

$$\langle p \rangle^* = \langle \hat{p} \rangle \quad (13-1)$$

$$= \left(\int dx \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \right)^* \quad (13-2)$$

$$= \int dx \Psi \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi^* \quad (13-3)$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\partial}{\partial x} (\Psi \Psi^*) - \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right] \quad (13-4)$$

$$= \int dx \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \quad (13-5)$$

$$= \langle p \rangle, \quad (13-6)$$

burada yine kısmi integrasyon kullanıldı ve $\pm\infty$ 'da Ψ 'ın yok olduğu kabul edildi. Sonuç olarak, $\langle p \rangle = \langle p \rangle^*$, yani $\hat{p}$ 'nin tüm beklenti değerleri gerçeldir. Bir özdeğer kendisine karşı gelen kararlı durumun beklenti değeri olduğundan, momentum işlemcisinin tüm özdeğerleri gerçel olmalıdır. Özdeğerleri gerçel olan bir işlemciye bir **Hermite-sel işlemcisi** denilir. (Eşdeğer olarak, tüm izinli dalga fonk.larının beklenti değeri gerçeldir.)

Fiziksel ölçülebilir nicelikler Hermit işlemcileriyle temsil edilmiştir.

Benzer şekilde, herhangi bir durumda $\langle E \rangle^* = \langle E \rangle$ olduğu gösterilebilir ki tüm enerji özdeğerleri gerçeldir. $\hat{H}$ Hamilton işlemcisi bir Hermite-sel işlemcisidir.

Newton'un $F = ma$ eşitliğini SD'den "türete"bilir miyiz?

Klasik Mekanik: $F = -\frac{dV}{dx} = ma = \frac{dp}{dt}$, $\frac{dp}{dt}$ 'nin beklenti değerini hesaplayalım:

$$\left\langle \frac{dp}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle p \rangle \quad (13-7)$$

$$= \frac{d}{dt} \int dx \Psi^*(x, t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) \quad (13-8)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int dx \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) \quad (13-9)$$

$$= \int dx \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + V \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi \right) \right]}_A \quad (13-10)$$

Buradaki integrand şudur:

$$A = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \cancel{V \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi^* \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right) \Psi - \cancel{\Psi^* V \frac{\partial \Psi}{\partial x}} \quad (13-11)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] - \Psi^* \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right) \Psi \quad (13-12)$$

$x \rightarrow \pm\infty$ için $\Psi \rightarrow 0$ olduğundan integraldeki ilk terim ortadan kalkar ve geriye kalan ise

$$\left\langle \frac{dp}{dt} \right\rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \left(-\frac{\partial V}{\partial x}(x) \right) \Psi(x, t) = \left\langle -\frac{dV}{dx} \right\rangle \quad (13-13)$$

or

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle} \quad (13-14)$$

SE'den ortaya çıkan **beklenti değerlerinin klasik hareket denklemlerine tabi olmasıdır.**

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle \quad (13-15)$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \quad (13-16)$$

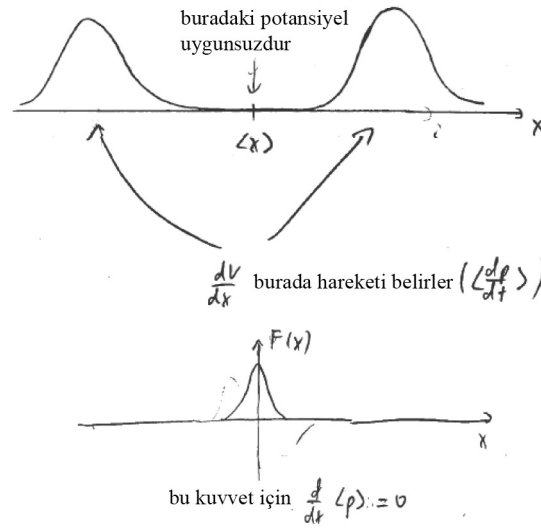
Ortalama kuvvetten dolayı ortalama momentum değişikliği

$$- \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle = - \int dx \Psi^* \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right) \Psi = \int dx F(x) |\Psi(x, t)|^2, \quad (13-17)$$

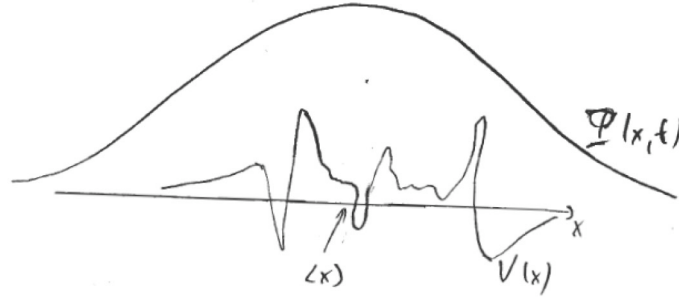
Yani, $F(x)$ konuma bağlı olup, bir parçacığı t anında x konumunda bulma olasılığı $|\Psi(x, t)|^2$ ile ağırlıklandırılır. Ancak, $\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \neq \frac{d}{d\langle x \rangle} V(\langle x \rangle)$ olduğunu unutmayalım.

Örnek 1. Çift-pikli dağılım. Parçacığı $\langle x \rangle$ ortalama konumunda bulma olasılığı küçük olup, bu yüzden kuvvet parçacığın hareketinde pek önemli bir yer tutmaz.

Örnek 2. Dalga paketi ölçeğinde kuvvet çok çabuk değişme gösterir. $-\frac{d}{d\langle x \rangle} V(\langle x \rangle)$ klasik hesabına göre öngörü büyüktür (ve $\langle x \rangle$ değişirken çabucak değişen kuvvet söz konusudur), gerçek KM kuvveti $\left\langle -\frac{dV}{dx} \right\rangle$ ise oldukça küçüktür ve parçacığa etki eder.



Şekil I: Ortalama konumda parçacığı bulma olasılığı yokken çift-piklikli dağılım



Şekil II: Kuvvetin konumsal değişimine kıyasla parçacığın dalga paketi daha büyüktür. Dalga paketinin zaman evrimi sadece ortalama parçacık konumuna değil, dalga paketi üzerine ortalaması alınan kuvvetin değerine bağlı olur.

Ancak, tek bir dalga paketinin büyüklüğüne kıyasla kuvvet yavaşça değişirse, bu takdirde

$$\left\langle -\frac{dV}{dx} \right\rangle = \langle F(x) \rangle \approx F(\langle x \rangle) = -\frac{d}{d\langle x \rangle} V(\langle x \rangle) \quad (13-18)$$

Makroskopik potansiyelde parçacıkların ekseriya klasik parçacıklar gibi ele alınmasının sebebi işte budur.

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle} \rightarrow \text{daima doğru} \quad (13-19)$$

ve

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle p \rangle \approx -\frac{d}{d\langle x \rangle} V(\langle x \rangle)} \rightarrow \text{yavaş değişen potansiyeller için **Ehrenfest teoremidir.** (13-20)}$$

Momentum İşlemcisinin Özfonksiyonları

$$\hat{p}u_p = pu_p \quad (13-21)$$

eşitliğini sağlayan özfonksiyonlar $\hat{p}$ özdeğerinin belli bir p işlemcisinin u_p özfonksiyonları olup değerleri nedir? $\hat{p}$ işlemcisinin Hermite-sel olduğunu biliyoruz öyleki tüm özdeğerleri p 'ler gerçeldir. Konum uzayında, $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ ve $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} u_p(x) = pu_p(x)$ eşitsizliğinin çözümü, $u_p(x) = Ae^{ipx/\hbar}$ dır. Momentum özfonksiyonları şüphesiz ki düzlem dalgalarıdır. Özdurumlar için ortonormallik şartını sağlayalım:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_p^*(x) u_p(x) = A_{p'}^* A_p \int dx e^{-ip'x/\hbar} e^{ipx/\hbar} \quad (13-22)$$

$$= A_{p'}^* A_p \int dx e^{i(p-p')x/\hbar} \quad (13-23)$$

$$= \hbar A_{p'}^* A_p \int dy e^{i(p-p')y} \quad (13-24)$$

$$= \hbar A_{p'}^* A_p \delta(p - p') 2\pi \quad (13-25)$$

$$= \hbar 2\pi A_{p'}^* A_p \delta(p - p') \quad (13-26)$$

$p \neq p'$ için momentum özfonksiyonları diktir, ancak $p = p'$ durumunda bir normalleşme sorunu vardır: Dirac delta fonksiyonu, veyahut eşdeğer olarak

$$\int dx |u_p(x)|^2 = |A_p|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{|e^{ipx/\hbar}|^2}_{=1} \quad (13-27)$$

integrali ıraksar. Normalleşme sorunu ile ilgili olasılıkları ele amadan önce, açılım katsayıları $c(p)$ lerini hesaplayalım:

$$c(p) = \int dx A_p^* e^{-ipx/\hbar} \psi(x) = A_p^* \underbrace{\int dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar}}_{\sqrt{2\pi\hbar}\phi(p)} \quad (13-28)$$

$A_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ normalleşme seçimini yaparsak, $c(p)$ açınım katsayılarının momentum öz durumlarındaki son hali Fourier dönüşümüyle verilir

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \rightarrow \text{“normalleşmiş” momentum öz durumları} \quad (13-29)$$

$$\psi(x) = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) u_p(x)}_{\text{momentum öz durumlarına açınım}} \quad (13-30)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \underbrace{\int dp \phi(p) e^{ipx/\hbar}}_{\text{Fourier dönüşümü}} \quad (13-31)$$

a açınım ve Fourier dönüşümü bir tane olup, aynısıdır. $\psi(x)$ ve $\phi(p)$ parçacık hakkında aynı bilgiyi içerdiğinden, bunlardan birisini parçacığın konumunu ve hareketini betimlemek için kullanabiliriz. Daha temel bir hareket parçacığın durumudur (durum Hilbert uzayında bir vektördür). Bu durum değişik temsillerde (konum temsili $\psi(x)$, momentum temsili $\phi(p)$, enerji temsili c_E) Hermite-sel işlemcileri ile ilgilendirilmiştir (konum $\hat{x}$, momentum $\hat{p}$, enerji $\hat{H}$). $\phi(p)$ özel bir durumun **momentum temsili** olup, onu **momentum uzayında dalga fonksiyonu** gibi yorumlarız. SD dalga fonksiyonunun zaman evrimi veyahut eşdeğer olarak, Hilbert uzayında parçacık durumunun zaman evrimidir.

Tek (üç) boyuttaki bir parçacık için, Hilbert uzayı tek (üç) boyutlu olurken, üç boyutlu N parçacık için ise Hilbert uzayı $3N$ -boyutludur. Genel olarak, Hilbert uzayı N üç-boyutlu vektör uzayda bir tensör çarpımına ayrılamaz $V_{\text{sistem}} \neq V_1 \otimes V_2 \otimes \dots \otimes V_N$ veya eşdeğer olarak, N parçacığına ait dalga fonksiyonu, her bir parçacığın dalga fonksiyonlarının bir çarpımına ayrılamaz,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) \neq \Psi_1(\mathbf{r}_1) \Psi_2(\mathbf{r}_2) \dots \Psi_N(\mathbf{r}_N) \quad (13-32)$$

Bu durumda, N -parçacıklı bir sistemin dalga fonksiyonu her bir bireysel parçacığın dalga fonksiyonlarının bir çarpımı şeklinde yazılamadığı zaman, yani parçacıklar birbirinden bağımsız olarak evrime uğramazlarsa bu durumda **dolaşık bir durumdan** söz edebiliriz. Bu olasılık sebebiyle N -parçacıklı bir kuantum sistemi, klasik karşısına kıyasla oldukça daha zengindir (N 'e göre üssel). Bununla beraber, çoğu durumda dolaşıklık ile ilgili parçacık-parçacık eş ilişkilerini takip etmek zor olup, sistem bu durumda yarı-klasik gibi davranır. Eş ilişkileri koruyabilen bir kuantum sistemi, dışarıdan değiştirilebilir bir kuantum bilgisayarı teşkil edebilirdi. Bu kuantum bilgisayarı bazı hesaplama sorunlarını klasik bir bilgisayara göre üssel hızda çözebilirdi (şimdiye kadar çok azı keşfedildi). Hilbert uzayının muazzam büyüklüğünden dolayı, çok-parçacıklı eş ilişkileri kapsayan bazı kuantum mekaniksel sorunların çözümünü klasik bir bilgisayarda gerçekleştirmek oldukça zordur. (örneğin, birçok elektronun eş ilişkili hareketini bulunduran yüksek sıcaklık üstün iletkenliği). Şimdi tek boyutta tek bir parçacığa dönelim...