## ***Artırma ve Azaltma Operatörleriyle Elde Edilen Harmonik Osilatör Enerjileri ve Dalga Fonksiyonları***

Schrödinger denklemi harmonik osilatör için ilginç bir forma dönüştürülür......

$$u^2+v^2=(iu+v)(-iu+v)$$ bağıntısıyla aynı şekilde

$$H=\frac{1}{2m}\left[p^2+(m\omega x)^2\right]$$ ile birlikte

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2+(m\omega x)^2\right]\psi=\frac{1}{2m}\left[p^2+(m\omega x)^2\right]\psi=E\psi$$

Aşağıda verilen

$$(a_-a_+)f(x)=\left(\frac{1}{2\hbar m\omega}(ip+m\omega x)(-ip+m\omega x)\right)f(x)$$

$$=\frac{1}{2\hbar m\omega}\left[p^2+(m\omega x)^2-im\omega(xp-px)\right]f(x)$$

$$=\left\{\frac{1}{2\hbar m\omega}\left(p^2+(m\omega x)^2\right)-\frac{i}{2\hbar}[x,p]\right\}f(x)$$

$$a_-a_+=\frac{1}{2\hbar m\omega}\left(p^2+(m\omega x)^2\right)+\frac{1}{2}=\frac{1}{\hbar\omega}H+\frac{1}{2}$$

ifadesini elde etmek için deney fonksiyonu (f(*x*)) üzerine etkili olan iki operatör tanımlanabilir:

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

Bu operatörlerle, Schrödinger denkleminin $a_+$ ve $a_-$ içeren yeni bir formu elde edilir.

$$\boxed{H\psi = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right)\psi}$$

Operatörlerin sırası değiştirilirse, --- $a_-a_+ \Rightarrow a_+a_-$ --- şeklinde

$$\boxed{H\psi = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi}$$

veya

$$\boxed{\hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi}$$

ve ilginç bir sonuç elde edilir.

$$a_-a_+ - a_+a_- = \left[a_-a_+\right] = 1$$

ÖNERİ: $\psi$, $E$ enerjiyle; $a_+\psi$, $E+\hbar\omega$ enerjiyle Schrödinger denklemine uyarsa !

$$H\left(a_+\psi\right) = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\left(a_+\psi\right) = \hbar\omega\left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+\right)\psi$$
$$= \hbar\omega a_+\left(a_-a_+ + \frac{1}{2}\right)\psi = a_+\left\{\hbar\omega\left(a_+a_- + 1 + \frac{1}{2}\right)\psi\right\} = a_+\left\{\hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\right\}\psi$$
$$= a_+\left(H + \hbar\omega\right)\psi = \left(E + \hbar\omega\right)\left(a_+\psi\right)$$

$$\boxed{H\left(a_+\psi\right) = \left(E + \hbar\omega\right)\left(a_+\psi\right)}$$

Benzer şekilde, $a_-\psi$, $E-\hbar\omega$ enerjiyle Schrödinger denklemine uyarsa !

$$H\left(a_-\psi\right) = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right)\left(a_-\psi\right) = \hbar\omega\left(a_-a_+a_- - \frac{1}{2}a_-\right)\psi = a_-\hbar\omega\left(a_+a_- - \frac{1}{2}\right)\psi$$
$$= a_-\left\{\hbar\omega\left(a_-a_+ - 1 - \frac{1}{2}\right)\psi\right\} = a_-\left(H - \hbar\omega\right)\psi = a_-\left(E - \hbar\omega\right)\psi$$

$$\boxed{H\left(a_-\psi\right) = \left(E - \hbar\omega\right)\left(a_-\psi\right)}$$

Bunlar, hâller arasında ilişki kuran operatörlerdir. Bir hâl tanımlanırsa, diğer dalga fonksiyonları ve enerjileri oluşturmak için bu hâl kullanılabilir. Ticarî kullanımda, $a_\pm$, MERDİVEN operatörler olarak veya $a_+$ = artıran ve $a_-$ = azaltan operatör olarak kullanılır.

Merdivende bir alt basamak ($\psi_0$) olduğu bilinir ve

$$a_-\psi_0 = 0$$

yazılır.

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

Bu bağıntının integrali, aşağıdaki sonucu verir.

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

$$\int\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}\int xdx \qquad \Rightarrow \qquad \ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{2h}x^2 + A_0$$

$$\boxed{\psi_0(x) = A_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}} \quad \text{ve} \quad \boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$

$E_0$, $\psi_0$' ın $H\psi = E\psi$ ile ilişkilendirilmesi sonucu bulunur. Normalizasyon aşağıda verilmiştir.

Şimdi merdivenin alt basamağına odaklanıldığında, diğer dalga fonksiyonlarını ($\psi_n$) ve enerjilerini ($E_n$) elde etmek için tekrar $a_+$' dan yararlanılır. Kısacası

$$\boxed{\psi_n(x) = A_n(a_+)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},} \quad \text{ve} \quad \boxed{E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega} \quad \text{olur.}$$

Böylece $\psi_1$ için aşağıdaki bağıntı elde edilir.

$$\psi_1(x) = A_1\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} xe^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Bu bağıntıda hâlâ, tayin edilmesi gereken bir normalizasyon sabiti ($A_1$) bulunmaktadır.

**Dalga fonksiyonlarının Cebirsel Normalizasyonu:** Normalizasyon, cebirsel olarak yapılabilir.

$$a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1} \qquad\qquad a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1}$$

$c_n$ ve $d_n$ orantı faktörleri nedir? Herhangi bir $f(x)$ ve $g(x)$ fonksiyonu için

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

dir. Burada $a_\mp$, $a_\pm$' nın **Hermit devinimi** dir.

*İspat :*

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

$$a_\pm = \frac{1}{(2\hbar m\omega)^{1/2}}[\mp ip + mwx] \quad = \frac{1}{(2\hbar m\omega)^{1/2}}\left[\mp i\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right) + mwx\right] = \frac{1}{(2\hbar m\omega)^{1/2}}\left[\mp\hbar\frac{d}{dx} + mwx\right]$$

olduğu hatırlanırsa ve aşağıdaki integral alınırsa

$$\int f^*(a_\pm g)\, dx = \frac{1}{(2\hbar mw)}\, dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\left(\pm\hbar\frac{d}{dx} + mwx\right)f\right]^* gdx = \int_{-\infty}^{\infty}(a_\mp f)^* g\, dx$$

sonuç olarak

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

yazılabilir.

$$\hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi_n = E_n\psi_n \qquad \text{ve} \qquad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar w$$

$$\left(a_+ a_- \pm \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n$$

bağıntıları kullanılırsa

$$\boxed{a_+ a_-\psi_n = n\psi_n}$$

bağıntısı ve

$$\hbar\omega\left(a_- a_+ - \frac{1}{2}\right)\psi_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n$$

$$\boxed{a_- a_+ \psi_n = (n+1)\psi_n}$$

bağıntıları elde edilir.

Artık $c_n$ hesaplanabilir:

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

$$\boxed{c_n = \sqrt{n+1}}$$

$d_n$ faktörü de benzer şekilde hesaplanabilir:

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

$$\boxed{d_n = \sqrt{n}}$$

Böylece $a_\pm$ için iki normalizasyon sabiti elde edilir.

$$a_+\psi_n = (n+1)^{1/2} \psi_{n+1} \qquad\qquad a_-\psi_n = n^{1/2} \psi_{n-1}$$

<u>Harmonik osilatör dalga fonksiyonları:</u> Denklemler, biraz daha kullanışlı forma yeniden düzenlendiğinde

$$\psi_{n+1} = \frac{1}{(n+1)^{1/2}} a_+\psi_n \qquad\qquad \psi_{n-1} = \frac{1}{n^{1/2}} a_-\psi_n$$

elde edilir.

Bu denklemler, diğer dalga fonksiyonlarını türetmek için kullanılabilir. $\psi_0$ ile başlanıldığında;

$$n=0 \qquad \psi_1 = \frac{1}{(0+1)^{1/2}} a_+\psi_0 = a_+\psi_0$$

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

$$n=2 \qquad \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2+1}} a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3\cdot 2}} a_+^3\psi_0$$

$$n=3 \qquad \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{3+1}} a_+\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4\cdot 3\cdot 2}} a_+^4\psi_0$$

$\psi_n$ için

$$\boxed{\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a_+\right)^n \psi_0}$$

yazılabilir.

<u>Harmonik osilatör dalga fonksiyonlarının ortogonalliği:</u> İki dalga fonksiyonu için ortogonallik koşulu hatırlanacak olursa

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx = \delta_{nm}}$$

yazılır. $a_\pm$ operatörleri kullanılarak bu koşulun harmonik osilatör dalga fonksiyonları için de geçerli olduğu gösterilebilir. İspatı, aşağıda verilmiştir.

$$\int \psi_m^* (a_+ a_-) \psi_n \, dx = n \int \psi_m^* \psi_n \, dx$$

$$\int (a_- \psi_m)^* (a_- \psi_m) dx = \int (a_+ a_- \psi_m)^* \psi_n \, dx = m \int \psi_m^* \psi_n \, dx$$

$$(n-m)\int \psi_m^* \psi_n \, dx = 0$$

$n = m$ alındığında en basit durum söz konusuyken n ≠ m olduğunda

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dx = 0$$

olur

<u>Harmonik osilatörün potansiyel enerjisi:</u> $a_\pm$ operatörleri kullanılarak bazı açıklayıcı hesaplamalar yapılabilir. Potansiyel enerjinin, harmonik osilatörle ilişkilendirildiği düşünüldüğünde

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

ve böylece

$$\langle V \rangle = \left\langle \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 \int \psi_n^* \hat{x}^2 \psi_n dx$$

yazılır.

Önce, $\hat{x}$ ve $\hat{p}$, $a_{\pm}$ operatörleri cinsinden yazılır.....

$$\hat{x} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(a_+ + a_-) \qquad \hat{p} = i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{1/2}(a_+ - a_-)$$

ve

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

<u>**Dirac Gösterimi:**</u> Bu ifade açıklanmadan önce, daha sonraki durumlarda kolaylık sağlayacak bazı yeni gösterimler verilebilir. $\pm\infty$ sınırları arasında integral yazmak yerine bu integrali göstermek üzere $\langle \; | \; \rangle$ parantezleri kullanılır. İlk yarısı "**bra**" ve ikinci yarısı "**ket**" olarak adlandırılır. Bir başka ifadeyle "**bra**" – "**ket**" gösterimi:

bra = $\langle \; |$ ve ket = $| \; \rangle$

Olasılık yoğunluğu için böyle bir ifade yazılabilir:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \langle m | n \rangle$$

Burada $\psi_m^*$' ın varlığı anlaşılabilir. Bu gösterim kullanılarak $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$ ve $\langle x^2 \rangle$ için integraller aşağıdaki gibi verilebilir.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \hat{x} \psi_n dx = \langle m | \hat{x} | n \rangle \qquad \text{ve} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \hat{p} \psi_n dx = \langle m | \hat{p} | n \rangle$$

$$\langle V \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \int \psi_n^* \hat{x}^2 \psi_n dx = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle$$

$$\langle V \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\frac{1}{2} m\omega^2 \left[\langle n | a_+a_+ | n \rangle + \langle n | a_+a_- | n \rangle + \langle n | a_-a_+ | n \rangle + \langle n | a_-a_- | n \rangle\right]$$

Sonuç olarak

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

yazılır.

Denklemlerin tamamen karmaşık hale gelmemesi önemli olup fizik ve kimya ihmal edilir. Buna göre, bu bağıntının fiziksel önemi nedir diye bir soru sormamız gerekir?