

Bu takdirde

$$\hat{H}|\tilde{1}\rangle = \hat{H}\hat{a}^\dagger|0\rangle \quad (19-1)$$

$$= \left([\hat{H}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger \hat{H} \right) |0\rangle \quad (19-2)$$

$$= \left(\hbar\omega\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \right) |0\rangle \quad (19-3)$$

$$= \frac{3}{2}\hbar\omega\hat{a}^\dagger|0\rangle \quad (19-4)$$

$$= \frac{3}{2}\hbar\omega|\tilde{1}\rangle, \quad (19-5)$$

yani, $|\tilde{1}\rangle = \hat{a}^\dagger|0\rangle$ de bir enerji özdurumudur, ancak $|0\rangle$ için enerjisi $\frac{1}{2}\hbar\omega$ yerine $\frac{3}{2}\hbar\omega$ dir.

Benzer şekilde, $|\tilde{2}\rangle = \hat{a}^\dagger|\tilde{1}\rangle$ inde bir enerji özdurumu olduğunu fakat enerjisinin $\frac{5}{2}\hbar\omega$, vs. söyleyebiliriz. Sonuç olarak, $|\tilde{n}\rangle$ enerji özdurumlarının (henüz birim boylandırılmamış) bir merdivenini

$$|\tilde{n}\rangle = (\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad (19-6)$$

ile oluşturabiliriz ki enerjisi

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega. \quad (19-7)$$

$\hat{a}(\hat{a}^\dagger)$ eksiltir (artırır) işlemcisi olarak bilinir ve bu enerjiyi $\hbar\omega$ kadar eksiltir (artırır).

Şekil I: $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ bazen “merdiven işlemcisi” olarak bilinir zira bunlar enerji özdurumlarını yukarı ve aşağı doğru taşırlar.

Tek dalga boylu bir elektromanyetik alanı kuantum mekaniksel olarak betimlerken, ω frekansını bir harmonik salıncının frekansı ile ilgilendirebiliriz. Etkileşmeyen parçacıklar (fotonlar gibi) n adet parçacıklı bir durum, HO’ün n -inci özdurumuyla ilgilendirebilir. Bu durumda taban durumu bir boş kipe (fotonsuz, $n = 0$) karşı gelir.

Bununla beraber, elektromanyetik alanın boşluk sapmalarıyla ilgili olan $\frac{1}{2}\hbar\omega$ sonlu bir enerji halen mevcuttur. Bu bağlamda $\hat{a}^\dagger$ ve $\hat{a}$ sırasıyla yaratma ve yoketme işlemcileri olarak bilinir., zira bunlar fotonları yaratır veya yok ederler ki bunlar keyfî etkileşmeyen bozonik parçacıklardır.

HO enerji öz durumlarının Birim boylandırılması

Taban durumu $|0\rangle$ 'ın düzgün bir şekilde önceden birim boylandırılmış olduğunu kabul edelim $\langle 0|0\rangle = 1$.

Not. $\langle 0|0\rangle$ 'ın $\langle 0|0\rangle = \int dx u_0^*(x) u_0(x)$ olduğunu hatırlayalım.

$|\tilde{1}\rangle = \hat{a}^\dagger |0\rangle$ durumu ne kadar uzundur?

$$\langle 1|1\rangle = \langle \hat{a}^\dagger 0 | \hat{a}^\dagger 0 \rangle \quad (19-8)$$

$$= \langle 0 | \hat{a} | \hat{a}^\dagger 0 \rangle \quad (19-9)$$

$$= \langle 0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \quad (19-10)$$

$$= \langle 0 | [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger \hat{a} | 0 \rangle \quad (19-11)$$

$$= \langle 0 | 1 + \hat{a}^\dagger \hat{a} | 0 \rangle \rightarrow (\hat{a} | 0 \rangle = 0) \quad (19-12)$$

$$= 1 \quad (19-13)$$

$|\tilde{1}\rangle$ durumu önceden birim boylandırıldığından, şunu yazabiliriz:

$$|\tilde{1}\rangle = \hat{a}^\dagger |0\rangle \rightarrow \text{birim boylandırılmış.} \quad (19-14)$$

$|\tilde{2}\rangle = \hat{a}^\dagger |\tilde{1}\rangle = \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger |0\rangle$ ne olur?

$$\langle \tilde{2} | \tilde{2} \rangle = \langle \hat{a}^\dagger 1 | \hat{a}^\dagger 1 \rangle \quad (19-15)$$

$$= \langle 1 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | 1 \rangle \quad (19-16)$$

$$= \langle 1 | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) | 1 \rangle \quad (19-17)$$

$$= \langle 1 | \hat{a}^\dagger | 0 \rangle + 1 \rightarrow (\hat{a} | 1 \rangle = | 0 \rangle) \quad (19-18)$$

$$= \langle 1 | 1 \rangle + 1 \quad (19-19)$$

$$= 2 \quad (19-20)$$

Bundan sonra düzgün birim boylandırılmış ikinci uyarılmış durum

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\tilde{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle. \quad (19-21)$$

Genel olarak, $|\tilde{n}\rangle = (\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ durumunun uzunluğunun karesinin $\langle \tilde{n}|\tilde{n}\rangle = n!$ olduğunu gösterebiliriz. Sonuç olarak, n -inci birim boylandırılmış öz durum

$$|n\rangle := \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle. \quad (19-22)$$

olur. Aynı zamanda gösterebiliriz ki

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (19-23)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (19-24)$$

İşlemcilerden konumsal dalga fonksiyonlarına dönüşüm

$|0\rangle$ taban durumundaki şart, $\hat{a}|0\rangle = 0$, yok edici işlemcimizin konum uzayındaki tanımı kullanarak şöyle yazılabilir

$$\hat{a} = \frac{\hat{x}}{x_0} + i\frac{\hat{p}}{p_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p}, \quad (19-25)$$

$$\hat{a}u_0(x) = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_0(x) = 0 \quad (19-26)$$

$$\left(m\omega x + \hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_0(x) = 0. \quad (19-27)$$

En basit dif. denk., $u_0(x) = ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ çözümüne $1 = c^2 \frac{\hbar}{m\omega}$ birim boylandırılmasıyla sahiptir. Sonuç olarak, birim boylandırılmış taban durum dalga fonksiyonu

$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \quad (19-28)$$

olur. Birim boylandırılmış n -inci öz durum

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad (19-29)$$

den elde edilebilir veya

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^n u_0(x). \quad (19-30)$$

olur.

Sıra deęiřtiriciler, Heisenberg belirsizlięi ve eřzamanlı özfonksiyonlar

Konum temsili $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ (veya $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ momentum temsili) gerçeęi öngörür ki

$$\hat{p}\hat{x}\psi(x) = \hat{p}(x\psi(x)) \neq \hat{x}\hat{p}\psi(x) = x(\hat{p}\psi(x)), \quad (19-31)$$

yani, $\hat{x}$ ve $\hat{p}$ sıra deęiřmez. $\hat{p}\hat{x}$ ve $\hat{x}\hat{p}$ arasındaki farkı, **sıra deęiřtirici** olarak tanımlarsak,

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}. \quad (19-32)$$

burada

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \rightarrow \text{(c-sayı)} \quad (19-33)$$

Genel olarak $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ bir işlemcidir. Sıra deęiřtirici doğrusaldır.

$$[c_1\hat{A}_1 + c_2\hat{A}_2, \hat{B}] = c_1[\hat{A}_1, \hat{B}] + c_2[\hat{A}_2, \hat{B}] \quad (19-34)$$

Dięer kullanışlı baęıntılar

$$[\hat{B}, \hat{A}] = -[\hat{A}, \hat{B}] \quad (19-35)$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (19-36)$$

Eřzamanlı özfonksiyonlar

Serbest bir parçacık ele alalım. $\psi(x) = e^{\pm ikx}$ düzlem dalgaları, özdeęeri $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ olmak üzere enerjinin eřzamanlı özfonksiyonlarıdır,

$$\hat{H}e^{\pm ikx} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\pm ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{\pm ikx}, \quad (19-37)$$

momentum için özdeęeri $\pm\hbar k$ olmak üzere

$$\hat{p}e^{\pm ikx} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{\pm ikx} = \pm\hbar k e^{\pm ikx}. \quad (19-38)$$

olur.

Not. Şayet $\cos(kx)$, $\sin(kx)$ seçmiř olsaydık, bunlar özdeęeri $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ olan enerji özfonksiyonları olurlardı, ancak momentum özfonksiyonları deęil.

Bununla beraber, $\cos(kx)$ ve $\sin(kx)$ dejenere olduklarından (yani aynı enerji özdeğerlerine sahip olmaları), dejenere öz durumların doğrusal birleşimi olan $e^{\pm ikx} = \cos(kx) \pm i \sin(kx)$ 'i seçmek mümkündür ki bunlar momentumunda eşzamanlı öz durumlarıdır. Potansiyel kuyusunda, diğer yandan, enerji öz durumları momentumun eşzamanlı öz durumları değildi. Genel olarak, şu teoremler vardır:

Teorem 19.1. $\hat{A}$, $\hat{B}$ gibi iki Hermitsel işlemci ancak ve ancak sıra değiştirme yaparlarsa, eşzamanlı bir özfonksiyonlar kümesine sahiptirler.

İspat. " $\Rightarrow$ " Eşzamanlı özfonksiyonların tam bir kümesi $\{u_{ab}\}$ bulunduğunu kabul edelim. Yani,

$$\hat{A}u_{ab} = au_{ab} \quad (19-39)$$

$$\hat{B}u_{ab} = bu_{ab} \quad (19-40)$$

olup, burada a, b özdeğerlerdir. Bu takdirde tüm özfonksiyonlar için

$$[\hat{A}, \hat{B}]u_{ab} = (ab - ba)u_{ab} = 0 \text{ olur} \rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0.$$

" $\Leftarrow$ " Bkz Gasiorowicz, 5-4

$\hat{A}$ 'ya ait bir ölçüm yapıldığında, $\hat{A}$ 'nın bir öz durumu belirli bir sonuç ortaya koyacağından, bu yalnızca $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ nin sıra değiştirmesi halinde, ΔA ve ΔB nin daima eşzamanlı olarak sıfır olacağı anlamındadır.

Teorem 19.2. Herhangi iki Hermitsel işlemci $\hat{A}$, $\hat{B}$ için herhangi seçilmiş bir durum ψ 'da

$$(\Delta A)_\psi^2 (\Delta B)_\psi^2 \geq \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi^2 \quad (19-41)$$

olacağını ispatlanabilir.

İspat. Bkz Gasiorowicz, online ekte.

$\hat{x}$, $\hat{p}$ için

$$(\Delta x)_\psi^2 (\Delta p)_\psi^2 \geq \frac{1}{4} \langle i\hbar \rangle_\psi^2 = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (19-42)$$

yazılabilir ki burada eşitliğin sağ tarafı ψ durumuna bağlı değildir. Bu $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ Heisenberg belirsizlik bağıntısının başka bir türetilimidir.

Üç boyutlu Schrödinger denklemi

$$\boxed{\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})} \rightarrow \text{SD 3B'da} \quad (19-43)$$

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \quad (19-44)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right) \rightarrow \text{konum temsilinde} \quad (19-45)$$

Böylece SD yazılırsa $\left(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = W \psi(\mathbf{r}) \rightarrow \text{SD, 3B'da} \quad (19-46)$$

Küresel simetrik potansiyel

Eğer potansiyel küresel simetriye sahipse, $V(\mathbf{r}) = V(r)$, bu takdirde küresel koordinatlarda çalışmak uygundur, bu durumda yazabiliriz ki

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (19-47)$$

olur. Bir işlemciyi şunu kullanarak tanımlarsak,

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad (19-48)$$

yazılır. $\hat{\mathbf{L}}$ açısal momentumla ilgili bir işlemcidir.

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (19-49)$$

$V(r)$, θ ve ϕ 'ye bağlı olmadığından, şimdi bir başlangıç yapalım

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (19-50)$$

bundan sonra,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \right] R(r)Y(\theta, \phi) \quad (19-51)$$

$$+ \frac{L^2}{2mr^2} R(r)Y(\theta, \phi) \quad (19-52)$$

$$= ER(r)Y(\theta, \phi) \quad (19-53)$$

Daha önceki gibi, zamandan bağımsız SD'ni türetirken, $R(r)Y(\theta, \phi) \neq 0$ ile bölelim.

$$\dots = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \right] R(r) + \frac{1}{Y(\theta, \phi)} \frac{L^2}{2mr^2} R(r)Y(\theta, \phi) \quad (19-54)$$

$$= E \quad (19-55)$$

Eğer ikinci terim θ, ϕ bağımlı değilse, denk.in sol tarafı tüm θ, ϕ ler için yalnızca bir sabit olur. Böylece iki denkleme ulaşırız:

$$\frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2}Y(\theta, \phi) = \frac{\text{const}}{2mr^2}Y(\theta, \phi) = E_L(r)Y(\theta, \phi) \quad (19-56)$$

$$\frac{1}{R(r)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \right] R(r) + \frac{\text{const}}{2mr^2} = E \quad (19-57)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) + \frac{\text{const}}{2mr^2} \right] R(r) = ER(r) \quad (19-58)$$

burada $E_L = \frac{\text{const}}{2mr^2}$, dalga fonksiyonunun açısal bağımlılığı ile ilgili enerjidir.