ denklemini sağlamalıdır; ve bu çözüm, $x \to \pm\infty$ 'da sıfıra gidecekse,

$$u(x) = e^{-\kappa x} \qquad x > 0$$
$$= e^{\kappa x} \qquad x < 0 \qquad (5\text{-}68)$$



Şek.5-14. Bir-boyutlu çift potansiyel kuyusu.Burada dalga fonksiyonunun biçimi de, bağlı bir durum için çizilmiştir.

olmalıdır.Dalga fonksiyonunun sürekliliği nedeni ile,öndeki katsayılar aynıdır (ve burada bir olarak seçilmiştir—bu fonksiyonları sonradan boylandırabiliriz). Artık,dalga fonksiyonunun türevi sürekli değildir.Daha önce de tartışıldığı gibi [Denk.(5-13)] ,

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{x=0_+} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{x=0_-} = -\frac{\lambda}{a}\,u(0) \qquad (5\text{-}69)$$

buluruz.Son bağıntı özdeğer koşulunu verir:

$$-K \quad -K = -\frac{\lambda}{a}$$

ya da,

$$K = \frac{\lambda}{2a} \qquad (5\text{-}70)$$

dır.Çift kare kuyu için,(5-66) yerine

$$(2m/\hbar^2)\,V(x) = -\frac{\lambda}{a}\left[\delta(x-a) + \delta(x+a)\right] \qquad (5\text{-}71)$$

gelir.Bu potansiyel,$x \to -x$ değiştokuşu altında bakışımlı olduğundan pariteleri belirli olan çözümler bulunacağını bekliyoruz; ve önce çift çözümleri inceleyelim.

1. Çift çözümler için,

$$u(x) = e^{-\kappa x} \qquad x > a$$
$$= A \cosh \kappa x \qquad a > x > -a$$
$$= e^{\kappa x} \qquad x < -a \tag{5-72}$$

yazarız,ve dalga fonksiyonunun sürekliliği

$$e^{-\kappa a} = A \cosh \kappa a \tag{5-73}$$

verir.Bakışım nedeniyle,türevlerin süreksizlik koşulunu yalnızca $x = a$'da uygulamak yeterlidir.$x = -a$ 'da uygulanmasından yeni bir şey gelmeyecektir.Böylece,

$$-\kappa e^{-\kappa a} - \kappa A \sinh \kappa a = -\frac{\lambda}{a} e^{-\kappa a} \tag{5-74}$$

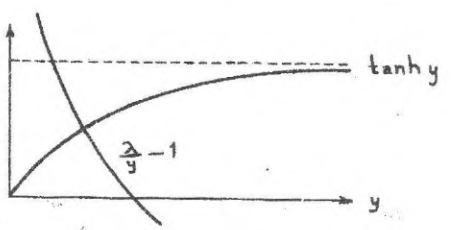
elde ederiz;ve özdeğer koşulu,

$$\tanh \kappa a = \frac{\lambda}{\kappa a} - 1 \tag{5-75}$$

olur.Bu koşul çizgel olarak Şek.5-15'te gösterilmiştir.tanh y ve $(\lambda/y)-1$ eğrilerinin yalnızca bir kesişim noktası vardır. $y = \lambda$ olduğu zaman sağ yanın sıfır olduğu açıktır,oysa tanh y > 0'dır.Böylece kesişim noktası için $y < \lambda$ olur.Ayrıca tanh y < 1 olduğundan kesişim noktasında $(\frac{\lambda}{y}) < 2$ olmalıdır,bu ise

$$\kappa > \frac{\lambda}{2a} \tag{5-76}$$

demektir.Bunu (5-70) ile karşılaştırırsak,çift kuyu için enerjinin daha büyük bir negatif sayı olduğunu görürüz; böylece çift potansiyel için enerji daha aşağıdadır. Bir potansiyel çiftinin yeğinliğinin bir tek potansiyelinkinden büyük olması buradan gelmez.İki protona bağlı bir elektron ile bir protona bağlı bir elektronun karşılaştı-



Şek.5-15. tanh $y = \frac{\lambda}{y} - 1$ özdeğer koşulunun çözümü.

rılması durumunda da böyledir.Çift potansiyel için bağlanmanın daha sıkı olmasının nedeni Şek.5-16'da gösterilmiştir: Hızla azalan bir üstel fonksiyonu, bakışımlı bir fonksiyon(burada cosh x) ile uzlaştırmak daha kolaydır;çünkü eğimdeki süreksizlik şekilde görüldüğü gibi az olur.Oysa aynı fonksiyonu,potansiyelin öbür yanında da eşit bir eğimle azalan bir üstel fonksiyonla uzlaştırmak zordur.Gerçek dünyada, aralarında küçük bir uzaklık bulunan iki protona bağlı bir elektronun enerjisi,bir proton ve çok uzaktaki bir Hidrojen atomuna bağlı elektronun enerjisinden daha aşağıdadır; üstelik de ilk durumda,protonlar arasındaki itme daha etkindir.Burada da gene,dalga fonksiyonu kendisini,başat etki olan geometrik durumla uzlaştırmaktadır.

2. Tek çözümlerin biçimi,

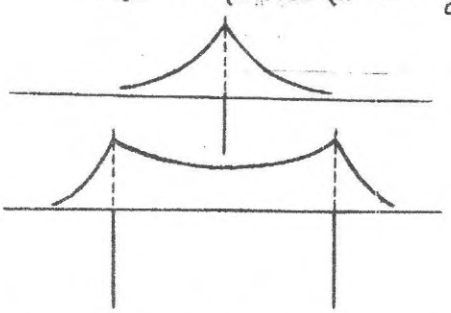
$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-\kappa x} && x > a \\ &= A \sinh \kappa x && a > x > -a \\ &= -e^{\kappa x} && x < -a \end{aligned} \qquad (5\text{-}77)$$

olacaktır.Bu kez de,karşı bakışım nedeniyle,koşulları örneğin $x = a$ 'da uygulamak yeterlidir.Dalga fonksiyonunun sürekliliği

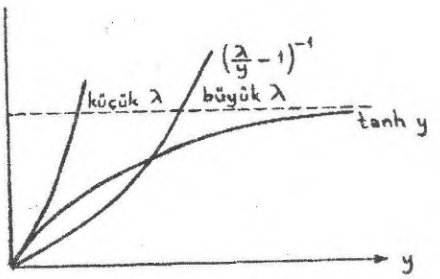
$$A \sinh \kappa a = e^{-\kappa a} \qquad (5\text{-}78)$$

verir.Süreksizlik denklemi ise,

$$-\kappa e^{-\kappa a} - \kappa A \cosh \kappa a = -\frac{\lambda}{a} e^{-\kappa a} \qquad (5\text{-}79)$$



Şek.5-16. Tek ve çift delta fonksiyonu çekici potansiyelleri için bağlı durum dalga fonksiyonları.



Şek.5-17. $\tanh y = (\lambda/y - 1)^{-1}$ özdeğer koşulunun çözümü.

olur.İkisinin birleştirilmesi,

$$\coth Ka = \frac{\lambda}{Ka} - 1 \qquad (5\text{-}80)$$

özdeğer koşulunu verir.Şek.5-17'de bu denklemin tersinin eğrisi çizilmiştir,bu $\tanh y$'nin $(\lambda/y - 1)^{-1}$ 'e göre çizimidir.Bu fonksiyonlardan birincisinin başlangıç noktasındaki eğimi ikinciden büyükse,yalnızca bir kesişim noktası bulunacaktır; bunun için de,

$$\lambda > 1 \qquad (5\text{-}81)$$

olmalıdır. $y = \lambda/2$ için $(\lambda/y-1)^{-1}$ terimi 1 verdiğinden,kesişme $y < \lambda/2$ için oluşmalıdır; bu da,

$$K < \frac{\lambda}{2a} \qquad (5\text{-}82)$$

demektir.Böylece,eğer bir bağlı durum varsa tek çözüm,çift çözümden daha zayıf bağlanmıştır.Sıfırdan geçmesi gereken dalga fonksiyonu kuyular arasında dik olmaya zorlanır; ve bu yüzden ancak,daha yavaş azalan bir üstel fonksiyonla uzlaşabilir. λ'nın büyüklüğüne bağlı olarak uyarılmış bir durum bulunabilir veya bulunmayabilir.

Şimdi de,enerjisi $E_ç$ olan $u_ç(x)$ taban durumu ile,enerjisi E_t olan $u_t(x)$ uyarılmış durumunun bir üstüstegelmesini düşünelim(ç ve t,çift ve tek demektir):

$$\psi(x) = u_ç(x) + \alpha\, u_t(x) \qquad (5\text{-}83)$$

Burada α'nın seçimi, $\int_{-\infty}^{0} dx \; |\psi(x)|^2$ 'yi olabildiğince küçük yapacak biçimdedir; bu ise,"elektron"un olabildiğince sağ yanda yerelleşmesi demektir.Bir t zamanı

sonunda dalga fonksiyonu,

$$\psi(x,t) = u_ç(x)\,e^{-iE_ç t/\hbar} + \alpha\, u_t(x)\,e^{-iE_t t/\hbar}$$

$$= e^{-iE_ç t/\hbar}\left[u_ç(x) + \alpha\, e^{-i(E_t - E_ç)t/\hbar}\, u_t(x)\right] \qquad (5\text{-}84)$$

olacaktır,böylece iki parça arasındaki evre bağıntısı değişecektir.Özellikle,

$$e^{-i(E_t - E_ç)t/\hbar} = -1 \qquad (5\text{-}85)$$

gibi bir zaman sonra,t = 0'da sağ yanda nasıl yerelleştiyse,elektron bu kez de sol yanda öylece yerelleşecektir.Öyleyse,elektronun iki potansiyel arasında gidip gelmesi olarak betimlenebilen bir salınan davranışı vardır; bu salınımın frekansı,

$$\omega = 2\,\omega_{tç} = 2\,\frac{E_t - E_ç}{\hbar} \qquad (5\text{-}86)$$

dır.Büyük λ için $\omega_{tç}$ frekansına eşlenen peryodun,iki kuyuyu ayıran engeli "tünel olayı ile geçme zamanı"na yaklaşık olarak eşit olduğu,Kesim C ve D'de sunulan yöntemle gösterilebilir;kendisini inandırması için,bu işi okura bırakıyoruz.Bu, amonyum molekülü için bir modeldir.Böyle bir frekansı büyük incelikle ölçmenin yolları vardır,ve böylece çok doğru ölçen bir "saat"imiz olur[6].

F. Kronig-Penney Modeli

Genel olarak metallerin kristalimsi bir yapısı vardır,yani iyonlar uzaysal bir dönemsellik gösterecek biçimde dizilmişlerdir.Bu dönemselliğin,özgür elektronların metal içindeki hareketi üzerinde bir etkisi vardır,ve bu etki şimdi tartışacağımız basit modelde gösterilecektir.

Dönemsellik potansiyelde olacaktır,bunun için

$$V(x + a) = V(x) \qquad (5\text{-}87)$$

olması gerekir.$x \to x + a$ değiştirmesi ile,$-(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2)$ kinetik enerji terimi değişmediğinden bütün Hamiltonien a yer değiştirmeleri altında değişmezdir.Sıfır potansiyel durumunda,verilen bir $E = \hbar^2 k^2/2m$ enerjisine karşılık gelen çözüm,

$$\psi(x) = e^{ikx} \qquad (5\text{-}88)$$

[6] Amonyum molekülünün bir tartışması için,bkz. R.P.Feynman,R.B.Leighton ve M.Sands,The Feynman Lectures on Physics Cilt III,Addison-Wesley,Reading Mass., 1965.

olur,yerdeğiştirme ise,

$$\psi(x+a) = e^{ik(x+a)} = e^{ika}\,\psi(x) \tag{5-89}$$

verir.Böylece ilk çözüm,bir evre çarpanı ile çarpılmış olur;ve bu yüzden,

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2 \tag{5-90}$$

dir.Öyleyse gözlenebilirler,x'de ve $x+a$ 'da aynı olacaklardır; ve biz x'de mi,yoksa $x+a$ 'da mı olduğumuzu söyleyemeyiz.Örneğimizde ayrıca, $\psi(x)$ ve $\psi(x+a)$'yı ayıran evre çarpanının, e^{ika} biçiminde olması gerekmediğini de vurgulayacağız.

Cebiri basitleştirmek için,itici delta fonksiyonu potansiyellerinin şu serisini alacağız :

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\lambda}{a}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-na) \tag{5-91}$$

$x = na$ noktaları dışındaki çözüm özgür parçacık denkleminin çözümü olacaktır,yani $\sin kx$ ve $\cos kx$ 'in bir çizgisel birleştirimidir(basit olması için gerçel fonksiyonlarla çalışıyoruz).$(n-1)a \le x \le na$ ile tanımlanan R_n bölgesinde,

$$\psi(x) = A_n \sin k(x-na) + B_n \cos k(x-na) \tag{5-92}$$

olduğunu,ve $na \le x \le (n+1)a$ ile tanımlanan R_{n+1} bölgesinde,

$$\psi(x) = A_{n+1}\sin k[x-(n+1)a] + B_{n+1}\cos k[x-(n+1)a] \tag{5-93}$$

olduğunu varsayalım.Dalga fonksiyonunun sürekliliği ($x = na$),

$$-A_{n+1}\sin ka + B_{n+1}\cos ka = B_n \tag{5-94}$$

verir;ve (5-83) süreksizlik koşulu burada,

$$kA_{n+1}\cos ka + kB_{n+1}\sin ka - kA_n = \frac{\lambda}{a}B_n \tag{5-95}$$

olur.Biraz düzenleme ile,

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= A_n\cos ka + (g\cos ka - \sin ka)B_n \\ B_{n+1} &= (g\sin ka + \cos ka)B_n + A_n\sin ka \end{aligned} \tag{5-96}$$

elde edilir,burada $g = \lambda/ka$ 'dır.

(5-92) ve (5-93) dalga fonksiyonları arasında,

$$\psi(R_{n+1}) = e^{i\phi}\psi(R_n) \tag{5-97}$$

bağıntısı bulunmalıdır;bu bağıntının sağlanması için de,

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= e^{i\phi}A_n \\ B_{n+1} &= e^{i\phi}B_n \end{aligned} \tag{5-98}$$

olmalıdır.Bu sonuçlar (5-96)'da yerine konulduğu zaman,

$$(e^{i\phi} - \cos ka)(e^{i\phi} - g \sin ka - \cos ka) = \sin ka\,(g \cos ka - \sin ka)$$

bağıntısını veren bir tutarlılık koşulu buluruz;ve bu,

$$e^{2i\phi} - e^{i\phi}(2 \cos ka + g \sin ka) + 1 = 0$$

olması demektir. $e^{-i\phi}$ ile çarpım,

$$\cos \phi = \cos ka + \frac{1}{2} g \sin ka \qquad (5\text{-}99)$$

verir.

"Kristal"imiz için,

$$\psi(R_{n+N}) = \psi(R_n) \qquad (5\text{-}100)$$

biçimindeki periyodik sınır koşullarını alırsak,o zaman (5-98)'den $e^{iN\phi} = 1$ sonucu çıkar,buradan da

$$\phi = \frac{2\pi}{N} m \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad (5\text{-}101)$$

bulunur.ϕ'yi qa ile gösterelim,burada q periyodik sınır koşulları taşıyan ve hiçbir potansiyelin yani hiçbir iyonun bulunmadığı,Na uzunluğunda bir kutu içindeki elektronun dalga sayısıdır.Böylece (5-99),

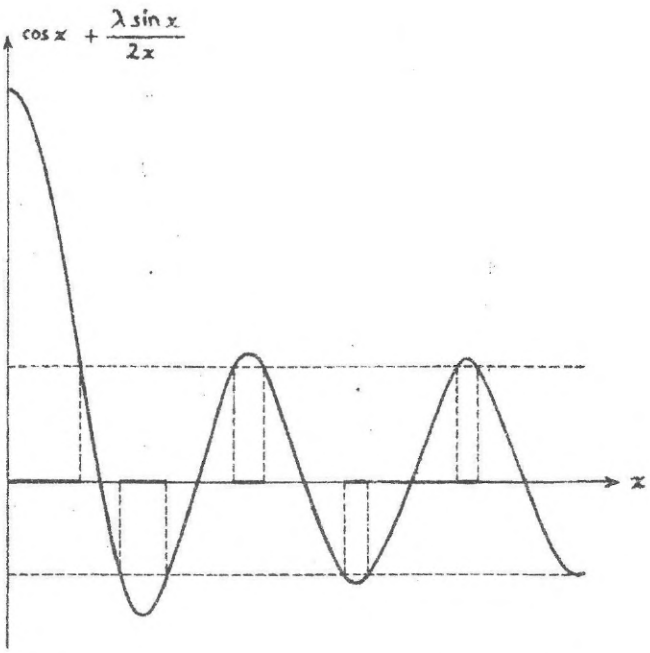
$$\cos qa = \cos ka + \frac{1}{2} \lambda \frac{\sin ka}{ka} \qquad (5\text{-}102)$$

biçiminde yeniden yazılabilmelidir.Bu çok ilginç bir sonuçtur,çünkü sol yan her zaman 1 ile sınırlanmıştır;yani $E = \hbar^2 k^2/2m$ enerjisinin alabileceği değerler üzerinde,"kristal"imizin parametrelerine bağlı olan kısıtlamalar vardır.Şek.5-18'de, $x = ka$'nın fonksiyonu olarak $\cos x + \lambda \sin x/2x$'in çizimi gösterilmiştir.Yatay çizgi $\cos qa$ 'nın sınırlarını gösterir,ve eğrinin şerit dışında kaldığı x bölgeleri yasak bölgelerdir.Böylece yasak bölgelerle ayrılmış olan izinli enerji kuşakları vardır.Yasak bir kuşağın başlaması,

$$ka = n\pi \qquad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \qquad (5\text{-}103)$$

koşuluna karşılık gelir.Ve bu,dik geliş için tam olarak Bragg yansıması koşuludur.

Elektronların "doldurduğu" enerji düzeylerinin daha fazla elektron alamayacağı olgusu(bu,ilerde incelenecektir) gözönüne alınırsa,Kronig-Penney modelinin metal,yalıtkan ve yarıiletken kuramlarıyla ilgisi olduğu görülür.Böylece bir metalde kısmen dolmuş olan bir enerji kuşağı bulunabilir.Bir dış elektrik alanı uygulanırsa, elektronlar ivmelenirler,ve kendilerine uygun gelen momentum durumları varsa,elektronlar dış alanın etkisi ile bu momentum durumlarını doldururlar.Yalıtkanlarda tam olarak dolmuş kuşaklar bulunur;ve yakınlarda hiçbir boş durum olmadığından,bir elektrik alanı elektronları ivmelendiremez.Elektrik alanı yeterince kuvvetli ise,elektronlar yasak bir enerji aralığının üstünden "atlayabilirler" ve boş bir izinli enerji

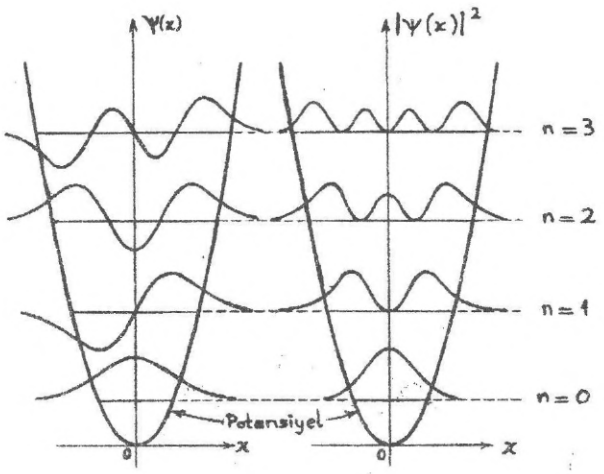


Şek.5-18. x'in fonksiyonu olarak cos x +($\lambda/2$) (sin x/x)'in çizimi.Yatay çizgiler ± 1 sınırlarını gösterir.Eğrinin kuşak dışına uzandığı x bölgeleri yasaktır.

kuşağına gidebilirler.Bu bir yalıtkanın bozulması demektir.Yarıiletken çok dar bir yasak aralığı bulunan bir yalıtkandır.Burada,koşullardaki küçük bir değişme,örneğin sıcaklıktaki bir artış "atlama"yı yaptırır ve yalıtkan bir iletken durumuna geçer.

G. Harmonik Salıngan

Son örneğimiz olarak harmonik salınganı inceliyoruz(Şek.5-19).Şimdiye değin incelediğimiz örneklerin tersine,çözülmesi gereken diferansiyel denklem öyle önemsiz değildir;ve bu problemi tartışmanın bir nedeni de,böyle denklemlerin çözüm teknikleri ile ilgili birşeyler öğrenmektir.



Şek.5-19. En alt dört özdeğer için harmonik salınganın özfonksiyonları ve olasılık yoğunlukları.Özfonksiyonların çiftlik ve teklik özeliğine dikkat ediniz.

Klasik Hamiltonien,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2 \tag{5-104}$$

biçimindedir,bundan dolayı özdeğer denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 u(x) = Eu(x) \tag{5-105}$$

olur.Şimdi salınganın,

$$\omega = \sqrt{k/m} \tag{5-106}$$

frekansını tanımlayalım ve

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{5-107}$$

yazalım.Ve,

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \tag{5-108}$$

değişken değiştirmesini yaparsak,son olarak denklemin şu basit biçimini elde

ederiz:

$$\frac{d^2u}{dy^2} + (\epsilon - y^2)\, u = 0 \qquad (5\text{-}109)$$

Burada görünen bütün nicelikler boyutsuzdur.

$y^2 \to \infty$ iken, herhangi bir ϵ özdeğeri için, ϵ 'nun bulunduğu terim önemsizdir. Bu yüzden u(y)'nin asimptotik olarak,

$$\frac{d^2u_o(y)}{dy^2} - y^2 u_o(y) = 0 \qquad (5\text{-}110)$$

denklemini sağlaması gerekir. Bunu $2du_o/dy$ ile çarparsak, bu denklemi

$$\frac{d}{dy}\left(\frac{du_o}{dy}\right)^2 - y^2 \frac{d}{dy}(u_o^2) = 0 \qquad (5\text{-}111)$$

biçiminde, ya da eşdeğer olarak,

$$\frac{d}{dy}\left[\left(\frac{du_o}{dy}\right)^2 - y^2 u_o^2\right] = -2yu_o^2 \qquad (5\text{-}112)$$

biçiminde yeniden yazabiliriz. Denklemin sağ yanındaki terimi önemsiz sayarsak, bu denklem büyük ölçüde basitleşir. Bunun yapılabileceğini varsayalım ve sonra bu varsayımın doğru olup olmadığına bakalım. Sağ yanı atarsak,

$$\frac{du_o}{dy} = (C + y^2 u_o^2)^{1/2}$$

buluruz, burada C bir tümlev sabitidir. Sonsuzda hem $u_o(y)$ hem de du_o/dy sıfır olacağından, C = 0 olmalıdır. Böylece,

$$\frac{du_o}{dy} = \pm\, yu_o \qquad (5\text{-}113)$$

bulunur, bunun sonsuzda da geçerli olan çözümü,

$$u_o(y) = e^{-y^2/2} \qquad (5\text{-}114)$$

dir. Şimdi büyük y'ler için,

$$\frac{d}{dy}(y^2 u_o^2) = \frac{d}{dy}(y^2 e^{-y^2}) \simeq -4y^3 e^{-y^2}$$

ile karşılaştırınca, $2yu_o^2 = 2y\, e^{-y^2}$ 'nin gerçekten önemsiz olduğunu doğrulayabiliriz. Burada,

$$u(y) = h(y)\, e^{-y^2/2} \qquad (5\text{-}115)$$

gibi, yeni bir h(y) fonksiyonu tanımlarsak, o zaman diferansiyel denklemin,

$$\frac{d^2h(y)}{dy^2} - 2y\,\frac{dh(y)}{dy} + (\epsilon - 1)h(y) = 0 \qquad (5\text{-}116)$$

biçimini alacağı kolayca görülür.Bu büyük bir basitleşme gibi gözükmez,fakat sonsuzdaki davranışı açıklamış oluruz,ve şimdi y = 0yakınındakidavranışa bakabiliriz.Bunun için,

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \qquad (5\text{-}117)$$

kuvvet serisi açılımını deneyelim.Bu,denklemde yerine konursa,y^m'nin katsayılarının

$$(m+1)(m+2)\,a_{m+2} = (2m - \epsilon + 1)\,a_m \qquad (5\text{-}118)$$

indirgeme bağıntısını sağlaması gerekir.Böylece, a_0 ve a_1 verildiğinde,tek ve çift seriler ayrı ayrı türetilebilir.Bunların karışmaması,Hamiltonien'in yansımalar altındaki değişmezliğinin bir sonucudur.İsteksel ϵ için,m'in büyük değerlerinde(örneğin $m > N$),

$$a_{m+2} \simeq \frac{2}{m}\, a_m \qquad (5\text{-}119)$$

buluruz.Böylece çözüm yaklaşık olarak,

$$h(y)=(y\text{'ye göre bir çokterimli}) + a_N \left[y^N + \frac{2}{N} y^{N+2} + \frac{2^2}{N(N+2)} y^{N+4} + \frac{2^3}{N(N+2)(N+4)} y^{N+6} + \cdots \right]$$

dır.Burada,basit olsun diye yalnız çift çözümleri aldık.Buradaki seri,

$$a_N y^2 \left(\frac{N}{2} - 1\right)! \left[\frac{(y^2)^{N/2-1}}{(N/2-1)!} + \frac{(y^2)^{N/2}}{(N/2)!} + \frac{(y^2)^{N/2+1}}{(N/2+1)!} + \cdots \right]$$

biçiminde yazılabilir;bu,bir çokterimli + bir sabit $\times$ $y^2 e^{y^2}$ biçimindedir.Bu, (5-115)'de yerine konursa,sonsuzda sıfır olmayan bir çözüm elde ederiz.İndirgeme bağıntısı bir yerde son bulursa,yani

$$\epsilon = 2N + 1 \qquad (5\text{-}120)$$

olursa geçerli bir çözüm bulunabilir. ϵ 'nun bu özel değeri için indirgeme bağıntısı,

$$a_{2k} = (-2)^k \frac{N(N-2)\cdots(N-2k+4)(N-2k+2)}{(2k)!}\, a_0 \qquad (5\text{-}121)$$

ve

$$a_{2k+1} = (-2)^k \frac{(N+1)(N-1)\cdots(N-2k+3)(N-2k+1)}{(2k+1)!}\, a_1 \qquad (5\text{-}122)$$

verir.Böylece,şu sonuçlara ulaşırız:

1. Kesikli,eşit aralıklı özdeğerler vardır.Denk.(5-120),

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (5\text{-}123)$$

olarak çevrilebilir.Bu alışılmış bir biçimdir;çünkü enerji ve frekans arasındaki bu bağıntı,Planck'ın ışınım alanı kipleri için bulduğu bağıntı ile aynıdır.Böyle olması rastlantı değildir;çünkü elektromagnetik alanın olağan kiplere ayrılması,aslında çiftlenimsiz harmonik salınganlara ayrılmasıdır.

2. h(y) çokterimlileri boylandırma sabitleri dışında $H_n(y)$ Hermite çokterimlileridir,ve bunların özelikleri birçok ders kitabında bulunabilir.Aslında biz bu ayrıntılarla ilgilenmiyoruz,ve harmonik salıngan problemini yine çözeceğiz; bu yüzden şimdilik bu konuları kesiyoruz.Ayrıca,harmonik salınganın klasik mekanikte olduğu gibi kuantum mekaniğinde de önemli olmasının nedenini belirtmeğe değer: Bir sistemin denge durumundan herhangi küçük bir tedirgenmesi küçük salınımlar doğurur,bunlar da her zaman olağan kiplere,başka deyişle bağımsız salınganlara ayrılabilir.

3. (5-123)'den görüldüğü gibi en alt durumun bile bir enerjisi vardır.Buna sıfır-nokta enerjisi denir.Bu enerjinin varlığı bütünüyle kuantum mekaniksel bir etkidir ve belirsizlik ilkesine dayanarak yorumlanabilir.Helyumun aşırı alçak sıcaklıklarda "donmaması",fakat olağan basınçlarda 10^{-3} Kelvin derecesi basamağına kadar sıvı kalması olgusundan da sıfır-nokta enerjisi sorumludur.Hafif atomlarda ω frekansı büyüktür,bu nedenle örneğin azotta bu etki görülmez.Bu enerji,ayrıca da atomlararası kuvvetlerin ayrıntılı özeliklerine bağlıdır,ve sıvı hidrojenin donması bu yüzdendir.

Problemler

1. x-ekseninin sonlu bir bölgesinde yerleşmiş isteksel bir potansiyeli gözönüne alınız.Potansiyel bölgesinin solundaki ve sağındaki çözümler sırayla,



ile verilmiş olsunlar.

$$C = S_{11}A + S_{12}D$$

$$B = S_{21}A + S_{22}D$$

yazarsak,ya da başka deyişle,"giden" dalgaları "gelen" dalgalara

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

olarak bağlarsak,

$$|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 = 1$$
$$|S_{21}|^2 + |S_{22}|^2 = 1$$
$$S_{11}S_{12}^* + S_{21}S_{22}^* = 0$$

bağıntılarının geçerli olduğunu gösteriniz.Bu bağıntılar,

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

matrisinin üniter olduğunu söylemeye gelir.

(İpucu: Akı korunumunu,ve A ve D'nin isteksel karmal sayılar olabileceğini kullanınız.)

2.

$$V(x) = 0 \qquad x < -a$$
$$= V_o \qquad -a < x < a$$
$$= 0 \qquad x < a$$

potansiyeli için,saçılma matrisinin S_{11}, S_{12}, S_{21} ve S_{22} öğelerini hesaplayınız,ve Problem 1'de kanıtlanan genel koşulların gerçekten sağlandığını gösteriniz.

3. S_{11} .....S_{22} öğeleri k'nın fonksiyonudur.

$$S_{11}(-k) = S_{11}^*(k)$$
$$S_{22}(-k) = S_{22}^*(k)$$
$$S_{12}(-k) = S_{21}^*(k)$$

olduğunu,ya da başka deyişle,bu matrisin

$$S(-k) = S^+(k)$$

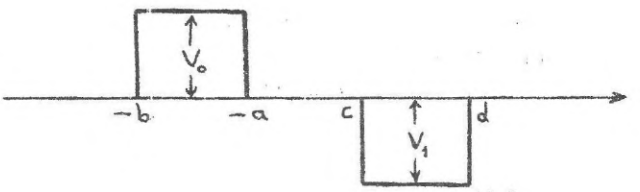
özeliğini taşıdığını gösteriniz.

4. Potansiyel kuyusu için tek çözümleri gözönüne alınız(örneğin Denk.5-39), bu çözümler sıfır açısal momentumlu üç-boyutlu potansiyel kuyusu için bir model olarak kullanılabilir.Potansiyelin aralığı $1.4\text{x}10^{-13}$ cm ve sistemin bağlanma enerjisi -2.2 MeV olarak verilirse ve kullanılan kütle $0.8\text{x}10^{-24}$ gr ise,potansiyelin derinliğini MeV olarak bulunuz.

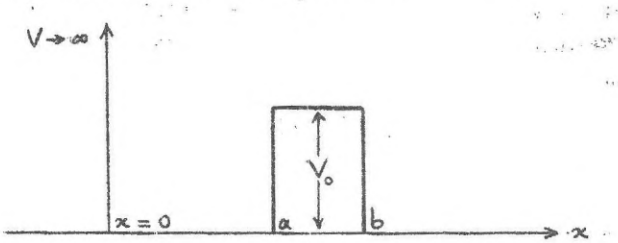
[Yardım: (1) Önce,uzunluk ve kütleleri öyle kütle birimlerine çevirimiz ki,aralık $d(\hbar/\mu c$) ve bağlanma enerjisi $\epsilon(\mu c^2)$ biçiminde olsunlar.Verilen kütle uygun olabilir.(2) Bağlanma enerjisi çok küçüktür,öyle ki hemen hemen sıfırdır.Sıfır olsa idi,(5-41) koşulu V_o'ı verirdi.Bu değer yakınlarında seriye açınız.

5. Schrödinger denklemini gerçekten çözmeden,çözümleri öyle kurunuz ki,

aşağıdaki durumlar için yalnızca özfonksiyonların ve türevlerinin eşitlenmesi kalsın :



Bu problemi çözerken, şu koşulları gözönünde tutunuz: (a) Potansiyel olmasaydı, soldan gelen akı $\hbar k/m$ olacaktı; $E < V_0$ alınız.



(b) Potansiyel olmasaydı, sağdan gelen akının büyüklüğü $\hbar k/m$ olacaktı; $E < V_0$ alınız.

6. (5-35)'deki bir bağlı durumun koşullarının, (5-25)'in paydasının $k = i\kappa$ 'da sıfır olması gereğinden elde edilebileceğini gösteriniz. Bunun neden bir rastlantı olmadığını tartışabilir misiniz?

7.

$$V(x) = \frac{\lambda}{a}\ \delta(x - b)$$

potansiyeli için saçılma matrisini gözönüne alınız ve bunun,

$$\begin{pmatrix} \frac{2ika}{2ika-\lambda} & \frac{\lambda}{2ika-\lambda} e^{-2ikb} \\ \frac{\lambda}{2ika-\lambda} e^{2ikb} & \frac{2ika}{2ika-\lambda} \end{pmatrix}$$

biçiminde olacağını gösteriniz. Bu matrisin üniter olduğunu, ve matrisin öğeleri

sonsuz olduğu zaman bağlı durumlar koşulunu verdiğini kanıtlayınız.(Bu durum, yalnızca $\lambda < 0$ için oluşacaktır.)

8. Parçacığı olabildiğince başlangıcın sağ yanında yerelleştirecek olan, Denk.5-83'deki α 'yi hesaplayınız.

9. Harmonik salınganın en alt üç özfonksiyonu için dalga fonksiyonlarını ayrıntılı olarak hesaplayınız.

10. Harmonik salıngan potansiyelinin küçük bir kübik terim ile terdirgendiğini düşününüz, öyle ki,

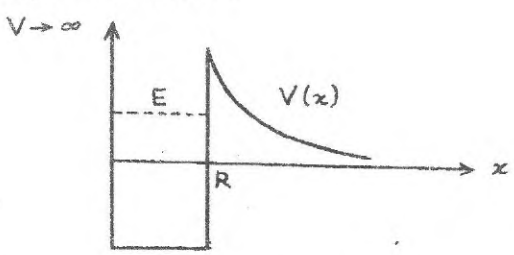
$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x^2 - \frac{1}{a} x^3 \right)$$

olsun. a büyükse $\left[(\hbar / m\omega)^{1/2} \right.$ belirtgen boyutu ile karşılaştırınca$\left.\right]$, taban durumdaki bir parçacığın en sağdaki bölgeye "sızması"nın ne kadar zaman aldığını kestiriniz. Yalnız bu tedirgenme varken, hiçbir en düşük enerji durumu bulunmadığına dikkat ediniz; çünkü yeterince büyük x için, potansiyel istendiği kadar derin olur.

11. Aşağıda gösterilen,

$$V(x) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mx^2} \qquad x > R_0$$

potansiyelini gözönüne alınız :



E enerjili bir parçacığın bu potansiyeldeki yarıömrünü kestiriniz(dıştaki potansiyel üç boyutlu bir dünyadaki merkezkaç bir engeli gösterir).Sonuçlarınızı $\frac{\ell}{kR}$ boyutsuz oranı cinsinden ifade ediniz, burada $E = \hbar^2 k^2 / 2m$'dir. $\ell \gg 1$ alınız.

12.

$$\lambda = 3\pi$$

olan Kronig-Penney potansiyelini gözönüne alınız.

(a) $x = k\alpha$ 'nın fonksiyonu olarak,

$$\cos x + \frac{\lambda}{2} \frac{\sin x}{x}$$

eğrisini ayrıntılı olarak çiziniz.

(b) Yasak enerji kuşaklarının, $k\alpha = n\pi$ 'nin hemen üstünden başladığını gösteriniz.

(c) λ artarken izinli enerji kuşaklarının daraldığını gösteriniz.

(d) $\hbar^2k^2/2m$ enerjisini, q'nun fonksiyonu olarak çiziniz.

13. Bir molekülün (5-71) ile tanımlanan modelini gözönüne alınız. λ büyük olduğu zaman,

$$\omega_{tç} \simeq \frac{\hbar}{2m\alpha^2}\lambda^2 e^{-\lambda}$$

olduğunu gösteriniz.

Kaynaklar

Kronig-Penney modeli şurada da ayrıntılı olarak incelenmiştir:

E.Merzbacher, Quantum Mechanics (2.nci basım), John Wiley and Sons, New York, 1970.

"Kuşak kuramı"nın daha ayrıntılı bir tartışması için bkz. :

C.Kittel, Introduction to Solid State Physics (4.üncü basım), John Wiley and Sons, Inc., New York, 1971, Bölüm 9.

Engelden sızmanın, WKB yaklaşımını kullanan daha tam bir tartışması için kitabın sonundaki listede verilen daha ileri ders kitaplarından birine bakınız.

BÖLÜM 6

DALGA MEKANİĞİNİN GENEL YAPISI

Bölüm 5'te fiziksel bakımdan ilginç olan,

$$H = \frac{p_{op}^2}{2m} + V(x) = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 + V(x) \qquad (6\text{-}1)$$

biçimindeki birkaç Hamiltonien için,

$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \qquad (6\text{-}2)$$

denkleminin çözümleri olan enerji özfonksiyonları elde edilmişti.Bir sistemin zaman içindeki gelişimini belirlemesi nedeniyle,H Hamiltonien işlemcisi üzerinde önemle durulmuştu. Bir sistemin başlangıç durumu herhangi bir $\psi(x)$ dalga fonksiyonu ile betimlenebilir.Bu dalga fonksiyonu üzerindeki tek kısıtlama şudur: Karesi tümlenebilir olmalıdır; bu durum,

$$\int dx \ \psi^*(x) \ \psi(x) < \infty \qquad (6\text{-}3)$$

olarak anlatılabilir.Genelliği bozmadan, $\psi(x)$ bir sabitle çarpılabilir; ve böylece bu dalga fonksiyonu,

$$\int dx \ \psi^*(x) \ \psi(x) = 1 \qquad (6\text{-}4)$$

olarak boylandırılmış olur.Zamana bağlı Schrödinger denklemi,

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H \ \psi(x,t) \qquad (6\text{-}5)$$

dalga fonksiyonunun zaman gelişimini betimler,ve $u_E(x)$ enerji özfonksiyonları verildiğinde bu problem hemen çözülebilir.Çözümün nasıl olduğunu söyleyen genel bir teorem

vardır: İsteksel bir $\psi(x)$ fonksiyonu,H'nin özfonksiyonlarının bir tam kümesi türünden açılabilir; ya da başka deyişle,

$$\psi(x) = \sum_{E} C_E u_E(x) \tag{6-6}$$

olarak yazılabilir.Eğer H'nin özfonksiyonlarını boylandırılmış olarak seçer ve E'nin farklı değerlerine karşılık gelen özfonksiyonların dik olduğunu gözönüne alırsak,o zaman

$$\int u^*_{E'}(x)\, u_{E''}(x)\, dx = \delta_{E'E''} \tag{6-7}$$

olur; bu sonuç Ek B'de kanıtlanmıştır.Buradan da açılım katsayıları,

$$\begin{aligned} \int dx\; u^*_{E'}(x)\, \psi(x) &= \sum C_E \int u^*_{E'}(x)\, u_E(x)\, dx \\ &= \sum C_E\, \delta_{EE'} \\ &= C_{E'} \end{aligned} \tag{6-8}$$

olarak belirlenir.Şimdi,her bir enerji özfonksiyonu için zaman bağlılığının,

$$u_E(x,t) = u_E(x)\, e^{-iEt/\hbar} \tag{6-9}$$

biçiminde olduğunu gözönüne alalım.Böyle olduğu,(6-9)'un (6-5)'te yerine konmasıyla kolayca görülebilir; ve buradan,

$$\psi(x,t) = \sum_{E} C_E\, e^{-iEt/\hbar}\, u_E(x) \tag{6-10}$$

olur.Çok sayıda örneğin incelenmesinden öğrendiğimiz gibi,enerji özdeğerleri kesikli ve/veya sürekli değerler alabilir.Bu yüzden,özdeğerlerin spektrumunun kesikli ve/veya sürekli olduğunu söyleriz.Öyleyse (6-6) aslında,bu iki duruma karşılık gelmek üzere,

$$\psi(x) = \sum_{n} C_n u_{E_n}(x) + \int dE\, C(E)\, u_E(x) \tag{6-11}$$

olmalıdır; ve (6-7),kesikli değerler için

$$\int u^*_{E_m}(x)\, u_{E_n}(x)\, dx = \delta_{mn} \tag{6-12}$$

ve sürekli değerler için,

$$\int u^*_{E}(x)\, u_{E'}(x)\, dx = \delta(E - E') \tag{6-13}$$

verir.Olabilen tek seçim bu değildir.Potansiyel kuyusu veya engeli problemlerinin çözümlerinde gördüğümüz gibi,enerji özdeğer denkleminin çözümleri öyle fonksiyonlardan

kurulabilir ki,bu fonksiyonlar potansiyelden uzaklarda,momentum özfonksiyonları olurlar.Burada,enerji ve momemtum arasında bir bağıntı vardır(potansiyelden uzakta,$E=p^2/2m$); böylece çözümler öyle boylandırılabilir ki,(6-13)'ün sağ yanı yerine $\delta(p-p')$,veya üç boyutta $\delta(\vec{p}-\vec{p}')$ gelir.

Ayrıca açılım katsayıları için,postülat olarak bir yorum önermiştik: $|C_E|^2$, $\psi(x)$ ile betimlenen durumun bir enerji ölçümünün,belli E özdeğerini vermesi olasılığıdır.Özel herhangi bir ölçüm yalnızca bir özdeğer verebilir; fakat klasik fiziğin tersine,bunun hangi özdeğer olacağını öngöremeyiz: Yalnızca,bu ölçümün belli bir E değeri vermesinin olasılığını biliriz.Klasik kuramda olduğu gibi kuantum mekaniğinde de, bir anlamı olması için,herhangi bir ölçüm yinelenebilir olmalıdır.Böylece,bir gözlemci bir sistem üzerinde tek bir ölçüm yaparak,enerjinin örneğin bir E_1 değerini bulursa,bu sistem için sonraki bir enerji ölçümü gene E_1 vermelidir.Bu nedenle,ilk ölçümden sonra sistemin durumu yeni bir dalga fonksiyonuyla betimlenir,bu ise $u_{E_1}(x)$ özfonksiyonudur; ancak o zaman yinelenen bir ölçüm,1 olasılığı ile E_1 verir.Ve bazen,"bir ölçüm bir durumu gözlenebilirin bir özdurumuna izdüşürür" deyimi kullanılır.

Açılım teoremi,bir $\vec{A}$ vektörünün N-boyutlu vektör uzayındaki dikeyboylu birim vektörler türünden açılımının bir genelleştirilmesi olarak görülebilir:

$$\vec{A} = \alpha_1\hat{\lambda}_1 + \alpha_2\hat{\lambda}_2 + \ldots\ldots + \alpha_N\hat{\lambda}_N \qquad (6\text{-}14)$$

$\hat{\lambda}_k$ birim vektörleri,

$$\hat{\lambda}_k \cdot \hat{\lambda}_\ell = \delta_{k\ell} \qquad (6\text{-}15)$$

bağıntısını sağlarlar,ve bunlar $u_E(x)$'lerin benzerleridir. α_k katsayıları,

$$\alpha_k = \hat{\lambda}_k \cdot \vec{A} \qquad (6\text{-}16)$$

ile verilir,bunlar da C_E'lerin benzerleridir.Kuantum mekaniğinde vektör uzayı dilini sık sık kullanacağız.Böylece C_E katsayılarını,çoğu kez $\psi(x)$'in $u_E(x)$ "boyunca izdüşümleri" olarak göreceğiz,ve

$$C_E = \int u_E^*(x)\ \psi(x)\ dx \qquad (6\text{-}17)$$

niceliğine bir skaler çarpım diyeceğiz.Dirac'ın yaptığına uygun olarak,skaler çarpım için şu uygun yazımı kullanacağız:

$$\int \phi^*(x)\ \psi(x)\ dx = \langle\phi|\psi\rangle \qquad (6\text{-}18)$$

Uygun dalga fonksiyonları ile tüm N-boyutlu vektörler topluluğu arasındaki benzerlik gerçekten çok derindir.Herhangi iki vektörün toplamı,

$$\vec{A} + \vec{B} = \vec{C} \qquad (6\text{-}19)$$

olarak yeni bir vektör verir,ve bir vektörle bir sayının çarpımı gene bir vektördür; bu durumun tam benzeri olarak,karesi tümlenebilir herhangi iki fonksiyonun toplamı, ve karesi tümlenebilir bir fonksiyonunun isteksel bir sayı(karmal) ile çarpımı da gene karesi tümlenebilir bir fonksiyondur.Skaler çarpım kavramını,bir durum için

$$\langle A \mid B \rangle = \vec{A}.\vec{B} \tag{6-20}$$

olarak,ve öbür durum için

$$\langle \phi \mid \psi \rangle = \int dx\, \phi^{*}(x)\, \psi(x) \tag{6-21}$$

olarak tanımlarsak,her iki durumda da çizgisel bir vektör uzayımız olur.Tek fark,kuantum mekaniğindeki vektör uzayının sonsuz boyutlu olmasıdır.(6-21)'deki sürekli x etiketi,

$$\vec{A}.\vec{B} = \sum_{i=1}^{N} a_i b_i \tag{6-22}$$

deki i indisinin rolünü oynadığı için,gerçekten bu uzay sürekli bir biçimde sonsuzdur.Bu durum,böyle bir vektör uzayının gerçek bir matematiksel incelenmesinin çok daha karmaşık olması demektir.Çünkü (6-21) gibi tümlevlerin yakınsaklık sorunu çıkar,ve sonlu boyutlu bir uzayın tersine tamlığı kanıtlamak çok daha zordur.Matematiksel söyleyişle,karesi tümlenebilen fonksiyonlar bir Hilbert uzayı kurarlar,ve enerji özfonksiyonları temel vektörlerinin bir tam kümesini oluştururlar.

Sonlu boyutlu veya daha genel vektör uzaylarında bir işlemci,bir vektörü başka bir vektöre,veya buradaki durumda karesi tümlenebilir bir fonksiyonu karesi tümlenebilir bir başka fonksiyona dönüştüren bir şey olarak tanımlamır.Biz aslında,

$$H(\alpha \psi_1 + \beta \psi_2) = \alpha H \psi_1 + \beta H \psi_2 \tag{6-23}$$

özeliğini taşıyan çizgisel işlemcilerle ilgileniyoruz.Bölüm 4'te tartışılan basit örnek,H'nin

$$\langle H \rangle_{\psi} = \int \psi^{*}(x)\, H\, \psi(x)\, dx \tag{6-24}$$

ile tanımlanan beklenen değerinin gerçel olduğunu göstermişti.Fiziksel olarak ölçülebilen bir nicelik için,böyle olması beklenir,ve bu şöyle genelleştirilir:Gözlenebilir bir niceliği gösterimleyen bir işlemcinin,tüm $\psi(x)$'ler için beklenen değeri gerçel olmalıdır.Bu özeliği taşıyan işlemcilere hermitien denir.

İsteksel bir çizgisel A işlemcisi için,

$$\langle A \rangle_{\psi} = \int \psi^{*}(x)\, A\, \psi(x)\, dx \tag{6-25}$$

ve

$$\langle A \rangle_{\psi}^{*} = \int \left[A\, \psi(x) \right]^{*}\, \psi(x)\, dx \tag{6-26}$$

olduğunu biliyoruz. $A^\dagger$ işlemcisi (A-haç okunur),

$$\int [A\,\psi(x)]^*\ \psi(x)\,dx = \int \psi^*(x)\ A^\dagger\ \psi(x)\,dx \qquad (6\text{-}27)$$

bağıntısıyla tanımlanır, ve hermitien eşlenik işlemci adını alır. Örneğin,

$$\int dx \left(\frac{d\psi}{dx}\right)^* \psi = \int dx \frac{d}{dx}(\psi^*\psi) - \int dx\, \psi^* \frac{d\psi}{dx} = -\int dx\, \psi^* \frac{d\psi}{dx}$$

bağıntısı,

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^\dagger = -\frac{d}{dx}$$

olduğunu gösterir. Benzer olarak,

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - a e^{ix}\right)$$

işlemcisinin hermitien eşleniğinin,

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - a^* e^{-ix}\right)$$

olacağı kolayca gösterilir. Hermitien bir işlemci için,

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_\psi^* &= \int [H\psi(x)]^*\ \psi(x)\,dx \\ &= \int \psi^*(x)\ H^\dagger\ \psi(x)\,dx \\ &= \langle H \rangle_\psi \\ &= \int \psi^*(x)\ H\ \psi(x)\,dx \end{aligned} \qquad (6\text{-}28)$$

olur; ve bu, tüm $\psi(x)$'ler için doğru olduğundan,

$$H^\dagger = H \qquad (6\text{-}29)$$

olduğunu söyleriz. İşlemcileri de kapsayan skaler çarpımın Dirac yazımı,

$$\int \phi^*(x)\ A\ \psi(x)\,dx = \langle \phi \mid A \mid \psi \rangle \qquad (6\text{-}30)$$

olur. Böylece[1],

$$\langle \phi \mid A \mid \psi \rangle^* = \int [A\ \psi(x)]^*\ \phi(x)\,dx$$

[1] $A^\dagger$'ın (6-27)'deki tanımı, yalnız A'nın beklenen değerini kapsar. λ isteksel bir karmal sayı olmak üzere $\psi(x) = u(x) + \lambda\, v(x)$ yazarak (6-27)'nin, (6-31)'deki birinci ve ikinci satır arasında bir basamak gerektirdiği kolayca görülür.

$$= \int \psi^*(x)\, A^\dagger\, \phi(x)\, dx$$

$$= \langle \psi \mid A^\dagger \mid \phi \rangle \qquad (6\text{-}31)$$

olur.

Genelliğe yönelmemizin nedeni şudur: Şimdiye dek gördüğümüz gibi, ilginç olan işlemci yalnızca H değildir. p_{op} momentum işlemcisi, parite, yer v.b. gibi öbür fiziksel gözlenebilirler de hermitien işlemcilerle gösterimlenir. İşlemciler için, A, B, C, ... harflerini kullanacağız. Yalnızca, gözlenebilirleri gösteren işlemcilerle ilgilendiğimizden, bunların tümü hermitien olacaktır:

$$A = A^\dagger$$

$$B = B^\dagger \qquad (6\text{-}32)$$

ve öbürleri.

Bütün hermitien işlemcilerin özfonksiyonları vardır. Ya da başka deyişle, öyle bir vektörler kümesi vardır ki, bu vektörlere etkiyen işlemci, bir orantı sabiti dışında gene aynı vektörleri verir; buradaki orantı sabiti özdeğerdir:

$$A u_\alpha(x) = \alpha\, u_\alpha(x) \qquad (6\text{-}33)$$

Özdeğerlerin spektrumu, Hamiltonien için olduğu gibi, kesikli ve/veya sürekli olabilir. Momentum özdeğerleri spektrumunun sürekli, parite özdeğerleri spektrumunun ise ± 1 değerleriyle kesikli olduğu bulunmuştu. Enerji özfonksiyonlarındaki gibi, α'nın farklı değerlerine karşılık gelen özfonksiyonlar diktir, ve bunlar boylandırılmış olarak seçilebilirler. Böylece,

$$\int u_\alpha^*(x)\, u_{\alpha'}(x)\, dx = \delta(\alpha, \alpha') \qquad (6\text{-}34)$$

veya yeni yazımımızla,

$$\langle u_\alpha \mid u_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha, \alpha') \qquad (6\text{-}35)$$

olur. Burada $\delta(\alpha, \alpha')$, özdeğerler kesikliyse bir $\delta_{\alpha\alpha'}$ Kroenecker deltası, sürekliyse bir $\delta(\alpha - \alpha')$ Dirac delta fonksiyonudur. (6-33) ve (6-34) denklemlerinden,

$$\alpha = \int u_\alpha^*(x)\, A u_\alpha(x)\, dx \qquad (6\text{-}36)$$

yani,

$$\alpha = \langle u_\alpha \mid A \mid u_\alpha \rangle \qquad (6\text{-}37)$$

sonucu çakar. Böylece, hermitien bir işlemcinin özdeğerleri gerçel olmalıdır. Ayrıca, A ile betimlenen gözlenebilirin bir tek ölçümünün sonucu özdeğerlerden biri olmalıdır, bu yüzden de özdeğerlerin gerçel olması gerekir.

Bölüm 4'te,Hamiltonien için olduğu gibi,Hermitien işlemcilerin özfonksiyonlarının da bir tam küme oluşturduğunu bulmuştuk.Bunun sonucu olarak,

$$\psi(x) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} u_{\alpha}(x) \tag{6-38}$$

açılım teoremi geçerlidir; burada,

$$C_{\alpha} = \int u_{\alpha}^{*}(x)\, \psi(x)\, dx = \langle u_{\alpha} | \psi \rangle \tag{6-39}$$

dir.Gene C_{α} 'nın yorumu,bir olasılık genliğidir; şöyle ki $|C_{\alpha}|^2$, $\psi(x)$ ile betimlenen sistem için A'nın bir ölçümü yapıldığında α özdeğerini bulma olasılığıdır. Gene,yeniden yapılabilirlik bir ölçümden sonra,sistemin $u_{\alpha}(x)$ özdurumunda bulunmasını gerektirir.

Bölüm 4'te tartışılan kutu içindeki parçacık ve özgür parçacık problemlerinin ikisinde de özfonksiyonların,hem H'nin hem de başka bir işlemcinin ortak özfonksiyonları olduğunu bulmuştuk.Bu başka işlemci,kutu içindeki parçacık için parite,ve özgür parçacık için momentum işlemcisiydi.Her iki durumda da,bu ek işlemcilerin H ile sıradeğiştirdiğini görmüştük.Şimdi hangi genel koşullar altında böyle olduğunu araştıralım.

A işlemcisinin α özdeğerine karşılık gelen,

$$Au_{\alpha}(x) = \alpha u_{\alpha}(x) \tag{6-40}$$

u_{α} özfonksiyonlarını düşünelim;bir B işlemcisi için,

$$Bu_{\alpha}(x) = bu_{\alpha}(x) \tag{6-41}$$

oluyorsa,u_{α} özfonksiyonları aynı zamanda B işlemcisinin de özfonksiyonları olacaktır. Bu durum,

$$ABu_{\alpha}(x) = Abu_{\alpha}(x) = bAu_{\alpha}(x) = \alpha b u_{\alpha}(x)$$

ve

$$BAu_{\alpha}(x) = B\alpha u_{\alpha}(x) = \alpha Bu_{\alpha}(x) = \alpha b u_{\alpha}(x)$$

olmasını,yani

$$(AB - BA)\, u_{\alpha}(x) = 0 \tag{6-42}$$

olmasını içerir.Bu,eğer bir tek u_{α} için geçerli olsaydı çok ilginç olmayacaktı; fakat u_{α} 'nın tam kümesi için geçerliyse,karesi tümlenebilen bütün $\psi(x) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} u_{\alpha}(x)$ fonksiyonları için,

$$\sum_{\alpha} C_{\alpha} (AB - BA)\, u_{\alpha}(x) = (AB - BA) \sum C_{\alpha} u_{\alpha}(x)$$
$$= (AB - BA)\psi(x) = 0 \tag{6-43}$$

olur,bu ise işlemcilerin sıradeğiştirmesi demektir:

$$[A,B] = 0 \tag{6-44}$$

Karşıt olarak,sıradeğiştiren A ve B gibi iki Hermitien işlemcimiz varsa,ve böylece (6-44) geçerliyse,o zaman

$$ABu_\alpha(x) = BAu_\alpha(x)$$
$$= \alpha Bu_\alpha(x) \qquad (6\text{-}45)$$

yani,

$$A\left[Bu_\alpha(x)\right] = \alpha\left[Bu_\alpha(x)\right] \qquad (6\text{-}46)$$

olacaktır.Böylece $Bu_\alpha(x)$ fonksiyonu da A'nın α özdeğerli bir özfonksiyonudur.Eğer A'nın α özdeğerine karşılık gelen yalnız bir özfonksiyonu varsa bu,$Bu_\alpha(x)$'in $u_\alpha(x)$ ile orantılı olmasını zorunlu kılar:

$$Bu_\alpha(x) = bu_\alpha(x) \qquad (6\text{-}47)$$

Öyleyse $u_\alpha(x)$,A ve B'nin ortak bir özfonksiyonudur.A'nın özfonksiyonlarının katmerli olmadığı bu durumu,kutu içindeki parçacıkta görmüştük.Şimdi,A'nın α özdeğerine karşılık gelen iki özfonksiyonu bulunduğuna düşünelim:

$$Au_\alpha^{(1)}(x) = \alpha\, u_\alpha^{(1)}(x)$$
$$Au_\alpha^{(2)}(x) = \alpha\, u_\alpha^{(2)}(x) \qquad (6\text{-}48)$$

Özgür parçacık örneğinde açıklandığı gibi,bu durumda iki katlı bir katmerlilik vardır; ve biz yalnızca şunu söyleyebiliriz: $Bu_\alpha^{(1)}(x)$ ve $Bu_\alpha^{(2)}(x)$, $u_\alpha^{(1)}(x)$ ve $u_\alpha^{(2)}(x)$'in çizgisel birleştirimleri olmalıdır:

$$Bu_\alpha^{(1)}(x) = b_{11}\, u_\alpha^{(1)}(x) + b_{12}\, u_\alpha^{(2)}(x)$$
$$Bu_\alpha^{(2)}(x) = b_{21}\, u_\alpha^{(1)}(x) + b_{22}\, u_\alpha^{(2)}(x) \qquad (6\text{-}49)$$

Ayrıca da,bu denklemlerin çizgisel birleştirimlerini alarak,

$$Bv_\alpha^{(1)}(x) = b_+ v_\alpha^{(1)}(x)$$
$$Bv_\alpha^{(2)}(x) = b_- v_\alpha^{(2)}(x) \qquad (6\text{-}50)$$

biçiminde denklemler elde edebileceğimiz açıktır.Örneğin,

$$B(u_\alpha^{(1)} + \lambda u_\alpha^{(2)}) = (b_{11} + \lambda b_{21})u_\alpha^{(1)} + (b_{12} + \lambda b_{22})u_\alpha^{(2)}$$
$$= b_\pm (u_\alpha^{(1)} + \lambda u_\alpha^{(2)})$$

yazılabilir;yalnızca bunun için,

$$\frac{b_{12} + \lambda b_{22}}{b_{11} + \lambda b_{21}} = \lambda$$

seçmek gerekir.Bu ikinci dereceden bir denklemdir,ve $b_\pm$ özdeğerlerine karşılık olarak λ'nın iki değeri vardır.A ve B'nin (6-50)'deki ortak özfonksiyonlarını,$u_{\alpha b}^{(1)}(x)$

ve $u^{(2)}_{ab}(x)$ olarak göstermek daha uygun olacaktır.Bunlar B işlemcisinin farklı özdeğerlerine karşılık geldiğinden birbirlerine dik olacaklardır.Uygulamada iki katlı katmerlilik için,A'nın katmerli özfonksiyonları birbirine dik olarak alınırsa(örneğin, özgür parçacık için olan e^{ikx} ve e^{-ikx} gibi),bunlar kendiliğinden B'nin de özfonksiyonları olacaktır.

A'nın özfonksiyonlarını bulduktan,ve sonra sıradeğiştiren bir B işlemcisinin özfonksiyonları olacak biçimde çizgisel birleştirimlerini yaptıktan sonra bile,gene de katmerlilik bulunabilir; yani aynı a ve b için,A ve B'nin birkaç ortak özfonksiyonu olabilir.Öyleyse,A ve B'nin ikisiyle de sıradeğiştiren üçüncü bir C işlemcisi bulunmalıdır; ve fonksiyonlar A,B ve C'nin ortak özfonksiyonlarını vermek üzere yeniden birleştirilebilmelidir,burada A ve B'nin katmerli özfonksiyonlarını C'nin özdeğerleri ayırdeder.Bu işlem hiç katmerlilik kalmayana kadar sürecektir.Fonksiyonlar kümemiz, karşılıklı olarak sıradeğiştiren A,B,C,.....,M işlemciler kümesinin ortak özfonksiyonlarının bir kümesidir.Bu işlemcilerin kümesine <u>sıradeğiştiren gözlenebilirlerin bir tam kümesi</u> adı verilir.Değişme bağıntıları,

$$[A,B]=[A,C] = ... = [A,M] = 0$$
$$[B,C]=[B,D] = ... = [B,M] = 0 \qquad (6\text{-}51)$$

v.b. dir.

$$Au_{ab...m}(x) = a\,u_{ab...m}(x)$$
$$Bu_{ab...m}(x) = b\,u_{ab...m}(x)$$
$$Mu_{ab...m}(x) = m\,u_{ab...m}(x) \qquad (6\text{-}52)$$

$u_{abc...m}(x)$ ile betimlenen durumun A,B,C,....,M gözlenebilirleri için belli değerleri vardır.Bir sistem için bir anda elde edebileceğimiz,olabilen en fazla bilgi budur. Çünkü,A,B,...,M işlemcilerinin fonksiyonu olmayan başka bir işlemciyi gözönüne alırsak(bunlar sıradeğiştirdiğinden,bunların fonksiyonu olan bir işlemci kesin olarak tanımlanmıştır),o zaman bu işlemcinin bir ölçümü $u_{ab...m}(x)$ durumu için keskin bir değer vermeyecektir.Genel olarak iki işlemci sıradeğiştirmiyorsa bu iki gözlenebilirin belirlenebilmesindeki kesinlik bir çeşit belirsizlik bağıntısıyla verilir.

Bunu göstermek için,önce belirsizliğin bir tanımı üzerinde anlaşmalıyız.Doğal bir tanım olan,

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \qquad (6\text{-}53)$$

bağıntısına <u>dağılma</u> da denir.Bunun üstünlüğü $\langle A\rangle = 0$ bile olsa dağılmanın sıfır olmaması,fakat beklenen değer A'nın bir özdurumu için alınırsa sıfır olmasıdır.Bu bağıntıyı,

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle \qquad (6\text{-}54)$$

olarak da yazabiliriz; çünkü,

$$\langle A^2 - 2A\langle A\rangle + \langle A\rangle^2\rangle = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle\langle A\rangle$$

dır.Öyleyse $(\Delta A)^2$, ortalama yakınındaki dalgalanmaların büyüklüğü ile ilgilidir. Ve

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 - \frac{1}{4}\langle i[A,B]\rangle^2 \geq 0 \qquad (6\text{-}55)$$

olduğunu göstermek kolaydır(Bkz. Ek B).Böylece x ve p için $[x,p]=i\hbar$ olduğundan

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \qquad (6\text{-}56)$$

sonucu çıkar.Bunun çıkarılmasında dalga özeliklerinin,x-uzayı veya p-uzayı fonksiyonlarının,veya parçacık-dalga ikiliğinin kullanılmadığına dikkat ediniz.Sonucumuz bütünüyle,A ve B gözlenebilirlerinin işlemci özeliklerine bağlıdır.

Şimdi kuantum kuramının klasik sınırıyla ilgili olan önemli soruna dönelim. Bunun için,önce işlemcilerinibeklenen değerlerinin zaman içindeki gelişimini incelemeliyiz.Genel olarak,bir işlemcinin beklenen değeri zamanla değişir.Zamanla değişmenin nedeni,işlemcinin açık olarak zamana bağlı olmasıdır,örneğin x+pt/m işlemcisi; başka bir nedeni de,beklenen değerin zamanla değişen bir dalga fonksiyonuna göre alınmasıdır.

$$\langle A\rangle_t = \int \psi^*(x,t)\, A\, \psi(x,t)\, dx \qquad (6\text{-}57)$$

yazarsak,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t &= \int \psi^*(x,t)\,\frac{\partial A}{\partial t}\,\psi(x,t)\,dx \\
&+ \int \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t}\, A\, \psi(x,t)\,dx \\
&+ \int \psi^*(x,t)\, A\, \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}\,dx \\
&= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_t + \int \left(\frac{1}{i\hbar} H\, \psi(x,t)\right)^* A\,\psi(x,t) \\
&+ \int \psi^*(x,t)\, A \left(\frac{1}{i\hbar} H\, \psi(x,t)\right) \\
&= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_t + \frac{i}{\hbar}\int \psi^*(x,t)\, HA\, \psi(x,t)\,dx \\
&- \frac{i}{\hbar}\int \psi^*(x,t)\, AH\, \psi(x,t)\,dx
\end{aligned}$$

olur,ve bu

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_t + \frac{i}{\hbar}\langle [H,A]\rangle_t \qquad (6\text{-}58)$$

demektir.Bunu çıkarırken H'nin hermitien bir işlemci olduğunu kullandık.A açıkça zamana bağlı değilse,herhangi bir durum için A'nın beklenen değerindeki değişmenin,

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \frac{i}{\hbar}\langle [H,A]\rangle_t \qquad (6\text{-}59)$$

olduğunu görüyoruz.İşlemci H ile sıradeğiştiriyorsa,beklenen değeri her zaman sabittir,bu durumda gözlenebilirin bir hareket sabiti olduğunu söyleyebiliriz.Hamiltonien, sıradeğiştiren gözlenebilirlerin tam kümesinin bir öğesi ise,öbürlerinin tümü hareket sabitidir.

Sırayla A = x ve A = p gözlenebilirlerini inceleyelim.Önce,

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

olduğunu buluruz.x işlemcisi,x'in herhangi bir fonksiyonu ile sıradeğiştirdiğinden,

$$[V(x),x] = 0 \qquad (6\text{-}60)$$

olur; bu yüzden bizim,yalnızca şu bağıntıyı hesaplamamız gerekir:

$$[p^2,x] = p[p,x] + [p,x]\,p$$
$$= \frac{2\hbar}{i}\,p \qquad (6\text{-}61)$$

Böylece,

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \left\langle \frac{p}{m}\right\rangle \qquad (6\text{-}62)$$

elde ederiz.Bundan sonra p işlemcisi için,p^2 ve p sıradeğiştirdiğinden,

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{p^2}{2m} + V(x),p\right]\right\rangle$$
$$= -\frac{i}{\hbar}\langle [p,V(x)]\rangle \qquad (6\text{-}63)$$

buluruz.Son değiştiriciyi hesaplamak için,

$$pV(x)\,\psi(x) - V(x)\,p\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\,\frac{d}{dx}\,[V(x)\psi(x)] - \frac{\hbar}{i}\,V(x)\,\frac{d}{dx}\,\psi(x)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\,\frac{dV(x)}{dx}\,\psi(x) \qquad (6\text{-}64)$$

olduğuna dikkat edelim. Bunun sonucu olarak,

$$[p, V(x)] = \frac{\hbar}{i}\,\frac{dV(x)}{dx} \qquad (6\text{-}65)$$

ve böylece,

$$\frac{d}{dt}\,\langle p\rangle_t = -\left\langle \frac{dV(x)}{dx}\right\rangle_t \qquad (6\text{-}66)$$

buluruz.

(6-62) ve (6-66)'yı birleştirebilir, ve

$$m\,\frac{d^2}{dt^2}\,\langle x\rangle_t = -\left\langle \frac{dV(x)}{dx}\right\rangle_t \qquad (6\text{-}67)$$

elde ederiz. Bu, bir $V(x)$ potansiyeli içindeki noktasal bir klasik parçacığın hareket denklemine çok benzer:

$$m\,\frac{d^2x_{kl}}{dt^2} = -\frac{dV(x_{kl})}{dx_{kl}} \qquad (6\text{-}68)$$

Bizim,

$$x_{kl} = \langle x\rangle \qquad (6\text{-}69)$$

özdeşlemesini yapmamızı engelleyen tek şey,

$$\left\langle \frac{dV}{dx}\right\rangle \neq \frac{d}{d\langle x\rangle}\,V(\langle x\rangle) \qquad (6\text{-}70)$$

olmasıdır. Yukardaki eşitsizliğin yaklaşık bir eşitliğe dönüştüğü durumlarda hareket tam olarak klasik sayılabilir, böyle olduğunu ilk olarak Ehrenfest belirtmiştir. (6-70)'in eşitliğe dönüşmesi için, potansiyelin kendi değişkenine göre yavaş değişen bir fonksiyon olması gerekir. Eğer,

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \qquad (6\text{-}71)$$

yazarsak, o zaman

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

olur. $(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ belirsizliği küçükse ve açılımdaki daha yüksek terimler önemsiz sayılabilirse,

$$\langle F(x) \rangle \cong F(\langle x \rangle) + \langle x - \langle x \rangle \rangle F'(\langle x \rangle)$$
$$\cong F(\langle x \rangle) \qquad (6\text{-}72)$$

elde ederiz. (6-72)'nin geçerliliği elektronlar ve öbür atomaltı parçacıklar için bile gerçekten doğrudur. Makroskopik alanlar için (6-72) iyi bir yaklaşımdır; ve bir hızlandırıcıdaki elektron ya da proton yörüngelerini, klâsik hareket denklemleri ile betimlememize izin verir.

Problemler

1. Eğer A ve B hermitien işlemcilerse, (1) AB işlemcisinin, yalnızca A ve B sıradeğiştiriyorsa, yani $AB = BA$ ise, hermitien olduğunu, ve (2) $(A+B)^n$ işlemcisinin hermitien olduğunu kanıtlayınız.

2. Herhangi bir işlemci için $A+A^\dagger$ ve $i(A-A^\dagger)$'ın, $AA^\dagger$ gibi hermitien olduklarını kanıtlayınız.

3. H hermitien bir işlemciyse, e^{iH} işlemcisi ($\sum_{n=0}^{\infty} i^n H^n / n!$ olarak tanımlanmıştır) nin hermitien eşleniğinin, e^{-iH} işlemcisi olduğunu kanıtlayınız.

4.
$$\langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle \geq |\langle \psi | \phi \rangle|^2$$

Schwartz eşitsizliğini kanıtlayınız. Bunun, üç boyutlu vektörler için $\cos^2 \theta \leq 1$ 'e eşdeğer olduğuna dikkat ediniz.
(İpucu: $\langle \psi + \lambda \phi | \psi + \lambda \phi \rangle \geq 0$ 'ı gözönüne alınız ve sol yanı minimum yapan λ değerini hesaplayınız.)

5. (6-38) ve (6-39) denklemlerini gözönüne alınız. İsteksel bir ϕ için, $\langle \phi | \psi \rangle$'yi $\langle \phi | u_a \rangle$ türünden hesaplayınız, ve

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_a \langle \phi | u_a \rangle \langle u_a | \psi \rangle$$

yazılabileceğini gösteriniz. Buna göre, bir tam küme üzerinden,

$$\sum_a |u_a\rangle \langle u_a|$$

toplamı birim işlemciye eşdeğerdir.

7. A hermitiense, $\langle A^2 \rangle \geq 0$ olduğunu gösteriniz.

8.
$$H^4 = 1$$

özeliğini taşıyan H hermitien işlemcisini gözönüne alınız. H işlemcisinin özdeğerleri

nedir? Eğer H hermitien olmakla sınırlanmamışsa özdeğerler ne olur?

9. Eğer bir işlemci,

$$UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = 1$$

özeliğini taşıyorsa,bu işlemciye **üniter** denir. $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ ise, $\langle U\psi|U\psi\rangle = 1$ olacağını gösteriniz.

10. Eğer A hermitiense, e^{iA} 'nın **üniter** olduğunu gösteriniz.

11. Eğer $\{u_a\}$,

$$\langle u_a \mid u_b\rangle = \delta_{ab}$$

biçiminde dikeyboylu bir tam küme kuruyorsa,U birimsel olmak üzere

$$|v_a\rangle = U\,|u_a\rangle$$

kümesinin de dikeyboylu olduğunu gösteriniz.(Bunların anlamı,"temel" durumlarının bir kümesine etkiyen birimsel bir işlemcinin,"temel" durumlarının bir başka kümesini vermesidir.)

12. Sonsuz bir kutu içindeki,n kuantum sayısı ile belirtilen bir parçacık için (6-54)'te verilen Δx ve Δp tanımlarını kullanarak,

$$\Delta p \;\; \Delta x \sim \hbar n$$

olduğunu gösteriniz.

13. $A^{\dagger}$ hermitien eşlenik işlemcisi (6-27) ile tanımlanmışsa,

$$\int dx\,[A\,\phi(x)]^{*}\,\psi(x) = \int dx\;\phi^{*}(x)\;\; A^{\dagger}\,\psi(x)$$

olacağını gösteriniz.(<u>İpucu :</u> Bkz. sayfa 115'deki dipnot 1.)

14.

(a) $$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m(\,\omega_1^2\,x^2 + \omega_2 x + \epsilon\,)$$

(b) $$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\,\omega^2 x^2 - \frac{A}{x^2}$$

Hamiltonienleri verildiğine göre, $\langle x\rangle$ ve $\langle p\rangle$ 'nin zaman bağlılığını betimleyen denklemleri elde etmek için, p momentumu ve x konumu arasındaki değişme bağıntılarını kullanınız.İlk denklemler kümesini çözünüz [(a) Hamiltonien'i için] .

Kaynaklar

Dalga mekaniğinin genel yapısı kuantum mekaniği kitaplarının tümünde tartışılmıştır. Daha çok giriş niteliğindeki kitaplar arasında, örneğin şunlara bakınız:

D.Bohm, Quantum Theory, Prentice Hall, Inc., 1951.

R.H.Dicke and J.P.Wittke, Introduction to Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Co., Inc., 1960.

J.L.Powell and B.Crasemann, Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Co., Inc., 1961.

E.Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley and Sons, Inc. (1970), daha ileri ders kitapları arasındadır.

Bölüm 7

Kuantum Mekaniğinde İşlemci Yöntemleri

Dalga mekaniğinin genel yapısının tartışılmasında,gözlenebilirleri gösteren işlemcilere ve onların özfonksiyonlarına eşit ağırlık verilmişti.Özfonksiyonlar bir bakıma N boyutlu vektör uzayındaki birim vektörlerin dikeyboylu bir temeline benzer olarak betimlenmişti,—kuşkusuz bu durum onların önemini azaltır.— Bu yüzden Bölüm 5'deki fiziksel problemlerle ilgili tartışmamızda,özfonksiyonlar işlemcilerden daha önemli bir rol oynuyormuş gibi görünüyordu.Bu bölümde,basit bir örnek üzerinde şunları göstereceğiz: (a) Yalnızca işlemcileri kullanarak özdeğer spektrumunu bulacak kadar ileri gidebiliriz,ve (b) Özfonksiyonların bir temel olarak betimlenmesini biraz daha soyutlaştırabiliriz.Bunlardan ikincisi,şimdiye kadar yalnızca x veya p'ye bağlı olan fonksiyonları incelediğimiz için önemlidir.İlerde, x-uzayı ile doğrudan hiçbir bağıntısı olmayan gözlenebilirlerin bulunduğunu,ve bunlar için çok daha soyut bir <u>özdurum</u> kavramının geliştirilmesinin gerektiğini göreceğiz.Bu söylediklerimiz,örnek olarak seçtiğimiz <u>harmonik salınan probleminin</u> çözümünü yaparken biraz daha açıklık kazanacaktır[1].

Harmonik salınganın Hamiltonien'i,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \qquad (7\text{-}1)$$

biçimindedir,burada x ve p işlemcilerdir.p'nin $(\hbar/i)(d/dx)$ ile gösterilmesi üzerinde çok durmuyoruz.Bölüm 3'de elde ettiğimiz açık gösterimin tek yararı,

$$[p,x] = \frac{\hbar}{i} \qquad (7\text{-}2)$$

[1] İster diferensiyel denklemler ister işlemci biçiminde olsun,tam olarak çözülebilen problemlerin sayısı azdır.Bu örnek en basitidir,ve böylece bizim amacımız için en uygun olanıdır.

temel değişme bağıntısıdır.Klasik olarak Hamiltonien,

$$H = \omega \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}\, x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}\, x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right)$$

olarak çarpanlara ayrılabilir,fakat p ve x sıradeğiştirmediğinden,

$$\omega \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}\, x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}\, x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right)$$

$$= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 - \frac{i\omega}{2}(px - xp)$$

$$= H - \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (7\text{-}3)$$

buluruz.Şimdi,

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

$$A^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}\, x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \qquad (7\text{-}4)$$

yazımını getirelim.x ve p hermitien işlemciler olduğundan,ikinci işlemcinin haç ile gösterilmesi uygundur.Bu iki işlemci sıradeğiştirmez:

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

$$= \hbar \qquad (7\text{-}5)$$

olduğunu hesaplayabiliriz;ve Hamiltonien'i yeni işlemciler türünden,

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega + \omega A^\dagger A \qquad (7\text{-}6)$$

olarak yeniden yazabiliriz.

Hamiltonien'in basitliği ,A ve $A^\dagger$ 'ın H ile değişme bağıntılarının basitliğinde de kendini gösterir.Bu bağıntılar için[2],

$$[H, A] = [\omega A^\dagger A, A] = \omega [A^\dagger, A] A$$

$$= -\hbar\omega A \qquad (7\text{-}7)$$

ve

$$[H, A^\dagger] = [\omega A^\dagger A, A^\dagger] = \omega A^\dagger [A, A^\dagger]$$

$$= \hbar\omega A^\dagger \qquad (7\text{-}8)$$

[2] Sıradeğiştiriciler için,Ek B'de verilen kuralları sık sık kullanacağız:

$$[A+B, C] = [A, C] + [B, C] \quad \text{ve} \quad [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

Kuşkusuz,işlemcilerin sıralarının karıştırılmaması çok önemlidir.

elde ederiz.Hermitien eşlenik işlemcilerin bulunduğu değişme bağıntılarını türetirken,

$$[A,B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger] \tag{7-9}$$

olduğunu anımsamak yararlı bir teknik oyundur.Özel olarak,

$$[H,A]^\dagger = [A^\dagger, H] = -[H,A^\dagger]$$
$$= (-\hbar\omega A)^\dagger \tag{7-10}$$

dır,ve (7-8) buradan da çıkar.

Şimdi,

$$Hu_E = Eu_E \tag{7-11}$$

özdeğer denklemini yazalım.Geçen bölümlerde böyle bir denklem yazmamız şu anlama geliyordu: H'de d/dx gibi diferansiyel işlemciler bulunuyordu ve u_E x'in bir fonksiyonuydu.Şimdi x'in tüm karesi tümlenebilen fonksiyonları ile tanımlanan uzayı düşünelim; işlemcilerimiz özel olarak bu uzaya bağlı olsunlar.(7-11)'in içermeleri bu uzay ve bu işlemciler için uygundur,fakat şimdiki yaptıklarımıza uygun değildir; çünkü şimdi işlemcilerin neye etki ettiğine pek bakmıyoruz.Artık işlemcilerin soyut bir vektör uzayında tanımlandıklarını varsayacağız,ve bu soyut vektör uzayını daha sonra x'in fonksiyonlarının uzayına bağlayacağız.Bu soyutlamayı özdeğer denklemlerinin betimlenmesinde kullandığımız dile çevirmek için,özfonksiyonlar yerine <u>özdurumlardan</u> söz edeceğiz,ve dalga fonksiyonları veya dalga paketleri dediğimiz şeylere <u>durum vektörleri</u> diyeceğiz.Böylece,gözlenebilirlerin sıradeğiştiren en büyük kümesinin $u_{ab\ldots m}(x)$ özfonksiyonu yerine,bu sıradeğiştiren en büyük kümenin $u_{ab\ldots m}$ özvektörü veya özdurumu alınabilir; a,b,...,m indisleri A,B,...,M gözlenebilirlerinin özdeğerlerini verir,ve açıkca görüldüğü gibi,bu betimleme en fazla bilgiyi kapsar.

Şimdi (7-7)'yi alalım,ve u_E 'ye etki ettirelim:

$$HAu_E - AHu_E = -\hbar\omega Au_E$$

(7-11)'in yardımıyla,buradan

$$HAu_E = (E - \hbar\omega)\, Au_E \tag{7-12}$$

bulunur.Bu denkleme göre,u_E,H'nin E özdeğerli bir özdurumuysa,Au_E de H'nin bir özdurumudur,fakat özdeğer $E - \hbar\omega$ 'dır; burada enerji,bir

$$\epsilon = \hbar\omega \tag{7-13}$$

birimi kadar azalmıştır.Bu yüzden,

$$Au_E = c(E)\, u_{E-\epsilon} \tag{7-14}$$

yazabiliriz.Buradaki c(E) sabiti gereklidir,çünkü u_E 'yi 1'e boylandırılmış olsa bile,

Au_E'nin 1'e boylandırılmış olması gerekmez.x bağlılığından kurtulmaya önem verdiğimizden,boylandırma koşulunu her zaman,

$$\int u_E^*(x)\, u_E(x)\, dx = 1$$

olarak yazıyorduk; şimdi,(6-18)'de tanımlanan yazımla,bu koşulu

$$\langle u_E \mid u_E \rangle = 1 \tag{7-15}$$

olarak yazacağız.Tüm özdurumları her zaman 1'e boylandıracağız,ve sürekli spektrumun özdurumları için,

$$\langle u_E \mid u_{E'} \rangle = \begin{cases} \delta(E - E') \\ \text{veya } \delta(p - p') \end{cases} \tag{7-16}$$

yazacağız.

Şimdi (7-7)'yi $u_{E-\epsilon}$ durumuna uygularsak,tam olarak aynı yoldan,$Au_{E-\epsilon}$'un veya eşdeğer olarak A^2u_E'nin $E-2\epsilon$ enerjili bir durum verdiğini buluruz.Böylece,A işlemcisini herhangi bir u_E'ye ardarda uygulayarak,enerjileri gitgide azalan durumlar elde edebiliriz.Buna uygun olarak,A'ya <u>azaltma işlemcisi</u> denir.A'nın kaç kez uygulanabileceğinin bir sınırı vardır; çünkü (7-1)'in bir sonucu olarak,H'nin beklenen değeri her zaman pozitif olmalıdır.İsteksel bir dalga fonksiyonu için,

$$\langle \psi | p^2 | \psi \rangle = \int \psi^*(x)\, p^2\, \psi(x)\, dx = \int [p^\dagger \psi(x)]^*\ (p\psi)\, dx$$

$$= \int [p\,\psi(x)]^*\ [p\,\psi(x)]\, dx$$

$$= \hbar^2 \int |\, d\,\psi(x)/dx\,|^2\, dx \geq 0 \tag{7-17}$$

olur,bunu koordinatlardan bağımsız olan yazımla,

$$\langle \psi | p^2 | \psi \rangle = \langle p^\dagger \psi | p\psi \rangle$$

$$= \langle p\psi | p\psi \rangle \geq 0 \tag{7-18}$$

olarak yeniden yazabiliriz.x de hermitien bir işlemci olduğundan,benzer olarak

$$\langle \psi | x^2 | \psi \rangle = \langle x^\dagger \psi \mid x\psi \rangle$$

$$= \langle x\psi \mid x\psi \rangle \geq 0 \tag{7-19}$$

yazabiliriz; ve tüm vektörlerin kendileriyle skaler çarpımları,bu vektörlerin uzunluklarının karesini verir,ve bu pozitif bir sayıdır.Böylece bizim azaltma işlemimiz bir yerde son bulmalıdır,ve burada bir <u>taban durumu</u> bulunur.Azaltmanın sona erdiği bu durumu u_o ile göstereceğiz.Bu durum için,

$$Au_o = 0 \tag{7-20}$$

olmalıdır.Taban durumunun enerjisi,

$$Hu_o = (\omega A^\dagger A + \frac{1}{2}\hbar\omega)\, u_o = \frac{1}{2}\hbar\omega\, u_o \qquad (7\text{-}21)$$

dir.

(7-8)'i taban durumuna uygulayalım:

$$HA^\dagger u_o - A^\dagger H u_o = \hbar\omega A^\dagger u_o$$

olduğundan,

$$HA^\dagger u_o = (\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega)\, A^\dagger u_o \qquad (7\text{-}22)$$

elde edilir.Enerji bir $\hbar\omega$ birimi kadar artmıştır ; ve $A^\dagger$, yerinde bir deyişle bir artırma işlemcisi olarak betimlenir.Yazımımızı biraz değiştireceğiz; ve bir durumu,taban durumu enerjisi olan $\frac{1}{2}\hbar\omega$ 'ya eklenen $\epsilon = \hbar\omega$ enerji birimlerinin sayısı ile etiketleyeceğiz.Böylece,

$$A^\dagger u_o = c u_1 \qquad (7\text{-}23)$$

yazarız.(7-12) denklemi,

$$Au_1 = c' u_o \qquad (7\text{-}24)$$

olduğunu söyler, Yani $A^\dagger$ uygulandığı durumları birer yukarı A ise birer aşağı kaydırır. Tüm durumlar,$A^\dagger$ 'ın u_o 'a ardarda uygulanmasıyla elde edilebilir.Bunun bir sonucu olarak,enerji spektrumu

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad n = 0,1,2,\ldots \qquad (7\text{-}25)$$

bağıntısıyla verilir.Enerji spektrumunun elde edilmesini,hiçbir diferansiyel denklem çözmeden başardık.Ayrıca özvektörler için de,

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{A^\dagger}{\sqrt{\hbar}}\right)^n u_o \qquad (7\text{-}26)$$

genel gösterimi vardır,burada doğru boylandırma sabitini kullandık[3]. Bu gösterim yardımıyla,farklı enerjilere karşılık gelen özdurumların dikliğini kanıtlayabiliriz.Bunun için,

$$\langle u_o |\ A^m (A^\dagger)^n\ |\ u_o \rangle$$

biçimindeki bir deyimin bir değerlendirilmesi yapılmalıdır; bunun için A'ların sıraları $A^\dagger$ 'larla değiştirilerek,A'lar sağa geçirilir; sonunda A'nın u 'ya etkimesi ile sıfır

[3] Cebirsel işlemlere alışkın okur için bunun türetiliş yolunu kısaca betimleyelim.$(A^\dagger)^n u_o = c_n u_n$ denirse, $|c_n|^2 \langle u_n | u_n \rangle = \langle (A^\dagger)^n u_o |\ (A^\dagger)^n u_o \rangle$ $= \langle u_o |\ A^n (A^\dagger)^n u_o \rangle$ buluruz.
Şimdi (7-5)'i kullanarak,$A^n(A^\dagger)^n = A^{n-1}\left[n\hbar(A^\dagger)^{n-1} + (A^\dagger)^n A\right]$ bağıntısını türetebiliriz.Bunu $\langle u_o | \ldots . | u_o \rangle$ arasına koyduğumuz zaman,sağ yandaki ikinci terim sıfır verir ve $|c_n|^2 = n\hbar\,|c_{n-1}|^2$ indirgeme bağıntısını elde ederiz.
$\therefore |6_n|^2 = n!\ (\hbar)^n\ |c_o|^2 = n!\ (\hbar)^n$.Genelliği bozmadan,$c_n$'yi gerçel seçebiliriz.

sonucu elde edilir.Örneğin,(7-5)'i kullanarak,

$$A^2(A^\dagger)^3 = A(A^\dagger A + \hbar)(A^\dagger)^2 = \hbar A(A^\dagger)^2$$
$$+AA^\dagger(A^\dagger A + \hbar)A^\dagger = 3\hbar A(A^\dagger)^2 + A(A^\dagger)^3 A$$

olduğunu görürüz.$Au_0 = 0$ olduğundan u_0 'lar arasına alınmış olan son terim sıfır verir; ve ilk terim aynı yolla işlenebilir,ve sonunda $6\hbar^2 A^\dagger$ verir.Böylece,

$$\langle u_0 | A^\dagger u_0 \rangle = \langle Au_0 | u_0 \rangle = 0 \qquad (7\text{-}27)$$

buluruz ve $\langle u_2 | u_3 \rangle = 0$ olduğunu kanıtlamış oluruz.Bu işlem genel durum için de yapılırsa,

$$\langle u_m | u_n \rangle = 0 \quad m \neq n \qquad (7\text{-}28)$$

olduğunu da kanıtlayabiliriz.

İsteksel bir durum vektörünün H'nın özdurumlarına açılabileceğini söyleyen deyim,şimdi koordinattan bağımsız anlatımda

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n u_n \qquad (7\text{-}29)$$

olur; ve $\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn}$ olduğundan,

$$C_m = \langle u_m | \psi \rangle \qquad (7\text{-}30)$$

elde ederiz.

Bu bölümün konusundan biraz ayrılarak,artırma ve azaltma işlemcilerinin harmonik salıngan denklemini çözmede nasıl yararlı olduğunu göstereceğiz.x-uzayında,(7-20) denklemi

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}\, x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right) u_0(x) = 0 \qquad (7\text{-}31)$$

verir.p işlemcisinin x gösterimi olan $p = (\hbar/i)(d/dx)$ kullanılarak,

$$\left(m\omega x + \hbar \frac{d}{dx} \right) u_0(x) = 0 \qquad (7\text{-}32)$$

bulunur.Bu basit bir diferansiyel denklemdir, ve çözümü

$$u_0(x) = C e^{-m\omega x^2/2\hbar} \qquad (7\text{-}33)$$

dir.$u_0(x)$'in bire boylandırılması gerekir,ve C sabiti buradan belirlenir:

$$1 = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-m\omega x^2/\hbar}$$
$$= C^2 \left(\frac{\hbar\pi}{m\omega} \right)^{1/2}$$

$$C = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \tag{7-34}$$

bulunur.Ayrıntılı hesabı yaparak,uyarılmış durumları da elde edebiliriz:

$$u_n(x) = \frac{\hbar^{-n/2}}{\sqrt{n!}} (A^\dagger)^n u_o(x)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\, \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \tag{7-35}$$

Gerçekten,diferansiyel denklemin genel çözümünün yazılmasında en kısa yol budur.

Yalnızca işlemci yöntemlerini kullanarak,harmonik salınganının özdeğerlerini çözebilmeyi başardık.Bu problemde,özdurumları belirlemek için yalnızca enerjinin, yani

$$E = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

bağıntısında görülen $n = 0,1,2,\ldots$ tam sayılarının bilinmesi yeter.Böylece sıradeğiştiren gözlenebilirlerin tam kümesi yalnız H'den oluşur[4],ve u_n özdurumundaki n indisi özdurumun tüm içeriğini betimler.Bunun için x-uzayındaki $u_n(x)$ özfonksiyonunun ayrıcalıklı rolünden vazgeçmek istiyorum.Yalnız,şu durum bunun dışında kalır: Bu da,$u_n(x)$'in ek bir bilgi olarak,parçacığı x'de bulmanın olasılık yoğunluğunu($|u_n(x)|^2$ olarak)vermesidir.Acaba bu ek içerik,x-uzayı dalga fonksiyonunu ayırır mı? Örneğin,Bölüm 3'teki $\phi(p)$ momentum uzayı dalga fonksiyonunun rolünü anımsayalım.x-uzayının Fourier dönüşmüşü olarak bu fonksiyonun ayrıcalıklı bir rolü var gibiydi; fakat daha sonra,örneğin (4-59)'da,$\phi(p)$'nin "yalnızca" bir açılım katsayısı olduğunu açıklamıştık: $\phi(p)$,isteksel bir $\psi(x)$'in momentum işlemcisinin özdurumlarına açılımındaki katsayıydı; bu nedenle de mutlak karesi,o durum için p momentumunun bulunma olasılığını veriyordu.Benzer olarak,$|\psi(x)|^2$ sistemin yerini x'de bulmanın olasılık yoğunluğudur.Bunu da şöyle yorumlayabiliriz: $\psi(x)$,isteksel bir soyut durumun x_{op} yer işlemcisinin özdurumlarına açılımındaki katsayıdır.Özdeğer denklemini soyut olarak,

$$x_{op}\,\phi_x = x\phi_x \tag{7-36}$$

biçiminde yazarız.u_n'deki n gibi,burada da x'i bir indis olarak alıyoruz ve böylece özdurumu etiketlemiş oluyoruz.Hermitien bir işlemci olan x_{op} 'nin spektrumu süreklidir,ve bunun sonucu olarak açılım teoremi,(7-29)'daki açılımın yerine

[4] n indisi pariteyi de kapsar.n'si çift olan durumlar pozitif pariteli ve tek olanlar negatif pariteli durumlardır.Bu,yansımalar altında A ve $A^\dagger$ 'ın tek olmalarının sonucudur.

$$\psi = \int dx\, C(x)\, \phi_x \tag{7-37}$$

verir.(7-36)'da tanımlanan özdurumlar dikeyboylu bir küme oluşturduğundan,

$$\langle \phi_x \mid \phi_{x'} \rangle = \delta(x - x') \tag{7-38}$$

dır,buradan da

$$C(x) = \langle \phi_x \mid \psi \rangle \tag{7-39}$$

sonucunu çıkarabiliriz.Bu nicelik bir parçacığı x'te bulmanın olasılık genliğidir —daha kesin bir deyişle,x gözlenebilirinin ölçümü, $|C(x)|^2$ olasılığı ile x öndeğerini verecektir.x-uzayı dalga fonksiyonunun hiçbir ayrıcalıklı rolü olmadığını göstermek için yapmamız gerekem,yazım değiştirerek,(7-37)'yi

$$\psi = \int dx\, \psi(x)\, \phi_x \tag{7-40}$$

biçiminde yeniden yazmaktır.Bu yazımı yalnızca,uygun olduğu için kullanırız.Temel ilkeler,soyut bir uzaydaki işlemcilerle,onların özvektörleriyle ve özdeğerleriyle ilgilidir,ve geriye kalan bir gösterim sorunudur.Kuşkusuz,gösterim konusu bütün bunların fiziği olan sayıları elde etmek için çok önemlidir.Bu nedenle biz kuramın biçimsel yapısı üzerinde fazlaca durmayıp,dalga fonksiyonlarını kullanarak ilerleyeceğiz. İlerde,elektronların ve öbür parçacıkların iç spini gibi klasik benzeri olmayan işlemcilerle çalışacağız ve başka gösterimler kullanma özgürlüğünü deneyeceğiz.

Bu bölümü,gösterimden bağımsız olan yöntemimizle,bir sistemin zaman içindeki gelişimini tartışarak bitirelim.Artık,zamana bağlı

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = H\,\psi(t) \tag{7-41}$$

Schrödinger denklemi,soyut bir uzaydaki bir işlemci denklemi olur. $\psi(t)$ bir vektördür ve zamana bağlı olan bir yönü gösterir.Denklem kolayca çözülebilir.Çözüm,

$$\psi(t) = e^{-iHt/\hbar}\,\psi(0) \tag{7-42}$$

olur,burada $\psi(0)$, t = 0 anındaki vektördür ve $e^{-iHt/\hbar}$ işlemcisi,

$$e^{-iHt/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-iHt/\hbar)^n}{n!} \tag{7-43}$$

ile tanımlanmıştır.(7-42) çözümü,zamana açık olarak bağlı olmayan bir A işlemcisinin beklenen değerinin zamanla nasıl değiştiğini betimlememize izin verir:

$$\langle A \rangle_t = \langle \psi(t) \mid A\, \psi(t) \rangle$$

$$= \langle e^{-iHt/\hbar}\psi(0) \mid A\, e^{-iHt/\hbar}\psi(0)\rangle$$

$$= \langle \psi(0) \mid e^{iHt/\hbar} A\, e^{-iHt/\hbar}\psi(0)\rangle$$

$$= \langle \psi(0) \mid A(t)\, \psi(0)\rangle$$

$$= \langle A(t)\rangle_0 \qquad (7\text{-}44)$$

Bu işlemler sırasında,

$$(e^{-iHt/\hbar})^\dagger = e^{iH^\dagger t/\hbar} = e^{iHt/\hbar} \qquad (7\text{-}45)$$

bağıntısını kullandık ve

$$A(t) = e^{iHt/\hbar} A\, e^{-iHt/\hbar} \qquad (7\text{-}46)$$

tanımını yaptık.(7-44)'e göre,zamandan bağımsız bir A işlemcisinin (7-42)'deki gibi zamanla değişen bir durumdaki beklenen değeri,zamanla değişen bir A(t) işlemcisinin [(7-46)'da verilen] zamandan bağımsız $\psi(0)$ durumundaki beklenen değeri olarak yazılabilir.Bu kuantum mekaniğinin biçimsel tartışması açısından çok yararlıdır.Çünkü soyut vektör uzayında dikeyboylu özvektörlerin bir temelini bir kez kurup,temel vektörlerinin zamanla nasıl değiştiğine bakmamak uygundur.Böyle yaptığımız zaman Heisenberg görünüşünde çalışmış oluyoruz.A'yı zamandan bağımsız almak Schrödinger görünüşünde çalışmak demektir.Hangi görünüşü kullanırsak kullanalım sonuç aynıdır: Bu,sabit eksenlere göre dönen bir cismi betimlemek,ya da dönen bir koordinat sisteminde duran cismi betimlemek arasında bir seçim yapmak gibidir.Uygun olan seçilir.Heisenberg görünüşünde çalışıyorsak,durum vektörleri sabit olur ve bunlara bakmamız gerekmez.Bir gözlenebilirin zamanla nasıl değiştiğini (7-46) ile belirlenir,ve bu

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{iH}{\hbar} e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} - \frac{i}{\hbar} e^{iHt/\hbar} AH e^{-iHt/\hbar}$$

$$= \frac{i}{\hbar} HA(t) - \frac{i}{\hbar} A(t)\, H$$

$$= \frac{i}{\hbar} [H, A(t)] \qquad (7\text{-}47)$$

verir ve bu biçim (6-59)'un çok benzer.(6-59),beklenen değerler için bir denklemdi,fakat biçimi beklenen değerin alındığı durumdan bağımsızdı; bu yüzden işlemci özeliklerini yansıtmalıydı.Şimdi ise,(7-47) böyle olduğunu açıkça göstermektedir.

Harmonik salınıcı için,

$$H = \omega A^\dagger A + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

dir ve H bir hareket sabiti olduğundan,

$$H = \omega A^{\dagger}(t) A(t) + \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{7-48}$$

yazabiliriz.(7-46)'yı kullanarak,

$$[A(t), A^{\dagger}(t)] = \hbar \tag{7-49}$$

olduğunu gösterebiliriz.Bu nedenle,(7-7) ve (7-8)'in biçimleri gene aynıdır,ve

$$\frac{d}{dt} A(t) = -i\omega A(t)$$

$$\frac{d}{dt} A^{\dagger}(t) = i\omega A^{\dagger}(t) \tag{7-50}$$

elde ederiz.Böylece,(7-50) denklemini çözerek A(t) ve $A^{\dagger}(t)$'nin zamana bağlılığı için

$$A(t) = e^{-i\omega t} A(0)$$

$$A^{\dagger}(t) = e^{i\omega t} A^{\dagger}(0) \tag{7-51}$$

sonuçlarını buluruz.(7-4) bağıntısını kullanarak,

$$p(t) = p(0)\cos\omega t - m\omega x(0)\sin\omega t$$

$$x(t) = x(0)\cos\omega t + \frac{p(0)}{m\omega}\sin\omega t \tag{7-52}$$

olduğunu göstermek kolaydır; bu bağıntılar x(t) ve p(t) işlemcilerini x(0) ve p(0) işlemcileri türünden verir.

Problemler

1. (7-5) değişme bağıntısını ve u_n durumunun (7-26)'da verilen tanımını kullanarak,

$$Au_n = \sqrt{n\hbar}\, u_{n-1}$$

olduğunu kanıtlayınız.

(İpucu: Tümevarım yöntemini kullanınız.Yani,bu bağıntının,n için doğruysa n+1 için de doğru olduğunu gösteriniz,ve bağıntıyı doğrudan doğruya n = 1 için kurunuz.)

2. Yukardaki bağıntıyı kullanarak,$f(A^{\dagger})$, $A^{\dagger}$ 'ın herhangi bir çokterimlisi ise,

$$Af(A^{\dagger})\, u_0 = \hbar \frac{df(A^{\dagger})}{dA^{\dagger}} u_0$$

olduğunu gösteriniz.A'yı,

$$A = \hbar \frac{d}{d A^{\dagger}}$$

biçiminde yazmanın (7-5) değişme bağıntısıyla tutarlı olduğuna,ve bunun

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

gösteriminin tam benzeri olduğuna dikkat ediniz.

3. $\langle u_n|x|u_m\rangle$ 'yi hesaplayınız,ve bunun $n = m \pm 1$ dışında sıfır olacağını gösteriniz.

(İpucu: $\langle u_n|A|u_m\rangle$ 'yi hesaplamak yeterlidir,çünkü $\langle u_n|A^{\dagger}|u_m\rangle = \langle A u_n | u_m\rangle = \langle u_m|A|u_n\rangle^{*}$ 'dır.Ve Problem 1'deki sonucu kullanınız.)

4. Problem 2'nin sonuçlarını kullanarak,

$$e^{\lambda A} f(A^{\dagger}) u_o = f(A^{\dagger} + \lambda\hbar) u_o$$

olduğunu gösteriniz.

(İpucu: Bu problemi çözmek için üstel fonksiyonu seriye açınız,ve

$$f(x + a) = \sum \frac{a^n}{n!} f^{(n)}(x)$$

$$f^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n} f(x)$$

olduğunu kullanınız.)

5. Problem 4'ün sonuçlarını kullanarak,

$$e^{\lambda A} f(A^{\dagger}) e^{-\lambda A} = f(A^{\dagger} + \lambda\hbar)$$

işlemci bağıntısını kurunuz.Bir işlemci bağıntısı,istemsel bir duruma etkidiğinde geçerli olmalıdır,buna dikkat ediniz.İstemsel bir durum,$g(A^{\dagger})\, u_o$.biçiminde olsun. Öyleyse,

$$e^{\lambda A} f(A^{\dagger}) e^{-\lambda A} g(A^{\dagger})\, u_o = f(A^{\dagger} + \lambda\hbar)\, g(A^{\dagger})\, u_o$$

olduğunu kanıtlamak gerekir.Bu,

$$e^{\lambda A} A^{\dagger} e^{-\lambda A} = A^{\dagger} + \lambda [A, A^{\dagger}] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, A^{\dagger}]] + \cdots$$

genel bağıntısından da kanıtlanabilir.

6. Yukarıdaki bağıntıyı kullanarak,

$$e^{aA + bA^{\dagger}} = e^{aA}\, e^{bA^{\dagger}}\, e^{-(1/2)ab\hbar}$$

olduğunu kanıtlayınız.İşlem şöyledir:

$$e^{\lambda(aA + bA^{\dagger})} \equiv e^{\lambda aA} F(\lambda)$$

olsun. λ'ya göre türev,

$$(aA + bA^{\dagger}) e^{\lambda(aA + bA^{\dagger})} = aA\, e^{\lambda aA} F(\lambda) + e^{\lambda aA} \frac{dF}{d\lambda}$$

verir,ve bu

$$(aA+bA^{\dagger})e^{\lambda aA}F(\lambda) = aAe^{\lambda aA}F(\lambda) + e^{\lambda aA}\frac{dF}{d\lambda}$$

demektir.Problem 5'i kullanarak,

$$\frac{dF}{d\lambda} = (bA^{\dagger} - \lambda ab\hbar)F(\lambda)$$

olduğunu,ve bunun sonucu olarak,

$$F(\lambda) = e^{\lambda bA^{\dagger}}e^{-(1/2)\lambda^2 ab\hbar}$$

olduğunu gösteriniz.

7. Problem 5'deki işlemi kullanarak,

$$e^{\lambda A^{\dagger}}f(A)e^{-\lambda A^{\dagger}} = f(A-\lambda\hbar)$$

olduğunu,ve buradan Problem 6'da verilen yöntemi kullanarak,

$$e^{aA+bA^{\dagger}} = e^{bA^{\dagger}}e^{aA}e^{(1/2)ab\hbar}$$

olduğunu gösteriniz.

8. Yukardaki sonucu kullanarak,

$$e^{ikx} = e^{(ik/\sqrt{2m\omega})A^{\dagger}}e^{(ik/\sqrt{2m\omega})A}e^{-(\hbar k^2/4m\omega)}$$

olduğunu gösteriniz.$x = (1/\sqrt{2m\omega})(A+A^{\dagger})$ olduğuna dikkat ediniz.Bunu kullanarak,

$$\langle u_0|e^{ikx}|u_0\rangle$$

ifadesini hesaplayınız.

9. Yukarda elde edilen sonucun,

$$\int dx\, u_0^*(x)\, e^{ikx}\, u_0(x)$$

den elde edilen ile aynı olduğunu gösteriniz.

10.

$$H = \frac{p^2(t)}{2m} + mgx(t)$$

verildiğine göre,genel işlemci hareket denklemi (7-47)'yi kullanarak,buradaki $x(t)$ işlemcisinin zamana bağlılığını çözünüz.

11. Bir dış elektrik alanı içindeki bir boyutlu harmonik salınganın,

$$H = \frac{p^2(t)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2(t) - e\mathcal{E}x(t)$$

Hamiltoniem'ini gözönüne alınız.

$$[p(t),x(t)] = \frac{\hbar}{i}$$

değişme bağıntısını ve (7-47) denklemini kullanarak $x(t)$ ve $p(t)$ işlemcileri için hareket denklemini bulunuz.Hareket denkleminin,klasik hareket denklemi ile aynı

olduğunu gösteriniz.p(t) ve x(t)'yi x(0) ve p(0) türünden çözünüz.

$$[x(t_1),x(t_2)] \neq 0 \qquad t_1 \neq t_2 \quad \text{için}$$

olduğunu gösteriniz.Bu,aynı anda sıradeğiştiren işlemcilerin,farklı anlarda sıradeğiştirmesinin gerekmediğini gösterir.

12. (7-35) denklemini kullanarak n = 1,2,3 için özfonksiyonları elde ediniz.

Not: Binom serisi açılımında x ve d/dx'in sıralarını aynı tutmaya dikkat ediniz.

Kaynaklar

Bu bölümde tartışılan konular,kitabın sonunda verilen kaynak listesindeki kitapların hemen hemen tümünde işlenmiştir.Öğrencilerin bu kitaplardan bakmaçısına bakmaları öğütlenir,çünkü aynı temel konuların değişik görüş açılarından sunuluşunu görmek her zaman yararlıdır.

BÖLÜM 8

N-Parçacık Sistemleri

Tek parçacıkla ilgili tartışmamız,bir N-Parçacık sistemine de kolayca genelleştirilebilir.Bu N parçacık bir $\psi(x_1,x_2,\ldots,x_N)$ dalga fonksiyonu ile betimlenir; ve bu dalga fonksiyonu,

$$\int\cdots\int dx_1dx_2\ \ldots\ dx_N\ |\psi(x_1,x_2,\ldots,x_N)|^2 = 1 \qquad (8\text{-}1)$$

olarak boylandırılır. $|\psi(x_1,x_2,\ldots,x_N)|^2$'nin yorumu, $|\psi(x)|^2$'nin yorumunun bir genelleştirilmesidir; ve bu, 1. parçacığı x_1'de,2. parçacığı x_2'de, ...,N. parçacığı x_N'de bulmanın olasılık yoğunluğunu verir.Böyle bir dalga fonksiyonunun zaman içindeki gelişimi,

$$i\hbar\ \frac{\partial}{\partial t}\ \psi(x_1,\ldots,x_N;\ t) = H\ \psi(x_1,\ \ldots,x_N;t) \qquad (8\text{-}2)$$

diferansiyel denkleminin çözümüyle verilir.Burada Hamiltonien yine,

$$H = \sum_{i=1}^{N}\ \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_1,x_2,\ldots,x_N) \qquad (8\text{-}3)$$

klasik biçimine karşılık olarak,

$$H = -\hbar^2\left(\frac{1}{2m_1}\ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \ldots + \frac{1}{2m_N}\ \frac{\partial^2}{\partial x_N^2}\right) + \ldots$$

$$+ V(x_1,\ldots,x_N) \qquad (8\text{-}4)$$

biçiminde kurulmuştur.Tek parçacık gözlenebilirlerini betimleyen işlemciler,

$$[p_i,x_j] = \frac{\hbar}{i}\ \delta_{ij} \qquad (8\text{-}5)$$

bağıntısındaki gibi,farklı parçacıkları gösterdikleri zaman sıradeğiştiriyorlarsa, kuantum mekaniğinin geliştirilmiş olan önceki tüm anlatımı kolayca genelleştirilebilir.

Yerin çekim alanı ya da dışarıdan konulmuş elektrik veya magnetik alanlar gibi dış alanlar yoksa,o zaman potansiyel enerji yalnızca parçacıkların bağıl aralığına bağlı olur,ve

$$V = V(x_1-x_2, x_1-x_3, \ldots, x_{N-1}-x_N) \tag{8-6}$$

yazılabilir.Böyle olması da gerekir; çünkü,her nasılsa bir "başlangıç"ın bulunmasını gerektiren bir dış araç yoksa,bütün sistemin yerdeğiştirmesi sistemin hiçbir fiziksel özeliğini değiştirmemelidir.Başka bir deyimle,(8-6)'daki potansiyelin biçimi şu değişmezliğin bir sonucudur: Fiziksel bakımdan anlamlı olan tüm nicelikler,

$$x_i \rightarrow x_i + a \tag{8-7}$$

dönüşümü altında değişmezdir.(8-6)'nın çok önemli bir özel hali,

$$V = \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \tag{8-8}$$

olduğu iki-cisim kuvvetleri halidir.Toplama tüm i ve j indisleri üzerindendir; ve iki defa saymayı ve i = j 'nin sayılmasını önlemek için, $i > j$ koşulu ile yapılır.Aslında biz,atomlardaki elektronların betimlenmesinde, bilinen Coulomb potansiyeli ve elektron-elektron itmesi ile çalışacağız; ve burada çekirdek bir başlangıç sağlayacaktır.Bu halde potansiyel,

$$\sum_{i=1}^{N} V(x_i) + \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \tag{8-9}$$

ifadesinin üç-boyutlu bir genelleştirilmesi olacaktır.

Dış kuvvetler olmadığı zaman,klasik mekanikte toplam momentum korunumludur.Bu,

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1-x_2, x_1-x_3, \ldots, x_{N-1}-x_N) \tag{8-10}$$

hareket denklemlerinden çıkar; bu denklemlerin bir sonucu,

$$\frac{d}{dt} \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1-x_2, \ldots, x_{N-1}-x_N) = 0 \tag{8-11}$$

dır.Yukarıdaki denklemin sağ yanının sıfır olmasının nedeni, $\sum_i \partial / \partial x_i$ 'nin V'ye etkimesinden,V'nin her değişkeni için eşit ve zıt katkıların gelmesidir.Böylece,

$$P = \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} \tag{8-12}$$

bir hareket sabitidir.

Kuantum Mekaniğinde de aynı sonuç geçerlidir.Bunu,Hamiltonien'in (8-7) dönüşümü altındaki değişmezliğini kullanarak göstereceğiz.Değişmezlik,hem

$$Hu_E(x_1,x_2,\ldots,x_N) = Eu_E(x_1,x_2,\ldots,x_N) \tag{8-13}$$

bağıntısının,hem de

$$Hu_E(x_1+a,x_2+a,\ldots,x_N+a) = Eu_E(x_1+a,x_2+a,\ldots,x_N+a) \tag{8-14}$$

bağıntısının geçerli olması demektir. a'yı sonsuz küçük alalım,böylece $0(a^2)$ terimleri önemsiz sayılabilir.O zaman,

$$\begin{aligned} u(x_1+a,\ldots,x_N+a) &\simeq u(x_1,\ldots,x_N) + a\frac{\partial}{\partial x_1}u(x_1,\ldots,x_N) \\ &\quad + a\frac{\partial}{\partial x_2}u(x_1,\ldots,x_N) + \ldots \\ &\simeq u(x_1,\ldots,x_N) + a\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}u(x_1,\ldots,x_N) \end{aligned}$$

olur; ve böylece (8-13),(8-14)'den çıkarılarak,

$$\begin{aligned} aH\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)u_E(x_1,\ldots,x_N) &= aE\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)u_E(x_1,\ldots,x_N) \\ &= a\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)Eu_E(x_1,\ldots,x_N) \\ &= a\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)Hu_E(x_1,\ldots,x_N) \end{aligned} \tag{8-15}$$

bulunur.Şimdi de,

$$P = \frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i} \equiv \sum_{i=1}^{N}p_i \tag{8-16}$$

tanımını yaparsak,

$$(HP - PH)\,u_E(x_1,\ldots,x_N) = 0 \tag{8-17}$$

olduğunu göstermiş oluruz.$x_1,x_2,\ldots,x_N$'nin herhangi bir fonksiyonunun bütün $u_E(x_1,\ldots,x_N)$'ler türünden açılabilmesi anlamında,N-parçacığın enerji özdurumlarının da bir tam küme oluşturacağı öngörülebilir.Bu yüzden,yukarıdaki denklem tüm $\psi(x_1,\ldots,x_N)$'ler için geçerli olan,

$$[H,P]\,\psi(x_1,\ldots,x_N) = 0 \tag{8-18}$$

denklemine çevrilebilir;ve buradan,

$$[H,P] = 0 \tag{8-19}$$

işlemci bağıntısı bulunur.Bu bağıntı,sistemin toplam momentumu P'nin bir hareket sabiti olmasını içerir.Bu,gerçekten,uzayın doğası için söylenenlerin çok derin

bir sonucudur.Hiçbir başlangıcın bulunmadığını,ya da başka deyişle,belli bir uzaklık kadar yerdeğiştirme altında fizik yasalarının değişmez olduğunu söylemek, bir korunum yasasına götürür.Parçacık fiziğinde burada incelediğimiz biçimde potansiyeller yoktur;bununla birlikte,yukarda söylendiği gibi,değişmezlik ilkesi gene korunan bir toplam momentum verir.

Başlıca amacımız,hemen inceleyeceğimiz iki-parçacık sistemi olacaktır.Etkileşmeyen iki parçacığın basit bir Hamiltonien'i vardır:

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} \tag{8-20}$$

İki parçacık arasında hiçbir ilişki olmadığından,birini x_1'de ve öbürünü x_2'de bulma olasılığının,iki bağımsız olasılığın çarpımı olacağını bekleyebiliriz:

$$P(x_1,x_2) = P(x_1)\ P(x_2) \tag{8-21}$$

Böylece de,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) u(x_1,x_2) = Eu(x_1,x_2) \tag{8-22}$$

denkleminin çözümünün,

$$u(x_1,x_2) = \phi_1(x_1)\ \phi_2(x_2) \tag{8-23}$$

olarak ayrılabilmesini bekleriz.Bunu (8-22)'de yerine koyar,ve $u(x_1,x_2)$ ile bölersek,

$$\frac{-(\hbar^2/2m_1)(d^2\phi_1(x_1)/dx_1^2)}{\phi_1(x_1)} + \frac{-(\hbar^2/2m_2)(d^2\phi_2(x_2)/dx_2^2)}{\phi_2(x_2)} = E \tag{8-24}$$

elde ederiz.Denklemdeki iki terim farklı değişkenlere bağlıdır,ve bu nedenle ikisini de sırayla E_1 ve E_2 sabitlerine eşitleriz:

$$\begin{aligned} E &= E_1 + E_2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2\phi_1(x_1)}{dx_1^2} &= E_1\phi_1(x_1) \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{d^2\phi_2(x_2)}{dx_2^2} &= E_2\phi_2(x_2) \end{aligned} \tag{8-25}$$

Bu iki denklem kolayca çözülür,ve

$$u(x_1,x_2) = C\, e^{ik_1x_1 + ik_2x_2} \tag{8-26}$$

elde ederiz.Burada

$$k_1^2 = \frac{2m_1E_1}{\hbar^2} \qquad k_2^2 = \frac{2m_2E_2}{\hbar^2} \tag{8-27}$$

dir.

Şimdi,

$$x = x_1 - x_2$$

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \tag{8-28}$$

koordinatlarını kullanarak,çözümü yeniden yazalım; bunlar,parçacıklar arasındaki aralık ve kütle merkezi koordinatıdır.

$$k_1 x_1 + k_2 x_2 = \alpha(x_1 - x_2) + \beta \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

yazarsak,

$$\beta = k_1 + k_2 \equiv K$$

$$\alpha = \frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_1 + m_2} \equiv k$$

buluruz; bu yüzden çözümün biçimi,

$$u(x_1, x_2) = C\, e^{iKX}\, e^{ikx} \tag{8-29}$$

olur.Burada $K = k_1 + k_2$, toplam momentuma karşılık olan dalga sayısı ve k bağıl momentuma karşılık olan dalga sayısıdır.İlk çarpan kütle merkezinin hareketini gösterimler,ve ikinci çarpan "iç" dalga fonksiyonudur.Enerji

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \tag{8-30}$$

olarak yazılabilir.İlk terim,toplam momentumla ve m_1+m_2 kütlesi ile özgürce hareket eden iki parçacık sisteminin enerjisi,ve ikinci terim iç enerjidir.

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \tag{8-31}$$

ile tanımlanan μ indirgenmiş kütlesini getirirsek,o zaman $\hbar^2 k^2/2\mu$ terimi etkin olarak μ kütleli ve $\hbar k$ momentumlu özgür parçacığın enerjisidir.

(8-20)'deki Hamiltonien,yalnızca $x_1 - x_2$'ye bağlı olan bir potansiyel eklenerek değiştirildiğinde,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) u(x_1, x_2) + V(x_1 - x_2)u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2) \tag{8-32}$$

elde ederiz.

$$x = x_1 - x_2$$

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} = \frac{\mu}{m_2} x_1 + \frac{\mu}{m_1} x_2 \tag{8-33}$$

koordinatlarını kullanarak,

$$x_1 = X + \frac{\mu}{m_1} x$$

$$x_2 = X - \frac{\mu}{m_2} x \qquad (8\text{-}34)$$

buluruz.Biraz cebirle (8-32) denklemi,

$$\left(- \frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) u(x,X) = E u(x,X) \qquad (8\text{-}35)$$

biçimini alır.

$$u(x,X) = e^{iKX} \phi(x) \qquad (8\text{-}36)$$

yazarsak,$\phi(x)$ için

$$- \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\,\phi(x) = \epsilon\,\phi(x) \qquad (8\text{-}37)$$

denklemini buluruz; bu,bir bir-parçacık Schrödinger denklemidir.Bu denklemde kütle,indirgenmiş kütledir,ve enerji

$$\epsilon = E - \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} \qquad (8\text{-}38)$$

dir.Bölüm 9'da bu ayrılmayı biraz daha karışık bir yoldan elde edeceğiz.Şimdi özdeş parçacıklar problemine dönelim.

Elektronların ayırdedilemez olduğunu gösteren güçlü kanıtlar vardır.Böyle olmasaydı,bir atomun,örneğin helyumun spektrumu,deneyde "hangi çeşit" elektronların bulunduğuna bağlı olarak deneyden deneye değişirdi.Böyle bir değişim hiçbir zaman gözlenmemiştir.Benzer olarak,çekirdek spektrumları da her zaman aynıdır;bu da proton ve nötronların ayırdedilemez olduğunu gösterir.Yüksek enerji fiziği deneylerinin benzer kanıtları, çok güçlü olarak öbür parçacıkların da,örneğin pimezonların ayırdedilemez olduğunu göstermektedir.Bu tam olarak kuantum mekanik bir özeliktir: Klasik mekanikte(ilke olarak) tüm parçacıkların yörüngeleri izlenebilir; bu yüzden,gerçekten onlar her zaman ayırdedilebilirler.

Elektronların,spin denilen bir iç kuantum sayısı ile belirlendiklerini öğreneceğiz; ve böylece elektronların betimlenmesinde,durumlar spin etiketini de kapsamalıdır.Bunun ayırdedilemezliğin sonuçları üzerinde daha öte bir etkisi vardır,bunu daha sonra inceleyeceğiz.

Ayırdedilemez parçacıklar için,Hamiltonien parçacıkların koordinatlarına göre tam olarak bakışımlı olmalıdır.İki-parçacık sistemi için spin etiketlerine bağlılık yoksa,Hamiltonien

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1,x_2) \qquad (8\text{-}39)$$

olur,burada

$$V(x_1,x_2) = V(x_2,x_1) \tag{8-40}$$

dir.Bu bakışımı simgesel olarak,

$$H(1,2) = H(2,1) \tag{8-41}$$

biçiminde yazabiliriz.Hamiltonien parçacıkların spinine bağlı ise,o zaman "1","2" etiketleri spinleri de kapsamalıdır.Tüm parçacıkların özdeş olduğu bir N-Parçacık sisteminin bir dalga fonksiyonu $\psi(1,2,\ldots,N)$ ile gösterilecektir ve bu, σ_i'ler spin durumlarını betimlemek üzere,daha açık olan $\psi(x_1, \sigma_1;x_2, \sigma_2;\ldots;x_N, \sigma_N)$'nin yerini tutacaktır.

Bir iki-parçacık sistemi için enerji özdeğer denklemi,

$$H(1,2)\, u_E(1,2) = E u_E(1,2) \tag{8-42}$$

olur.Etiketleme değişiklik yapmadığından,bunu

$$H(2,1)\, u_E(2,1) = E u_E(2,1) \tag{8-43}$$

olarak da yazabiliriz.Ayrıca da, (8-41)'i kullanarak

$$H(1,2)\, u_E(2,1) = E u_E(2,1) \tag{8-44}$$

buluruz.Parite tartışmamızdaki biçimsel yaklaşımı izleyerek,P_{12} **değiştokuş işlemcisini** tanıtalım; bu işlemci bir duruma etkeyince,1 ve 2 parçacıklarının bütün koordinatlarını(uzay ve spin) değiştokuş eder.P_{12}'nin tanımı,

$$P_{12}\, \psi(1,2) = \psi(2,1) \tag{8-45}$$

demektir.Denk.(8-44) şöyle yazılabilir:

$$\begin{aligned} HP_{12}u_E(1,2) &= Eu_E(2,1) \\ &= EP_{12}u_E(1,2) \\ &= P_{12}Eu_E(1,2) \\ &= P_{12}Hu_E(1,2) \end{aligned} \tag{8-46}$$

Ve bu,alışıldığı gibi,

$$[H,P_{12}] = 0 \tag{8-47}$$

işlemci bağıntısını verir.Böylece parite gibi,P_{12} de bir hareket sabitidir.Ayrıca, parite gibi,

$$(P_{12})^2\, \psi(1,2) = \psi(1,2) \tag{8-48}$$

dir; bu yüzden,P_{12}'nin de özdeğerleri $\pm$ 1'dir.Özdurumlar,bakışımlı ve karşıbakışımlı birleştirimlerdir:

$$\psi^{(S)}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\, [\psi(1,2) + \psi(2,1)]$$

$$\psi^{(A)}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi(1,2) - \psi(2,1)\right] \qquad (8\text{-}49)$$

P_{12}'nin bir hareket sabiti olması olgusu,bir başlangıç anında bakışımlı olan bir durumun her zaman bakışımlı ve karşıbakışımlı olan bir durumun da her zaman karşıbakışımlı olacağını söyler.

İki parçacığın değiştokuşu altındaki bakışım veya karşıbakışım bu parçacıkların bir belirtgenidir,bu önemli bir doğa yasasıdır;ve bu,başlangıç durumunun hazırlanmasında düzenlenebilen bir şey değildir.Pauli'nin bulguladığı bu yasa şunları söyler:

1. Spini yarım-tek-tamsayı olan özdeş parçacıklardan(örneğin,spin 1/2, 3/2,...) oluşan sistemler karşıbakışımlı dalga fonksiyonları ile betimlenir.Böyle parçacıklara fermiyonlar denir,ve bunların Fermi-Dirac istatistiğine uydukları söylenir.

2. Tam sayı spinli parçacıklardan (örneğin,spin 0,1,2,...) oluşan sistemler bakışımlı dalga fonksiyonları ile betimlenir.Böyle parçacıklara bozon denir,ve bunların Bose-Einstein istatistiğine uydukları söylenir.

Yasa,N-parçacık durumlarına genişletilebilir.N özdeş fermiyonun bir sistemi için,dalga fonksiyonu herhangi bir parçacık çiftinin değiştokuşu altında karşıbakışımlıdır.Örneğin,uygun biçimde karşıbakışımlılaştırılmış üç parçacık dalga fonksiyonunun biçimi,

$$\psi^{(A)}(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{6}}\left[\psi(1,2,3) - \psi(2,1,3) + \psi(2,3,1) - \psi(3,2,1) + \psi(3,1,2) - \psi(1,3,2)\right] \qquad (8\text{-}50)$$

dir; oysa üç özdeş bozonun dalga fonksiyonunun biçimi,

$$\psi^{(S)}(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{6}}\left[\psi(1,2,3) + \psi(2,1,3) + \psi(2,3,1) + \psi(3,2,1) + \psi(3,1,2) + \psi(1,3,2)\right] \qquad (8\text{-}51)$$

dir.

Şimdi çok ilginç olan özel bir durumu gözönüne alalım; N fermiyon birbirleriyle etkileşmesinler,fakat genel bir potansiyelle etkileşsinler.Bu durum için,

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_i \qquad (8\text{-}52)$$

yazılabilir; burada

$$H_i = \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i) \qquad (8\text{-}53)$$

dir.Tek parçacık potansiyelinin özdurumları $u_{E_k}(x)$ ile gösterilir,burada

$$H_k\, u_{E_k}(x_k) = E_k\, u_{E_k}(x_k) \qquad (8\text{-}54)$$

dır.

$$Hu_E(1,2,\ldots,N) = Eu_E(1,2,\ldots,N) \tag{8-55}$$

denkleminin bir çözümü,

$$u_E(1,2,\ldots,N) = u_{E_1}(x_1)\, u_{E_2}(x_2) \ldots u_{E_N}(x_N) \tag{8-56}$$

olur, burada

$$E_1 + E_2 + \ldots + E_N = E \tag{8-57}$$

dir. (8-56)'da, x_i 'lerle birlikte görülen σ_i etiketlerini açıkça yazmadık. Şimdiki işimiz, (8-56)'yı karşıbakışımlı yapmaktır. Yalnız iki parçacık varsa,

$$u^{(A)}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[u_{E_1}(x_1) u_{E_2}(x_2) - u_{E_1}(x_2)\, u_{E_2}(x_1) \right] \tag{8-58}$$

olacağı açıktır. Üç parçacık varsa, karşıbakışımlı dalga fonksiyonunun biçimi,

$$\begin{aligned} u^{(A)}(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{6}} \Big[& u_{E_1}(x_1)\, u_{E_2}(x_2)\, u_{E_3}(x_3) - u_{E_1}(x_2)\, u_{E_2}(x_1)\, u_{E_3}(x_3) \\ & + u_{E_1}(x_2)\, u_{E_2}(x_3)\, u_{E_3}(x_1) - u_{E_1}(x_3)\, u_{E_2}(x_2)\, u_{E_3}(x_1) \\ & + u_{E_1}(x_3)\, u_{E_2}(x_1)\, u_{E_3}(x_2) - u_{E_1}(x_1)\, u_{E_2}(x_3)\, u_{E_3}(x_2) \Big] \end{aligned} \tag{8-59}$$

olur. N-parçacık için yanıt, bir determinanttır; buna Slater determinantı denir[1]:

$$u^{(A)}(1,2,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{E_1}(x_1) & u_{E_1}(x_2) & \ldots & u_{E_1}(x_N) \\ u_{E_2}(x_1) & u_{E_2}(x_2) & \ldots & u_{E_2}(x_N) \\ \vdots & & & \\ u_{E_N}(x_1) & u_{E_N}(x_2) & \ldots & u_{E_N}(x_N) \end{vmatrix} \tag{8-60}$$

Açıkça görüldüğü gibi, iki parçacığın değiştokuşu, determinanttaki iki sütunun değiştokuşu demektir; bu da işareti değiştirir. İki elektron aynı enerji özdurumundaysa, örneğin $E_1 = E_2$, ve ikisi de aynı spin durumundaysa spin etiketleri de aynı olacağından, $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = x_2$ iken determinant sıfır olur. Öyleyse bu elektronlar aynı yerde bulunamaz. Böylece, karşıbakışım gereksiniminden, iki fermiyon arasında etkin bir etkileşme ortaya çıkar: Nitel olarak, aynı durumdaki iki parçacık birbirlerinden uzakta durmaya çalışırlar, çünkü aralarındaki uzaklık sıfıra gittiği zaman ilgili dalga fonksiyonu sıfır olur. Böylece etkileşmeyen parçacıklar bile, aralarında bir itici etkileşme varmış gibi davranırlar. Elektronlar için, sıradeğiş-

[1] N özdeş bozon için, dalga fonksiyonu tam olarak bakışımlıdır ve genel biçimi (8-60) determinantının açılımındaki bütün işaretleri pozitif yaparak elde edilir.

tiren gözlenebilirlerin bir tam kümesinde,ek olarak spine bağlı iki-değerli bir gözlenebilir bulunduğunu göreceğiz.Böylece enerjisi,açısal momentumu,paritesi, ve başka nicelikleri belli olan bir durumda iki elektron(zıt spin değişkenli) bulunabilir,fakat ikiden fazla elektron bulunamaz.Bu,Pauli dışarlama ilkesinin sınırlandırılmış bir görünümüdür.

"İki elektron aynı kuantum durumunda olamaz" demek,elektronun bütünsel yapısı ile ilgilidir.Yeryüzünde taban durumunda bulunan bir hidrojen atomumuz, ve bir de ayda kendi taban durumunda bulunan başka bir hidrojen atomumuz olsun. Acaba bu durum,bu iki elektronun zıt spin durumlarında olmasını gerektirir mi? Bunu yanıtlamak için,elektronların spinlerinin "yukarı" veya "aşağı" olduğunu, ve bu elektronların kendi atomlarının taban durumlarında olduklarını bilmek yetmez; ayrıca atomların enerjilerinin de belirlenmesi gerekir.Bu belirlemedeki duyarlık nedir? Genişliği L olan bir kutu düşünelim,ve atomlar sırayla $0 \leq x \leq L/4$ ve $3L/4 \leq x \leq L$ aralıklarında yerleşmiş olsunlar.O zaman atomların momentumlarının belirlenebilmesindeki incelik,belirsizlik ilkesiyle sınırlanmıştır.Enerjinin olabilen değerleri,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ML^2} \tag{8-61}$$

olarak verilir; momentumun olabilen değerleri de buradan,

$$p = \frac{\hbar \pi n}{L}$$

olarak çıkarılabilir.Atomların momentumlarının ölçümleri belirsizlik bağıntısı ile sınırlanmıştır:

$$\Delta p \sim \frac{n\hbar}{\Delta x} \sim \frac{n\hbar}{L} \tag{8-62}$$

ve bu yüzden enerjileri,ancak

$$\Delta E \simeq \frac{p \Delta p}{M} \sim \frac{\hbar^2 \pi n^2}{ML^2} \tag{8-63}$$

inceliği ile belirlenebilir.Fakat bu,

$$E_n - E_{n-1} \simeq \frac{\hbar^2 \pi^2 n}{ML^2} \tag{8-64}$$

değerinden daha büyüktür.Gerçekten,aralarında 1 metre uzaklık bulunan atomlar için,örneğin 10^6 cm/s hızla hareket ediyorlarsa,$n \sim 10^{11}$'dir; buna göre makroskopik bir durumda klasik sezgiyle bir uyuşmazlık sözkonusu değildir.Gerçekten de,başlıca sorun şudur: İki atom A ve B ile gösterilirse,acaba iki elektron durumunu betimlemede, $\psi_A(x_1)\,\psi_B(x_2)$ dalga fonksiyonu ile,

$$\frac{\psi_A(x_1)\,\psi_B(x_2) - \psi_A(x_2)\,\psi_B(x_1)}{\sqrt{2}}$$

dalga fonksiyonu arasında fark var mıdır? Molekülleri tartışırken,dalga fonksiyonları arasındaki örtüşmenin atomlar arası uzaklıkla üstel olarak azaldığını göreceğiz.Atomlar birbirlerinden çok uzak iseler,hangi dalga fonksiyonunun kullanıldığı sonucu değiştirmez.H_2 molekülünde olduğu gibi atomlar yakınsa,ve örneğin n,l basamağında ise dalga fonksiyonları birbirini örter ve karşılıklı ilişkisi bulunmayan dalga fonksiyonlarının mı,yoksa karşıbakışımlı dalga fonksiyonlarının mı kullanıldığı önemli olur.Demek,bu durum için karşıbakışımlı dalga fonksiyonunun kullanılacağını söyler.

Pauli dışarlama ilkesinin ilginç bir sonucu şudur: N elektronun herhangi bir potansiyeldeki taban durumu,N bozonun veya N ayırdedilebilir parçacığın taban durumundan çok değişiktir.Örneğin,

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x &< 0 \\ &= 0 & 0 &< x < b \\ &= \infty & b &< x \end{aligned} \tag{8-65}$$

sonsuz potansiyel kutusunu düşünelim.Schrödinger denkleminin x = 0 ve x = b'de sıfır olan çözümü,

$$u_n(x) = \sin n\pi x/b \tag{8-66}$$

ile verilir; ve enerji özdeğerleri,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2} \tag{8-67}$$

olur,burada n = 1,2,3,...'dir.Etkileşmeyen N bozon için,taban durumda bütün parçacıklar n = 1 durumundadır; ve böylece enerji,

$$E = N \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \tag{8-68}$$

olarak verilir; buna göre,parçacık başına düşen enerji,

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \tag{8-69}$$

olur.Etkileşmeyen N fermiyon için durum çok değişiktir.n = 1,2,3,... durumlarının herbirine yalnızca iki elektron girebilir,buna göre N/2 durum dolar.Böylece, toplam enerji,

$$E = 2 \sum_{n=1}^{N/2} \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \frac{N^3}{24} \tag{8-70}$$

ile verilir.Son sonucu elde ederken,N'yi çok büyük varsaydık; bu yüzden son düzeyin bir elektronla mı yoksa iki elektronla mı doldurulduğu önemli olmadığından,

$$\sum_{n=1}^{N/2} n^2 \approx \int_0^{N/2} n^2 \, dn \simeq \frac{1}{3} \left(\frac{N}{2}\right)^3$$

bağıntısını kullandık.Böylece,parçacık başına düşen,

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{24mb^2} N^2 \qquad (8\text{-}71)$$

enerjisi N^2 ile büyür.Eşdeğer olarak,verilen bir enerji için kuyuyu dolduran bozon sayısı E ile orantılıdır,buna karşın kuyuyu dolduran fermiyon sayısı $E^{1/3}$ ile orantılıdır.Fermiyon halinde,doldurulacak olan en yüksek düzey $n = N/2$ 'dir; ve bu düzeyin enerjisi,

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2 N^2}{8mb^2} \qquad (8\text{-}72)$$

dir.Bu enerjiye Fermi enerjisi dendiğinden,F indisi konulmuştur.Bunu fermiyon yoğunluğu türünden yazabiliriz; bu yoğunluk,bir-boyutlu problemde $N/b \equiv \rho$ 'dur, ve

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m} \rho^2 \qquad (8\text{-}73)$$

olur.Bu uyarıların anlamına,Bölüm 9'da yeniden döneceğiz.

Dışarlama ilkesi,atomların yapısında son derece önemli bir rol oynar.Çeşitli öğelerin değişik kimyasal özeliklerindeki aşırı zenginlik,doğrudan doğruya, şu olguyla elde edilebilir: Verilen bir enerji özdurumunda yalnızca sınırlı sayıda elektron bulunabilir.

Problemler

1. Bir elektron-proton sisteminin indirgenmiş kütlesi nedir? Bu,elektron-deuteron sisteminin indirgenmiş kütlesinden ne kadar farklıdır? İki özdeş parçacığın indirgenmiş kütlesi nedir?

2. P_{12} değiştokuş işlemcisinin hermitien olduğunu kanıtlayınız.

3. Sonsuz potansiyel kuyusunda,etkileşmeyen iki elektron düşününüz.İki elektron aynı spin durumunda ise,taban durum dalga fonksiyonu nedir?

4. Aynı spin durumunda olan,ve

$$V(|x_1 - x_2|) = -V_o \qquad |x_1 - x_2| \leq a$$
$$= 0 \qquad \text{başka yerde}$$

potansiyeli ile etkileşen iki elektron düşününüz.İki elektronun toplam momentumunun sıfır olduğunu varsayarsak,iki-elektron durumunun en düşük enerjisi nedir?

[İpucu: Denklemi, (8-37)'ye götürecek biçimde ayırınız ve Pauli ilkesini uygulayınız.]

5. Herbirinin spini 0 olan, ve

$$V(x_1,x_2) = K\left[(x_1 - x_0) - (x_2 + x_0)\right]^2$$

potansiyel enerjisi ile etkileşen iki özdeş parçacık düşününüz, burada x_0 ve $-x_0$ parçacıkların denge konumlarıdır.

İki-parçacık sisteminin spektrumu nedir? Özdeş parçacıkların spinleri 1/2 olduğu zaman, spektrum ne olur?

6.

$$H = H(p_1,x_1) + H(p_2,x_2)$$

enerji işlemcisi ile betimlenen, iki özdeş parçacığı gözönüne alınız, burada

$$H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\, m\omega^2 x^2$$

dir. Kütle merkezi hareketini ayırınız ve sistemin enerji spektrumunu elde ediniz. Bunun,

$$H\psi(x_1,x_2) = E\,\psi(x_1,x_2)$$

denkleminin çözümünden elde edilenle uyuştuğunu gösteriniz, burada

$$\psi(x_1,x_2) = u_1(x_1)\, u_2(x_2)$$

dir. Enerji spektrumunun katmerliliğini tartışınız.

Kaynaklar

Bölüm 6'nın sonundaki sıralanmış kaynaklardan herhangi birine ve ayrıca aşağıdakilere bakınız:

D. S. Saxon, Elementary Quantum Mechanics, Holden-Day, Inc., 1968.

D. Park, Introduction to the Quantum Theory, McGraw-Hill Co., 1964.

Bölüm 9

Üç Boyutlu Schrödinger Denklemi

Üç-boyutlu uzayda hareket eden bir tek-parçacığın Hamiltonien'i,

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x,y,z) \qquad (9\text{-}1)$$

olur,ve bunu

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \qquad (9\text{-}2)$$

biçiminde yazarız.Üç-boyutlu $\vec{p}$ momentum işlemcisi,

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \qquad (9\text{-}3)$$

olarak gösterilir.Üç boyuttaki iki parçacık için Hamiltonien'in genel biçimi,

$$H = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2} + V(\vec{r}_1 , \vec{r}_2) \qquad (9\text{-}4)$$

ile verilir.Eğer potansiyel,

$$V(\vec{r}_1 , \vec{r}_2) = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \qquad (9\text{-}5)$$

şeklinde yalnızca parçacıklar arasındaki uzaklığa bağlıysa,o zaman Hamiltonien, tüm sistemin $\vec{r}_1 \to \vec{r}_1 + \vec{a}$, $\vec{r}_2 \to \vec{r}_2 + \vec{a}$ yerdeğiştirmeleri altında değişmezdir.Bu,Bölüm 8'de gördüğümüz gibi,toplam momentumun korunumunu ve değişkenlerin ayrılmasını içerir.Aşağıda bu ayırmayı,sıradeğiştiren H ve $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$ işlemcilerinin ortak özfonksiyonlarını bularak yapacağız.Momentum özdeğer denklemi,

$$\vec{P}_{op} f(\vec{r}_1 , \vec{r}_2) = \vec{P}\, f(\vec{r}_1 , \vec{r}_2) \qquad (9\text{-}6)$$

verir,ve bu

$$\frac{\hbar}{i}\,(\vec{\nabla}_1+\vec{\nabla}_2)f(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\vec{P}\,f(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \tag{9-7}$$

demektir.Eğer,

$$f(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\psi(\vec{r}_1-\vec{r}_2,\alpha\vec{r}_1+\beta\vec{r}_2) \tag{9-8}$$

yazarsak, $\vec{R}=\alpha\vec{r}_1+\beta\vec{r}_2$ olduğundan (9-7) denklemi,

$$\frac{\hbar}{i}\,(\alpha+\beta)\,\vec{\nabla}_R\,\psi(\vec{r},\vec{R})=\vec{P}\,\psi(\vec{r},\vec{R}) \tag{9-9}$$

biçimini alır; ve bu denklemdeki işlemler bakımından $\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2$ değişkeni bir sabit parametredir.Böylece bu denklemin çözümü,

$$\psi(\vec{r},\vec{R})=u(\vec{r})\,e^{i\vec{P}.\vec{R}/\hbar(\alpha+\beta)} \tag{9-10}$$

olur.Şimdi, α ve β 'nın seçimini,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\,\vec{\nabla}_1^{\,2}-\frac{\hbar^2}{2m_2}\,\vec{\nabla}_2^{\,2}+V(|\vec{r}|)-E_{top}\right]u(\vec{r})\,e^{i\vec{P}.\vec{R}/\hbar(\alpha+\beta)}=0 \tag{9-11}$$

enerji özdeğer denklemini basitleştirecek biçimde yapacağız.

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}_1&=\vec{\nabla}_r+\alpha\vec{\nabla}_R\\ \vec{\nabla}_2&=-\vec{\nabla}_r+\beta\vec{\nabla}_R\end{aligned} \tag{9-12}$$

olduğundan bu denklem,

$$\begin{aligned}&-\frac{\hbar^2}{2m_1}\left[\vec{\nabla}_r^{\,2}\,u(\vec{r})+\frac{2i\alpha}{(\alpha+\beta)\hbar}\,\vec{P}.\vec{\nabla}_r\,u(\vec{r})-\frac{\alpha^2\vec{P}^2}{(\alpha+\beta)^2\hbar^2}\,u(\vec{r})\right]\\ &-\frac{\hbar^2}{2m_2}\left[\vec{\nabla}_r^{\,2}\,u(\vec{r})-\frac{2i\beta}{(\alpha+\beta)\hbar}\,\vec{P}.\vec{\nabla}_r\,u(\vec{r})-\frac{\beta^2\vec{P}^2}{(\alpha+\beta)^2\hbar^2}\,u(\vec{r})\right]\\ &+V(|\vec{r}|)\,u(\vec{r})=E_{top}\,u(\vec{r})\end{aligned} \tag{9-13}$$

biçimini alır; bunu bulmak için,denklemde $\vec{R}$ 'ye göre türev alındıktan sonra, denklem üstel çarpana bölünmüştür.Eğer,

$$\begin{aligned}\alpha&=\gamma m_1\\ \beta&=\gamma m_2\end{aligned} \tag{9-14}$$

seçimiyle çapraz terimler düşürülürse,denklem

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\vec{\nabla}_r^{\,2}\,u(\vec{r})+V(|\vec{r}|)\,u(\vec{r})=\left(E_{top}-\frac{\vec{P}^2}{2(m_1+m_2)}\right)u(\vec{r}) \tag{9-15}$$

olarak basitleşir,Burada,

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \tag{9-16}$$

ile tanımlanan μ indirgenmiş kütlesini kullandık.(9-15) denklemi aslında,

$$E = E_{top} - \frac{\vec{P}^2}{2(m_1 + m_2)} \tag{9-17}$$

enerjili bir tek-parçacık Schrödinger denklemidir.Böylece etkin tek-parçacık denklemine giren enerji,toplam enerjiden iki-parçacık sisteminin kinetik enerjisi kadar küçüktür.İki parçacık sisteminin kütle merkezi $\vec{P}$ momentumu ile gider ve toplam kütlesi $m_1 + m_2$'dir.

Yukardaki denklem γ niceliğini belirlemez.Ancak, $\vec{R}$ değişkeninin $\vec{P}$ toplam momentumuyla kanonik eşlenik olmasını istersek,yani

$$[P_x, R_x] = \frac{\hbar}{i} \tag{9-18}$$

vsb. olmasını istersek,

$$[p_{1x} + p_{2x},\ \alpha x_1 + \beta x_2] = \frac{\hbar}{i}(\alpha + \beta) = \frac{\hbar}{i} \tag{9-19}$$

buluruz.Bu ise,

$$\alpha + \beta = 1 \tag{9-20}$$

olması,yani

$$\gamma = \frac{1}{m_1 + m_2} \tag{9-21}$$

olması demektir.Aslında çok basit olan buradaki değişkenlere ayırmayı böyle karmaşık bir yoldan yürütmemizin nedeni,bu işlemin bir-parçacık Schrödinger denkleminin başka ayrılmalarında nasıl bir yol izleyeceğimizi gösteren bir örnek olmasıdır.Böyle bir ayırma,potansiyel yalnız parçacıklar arasındaki $|\vec{r}|$ uzaklığına bağlıysa olabilir. $|\vec{r}| = r$ dersek,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) \tag{9-22}$$

Hamiltonien'i dönmeler altında değişmezdir; kuşkusuz V(r) yalnız başlangıç noktasından uzaklığın bir fonksiyonudur,ve $\vec{r}$ vektörünün doğrultusunu veren açısal değişkenlere bağlı değildir; $\vec{p}^2$ de skaler bir niceliktir, $\vec{p}$ vektörünün uzunluğudur ve $\vec{p}$ 'nin yöneliminden bağımsızdır.Eşdeğer olarak, $p^2 = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2$ dönmeler altında değişmezdir.Kuşkulanan okur,özel bir hal olan z-ekseni etrafında θ açısı kadar bir dönmeyi inceleyerek bunu doğrulayabilir:

$$x' = x\cos\theta - y\sin\theta$$
$$y' = x\sin\theta + y\cos\theta \qquad (9\text{-}23)$$

olduğundan

$$r' = (x'^2 + y'^2 + z'^2)^{1/2} = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} = r$$

olduğu,ve

$$\left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y'}\right)^2 = \left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial x} - \sin\theta\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial x} + \cos\theta\frac{\partial}{\partial y}\right)^2$$
$$= \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^2$$

olduğu kolayca görülür.

Parite durumunda ve yerdeğiştirmeler altındaki değişmezlikte gördüğümüz gibi,burada da Hamiltonien'in bir değişmezlik özeliği olduğundan gene bir korunum yasası bekleriz.H ile sıradeğiştiren işlemcileri bulmak için z-ekseni etrafında sonsuz küçük bir dönmeyi inceleyelim.Yalnız θ basamağındaki terimleri alırsak,

$$x' = x - \theta y$$
$$y' = y + \theta x \qquad (9\text{-}24)$$

buluruz,ve

$$Hu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) = Eu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) \qquad (9\text{-}25)$$

olması gerekir.Bunu θ 'ya göre birinci basamağa kadar açar,ve açılımdan

$$Hu_E(x,y,z) = Eu_E(x,y,z) \qquad (9\text{-}26)$$

bağıntısını çıkarırsak,

$$H\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)u_E(x,y,z) = E\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)u_E(x,y,z) \qquad (9\text{-}27)$$

elde ederiz.Bunun sağ yanı,

$$\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)Hu_E(x,y,z)$$

olarak yazılabildiğinden,ve $u_E(\vec{r})$ bir tam küme oluşturduğundan,şu değişme bağıntısının geçerli olduğunu buluruz:

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = xp_y - yp_x \qquad (9\text{-}28)$$

olmak üzere,

$$[H, L_z] = 0 \qquad (9\text{-}29)$$

dır.L_z,

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{9-30}$$

açısal momentum işlemcisinin z-bileşenidir.x- ve y-eksenleri etrafındaki dönmeleri alsaydık,ek olarak

$$\begin{aligned} [H,L_x] &= 0 \\ [H,L_y] &= 0 \end{aligned} \tag{9-31}$$

bulurduk.Böylece açısal momentum işlemcisinin üç bileşeni de H ile sıradeğiştirir, yani açısal momentum bir hareket sabitidir.Böyle olması,şu klasik sonuca koşuttur: Merkezcil kuvvetler açısal momentum korunumunu gerektirir.

H,L_x,L_y ve L_z'nin ortak özfonksiyonlarını bulmak isteyebiliriz.Fakat bunlar, sıradeğiştiren değişkenlerin bir tam kümesini oluşturmazlar.Örneğin,

$$\begin{aligned} [L_x,L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z,zp_x] - [zp_y,zp_x] - [yp_z,xp_z] + [zp_y,xp_z] \\ &= y[p_z,z]p_x + x[z,p_z]p_y \\ &= \frac{\hbar}{i}(yp_x - xp_y) \\ &= i\hbar L_z \end{aligned} \tag{9-32}$$

ve benzer olarak

$$\begin{aligned} [L_y,L_z] &= i\hbar L_x \\ [L_z,L_x] &= i\hbar L_y \end{aligned} \tag{9-33}$$

dir.Böylece,H ile birlikte,gözlenebilirlerin sıradeğiştiren kümesini kurmak üzere, $\vec{L}$ 'min yalnız bir bileşeni seçilebilir.Belki daha iyi bir seçim yapabiliriz; çünkü,(9-32) ve (9-33)'e göre $\vec{L}^2$, $\vec{L}$ 'nin üç bileşeniyle de sıradeğiştirir:

$$\begin{aligned} [L_z,\vec{L}^2] &= [L_z,L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] = [L_z,L_x^2] + [L_z,L_y^2] \\ &= L_x[L_z,L_x] + [L_z,L_x]L_x + L_y[L_z,L_y] + [L_z,L_y]L_y \\ &= i\hbar L_xL_y + i\hbar L_yL_x - i\hbar L_yL_x - i\hbar L_xL_y \\ &= 0 \end{aligned} \tag{9-34}$$

v.b. Böylece sıradeğiştiren gözlenebilirlerin tam kümesi olarak H,L_z (bütünüyle anlaşmaya dayanan bir seçim) ve $\vec{L}^2$ işlemcilerini seçebiliriz.Açıkça görüldüğü gibi Hamiltonien $x \to -x$, $y \to -y$ ve $z \to -z$ altında değişmez olduğundan,pariteyi de bu kümeye koyabilirdik; fakat ilerde göreceğimiz gibi,$\vec{L}^2$'nin bilinmesi pariteyi de belirler.

Bölüm 10'da L_z ve $\vec{L}^2$ 'nin özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını belirleyeceğiz; burada yalnızca,bunların kullanılmasının Schrödinger denkleminin çözümünü büyük ölçüde basitleştirdiğini belirtelim.Böyle olması,aşağıda çıkarılan bağıntının sonucudur.Biraz cebir,

$$\vec{L}^2=(\vec{r}\times\vec{p})^2=[(\vec{r}\times\vec{p})_x]^2+[(\vec{r}\times\vec{p})_y]^2+[(\vec{r}\times\vec{p})_z]^2$$

$$=-\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$-\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$-\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$=-\hbar^2\left[x^2\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+y^2\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\right.$$

$$+z^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)-2xy\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y}-2yz\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial z}$$

$$\left.-2zx\frac{\partial^2}{\partial z\,\partial x}-2x\frac{\partial}{\partial x}-2y\frac{\partial}{\partial y}-2z\frac{\partial}{\partial z}\right] \qquad (9\text{-}35)$$

olduğunu gösterir.Benzer olarak,

$$(\vec{r}\cdot\vec{p})^2=-\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$=-\hbar^2\left(x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+y^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+z^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}+2xy\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y}+2yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}\right.$$

$$\left.+2zx\frac{\partial^2}{\partial z\,\partial x}+x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad (9\text{-}36)$$

bulunur.Bu ikisinin toplamı,

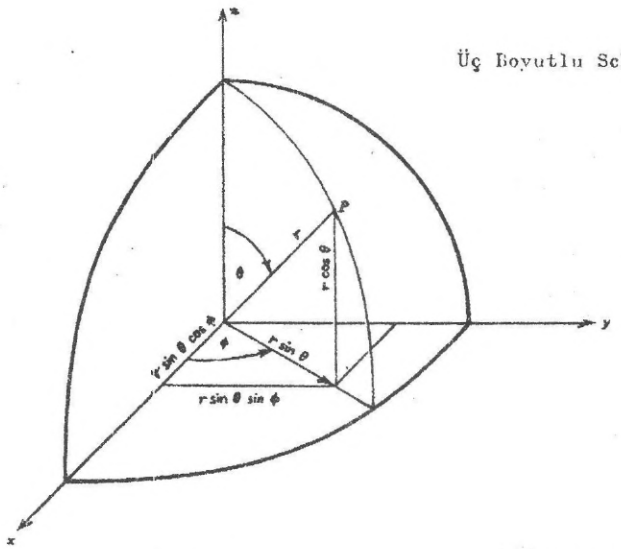
$$-\hbar^2(x^2+y^2+z^2)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad (9\text{-}37)$$

verir.Böylece,

$$\vec{L}^2+(\vec{r}\cdot\vec{p})^2=r^2\vec{p}^2+i\hbar\,\vec{r}\cdot\vec{p} \qquad (9\text{-}38)$$

özdeşliğini elde ederiz.İşlemcilerle çalıştığımızdan,terimlerin sırasını bozmamak çok önemlidir.Bu özdeşlikten,

$$\vec{p}^2=\frac{1}{r^2}\left[\vec{L}^2+(\vec{r}\cdot\vec{p})^2-i\hbar\,\vec{r}\cdot\vec{p}\right]$$



Şek.9-1. Konuda kullanılan küresel koordinatların tanımı,ve (x,y,z) kartezien koordinatları ile (r,θ, ϕ) küresel koordinatları arasındaki bağıntı.

$$= -\frac{1}{r^2}\vec{L}^2 - \hbar^2\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - \hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} \qquad (9\text{-}39)$$

sonucu çıkar.Böylece Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{\hbar^2 r^2}\vec{L}^2\right]u_E(\vec{r}\,)$$

$$+V(r)\,u_E(\vec{r}\,) = Eu_E(\vec{r}\,) \qquad (9\text{-}40)$$

biçimini alır. Burada doğal olarak yapılacak şey,küresel koordinatlarda çalışmaktır. O zaman, θ ve ϕ açılarının bulunduğu tek işlemci $\vec{L}^2$ olur.Bu yüzden,özfonksiyonları

$$u_E(\vec{r}\,) = Y_\lambda(\theta,\phi)\,R_{E\lambda}(r) \qquad (9\text{-}41)$$

olarak seçersek,$\vec{L}^2$'nin özdeğer denklemi

$$\hat{L}^2 Y_\lambda(\theta,\phi) = \lambda Y_\lambda(\theta,\phi) \qquad (9\text{-}42)$$

olur; ve (9-40) denklemi,Denk.(9-42)'ye ve bir de tam olarak ışınsal olan bir denkleme ayrılır.İzleyeceğimiz yol alışılmış değişkenlere ayırma yolundan değişik değildir.Ancak,işlemcilerin sıradeğiştiren tam kümesinin belirlenmesinde bakışımın rolüne önem vermemiz,bu ayırmayı etkileyebilir.

Üç-boyutlu enerji özdeğer denklemini,küresel koordinatlarda indirgemeye çalıştık; çünkü en ilginç potansiyeller,V=V(r) biçimindeki merkezcil potansiyellerdir.İlginç olan başka bir durum ise,potansiyelin

$$V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

biçiminde olmasıdır.Bu durum için,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)u_E(x,y,z) + \left[V_1(x)+V_2(y)+V_3(z)\right]\ u_E(x,y,z) = Eu_E(x,y,z) \qquad (9\text{-}43)$$

denklemi ,

$$u_E(x,y,z) = u_{\epsilon_1}(x)\, v_{\epsilon_2}(y)\, \omega_{\epsilon_3}(z) \qquad (9\text{-}44)$$

yazılarak kolayca çözülür.Burada,sağ yandaki fonksiyonlar,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_1(x)\right]\ u_{\epsilon_1}(x) = \epsilon_1 u_{\epsilon_1}(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}+V_2(y)\right]\ v_{\epsilon_2}(y) = \epsilon_2 v_{\epsilon_2}(y)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}+V_3(z)\right]\ \omega_{\epsilon_3}(z) = \epsilon_3 \omega_{\epsilon_3}(z) \qquad (9\text{-}45)$$

denklemlerinin çözümleridir; ve

$$E = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3$$

bağıntısı vardır.

Özellikle ilginç olan bir örnek,sonsuz duvarlı potansiyel çukurunun üç-boyutlu genelleştirilmesidir.Üç-boyutlu kutu kenarları L olan küp biçimindeyse, o zaman

$$\begin{aligned} V_1(x) &= \infty && x < 0 \\ &= 0 && 0 < x < L \\ &= \infty && L < x \end{aligned} \qquad (9\text{-}46)$$

v.b.dir.Böylece bir boylandırma çarpanı dışında genel çözüm,

$$u_E(x,y,z) = \sin\frac{n_1\pi x}{L}\sin\frac{n_2\pi y}{L}\sin\frac{n_3\pi z}{L} \qquad (9\text{-}47)$$

biçiminde olur,ve buradan

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \qquad (9\text{-}48)$$

bulunur.Problemde pek çok katmerlilik bulunduğuna dikkat ediniz: Verilen bir E için,(9-48)'i sağlayan ne kadar $\{n_1,n_2,n_3\}$ tamsayı kümesi varsa o kadar çok çözüm vardır.Alışıldığı gibi,katmerlilik karşılıklı olarak sıradeğiştiren işlemcilerin varlığına bağlıdır,bu örnek ayrık bir durum değildir.Burada,bu işlemciler H_x,H_y ve H_z'dir.Bunlar

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m} + V_1(x)$$

$$H_y = \frac{p_y^2}{2m} + V_2(y)$$

$$H_z = \frac{p_z^2}{2m} + V_3(z) \qquad (9\text{-}49)$$

olarak tanımlanmışlardır,ve

$$H_x + H_y + H_z = H \qquad (9\text{-}50)$$

bağıntısını sağlarlar.

N tane etkileşmeyen özdeş fermiyonun taban durumu enerjisini araştırmak ilginçtir; örneğin,L^3 hacımlı bir kutu içindeki elektronlar.Tamsayıların her bir (1,1,1),(2,1,1),(1,2,1),... üçlüsü için iki elektron yerleştirilebilir.Soruyu başka bir biçimde sormak daha kolaydır: (9-48) ile verilen E'nin,E_F Fermi enerjisinden küçük olacağı kaç tane $\{n_1,n_2,n_3\}$ tamsayı üçlüsü vardır? Her üçlü,üç-boyutlu bir uzay örgüsünde bir nokta verir; bu noktaların sayısı çoksa,o zaman bunlar R yarıçaplı bir kürenin içinde bulunmalıdır,R'nin değeri (9-48)'e göre

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2\pi^2}L^2 \qquad (9\text{-}51)$$

olarak verilir.Bu da,çok iyi bir yaklaşıklıktır.Bunların sayısı,tüm n_i'lerin pozitif olduğu,kürenin sekizde bir hacmıyla verilir.Böylece örgü noktalarının sayısı,

$$\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}R^3 = \frac{1}{8}\,\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2mE_F}{\hbar^2\pi^2}L^2\right)^{3/2} \qquad (9\text{-}52)$$

olur,ve bu yüzden enerjisi E_F Fermi enerjisinden küçük olan elektronların sayısı bunun iki katıdır,yani

$$N = \frac{\pi}{3}L^3\left(\frac{2mE_F}{\hbar^2\pi^2}\right)^{3/2} \qquad (9\text{-}53)$$

dir.Elektronların sayısı,beklendiği gibi,kutunun L^3 hacmiyla orantılıdır.

$$n = \frac{N}{L^3} \tag{9-54}$$

elektron yoğunluğu türünden,Fermi enerjisi

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3} \tag{9-55}$$

olur.Toplam enerjiyi hesaplamak için,örgü noktalarının sayısı

$$\frac{1}{8} \int_{|\vec{n}| \leq R} d^3\vec{n} \tag{9-56}$$

olarak yazılabilir.1/8 çarpanı,(9-48)'deki pozitif tamsayılar kısıtlamamızdan gelir; yukarıdaki tümlevde bu kısıtlama kaldırılmıştır,fakat öndeki çarpanla denkleştirilmiştir.Her örgü noktasındaki enerji,

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \vec{n}^2 \tag{9-57}$$

olarak verilir; böylece de toplam enerji için,

$$\begin{aligned} E_{top} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot \frac{1}{8} \int_{|\vec{n}| \leq R} \vec{n}^2 \, d^3\vec{n} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot \frac{1}{8} \cdot 4\pi \int_0^R n^4 \, dn \\ &= \frac{\pi^3 \hbar^2}{20mL^2} R^5 \end{aligned} \tag{9-58}$$

bulunur.R,elektron sayısına

$$N = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 \tag{9-59}$$

olarak bağlı olduğundan,sonuçta

$$E_{top} = \frac{\pi^3 \hbar^2}{20mL^2} \left(\frac{3N}{\pi} \right)^{5/3} \tag{9-60}$$

elde ederiz.Bunu,$n = N/L^3$ türünden yazarsak,

$$E_{top} = \frac{\pi^3 \hbar^2}{20m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{5/3} L^3 \tag{9-61}$$

buluruz.

Bir potansiyel içindeki bir çok-elektron sisteminin taban durumu,pek çok dallanması olan büyük sayıdaki dolmuş düzeyden oluşur.E_F'nin tipik değerleri

5-10 eV basamağındadır.Böylece,bayağı sıcaklıklarda çok az sayıda elektron ısıl olarak uyarılabilir; çünkü elektronların pek çoğu ancak,önceden doldurulmuş olan durumlara uyarılabilir.Bunun sonucu olarak,atom başına bir ya da iki özgür elektronu olan iyonların bir kristal örgüsü olarak oldukça iyi betimlenen bir metalde ,özgül ısıya yalnızca iyonların katkıları vardır.Metale bir elektrik alan uygulanırsa,yalnız "Fermi denizi"nin yüzüne yakın olan elektronlar ivmelenebilir,çünkü daha derinde yerleşmiş olan elektronlar uygun enerji durumları bulamazlar.İvmelendirilenlerin uzun bir ortalama özgür yolları vardır.İyonlarla çarpışmada,elektronların enerjisi E_F'nin altına düşüyorsa,böyle çarpışmalar yasaktır;çünkü uygun hiçbir boş durum yoktur.Bu konular, katıhal fiziği kitaplarında çok ayrıntılı olarak incelenecektir.

Problemler

1. $\varrho^2 = x^2 + y^2$ olmak üzere,silindirsel bakışımlı bir $V(\varrho)$ potansiyeli içinde hareket eden bir parçacığı göz önüne alınız.Sistemin durumlarını belirlemek için kullanacağınız,sıradeğiştiren gözlenebilirlerin tam kümesi nedir?

2. Problem 1'deki sonuçlarınızı kullanarak,Schrödinger denklemini silindirsel koordinatlarda ayırınız.

3. Bakır içindeki özgür elektron sayısının yoğunluğu 8.5×10^{22} cm^{-3} olarak verildiğine göre,(1) elektron volt olarak Fermi enerjisini; (2) Fermi enerjisine eşit kinetik enerjiyle hareket eden bir elektronun hızını hesaplayınız.

4. Bir çekirdek N tane nötron ve Z tane protondan oluşur,ve $N + Z = A$'dır. $r_o = 1.1$ fm (1 fm $= 10^{-13}$ cm) olmak üzere,çekirdeğin yarıçapı $R = r_o A^{1/3}$ bağıntısıyla veriliyorsa ve nötronla protonun kütleleri çok yakın olarak 1.6×10^{-24} gr ise, proton ve nötronların özgürce hareket ettiğini varsayarak,proton "gaz"ı ve nötron "gaz"ının Fermi enerjisi için bir deyim yazınız.N = 126 ve Z = 82 ise Fermi enerjisi ne kadardır?

5. ϱ kütle yoğunluğu 10^{11}'den 10^{16} gr cm^{-3}'e kadar değişen,taban durumunda bir nötron gazını göz önüne alınız.Fermi enerjisini ϱ'nun bir fonksiyonu olarak hesaplayınız.Bazı enerjilerde,nötron gazının göreli olduğuna,yani enerji ve momentum arasındaki bağıntının göreli olduğuna dikkat ediniz.Yoğunluk hangi değere ulaştığında,göreli formülü kullanmaya başlamak gerekir?

6. Yozlaşmış bir elektron gazında göreli olmayan elektronların ortalama enerjisi,

$$E = \frac{\frac{1}{8}\int d^3\vec{n}\,\frac{p^2}{2m_e}}{\frac{1}{8}\int d^3\vec{n}}$$

ile verilir,ve daha genel olarak

$$E = \frac{\frac{1}{8}\int d^3\vec{n}\ \ (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2} - mc^2}{\frac{1}{8}\int d^3\vec{n}}$$

yazılır.Ortalama enerjinin bu genel deyimini, $\xi = p_F/m_e c$ 'nin fonksiyonu olarak hesaplayınız.Bunu kullanarak,göresiz formülde ve $\xi \gg 1$ olan görelilik-ötesi bölgede,

$$P = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial (1/n)}$$

termodinamik formülü ile tanımlanan basıncı hesaplayınız.

Kaynaklar

Açısal momentumun burada kullanılan çerçevedeki iyi bir tartışması için,bkz. J.L.Powell and B.Crasemann,Quantum Mechanics,Addison-Wesley,Inc.,1961.

Bu kitapta,her giriş kitabında olduğu gibi,üç-boyutlu Schrödinger denkleminin ayrılması işlenmiştir.

Bölüm 10

Açısal Momentum

Bu bölümdeki işimiz, L_z ve $\vec{L}^2$ işlemcilerinin özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını bulmaktır. Açısal momentum $\hbar$ boyutunda olduğundan özdeğer denklemini,

$$L_z Y_{\ell m} = m\hbar\, Y_{\ell m}$$

$$\vec{L}^2 Y_{\ell m} = \ell(\ell+1)\,\hbar^2 Y_{\ell m} \qquad (10\text{-}1)$$

biçiminde yazabiliriz, burada m ve $\ell(\ell+1)$ gerçel sayılardır. $\vec{L}^2$'nin özdeğerinin bu garip yazılışının uygunluğu ilerde kanıtlanacaktır. İşlemin çeşitli yolları vardır. Geleneksel yol $\vec{L}$ işlemcilerini küresel koordinatlarda yazmaktır.

$$x = r \sin\theta \cos\phi$$

$$y = r \sin\theta \sin\phi$$

$$z = r \cos\theta \qquad (10\text{-}2)$$

olduğundan,

$$dx = \sin\theta\cos\phi\, dr + r\cos\theta\cos\phi\, d\theta - r\sin\theta\sin\phi\, d\phi$$

$$dy = \sin\theta\sin\phi\, dr + r\cos\theta\sin\phi\, d\theta + r\sin\theta\cos\phi\, d\phi$$

$$dz = \cos\theta\, dr - r\sin\theta\, d\theta \qquad (10\text{-}3)$$

bulunur. Bunlar çözülebilir, ve

$$dr = \sin\theta\cos\phi\, dx + \sin\theta\sin\phi\, dy + \cos\theta\, dz$$

$$d\theta = \frac{1}{r}(\cos\theta\cos\phi\, dx + \cos\theta\sin\phi\, dy - \sin\theta\, dz)$$

$$d\phi = \frac{1}{r\sin\theta}(-\sin\phi\, dx + \cos\phi\, dy) \qquad (10\text{-}4)$$

verir.Bu denklemlerin yardımıyla,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$= \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} \qquad (10\text{-}5)$$

elde edebiliriz,ve sonunda

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \phi} \qquad (10\text{-}6)$$

buluruz.Açısal momentumun öbür iki bileşeni ise,daha kapalı bir biçimde yazılır:

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \qquad (10\text{-}7)$$

tanımı yapılırsa,o zaman

$$L_{\pm} = \frac{\hbar}{i}\left[y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \pm i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left[\pm iz\left(\frac{\partial}{\partial x} \pm i\frac{\partial}{\partial y}\right) \mp i(x \pm iy)\frac{\partial}{\partial z}\right]$$

$$= \pm\hbar r\cos\theta\left(\sin\theta e^{\pm i\phi}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta e^{\pm i\phi}\frac{\partial}{\partial \theta} \pm \frac{ie^{\pm i\phi}}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

$$\mp\hbar r\sin\theta e^{\pm i\phi}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\right) \qquad (10\text{-}8)$$

olur,bu da

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial \phi}\right) \qquad (10\text{-}9)$$

demektir.$\vec{L}^2$ işlemcisi,şöyle kurulabilir:

$$L_+L_- = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y)$$

$$= L_x^2 + L_y^2 - i\left[L_x, L_y\right] \qquad (10\text{-}10)$$

olduğu gözlenerek,

$$\vec{L}^2 = L_z^2 + L_+L_- + i\left[L_x, L_y\right]$$

$$= L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z \qquad (10\text{-}11)$$

bulunur. Son satırda (9-32)'yi kullandık. Böylece θ ve ϕ'ye göre ikinci basamaktan bir diferansiyel işlemci elde etmiş oluyoruz, ve geriye (10-1)'in gösterdiği diferansiyel denklemleri çözmek kalıyor. Bu konu pek çok kuantum mekaniği ya da klasik elektrodinamik ders kitabında incelenmiştir. İşimizi cebirsel işlemlerle sürdüreceğiz, fakat

$$L_z Y_{\ell m} = m\hbar\, Y_{\ell m} \tag{10-12}$$

özdeğer denklemini ve bazı uygulamaları tartışmak için konudan biraz ayrılacağız. (10-6) kullanılarak, bu denklem

$$\frac{\partial}{\partial\phi} Y_{\ell m}(\theta,\phi) = im Y_{\ell m}(\theta,\phi) \tag{10-13}$$

verir, bu yüzden çözüm, $Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\,\Phi_m(\phi)$ biçimindedir. Burada, $\Phi_m(\phi)$

$$\frac{d\Phi_m(\phi)}{d\phi} = im\,\Phi_m(\phi) \tag{10-14}$$

denklemini sağlar. Bu denklemin,

$$\int_0^{2\pi} d\phi\,|\Phi_m|^2 = 1 \tag{10-15}$$

olacak biçimde boylandırılmış çözümleri,

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\phi} \tag{10-16}$$

dir. Arasıra şöyle bir tartışma yapılır: 360°'lik bir dönme yani bir $\phi \to \phi + 2\pi$, dönüşümü altında sistem değişmez olduğundan,

$$e^{2\pi i m} = 1 \tag{10-17}$$

olması gerekir; bu yüzden de, m bir tamsayıdır. Bu aslında doğru değildir. Çünkü fiziksel gözlenebilirlere giren nicelikler, $\int_0^{2\pi} d\phi\ \psi_1^*(\phi)\, A\, \psi_2(\phi)$ tipindedir; ve buradaki $\psi(\phi)$ dalga fonksiyonları,

$$\psi(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \tag{10-18}$$

biçimindedir. Eğer bu isteksel dalga paketlerinin $\phi \to \phi + 2\pi$ dönüşümü altında değişmemesini (ortak bir evre çarpanı dışında) istersek, şu sonuca ulaşırız: m'nin izin verilen en genel değerleri, c bir sabit olmak üzere, $m = c +$ tamsayı olur. Yalnızca, L_z işlemcisini (L_x, L_y, L_z) toplam kümesinin bir parçası olarak görürsek, c sabiti için bir şeyler söyleyebiliriz. Aşağıda, özdeğerlerin sıfıra göre bakışımlı olarak dağıldığını tartışacağız, öyle ki, $c = 0$ ya da $c = 1/2$ olacaktır. Bu bölümde inceleyeceğimiz işlemciler için, kendimizi $c = 0$ değerine kısıtlayacağız; bu koşul m'nin bir tamsayı olması demektir.

L_z'nin özdeğer denklemi başka bir ilişkiyle de ortaya çıkar.x-y düzleminde dönen klasik bir döneri gözönüne alınız.Eylemsizlik momenti I ise,enerjisi

$$E = \frac{L_z^2}{2I} \tag{10-19}$$

olur,ve böylece Hamiltonien

$$H = \frac{L_z^2}{2I} \tag{10-20}$$

ile verilir.Hamiltonien'in özdeğerlerinin,

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} \tag{10-21}$$

olduğu hemen görülmektedir,ve özfonksiyonlar $e^{\pm im\phi}$ 'lerdir.H,L_z ile sıradeğiştirdiğinden,bir katmerlilik vardır,ve verilen E_m için iki özfonksiyon dönmenin iki yönüne karşılık gelir.Eğer bir çember üzerinde,aralarında birbirine eşit $2\pi/N$ açısı olan,sıkıca tutturulmuş N tane parçacığımız varsa,ve bu parçacıklar özdeşse, o zaman

$$H\,\Phi_E(\phi) = E\,\Phi_E(\phi) \tag{10-22}$$

enerji özdeğer denkleminin çözümü yine $e^{\pm i\lambda\phi}$ olacaktır.Fiziksel sistem,$2\pi/N$ radyanlık(ya da bu açının bir tam katı kadar) bir dönme altında değişmez,ve çözümler de bunu yansıtmalıdır.m'yi bir tamsayı olmaya zorlayan türdeki tartışmalar,şimdi de $\lambda = NX$(bir tamsayı) olduğunu söyler.[1] Böylece enerji,

$$E = \frac{\hbar^2 (Nm)^2}{2I} \tag{10-23}$$

olur.

Şimdi (10-1) denklemine dönelim; ve Bölüm 7'deki harmonik salıngan incelememizi anımsatan bir yolla,özdeğerleri elde etmeye çalışalım.L_z ve $\vec{L}^2$ hermitien işlemcilerinin özfonksiyonları dik olacaktır; özdeğerler farklıysa,uygun bir boylandırmayla,

$$\langle Y_{\ell' m'} \mid Y_{\ell m} \rangle = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}, \tag{10-24}$$

yazacağız.

$$\begin{aligned} \langle Y_{\ell m} \mid (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)\, Y_{\ell m} \rangle \\ &= \langle L_x Y_{\ell m} \mid L_x Y_{\ell m} \rangle + \langle L_y Y_{\ell m} \mid L_y Y_{\ell m} \rangle + m^2\hbar^2 \\ &\geq 0 \end{aligned} \tag{10-25}$$

[1] Okur Bölüm 1'de tartışılan Dicke-Wittke'nin Düşünce Deneyi'ne bakabilir.

olduğundan,

$$\ell(\ell+1) \geq 0 \tag{10-26}$$

sonucu çıkar.

(10-7)'de tanımlanan $L_{\pm}$ işlemcileri,aşağıdaki yapacaklarımız için çok yararlıdır.Bu işlemcilerin artırma ve azaltma işlemcilerinin rolünü oynadıklarını göreceğiz.Önce,

$$\vec{L}^{\,2} = L_+L_- + L_z^{\,2} - \hbar L_z \tag{10-27}$$

olduğunu görmüştük.Aynı yolla,

$$\vec{L}^{\,2} = L_-L_+ + L_z^{\,2} + \hbar L_z \tag{10-28}$$

olduğunu da görürüz.Doğrudan doğruya (9-32)'den bulunabileceği gibi,(10-27) ve (10-28)'den de,

$$\left[L_+, L_-\right] = 2\hbar L_z \tag{10-29}$$

buluruz.Geriye kalan değişme bağıntıları,

$$\left[L_+, L_z\right] = \left[L_x + iL_y, L_z\right] = -i\hbar L_y - \hbar L_x$$

$$= -\hbar L_+ \tag{10-30}$$

ve

$$\left[L_-, L_z\right] = \hbar L_- \tag{10-31}$$

dir. $\left[\vec{L}^{\,2}, \vec{L}\right] = 0$ olduğundan,ayrıca da

$$\left[\vec{L}^{\,2}, L_\pm\right] = 0$$

$$\left[\vec{L}^{\,2}, L_z\right] = 0 \tag{10-32}$$

sonuçları elde edilir.Bu,

$$\vec{L}^{\,2} L_\pm Y_{\ell m} = L_\pm \vec{L}^{\,2} Y_{\ell m} = \ell(\ell+1)\hbar^2 L_\pm Y_{\ell m} \tag{10-33}$$

olduğunu söyler; böylece $L_\pm Y_{\ell m}$'ler de $\vec{L}^{\,2}$'nin ℓ özdeğeri ile belirlenen özfonksiyonlarıdır.Ayrıca,

$$L_z L_+ Y_{\ell m} = (L_+L_z + \hbar L_+)\, Y_{\ell m}$$

$$= m\hbar L_+ Y_{\ell m} + \hbar L_+ Y_{\ell m}$$

$$= \hbar(m+1)\, L_+ Y_{\ell m} \tag{10-34}$$

olduğundan $L_+ Y_{\ell m}$ de L_z'nin bir özfonksiyonudur,fakat m-değeri bir birim artmıştır. Benzer biçimde,

$$L_z L_- Y_{\ell m} = \hbar(m-1)\, L_- Y_{\ell m} \tag{10-35}$$

olduğunu gösterebiliriz; bu yüzden $L_- Y_{\ell m}$ de L_z'nin bir özfonksiyonudur,burada ise m-değeri bir birim azalmıştır.Böylece $L_\pm$'ye sırayla artırma ve azaltma işlemcileri adı verilir.

$$L_\pm Y_{\ell m} = C_\pm(\ell, m)\, Y_{\ell, m\pm 1} \tag{10-36}$$

yazabiliriz.

L_x ve L_y'nin hermitienliğinin sonucu olarak,

$$L_\pm^\dagger = (L_x \pm iL_y)^\dagger = L_x \mp iL_y = L_\mp \tag{10-37}$$

elde edilir.Bu yüzden,

$$\langle L_\pm Y_{\ell m} | L_\pm Y_{\ell m} \rangle \geq 0 \tag{10-38}$$

bağıntısının bir sonucu,

$$\langle Y_{\ell m} | L_\mp L_\pm Y_{\ell m} \rangle \geq 0 \tag{10-39}$$

olur;ve böylece (10-27) ve (10-28) bağıntıları,

$$\langle Y_{\ell m} | (\vec{L}^2 - L_z^2 \pm \hbar L_z) Y_{\ell m} \rangle \geq 0 \tag{10-40}$$

olmasını,yani

$$\begin{aligned} \ell(\ell+1) &\geq m^2 + m \\ \ell(\ell+1) &\geq m^2 - m \end{aligned} \tag{10-41}$$

olmasını gerektirir. $\ell(\ell+1) \geq 0$ olduğundan,genelliği yitirmeden, $\ell \geq 0$ alabiliriz[2]. O zaman,(10-41)

$$-\ell \leq m \leq \ell \tag{10-42}$$

olduğunu gösterir.

Eğer m'nin bir enküçük değeri ($m = m_-$) varsa,buna karşılık gelen özdurum için,

$$L_- Y_{\ell m_-} = 0 \tag{10-43}$$

olur.(10-27)'yi kullanarak ve bunu $Y_{\ell m_-}$'ye uygulayarak m_-'yi hesaplayabiliriz:

$$\ell(\ell+1)\hbar^2 = m_-^2\hbar^2 - m_-\hbar^2 \tag{10-44}$$

elde ederiz.Benzer olarak,m'nin bir enbüyük değeri ($m = m_+$) varsa,

$$L_+ Y_{\ell m_+} = 0 \tag{10-45}$$

olur; ve (10-28)'in enbüyük özduruma uygulanması,

$$\ell(\ell+1)\hbar^2 = m_+^2\hbar^2 + m_+\hbar^2 \tag{10-46}$$

verir.Bu yüzden,

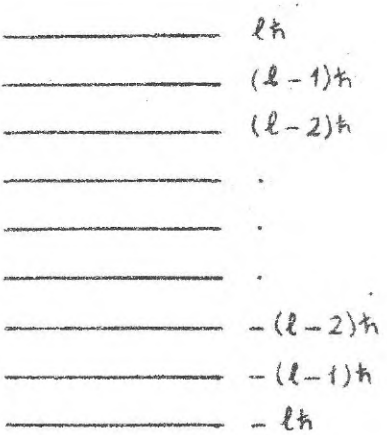
$$\begin{aligned} m_- &= -\ell \\ m_+ &= +\ell \end{aligned} \tag{10-47}$$

bulunur.Enküçük değerden birim adımlarla(L_+'nın ardarda uygulanmasıyla) enbüyük değere ulaşabildiğimizden,şu sonuçları buluruz(Şek.10.1): (a) $(2\ell+1)$ tane durum vardır, yani $2\ell+1$ bir tamsayıdır; (b) m'nin alabildiği değerler,

$$m = -\ell, -\ell+1, -\ell+2, \ldots, \ell-1, \ell$$

dir. ℓ'nin, $\ell = 1/2, 3/2, \ldots$ gibi yarı-tek tamsayı değerler alabileceğini,

[2] Eğer $\ell \leq -1$ bulmuş olsaydık,yalnızca $L = -\ell - 1$'i tanımlayacaktık,ve eski ℓ yerine yeni pozitif L'yi alacaktık.$L(L+1) = \ell(\ell+1)$ olacağından birşey değişmeyecekti.



Şek.10.1. ℓ'nin verilen bir değeri için, L_z işlemcisinin spektrumu.

spinü inceleyeceğimiz Bölüm 14'te tartışacağız. Bu bölümde kendimizi ℓ'nin tamsayı olan değerlerine kısıtlayacağız.

(10-36)'da tanımlanan $C_{\pm}(\ell,m)$ katsayılarını da hesaplayabiliriz.

$$|C_{\pm}(\ell,m)|^2 \langle Y_{\ell,m\pm1} | Y_{\ell,m\pm1}\rangle = \langle L_{\pm} Y_{\ell m} | L_{\pm} Y_{\ell m}\rangle$$
$$= \langle Y_{\ell m} | L_{\mp}L_{\pm} Y_{\ell m}\rangle$$
$$= \langle Y_{\ell m} | (\vec{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z) Y_{\ell m}\rangle$$
$$= \hbar^2[\ell(\ell+1) - m(m\pm1)]$$

olduğundan, uygun bir evre seçerek,

$$C_{\pm}(\ell,m) = \hbar[\ell(\ell+1) - m(m\pm1)]^{1/2} \qquad (10\text{-}48)$$

elde ederiz. İşlemci yöntemleriyle buraya kadar gelebiliriz. Şimdi, özfonksiyonlar için θ ve ϕ küresel açıları cinsinden uygun ifadeler elde etmek için, L_z ve $L_{\pm}$ işlemcilerinin açık biçimlerini kullanacağız. Yapacaklarımız, (7-31)'den (7-35)'e kadarki yaptıklarımıza koşut olacaktır. Önerildiği gibi,

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\, e^{im\phi} \qquad (10\text{-}49)$$

yazalım. (10-45) koşulu,

$$\hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\Theta_{\ell\ell}(\theta)\, e^{i\ell\phi}$$
$$= \hbar e^{i(\ell+1)\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - \ell\cot\theta\right)\Theta_{\ell\ell}(\theta) = 0 \qquad (10\text{-}50)$$

verir.Bu denklemin çözümünün,

$$\Theta_{\ell\ell}(\theta) = (\sin\theta)^{\ell} \tag{10-51}$$

olduğu kolayca bulunur.Çarpan olarak gelecek uygun bir sabit daha sonra boylandırma koşulundan elde edilecektir.İsteksel herhangi bir durum,azaltma işlemiyle

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = C(L_-)^{\ell-m}\,(\sin\theta)^{\ell} e^{i\ell\phi} \tag{10-52}$$

olarak elde edilir.Önce,

$$L_- Y_{\ell\ell}(\theta,\phi) = \hbar e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)(\sin\theta)^{\ell} e^{i\ell\phi}$$
$$= \hbar e^{i(\ell-1)\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} - \ell\cot\theta\right)(\sin\theta)^{\ell}$$

olduğunu gözönüne alalım.İsteksel bir $f(\theta)$ fonksiyonu için,

$$\left(\frac{d}{d\theta} + \ell\cot\theta\right) f(\theta) = \frac{1}{(\sin\theta)^{\ell}}\frac{d}{d\theta}\left[(\sin\theta)^{\ell} f(\theta)\right] \tag{10-53}$$

olduğu gösterilebilir; böylece,

$$Y_{\ell,\ell-1} = C'\frac{e^{i(\ell-1)\phi}}{(\sin\theta)^{\ell}}\left(-\frac{d}{d\theta}\right)\left[(\sin\theta)^{\ell}(\sin\theta)^{\ell}\right] \tag{10-54}$$

elde ederiz.Bundan sonraki adım da, ℓ yerine $\ell-1$ gelmesi dışında aynıdır; ve (10-53)'teki işlemci bu kez (10-54)'te elde edilen fonksiyona etkir.Böylece,

$$Y_{\ell,\ell-2} = C''\frac{e^{i(\ell-2)\phi}}{(\sin\theta)^{\ell-1}}\left(-\frac{d}{d\theta}\right)\left[(\sin\theta)^{\ell-1}\frac{1}{(\sin\theta)^{\ell}}\left(-\frac{d}{d\theta}\right)(\sin\theta)^{2\ell}\right]$$
$$= C''(-1)^2\frac{e^{i(\ell-2)\phi}}{(\sin\theta)^{\ell-1}}\frac{d}{d\theta}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta)^{2\ell}\right] \tag{10-55}$$

bulunur.$u = \cos\theta$, $-1/(\sin\theta)\,(d/d\theta) = d/du$ değişkeni türünden,(10-54) ve (10-55), sırayla

$$Y_{\ell,\ell-1} = C'\frac{e^{i(\ell-1)\phi}}{(\sin\theta)^{\ell-1}}\frac{d}{du}\left[(1-u^2)^{\ell}\right]$$
$$Y_{\ell,\ell-2} = C''\frac{e^{i(\ell-2)\phi}}{(\sin\theta)^{\ell-2}}\frac{d^2}{du^2}\left[(1-u^2)^{\ell}\right] \tag{10-56}$$

verir,ve genel biçim

$$Y_{\ell m} = C\frac{e^{im\phi}}{(\sin\theta)^{m}}\left(\frac{d}{du}\right)^{\ell-m}\left[(1-u^2)^{\ell}\right] \tag{10-57}$$

olur.

Bu özfonksiyonların boylandırılmaları gerekir.Tümlev aralıkları $0 \leq \phi \leq 2\pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$ olan küresel açılar ile uğraştığımızdan(Bkz.Şek.9.1), ve küre yüzeyi üzerinden(r = sabit)tümlev,

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta$$

olduğundan,

$$\langle Y_{\ell m} | Y_{\ell m} \rangle = 1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} du\, |C|^2 \left[\frac{1}{(1-u^2)^{m/2}} \left(\frac{d}{du} \right)^{\ell-m} (1-u^2) \right]^2 \tag{10-58}$$

yazmamız gerekir.Buradaki tümlevin alınması usandırıcıdır.Bu yüzden uygun biçimde boylandırılmış olan $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ 'leri,geleneksel evreleri ile yazmakla yetineceğiz:

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = (-1)^m \left[\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi\ (\ell+m)!} \right]^{1/2} P_\ell^m (\cos\theta) e^{im\phi} \tag{10-59}$$

Bunlar,

$$Y_{\ell,-m} = (-1)^m Y^*_{\ell m} \tag{10-60}$$

özeliğini taşırlar.Bağlı Legendre çokterimlileri,

$$P_\ell^{\,m}(u) = (-1)^{\ell+m} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \frac{(1-u^2)^{-m/2}}{2^\ell \ell!} \left(\frac{d}{du} \right)^{\ell-m} (1-u^2)^\ell \tag{10-61}$$

olarak verilir; bu çokterimlilerin negatif m için değerleri,

$$P_\ell^{\,-m}(u) = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^{\,m}(u) \tag{10-62}$$

bağıntısından elde edilir.Özfonksiyonlardan birkaçını sıralamak,bizim amacımız için yeterli olacaktır:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin\theta$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_{2,2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\phi} \sin^2\theta$$

$$Y_{2,1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin\theta \cos\theta$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2\theta - 1) \qquad (10\text{-}63)$$

(9-40)'da olduğu gibi, $\vec{L}^2$'nin bir özfonksiyona etkimesiyle $\ell(\ell+1)\hbar^2$ elde edildiğini bildiğimizden, şimdi, enerji özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını belirleyen ışınsal diferansiyel denklemi yazabiliriz. Çeşitli potansiyeller için, çok ayrıntılı olarak tartışacağımız denklem,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R_{E\ell m}(r)$$

$$+V(r)\,R_{E\ell m}(r) = ER_{E\ell m}(r) \qquad (10\text{-}64)$$

dir. Bu denklemin m'ye hiç bağlı olmadığını belirtelim. Böylece verilen bir ℓ için, her zaman $(2\ell+1)$ katlı bir katmerlilik olacaktır; çünkü olabilen tüm m-değerleri için enerji aynı olacaktır.

Problemler

1. Bir molekül iki özdeş atomdan oluşuyor; bu atomlar taban durumdadır ve spinleri sıfırdır. Molekülün olabilen uyarılmaları arasında dönel uyarılmalar da vardır. Yalnız z-ekseni etrafındaki dönmeler gözönüne alınırsa, $H = L_z^2/2I$ olur; ve atomlar arasındaki uzaklık sabit alınırsa, dönme spektrumu ne olur? Atomların spini 1/2 ise, ve her ikisi de aynı spin durumundaysa spektrum nedir?

2. (10-63)'te sıralanan küresel harmonikleri $x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$ ve $z = r\cos\theta$ cinsinden ifade ediniz.

3. $P_\ell(u) = P_\ell^0(u)$ Legendre çokterimlileri, (10-61) ifadesi cinsinden tanımlanabilir. Bu tanımı kullanarak, $P_\ell(u)$'nun

$$(1-u^2)\,P_\ell''(u) - 2uP_\ell'(u) + \ell(\ell+1)\,P_\ell(u) = 0$$

denklemini sağladığını gösteriniz.

4. $P_\ell(u)$ Legendre çokterimlilerinin,

$$\ell P_{\ell-1} = u\ell P_\ell + (1-u^2)\,P_\ell'$$

$$(\ell+1)\,P_{\ell+1} = (\ell+1)\,uP_\ell - (1-u^2)\,P_\ell'$$

$$(\ell+1)\,P_{\ell+1} - (2\ell+1)\,uP_\ell + \ell P_{\ell-1} = 0$$

indirgeme bağıntılarını sağladığını gösteriniz.

5. (10-61)'i kullanarak,

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} z^\ell P_\ell(u) = (1-2uz+z^2)^{-1/2} \qquad z < 1$$

olduğunu gösteriniz.

6. Dört boyuttaki dönmeleri tartışmak için bu bölümde özetlenen işlemi kullanınız.L'nin bu duruma genelleştirilmişi,

$$L_{ij} = -i(x_i \partial_j - x_j \partial_i)$$

$(i,j = 1,2,3,4)$ olarak yazılabilen işlemciler kümesidir.

$$(J_1,J_2,J_3) = (L_{23},L_{31},L_{12})$$

ve

$$(K_1,K_2,K_3) = (L_{14},L_{24},L_{34})$$

tanımlayalım.

(a) Bu altı işlemcinin tümünün kendi aralarındaki değişme bağıntılarını bulunuz.

(b)

$$\vec{J}^{(+)} = (\vec{J} + \vec{K}); \quad \vec{J}^{(-)} = (\vec{J} - \vec{K})$$

işlemcilerinden her birinin açısal momentum değişme bağıntılarına uyduğunu ve birbirleriyle saradeğiştirdiğini gösteriniz.Bulduğunuz sonucu kullanarak,karşılıklı olarak saradeğiştiren işlemcilerin kümesini,ve bir özfonksiyonu etiketlemek için kullanılabilecek kuantum sayılarını belirleyiniz.

7. İsteksel bir V(r) potansiyeli içinde ve bir ℓ açısal momentum durumunda olan bir elektronu gözönüne alınız.Elektronu $\vec{r}$ noktasında bulma olasılığının yalnızca $|\vec{r}|$ 'nin bir fonksiyonu olduğunu gösteriniz.

[Yol Gösterme: $(2\ell + 1)$ tane m değeri için çözümlerin katmerli olduğuna ve özel bir sıralama yapılmamışsa,tüm m değerlerinin eşit olasılıklı olduğuna dikkat ediniz.

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell m}(\theta,\phi)|^2 = \frac{2\ell + 1}{4\pi}$$

formülünü kullanınız.]

8. Küresel bakışımlı bir potansiyel içindeki bir parçacık,

$$\psi(x,y,z) = C(xy + yz + zx)e^{-\alpha r^2}$$

dalga paketiyle betimlenen bir durumdadır.Açısal momentumun karesinin ölçümünün 0 vermesi olasılığı nedir? Bunun $6\hbar^2$ vermesi olasılığı nedir? ℓ 'nin değeri 2 olarak bulunmuşsa,m = 2,1,0,-1,-2 için bağıl olasılıklar nelerdir?

9. Kusursuz düzgün bir silindir için şu modeli gözönüne alınız.Bu eşit aralıkla yerleşmiş M/N kütleli özdeş parçacıklardan oluşan R yarıçaplı bir halkadır. Böylece halkanın kütlesi M ve eylemsizlik momenti MR^2'dir.Açısal momentumun olabilen değerlerini hesaplayınız.Enerji özdeğerlerini hesaplayınız.Sıfır açısal momentumlu taban durumu ile ilk dönel durum arasındaki enerji farkı ne kadardır? $N \to \infty$ iken bu farkın sonsuza yaklaşacağını gösteriniz.Bununla,$2\pi/N$ radyanlık dönme altında bakışımlı olmayan"çentilmiş" bir silindirin karşılık gelen enerjisi arasındaki farkı gösteriniz.Bu örneğe göre,kusursuz düzgün bir silindirin döndürülmesi olanaksızdır,

ve böyle olması şu olguyla tutarlıdır: Çok düzgün bir silindir için böyle bir dönme gözlenebilir değildir.

10. $\vec{L}^2$'yi $\partial/\partial\theta$ ve $\partial/\partial\phi$ türünden deyimleyiniz. Denk.(10-49)'da tanımlanan $\Theta_{\ell m}$'nin sağladığı diferansiyel denklemi yazınız.
[Yol gösterme: $z = \cos\theta$ değişkenini kullanınız.] $(\sin\theta)^{\ell}$'nin, bu denklemin $\ell = m$ için olan çözümü olduğunu gösteriniz.

Kaynaklar

Bunlar, sayfa 501'de sıralanan kitapların her birinde bulunan temel konulardır. Dönme altındaki değişmezliğin sonuçlarını daha iyi anlamak için özellikle şu kitaplara bakınız:

K.Gottfried, Quantum Mechanics, Vol.1, W.A.Benjamin, Inc., 1966.

M.E.Rose, Elementary Theory of Angular Momentum, John Wiley and Sons, Inc., 1957.

Bölüm 11

IŞINSAL DENKLEM

(10-64) ışınsal Schrödinger denklemi,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_{n\ell m}(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{n\ell m}(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R_{n\ell m}(r) = 0 \qquad (11\text{-}1)$$

olarak yazılabilir; burada $R_{n\ell m}$ özfonksiyonunun indislerinde, E etiketi yerine n kullandık. Çeşitli potansiyeller için bu denklemin çözümlerini araştıracağız. İnceleyeceğimiz potansiyeller, önemli bir özel hal olan Coulomb potansiyeli dışında, sonsuzda $1/r$'den daha hızlı sıfıra gitmek koşulu ile kısıtlanmıştır. Ayrıca potansiyellerin başlangıç noktasındaki tekilliğinin $1/r^2$'den daha az olduğunu da varsayacağız, öyle ki

$$\lim_{r \to 0} r^2 V(r) = 0 \qquad (11\text{-}2)$$

olsun. Bazen,

$$u_{n\ell m}(r) = r R_{n\ell m}(r) \qquad (11\text{-}3)$$

fonksiyonunu tanımlamak uygun olur.

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{u_{n\ell m}(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} u_{n\ell m}(r) \qquad (11\text{-}4)$$

olduğundan,

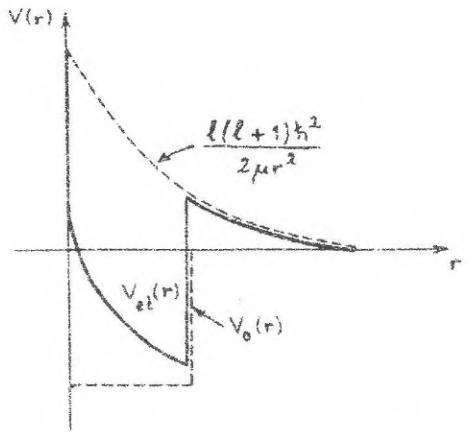
$$\frac{d^2 u_{n\ell m}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u_{n\ell m}(r) = 0 \qquad (11\text{-}5)$$

sonucu çıkar. Bu denklem aşağıdaki değişiklikler dışında bir-boyutlu denkleme pek çok benzer:

(a) V(r) potansiyeli, itici bir merkezcil engelin eklenmesiyle,

$$V(r) \to V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \qquad (11\text{-}6)$$

olarak değişmiştir.



Şek.11-1. Asıl potansiyelin bir kare kuyu olması durumunda, $u = r\,R(r)$'nin ışınsal denklemindeki etkin potansiyel.

(b) $u_{n\ell m}(r)$'nin tanımı ve dalga fonksiyonunun başlangıç noktasındaki sonluluğu,

$$u_{n\ell m}(0) = 0 \tag{11-7}$$

olmasını gerektirir. Bu da problemi daha çok, sol yanda $V = +\infty$ olan bir-boyutlu probleme benzetir (Şek.11.1).

Önce ışınsal denklemi başlangıç noktası yakınında inceleyelim, ve kolaylık bakımından tüm indisleri düşürelim. $r \to 0$ olduğunda, denklemimizdeki baskın terimler

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\,u \simeq 0 \tag{11-8}$$

dir; çünkü (11-2) sağlandığında, yeterince küçük r'ler için potansiyelin katkısı yoktur. Denklemde,

$$u(r) \sim r^s \tag{11-9}$$

deneme çözümünü yerine koyarsak,

$$s(s-1) - \ell(\ell+1) = 0 \tag{11-10}$$

olması koşulu ile denklemin sağlanacağını buluruz; bu koşul, $s = \ell + 1$ ya da $s = -\ell$ verir. $u(0) = 0$ koşulunu sağlayan, yani $r^{\ell+1}$ gibi davranan çözüme düzenli çözüm, $r^{-\ell}$ gibi davranan çözüme de düzensiz çözüm denir.

Büyük r'ler için potansiyel terimini düşürebiliriz,ve denklem

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} u \simeq 0 \qquad (11\text{-}11)$$

biçimini alır.Karelerin tümlenebilmesi koşulu,

$$1 = \int d^3r \ |\psi(\vec{r})|^2 = \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega |R_{n\ell m}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)|^2$$

$$= \int_0^\infty r^2 dr |R_{n\ell m}(r)|^2 \qquad (11\text{-}12)$$

olmasını gerektirir,bu da

$$\int_0^\infty dr |u_{n\ell m}(r)|^2 = 1 \qquad (11\text{-}13)$$

demektir.Bunun sonucu olarak dalga fonksiyonu sonsuzda sıfır olmalıdır.$E < 0$ ise,

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2 \qquad (11\text{-}14)$$

olur,ve asimptotik çözüm

$$u(r) \sim e^{-\alpha r} \qquad (11\text{-}15)$$

biçimindedir.Eğer $E > 0$ ise,ancak bir kutu içinde boylandırılabilen çözümler elde ederiz(Bölüm 4'teki tartışmaya bakınız).

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \qquad (11\text{-}16)$$

olmak üzere,çözüm e^{ikr} ve e^{-ikr}'nin bir çizgisel birleştirimi olacaktır,uygun birleştirim şöyle belirlenir: Asimptotik çözümün,başlangıç noktasında düzenli olan çözüme bağlanışı sürekli olmalıdır.Şimdi birkaç örneği inceleyelim.

A. Özgür Parçacık

Bu örnekte $V(r) = 0$'dır,fakat gene de merkezcil bir engel vardır.(11-1) ışınsal denklemi,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] R(r) + k^2 R(r) = 0 \qquad (11\text{-}17)$$

biçimini alır. $\rho = kr$ değişkenini tanımlarsak,

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} R + R = 0 \qquad (11\text{-}18)$$

elde ederiz.Gerçekten de bu denklem basit fonksiyonlar türünden çözülebilir.Çözümler küresel Bessel fonksiyonları olarak bilinmektedir.Düzenli çözüm,

$$j_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right) \tag{11-19}$$

dir; ve düzensiz çözüm,

$$n_\ell(\rho) = -(-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right) \tag{11-20}$$

dir.İlk birkaç fonksiyon aşağıda sıralanmıştır:

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho} \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho}$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho} \qquad n_1(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}$$

$$j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\rho$$

$$n_2(\rho) = -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\cos\rho - \frac{3}{\rho^2}\sin\rho \tag{11-21}$$

Büyük ρ'lar için ilginç olan birleştirimler küresel Hankel fonksiyonlarıdır:

$$h_\ell^{(1)}(\rho) = j_\ell(\rho) + i n_\ell(\rho) \tag{11-22}$$

ve

$$h_\ell^{(2)}(\rho) = \left[h_\ell^{(1)}(\rho)\right]^* \tag{11-23}$$

Şimdi de,ilk birkaç Hankel fonksiyonunu verelim:

$$h_0^{(1)}(\rho) = \frac{e^{i\rho}}{i\rho}$$

$$h_1^{(1)}(\rho) = -\frac{e^{i\rho}}{\rho}\left(1 + \frac{i}{\rho}\right)$$

$$h_2^{(1)}(\rho) = \frac{i e^{i\rho}}{\rho}\left(1 + \frac{3i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2}\right) \tag{11-24}$$

Özellikle şu durumlar ilginçtir:

(a)Başlangıç noktası yakınındaki davranış: $\rho \ll 1$ için,

$$j_\ell(\rho) \approx \frac{\rho^\ell}{1.3.5....(2\ell+1)} \tag{11-25}$$

ve

$$n_\ell(\rho) \simeq -\frac{1.3.5....(2\ell-1)}{\rho^{\ell+1}} \qquad (11\text{-}26)$$

olur.

(b) $\rho \gg \ell$ için ise,

$$j_\ell(\rho) \simeq \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right) \qquad (11\text{-}27)$$

ve

$$n_\ell(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right) \qquad (11\text{-}28)$$

asimptotik ifadelerini elde ederiz. Böylece de,

$$h_\ell^{(1)}(\rho) \simeq -\frac{i}{\rho}\, e^{i(\rho - \ell\pi/2)} \qquad (11\text{-}29)$$

olur. Başlangıç noktasında düzenli olan çözüm,

$$R_\ell(r) = j_\ell(kr) \qquad (11\text{-}30)$$

dir. (11-27)'nin kullanılması ile, bunun asimptotik biçimi için,

$$R_\ell(r) \simeq -\frac{1}{2ikr}\left[e^{-i(kr-\ell\pi/2)} - e^{i(kr-\ell\pi/2)}\right] \qquad (11\text{-}31)$$

bulunur. Bunu bir "gelen" ve bir "giden" küresel dalganın toplamı olarak betimleriz. Bu terimleşmeye şöyle varılır. Bir-boyutlu akının genelleştirilmişi,

$$\vec{j} = -\frac{\hbar}{2i\mu}\left[\psi^*(\vec{r})\,\vec{\nabla}\,\psi(\vec{r}) - \vec{\nabla}\psi^*(\vec{r})\;\psi(\vec{r})\right] \qquad (11\text{-}32)$$

dir. Büyük r'ler için yalnızca ışınsal doğrultudaki akının ilginç olduğunu göreceğiz. Böylece, tüm açılar üzerinden tümlenmiş olan ışınsal akı,

$$\int d\Omega\;\hat{\imath}_r\cdot\vec{j}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2i\mu}\int d\Omega\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial r}\psi - \frac{\partial\psi^*}{\partial r}\psi\right) \qquad (11\text{-}33)$$

olur.

$$\psi(\vec{r}) = C\,\frac{e^{\pm ikr}}{r}\,Y_{\ell m}(\theta,\phi) \qquad (11\text{-}34)$$

biçimindeki bir çözüm için,

$$\int d\Omega\;|Y_{\ell m}(\theta,\phi)|^2 = 1 \qquad (11\text{-}35)$$

olduğundan

$$\int d\Omega\, j_r = \frac{\hbar}{2i\mu}\,|C|^2\left[\frac{e^{\mp ikr}}{r}\left(\pm ik\,\frac{e^{\pm ikr}}{r}-\frac{e^{\pm ikr}}{r^2}\right)-\text{karmal eşleniği}\right]$$

$$=\pm\frac{\hbar k|C|^2}{\mu}\,\frac{1}{r^2} \qquad (11\text{-}36)$$

elde ederiz. $\pm$ işaretleri giden/gelen akıları gösterir.Hesabımızdan çıkan $1/r^2$ çarpanı,akı korunumu için de gerçekten gereklidir; çünkü r yarıçaplı küre yüzeyinden geçen akı,

$$\int r^2 d\Omega\, j_r = (\text{r 'den bağımsız}) \qquad (11\text{-}37)$$

dir.(11-31) çözümü için gelen akı,$1/r^2$ dışında

$$-\frac{\hbar k}{\mu}\left|\frac{i}{2k}\,e^{i\ell\pi/2}\right|^2 = -\frac{\hbar k}{\mu}\,\frac{1}{4k^2} \qquad (11\text{-}38)$$

olur,ve bu giden akının büyüklüğüne eşittir.Bu yüzden net akı sıfırdır; hiç bir akı kaynağı bulunmadığından,böyle olması da gerekir.

Genel olarak,herhangi bir çözümün —$V(r)\neq 0$ olan çözümleri de kapsayan— biçimi, büyük r'ler için [(11-16)'yı izleyen uslamlamalarla],

$$R_\ell(r)\simeq -\frac{1}{2ikr}\left[e^{-i(kr-\ell\pi/2)}-S_\ell(k)\,e^{i(kr-\ell\pi/2)}\right] \qquad (11\text{-}39)$$

olmalıdır.Akı konumu ise,

$$|S_\ell(k)|^2 = 1 \qquad (11\text{-}40)$$

olmasını gerektirir; böyle olmasaydı,giden akı gelen akıdan farklı olurdu.Mutlak karesi bir olan bir fonksiyon her zaman,

$$S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)} \qquad (11\text{-}41)$$

biçiminde yazılabilir. $\delta_\ell(k)$ gerçel fonksiyonuna <u>evre kayması</u> denir,çünkü asimptotik bölgedeki (11-39) ışınsal fonksiyonu,

$$R_\ell(r) \simeq e^{i\delta_\ell(k)}\,\frac{\sin\left[kr-\ell\pi/2+\delta_\ell(k)\right]}{kr} \qquad (11\text{-}42)$$

olarak yeniden yazılabilir.Öndeki evre çarpanı dışında bu fonksiyon,asimptotik biçimi $[\sin(kr-\ell\pi/2)]/kr$ olan $j_\ell(kr)$ özgür parçacık çözümünden,yalnızca evredeki $\delta_\ell(k)$ kayması kadar ayrılır.

$\hat{\lambda}_\theta$ doğrultusundaki akıda,

$$\hat{\lambda}_\theta\cdot\vec{j} = \frac{\hbar}{2i\mu}\left(\psi^*\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\psi-\text{karmal eşleniği}\right)\sim\frac{1}{r^3}(\ldots)$$

teriminin bulunduğuna dikkat edelim; bu yüzden $r^2 d\Omega$ alan çarpanı ile çarpıldığı zaman, böyle bir akı ışınsal akıdaki başat terime göre $1/r$ gibi sıfıra gider. Bu özellik, büyük uzaklıklarda yalnızca ışınsal akıyı önemli saymamızı doğrular.

B. Kare Kuyu, Bağlı Durumlar

$$V(r) = -V_0 \qquad r < a$$
$$= 0 \qquad r > a \tag{11-43}$$

potansiyelini gözönüne alalım. Bu durum için ışınsal denklem,

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R + \frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E)R = 0 \qquad r < a$$
$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R + \frac{2\mu E}{\hbar^2}R = 0 \qquad r > a \tag{11-44}$$

biçimindedir. $E < 0$ olan bağlı durum çözümlerini arayalım.

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E) = \kappa^2$$
$$\frac{2\mu}{\hbar^2}E = -\alpha^2 \tag{11-45}$$

yazarız. Başlangıç noktasında düzenli olması gereken $r < a$ çözümü,

$$R(r) = A j_\ell(\kappa r) \tag{11-46}$$

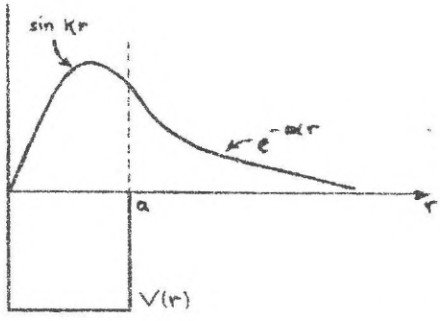
dir. $r > a$ çözümü $r \to \infty$ için sıfır olmalıdır. (11-44) denklemlerinden ikincisi küresel Bessel fonksiyonu denkleminin tam aynısıdır, yalnızca burada k yerine $i\alpha$ gelmiştir. e^{ikr} gibi davranan çözüm, şimdi üstel olarak azalan bir fonksiyon olur; böylece $r > a$ için,

$$R(r) = B h_\ell^{(1)}(i\alpha r) \tag{11-47}$$

buluruz. Bu iki çözüm ve türevleri $r = a$'da birbirlerine eşitlenmelidir. Böylece,

$$\kappa \left[\frac{dj_\ell(\rho)/d\rho}{j_\ell(\rho)}\right]_{\rho=\kappa a} = i\alpha \left[\frac{dh_\ell^{(1)}(\rho)/d\rho}{h_\ell^{(1)}(\rho)}\right]_{\rho=i\alpha a} \tag{11-48}$$

koşulu bulunur. ℓ, V_0 ve E'yi kapsayan bu denklem çok karmaşık transandant bir denklemdir. $\ell = 0$ için, $u(r) = rR(r)$ fonksiyonu kullanılırsa bu denklem oldukça basitleşir. Özdeğerler, $r = a$'da A sin κr ve $Be^{-\alpha r}$'yi eşitleyerek elde edilir. Ayrıntılar, bir



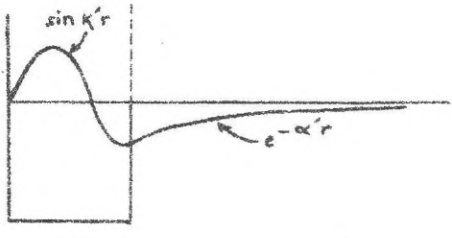
Şek. 11-2. Çekici bir kare kuyu için, bağlı bir durum olduğunda ($\ell = 0$), $u(r) = rR(r)$ dalga fonksiyonunun biçimi.

alıştırma olarak,okura bırakılmıştır; birinci ve ikinci bağlı durumların $u(r)$ ışınsal dalga fonksiyonunun biçimi Şek.11-2 ve 11-3'te gösterilmiştir.

$Ka \gg \ell$ olduğu çok derin bir potansiyel hali için,Denk.(11-48)'e dönelim.Bu halde denklemin sol yanı basitleşir; böyle olduğunu $j_\ell(\rho)$ 'nun asimptotik biçimini kullanarak doğrulayabiliriz.Hesaplama,(11-48)'in

$$-\frac{1}{a} + K \cot\left(Ka - \frac{\ell\pi}{2}\right) = (\text{sağ yan}) \qquad (11\text{-}49)$$

biçimini alacağını gösterir.Sağ yanda,V_0 bulunmaz,ve $|E| \ll V_0$ ise, Ka'nın büyük



Şek. 11-3. Çekici bir kare kuyu için bağlı iki durum olduğunda ($\ell = 0$), $u(r) = rR(r)$ dalga fonksiyonunun biçimi.Bu şekilde,yalnızca ikinci bağlı durumun dalga fonksiyonu çizilmiştir.

olması,kotanjantın sıfıra yakın olmasını içerir.Böylece yaklaşık olarak,

$$k_0 a - \frac{\ell\pi}{2} \simeq (n + \frac{1}{2})\pi \qquad (11\text{-}50)$$

elde ederiz.$|E| \ll V_0$ için,

$$k \simeq k_0\left(1 + \frac{E}{2V_0}\right) \qquad (11\text{-}51)$$

olur,burada

$$k_0^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \qquad (11\text{-}52)$$

dir; böylece Denk.(11-50),

$$\frac{E}{2V_0} = -1 + \frac{[n + (\ell + 1)/2]\pi}{k_0 a} \qquad (11\text{-}53)$$

verir.Bu yüzden,tüm $\ell \ll k_0 a$'lar için,kuyunun dibinden uzaktaki düzeyler yaklaşık olarak eşit aralıklıdır,ve aralık

$$\frac{\Delta E}{2V_0} \simeq \frac{\pi}{k_0 a} \qquad (11\text{-}54)$$

dır.

Bu konuyla ilgili bir problem üç boyutlu sonsuz kutudur.Burada

$$\begin{aligned} V(r) &= 0 \qquad r < a \\ &= \infty \qquad r > a \end{aligned} \qquad (11\text{-}55)$$

dır; ve

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \qquad (11\text{-}56)$$

dersek,r = 0'da düzenli olan çözüm,

$$R(r) = A\, j_\ell(kr) \qquad (11\text{-}57)$$

olur.Özdeğerler,r = a'da çözümün sıfır olması,koşuluyla belirlenir:

$$j_\ell(ka) = 0 \qquad (11\text{-}58)$$

Birkaç ℓ değeri için kökler aşağıda sıralanmıştır.

$\ell = 0$	1	2	3	4	5
3.14	4.49	5.76	6.99	8.18	9.36
6.28	7.73	9.10	10.42		
9.42					

Verilen bir ℓ için birinci kökü n = 1 ile,ikinci kökü n = 2 ile,v.b. olarak etiketlersek,ve ℓ değerleri için benimsenmiş olan,

$$S : \ell = 0$$
$$P : \ell = 1$$
$$D : \ell = 2$$
$$F : \ell = 3$$
$$G : \ell = 4$$

spektroskopik yazımını kullanırsak[1],düzeylerin ortaya çıktığı sıra,

1S; 1P; 1D; 2S; 1F; 2P; 1G; 2D; 1H; 3S;...

olur.

Böyle bir sonsuz kutu içinde bulunan nötron ve protonlardan oluşmuş bir çekirdek modelini gözönüne alalım.Nötronlar ve protonlar 1/2 spinli parçacıklar,yani fermionlar olduklarından,verilen bir durumda ikiden fazla nötron ya da proton bulunamaz.Protonları düşünüyorsak,1S durumunda yalnızca iki proton bulunabileceğini gözleriz.Bundan sonraki düzeyde $\ell = 1$ olduğundan üç durum vardır,ve bu düzeyi altı proton doldurur.1D düzeyi için m'nin olabilen beş değeri vardır($\ell = 2$ olduğundan), böylece bu "kabuğu" doldurmak için on proton gerekir.Böylece,proton sayıları 2,8(= 2+6), 18(= 2+6+10),20(= 18+2), 34(= 20+14),40,58,68,90,92,106,.... olduğunda, düzeyler dolmuş olacaktır,ve benzer durum nötronlar için de geçerlidir.Çekirdeklerin gerçek bir incelemesi,proton ve nötronların "sihirli" sayılarının 2,8,20,28,50,82, 126,... olduğunu;yani çekirdeklerin,kapalı kabuklar veren dolmuş düzeylere bağlı özel nitelikler sergilediklerini gösterir.Gerçek "sihirli" sayılarla bizim ilkel modelimizden elde edilenler arasındaki fark,spine bağlı olan ve düzeyleri bir parça kaydırarak sayıları yeniden sıralayan bir ek potansiyel bulunmasından gelir.Kabuk modeli tam anlamıyla kurulursa,çekirdeğin pek çok özeliğini açıklar.Açık olmayan şey,çekirdeğin neden bir kutu içindeki parçacıklar topluluğu gibi davrandığıdır.

C. Kare Kuyu,Sürekli Çözümler

$E > 0$ olduğunda,

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \qquad (11\text{-}59)$$

[1] Bu yazımın tarihsel kökeni,spektrum çizgilerinin Sharp(keskin),Principal (baş,başlıca) Diffuse (yaygın),.... olarak nitelenmelerine ve bunların sonradan benimsenmesine dayanır.Bu yazımın çok anlamı yoktur,fakat yerleşmiştir.Buradaki yazım atom fiziğindekinden değişiktir.Atom fiziğinin geleneksel yazımında ℓ-değeri indislere eklendiğinden,sıralanış

1S,2P,3D,4S,4F,3P,5G,4D,6H,3S,....

olarak yazılır.

yazarız.r > a çözümü,alan bulunmayan denklemin düzenli ve düzensiz çözümlerinin bir birleştirimi olacaktır:

$$R_\ell(r) = Bj_\ell(kr) + Cn_\ell(kr) \tag{11-60}$$

Oysa r < a çözümü,düzenli olan

$$R_\ell(r) = Aj_\ell(\kappa r) \tag{11-61}$$

çözümü olmalıdır.Önceki gibi,burada da

$$\kappa^2 = \frac{2\mu(E + V_0)}{\hbar^2} \tag{11-62}$$

dir.

r = a'da, $\frac{1}{R_\ell}\frac{dR_\ell}{dr}$ fonksiyonlarının eşitlenmesi

$$\kappa\left[\frac{dj_\ell(\varsigma)/d\varsigma}{j_\ell(\varsigma)}\right]_{\varsigma=\kappa a} = k\left[\frac{Bdj_\ell/d\varsigma + Cdn_\ell/d\varsigma}{Bj_\ell(\varsigma) + Cn_\ell(\varsigma)}\right]_{\varsigma=ka} \tag{11-63}$$

verir,ve buradan C/B oranı hesaplanabilir.Bu oran,(11-42)'de görülen evre kaymasına bağlanabilir.Bunu,şöyle yaparız: (11-60)'ın,büyük r için

$$R_\ell(r) \simeq \frac{B}{kr}\left[\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) - \frac{C}{B}\cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)\right] \tag{11-64}$$

olan asimptotik biçimini,(11-42) ile karşılaştırmak gerekir.(11-42),

$$R_\ell(r) \simeq \frac{1}{kr}\left[\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)\cos\delta_\ell(k) + \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)\sin\delta_\ell(k)\right]$$

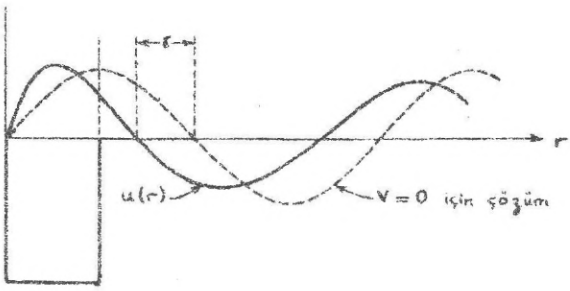
olarak yeniden yazılırsa,

$$\frac{C}{B} = -\tan\delta_\ell(k) \tag{11-65}$$

bağıntısının sağlandığı görülür.

C/B'nin (11-63)'ten gerçek hesabı, $\ell = 0$ dışında usandırıcıdır.Bağlı durum probleminde olduğu gibi,u(r) = rR(r)'nin kullanılması hesabı büyük ölçüde kolaylaştırır.ten δ_0 için bir ifade elde etmek,yalnızca A sin κr'nin r = a'da B sin kr + C cos kr'ye eşitlenmesinâ gerektirir.Bu halin sonuçları Şek.11.4 ve 11.5'te şema olarak çizilmiştir.Bu şekiller,çekici potansiyelin dalga fonksiyonunu içe çekme eğiliminde,itici potansiyelin ise dışa itme eğiliminde olduğunu gösterir.Bölüm 24'te çarpışma kuramını tartışırken bu konulara döneceğiz.

Bu bölümü bitirmeden önce,özgür parçacık denklemini iki yoldan çözerek elde edebileceğimiz önemli bir bağıntı üzerinde duracağız.Çözümlerin biri için,ayrılmış



Şek. 11-4. Çekici potansiyel için, $u(r) = rR(r)$ sürekli çözümü ($\ell = 0$).

olan (11-30) çözümlerinin uygun $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ küresel harmonikleri ile çarpımlarının bir üstüste gelmesi olarak,

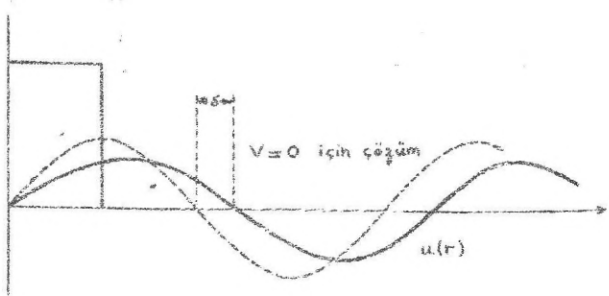
$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} A_{\ell m} j_\ell (kr)\, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \qquad (11\text{-}66)$$

bulunur.

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)\ \psi(\vec{r}) = 0 \qquad (11\text{-}67)$$

biçimindeki özgür parçacık denkleminin bir çözümünde açısal ve ışınsal kısımlar ayrılmamıştır; bu çözüm,

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad (11\text{-}68)$$



Şek. 11-5. İtici potansiyel için, $u(r) = rR(r)$ sürekli çözümü ($\ell = 0$).

düzlem dalgasıdır.Bu yüzden, $A_{\ell m}$'yi (11-66)'da $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ yazarak bulabiliriz.(θ, ϕ) küresel açıları, $\vec{r}$ vektörünün isteksel olarak seçilmiş bir z eksenine göre koordinatlarıdır(Bkz. Şek. 9.1). z ekseninin doğrultusunu,k'nın doğrultusu olarak tanımlarsak (şimdiye kadar isteksel bir doğrultuydu),

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos\theta} \tag{11-69}$$

olur.Böylece,(11-66)'nın sol yanı ϕ başucu açısına bağlı olmaz,ve bu yüzden sağ yanda yalnız $m = 0$ olan terimler görünebilir.Böylece,P_ℓ $(\cos\theta)$'lar Legendre çokterimlileri olmak üzere,

$$Y_{\ell 0}(\theta, \phi) = \left(\frac{2\ell+1}{4\pi}\right)^{1/2} P_\ell(\cos\theta) \tag{11-70}$$

olduğunu kullanırsak,

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{2\ell+1}{4\pi}\right)^{1/2} A_\ell\, j_\ell(kr)\, P_\ell(\cos\theta) \tag{11-71}$$

bağıntısını elde ederiz.$Y_{\ell m}$'lerin dikeyboyluluk bağıntısının ve (11-70)'in doğrudan bir sonucu olan,

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, P_\ell(\cos\theta)\, P_{\ell'}(\cos\theta) = \frac{\delta_{\ell\ell'}}{2\ell+1} \tag{11-72}$$

bağıntısını kullanarak,

$$A_\ell\, j_\ell(kr) = \frac{1}{2}\left[4\pi(2\ell+1)\right]^{1/2}\int_{-1}^{1} dz P_\ell(z)\, e^{ikrz} \tag{11-73}$$

buluruz.Tümlev için,bir çizelgeye bakılabilir; ya da tümlev,$kr \to 0$ limitinde iki yanı karşılaştırarak hesaplanabilir.Her iki durum da,sonuç olarak

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)\, i^\ell\, j_\ell(kr)\, P_\ell(\cos\theta) \tag{11-74}$$

açılımını verir; bu açılım,çarpışma kuramının tartışılmasında çok yararlı olacaktır.

Problemler

1. Çekici bir kare kuyu için, $\ell = 0$ bağlı durumlarını gözönüne alınız.Bağlı bir durum için özdeğer koşulunu bulunuz.Ancak bağlı olan bir durum için potansiyelin derinliği ne kadardır?

2. Döteronun (eşit kütleli bir nötron ve bir protondan oluşan),bir $\ell = 0$ bağlı durumu olduğunu,ve potansiyelin kare biçimli olduğunu varsayınız; potansiyelin

erişimi r = 2.8×10^{-13} cm olsun.Bağlanma enerjisi −2.8 MeV olarak veriliyor,potansiyelin derinliğini bulunuz.

(İpucu: Problem 1'de tartışılan sıfır bağlanma enejisi durumu çevresinde açılım yapınız).

3. Nötron-proton saçılmasını gözönüne alınız; nötron proton etkileşmesinin,erişimi 2.8×10^{-13} cm ve derinliği 20 MeV olan bir kare kuyu potansiyeli aracılığı ile olduğunu varsayınız. $\ell = 0$ için çok düşük enerjilerdeki evre kaymasını enerjinin bir fonksiyonu olarak hesaplayınız.

4. Bir kare kuyu potansiyeli için $\ell = 0$ evre kaymasını hesaplayınız.Denk. (11-65)'ten sonra özetlenmiş olan işlemi kullanarak,çekici ve itici potansiyel hallerinin ikisi için de hesaplayınız.E'nin büyük ve küçük,V_o'ın büyük ve küçük olması gibi çeşitli limitleri tartışınız.

5. İstekselerişimdeve V_o derinliğindeki bir kare kuyu için $\ell = 0$ saçılmasında evre kaymasının her zaman,

$$k \cot \delta_o = -\frac{1}{a} + r_{et} k^2/2 + 0(k^4)$$

gibi bir açılım olarak yazılabileceğini gösteriniz.a ve r_{et} için kuyunun parametreleri türünden bir ifade elde ediniz.

6. $r \geq a$'da sıfır olan isteksel biçimli bir potansiyeli göz önüne alınız.Potansiyel içindeki ışınsal fonksiyonun

$$\frac{1}{R}\frac{dR(r)}{dr}\bigg|_{r=a} = f_\ell(E)$$

logaritmik türevi,enerjinin yavaş değişen bir fonksiyonu olsun. $\ell = 0$ olduğunu düşünmüyüz.

(a) Potansiyelin E_B enerjili bir bağlı durumu varsa,$f_o(E_B)$'nin değeri nedir?

(b) $f_o(E)$,E'den bağımsızsa,enerjinin bir fonksiyonu olarak evre kayması ne olur?

(c) Eğer $f_o(E) = f_o(E_B) + (E-E_B)f_o'$ ise,f_o' evre kaymasına nasıl girer?

Evre kayması yerine,(b) ve (c)'yi $k \cot \delta_o(k)$ türünden hesaplamak daha basittir,ve sonuçlarınızı göstermek bakımından yeğlenebilir bir yoldur.

7. $\delta_\ell(k)$'nın,neden k'nın bir tek fonksiyonu olacağı konusunda genel bir uslamlama veriniz.Kare kuyu için de böyle olduğunu doğrulayınız [örneğin (11-65)'i kullanarak] .$S_\ell(k)$, (11-41)'de tanımlandığına göre,

$$S_\ell(-k) = S_\ell^*(k)$$

olduğunu gösteriniz.

8. $S_\ell(k)$ fonksiyonunu,

$$V(r) = \infty \qquad r < a$$
$$V(r) = 0 \qquad r > a$$

biçimindeki bir potansiyel için hesaplayınız. $\ell = 0$ evre kaymasını gözönüne alınız. Bu evre kayması çok küçük ka için nedir?Çok büyük ka için nedir?Bu potansiyelin,içine sızılamayan bir küre için bir model olduğuna dikkat ediniz.

9. (11-63) çözümü ile birlikte,küresel Bessel fonksiyonlarının (11-25) ve (11-26)'da verilen,başlangıç noktası yakınındaki değerlerini kullanarak,$k \to 0$ için tan $\delta_\ell(k) \to 0$ olacağını gösteriniz.Verilen bir ℓ için,bu hangi hızla sıfıra yaklaşır?

10.

$$V(r) = V_0 \left[e^{-2(r-r_0)/a} - 2\, e^{-(r-r_0)/a} \right]$$

potansiyeli için (Morse potansiyeli olarak bilinen) $\ell = 0$ ışınsal denklemini gözönüne alınız.Diferansiyel denklemi basitleştirerek,enerji özdeğerlerini bulunuz.Bunu yapmak için,yeni bir $x = Ce^{-r/a}$ değişkeni tanımlayarak,buradaki C'yi denklemi olabildiğince kolaylaştıracak biçimde seçiniz; sonra da denklemi,Bölüm 5'de incelenen basit harmonik salınıcı problemindeki yolla işleyiniz.

Potansiyeli çiziniz.Derin ve geniş bir potansiyel için,potansiyelin dibinde uzanan bağlı durumların bir harmonik salınıcının bağlı durumlarına yaklaştığını gösteriniz ve bunun nedenini açıklayınız.

Kaynaklar

Kuantum mekaniği çerçevesindeki ikinci basamaktan diferansiyel denklemlerin genel özelikleri şu kitapta tartışılmıştır:

J.L.Powell and B.Craseman,Quantum Mechanics,Addison-Wesley ,Inc.,1961.

Böyle denklemlerin daha geniş bir tartışması ise şu kitapta bulunabilir:

P.M.Morse and H.Feshbach,Methods of Theoretical Physics,McGraw-Hill Book Co., Inc.,1953.

Bölüm 12

Hidrojen Atomu

Hidrojen atomu en basit atomdur,çünkü yalnızca bir elektronu vardır.Böylece Schrödinger denklemi,kütle merkezi hareketi ayrıldıktan sonra bir bir-parçacık denklemi olur.Burada yalnızca bir elektronu bulunan hidrojenimsi atomları inceleyeceğiz, fakat çekirdeğin bir tek protondan daha karmaşık olmasına izin vereceğiz.Böylece potansiyel,

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \tag{12-1}$$

olur; ve ışınsal Schrödinger denklemi,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]R = 0 \tag{12-2}$$

verir.Bağlı durumlar,yani $E < 0$ çözümleri üzerinde duracağız.Bir

$$\rho = \left(\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2} r \tag{12-3}$$

değişken değiştirmesi yapmak uygundur.O zaman denklem,

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}R + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4}\right)R = 0 \tag{12-4}$$

verir; burada

$$\lambda = \frac{Ze^2}{\hbar}\left(\frac{\mu}{2|E|}\right)^{1/2} = Z\alpha\left(\frac{\mu c^2}{2|E|}\right)^{1/2} \tag{12-5}$$

boyutsuk parametresini tanımladık.Denklemin ikinci biçimi hesabı kolaylaştırır; çünkü $\alpha = 1/137$'dir,ve enerji durgun kütle birimleri cinsinden ifade edilmiştir.Bununla birlikte,birinci biçim,c ışık hızının gerçekten denklemde görünmediğini,yani bu denklemin tam olarak göresiz bir denklem olduğunu açıkça gösterir.

(12-4) denklemini, artık alıştığımız bir yolla çözmeye çalışalım. Önce büyük ρ davranışını çıkaralım. Büyük ρ için denklemde kalan terimler,

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R \simeq 0 \qquad (12\text{-}6)$$

dır; ve sonsuzdaki davranışı uygun olan çözüm $R \sim e^{-\rho/2}$'dir. Harmonik salıngan incelememizdeki gibi,

$$R(\rho) = e^{-\rho/2}\, G(\rho) \qquad (12\text{-}7)$$

yazalım; bunu (12-4)'te yerine koyarak, $G(\rho)$ için bir denklem elde ederiz. Burada yeniden vermeyeceğimiz biraz cebirle,

$$\frac{d^2G}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right) \frac{dG}{d\rho} + \left[\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] G = 0 \qquad (12\text{-}8)$$

denklemi bulunur. Şimdi $G(\rho)$ için,

$$G(\rho) = \rho^{\ell} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \qquad (12\text{-}9)$$

biçimindeki kuvvet serisi açılımını yapalım. $R(\rho)$'nun, ve dolayısıyla $G(\rho)$'nun başlangıç noktasında ρ^{ℓ} gibi davrandığı, Bölüm 11'in başında (11-2)'yi sağlayan tüm potansiyeller için gösterilmiştir. (12-9), diferansiyel denklemde yerine konursa, çeşitli a_n katsayıları arasında bir bağıntı buluruz. İndirgeme bağıntısı şu diferansiyel denklemden elde edilir: (12-8)'de, $G(\rho) = \rho^{\ell} H(\rho)$ yazılırsa,

$$H(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \qquad (12\text{-}10)$$

açılımı

$$\frac{d^2H}{d\rho^2} + \left(\frac{2\ell+2}{\rho} - 1\right) \frac{dH}{d\rho} + \frac{\lambda - 1 - \ell}{\rho} H = 0 \qquad (12\text{-}11)$$

diferansiyel denklemini sağlar. Buradan

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[n(n-1) a_n \rho^{n-2} + n a_n \rho^{n-1} \left(\frac{2\ell+2}{\rho} - 1\right) + (\lambda - 1 - \ell) a_n \rho^{n-1} \right] = 0 \qquad (12\text{-}12)$$

ya da

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left\{ (n+1) \left[n a_{n+1} + (2\ell+2) a_{n+1} \right] + (\lambda - 1 - \ell - n) a_n \right\} \rho^{n-1} = 0$$

buluruz. Bu bağıntının her teriminin sıfır olması gerektiğinden,

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n + \ell + 1 - \lambda}{(n+1)(n+2\ell+2)} \tag{12-13}$$

indirgenme bağıntısını elde ederiz.Büyük n için bu oran,

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} \simeq \frac{1}{n} \tag{12-14}$$

olur,ve harmonik salıngan probleminde olduğu gibi,(12-9) serisi sonlu olmadıkça,sonsuzda iyi davranan bir $R(\varrho)$ çözümü bulamayız.Buna göre,verilen bir ℓ için,bir $n = n_r$ değerinde,

$$\lambda = n_r + \ell + 1 \tag{12-15}$$

olmalıdır.Şimdi,n <u>baş kuantum sayısını</u>

$$n = n_r + \ell + 1 \tag{12-16}$$

olarak tanımlayalım.O zaman,$n_r \geq 0$ olduğundan şu sonuçlar çıkar:

1. $n \geq \ell + 1$'dir.
2. n bir tamsayıdır.
3. $\lambda = n$ bağıntısı,

$$E = -\frac{1}{2}\ \mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \tag{12-17}$$

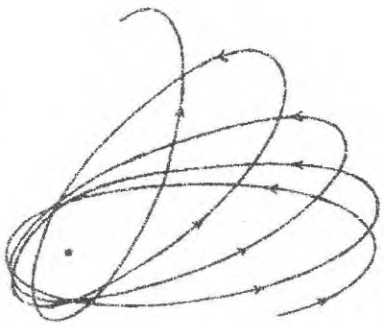
olmasını içerir; Bu,eski Bohr modelinin alışılmış bir sonucudur.Bu ifadede <u>indirgenmiş kütlenin</u> bulunduğuna dikkat ediniz; kuşkusuz,diferansiyel denklem yaklaşımında böyle olması garip değildir.Eski Bohr kuramında,klasik yörüngelerin uygun bir incelemesi,sonradan açısal momentumun kuantumlanma koşuluyla kısıtlanmıştır; bu incelemede de,enerji formülünde indirgenmiş kütlenin kullanılması gerekmiştir.m elektron kütlesi ve M çekirdeğin kütlesi olmak üzere,

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \tag{12-18}$$

indirgenmiş kütlesinin varlığı şu anlama gelir:

$$\omega_{ij} = \frac{E_i - E_j}{\hbar} = \frac{mc^2/2\hbar}{1 + m/M} (Z\alpha)^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right) \tag{12-19}$$

frekansları,çeşitli hidrojenimsi atomlarda atomdan atoma biraz değişik olur.Özellikle,hidrojen ve döteryum—döteryumda,M çekirdek kütlesi proton kütlesinin iki katına



Şek. 12-1. Tam olarak 1/r biçiminde olmayan bir potansiyel için,yörüngeler birbiri üzerine kapanmaz ve burada gösterildiği gibi eğirilir.Potansiyel ışınsal oldukça, yörüngeler düzlemsel kalır.

çok yakındır—spektrumları arasındaki fark,1932'de Urey ve çalışma arkadaşlarının döteryumu bulmalarına yol açmıştı[1].

Enerji ℓ'ye bağlı değildir,yani verilen bir n için $\ell+1 \leq n$ olan tüm durumların enerjileri katmerlidir.Işınsal denklem m'ye bağlı olmadığından,verilen bir ℓ için enerji durumlarında $(2\ell+1)$ katlı bir katmerlilik olmasını bekliyorduk; burada ise,ışınsal denklemin ℓ'ye bağlı olmasına karşın ek bir katmerlilik bulduk.Hiçbir açık nedeni olmadığından,böyle bir katmerliliğe önceleri "raslantısal" denmiştir.Fakat bu,"açıklık"tan ne anlaşıldığına bağlıdır.Zaten 1/r potansiyelinin bazı özel yanları olduğu klasik mekanikten bilinir: Yörüngeler,eğirilen yörüngeler biçiminde (Şek.12-1) olmak yerine,uzaydaki yönelimini koruyan elipslerden oluşur.Potansiyeldeki ufak bir değişiklik bir eğirilmeye neden olur.Böyle değişiklikler çeşitli kaynaklardan gelebilir,örneğin,Kepler probleminde başka gezegenlerden ileri gelen tedirgenmeler.Merkür'ün gezegensel yörüngesi incelenirken,öbür gezegenlerin etkilerinin göz önüne alınmasıyla,Merkür'ün yörüngesinin güneşe en yakın noktasının yüzyıl başına 42" 'lik bir eğirilmesinin hesaba katılmadığı bulunmuştu.Ve bu,sonunda Einstein'ın genel görelik kuramı ile açıklanmıştı; bu kuram, 1/r Newton potansiyeline $1/r^2$ potansiyelinin tam katkısının ekleneceğini öngörür.

Kuantum mekaniğinde de tedirgenmeler vardır; bu yüzden ℓ'nin katmerliliği

[1] Kuşkusuz,spektrum çizgilerinde göreli olaylardan ve elektron spininin varlığından doğan başka kaymalar da vardır.Bunlar daha sonra tartışılacaktır.

aslında gözlendiği gibi değildir.Gene de,ilk yaklaşıklıkta verilen bir n için ℓ'nin olabilen değerleri $\ell = 0,1,2,\ldots(n-1)$ olur,ve bunların herbiri için $(2\ell+1)$ -katlı katmerlilik vardır.Böylece toplam katmerlilik sayısı,

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2 \tag{12-20}$$

dir.Daha kesin konuşursak,spini nedeniyle elektron için olabilen iki durum olduğundan,doğru katmerlilik sayısı aslında $2n^2$'dir.

Şimdi diferansiyel denkleme dönelim.(12-13) indirgeme bağıntısında, $\lambda = n$ alınırsa

$$a_{k+1} = \frac{k+\ell+1-n}{(k+1)(k+2\ell+2)}\, a_k \tag{12-21}$$

olur,ve

$$a_{k+1} = (-1)^{k+1} \frac{n-(k+\ell+1)}{(k+1)(k+2\ell+2)} \cdot \frac{n-(k+\ell)}{k(k+2\ell+1)} \cdots \frac{n-(\ell+1)}{1\,.(2\ell+2)} \tag{12-22}$$

olduğunu buluruz.Bu denklem yardımıyla,$H(\varrho)$ için kuvvet serisi açılımını elde edebiliriz.Eşdeğer olarak da,$H(\varrho)$'nun denkleminin bağlı Laguerre çokterimlilerinin denklemi olduğunu gözleriz:

$$H(\varrho) = L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\varrho) \tag{12-23}$$

Matematiksel yazında ,bu çokterimlilerin çizelgesi ve çeşitli özelikleri bulunabilir[2].

Yeniden r ışınsal koordinatına dönülür ve boylandırma yapılırsa,ilk birkaç ışınsal fonksiyon hesaplanabilir.Bunlar aşağıda sıralanmıştır.$R_{n\ell}(r)$'lerin aşağıdaki çizelgesinde,

$$a_o = \frac{\hbar}{\mu c \alpha} \tag{12-24}$$

niceliği kullanılmıştır:

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_o}$$

$$R_{20}(r) = 2\left(\frac{Z}{2a_o}\right)^{3/2} \left(1-\frac{Zr}{2a_o}\right) e^{-Zr/2a_o}$$

[2] Son derece yararlı bir kitap: M-Abramowitz and I.A.Stegun (eds.), Handbook of Mathematical Functions,National Bureau of Standards Publication,1964.

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_o}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_o} e^{-Zr/2a_o}$$

$$R_{30}(r) = 2\left(\frac{Z}{3a_o}\right)^{3/2} \left[1 - \frac{2Zr}{3a_o} + \frac{2(Zr)^2}{27\,a_o^2}\right] e^{-Zr/3a_o}$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_o}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_o} \left(1 - \frac{Zr}{6a_o}\right) e^{-Zr/3a_o}$$

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_o}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_o}\right)^2 e^{-Zr/3a_o} \qquad (12\text{-}25)$$

Aşağıdaki nitel özelikler özçözümlerin örnek olarak denenmesinden ortaya çıkmıştır:

(a) Küçük r için r^{ℓ} davranışı, dalga fonksiyonunu ℓ ile artan bir yarıçap erişiminde küçük kalmaya zorlar. Bu davranış, elektronların çekirdeğe yaklaşmasını önleyen itici merkezkaç engelin bir sonucudur.

(b) İndirgenme bağıntısı, $H(\rho)$'nun $n_r = n - \ell - 1$'inci dereceden bir çokterimli olduğunu, ve böylece ışınsal doğrultuda n_r tane düğümü (sıfırları) olduğunu gösterir.

$$P(r) = r^2 \left[R_{n\ell}(r)\right]^2 \qquad (12\text{-}26)$$

olasılık yoğunluğu dağılımında $n - \ell$ tane "tümsek" olacaktır. Verilen bir n için, ℓ kendisinin $\ell = n - 1$ en büyük değerindeyken, yalnız bir tümsek vardır. (12-25)'-in söylediği ve diferansiyel denklemin çözümünden görülebileceği gibi,

$$R_{n,n-1}(r) \propto r^{n-1} e^{-Zr/a_o n} \qquad (12\text{-}27)$$

olur. Bu yüzden $P(r) \propto r^{2n} e^{-2Zr/a_o n}$ olasılığı, r'nin

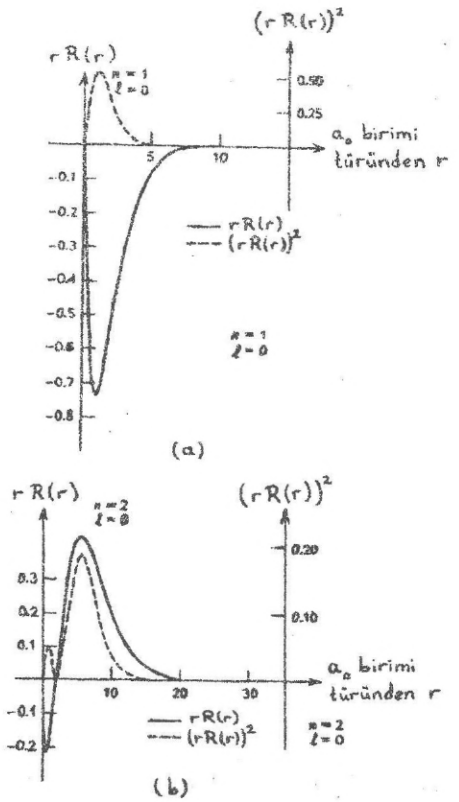
$$\frac{dP(r)}{dr} = \left(2nr^{2n-1} - \frac{2Z}{a_o n} r^{2n}\right) e^{-2Zr/a_o n} = 0 \qquad (12\text{-}28)$$

denklemiyle belirlenen,

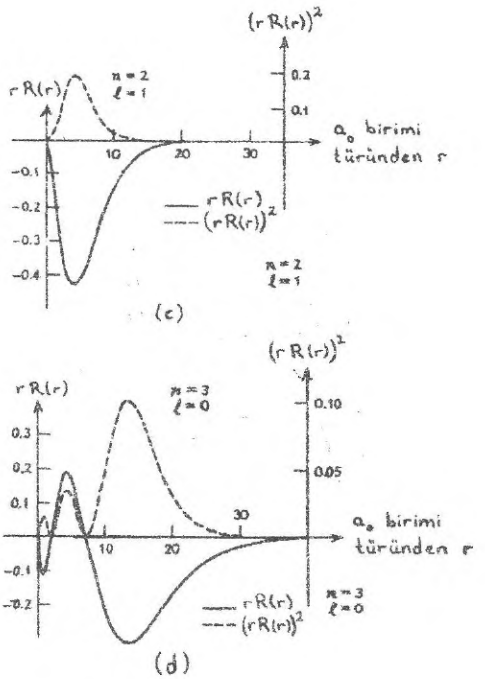
$$r = \frac{n^2 a_o}{Z} \qquad (12\text{-}29)$$

değerinde tepe verecektir. Bu r değeri, dairesel yörüngeler için Bohr atomu değeridir. ℓ'nin daha küçük değerleri, olasılık dağılımında daha çok tümsek verir. Bunların, büyük kuantum sayıları sınırındaki eliptik yörüngelere karşılık geldiği gösterilebilir.

(c) Elektronun başlangıç noktasından bir r uzaklığında bulunma olasılığını gösteren P(r) ışınsal olasılık yoğunluğunun çizimleri, dalga fonksiyonlarının yardımıyla yapılabilir. Şek.12-2 genel deseni gösterir. Dalga fonksiyonunun da açısal bir parçası olduğunu anımsamalıyız, bu kısmın mutlak karesi $P_{\ell}^{m}(\cos\theta)^2$'dir. $P_{\ell}^{m}(\cos\theta)$ bağlı Legendre fonksiyonlarının çizimleri Şek.12.3'te verilmiştir. m arttıkça, olasılık yoğunluğunun

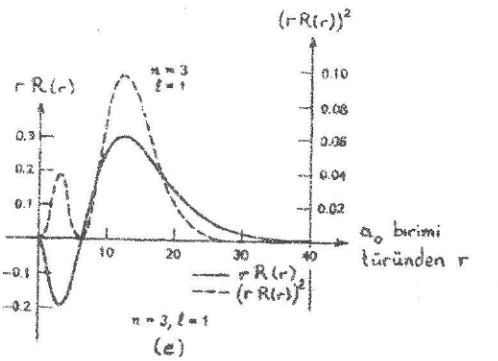


Şek. 12-2. n = 1,2,3,4 değerleri ve ℓ'nin olabilen değerleri için u(r) = rR(r) ışınsal dalga fonksiyonları ve $u^2(r)$ ışınsal olasılık yoğunluğu fonksiyonu. Soldaki ordinat u(r)'yi ve sağdaki ordinat $u^2(r)$'yi ölçmektedir. Dalga fonksiyonları sürekli ve olasılık yoğunlukları kesikli çizgilerle verilmiştir. Apsis r'yi a_0 birimleri cinsinden ölçmektedir.

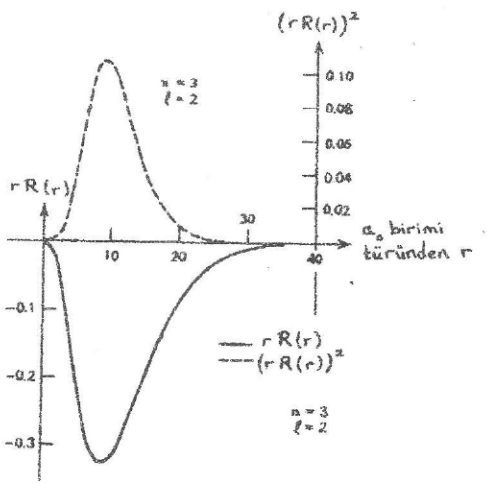


Şek. 12-2.'nin devamı

z-ekseninden ekvator düzlemine doğru kaydığı görülür. $|m| = \ell$ olduğu zaman, Denk.(10-55)'ten görülebildiği gibi $|P_\ell^\ell(\cos\theta)|^2 \propto \sin^{2\ell}\theta$ olur. Bu fonksiyon $\theta = \pi/2$'de bir tepe verir. ℓ arttıkça, tepenin genişliğinin $\ell^{-1/2}$ gibi azaldığı gösterilebilir; ve böylece büyük kuantum sayıları için, düzlemsel yörüngelerin klasik görünüşünü elde ederiz. Tepenin sonlu genişliği, aşağıdaki düşüncelerden anlaşılabilir. $|m| = \ell$ olduğunda $L_z^2 = \ell^2$'dir ve sonuç olarak $L_x^2 + L_y^2 = \ell$ olur. Böylece açısal momentum vektörü hiçbir zaman tam olarak bir eksen boyunca yönelemez. Fakat, m'nin katmerliliği "yörünge"yi başka bir eksene göre yöneltmemize izin verir; bu yüzden, aslında seçilmiş bir z-ekseni yoktur. Böylece L_x'in ℓ özdeğerli bir özdurumu olan bir durum, x-doğrultusunda yöneltilebilir. Bu durum için, dalga

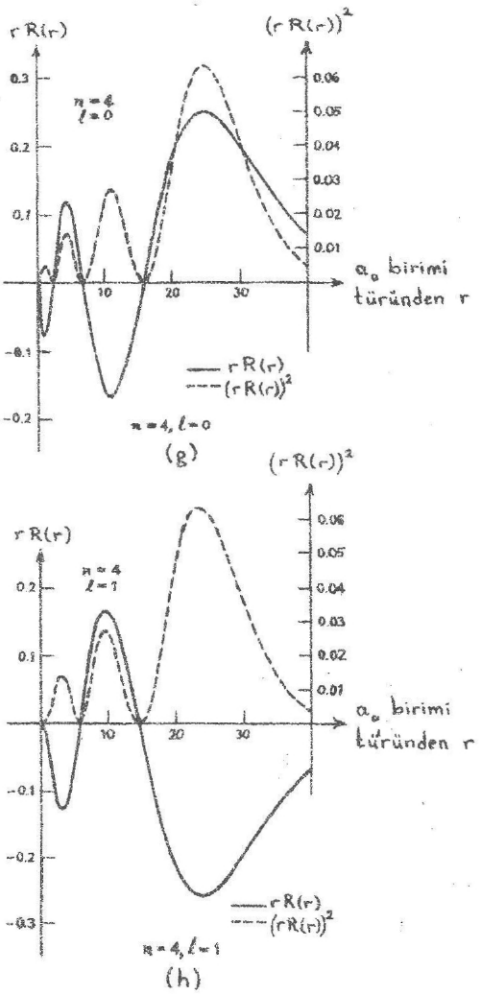


(e)

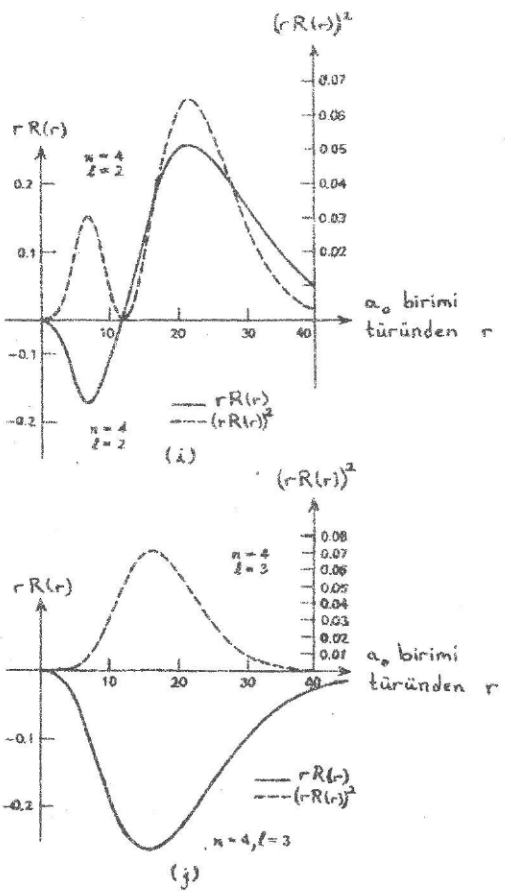


(f)

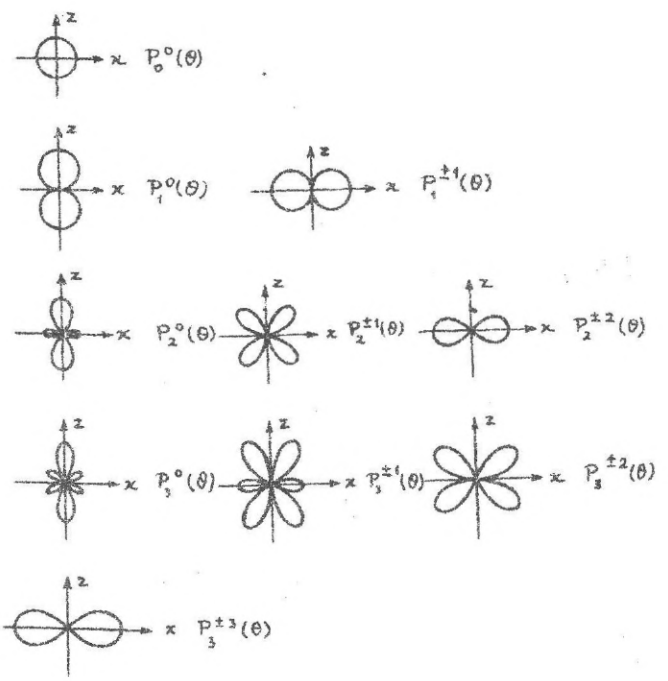
Şek. 12-2.'nin devamı



Şek. 12-2'nin devamı



Şek. 12-2.'nin devamı



Şek. 12-3. z-ekseni ile ekvator düzlemi arasındaki θ açısının bir fonksiyonu olarak,bağlı Legendre çokterimlilerinin biçimleri; burada ekvator düzlemi x-ekseni ile gösterilmiştir.

fonksiyonu $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$'lerin bir çizgisel birleştirimi olacaktır,fakat katmerlilik nedeniyle enerji z'ye göre yönelen yörüngelerinkiyle aynı olacaktır.

(d) Dalga fonksiyonları verilmişse,

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr\, r^{2+k} \left[R_{n\ell}(r)\right]^2 \qquad (12\text{-}30)$$

niceliğini hesaplayabiliriz.Yararlı birkaç beklenen değer aşağıda verilmiştir:

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z}\left[3n^2 - \ell(\ell+1)\right]$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a_o^2 n^2}{2Z^2}\left[5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)\right]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a_o n}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_o^2 n^3 (\ell + \frac{1}{2})} \qquad (12\text{-}31)$$

Problemler

1. (1) Hidrojendeki,(2) döteryumdaki(çekirdeksel kütle = 2 X proton kütlesi), (3) pozitronyumdaki(bir elektronla,kütlesi bir elektron kütlesinin aynı olan bir pozitronun bağlı durumu) 2P → 1S geçişlerinin dalga boylarını karşılaştırınız.

2.Çekirdeği bir proton ve iki elektrondan oluşan **trityumun** taban durumunda bir elektron olsun.Bir çekirdek tepkimesi birdenbire çekirdeği,iki proton ve bir nötrondan oluşan He^3'e dönüştürüyor.Elektronun He^3'ün taban durumunda kalması olasılığını hesaplayınız.Elektronun p momentumlu özgür bir elektron olması olasılığı nedir?

[Not: Özgür bir elektronun momentum özfonksiyonu $e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}(2\pi\hbar)^{-3/2}$'dir.]

3. Sıfır spinli bir elektron için,Schrödinger denkleminin göreli benzeri (bu gerçek bir elektrona uygulanamaz),

$$(E - V)^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

denkleminin işlemci anlatımı olan,

$$\left(\frac{E}{\hbar c} - \frac{Ze^2}{\hbar c}\frac{1}{r}\right)^2 \psi = -\nabla^2\psi + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \psi$$

denklemidir.

(a) Işınsal denklemi bulunuz.

(b) Hidrojen atomu problemindeki ışınsal denklem ile (a)'da elde edilen ışınsal denklem arasındaki yakın bağlantıyı gözönünde tutarak,özdeğer spektrumunu bulunuz.

4. $\langle 1/r \rangle_{n,\ell}$'nin deyimini kullanarak,isteksel bir hidrojen atomu özdurumu için(Z isteksel),

$$\langle T \rangle_{n,\ell} = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{n,\ell}$$

deyimini hesaplayınız.Bu potansiyel için genel olarak,

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle$$

olduğunu gösteriniz.Bu,Virial teoreminin özel bir örneğidir.

5. Bir protonun Coulomb alanı içindeki bir elektron,

$$\frac{1}{6}\left[4\psi_{100}(\vec{r}) + 3\psi_{211}(\vec{r}) - \psi_{210}(\vec{r}) + \sqrt{10}\,\psi_{21-1}(\vec{r})\right]$$

dalga fonksiyonu ile betimlenen bir durumdadır.

(a) Enerjinin beklenen değeri nedir?

(b) $\vec{L}^2$'nin beklenen değeri nedir?

(c) L_z'nin beklenen değeri nedir?

6. Bir protonun Coulomb alanı içindeki bir elektron,

$$\psi(\vec{r}) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} e^{-\alpha^2 r^2/2}$$

dalga fonksiyonu ile betimlenen bir durumdadır.Elektronun,hidrojen atomunun taban durumunda bulunabilmesi olasılığı nedir?

7. Bir elektron,hidrojen atomunun $n = 2$, $\ell = 1$, $m = 0$ durumundadır.Elektronun momentum uzayındaki dalga fonksiyonu nedir?

8. $f(\vec{r},\vec{p})$'nin herhangi bir durıklı durumdaki beklenen değeri bir sabittir. Bir

$$H = \vec{p}^2/2m + V(r)$$

Hamiltonien'i için

$$0 = \frac{d}{dt}\langle \vec{r}.\vec{p}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H,\vec{r}.\vec{p}]\rangle$$

olduğunu hesaplayınız,ve

$$\left\langle \frac{\vec{p}^2}{m} \right\rangle = \langle \vec{r}.\vec{\nabla}\, V(r)\rangle$$

olduğunu gösteriniz.Bunu kullanarak Problem 4'deki sonucu kurunuz.

9. Bu bölümde geliştirilmiş olan tekniği kullanarak,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$$

olan üç boyutlu harmonik salınıgan problemini tartışınız.Bağlı Laguerre çokterimlilerinin bu problemde de ortaya çıktığına dikkat ediniz.

Kaynaklar

Hidrojenimsi atomların tam bir tartışması şu kitapta bulunabilir:

E.U.Condon and G.H.Shortley,The Theory of Atomic Spectra,Cambridge University Press,Cambridge,1959.

Ayrıca bu problem,her kuantum mekaniği kitabında tartışılır.

BÖLÜM 13

ELEKTRONLARIN ELEKTROMANYETİK ALAN İLE ETKİLEŞMESİ

Bölüm 12'de bir elektronun bir nokta yükten ileri gelen durgun Coulomb alanı ile etkileşmesini inceledik.Bunu,bir dış manyetik veya elektrik alan ile etkileşmeye genelleştirmek için,önce klasik kuramı gözden geçirmeliyiz.Gauss birimleri türünden yazılan Maxwell denklemleri,boşlukta

$$\vec{\nabla}.\vec{B}(\vec{r},t) = 0 \qquad (13\text{-}1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}(\vec{r},t)}{\partial t} = 0 \qquad (13\text{-}2)$$

$$\vec{\nabla}.\vec{E}(\vec{r},t) = 4\pi \rho(\vec{r},t) \qquad (13\text{-}3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{r},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}(\vec{r},t) \qquad (13\text{-}4)$$

olur; burada $\rho(\vec{r},t)$ ve $\vec{j}(\vec{r},t)$,yük ve akım yoğunluklarıdır,bunlar $\vec{E}(\vec{r},t)$ ve $\vec{B}(\vec{r},t)$ elektromanyetik alanlarının kaynaklarıdır.Böylece,

$$\frac{\partial \rho(\vec{r},t)}{\partial t} + \vec{\nabla}.\vec{j}(\vec{r},t) = 0 \qquad (13\text{-}5)$$

yük korunumu denklemi kendiliğinden sağlanır.

İlk iki denklemi,alanları bir $\phi(\vec{r},t)$ skaler potansiyeli ve bir $\vec{A}(\vec{r},t)$ vektör potansiyeli cinsinden ifade ederek sağlayabiliriz.

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r},t)$$

$$\vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}(\vec{r},t)}{\partial t} - \vec{\nabla}\phi(\vec{r},t) \qquad (13\text{-}6)$$

$\vec{E}$ ve $\vec{B}$ alanları, ϕ ve $\vec{A}$'yı tek olarak belirlemezler:

$$\vec{A}'(\vec{r},t) = \vec{A}(\vec{r},t) - \vec{\nabla} f(\vec{r},t)$$

$$\phi'(\vec{r},t) = \phi(\vec{r},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial f(\vec{r},t)}{\partial t} \qquad (13\text{-}7)$$

ile verilen yeni potansiyellerin de,aynı $\vec{E}$ ve $\vec{B}$ alanlarını verdiği kolayca görülebilir.$(\vec{A}, \phi)$ kümesinden $(\vec{A}', \phi')$'ye olan dönüşüm bir <u>ayar dönüşümü</u> olarak bilinir,ve $\vec{E}$ ve $\vec{B}$'nin değişmezliği isteksel $f(\vec{r},t)$ fonksiyonunu en uygun biçimde seçmemize izin verir.

Şimdi,(13-3) ve (13-4) kaynağa-bağlı,

$$-\nabla^2\phi(\vec{r},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\vec{\nabla}.\vec{A}\right) = 4\pi\,\rho(\vec{r},t) \qquad (13\text{-}8)$$

ve

$$\vec{\nabla}\times\left(\vec{\nabla}\times\vec{A}\right) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}(\vec{r},t)}{\partial t^2} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{\nabla}\phi = \frac{4\pi}{c}\vec{j}(\vec{r},t)$$

denklem çiftini verir; ikinci denklem,

$$-\nabla^2\vec{A}(\vec{r},t) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}(\vec{r},t)}{\partial t^2} + \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}.\vec{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = \frac{4\pi}{c}\vec{j}(\vec{r},t) \qquad (13\text{-}9)$$

olarak yeniden yazılabilir.Yük dağılımı durgun ise,yani $\rho(\vec{r})$ zamandan bağımsız ise,ayarı

$$\vec{\nabla}.\vec{A}(\vec{r},t) = 0 \qquad (13\text{-}10)$$

olacak biçimde seçmek uygundur.$f(\vec{r},t)$'nin bu seçimine <u>Coulomb ayarı</u> adı verilir. Bu halde,

$$-\nabla^2\phi(\vec{r}) = 4\pi\,\rho(\vec{r}) \qquad (13\text{-}11)$$

elde ederiz,yani zamandan bağımsız skaler bir potansiyelimiz olur,ve böylece $\vec{A}(\vec{r},t)$'nin denklemi

$$-\nabla^2\vec{A}(\vec{r},t) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}(\vec{r},t)}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}(\vec{r},t) \qquad (13\text{-}12)$$

biçimini alır.

Yük dağılımı durgun olmadığı zaman,<u>Lorentz ayarı</u> denem,

$$\vec{\nabla}.\vec{A}(\vec{r},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial\phi(\vec{r},t)}{\partial t} = 0 \qquad (13\text{-}13)$$

ayarını seçmek daha uygundur.Bu,vektör potansiyelin denklemini aynı bırakır;fakat şimdi skaler potansiyel de bir dalga denklemi sağlar.Önemli bir teknik nokta, (13-9)'un elde edilmesinde kullanılan

$$\vec{\nabla}\times\left(\vec{\nabla}\times\vec{A}\right) = -\nabla^2\vec{A} + \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}.\vec{A}\right)$$

bağıntısının yalnızca kartezyen koordinatlarda geçerli olmasıdır.Böylece bağıntıda görünen $\nabla^2\vec{A}(\vec{r},t)$,x,y ve z türünden hesaplanmalıdır.

Kütlesi μ olan noktasal bir elektronun bir elektromanyetik alan ile etkileşmesini betimleyen denklem klasik Lorentz kuvveti denklemidir:

$$\mu \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -e\left[\vec{E}(\vec{r},t) + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}(\vec{r},t)\right] \qquad (13\text{-}14)$$

Alanlar olmadığı zaman,elektronun klasik Hamiltonien'i

$$H_o = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} \qquad (13\text{-}15)$$

dür;bu Hamiltonien'de,

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r},t) \qquad (13\text{-}16)$$

değiştirilmesi yapılır ve $-e\phi(\vec{r})$ potansiyeli eklenirse (biz durgun skaler potansiyellerle çalışacağız),

$$H = \frac{1}{2\mu}\left[\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r},t)\right]^2 - e\,\phi\,(\vec{r}) \qquad (13\text{-}17)$$

bulunur.Şimdi,(13-14)'ün bu yeni Hamiltonien'den elde edileceğini ileri sürüyoruz.Bu savın kanıtlanmasını bir alıştırma olarak okura bırakıyoruz[1].Buna karşılık olan Schrödinger denklemi,

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \psi(\vec{r},t) = \left[E + e\,\phi\,(\vec{r})\right]\,\psi\,(\vec{r},t) \qquad (13\text{-}18)$$

olur;burada,durgun potansiyel sağ yana alınmıştır.Sol yan işlenirse,

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi + \frac{e}{c}\vec{A}\psi\right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{ie\hbar}{\mu c}\vec{A}.\vec{\nabla}\psi - \frac{ie\hbar}{2\mu c}(\vec{\nabla}.\vec{A})\psi + \frac{e^2}{2\mu c^2}\vec{A}^2\psi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{ie\hbar}{\mu c}\vec{A}.\vec{\nabla}\psi + \frac{e^2}{2\mu c^2}\vec{A}^2\psi \qquad (13\text{-}19)$$

verir.Düzgün bir sabit $\vec{B}$ manyetik alanı için

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B} \qquad (13\text{-}20)$$

alabiliriz[2].Buna göre,$\vec{A}$'nın üç bileşeni

[1] Bkz. dipnot 4,s.216.

[2] Bu seçimin tek olmadığına dikkat ediniz;çünkü $\vec{B}$'yi değiştirmeksizin,$\vec{A}$'ya herhangi bir fonksiyonun gradientini ekleyebiliriz.Ancak bu seçim,çok uygundur.

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}(yB_z - zB_y, zB_x - xB_z, xB_y - yB_x)$$

olur, ve sonuç olarak

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \left(\frac{1}{2}B_x + \frac{1}{2}B_x, B_y, B_z\right)$$

$$= \vec{B}$$

dir. Bu yüzden (13.9)'daki ikinci terim,

$$\frac{ie\hbar}{2\mu c}\vec{r} \times \vec{B}.\vec{\nabla}\psi = -\frac{ie\hbar}{2\mu c}\vec{B}.\vec{r} \times \vec{\nabla}\psi$$

$$= \frac{e}{2\mu c}\vec{B}.\vec{r} \times \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi = \frac{e}{2\mu c}\vec{B}.\vec{L}\psi \qquad (13\text{-}21)$$

olur; ve $\vec{B}$'nin doğrultusu z-ekseninin tanımlıyorsa, üçüncü terim

$$\frac{e^2}{8\mu c^2}(\vec{r} \times \vec{B})^2\psi = \frac{e^2}{8\mu c^2}\left[r^2\vec{B}^2 - (\vec{r}.\vec{B})^2\right]\psi = \frac{e^2B^2}{8\mu c^2}(x^2 + y^2)\psi \qquad (13\text{-}22)$$

verir. Bu, iki boyutlu bir harmonik salınganın potansiyeli biçimindedir.

Bu iki terimin büyüklüklerini karşılaştıralım. $\langle L_z \rangle$ 'yi $\hbar$ basamağında, ve a_o Bohr yarıçapı olmak üzere $\langle x^2 + y^2 \rangle$ 'yi a_o^2 basamağında alarak, bu iki terimin oranı için

$$\frac{(e^2/8\mu c^2)\, a_o^2 B^2}{(e/2\mu c)\,\hbar B} \simeq \frac{1}{4}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{B}{e/a_o^2} \simeq \frac{1}{548}\frac{B}{e/a_o^2}$$

$$\approx \frac{B}{548(4{,}8 \times 10^{-10})/(0{,}5 \times 10^{-8})^2}$$

$$\approx \frac{B}{9 \times 10^9 \text{ gauss}} \qquad (13\text{-}23)$$

buluruz. Böylece laboratuvarda elde edilebilecek çeşitten alanlar için, yani $B \lesssim 10^4$ gauss için, atomsal sistemlerde kareli terimin önemsiz olduğu kesindir. B'ye göre çizgisel olan terim de Coulomb potansiyel enerjisi ile karşılaştırılarak, benzer bir yoldan kestirilebilir:

$$\frac{(e/2\mu c)\,\hbar B}{e^2/a_o} \approx \frac{1}{2}\frac{\hbar/\mu c}{e/a_o}B \approx \frac{1}{274}\frac{B}{e/a_o^2} \approx \frac{B}{5 \times 10^9 \text{ gauss}} \qquad (13\text{-}24)$$

Böylece, çizgisel terim atomsal enerji düzeylerini yalnızca pek az tedirgeyecektir. Kareli terim iki koşul altında çok önemli olabilir: Manyetik alan çok yeğinse; 10^{12} gauss büyüklüğündeki bu alanların nötron yıldızlarının yüzeyinde bulunabileceklerine

inanılır; ve bu,atomların yapısını kökten değiştirir[3].Kareli terim elektronun bir dış alandaki makroskopik hareketi gözönüne alındığında da önemlidir.

Önce yalnız başına çizgisel terimi düşünelim ve z-doğrultusunu $\vec{B}$'nin doğrultusu ile çakışacak biçimde seçelim.Böylece $\vec{B} = 0$ olduğu zamanki Hamiltonien,

$$H_1 = \frac{e}{2\mu c} BL_z \tag{13-25}$$

teriminin eklenmesi ile değişmiş olur.Larmor frekansı denen,

$$\frac{eB}{2\mu c} = \omega_L \tag{13-26}$$

frekansını tanımlayalım; $\vec{L}^2$ ve L_z'nin ortak özdurumları olan enerji özdurumları ile çalışıyorsak,(13-25) ek terimi bir özdurum üzerine etki ettiğinde bir sayı verir:

$$H_1 u_{n\ell m}(\vec{r}) = \hbar\omega_L m u_{n\ell m}(\vec{r}) \tag{13-27}$$

Burada m,açısal momentumun z-bileşeninin özdeğeridir; $-\ell \leq m \leq \ell$'dir.Varolan $(2\ell+1)$ kez katmerli enerji düzeyleri böylece,$(2\ell+1)$ bileşene yarılır;bunlar eşit aralıklıdır,enerjileri

$$E = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} + \hbar\omega_L m \tag{13-28}$$

ile verilir.Yarılmanın büyüklüğü,

$$\frac{eB\hbar}{2\mu c} = \frac{e\hbar}{2\mu c}\left(\frac{B}{e/a_o^2}\right)\frac{e}{a_o^2}$$

$$= \frac{e^2\hbar}{2\mu c}\left(\frac{\mu c\alpha}{\hbar}\right)^2\left(\frac{B}{e/a_o^2}\right)$$

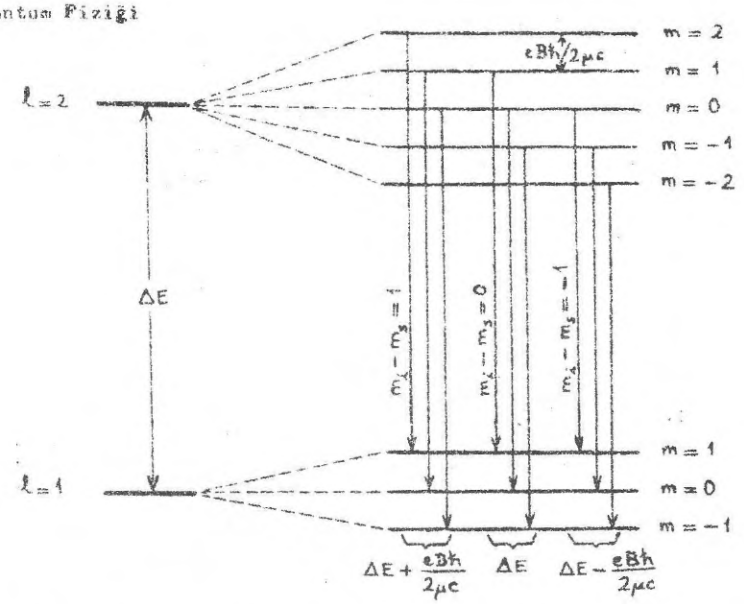
$$= \left(\frac{1}{2}\alpha^2\mu c^2\right)\alpha\,\frac{B}{e/a_o^2}$$

$$= \left(\frac{B}{2{,}4 \times 10^9}\right) \times 13{,}6\ \text{eV}$$

dur.

Seçim kurallarına(ilerde tartışılacaktır) göre yalnızca m-değerinin sıfır ya da bir birim değiştiği geçişler izinlidir.Bu yüzden,Şek.13.1'de görüldüğü gibi,$B = 0$ olduğu zamanki geçişi gösterimleyen tek çizgi üç çizgiye yarılır.Bu,olağan Zeeman olayıdır.Gerçekten,atomdaki elektronun spini sıfır durumunda olmadıkça,elektron

[3] Bkz. R.Cohen,L.Lodenquai,and M.Ruderman,Phys.Rev.Letters,25,467(1970).



Şek.13-1. Olağan Zeeman olayı: Manyetik alanda yarılmış $\ell = 2$ ve $\ell = 1$ durumları arasında,olabilen 15 geçişten yalnızca 9 tanesi oluşur.Bunlar,üçer çizgi olarak $\Delta m = m_l - m_s = -1\ ,\ 0\ ,\ 1$'e karşılık gelirler.

spininin manyetik alanla etkileşmesi yukarda öngörülen deseni değiştirir.Daha genel olan olağandışı Zeeman olayı,spini öğrendiğimiz zaman tartışılacaktır.

B^2'li terimin önemli,ve Coulomb potansiyelinin önemsiz olduğu koşullarda, sabit manyetik alandaki bir elektronun çözümünü tartışmak oldukça ilginçtir.Bu koşullar altında,$\vec{B}$ yine z-doğrultusunu tanımlayacak biçimde seçilirse,Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + \frac{eB}{2\mu c}L_z\psi + \frac{e^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)\psi = E\psi \qquad (13\text{-}29)$$

olur; burada (13-19), (13-21) ve (13-22) kullanılmıştır.(x^2+y^2) "potansiyeli"nin varlığı,değişkenlerin ayrılması için silindirik koordinatların kullanılmasını esinler.

$$x = \rho\cos\phi$$

$$y = \rho\sin\phi \qquad (13\text{-}30)$$

yazarak ve Bölüm 10'un başında özetlenen işlemleri izleyerek,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos\phi \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin\phi}{\rho}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\phi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos\phi}{\rho}\frac{\partial}{\partial \phi} \qquad (13\text{-}31)$$

sonucuna ulaşırız; ve buradan,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \qquad (13\text{-}32)$$

elde ederiz.Şimdi

$$\psi(\vec{r}) = u_m(\rho)\, e^{im\phi} e^{ikz} \qquad (13\text{-}33)$$

yazılırsa,$u_m(\rho)$'nun sağladığı

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{du}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}u - \frac{e^2B^2}{4\hbar^2c^2}\rho^2 u + \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{eB\hbar m}{\hbar^2 c} - k^2\right)u = 0 \qquad (13\text{-}34)$$

diferansiyel denklemini buluruz.

$$x = \sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}}\,\rho \qquad (13\text{-}35)$$

değişkeni türünden,denklemi

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{du}{dx} - \frac{m^2}{x^2}u - x^2u + \lambda u = 0 \qquad (13\text{-}36)$$

olarak yeniden yazabiliriz,burada

$$\lambda = \frac{4\mu c}{eB\hbar}\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\right) - 2m \qquad (13\text{-}37)$$

dir.Şunları belirlemek oldukça kolaydır: (a) u(x)'in sonsuzdaki davranışı,

$$\frac{d^2u}{dx^2} - x^2u \approx 0$$

denkleminden,$u(x) \sim e^{-x^2/2}$ olarak belirlenir; (b) u(x)'in x = 0 yakınındaki davranışı ise,

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{du}{dx} - \frac{m^2}{x^2}u \approx 0$$

denkleminden,$u(x) \sim x^{|m|}$ olarak belirlenir.Böylece,

$$u(x) = x^{|m|}\, e^{-x^2/2}\, G(x) \qquad (13\text{-}38)$$

yazar ve G(x)'in sağladığı diferansiyel denklemi bölerEriz.
Biraz cebirle,

$$\frac{d^2G}{dx^2} + \left(\frac{2|m| + 1}{x} - 2x \right) \frac{dG}{dx} + (\lambda - 2 - 2|m|)\, G = 0 \qquad (13\text{-}39)$$

sonucuna ulaşırız.

$$y = x^2 \qquad (13\text{-}40)$$

değişken değiştirmesi yapılırsa,bu denklem (12-11) ile aynı biçime getirilebilir. O zaman denklem,

$$\frac{d^2G}{dy^2} + \left(\frac{|m| + 1}{y} - 1 \right) \frac{dG}{dy} + \frac{\lambda - 2 - 2|m|}{4y}\, G = 0 \qquad (13\text{-}41)$$

biçimini alır.Şimdi Bölüm 12'deki yolu tutabiliriz.(12-11) ile karşılaştırmaya göre, $n_r = 0,1,2,3,\ldots$ olmak üzere,özdeğer koşulunun

$$\frac{1}{4}\lambda - \frac{1 + |m|}{2} = n_r \qquad (13\text{-}42)$$

olması gerekir.Bu,z-doğrultusundaki özgür hareketin kinetik enerjisinin çıkarılmasıyla bulunan $E - \hbar^2k^2/2\mu$ enerjisinin,

$$E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{eB\hbar}{2\mu c}(2n_r + 1 + |m| + m) \qquad (13\text{-}43)$$

olarak verileceğini,ve

$$G(y) = L_{n_r}^{|m|}(y) \qquad (13\text{-}44)$$

olacağını içerir.

Bu çözümü,yalnızca klasik sınırda tartışacağız.Bunun için,önce klasik kuramı gözden geçirelim.(13-17) Hamiltonien'inde,skaler potansiyel terimi yoksa,

$$\vec{v} = \frac{\vec{p} + (e/c)\vec{A}}{\mu} \qquad (13\text{-}45)$$

buluruz[4]; ve $\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}$ olduğundan,

$$\mu \vec{r} \times \vec{v} = \vec{r} \times \vec{p} + \frac{e}{c}\vec{r} \times \left(-\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B} \right)$$

$$= \vec{L} - \frac{e}{2c}\left[\vec{r}(\vec{r}.\vec{B}) - r^2\vec{B} \right] \qquad (13\text{-}46)$$

[4]Hamilton mekaniğine alışkın olmayan okur,$H=p^2/2\mu + V(r)$ için,$dx/dt = \partial H/\partial p_x$, $dp_x/dt = -\partial H/\partial x$,v.b. denklemlerinin Newton denklemlerine eşdeğer olduğuna kendini inandırabilir.Bu denklemler,daha karmaşık olan $\left[\vec{p} + e\vec{A}(\vec{r})/c \right]^2/2\mu$ Hamiltonien'i için de geçerlidir.

elde ederiz,burada

$$\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b}(\vec{a}.\vec{c}) - \vec{c}(\vec{a}.\vec{b}) \tag{13-47}$$

özdeşliğinden yararlandık.Bu denklemin z-bileşenini alırsak

$$\mu(\vec{r} \times \vec{v})_z = L_z + \frac{e}{2c} B (x^2 + y^2)$$

elde ederiz,bu ise

$$\mu \rho v = L_z + \frac{eB}{2c} \rho^2 \tag{13-48}$$

demektir.Elektrona etki eden kuvvetin

$$\vec{F} = - \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B} \tag{13-49}$$

ifadesi,dairesel hareket için

$$\frac{\mu v^2}{\rho} = \frac{evB}{c} \tag{13-50}$$

bağıntısına götürür.Bu bağıntı (13-48) ile birlikte,biraz cebirden sonra

$$\frac{1}{2} \mu v^2 = \frac{eB}{\mu c} L_z \tag{13-51}$$

ve

$$\rho = \left[\frac{2c}{eB} L_z \right]^{1/2} \tag{13-52}$$

verir.

Şimdi yeniden,enerjinin (13-43) ifadesine dönelim.Akla yatkın B için, $\hbar$'nin küçüklüğü nedeniyle enerji yalnızca,$(2n_r+1+|m|+m)$ çok büyükse makroskopik büyüklükte olabilir.Burada iki hal vardır: (a) $m < 0$ ise,bu n_r'nin çok büyük olmasını içerir. n_r, $L_{n_r}^{|m|}(y)$ çokterimlisinin derecesini belirler; bu,fonksiyondaki sıfırların sayısıdır[5], ve bu çok büyükse,klasik yörüngenin yerelleştiği küçük erişimli y için bu fonksiyon büyük olamaz.(b) $m > 0$ ise,katsayı $(2n_r + 1 + 2m)$ olur; ve bu,m'nin büyük olması koşuluyla,küçük n_r için de büyük olabilir.Böylece enerji,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \simeq \frac{eB}{\mu c} \hbar m \tag{13-53}$$

[5] Denk.(12-23)'e,bu denklemin elde edilişine ve s.200'deki tartışmaya bakınız.

olur; ve bu,klasik sonuçla uyum içindedir.Beklendiği gibi,

$$L_z = \hbar m \tag{13-54}$$

değerinin pozitif olduğuna dikkat ediniz.

Işınsal olasılık dağılımının tepesi ile belirlenen yörünge yarıçapının da, klasik değere karşılık geldiğini gösterebiliriz.$n_r = 0$ alalım.Bu halde $L_{n_r}^{|m|}(y)$ bir sabittir; ve (13-38)'e göre,dalga fonksiyonunun karesi

$$P(x) = x^{2|m|} e^{-x^2} \tag{13-55}$$

olur.Bunun,

$$\frac{dP}{dx} = (2|m|\ x^{2|m|-1} - 2x^{2|m|+1})\ e^{-x^2} = 0$$

olduğu yerde,yani

$$x = \sqrt{|m|} \tag{13-56}$$

noktasında bir maksimumu vardır; ve bu,

$$\varrho = \left(\frac{2c}{eB}\ \hbar m\right)^{1/2} \tag{13-57}$$

verir.Bu problem karşılığı bulunma ilkesinin güzel bir örneğidir.

Manyetik alanla etkileşme konusunda ilginç birçok kuantum mekaniksel olay vardır,biz şimdi bunları inceleyeceğiz.(13-18) Schrödinger denklemi ayar değişmezliği ilkesini bozuyor gibi görünmektedir,çünkü denklemde ortaya çıkan $\vec{A}(\vec{r},t)$'nin

$$\vec{A} \to \vec{A} + \vec{\nabla} f(\vec{r},t) \tag{13-58}$$

dönüşümü altında,Hamiltonien

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \to \frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{\nabla} f\right)^2 \tag{13-59}$$

ye göre dönüşür.Dalga fonksiyonunun $\vec{r}$ 'ye bağlı olabilen bir evre çarpanı ile değişmesinin hiçbir fiziksel sonucu olmadığı olgusunu kullanarak,ayar değişmezliğini kurtarma olanağı vardır.Böylece,(13-58) denklemine

$$\psi(\vec{r},t) \to e^{i\Lambda(\vec{r},t)}\ \psi(\vec{r},t) \tag{13-60}$$

dönüşümünün eşlik etmesi gerektiği koşulunu koyarsak,Denk,(13-18)'in sol yanı

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{\nabla} f\right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{\nabla} f\right) e^{i\Lambda}\psi$$

$$= \frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{\nabla}f\right)\cdot\left[e^{i\Lambda}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi + \frac{e}{c}\vec{A}\psi + \frac{e}{c}\vec{\nabla}f\,\psi + \hbar\vec{\nabla}\Lambda\psi\right)\right]$$

$$= \frac{1}{2\mu}e^{i\Lambda}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{\nabla}f + \hbar\vec{\nabla}\Lambda\right)^2\psi \qquad (13\text{-}61)$$

biçimini alır.Böylece,

$$\Lambda = -\frac{e}{\hbar c}f \qquad (13\text{-}62)$$

seçimi ile,yani

$$\psi(\vec{r},t) \longrightarrow e^{-(ie/\hbar c)f(\vec{r},t)}\,\psi(\vec{r},t) \qquad (13\text{-}63)$$

dönüşüm yasası ile ayar değişmezliği yeniden sağlanmış olur.

$\vec{B} = 0$ olan alansız bölge,

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = 0 \qquad (13\text{-}64)$$

olmasını içerir; buna göre $\vec{A}$,bir fonksiyonun gradienti olarak yazılabilir:

$$\vec{A} = \vec{\nabla}f \qquad (13\text{-}65)$$

Bu yüzden,alansız bölgedeki bir elektronun hareketini iki yoldan betimleyebiliriz: Ya hiç alan bulunmadığını düşünürüz, ve enerji özfonksiyonu denklemi için

$$\left[\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2 + V(\vec{r})\right]\psi = E\psi \qquad (13\text{-}66)$$

yazarız; ya da denklemi,(13-65)'de verilen vektör potansiyel ile

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi' + V(\vec{r})\psi' = E\psi' \qquad (13\text{-}67)$$

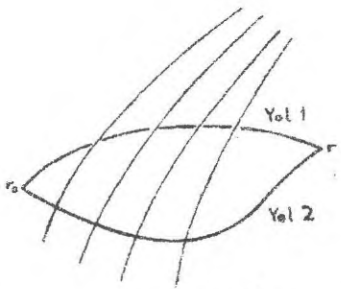
olarak yazar,ve

$$\psi' = e^{-(ie/\hbar c)f}\psi \qquad (13\text{-}68)$$

alırız.$f(\vec{r},t)$ fonksiyonu,(13-65)'i çözerek $\vec{A}(\vec{r},t)$ cinsinden yazılabilir:

$$f(\vec{r},t) = \int^{\vec{r}} d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}',t) \qquad (13\text{-}69)$$

burada tümlevin yolu,saptanmış isteksel bir noktadan örneğin,başlangıçtan ya da sonsuzdan $\vec{r}$ noktasına kadardır.Tümlevin,yalnızca $\vec{B} = 0$ olan alansız bölgede anlamı vardır; çünkü 1 ve 2 ile belirtilen farklı iki yol boyunca alınan tümlevler arasındaki fark,



Şek. 13-2. 1 ve 2 yolu boyunca alınan $\int_{\vec{r}_o}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}').d\vec{r}'$ tümlevleri genel olarak aynı değildir; çünkü fark,kapalı ilmekten geçen manyetik akıya eşittir.

$$\int_1 d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}',t) - \int_2 d\vec{r}'\vec{A}(\vec{r}',t) = \oint d\vec{r}' , \vec{A}(\vec{r}',t)$$

$$= \int_S \vec{\nabla}' \times \vec{A}(\vec{r}',t). d\vec{S} = \int_S \vec{B}. d\vec{S} = \Phi \qquad (13\text{-}70)$$

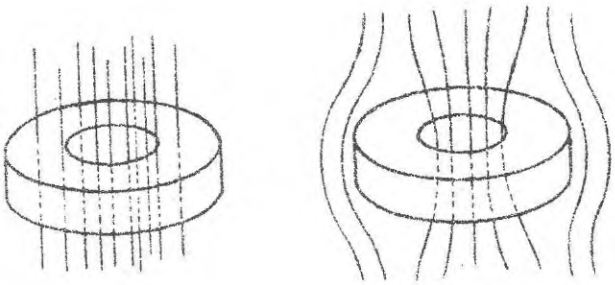
dir.Burada Stokes teoremini kullandık;ve Φ ,bu iki yolun sınırladığı yüzeyden geçen manyetik alanın akısıdır.(Şek.13-2).Bu yüzden,yalnızca $\Phi = 0$ ise,(13-68)'deki evre çarpanı çizgi tümlevindeki yolun seçiminden bağımsız olacaktır.Dalga fonksiyonunun tek-değerli olması isteniyorsa,böyle bir bağımsızlık gereklidir.

Bu iki yol akı içindeyse,o zaman iki yol boyunca giden elektronlar farklı evreler kazanırlar.İlginç bir sonuç şudur: Elektron,yalın bağlantılı değil,fakat içinden Φ akısı geçen bir "delik"i saran alansız bir bölgede hareket ediyorsa,bir çevrimi tamamladığında ek bir $e^{ie\Phi/\hbar c}$ evre çarpanı kazanır.Elektronun dalga fonksiyonunun tek-değerli olması gereksinimi,ve bu yüzden evre çarpanının bir olması, kuşatılan akının kuantumlu olacağını içerir:

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e} n \qquad n = 0 , \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad (13\text{-}71)$$

Elektronların,içinden akı geçen bir bölgeyi saran üstüniletken bir halkadaki hareketinde,böyle bir durum ortaya çıkar.1961'de yapılan ilk deneyler[6],şu taslak üzerine kurulmuştu: Üstüniletkenden yapılmış bir halka,kritik sıcaklığın üstündeki

[6] B.S.Deaver and W.Fairbank,Phys.Rev.Letters,7,43 (1961); R.Döll and M.Nabauer, aynı yerde,7,51(1961).



Şek.13-3. Bir üstüniletken $T > T_k$ (kritik sıcaklık) sıcaklığında, başka herhangi bir metal gibi davranır; ve içinden manyetik akı çizgileri geçebilir. Sıcaklık, $T < T_k$ oluncaya kadar düşürülürse halka üstüniletken olur, ve manyetik akı çizgilerini iter. Bunların bazıları halkanın içinde tuzaklanmış olur. Kuantumlanmış olan akı, bu tuzaklanan akıdır.

bir sıcaklıkta, dış bir manyetik alana konulmuştur; öyle ki, metal artık üstüniletken değildir. Üstüniletkenler manyetik alan çizgilerini ittiğinden, içlerinde ince bir yüzey tabakası dışında $\vec{B} = 0$ dır. Bu Meissner olayıdır[7]. Halka kritik sıcaklığın altına kadar soğutulunca, üstüniletken olur, ve manyetik akı halkanın içinde tuzaklanır (Şek.13-3). Bu akının ustalıklı bir ölçümü,

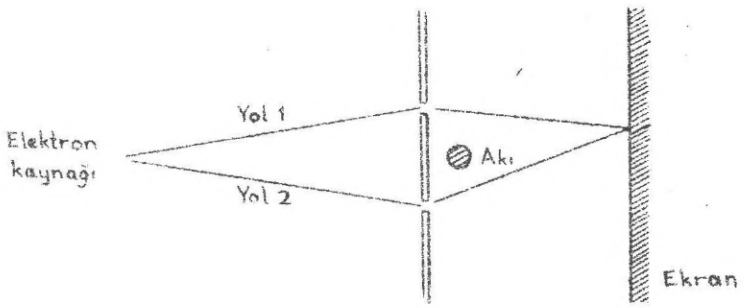
$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{(2e)} n \qquad (13\text{-}72)$$

değişikliği ile, (13-71)'in geçerli olduğunu gösterir. Bu, bizim üstüniletkenlik görüngüsü konusundaki şimdiki anlayışımızla tutarlıdır; buna göre üstüniletkenlerde elektron çiftlerimiz (2e yüklü!) "ilintili durumları", çalışılan temel nicelikleri oluştururlar.

Dalga fonksiyonunun evresinin akıya bağlılığının başka bir ortaya çıkışı, ilke olarak, bir girişim deneyinde görülebilir (Şek.13-4). Burada, bir çift yarık deneyinde yarıklar arasına manyetik akıyı kuşatan bir sarmal konmuştur. Ekrandaki girişim deseni dalga fonksiyonunun iki parçasının,

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \qquad (13\text{-}73)$$

[7] Kuantum mekaniğinin böyle makroskopik ortaya çıkışlarının eşsiz bir tartışması için özellikle Feynman Lectures on Physics, Cilt III'deki Bölüm 21'i öğütleyelim.



Şek. 13-4. Kuşatılmış manyetik akının elektron girişim deseninde oluşturacağı kaymayı ölçen deneyin taslak çizimi.

biçimindeki üstüstegelmesinin sonucudur; burada ψ_1 ,dalga fonksiyonunun 1.nci yolu izleyen elektronu betimleyen parçasını ve ψ_2 2.nci yola karşılık gelen parçayı gösterir.Sarmalın varlığında,

$$\psi = \psi_1 e^{(ie/\hbar c)\int_1 d\vec{r}\cdot\vec{A}} + \psi_2 e^{(ie/\hbar c)\int_2 d\vec{r}\cdot\vec{A}}$$
$$= \left(\psi_1 e^{ie\Phi/\hbar c} + \psi_2\right) e^{(ie/\hbar c)\int_2 d\vec{r}\cdot\vec{A}} \qquad (13\text{-}74)$$

elde ederiz.Böylece akı, ψ_1 ve ψ_2 arasında bağıl bir evre değişikliğine neden olur ve bu,girişim desenini değiştirir.İlk olarak Aharanov ve Bohm'un belirledi bu olay denel olarak gözlenmiştir[8].

Problemler

1.

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r)$$

için,

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_x}, \ldots$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \ldots$$

[8] R.G.Chambers, Phys. Rev. Letters, 5, 3 (1960).

denklemlerinin,şu hareket denklemlerini verdiğini gösteriniz:

$$\mu \frac{d^2x}{dt^2} = - \frac{\partial V}{\partial x} , \ldots$$

2.

$$H = \frac{1}{2\mu} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r},t) \right]^2 - \frac{e^2}{r}$$

Hamiltonien'imin,

$$\mu \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = - e \left[\vec{E}(\vec{r},t) + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B}(\vec{r},t) \right]$$

Lorentz kuvveti denklemini verdiğini gösteriniz. [Not: Hesaplarınızda,

$$\frac{d}{dt} \vec{A}(\vec{r},t) = \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x} + \frac{dy}{dt} \frac{\partial \vec{A}}{\partial y} + \frac{dz}{dt} \frac{\partial \vec{A}}{\partial z}$$

olduğunu kullanınız;çünkü hareket denklemlerine (ve Hamiltonien'e) giren alanların, parçacığın bulunduğu konumda değerlendirilmesi gerekir.]

3. 10^4 gaussluk bir alandaki hidrojenin 3D → 2P geçişindeki üç Zeeman çizgisinin dalgaboyunu hesaplayınız.

4. Sırasıyla yarıçapları a ve b olan iki silindir arasındaki bölgeye kapatılmış bir elektronu düşününüz($b > a$).(a) Schrödinger denklemini silindirik koordinatlarda ayırınız (Denk. 13-32 ile karşılaştırınız),ve denklemin Bessel fonksiyonları ile çözülebileceğini gösteriniz.Enerji özdeğerinin belirlenmesindeki koşullar nelerdir? (b) Enerji özfonksiyonlarının katmerliliğini tartışınız.Bu katmerlilik nereden ileri gelir? Bessel fonksiyonları için,Problem 8'den sonraki nota bakınız.

5. Bu problemde kapatılmış bir manyetik akının,akı tüpünün dışında bir bölgedeki bir parçacığın açısal momentumunu nasıl değiştirdiğini gösteren bir örneği çözeceğiz. $\varrho < a$ silindirik bölgesine kapatılmış bir manyetik alan düşününüz.Akı, Φ olsun. $\varrho > a$ bölgesinde manyetik alan yoktur,ve bu yüzden vektör potansiyel

$$\vec{A}(\varrho,\theta,z) = \vec{\nabla} \Lambda(\varrho,\theta,z)$$

biçimindedir.

(a) $\vec{\nabla} . \vec{A} = 0$ ayarının seçimi,

$$\nabla^2 \Lambda = 0$$

olması demektir.Bu denklemin (13-70)'i sağlayan bir çözümünün,

$$\Lambda = \frac{1}{2\pi} \Phi\theta$$

olduğunu gösteriniz.

(b) Bakışım ekseni çevresindeki,

$$(\mu \vec{r} X \vec{v})_z = \tilde{L}_z = \left[\vec{r} X \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right]$$

açısal momentumunu silindirik koordinatlarda hesaplayınız,ve yukardaki Λ için,

$$\tilde{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{e}{c} \frac{\Phi}{2\pi}$$

ile verildiğini gösteriniz.

(c) $\tilde{L}_z \psi = \lambda \psi$ özdeğer problemini çözünüz,ve özfonksiyonların tek-değerliliğinin akı kuantumlanmasına götürdüğünü gösteriniz.

6)

$$H = \frac{\left[\vec{p} + (e/c) \vec{A}(\vec{r},t) \right]^2}{2\mu}$$

Hamiltonien'i ile betimlenen bir sistem için,

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi \quad + \vec{\nabla} . \vec{j} = 0$$

bağıntısını sağlayan $\vec{j}$ akısının,

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2i\mu} \left[\psi^* \vec{\nabla} \psi - \vec{\nabla} \psi^* \psi + \frac{2ie}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r},t) \psi^* \psi \right]$$

ile verildiğini gösteriniz.Ayrıca **Problem 1'deki Hamilton hareket denklemlerinin,**

$$\frac{d}{dt} \tilde{\vec{L}} = 0$$

olmasını içerdiğini gösteriniz,burada

$$\tilde{\vec{L}} = \vec{r} X \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r},t) \right)$$

dir.

7. $\vec{A} = (-yB,0,0)$ olarak seçilen ayarla,dış bir $\vec{B} = (0,0,B)$ manyetik alanındaki,yüklü bir parçacık problemini düşününüz.Hareket sabitleri nelerdir? Hareket denklemlerini çözerken gidebildiğiniz kadar gidiniz,ve enerji spektrumunu elde ediniz.Aynı problemin $\vec{A} = (-yB/2, xB/2, 0)$, $\vec{A} = (-yB,0,0)$ ve $\vec{A} = (0,xB,0)$ ayarlarındaki çözümlerinin her üç halde farklı görünmesine karşın,neden aynı fiziksel durumu gösterimlediğini açıklayabilir misiniz?

8. $\vec{B} = (0,0,B)$ manyetik alanındaki ve çapraz $\vec{E} = (E,0,0)$ elektrik alanındaki bir yüklü parçacığı gözönüne alınız.Problem 7'de sözü edilen üç ayardan hangisini,bu problem için kullanırsınız? Özdeğer problemini çözünüz.

Not. n tamsayı olmak üzere,

$$\frac{d^2u}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{du}{dz} + \left(1 - \frac{n^2}{z^2} \right) u = 0$$

denkleminin düzenli çözümleri,

$$J_n(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^n \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(iz/2)^{2\ell}}{\ell!(n+\ell)!}$$

Bessel fonksiyonları,ve düzensiz çözümleri

$$N_n(z) = \frac{2}{\pi} J_n(z) \log \frac{\gamma z}{2} - \frac{1}{\pi}\left(\frac{z}{2}\right)^n \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(iz/2)^{2\ell}}{\ell!(n+\ell)!} a_{n\ell}$$

$$- \frac{1}{\pi}\left(\frac{z}{2}\right)^{-n} \sum_{\ell=0}^{n-1} \frac{(n-\ell-1)!}{\ell!}\left(\frac{z}{2}\right)^{2\ell}$$

$$(\log \gamma = 0{,}5772\ldots) \qquad a_{n\ell} = \left(\sum_{m=1}^{\ell} \frac{1}{m} + \sum_{m=1}^{\ell+n} \frac{1}{m}\right)$$

Neumann fonksiyonları olarak bilinir.Bunların asimptotik davranışları

$$J_n(z) \sim \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} \cos\left(z - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\left[1 + 0\left(\frac{1}{z^2}\right)\right]$$

$$N_n(z) \sim \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} \sin\left(z - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\left[1 + 0\left(\frac{1}{z^2}\right)\right]$$

biçimindedir.Bunların özeliklerinin ayrıntılı bir incelemesi matematiksel fiziğin özel fonksiyonları ile ilgili herhangi bir kitapta bulunabilir.

Kaynaklar

Bir manyetik alandaki elektron hareketinin çeşitli yönlerinin şu kitaptaki tartışması çok ilginçtir:

R.P.Feynman,R.B.Leighton,and M.Sands,The Feynman Lectures on Physics,Vol.3, Addison-Wesley,Inc.,1965.

Bölüm 14

İŞLEMCİLER, MATRİSLER, ve SPİN

Elektronun spini gözönüne alınmadan, atomların gerçek bir tartışması yapılamaz. Anlamlı adına karşın, elektronun bu özeliğinin klasik benzeri yoktur, ve, hemen görüleceği gibi, biraz soyut yöntemlerle işlenmesi gerekir. Neyse ki, koordinat uzayına yakından bağlı bir betimlemeden yola çıkan bu ileri inceleme için bazı hazırlıklarımız var; daha önce, harmonik salıngan (Bölüm 7) ve

$$\vec{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$$
$$L_z Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m} \qquad (14\text{-}1)$$

biçimindeki açısal momentum özdeğer problemlerinin ikisini de işlemci yöntemleri ile tartışmıştık. Harmonik salıngan için,

$$u_n = \frac{1}{(n!\ \hbar^n)^{1/2}} (A^\dagger)^n u_o \qquad (14\text{-}2)$$

olarak tanımlanan durumlar bulmuştuk; bu durumlar için,

$$H u_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2})\, u_n \qquad (14\text{-}3)$$

idi. u_n üzerine artırma ve azaltma işlemcilerinin etkilerini de,

$$A^\dagger u_n = \sqrt{(n+1)\hbar}\ u_{n+1} \qquad (14\text{-}4)$$

ve

$$A u_n = \sqrt{n\hbar}\ u_{n-1} \qquad (14\text{-}5)$$

olarak hesaplayabilmiştik. Ayrıca,

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn} \qquad (14\text{-}6)$$

olduğunu göstermiştik; bu, herhangi bir hermitien işlemcinin (burada H) özdurumları için geçerli kılınabilen bir deyimdir. (14-3)'ten (14-5)'e kadarki denklemlerin u_m ile skaler çarpımını alırsak,

$$\langle u_m | H u_n \rangle \equiv \langle u_m | H | u_n \rangle = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega\ \delta_{mn}$$

$$\langle u_m | A^\dagger u_n \rangle \equiv \langle u_m | A^\dagger | u_n \rangle = \sqrt{(n+1)\hbar}\ \delta_{m,n+1}$$
$$\langle u_m | A\, u_n \rangle \equiv \langle u_m | A | u_n \rangle = \sqrt{n\hbar}\ \delta_{m,n-1} \qquad (14\text{-}7)$$

buluruz;burada,daha bakışımlı olan

$$\langle u_i | Ou_j \rangle \equiv \langle u_i | O | u_j \rangle \qquad (14\text{-}8)$$

yazımını getirdik.Bu nicelikler,matrisler denilen sıralara dizilebilirler.Bir M_{ij} matrisinin geleneksel yazımında ilk indis dizinin satırını,ve ikincisi sütununu etiketler.Böylece $\langle u_m | H | u_n \rangle$ skaler çarpımını H_{mn} yazımına çevirirsek,

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5/2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 7/2 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}9)$$

bulurus.Benzer olarak,

$$A^\dagger = \sqrt{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}10)$$

ve

$$A = \sqrt{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}11)$$

elde ederiz.F herhangi bir işlemci ve u_i herhangi bir tam küme olmak üzere $\langle u_m | F | u_n \rangle$ dizisine,u_i'lerin oluşturduğu tabanda F'nin bir matris gösterimi diyeceğiz. Bu adım yerinde olduğunu gösterelim. .Örneğin iki matrisin çarpımı,

$$(FG)_{ij} = \sum_n (F)_{in}(G)_{nj} \qquad (14\text{-}12)$$

bağıntısını sağlar,ve F ve G işlemcilerinin "matris gösterimleri" için bu bağıntıyı doğrulamamız gerekir.Bunun için,Gu_j durumunu gözönüne alalım,ve tamlığı kullanarak bunu

$$Gu_j = \sum_n C_n u_n \qquad (14\text{-}13)$$

biçiminde açalım.C_n katsayıları,

$$C_n = \langle u_n \mid G \mid u_j \rangle \tag{14-14}$$

olarak verilir.Bu yüzden,

$$\begin{aligned}\langle u_i \mid FG \mid u_j \rangle &= \langle u_i \mid F(\sum_n C_n u_n) \rangle \\ &= \sum_n C_n \langle u_i \mid F \mid u_n \rangle \\ &= \sum_n \langle u_i \mid F \mid u_n \rangle \langle u_n \mid G \mid u_j \rangle \end{aligned} \tag{14-15}$$

olur;ve bu,

$$\langle u_i \mid F \mid u_n \rangle = F_{in} \tag{14-16}$$

yazmak koşulu ile,(14-12)'nin aynısıdır.Birim işlemciyi

$$1 = \sum \mid u_n \rangle \langle u_n \mid \tag{14-17}$$

biçiminde yazmak,belleğe yararlı olan bir düzenektir;ve bu biçimiyle $\langle u_i \mid FG \mid u_j \rangle$ matris öğesindeki F ve G işlemcilerinin arasına konulduğunda (14-15)'i verir.Matris bağlantısı için başka bir kanıt,

$$\langle u_m \mid F \mid u_n \rangle^* = \langle Fu_n \mid u_m \rangle = \langle u_n \mid F^\dagger \mid u_m \rangle \tag{14-18}$$

bağıntısından gelir.Bu bağıntı,F işlemcisi bir matrisle gösterimlendiğinde,$F^\dagger$ hermitien eşlenik işlemcisinin ise hermitien eşlenik matrisle gösterimleneceğini gösterir;çünkü hermitien eşlenik matris,

$$(F^\dagger)_{nm} = F^*_{mn} \tag{14-19}$$

olarak tanımlanır.

Bu tartışmada harmonik salınıcın Hamiltonien'inin özdurumlarından yola çıktığımızla ilgili hiç bir şey söylemediğimize dikkat ediniz.Onlarla ilgili tek şey,onların H'yi gösterimleyen matrisi köşegenleştirmeleridir.Başka bir tam küme için H köşegen olmayacak;ve özdeğerlerini,yani köşegen olduğu zamanki matris öğelerini bulmak kolay olmayacaktır.

Y $_{\ell m}$'ler,$\vec{L}^2$ ve L_z'yi birlikte köşegenleştiren durumlar olarak tanımlanmıştır. ℓ'yi sabit bırakırsak,yani yalnız m değerlerinin değiştiği durumları alırsak,kısa bir yazımla,(14-1)'in ikinci bağıntısı

$$\langle \ell,m' \mid L_z \mid \ell,m \rangle = \hbar m \quad \delta_{m'm} \tag{14-20}$$

verir.Ayrıca (10-40),(10-52) ile birlikte

$$\langle \ell,m' \mid L_\pm \mid \ell,m \rangle = \hbar [\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} \quad \delta_{m',m\pm 1} \tag{14-21}$$

olduğunu söyler.Bu ise, $\ell = 1$ açısal momentum işlemcileri için

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}22)$$

$$L_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}23)$$

ve

$$L_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}24)$$

matris gösterimlerine götürür.Satırlar soldan sağa ve sütunlar yukardan aşağıya olmak üzere,$m = 1,0,-1$ sırasına göre etiketlenmiştir.Bu matrislerin değişme bağıntılarını sağladığını doğrulamak kolaydır.Örneğin,

$$[L_+,L_-] = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} - \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = 2\hbar L_z \qquad (14\text{-}25)$$

Durumlar arasındaki genel bağıntılar da matris gösterimi ile yazılabilir.Örneğin,

$$\Psi = A\,\phi \qquad (14\text{-}26)$$

gibi bir bağıntıyı gözönüne alalım.Bunun,bir u_i tam kümesinin herhangi bir üyesiyle skaler çarpımını alırsak,

$$\langle u_i | \Psi \rangle = \langle u_i | A\,\phi \rangle \qquad (14\text{-}27)$$

elde ederiz.Ayrıca,(14-17) biçimindeki birim işlemcinin A ile ϕ arasına konulması,

$$\langle u_i | \Psi \rangle = \sum_n \langle u_i | A | u_n \rangle \langle u_n | \phi \rangle \qquad (14\text{-}28)$$

verir. $\langle u_n | \phi \rangle$ 'yi,

$$\langle u_n | \phi \rangle \rightarrow \begin{bmatrix} \langle u_1 | \phi \rangle \\ \langle u_2 | \phi \rangle \\ \langle u_3 | \phi \rangle \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} \qquad (14\text{-}29)$$

biçiminde bir α_n sütun vektörü olarak yazarsak,ve benzerince de

$$\langle u_n | \psi \rangle \rightarrow \begin{bmatrix} \langle u_1 | \psi \rangle \\ \langle u_2 | \psi \rangle \\ \langle u_3 | \psi \rangle \\ \vdots \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{14-30}$$

yazarsak,(14-26)'nın matris gösterimi

$$\beta_i = \sum_n A_{in} \alpha_n \tag{14-31}$$

olur.Böylece matrisler işlemcileri,ve sütun vektörleridurumları gösterir.Anlaşma olarak, $\langle \phi | u_n \rangle = \langle u_n | \phi \rangle^*$ skaler çarpımı

$$\langle \phi | u_n \rangle \rightarrow (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \alpha_3^*, \ldots) \tag{14-32}$$

biçiminde bir satır olarak yazılır;bu yüzden örneğin, $\langle \phi | \psi \rangle$ skaler çarpımı

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_n \langle \phi | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle$$

$$= \sum_n \alpha_n^* \beta_n \tag{14-33}$$

olarak yazılabilir.

Bir özdeğer denklemi,(14-26)'nın özel bir halidir.Bu,

$$A\phi = a\phi \tag{14-34}$$

demektir,ve matris biçiminde

$$\sum A_{in} \alpha_n = a \alpha_i \tag{14-35}$$

olarak yazılır.Bu,

$$\begin{pmatrix} A_{11} - a & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} - a & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} - a & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = 0 \tag{14-36}$$

denklemine eşdeğerdir; ve yalnızca eğer bu matrisin determinantı sıfır olursa,bu denklemin aşikâr olmayan bir çözümü vardır:

$$\det | A_{in} - a \delta_{in} | = 0 \tag{14-37}$$

Bu,sonlu matrislerle gösterimlenen işlemciler için özdeğerleri (ve özvektörleri) bulmanın iyi bir yoludur,fakat ne yazık ki,sonsuz matrisler için iş böyle basit değildir.

İşlemcileri fonksiyonlar ve diferansiyellerle gösterimleme seçeneğinin bulunması

gerçekten bir şanstır,gene de tüm işlemciler bu yolla gösterilemez.En basit örnek, $\ell = 1/2$ açısal momentumuna karşılık gelen işlemcilerdir.Demek.(10-51) ve (10-60) bize,

$$Y_{1/2,\ \pm 1/2} = C_{\pm} \quad \sqrt{\sin\theta}\ e^{\pm i\phi/2} \tag{14-38}$$

olduğunu söyler;ve (10-54),

$$L_{-}\, Y_{1/2,1/2} \propto \frac{\cos\theta}{\sqrt{\sin\theta}}\, e^{-i\phi/2} \tag{14-39}$$

bağıntısını hesaplamamızı sağlar.Fakat bu,$Y_{1/2,-1/2}$ ile orantılı değildir,ve ayrıca $\theta = 0$ ve π da tekildir.Böylece, $\ell = 1/2$ için güçlükler vardır; ve matris gösterimlerine dönmemiz gerekir. $\ell = 1/2$'den söz etmek yerine $S = 1/2$ spininden söz edeceğiz; ve ℓ harfini $\vec{r}x\vec{p}$ 'ye karşılık gelen yörüngesel açısal momentum için kullanacağız.Spin işlemcileri S_x,S_y ve S_z'dir,ve

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \tag{14-40}$$

v.b. değişme bağıntıları ile tanımlanırlar.
Bunları,2x2'lik matrislerle gösterimlemek istiyoruz.(14-20) bağıntısı,

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \tag{14-41}$$

ve (14-21) ise,

$$S_{+} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_{-} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{14-42}$$

verirler.Bu gösterimi,

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma} \tag{14-43}$$

olarak yazabiliriz; buradaki

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{14-44}$$

matrisleri,Pauli matrisleridir.Bunların (14-40)'ı sağlamaları gerektiğinden,

$$[\sigma_x,\ \sigma_y] = 2i\ \sigma_z \tag{14-45}$$

v.b. değişme bağıntılarını sağlarlar; ayrıca,

$$\sigma_x^{\,2} = \sigma_y^{\,2} = \sigma_z^{\,2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv 1 \tag{14-46}$$

ve

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x$$
$$\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z$$
$$\sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y \qquad (14\text{-}47)$$

bağıntılarını da sağlarlar.Bunlar spin 1/2 gösterimlerine özgü bağıntılardır,ve örneğin $\ell = 1$ matrisleri için geçerli değillerdir.

S_z'nin özdurumları,spinör denen iki bileşenli bir sütun vektörle gösterilecektir.Bu özspinörleri bulmak için,

$$S_z \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}48)$$

denklemini çözeriz;bu denklemi,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

olarak,veya

$$\begin{pmatrix} u \\ -v \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

olarak yazabiliriz.Artı özçözüm için $v = 0$, ve eksi özçözüm için $u = 0$ 'dır.Böylece, $\left[S_z = +(1/2)\hbar \right]$ spin yukarı ve $\left[S_z = -(1/2)\hbar \right]$ spin aşağı durumlarına karşılık gelen özspinörler için,sırasıyla

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}49)$$

yazarız.

İsteksel bir spinör bu tam kümeye açılabilir:

$$\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \alpha_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}50)$$

Ve açılım postülatları şu yorumu verir: $|\alpha_+|^2$ ve $|\alpha_-|^2$ nicelikleri,

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1 \qquad (14\text{-}51)$$

biçiminde doğru olarak boylandırılmış iseler, $\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$ durumu üzerinde S_z'nin bir ölçümünün $+(1/2)\hbar$ ve $-(1/2)\hbar$ vermesi olasılıkları,sırasıyla $|\alpha_+|^2$ ve $|\alpha_-|^2$ olur.

Her zaman, S_z'yi köşegen almak zorunlu değildir. $S_x \cos\phi + S_y \sin\phi$ işlemcisinin özdurumlarını arıyorsak,

$$(S_x \cos\phi + S_y \sin\phi) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\lambda \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}52)$$

denkleminini çözmemiz gerekir. Bu denklemi açık olarak,

$$\begin{pmatrix} 0 & \cos\phi - i\sin\phi \\ \cos\phi + i\sin\phi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

biçiminde yazabiliriz. Bu,

$$\begin{aligned} v\, e^{-i\phi} &= \lambda u \\ u\, e^{i\phi} &= \lambda v \end{aligned} \qquad (14\text{-}53)$$

verir. Öyleyse,

$$\lambda = \pm 1 \qquad (14\text{-}54)$$

olur. $\lambda = +1$ ve $\lambda = -1$'e karşılık gelen özvektörler sırasıyla,

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi/2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi/2} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi/2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}55)$$

dir. ϕ'yi $\phi + 2\pi$ olarak değiştirirsek, çözümlerin işaret değiştirdiğinin gözlenmesi ilginçtir. Bu, spini yarım tek tamsayı olan dalga fonksiyonlarının (fermiyon durumları) belirtgenidir; böyle olması kuantum mekaniğini bozmaz, çünkü -1 yalnızca bir evre çarpanıdır. Ancak bu, açısal momentumu yarım tek tamsayı olan klasik bir makroskopik dalga paketinin kurulamayacağını söyler.

İsteksel bir α durumu verildiğinde, $\vec{S}$'nin beklenen değeri hesaplanabilir:

$$\langle \alpha | \vec{S} | \alpha \rangle = \sum_i \sum_j \langle \alpha | i \rangle \langle i | \vec{S} | j \rangle \langle j | \alpha \rangle$$

veya eşdeğer olarak,

$$(\alpha_+^*, \alpha_-^*)\, \vec{S} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$$

buluruz. Böylece,

$$\langle S_x \rangle = (\alpha_+^*, \alpha_-^*) \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar \left(\alpha_+^*, \alpha_-^* \right) \begin{pmatrix} \alpha_- \\ \alpha_+ \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \left(\alpha_+^* \alpha_- + \alpha_-^* \alpha_+ \right)$$

$$\langle s_y \rangle = \frac{1}{2}\hbar \left(\alpha_+^*, \alpha_-^* \right) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar \left(\alpha_+^*, \alpha_-^* \right) \begin{pmatrix} -i\alpha_- \\ i\alpha_+ \end{pmatrix} = -\frac{i\hbar}{2} \left(\alpha_+^* \alpha_- - \alpha_-^* \alpha_+ \right)$$

$$\langle s_z \rangle = \frac{1}{2}\hbar \left(\alpha_+^*, \alpha_-^* \right) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ -\alpha_- \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \left(|\alpha_+|^2 - |\alpha_-|^2 \right) \qquad (14\text{-}56)$$

bulunur.Hermitien işlemciler için beklendiği gibi,bunların tümünün gerçel olduğuna dikkat edimiz.

Daha sonra,bir elektronun spininin,örneğin hidrojen atomunun Hamiltonien'inde yörüngesel açısal momentumla çiftlenimli olarak ortaya çıktığını göreceğiz.Örneğin bir elektron bir kristal örgüsünün köşesine yerleştiğinde,çoğu zaman spin,elektronun taşıdığı tek özgürlük derecesi olarak incelenebilir.Spini nedeniyle elektronun bir iç manyetik çiftkutup momenti olacaktır,ve bu manyetik moment[1]

$$\vec{M} = -\frac{eg}{2mc}\vec{S} \qquad (14\text{-}57)$$

dir; burada,g jiromanyetik oranı 2'ye çok yakındır:

$$g = 2\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \ldots \right) = 2.0023192 \qquad (14\text{-}58)$$

ve m elektron kütlesidir.

Böyle yerleşmiş bir elektron için,dış bir $\vec{B}$ manyetik alanının varlığında,Hamiltonien tam olarak

$$H = -\vec{M} \cdot \vec{B} = \frac{eg}{4mc}\vec{\sigma} \cdot \vec{B} \qquad (14\text{-}59)$$

potansiyel enerjisine eşittir. $\psi(t) = \begin{bmatrix} \alpha_+(t) \\ \alpha_-(t) \end{bmatrix}$ durumu için Schrödinger denklemi,

[1] $\vec{L}$ açısal momentumuyla bir daire üzerinde hareket eden"klasik" bir elektron,manyetik momenti $\vec{M} = -e\vec{L}/2mc$ olan bir akım ilmeği oluşturur.Spin tümüyle kuantum mekaniksel bir değişken olduğundan,(14-57) ancak benzetme yolu ile tartışılabilir.Bunun doğrulanması için,göreli Dirac denklemine gerek vardır; g = 2 olduğu da,bu denklemden çıkar.g = 2 nin düzeltmeleri kuantum elektrodinamiğinden gelir.Spinin klasik olmayan görünüşlerini, onun bulucuları olan S.Goudsmit ve G.Uhlenbeck (1925) göstermiştir.

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = \frac{eg\hbar}{4mc} \vec{\sigma}.\vec{B}\psi(t) \qquad (14\text{-}60)$$

dir. $\vec{B}$ 'nin doğrultusu z-ekseninin tanımlayacak biçimde seçilirse, ve

$$\psi(t) = \begin{bmatrix} \alpha_+(t) \\ \alpha_-(t) \end{bmatrix} = e^{-i\omega t}\begin{bmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{bmatrix} \qquad (14\text{-}61)$$

yazılırsa, denklem

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \frac{eg\hbar B}{4mc} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}62)$$

biçimini alır. Çözümler farklı ω frekanslarına karşılık gelirler. $\omega = egB/4mc$ için $\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, ve $\omega = -(egB/4mc)$ için $\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ elde edilir. Böylece, başlangıç durumu

$$\psi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \qquad (14\text{-}63)$$

olursa, daha sonraki bir anda, durum

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} a\, e^{-i\omega t} \\ b\, e^{i\omega t} \end{pmatrix}, \quad \omega = \frac{geB}{4mc} \qquad (14\text{-}64)$$

olacaktır. $t = 0$ anında spin, S_x'in $+(1/2)\hbar$ özdeğerli bir özdurumu olsun; yani spin, "x-ekseni doğrultusunu göstersin". Buna göre,

$$\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

olur; böylece, $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ olmalıdır. Öyleyse, daha sonraki bir anda

$$\langle S_x \rangle = \frac{1}{2}\hbar \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}\right)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{4}\left(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}\right)\begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t \qquad (14\text{-}65)$$

olacaktır.Benzerince,

$$\langle S_y\rangle = \frac{1}{2}\hbar \; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{4}\,(-i\,e^{2i\omega t} + i\,e^{-2i\omega t})$$

$$= \frac{\hbar}{2} \sin 2\omega t \qquad (14\text{-}66)$$

bulunur.Böylece spin,$\vec{B}$ 'nin de doğrultusu olan z-akseni etrafında

$$2\omega = \frac{egB}{2mc} \simeq \frac{eB}{mc} \qquad (14\text{-}67)$$

frekansıyla eğirim yapar.

Bir katı içinde,bir elektronun g jiromanyetik çarpanı katı içinde etkiyen kuvvetlerin doğasından etkilenir.g'nin bilinmesi,bu kuvvetlerin ne olabileceğine değgin çok yararlı bağ koşulları sağlar,ve bu nedenle g'yi ölçebilmek önemlidir.Bu,şimdi betimleyeceğimiz parmanyetik rezonans yöntemi ile yapılabilir.

Tek özgürlük derecesi spin durumları olan bir elektronun,z-doğrultusundaki,zamana göre sabit,büyük bir B_o manyetik alanının ve x-doğrultusundaki,salınan küçük bir $B_1 \cos \omega t$ alanının etkisi altında olduğunu düşünelim.Bu durumda Schrödinger denklemi,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} = \frac{eg\hbar}{4mc} \begin{pmatrix} B_o & B_1 \cos \omega t \\ B_1 \cos \omega t & -B_o \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} \qquad (14\text{-}68)$$

olur; bu ise,

$$\omega_o = \frac{egB_o}{4mc} \qquad \omega_1 = \frac{egB_1}{4mc} \qquad (14\text{-}69)$$

olmak üzere,

$$i\,\frac{da(t)}{dt} = \omega_o\, a(t) + \omega_1 \cos \omega t\, b(t)$$

$$i\,\frac{db(t)}{dt} = \omega_1 \cos \omega t\, a(t) - \omega_o b(t) \qquad (14\text{-}70)$$

verir.

$$A(t) = a(t)\, e^{i\omega_o t}$$

$$B(t) = b(t)\, e^{-i\omega_o t} \qquad (14\text{-}71)$$

olsun.Bunlar,

$$i\,\frac{dA(t)}{dt} = \omega_1 \cos \omega t\, B(t)\, e^{2i\omega_o t}$$

$$\approx \frac{1}{2}\omega_1 \, e^{i(2\omega_0-\omega)t} B(t)$$

$$i\frac{dB(t)}{dt} = \omega_1 \cos\omega t\, A(t)\, e^{-2i\omega_0 t}$$

$$\approx \frac{1}{2}\omega_1 \, e^{-i(2\omega_0-\omega)t} A(t) \qquad (14\text{-}72)$$

denklemlerini sağlarlar.Bunları elde ederken bir yaklaşıklık yaptık:

$$\cos\omega t\, e^{2i\omega_0 t} = \frac{1}{2}\left[e^{i(2\omega_0+\omega)t} + e^{i(2\omega_0-\omega)t}\right]$$

$$\approx \frac{1}{2}\, e^{i(2\omega_0-\omega)t}$$

yazdık.Biz $\omega = 2\omega_0$ değerleriyle ilgileneceğimizden,ve her ikisi de büyük olduğundan,attığımız terim çok hızlı salınır,ve bunun katkısının ortalama olarak sıfır olacağını bekleyebiliriz.Daha ayrıntılı bir inceleme de bu gözlemi destekler.B(t)'yi eleyebiliriz:

$$B(t) = \frac{2i}{\omega_1}\,\frac{dA(t)}{dt}\, e^{-i(2\omega_0-\omega)t} \qquad (14\text{-}73)$$

olduğunu kullanarak,A(t) için ikinci basamaktan bir diferensiyel denklem elde ederiz:

$$\frac{d^2A(t)}{dt^2} - i(2\omega_0 - \omega)\frac{dA(t)}{dt} + \frac{\omega_1^2}{4}A(t) = 0 \qquad (14\text{-}74)$$

Bu denklem için,

$$A(t) = A(0)\, e^{i\lambda t} \qquad (14\text{-}75)$$

çözümünü deneyelim.Bu,(14-74)'te yerine konulduğunda,

$$-\lambda^2 + (2\omega_0 - \omega)\lambda + \frac{\omega_1^2}{4} = 0$$

denkleminin kökleri, λ'yı

$$\lambda_\pm = \frac{2\omega_0 - \omega \pm \sqrt{(2\omega_0-\omega)^2 + \omega_1^2}}{2} \qquad (14\text{-}76)$$

olarak belirler.

En genel çözüm,

$$A(t) = A_+\, e^{i\lambda_+ t} + A_-\, e^{i\lambda_- t} \qquad (14\text{-}77)$$

biçimindedir;ve buradan

$$B(t) = -\frac{2}{\omega_1}\, e^{-i(2\omega_0-\omega)t}\left(\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}\right) \qquad (14\text{-}78)$$

bulunur.Son olarak,bu da

$$a(t) = e^{-i\omega_0 t}\left(A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t}\right)$$

$$b(t) = -\frac{2}{\omega_1}\, e^{-i(\omega_0-\omega)t}\left(\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}\right) \qquad (14\text{-}79)$$

verir.$t = 0$ anında elektronun spini artı z-doğrultusunu gösteriyorsa,$a(0) = 1$ ve $b(0) = 0$ olduğundan,

$$A_+ + A_- = 1$$

$$\lambda_+ A_+ + \lambda_- A_- = 0$$

elde edilir;buradan da,

$$A_+ = \frac{\lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+}$$

$$A_- = -\frac{\lambda_+}{\lambda_- - \lambda_+} \tag{14-80}$$

bulunur.Daha sonraki bir t anında spinin eksi z-doğrultusunda bulunma olasılığı $|b(t)|^2$'dir:

$$|b(t)|^2 = \frac{4}{\omega_1^2}\left|\frac{\lambda_+\lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} e^{i\lambda_+ t} - \frac{\lambda_+\lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} e^{i\lambda_- t}\right|^2$$

$$= \frac{\omega_1^2}{(2\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}\left|1 - e^{-i(\lambda_+ - \lambda_-)t}\right|^2$$

$$= \frac{\omega_1^2}{(2\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}\,\frac{1 - \cos\sqrt{(2\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}\,t}{2} \tag{14-81}$$

$\omega_1 \ll \omega, \omega_0$ olduğundan,bu nicelik küçüktür.B_1 alanının frekansı $2\omega_0$'a ayarlanırsa olasılık

$$|b(t)|^2 \to \frac{1 - \cos \omega_1 t}{2} \tag{14-82}$$

biçiminde,bire yaklaşır."Yukarı" durumun enerjisi "aşağı" durumunkinden farklı olduğundan,dış alandan soğurulan böyle bir enerji farkı rezonans frekansını belirler; ve böylece ω_0,ve buradan da g büyük bir kesinlikle ölçülebilir.

Problemler

1. Harmonik salınganın taban durum vektörü,

$$u_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

olarak verilmişse,(14-2) ve (14-10)'u kullanarak u_1, u_2, u_3 'ü hesaplayınız.Genel desem nedir?

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn}$$

olduğuna kendinizi inandırınız.

2. Verilen bir

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}$$

vektörü için (14-9),(14-10) ve (14-11) harmonik salınıcan işlemcileriyle aşağıdaki nicelikleri hesaplayınız.

(a) $\langle H \rangle$.

(b) $\langle x^2 \rangle$, $\langle x \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, $\langle p \rangle$.

(c) Bunu kullanarak, $\Delta p \ \Delta x$ 'i hesaplayınız.

[Not. p ve x'in A ve $A^\dagger$ türünden deyimleri,(7-4)'ten bulunur.]

3. Harmonik salınıcan için,x^4'ün matris gösteriminde sol üstteki 4 x 4 köşesini hesaplayınız.

4. 3/2 açısal momentumu için,(14-20) ve (14-21)'i kullanarak L_x, L_y ve L_z'nin matris gösterimini hesaplayınız.

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

v.b. değişme bağıntılarının sağlandığını doğrulayınız.

5.

$$H = \frac{1}{2 I_1} L_x^2 + \frac{1}{2 I_2} L_y^2 + \frac{1}{2 I_3} L_z^2$$

Hamiltonien'i veriliyor. (a) Sistemin açısal momentumu 1 olduğu zaman, (b) Sistemin açısal momentumu 2 olduğu zaman,H'nin özdeğerlerini bulunuz.

[Not. Açısal momentum 2 olduğunda L_x, L_y ve L_z'nin matris gösterimleri,

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

$$L_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad L_- = (L_+)$$

dan elde edilebilir.

6.

$$H = \begin{pmatrix} 8 & 4 & 6 \\ 4 & 14 & 4 \\ 6 & 4 & 8 \end{pmatrix}$$

matrisinin özdeğerlerini hesaplayınız.Özvektörler nelerdir?

7. Açısal momentumu 1 olan ve

$$u = \frac{1}{\sqrt{26}} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix}$$

durum vektörüyle gösterimlenen bir sistemi gözönüne alınız.L_x'in bir ölçümünün 0 değerini vermesi olasılığı nedir?

8. Açısal momentumu 1 olan bir sistemi gözönüne alınız.$L_xL_y+L_yL_x$ işlemcisinin özfonksiyonları ve özdeğerleri nedir?

9. Spini 1/2 olan bir sistemi gözönüne alınız.S_x+S_y işlemcisinin özdeğerleri ve özvektörleri nelerdir? Bu işlemcinin bir ölçümünün yapıldığını,ve sistemin büyük özdeğere karşılık gelen bir durumda bulunduğunu varsayınız.S_z'nin bir ölçümünün $\hbar/2$ vermesi olasılığı nedir?

10. Heisenberg görünüşündeki bir işlemcinin değişme hızının denklemi,Denk.(7-47) ile verilir.$S_x(t)$,... işlemcilerini gözönüne alınız.Hamiltonien

$$H = \frac{e_\mu}{2mc} \vec{S}(t) \cdot \vec{B}$$

olarak veriliyorsa,ve değişme bağıntıları $[S_x(t),S_y(t)] = i\hbar\, S_z(t)$ v.b. iseler,bu işlemcilerin hareket denklemleri nedir? $\vec{B} = (0,0,B)$ ise,$S(t)$'yi $S(0)$ türünden çözünüz.

11. Spini 1/2 olan bir cisim,$t = 0$ anında S_x'in $+\hbar/2$ özdeğerli bir özdurumundadır.Aynı anda bir $\vec{B} = (0,0,B)$ manyetik alanı içine konulmuş ve bir T zamanı için eğirim yapmaya bırakılmıştır.0 anda manyetik alan,bileşenleri $(0,B,0)$ olacak biçimde çok hızlı olarak y-doğrultusuna döndürülmüştür.Bundan sonraki T zaman aralığı sonunda, S_x'in bir ölçümü yapılmıştır. $\hbar/2$ değerinin bulunması olasılığı nedir?

12. Spini 1 olan bir parçacığın bir dış manyetik alan içindeki davranışını inceleyiniz. $\vec{B} = (0,0,B)$ seçiniz ve başlangıç durumunu,

$$\vec{S}\cdot\vec{n} = S_x \sin\theta\cos\phi + S_y \sin\theta\sin\phi + S_z \cos\theta$$

nın $\hbar$, 0 ve $-\hbar$ ardışık özdeğerli özdurumlarından biri olarak alınız.
[İpucu: (14-22)'den (14-24)'e kadarki verilen matris gösterimlerini kullanınız.]

Kaynaklar

Spin ile ilgili konular standarttır, ve tartışmalar bu eitdim sonunda sıralanan kitaplarım tümünde bulunabilir.

Bölüm 15

AÇISAL MOMENTUMLARIN TOPLANMASI

Spinleri $\vec{S}_1$ ve $\vec{S}_2$ işlemcileri ile betimlenen iki elektronumuzun olduğunu varsayınız. Bu işlemci kümelerinin herbiri standart açısal momentum değişme bağıntılarını sağlarlar:

$$[S_{1x}, S_{1y}] = i\hbar S_{1z}$$

v.b.,

$$[S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar S_{2z} \qquad (15\text{-}1)$$

v.b. Fakat bu işlemci kümeleri birbirleri ile sıradeğiştirir, çünkü başka başka parçacıklara bağlanmış olan özgürlük dereceleri bağımsızdır:

$$[\vec{S}_1, \vec{S}_2] = 0 \qquad (15\text{-}2)$$

Şimdi $\vec{S}$ toplam spinini,

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \qquad (15\text{-}3)$$

olarak tanımlayalım. $\vec{S}$'nin bileşenlerinin sağladığı değişme bağıntıları,

$$\begin{aligned}[S_x, S_y] &= [S_{1x} + S_{2x},\ S_{1y} + S_{2y}] \\ &= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] \\ &= i\hbar (S_{1z} + S_{2z}) = i\hbar S_z \end{aligned} \qquad (15\text{-}4)$$

v.b. olur. Bu yüzden $\vec{S}$'ye <u>toplam spin</u> demek doğrudur. Şimdi $\vec{S}^2$ ve S_z'nin özdeğerlerini ve özfonksiyonları belirleyebiliriz.

Bu iki-spin sisteminin aslında dört durumu vardır. Birinci elektronun spinörünü $\chi_{\pm}^{(1)}$ ile gösterirsek,

$$\begin{aligned} \vec{S}_1^{\,2}\, \chi_{\pm}^{(1)} &= \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}+1\right)\hbar^2 \chi_{\pm}^{(1)} \\ S_{1z}\, \chi_{\pm}^{(1)} &= \pm \tfrac{1}{2}\hbar\, \chi_{\pm}^{(1)} \end{aligned} \qquad (15\text{-}5)$$

olur; ve ikinci elektronun $\chi_{\pm}^{(2)}$ spinörü için de durum buna benzer.Böylece bu dört durum,

$$\chi_{+}^{(1)}\chi_{+}^{(2)}\ ,\ \chi_{+}^{(1)}\chi_{-}^{(2)}\ ,\ \chi_{-}^{(1)}\chi_{+}^{(2)}\ ,\ \chi_{-}^{(1)}\chi_{-}^{(2)} \tag{15-6}$$

olur.Bu dört durum için S_z'nin özdeğerleri,

$$\begin{aligned} S_z\,\chi_{\pm}^{(1)}\chi_{\pm}^{(2)} &= (S_{1z}+S_{2z})\chi_{\pm}^{(1)}\chi_{\pm}^{(2)} \\ &= (S_{1z}\,\chi_{\pm}^{(1)})\chi_{\pm}^{(2)} \quad + \quad \chi_{\pm}^{(1)}(S_{2z}\,\chi_{\pm}^{(2)}) \end{aligned}$$

denkleminden,

$$\begin{aligned} S_z\,\chi_{+}^{(1)}\chi_{+}^{(2)} &= \hbar\,\chi_{+}^{(1)}\chi_{+}^{(2)} \\ S_z\,\chi_{+}^{(1)}\chi_{-}^{(2)} &= S_z\,\chi_{-}^{(1)}\chi_{+}^{(2)} = 0 \\ S_z\,\chi_{-}^{(1)}\chi_{-}^{(2)} &= -\hbar\,\chi_{-}^{(1)}\chi_{-}^{(2)} \end{aligned} \tag{15-7}$$

olarak bulunur.m-değeri 0 olan iki durum vardır.Bu iki durumun bir çizgisel birleştiriminin,bir S = 1 durumu vereceği beklenebilir; ve bu durum, m = 1 ve m = −1 ile birlikte bir üçlü oluşturur.Buna dik olan birleştirim ise,S = 0 tekli durumunu oluşturacaktır.Bu beklentiyi doğrulamak için,

$$S_{-} = S_{1-} + S_{2-} \tag{15-8}$$

azaltma işlemcisini kuralım,ve m = 1 durumuna uygulayalım. Bu bize,öndeki bir katsayı dışında,S = 1 üçlüsünün m = 0 durumunu vermelidir.Bunu göstermek için,

$$S_{-}^{(i)}\chi_{+}^{(i)} = \hbar\,\chi_{-}^{(i)} \tag{15-9}$$

olduğunu kullanalım; bu bağıntı,

$$\frac{1}{2}\hbar\left[\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} - i\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} \tag{15-10}$$

hesabından bulunabilir.Gerçekten de,(15-9)'u kullanarak

$$\begin{aligned} S_{-}\,\chi_{+}^{(1)}\chi_{+}^{(2)} &= (S_{1-}\,\chi_{+}^{(1)})\chi_{+}^{(2)} + \chi_{+}^{(1)}S_{2-}\,\chi_{+}^{(2)} \\ &= \hbar\,\chi_{-}^{(1)}\chi_{+}^{(2)} + \hbar\,\chi_{+}^{(1)}\chi_{-}^{(2)} \\ &= \sqrt{2}\,\hbar\,\frac{\chi_{+}^{(1)}\chi_{-}^{(2)} + \chi_{-}^{(1)}\chi_{+}^{(2)}}{\sqrt{2}} \end{aligned} \tag{15-11}$$

buluruz.Bu çizgisel birleştirim boylandırılmıştır,ve öndeki $\sqrt{2}\,\hbar$ dengeleme çarpanı, $\ell = m = 1$ için (10-36) ve (10-48)'den beklenenle uyuşur.Şimdi,bu çizgisel birleştirime S_- 'yi uygular,ve

$$S_{-}^{(i)}\chi_{-}^{(i)} = 0 \tag{15-12}$$

olduğunu gözönünde tutarsak,bir S = 1 açısal momentum durumu için beklediğimiz

gibi

$$S_- \frac{\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}}{\sqrt{2}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left(\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} \right)$$

$$= \sqrt{2}\,\hbar\,\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} \qquad (15\text{-}13)$$

elde ederiz.

(15-11)'e dik olarak kurulan ve doğru olarak boylandırılan öbür durum,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)} \right) \qquad (15\text{-}14)$$

biçimindedir; ve başka ortağı olmadığından, bunun bir $S = 0$ durumu olduğunu düşünürüz. Bunu yoklamak amacıyla,

$$\chi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} \pm \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)} \right) \qquad (15\text{-}15)$$

iki durumu,için,$\vec{S}^{\,2}$'yi hesaplıyoruz.$\vec{S}^{\,2}$'yi,

$$\vec{S}^{\,2} = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^{\,2} + \vec{S}_2^{\,2} + 2\vec{S}_1\vec{S}_2$$

$$= \vec{S}_1^{\,2} + \vec{S}_2^{\,2} + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} \qquad (15\text{-}16)$$

olarak yazalım.Önce,

$$\vec{S}_1^{\,2}\,\chi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_-^{(2)}\,\vec{S}_1^{\,2}\,\chi_+^{(1)} \pm \chi_+^{(2)}\vec{S}_1^{\,2}\,\chi_-^{(1)} \right)$$

$$= \frac{3}{4}\,\hbar^2\chi_\pm \qquad (15\text{-}17)$$

ve benzer olarak

$$\vec{S}_2^{\,2}\,\chi_\pm = \frac{3}{4}\,\hbar^2\,\chi_\pm \qquad (15\text{-}18)$$

buluruz.Bundan sonra,

$$2S_{1z}S_{2z}\chi_\pm = 2\left(\frac{1}{2}\hbar\right)\left(-\frac{1}{2}\hbar\right)\chi_\pm = -\frac{1}{2}\,\hbar^2\,\chi_\pm \qquad (15\text{-}19)$$

olduğunu hesaplarız.Son olarak da,

$$(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})\,\chi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(S_{1+}\chi_+^{(1)}S_{2-}\chi_-^{(2)} + S_{1-}\chi_+^{(1)}\,S_{2+}\chi_-^{(2)} \right.$$

$$\left. \pm\, S_{1+}\chi_-^{(1)}\,S_{2-}\chi_+^{(2)} \pm S_{1-}\chi_-^{(1)}S_{2+}\chi_+^{(2)} \right)$$

denklemi,(15-9) ve (15-12)'nin yardımıyla

$$(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})\,\chi_\pm = \pm\,\hbar^2\,\chi_\pm \qquad (15\text{-}20)$$

verir.Böylece

$$\vec{S}^2 \chi_\pm = \hbar^2\left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4} - \frac{1}{2} \pm 1\right)\chi_\pm = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \hbar^2 \chi_\pm$$

$$= \hbar^2 s(s+1)\,\chi_\pm \qquad (15\text{-}21)$$

elde edilir; burada $s = 1$ ve 0'dır; ve bunlar, $\pm$ durumlarına karşılık gelirler.

Böylece 1/2 spinli iki parçacığın toplam dört durumunun,bir üçlü ve bir tekli toplam spin durumu verecek biçimde yeniden birleştirilebileceğini göstermiş olduk.Özgür spinler için,bu iki betimleme tam olarak eşdeğerdir.Bununla birlikte,kuvvetlerin spine bağlı olduğu fiziksel bir sistem varsa,tek tek spinlerin özfonksiyonları artık H ile örneğin $\vec{S}_1^{\,2}$, S_{1z} ve $\vec{S}_2^{\,2}$, S_{2z} 'nin ortak özfonksiyonları değildir; fakat bunlar H, $\vec{S}^2$, S_z, $\vec{S}_1^{\,2}$ ve $\vec{S}_2^{\,2}$ 'nin ortak özfonksiyonları olabilirler. Bu,bir örnekle kolayca görülebilir.

İki elektron arasında,

$$V(r) = V_1(r) + \frac{1}{\hbar^2}\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2\, V_2(r) \qquad (15\text{-}22)$$

biçiminde spine bağlı bir potansiyelimiz varsa,S_{1z} ve S_{2z} 'nin ikinci terimle sıradeğiştirmediğini kolayca görebiliriz; bu yüzden,bu potansiyeli kapsayan H'nin özdurumları,S_{1z} ve S_{2z}'nin özdurumlarının basit bir çarpımı olamaz. Ancak

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^{\,2} - \vec{S}_2^{\,2}) \qquad (15\text{-}23)$$

olduğunu gözönüne alırsak,$\vec{S}^2$,$\vec{S}_1^{\,2}$ ve $\vec{S}_2^{\,2}$ 'nin özfonksiyonlarına etkidiğinde bu terimin yerine özdeğer gelebilir,ve o zaman

$$V(r) = V_1(r) + \frac{1}{2}\,V_2(r)\left[\, s(s+1) - \frac{3}{2}\,\right]$$

$$= V_1(r) + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix} V_2(r) \qquad \begin{cases} s = 1 \\ s = 0 \end{cases} \qquad (15\text{-}24)$$

olur.Gerçekten, böyle bir spine bağlı potansiyel nötron-proton sisteminde gözlenir. Bağlı durum,bir $s = 1$ durumudur—bu döteromdur—;fakat yalnızca $V_2(r) \neq 0$ için olabilen, ve bağlı olmayan bir $s = 0$ durumu da vardır.

İlerdeki uygulamalar için çok daha önemli olan,spinle yörüngesel açısal momentumun birleştirimidir. $\vec{L}$ uzayısal koordinatlara bağlı,fakat $\vec{S}$ bağlı olmadığından bunlar sıradeğiştirir:

$$[\vec{L}, \vec{S}\,] = 0 \qquad (15\text{-}25)$$

Böylece,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \qquad (15\text{-}26)$$

bağıntısıyla tanımlanan $\vec{J}$ toplam açısal momentumunun bileşenleri,açısal momentum

değişme bağıntılarını sağlayacaktır.Şimdi

$$J_z = L_z + S_z \tag{15-27}$$

ve

$$\vec{J}^2 = (\vec{L}^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} + \vec{S}^2)$$

$$= \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+ \tag{15-28}$$

işlemcilerinin özdurumlarını kurmak üzere, $Y_{\ell m}$ ve $\chi_\pm$ 'lerin çizgisel birleştirimlerini arayabiliriz,

$$\Psi_{j,m+1/2} = \alpha\, Y_{\ell m}\chi_+ + \beta\, Y_{\ell,m+1}\chi_- \tag{15-29}$$

çizgisel birleştirimini gözönüne alalım. Bu,kuruluşu bakımından, J_z'nin $(m+1/2)\hbar$ özdeğerli bir özfonksiyonudur.Şimdi α ve β'yı,bu birleştirimin J^2'nin de özfonksiyonu olmasını sağlayacak biçimde belirleyeceğiz.

$$L_+Y_{\ell m} = \left[\ell(\ell+1) - m(m+1)\right]^{1/2}\hbar\, Y_{\ell,m+1}$$

$$= \left[(\ell+m+1)(\ell-m)\right]^{1/2}\hbar\, Y_{\ell,m+1}$$

$$L_-Y_{\ell m} = \left[(\ell-m+1)(\ell+m)\right]^{1/2}\hbar\, Y_{\ell,m-1}$$

$$S_+\chi_+ = S_-\chi_- = 0 \quad , \quad S_\pm\chi_\mp = \hbar\chi_\pm \tag{15-30}$$

bağıntılarını kullanarak,

$$\vec{J}^2\Psi_{j,m+1/2} = \alpha\hbar^2\Big\{\ell(\ell+1)\,Y_{\ell m}\chi_+ + \tfrac{3}{4}\,Y_{\ell m}\chi_+ + 2m(\tfrac{1}{2})\,Y_{\ell m}\chi_+$$

$$+ \left[(\ell-m)(\ell+m+1)\right]^{1/2}Y_{\ell,m+1}\chi_-\Big\} + \beta\hbar^2\Big\{\ell(\ell+1)\,Y_{\ell,m+1}\chi_-$$

$$+ \tfrac{3}{4}\,Y_{\ell,m+1}\chi_- + 2(m+1)(-\tfrac{1}{2})\,Y_{\ell,m+1}\chi_-$$

$$+ \left[(\ell-m)(\ell+m+1)\right]^{1/2}Y_{\ell m}\chi_+\Big\} \tag{15-31}$$

bulurux.Bu bağıntı,

$$\hbar^2 j(j+1)\Psi_{j,m+1/2} = \hbar^2 j(j+1)(\alpha\, Y_{\ell m}\chi_+ + \beta\, Y_{\ell,m+1}\chi_-) \tag{15-32}$$

biçiminde olacaktır; bunun için de,

$$\alpha\left[\ell(\ell+1) + \tfrac{3}{4} + m\right] + \beta\left[(\ell-m)(\ell+m+1)\right]^{1/2} = j(j+1)\alpha$$

$$\beta\left[\ell(\ell+1) + \tfrac{3}{4} - m - 1\right] + \alpha\left[(\ell-m)(\ell+m+1)\right]^{1/2} = j(j+1)\beta \tag{15-33}$$

olmalıdır.Bu ise,

$$(\ell-m)(\ell+m+1) = \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \tfrac{3}{4} - m\right]$$

$$\times\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \tfrac{3}{4} + m + 1\right]$$

olmasını gerektirir.Açıkça görüldüğü gibi,bunun

$$j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} -\ell - 1 \\ \ell \end{cases} \qquad (15\text{-}34)$$

olarak iki çözümü vardır; bu çözümler için,

$$j = \begin{cases} \ell - \frac{1}{2} \\ \\ \ell + \frac{1}{2} \end{cases} \qquad (15\text{-}35)$$

dir. $j = \ell + 1/2$ için,biraz cebirden sonra

$$\alpha = \sqrt{\frac{\ell + m + 1}{2\ell + 1}} \qquad \beta = \sqrt{\frac{\ell - m}{2\ell + 1}} \qquad (15\text{-}36)$$

elde ederiz(Aslında biz yalnızca bunların oranını elde ederiz; burada verilenler boylandırılmış biçimlerdir).Böylece

$$\Psi_{\ell+1/2,\, m+1/2} = \sqrt{\frac{\ell + m + 1}{2\ell + 1}}\, Y_{\ell m} \chi_+ + \sqrt{\frac{\ell - m}{2\ell + 1}}\, Y_{\ell, m+1} \chi_- \qquad (15\text{-}37)$$

olur. $j = \ell - 1/2$ çözümünün,

$$\Psi_{\ell-1/2,\, m+1/2} = \sqrt{\frac{\ell - m}{2\ell + 1}}\, Y_{\ell m} \chi_+ - \sqrt{\frac{\ell + m + 1}{2\ell + 1}}\, Y_{\ell, m+1} \chi_- \qquad (15\text{-}38)$$

biçiminde olması gerektiğini kestirebiliriz; çünkü bu çözüm, $j = \ell + 1/2$ çözümüne dik olacaktır.

Bu iki örnek,açısal momentumların toplanmasında kapsanan genel özelikleri açıklar: Eğer $\vec{L}_1^{\,2}$ ve L_{1z} 'nin $Y^{(1)}_{\ell_1 m_1}$ özdurumlarını,ve $\vec{L}_2^{\,2}$ ve L_{2z}'nin $Y^{(2)}_{\ell_2 m_2}$ özdurumlarını biliyorsak,$(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)$ tane çarpım dalga fonksiyonu kurabiliriz:

$$Y^{(1)}_{\ell_1 m_1} Y^{(2)}_{\ell_2 m_2} \qquad \left\{ \begin{array}{l} -\ell_1 \le m_1 \le \ell_1 \\ -\ell_2 \le m_2 \le \ell_2 \end{array} \right\} \qquad (15\text{-}39)$$

Bunlar,

$$J_z = L_{1z} + L_{2z} \qquad (15\text{-}40)$$

işlemcisinin özdeğeriyle sınıflandırılabilir.Bu özdeğer m_1+m_2'dir,ve bir en büyük $\ell_1+\ell_2$ değerinden $-\ell_1-\ell_2$ değerine kadar uzanır.Yukarda tartışılan basit durumlarda olduğu gibi,m-değeri aynı olan fonksiyonların farklı çizgisel birleştirimleri j'nin farklı değerlerine ait olacaktır.Aşağıdaki çizelgede $\ell_1 = 4$, $\ell_2 = 2$ özel örneği için olabilen birleştirimleri sıralıyoruz.$Y^{(1)}_{\ell_1 m_1}$ $Y^{(2)}_{\ell_2 m_2}$ için,(m_1,m_2) kısaltmasını kullanıyoruz:

m-değeri	m_1, m_2 birleştirimleri	sayı
6	(4,2)	1
5	(4,1) (3,2)	2
4	(4,0) (3,1) (2,2)	3
3	(4,-1) (3,0) (2,1) (1,2)	4
2	(4,-2) (3,-1) (2,0) (1,1) (0,2)	5
1	(3,-2) (2,-1) (1,0) (0,1) (-1,2)	5
0	(2,-2) (1,-1) (0,0) (-1,1) (-2,2)	5
-1	(1,-2) (0,-1) (-1,0) (-2,1) (-3,2)	5
-2	(0,-2) (-1,-1) (-2,0) (-3,1) (-4,2)	5
-3	(-1,-2) (-2,-1) (-3,0) (-4,1)	4
-4	(-2,-2) (-3,-1) (-4,0)	3
-5	(-3,-2) (-4,-1)	2
-6	(-4,-2)	1

Burada, $(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$'e uygun olarak, toplam 45 birleştirim vardır.

Bu yüksek durumun toplam açısal momentumu $\ell_1+\ell_2$'dir; böyle olduğu, J^2'yi $Y^{(1)}_{\ell_1\ell_1}$ $Y^{(2)}_{\ell_2\ell_2}$'ye uygulayarak kolayca doğrulanabilir:

$$\vec{J}^2 Y^{(1)}_{\ell_1\ell_1} Y^{(2)}_{\ell_2\ell_2} = (\vec{L}_1^2 + \vec{L}_2^2 + 2L_{1z}L_{2z} + L_{1+}L_{2-} + L_{1-}L_{2+}) Y^{(1)}_{\ell_1\ell_1} Y^{(2)}_{\ell_2\ell_2}$$

$$= \hbar^2[\ell_1(\ell_1+1) + \ell_2(\ell_2+1) + 2\ell_1\ell_2] Y^{(1)}_{\ell_1\ell_1} Y^{(2)}_{\ell_2\ell_2}$$

$$= \hbar^2(\ell_1+\ell_2)(\ell_1+\ell_2+1) Y^{(1)}_{\ell_1\ell_1} Y^{(2)}_{\ell_2\ell_2} \qquad (15\text{-}41)$$

Çizelgede tartışılan örnekte, $j = 6$'dır.

$$J_- = L_{1-} + L_{2-} \qquad (15\text{-}42)$$

işlemcisinin ardarda uygulanması, çizelgedeki her satırdan bir çizgisel birleştirim ayıracaktır. Bunlar $j = 6$'ya ait 13 durumu oluşturacak ve geriye bir tek $m = 5$ durumu, iki $m = 4, \ldots,$ bir $m = -5$ durumu kalacaktır. $m = 5$ durumunun $j = 5$'e ait olması son derece akla yatkındır, ve gerçekten doğrulanabilir. Yine J_-'nin ardışık uygulamaları çizelgedeki her satırdan başka bir çizgisel birleştirim seçer, ve bunlar $j = 5$'e ait 11 durumu oluşturur. Bu işlemin yinelenmesi, $j = 4$, $j = 3$ ve en sonunda $j = 2$'ye ait olan kümeleri elde edeceğimizi gösterir. Bu çokkatlılıkların toplamı 45 yapar:

$$13 + 11 + 9 + 7 + 5 = 45$$

Bu kitabın alanı dışında kaldığından, bu bileşenlere ayırmanın ayrıntılarını işlemeyeceğiz. Yalnızca sonuçları veriyoruz:

(a) $Y^{(1)}_{\ell_1 m_1} Y^{(2)}_{\ell_2 m_2}$ çarpımları, $\vec{J}^2$'nin $j(j+1)\hbar^2$ özdeğerli özdurumları türünden bileşenlere ayrılabilir; burada j,

$$j = \ell_1+\ell_2, \ell_1+\ell_2-1, \ldots, |\ell_1-\ell_2| \qquad (15\text{-}43)$$

değerlerini alabilir.

(b) (15-37) ve (15-38),

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1 m_2} C(j m; \ell_1 m_1 \ell_2 m_2)\, Y^{(1)}_{\ell_1 m_1}\, Y^{(2)}_{\ell_2 m_2} \qquad (15\text{-}44)$$

Clebsch-Gordan serisini verecek biçimde genelleştirilebilir. $C(j m; \ell_1 m_1 \ell_2 m_2)$ katsayıları Wigner katsayıları olarak bilinir, ve değişkenlerin çeşitli değerleri için bu katsayıları veren çizelgeler hazırlanmıştır. Biz yalnızca, açıkça hesapladığımız $\ell_2 = 1/2$ için olan katsayıları kullanacağız.

(15-43)'deki çokkatlılığı doğrulayabiliriz: Durumların sayısını toplarsak ($\ell_1 \geq \ell_2$),

$$\left[2(\ell_1 + \ell_2) + 1\right] + \left[2(\ell_1 + \ell_2 - 1) + 1\right] + \ldots + \left[2(\ell_1 - \ell_2) + 1\right]$$

$$= \sum_{n=0}^{2\ell_2} \left[2(\ell_1 - \ell_2 + n) + 1\right]$$

$$= (2\ell_2 + 1)(2\ell_1 + 1) \qquad (15\text{-}45)$$

elde ederiz.

Son olarak şu açıklamayı yapalım. Özdeş parçacıkları tartışırken, iki elektronlu (veya daha genel olarak iki fermiyonlu) bir sistemin, bu iki parçacığın değiştokuşu altında karşıbakışımlı olan bir durumda bulunması gerektiğini belirtmiştik. Bu değiştokuş yalnızca uzaysal koordinatların değil, spin etiketlerinin de değiştokuşunu kapsar. Özdeş iki spin 1/2 parçacığının bir sistemi için, durumların

$$\chi^{(1)}_+ \chi^{(2)}_+$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi^{(1)}_+ \chi^{(2)}_- + \chi^{(1)}_- \chi^{(2)}_+\right) \qquad (15\text{-}46)$$

$$\chi^{(1)}_- \chi^{(2)}_-$$

biçimindeki $S = 1$ üçlüsü, spin etiketlerinin değiştokuşu altında bakışımlıdır; oysa $S = 0$ için olan

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi^{(1)}_+ \chi^{(2)}_- - \chi^{(1)}_- \chi^{(2)}_+\right) \qquad (15\text{-}47)$$

teklisi karşıbakışımlıdır. Böylece bir üçlü durum için uzaysal dalga fonksiyonu karşıbakışımlı, ve bir tekli durum için bakışımlı olmalıdır. Bir iki-parçacık sisteminin uzaysal dalga fonksiyonu, kütle merkezi sisteminde

$$u(\vec{r}) = R_{n\ell m}(r)\, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \qquad (15\text{-}48)$$

genel biçimindedir. Bu iki parçacığın koordinatlarının değiştokuşu,

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta \\ \phi &\rightarrow \phi + \pi \end{aligned} \qquad (15\text{-}49)$$

değişmesine eşdeğerdir.Böylece ışınsal fonksiyon değişmeden kalır.Fakat bu dönüşüm altında,

$$Y_{lm}(\theta,\phi) \longrightarrow Y_{lm}(\pi-\theta,\ \phi+\pi) = (-1)^{l} Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad (15\text{-}50)$$

olduğundan,üçlü durumların l yörüngesel açısal momentumu tek,ve tekli durumlarınki çift olmalıdır.Bunun bir uygulamasını,helyum atomunu tartışırken göreceğiz.

Bu söylediklerimizin ilginç bir uygulaması temel parçacıklar fiziğinde ortaya çıkar.Bulgulanması gereken çok kararsız temel parçacıklardan en önemlisi Yukawa'nın öngördüğü π mezonu idi.Çekirdek kuvvetlerinde önemli bir rol oynayan bu parçacık π^{+}, π^{o}, π^{-} biçiminde üç yük durumunda ortaya çıkar.Spini 0 olarak bulunmuştur; böylece sorun şudur: Bilinen parçacıkların yani proton ve nötronun iç paritelerinin artı olduğu varsayıldığına göre,acaba bir pionun — π mezonuna bu ad verilir— dalga fonksiyonu yansımalar altında tek midir,çift midir? Aşağıdaki deney öne sürülmüştür.

Bir π^{-}'nin bir döteron tarafından yakalanmasını gözönüne alınız.Yavaş bir pion,sıvı döteryum içinde çeşitli işleyişlerle enerji yitirir;bu yitiriş (ps) çekirdeği etrafındaki en alçak Bohr yörüngesine indiğinde sona erer,ve o zaman çekirdek kuvvetlerinin etkisiyle yakalanır,

$$\pi^{-} + d \longrightarrow n + n$$

çekirdek tepkimesinde açısal momentum 1'dir; pionun spini sıfırdır,en alçak Bohr durumunun yörüngesel açısal momentumu sıfırdır,bu yüzden tek katkı döteronun 1 olan açısal momentumundan gelir.Böylece,bu iki nötron açısal momentumu 1 olan durumda bulunmalıdır.İki nötronun toplam spini 0 ise,yörüngesel açısal momentum 1 olmalıdır. İki nötron durumunun toplam spini 1 ise yörüngesel açısal momentum 0,1, ve 2 olabilir; çünkü bir birimlik iki açısal momentumun toplamı 0,1, ve 2 verebilir,ve bir birimlik açısal momentumun iki birimlik açısal momentumla toplanması 3,2, ve 1 verebilir.Fakat iki özdeş fermiyonun tekli durumunun yörüngesel açısal momentumu çift olmalıdır;böylece bu iki nötronun tekli durumu dışarlanmış olur.Üçlü durumun ise,yörüngesel açısal momentumu tek olmalıdır; böylece üçlü durum,yörüngesel açısal momentum 1 ise,oluşabilir.Ve (15-50)'ye göre,böyle bir durumun paritesi tektir;bu yüzden pionun paritesi tek olmalıdır.Spektrumsal yazımda,durumlar

$$^{2S+1}L_{J} \qquad (15\text{-}51)$$

gösterimine uygun olarak etiketlenirler.Durumların toplam sınıfı, $^{1}S_{0}, ^{1}P_{1}, ^{1}D_{2}, ^{1}F_{3}, \ldots, ^{3}S_{1}, ^{3}P_{2}, ^{3}P_{1}, ^{3}P_{0}, ^{3}D_{3}, ^{3}D_{2}, ^{3}D_{1}, ^{3}F_{4}, ^{3}F_{3}, ^{3}F_{2}, \ldots$, 'dir.İki nötronun durumları ise, Fermi-Dirac istatistiği uslamlaması ile,bu tüm sınıfın şu durumlarına kısıtlanmıştır: $^{1}S_{0}, ^{1}D_{2}, \ldots, ^{3}P_{2,1,0}, ^{3}F_{4,3,2}, \ldots$ Ve bunların içinden,yalnızca $^{3}P_{1}$ durumunun açısal momentumu 1'dir.

Problemler

1. (15-37) ve (15-38)'i, L yörüngesel açısal momentumu ile spin 1'in toplanmasına genelleştiriniz.

(a) $\vec{S}^2$ ve S_z'nin özdurumlarını bulunuz; burada S_z,

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

olarak verilir.

(b) ξ_{+1} , ξ_0 ve ξ_{-1} olarak yazılan bu özdurumlara, S_+ ve S_-'nin etkisini bulunuz.

(c)
$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+$$

işlemcisinin,

$$\Psi_{j,m+1} = \alpha Y_{\ell m}\xi_1 + \beta Y_{\ell,m+1}\xi_0 + \gamma Y_{\ell,m+2}\xi_{-1}$$

gibi birleştirimler üzerine etkisini hesaplayınız.

(d) α , β , ve γ arasındaki bağıntıları,

$$\vec{J}^2\Psi_{j,m} = \hbar^2 j(j+1)\Psi_{j,m}$$

denkleminden elde ediniz.

2. Spini 2,1, ve 0 olan durumlar oluşturacak biçimde birleştirilebilen iki tane spin 1 parçacığı için, (15-46)'nın benzerini bulunuz. Parçacıkların spin vektörleri için $\xi_{+1}^{(i)}$, $\xi_0^{(i)}$, $\xi_{-1}^{(i)}$ yazımını kullanınız.

3. Bir döteronun spini 1'dir. İsteksel bir L açısal momentum durumundaki iki döteronun olabilen spin ve toplam açısal momentum durumları nelerdir? Pauli ilkesini unutmayınız.

4. 1 spinli bir parçacık,

$$V(r) = V_1(r) + \vec{S}.\vec{L}\, V_2(r) + (\vec{S}.\vec{L})^2 V_3(r)$$

biçimindeki merkezcil bir potansiyelde hareket ediyor. $J = L + 1$, L, ve L-1 durumlarında $V(r)$'nin değerleri nelerdir?

5. π^-'nin paritesinin belirlenmesi ile ilgili tartışmayı gözönüne alınız. π^-'nin spininin 1 olduğunu, fakat

$$\pi^- + d \rightarrow 2n$$

tepkimesinde gene bir $L = 0$ yörüngesel durumunda yakalandığını varsayınız. Olabilen iki-nötron durumları hangileridir? π^-'nin paritesi eksi olsaydı hangi durumlara izin verilirdi?

6. π^-'nin spininin 0 ve paritesinin eksi olduğunu varsayınız, fakat

$$\pi^- + d \rightarrow 2n$$

tepkimesinde P yörüngesinden yakalansın. İki nötronun tekli bir durumda olması gerektiğini gösteriniz.

7. Bir spin sisteminin Hamiltonien'i,

$$H = A + \frac{B\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2}{\hbar^2} + \frac{C(S_{1z} + S_{2z})}{\hbar}$$

olarak verilmiştir.İki parçacık sisteminin özdeğerlerini ve özdurumlarını şu durumlar için bulunuz: (a) Parçacıkların ikisinin de spini 1/2'dir. (b) Parçacıkların birinin spini 1/2,öbürünün spini 1(dir.(a)'daki iki parçacığın özdeş olduğunu varsayınız.

8. Spinleri $\vec{\sigma}_1$ ve $\vec{\sigma}_2$ Pauli işlemcileri ile betimlenen,1/2 spinli iki parçacığı gözönüne alınız. $\hat{e}$ iki parçacığı bağlayan birim vektör olsun,ve

$$S_{12} = 3(\vec{\sigma}_1 \cdot \hat{e})(\vec{\sigma}_2 \cdot \hat{e}) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$$

işlemcisi tanımlansın.İki parçacık bir S = 0 (tekli) durumundaysa,o zaman

$$S_{12}\chi_{tekli} = 0$$

olacağını gösteriniz.Üçlü bir durum için,

$$(S_{12} - 2)(S_{12} + 4)\,\chi_{üçlü} = 0$$

olacağını gösteriniz.

Kaynaklar

Burada tartışılan konular,her kuantum mekaniği ders kitabında şu veya bu yoldan işlenmiştir.Ayrıntıların bir çoğu aşağıdaki kitapta bulunabilir:

M.E.Rose,Elementary Theory of Angular Momentum, John Wiley and Sons,Inc.,1957.

EK A

FOURİER TÜMLEVİ
ve DELTA FONKSİYONLARI

Periyodu 2L olan bir f(x) periyodik fonksiyonunu düşünelim,öyle ki

$$f(x) = f(x + 2L) \tag{A-1}$$

dir.Böyle bir fonksiyon (-L,L) aralığında bir Fourier serisine açılabilir ve serinin biçimi

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos \frac{n\pi x}{L} + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin \frac{n\pi x}{L} \tag{A-2}$$

dir.Seriyi,

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{in\pi x/L} \tag{A-3}$$

biçiminde yeniden yazabileceğimiz kesindir,çünkü

$$\cos \frac{n\pi x}{L} = \frac{1}{2} \left(e^{in\pi x/L} + e^{-in\pi x/L} \right)$$

$$\sin \frac{n\pi x}{L} = \frac{1}{2i} \left(e^{in\pi x/L} - e^{-in\pi x/L} \right)$$

dir.Katsayılar,

$$\frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx\, e^{in\pi x/L} e^{-im\pi x/L} = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \tag{A-4}$$

dikeyboyluluk bağıntısı yardımıyla belirlenebilir.Böylece

$$a_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx f(x)\, e^{-in\pi x/L} \tag{A-5}$$

olur.

İki ardışık tam sayı arasındaki farkı Δn ile göstererek,(A-3)'ü yeniden yazalım.Bu fark bir olduğundan,

$$f(x) = \sum_n a_n e^{in\pi x/L} \Delta n$$

$$= \frac{L}{\pi} \sum_n a_n e^{in\pi x/L} \frac{\pi \Delta n}{L} \qquad (A-6)$$

elde ederiz,Yazımımızı,

$$\frac{\pi n}{L} = k \qquad (A-7)$$

ve

$$\frac{\pi \Delta n}{L} = \Delta k \qquad (A-8)$$

yazarak değiştirelim.Ayrıca da,

$$\frac{L a_n}{\pi} = \frac{A(k)}{\sqrt{2\pi}} \qquad (A-9)$$

yazabiliriz.Bu yüzden (A-6),

$$f(x) = \sum \frac{A(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \Delta k \qquad (A-10)$$

olur.Şimdi $L \to \infty$ yapılırsa,o zaman Δk sonsuz küçük olacağından,k sürekli bir değişkene yaklaşır.Bir tümlevin Riemann tanımını anımsarsak,limit halde (A-10)'un

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, e^{ikx}\, dk \qquad (A-11)$$

biçiminde yazılabileceğini görürüz.A(k) katsayısı,

$$A(k) = \sqrt{2\pi}\, \frac{L}{\pi} \cdot \frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx f(x)\, e^{-in\pi x/L}$$

$$\to \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\, e^{-ikx} \qquad (A-12)$$

ile verilir.A-11 ve A-12 denklemleri Fourier tümlevi dönüşümlerini tanımlarlar.İkinci denklemi birincide yerine koyarsak,

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y)\, e^{-iky} \qquad (A-13)$$

elde ederiz.Bir sakıncası olmadığından,tümlevlerin sırasını değiştokuş ettiğimizi varsayalım.O zaman,

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x-y)} \right] \qquad (A\text{-}14)$$

elde ederiz.Bunun doğru olması için,

$$\delta(x-y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x-y)} \qquad (A\text{-}15)$$

ile tanımlanan ve Dirac Delta fonksiyonu denen $\delta(x-y)$ niceliği,çok değişik türden bir fonksiyon olmalıdır; bu fonksiyon $x \neq y$ iken sıfır olmalıdır,ve tümleme bölgesi sonsuz küçük olduğundan,$x-y=0$ iken de uygun bir biçimde sonsuza gitmelidir.Bu yüzden o,alışılmış matematiksel anlamda bir fonksiyon değildir,fakat daha çok bir "genelleştirilmiş fonksiyon" veya bir "dağılım"dır[1].Yalnız başına bir anlamı yoktur,fakat şu koşulla tanımlanabilir: Bu fonksiyon her zaman,

$$\int dx f(x)\ \delta(x-a)$$

biçiminde ortaya çıkmalıdır;burada $f(x)$ fonksiyonu,delta fonksiyonunun argümanının aldığı değerler aralığında yeterince yumuşak olmalıdır.Sonunda yazdığımız bütün bağıntıların yalnızca tümlev işareti altında oluştuğu düşüncesi ile,delta fonksiyonunun varlığını kabul edecek ve kendisi ile işlem yapacağız.

Delta fonksiyonun şu özelikleri gösterilebilir.

(i)

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\ \delta(x) \qquad (A\text{-}16)$$

Bunun şuradan çıktığı görülebilir:

$$f(x) = \int dy f(y)\ \delta(x-y) \qquad (A\text{-}17)$$

$x = a\xi$ ve $y = a\eta$ yazarsak,o zaman bu

$$f(a\xi) = |a| \int d\eta\, f(a\eta)\ \ \delta[a(\xi-\eta)]$$

verir.Öte yandan,

$$f(a\xi) = \int d\eta\ f(a\eta)\ \delta(\xi-\eta)$$

olması ise,sonucumuzu içerir.

[1]Dağılımlar kuramı matematikçi Laurent Schwartz tarafından geliştirilmiştir. Bir giriş incelemesi M.J.Lightbill,Introduction to Fourier Analysis and Generalized Functions,Cambridge University Press (1958)'de bulunabilir.

(ii) (A-16)'dan çıkan bir bağıntı,

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|}\left[\delta(x-a) + \delta(x+a)\right] \qquad (A\text{-}18)$$

dır.Bu,delta fonksiyonun argümanının $x = a$ ve $x = -a$ 'da sıfır olması olgusundan çıkar.Böylece iki katkı vardır:

$$\delta(x^2 - a^2) = \delta\left[(x-a)(x+a)\right]$$

$$= \frac{1}{|x+a|}\,\delta(x-a) + \frac{1}{|x-a|}\,\delta(x+a)$$

$$= \frac{1}{2|a|}\left[\delta(x-a) + \delta(x+a)\right]$$

Daha genel olarak,

$$\delta\left[f(x)\right] = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{\left|df/dx\right|_{x=x_i}} \qquad (A\text{-}19)$$

olduğu gösterilebilir; burada x_i'ler,$f(x)$'in tümleme bölgesindeki kökleridir.

Delta fonksiyonunun (A-15) gösterimine ek olarak,yararlı olabilecek başka gösterimler de vardır.Bunların birkaçını tartışacağız.

(a)

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\lim_{L\to\infty}\int_{-L}^{L} dk\, e^{ikx} \qquad (A\text{-}20)$$

biçiminde yazabileceğimiz (A-15) biçimini göz önüne alalım. Bu tümlendiğinde

$$\delta(x) = \lim_{L\to\infty}\frac{1}{2\pi}\,\frac{e^{iLx} - e^{-iLx}}{ix}$$

$$= \lim_{L\to\infty}\frac{\sin Lx}{\pi x} \qquad (A\text{-}21)$$

verir, (b)

$$\Delta(x,a) = 0 \qquad x < -a$$

$$= \frac{1}{2a} \qquad -a < x < a \qquad (A\text{-}22)$$

$$= 0 \qquad a < x$$

ile tanımlanan $\Delta(x,a)$ fonksiyonunu düşünelim.O zaman

$$\delta(x) = \lim_{a\to 0}\Delta(x,a) \qquad (A\text{-}23)$$

olur. $\Delta(x,a)$ ile başlangıç yakınında yumuşak olan bir $f(x)$ fonksiyonunun çarpımının bir tümlevinin başlangıçtaki değeri seçip çıkaracağı açıktır.

$$\lim_{a\to 0} \int dx f(x)\ \Delta(x,a) = f(0) \lim_{a\to 0} \int dx\ \Delta(x,a)$$

$$= f(0)$$

(c) Aynı nedenle, altında kalan birim alan ile boylandırılan herhangi bir tepe fonksiyonu, tepenin genişliğinin sıfıra gittiği limitte bir delta fonksiyonuna yaklaşır. Şunların da, delta fonksiyonunun gösterimleri olduğunu kanıtlamayı okura bırakıyoruz:

$$\delta(x) = \lim_{a\to 0} \frac{1}{\pi} \frac{a}{x^2 + a^2} \qquad (A\text{-}24)$$

ve

$$\delta(x) = \lim_{a\to\infty} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2} \qquad (A\text{-}25)$$

(d) $P_n(x)$ genel simgesi ile gösterdiğimiz dikeyboylu çokterimliler ile iş görmemiz gerekebilir. Bunlar,

$$\int dx P_m(x)\ P_n(x)\ \omega(x) = \delta_{mn} \qquad (A\text{-}26)$$

özeliğini taşırlar; burada, birim ya da basit bir fonksiyon olabilen $\omega(x)$'e ağırlık fonksiyonu denir. Bu dikeyboylu çokterimlilerin bir serisine açılabilen fonksiyonlar için,

$$f(x) = \sum_n a_n P_n(x) \qquad (A\text{-}27)$$

yazabiliriz. Her iki yanı $\omega(x)\ P(x)$ ile çarpar ve x üzerinden tümlersek,

$$a_m = \int dy\ \omega(y)\ f(y)\ P_m(y) \qquad (A\text{-}28)$$

buluruz. Bunu (A-27)'de yerine koyarsak, "genelleştirilmiş fonksiyonlar" ile iş görmesini de biliyorsak, toplam ile tümlevi özgürce değiştokuş ederiz, ve

$$f(x) = \sum_n P_n(x) \int dy\ \omega(y)\ f(y)\ P_n(y)$$

$$= \int dy f(y) \left(\sum_n P_n(x)\ \omega(y)\ P_n(y) \right) \qquad (A\text{-}29)$$

elde ederiz. Böylece gene, delta fonksiyonunun bir başka gösterimini elde ederiz. $P_n(x)$'in örnekleri Legendre çokterimlileri, Hermite çokterimlileri ve Laguerre çokterimlileridir; bunların hepsi kuantum mekaniği problemlerinde ortaya çıkarlar.

Delta fonksiyonu her zaman,bir tümlev işareti altında yumuşak bir fonksiyonla çarpılmış olarak ortaya çıktığından,onun türevlerine anlam verebiliriz.Örneğin,

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx f(x) \frac{d}{dx} \delta(x) = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d}{dx} \left[f(x)\, \delta(x) \right] - \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{df(x)}{dx} \delta(x)$$

$$= - \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{df(x)}{dx} \delta(x)$$

$$= - \left(\frac{df}{dx} \right)_{x=0} \qquad (A\text{-}30)$$

ve benzerleri.Delta fonksiyonu son derece yararlı bir gereçtir,ve öğrenci matematiksel fiziğin her yerinde onunla karşılaşacaktır.

Delta fonksiyonunun tümlevi,

$$\int_{-\infty}^{x} dy \ \delta(y - a) = 0 \qquad x < a$$

$$= 1 \qquad x > a \qquad (A\text{-}31)$$

$$\equiv \theta(x - a)$$

dır;ve bu tümlev,bu süreksiz fonksiyon için standart yazımdır.Karşıt olarak,basamak fonksiyonu denen $\theta(x - a)$'nın türevi,Dirac delta fonksiyonudur:

$$\frac{d}{dx} \theta(x - a) = \delta(x - a) \qquad (A\text{-}32)$$

EK B

İŞLEMCİLER

Bu ekte,çizgisel işlemcilerle ilgili bazı konuları inceleyeceğiz.Usa yatkın dalga paketleri kümesi,karesi tümlenebilen fonksiyonlardan oluşur. $\psi_1(x)$ ve $\psi_2(x)$ karesi tümlenebilir fonksiyonlar ve α, β isteksel karmal sayılar olmak üzere,

$$\psi(x) = \alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x) \qquad (B\text{-}1)$$

karesi tümlenebilir olduğundan, ψ'ler bir çizgisel uzay oluşturur,deriz.Bu uzay üzerindeki bir A işlemcisi,

$$A\ \psi(x) = \phi(x) \qquad (B\text{-}2)$$

işlemini yapar,burada $\phi(x)$ de karesi tümlenebilirdir.Tüm işlemciler arasında çizgisel işlemciler denen bir altküme vardır,bunlar şu özelikleri taşırlar:

$$A\,\alpha\psi(x) = \alpha A\ \psi(x) \qquad (B\text{-}3)$$

burada α isteksel bir karmal sabittir; ve α, β karmal sayılar olmak üzere,

$$A\left[\alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x)\right] = \alpha A\,\psi_1(x) + \beta A\,\psi_2(x) \qquad (B\text{-}4)$$

olur.Başka bir altküme hermitien işlemcilerdir;usa yatkın tüm $\psi(x)$'ler için,

$$\langle A\rangle_\psi = \int dx\ \psi^*(x)\ A\ \psi(x) \qquad (B\text{-}5)$$

beklenen değerleri gerçeldir.Önce tüm usa yatkın ψ_1 ve ψ_2'ler için,

$$\int \psi_2^*(x)\ A\ \psi_1(x)\ dx = \int \left[A\ \psi_2(x)\right]^*\ \psi_1(x)\ dx \qquad (B\text{-}6)$$

in geçerli olduğunu gösterelim.

$\langle A\rangle$'nın gerçelliği,

$$\int dx\ \ \psi^*(x)\ A\ \psi(x) = \int dx\ \left[A\ \psi(x)\right]^*\ \psi(x) \qquad (B\text{-}7)$$

olmasını içerir.Şimdi burada, $\psi(x)$ yerine,

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \lambda \psi_2(x) \tag{B-8}$$

koyalım.Bu,

$$\int dx(\psi_1^* + \lambda^* \psi_2^*) A(\psi_1 + \lambda \psi_2) = \int dx(\psi_1 + \lambda\psi_2)(A\psi_1 + \lambda A \psi_2)^* \tag{B-9}$$

verir.

$$\int dx \ \psi_i^* A \psi_i = \int dx \ \psi_i (A \psi_i)^* \qquad i = 1,2 \tag{B-10}$$

hermitienliğini kullanarak,

$$\lambda^* \int dx \ \psi_2^* A \psi_1 + \lambda \int dx \ \psi_1^* A \psi_2 = \lambda \int dx \psi_2 (A\psi_1)^* + \lambda^* \int dx \ \psi_1 (A\psi_2)^* \tag{B-11}$$

elde ederiz. λ isteksel bir karmaşık sayı olduğundan, λ'nın katsayısı ve λ^*'ın katsayısı için olan bağıntılar ayrı ayrı sağlanmalıdır.Böylece,

$$\int dx \ \psi_2^* A \psi_1 = \int dx (A \psi_2)^* \psi_1 \tag{B-12}$$

olur.

Kanıtlamak istediğimiz bundan sonraki sonuç şudur: <u>Bir hermitien işlemcinin, değişik özdeğerlerine karşılık gelen özfonksiyonları diktir.</u>Şu iki denklemi gözönüne alınız:

$$A \ \psi_1(x) = a_1 \ \psi_1(x)$$

ve

$$\left[A \ \psi_2(x)\right]^* = a_2 \ \psi_2^*(x) \tag{B-13}$$

Bir hermitien işlemcinin özdeğerleri gerçel olduğundan,a_2'nin gerçel olduğuna dikkat ediniz.İlk denklemin ψ_2^* ile ve ikinci denklemin ψ_1 ile skaler çarpımını alalım. Böylece,

$$\int dx \ \psi_2^* A \ \psi_1(x) = a_1 \int \psi_2^*(x) \ \psi_1(x) \ dx$$

$$\int dx (A\psi_2)^* \ \psi_1(x) = a_2 \int \psi_2^*(x) \ \psi_1(x) \ dx \tag{B-14}$$

olur.Bunları birbirinden çıkarırsak,

$$(a_1 - a_2) \int \psi_2^*(x) \ \psi_1(x) \ dx = \int dx \ \psi_2^* A \ \psi_1 - \int dx (A \ \psi_2)^* \psi_1$$

$$= 0 \tag{B-15}$$

elde ederiz.Böylece,$a_1 \neq a_2$ ise,

$$\int \psi_2^*(x) \ \psi_1(x) \ dx = 0 \tag{B-16}$$

bulunur.

A işlemcisinin hermitien eşleniğini $A^\dagger$ ile tanımlarsak,

$$\int dx(A\,\Psi_2)^*\;\Psi_1 = \int dx\;\Psi_2^* A^\dagger\,\Psi_1 \qquad \text{(B-17)}$$

olur, ve böylece hermitien bir işlemci için,

$$A = A^\dagger \qquad \text{(B-18)}$$

dir.

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \qquad \text{(B-19)}$$

olduğunu kanıtlayabiliriz. Bunun için,

$$\begin{aligned}\int \Psi_2^*(AB)^\dagger\;\Psi_1 &= \int (AB\,\Psi_2)^*\;\Psi_1\\ &= \int (B\,\Psi_2)^*\;(A^\dagger\Psi_1)\\ &= \int \Psi_2^* B^\dagger(A^\dagger\,\Psi_1)\\ &= \int \Psi_2^* B^\dagger\;A^\dagger\,\Psi_1 \qquad \text{(B-20)}\end{aligned}$$

olduğuna dikkat edelim. Bunun bir genelleştirilmesi,

$$(ABC\ldots Z)^\dagger = Z^\dagger\ldots C^\dagger B^\dagger A^\dagger \qquad \text{(B-21)}$$

dir. Böylece iki hermitien işlemcinin bir çarpımı, yalnızca iki işlemci sıradeğiştiriyorsa hermitien olur:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA = AB + [B,A] \qquad \text{(B-22)}$$

Başka bir sonuç ise, herhangi bir A işlemcisi için şunların hermitien olacağıdır:

$$A + A^\dagger$$
$$i(A - A^\dagger) \qquad \text{(B-23)}$$
$$AA^\dagger$$

Bundan sonra, "belirsizlik bağıntılarını" kanıtlayalım.

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle \qquad \text{(B-24)}$$

tanımını yapalım.

$$\begin{aligned}U &= A - \langle A\rangle\\ V &= B - \langle B\rangle \qquad \text{(B-25)}\end{aligned}$$

olsun ve

$$\phi = U\psi + i\lambda V\psi \tag{B-26}$$

yi gözönüne alalım.O zaman,

$$I(\lambda) = \int dx\, \phi^*\phi \geq 0 \tag{B-27}$$

olacaktır.A ve B hermitien olduğundan,U ve V de hermitiendir.Böylece,$I(\lambda)$

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \int dx(U\psi + i\lambda V\psi)^* (U\psi + i\lambda V\psi) \\ &= \int dx(U\psi)^* (U\psi) + \lambda^2 \int dx(V\psi)^* (V\psi) \\ &\quad + i\lambda \int dx \left[(U\psi)^* (V\psi) - (V\psi)^* (U\psi)\right] \\ &= \int dx\, \psi^* (U^2 + \lambda^2 V^2 + i\lambda [U,V])\psi \\ &= (\Delta A)^2 + \lambda^2 (\Delta B)^2 + i\lambda \int dx\, \psi^* [U,V]\psi \geq 0 \\ &= (\Delta A)^2 + \lambda^2 (\Delta B)^2 + i\lambda \langle [A,B] \rangle \end{aligned} \tag{B-28}$$

olarak yeniden yazılabilir.Minimum,

$$2\lambda (\Delta B)^2 + i \langle [A,B] \rangle = 0 \tag{B-29}$$

için oluşacaktır.

$$\lambda = -i \frac{\langle [A,B] \rangle}{2(\Delta B)^2} \tag{B-30}$$

çözümü $I(\lambda)$'da yerine konursa,

$$(\Delta A)^2 - \frac{\langle [A,B] \rangle^2}{4(\Delta B)^2} + \frac{\langle [A,B] \rangle^2}{2(\Delta B)^2} \geq 0$$

elde ederiz;buradan da,

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle i [A,B] \rangle^2 \tag{B-31}$$

bulurus.Easlantı olarak,minimum değerin oluştuğu ψ için,$U\psi$ ve $V\psi$ birbirleri ile orantılıdır.x ve p işlemcileri halinde,bu

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx} + i\beta x\, \psi(x) = 0 \tag{B-32}$$

olması demektir;bunun çözümü

$$\psi(x) = C\, e^{-\beta(x^2/2\hbar)} \tag{B-33}$$

dir,bu bir harmonik salıngan temel durumu özfonksiyonudur.Şimdi şu önemli konuyu belirtelim:

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\left(\langle i[A,B]\rangle\right)^2 \qquad (B\text{-}34)$$

belirsizlik bağıntısı,dalga kavramlarını,ya da bir dalga biçimi ile onun Fourier dönüşümüğü arasındaki karşılıklılığı hiç kullanmadan türetilmişti.Sonuçlar,tümüyle A ve B gözlenebilirlerinin işlemsel özeliklerine bağlıdır.

Bu eki,sıradeğiştiricilerin bazı özeliklerini sıralayarak bitirelim.

(i)

$$[A,B] = -[B,A] \qquad (B\text{-}35)$$

(ii)

$$\begin{aligned}[A,B]^\dagger &= (AB)^\dagger - (BA)^\dagger \\ &= B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger \\ &= [B^\dagger, A^\dagger]\end{aligned} \qquad (B\text{-}36)$$

(iii) A ve B hermitien ise,$i[A,B]$ de hermitien'dir.Bu,önceki özeliklerden çıkar.

(iv)

$$\begin{aligned}[AB,C] &= ABC - CAB \\ &= ABC - ACB + ACB - CAB \\ &= A[B,C] + [A,C]B\end{aligned} \qquad (B\text{-}37)$$

(v) Terim terim,

$$e^{A}Be^{-A} = B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] + \frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \ldots \qquad (B\text{-}38)$$

olduğu gösterilebilir.Bu Baker-Hausdorff lemması olarak bilinir,ve işlemcilerle çalışırken yararlıdır.

(vi)

$$[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0 \qquad (B\text{-}39)$$

olduğu kolayca sağlanabilir.Buna Jacobi özdeşliği denir.

İşlemcilerin,ve bu işlemcilerin tanımlandıkları çizgisel uzayların geniş bir tartışması J.D.Jackson,Mathematics for Quantum Mechanics,W.A.Benjamin,Inc.,New York (1962)'de bulunabilir.