TEORİK FİZİK DERSLERİ

Dizinin Kurucusu : AHMED YÜKSEL ÖZEMRE
Dizinin Yöneticisi : ŞEHSUVAR ZEBİTAY

«Teorik Fizik Dersleri» şimdilik 3 ü Lisans ve 9 u Lisansüstü düzeyinde 12 cild metin kitabı ile 15 cild çözümlü problem kitabından oluşan bir dizi olarak plânlanmış bulunmaktadır.

METİN KİTAPLARI :

Lisans Düzeyinde

1. **Fizikte Matematik Metotlar**; A.Y. Özemre (1. *baskısı İTÜ Yayınları No.* 826, 1971; 2. *baskısı, İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 173, 1983).
2. **Klâsik Teorik Mekanik**; A.Y. Özemre (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 132, 1976; 2. *baskı No.* 158, 1981).

3A. **Kuvantum Mekaniği, Birinci Kitap**; Ç. Cansoy (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 228, 1994).

3B. **Kuvantum Mekaniği, İkinci Kitap**; Ç. Cansoy (*HAZIRLANIYOR*).

Lisansüstü Düzeyinde

4. **Klâsik Elektrodinamiğe Giriş**; A.Y.Özemre (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 180, 1983).
5. **Isı Teorisi**; A.Y. Özemre (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 140, 1977; 2. *baskı No.* 198, 1987).
6. **Özel Rölâtivite Teorisi.**
7. **Gravitasyon Rölâtivist Teorileri**; A.Y. Özemre (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 168, 1982).
8. **Kozmolojiye Giriş**; A.Y. Özemre (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 161, 1981).
9. **İleri Kuvantum Teorisi.**
10. **Çekirdek Teorisi**; Ç. Cansoy (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 143, 1978).
11. **Alan Teorilerine Giriş.**
12. **Temel Tânecikler Teorisi.**

ÇÖZÜMLÜ PROBLEM KİTAPLARI :

Dizinin tasarlanan 15 adet Çözümlü Problem Kitabından hâlen yayımlanmış, baskıda ya da hazırlanmakta olanlar şunlardır:

1/II **Fizikte Matematik Metotlar Çözümlü Problem Kitabı**; E. Rızaoğlu (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 169, 1982).

2/I **Klâsik Teorik Mekanik Çözümlü Problem Kitabı**; A.Y. Özemre ve Ş. Zebitay (*HAZIRLANIYOR*).

3A/I **Kuvantum Mekaniği Çözümlü Problem Kitabı**; E. Rızaoğlu (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 171, 1982; 2. *baskı No.* 202, 1987; 3. *baskı hazırlanıyor*).

5/I **Isı Teorisi Çözümlü Problem Kitabı**; A.Y. Özemre ve E. Rızaoğlu (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 147, 1978).

10/I **Çekirdek Teorisi Çözümlü Problem Kitabı**; (*İst. Üniv. Fen Fakültesi Yayınları No.* 183, 1983).

TEORİK FİZİK DERSLERİ

CİLD 3A

KUVANTUM MEKANİĞİ

(BİRİNCİ KİTAP)

Prof. Dr. ÇETİN CANSOY
İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi

İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ
FEN FAKÜLTESİ
1994

İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ
YAYINLARINDAN
Sayı : 3807

FEN FAKÜLTESİ
Sayı : 228

ISBN
975-404-333-7

TEORİK FİZİK
Sayı : 24

Bu kitabın I. basımı 4000 adet olarak İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi Matbaasında Aralık 1994 te tamamlanmıştır.

Bu Kitabımı

«Teorik Fizik Dersleri» Dizisinin Kurucusu

ve Bu Diziye ait Bu Güne Kadar Yayımlanan

Kitapların Yarıdan Fazlasını

Tek Başına Yazmış Bulunan

Azîz Meslektaşım

Prof. Dr. AHMED YÜKSEL ÖZEMRE'ye

En Derin Sevgilerimle İthaf Ediyorum.

ÖNSÖZ

Bu kitap 1980-1988 yılları arasında farklı iki ad altında arka arkaya 10 kez okutmuş olduğum bir yarıyıllık bir dersin notlarının derlenip toparlanmasiyle meydana gelmiştir. Söz konusu dersi, önce 1980-1982 bahar yarıyıllarında "**Kuvantum Mekaniği**" adı altında İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü VI. yarıyıl lisans öğrencilerine haftada 4 saat ders ve 2 saat uygulama olmak üzere 3 kez okuttum. Daha sonra da aynı dersi, 1982-1988 güz yarıyıllarında "**Kuvantum Fiziği I**" adı altında V. yarıyıl lisans öğrencilerine gene haftada 4 saat ders ve 2 saat uygulama olmak üzere 7 kez okuttum.

Yedi bölümden oluşan bu *birinci kitap*, hiçbir orijinalliği olmayan bir ders kitabıdır ve saçılma teorisi dışında rölâtivistik olmayan kuvantum mekaniğinin temel ilkelerini kapsamaktadır. Bu kitapta işlenen konuların, gerek kuvantum mekaniğinin temel ilkeleri bakımından, gerekse kullanılan matematiksel formalizm bakımından mümkün olduğu kadar ayrıntılı ve kolay anlaşılabilir bir tarzda açıklanmasına özen gösterilmiştir.

Kuvantum Mekaniği Derslerini okuturken bu kitaptaki bazı paragrafları zaman yetersizliğinden dolayı atladım. Bu paragraflar okuması için öğrenciye bırakılabilir(*). Öte yandan, yedinci bölümde pertürbasyon teorisinin ZEEMAN olayına uygulanmasında *seçim kuralları* kullanılmıştır. Derslerde zaman yetersizliğinden ötürü seçim kurallarının teorisi anlatılamadığından, kitabın sonunda EK. 1 de ayrıntılı olarak anlatılmıştır.

Her bölümün sonuna konu ile ilgili olarak, kitaptaki toplam sayısı 54 olan alıştırmalar ve problemler eklenmiştir. Öte yandan, Kuvantum Fiziği I dersine ait ve Teorik Fizik Dersleri Dizisinden "Kuvantum Mekaniği Çözümlü Problem

(*) Örneğin, (III.18) deki ispatın ikinci kısmı, (IV.8.39) bağıntısının ispatı, (IV.9) da (IV.9.2) bağıntısından sonrası, (VII.5.26a) integralinin hesabı ve (VII.7) ilk okuma esnasında atlanabilir.

Kitabı" Prof. Dr. Emine RIZAOĞLU tarafından yazılmıştır. Bu çözümlü problem kitabının ilk baskısı 1982 de, ikinci baskısı da 1987 de yayımlanmış olup yakında da üçüncü baskısı yayımlanacaktır. Prof. Dr. Emine RIZAOĞLU'nun çözümlü problem kitabı, bu kitaptaki söz konusu çözülmemiş problemlerin bir kısmını kapsamaktadır.

1983 bahar yarıyılından itibaren, VI. yarıyıl lisans öğrencilerine arka arkaya 12 kez okutmuş olduğum "Kuvantum Fiziği II" dersinin kitabı, "Kuvantum Mekaniği, *İkinci Kitap*" adı altında hazırlanmaktadır. *İkinci kitap* esas itibariyle saçılma teorisi ve rölâtivistik kuvantum mekaniği konularını kapsamaktadır.

Bu kitabın yazılmasını kolaylaştıran huzurlu ortamın varlığını sağlayan, başta Anabilim Dalı Başkanımız Prof. Dr. Şehsuvar ZEBİTAY olmak üzere Matematiksel Fizik Anabilim Dalının bütün elemanlarına samimî teşekkürlerimi burada ifâde etmeyi bir borç bilirim.

Formüllerinin dizgisi çok zor olan bu kitabı sabır ve güler yüzle dizen mürettip İsmail Binnaz'a, Atölye Şefi ve baskı operatörü Şâkir Çelik'e ve Fen Fakültesi Matbaasının emekleri geçen diğer personeline en kalbî teşekkürlerimi ifâde etmekten büyük haz duymaktayım.

Vezneciler, Ekim 1994 Çetin CANSOY

E R R A T A

(* işâretli satırlar sayfanın altından itibaren sayılacaktır).

Sayfa	Satır	Yanlış	Doğru
32	10	*vektörü*	*vektör*
89	3	$\sqrt{2mE/\hbar} = k$	$\sqrt{2mE} / \hbar = k$
120	14	(II.5)	(III.5)
125	14	$\mathbf{r}\,[c_1\,\psi_1(\mathbf{r}) + c_2\,\psi_1(\mathbf{r})] \equiv$	$\mathbf{r}\ \ c_1\,\psi_1(\mathbf{r}) + c_2\,\psi_2(\mathbf{r})] \equiv$
132	2*	Bır lineer ...	Bir A lineer ...
137	10*	$= p_x^2 + p_v^2 + p_z^2$	$= p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$
138	2*	*ati-HERMİTsel*	*anti-HERMİTsel*
141	13*	$C^+ = C - i\,B$	$C^+ = A - i\,B$
143	14	$(\mathbf{P}\,.\,\mathbf{Q}) = \ldots$	$(\mathbf{P}\,.\,\mathbf{Q})^+ = \ldots$
162	13*	operatörünfin	operatörünün
163	7*	*ortonommallik*	*ortonormallik*
173	11	partiye	pariteye
203	5*	$\mathbf{J}^2\,\psi_{jm} = j(j) + 1)\,\hbar^2\,\psi_{jm}$	$\mathbf{J}^2\,\psi_{jm} = j(j + 1)\,\hbar^2\,\psi_{jm}$
224	8	martiste	matriste
239	2	vektör	özvektör
312	12	$F_{11} = \frac{Z^6\,e^2}{\pi\,a_0^6} \int\int \ldots$	$F_{11} = \frac{Z^6\,e^2}{\pi^2\,a_0^6} \int\int \ldots$

I. BÖLÜM

TEK BİR PARÇACIĞA AİT SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİ

(I.1) KLÂSİK MEKANİĞİN KISA BİR ÖZETİ

Gerek klâsik mekanik, gerekse kuvantum mekaniği *dinamik değişkenler* cinsinden inşâ edilir. Klâsik mekanikte reel sayılar aracılığı ile ifâde edilen dinamik değişkenler kuvantum mekaniğinde *lineer operatörler* aracılığı ile ifâde edilirler. Fakat reel sayılar arasındaki çarpma işleminin komütatif olduğuna dair aksiyom lineer operatörler için geçerli değildir. Böylece kuvantum mekaniğinde dinamik değişkenler klâsik mekaniktekinden farklı bir cebire uyarlar. Daha ilerde göreceğiz ki, bu temel farka rağmen, kuvantum mekaniğindeki dinamik değişkenler klâsik mekanikteki karşılıkları ile ortak birçok özelliklere sâhiptirler ve böylece bu dinamik değişkenler aracılığı ile klâsik teoriye yakından benzer bir teori inşâ etmek ve klâsik teorinin güzel bir genelleştirmesini oluşturmak mümkündür. Kuvantum mekaniğinin klâsik mekanikle olan yakın benzerliklerini yeri geldikçe belirtebilmek amacı ile klâsik mekaniğin kısa bir özetini gözden geçireceğiz.

(I.1A) DİNAMİK DEĞİŞKENLER

Mekanikte bir noktasal parçacığa ait başlıca dinamik değişkenler koordinat (**r**), zaman (t), hız (**v**), momentum (**p**), enerji (E), açısal momentum (**L**) ve dönme açısıdır. Mekaniğin kanunları bu dinamik değişkenlerin bazıları arasındaki matematiksel bağıntılar aracılığı ile ifade edilirler. Bir kısım dinamik değişkenler doğrudan doğruya tanımlanır, başka bir kısmı ise öncekiler cinsinden tanımlanır. Klâsik mekanikte dinamik değişkenler reel sayılar aracılığı ile ifâde edilirler ve bu sebepten deneysel olarak ölçülen değerleri ile doğrudan doğruya karşılaştırılabilirler. Böylece, hem deney sonuçları aracılığı ile mekaniğin kanunları sınanabilir, hem de doğruluğu kabul edilen kanunların uygulanması ile deney sonuçları önceden hesaplanabilir. Şimdi bir noktasal parçacığa ait m kütlesi, **r** yer vektörü ve t zamanı cinsinden diğer dinamik değişkenleri tanımlayalım. Şüphesiz parçacığa ait m kütlesi bir dinamik değişken değildir.

$\mathbf{r}$ yer vektörü ile yeri belirlenen bir noktasal parçacığın kartezyen koordinatları $x = q_1, y = q_2, z = q_3$ olsun. Hız vektörünün koordinatlar ve zaman cinsinden ifâdesi

$$\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt \quad \text{veyâ} \quad v_i = dq_i/dt = \dot{q}_i \quad (i = 1, 2, 3)$$

şeklindedir. Kütlesi m ve hızı $\mathbf{v}$ olan bir noktasal parçacığın *momentum*unun ifâdesi

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} \quad \text{veyâ} \quad p_i = mv_i = m\dot{q}_i \quad (i = 1, 2, 3)$$

şeklindedir. Hız ve momentum vektörlerinin modülleri

$$v = |\mathbf{v}|, \quad p = |\mathbf{p}|$$

olduğuna göre

$$v^2 = \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{3} v_i v_i = \sum_{i=1}^{3} \dot{q}_i \dot{q}_i, \quad p^2 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = \sum_{i=1}^{3} p_i p_i$$

bağıntıları yazılabilir. Noktasal bir parçacığın *kinetik enerjisi*nin hızı veyâ momentumu cinsinden ifâdesi

$$T = m\, v^2/2 = p^2/2m$$

şeklindedir.

Bir noktasal parçacığa etki eden kuvvet alanı

$$\mathbf{F} = -\nabla V$$

şeklinde koordinatların ve zamanın bir $V(\mathbf{r}, t)$ fonksiyonundan türetilebiliyorsa bu $V(\mathbf{r}, t)$ fonksiyonuna noktasal parçacığın *potansiyel enerjisi* adı verilir. Söz konusu kuvvet alanı bu özel hâlde

$$\nabla \times \mathbf{F} = -\nabla \times \nabla V = 0$$

şartını sağlar ve *korunumlu kuvvet alanı* adını alır.

(I.1B) NEWTON HAREKET KANUNU VE HAMİLTON FONKSİYONU

Bir $\mathbf{F}$ kuvvet alanının etkisi altında hareket eden bir noktasal parçacığa ait *NEWTON hareket kanunu*nun ifâdesi

$$d\,\mathbf{p}/dt = \mathbf{F}$$

şeklindedir. Eğer kuvvet alanı korunumlu ise hareket kanunu veyâ hareket denklemi

$$d\mathbf{p}/dt = -\nabla V \tag{I.1B.1}$$

şeklini alır. Hareket denkleminin her iki yanını $d\mathbf{r} = \mathbf{v}dt$ ile skaler olarak çarparsak

$$\mathbf{v}\,.\,d\mathbf{p} = -(\nabla V)\,.\,d\mathbf{r}$$

bulunur. Öte yandan, V fonksiyonunun tam diferansiyelini veren

$$dV = (\nabla V)\,.\,d\mathbf{r} + \frac{\partial V}{\partial t}\,dt$$

bağıntısını kullanarak

$$-(\nabla V)\,.\,d\mathbf{r} = -\,dV + \frac{\partial V}{\partial t}\,dt$$

yazabiliriz. Ayrıca, $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ yazarak yukardaki bağıntı

$$\frac{\mathbf{p}\,.\,d\mathbf{p}}{m} = -\,dV + \frac{\partial V}{\partial t}\,dt$$

şeklini alır. $\mathbf{p}\,.\,\mathbf{p} = p^2$ bağıntısının diferansiyelini alırsak

$$\mathbf{p}\,.\,d\mathbf{p} = p\,dp = d(p^2/2)$$

bulunur ve yerine yazarak

$$d(p^2/2m) = -\,dV + \frac{\partial V}{\partial t}\,dt$$

veyâ

$$d\left(\frac{p^2}{2m} + V\right) = \frac{\partial V}{\partial t}\,dt$$

elde edilir. $T = p^2/2m$ olduğundan

$$\frac{d}{dt}(T + V) = \frac{\partial V}{\partial t} \tag{I.1B.2}$$

sonucuna varılır.

HAMİLTON fonksiyonu

$$H = H(\mathbf{p}, \mathbf{r};\, t) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}, t)$$

veyâ

$$H = H(p_i\,, q_i\,;\, t) = T(p_i) + V(q_i\,, t) \tag{I.1B.3}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Bu tanım bağıntısının zamana göre kısmî türevini alırsak

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial t} \tag{I.1B.4}$$

elde edilir ve böylece hareket denkleminden elde ettiğimiz (I.1B.2) bağıntısı

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} \tag{I.1B.5}$$

şeklini alır. Eğer potansiyel enerji fonksiyonu zamana açık olarak bağlı değilse HAMİLTON fonksiyonu da zamana açık olarak bağlı değildir. Böylece (I.1B.4) bağıntısından

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial t} = 0$$

bulunur ve (I.1B.5) bağıntısından

$$\frac{dH}{dt} = 0$$

veyâ integre ederek

$$H = E = \text{sâbit} \tag{I.1B.6}$$

sonucuna varılır. Böylece, potansiyel enerji zamana açık olarak bağlı değilse, HAMİLTON fonksiyonu veyâ toplam mekanik enerji bir *hareket sâbiti*dir. Bu da korunumlu kuvvet alanlarında *toplam mekanik enerjinin korunumu ilkesi*nin ifâdesinden başka bir şey değildir.

(I.1C) LAGRANGE FONKSİYONU VE HAMİLTON VARYASYON İLKESİ

LAGRANGE fonksiyonu

$$L = L(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) = T(\mathbf{v}) - V(\mathbf{r}, t)$$

veyâ

$$L = L(q_i, \dot{q}_i; t) = T(\dot{q}_i) - V(q_i, t) \tag{I.1C.1}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Bu fonksiyonun zamana göre ve $[t_1, t_2]$ zaman aralığındaki

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i; t)\, dt \tag{I.1C.2}$$

belirli integrali ile tanımlanan S büyüklüğüne *aksiyon* adı verilir. Parçacığın yörüngesi $q_i(t)$ fonksiyon takımı ile bellidir. Yörüngenin başlangıcı olan P_1 noktası $q_i(t_1)$ koordinatları ve bitimi olan P_2 noktası da $q_i(t_2)$ koordinatları ile bellidir. Sâbit tutulan P_1 ve P_2 noktaları sonsuz sayıda yörünge ile birleştirilebilir. Bu yörüngelerden her biri belirli bir S değeri verir. Öte yandan, bu yörüngelerden biri ve yalnız biri NEWTON hareket kanununa uyan yörüngedir ve S değerlerinin en küçüğünü verir. $t_1 < t < t_2$ olmak üzere belirli bir t ânında bir yörüngeden ona sonsuz yakın olan bir diğerine geçiş $q_i(t)$ fonksiyon takımının sonsuz küçük $\delta q_i(t)$ *varyasyonu* yâni *değişimi* ile belirlidir. Yörüngenin $\delta q_i(t)$ varyasyonu, aksiyonun δS varyasyonunu verir. Bütün yörüngeler P_1 ve P_2 sâbit noktalarından geçtikleri için bu noktalarda yörüngenin varyasyonu sıfırdır ve

$$\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0 \qquad \text{(I.1C.3)}$$

sınır şartları yazılabilir. Bir yörüngeden öbürüne geçerken zaman sâbit olduğundan, zamanın varyasyonu sıfırdır : $\delta t \equiv 0$. NEWTON hareket kanununa uyan yörünge için $S =$ minimum olduğundan, bu yörünge

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i ; t)\, dt = 0 \qquad \text{(I.1C.4)}$$

bağıntısı ile belirlidir. İşte bu bağıntı *HAMİLTON varyasyon ilkesi* adı ile bilinmektedir. Bu ilke

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L\, dt = \int_{t_1}^{t_2} \delta L\, dt = 0$$

şeklinde de yazılabilir. Buradaki δL tam diferansiyel alma kuralına göre hesaplanabilir ve $\delta t = 0$ olduğundan

$$\delta L = \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right)$$

bulunur. Yerine yazarak

$$\delta S = \sum_{i=1}^{3} \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) dt = 0$$

elde edilir. Öte yandan,

$$\delta \dot{q}_i = \delta \left(\frac{dq_i}{dt} \right) = \frac{d(\delta q_i)}{dt}$$

olduğundan, sağ taraftaki toplamın içindeki integrallerden ikincisi

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta\dot{q}_i\,dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\frac{d(\delta q_i)}{dt}\,dt$$

şeklinde yazılabilir. Bu integrale kısmî integrasyon metodu uygulanırsa

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta\dot{q}_i\,dt = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta q_i\right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\delta q_i\,dt$$

elde edilir. (I.1C.3) sınır şartlarından ötürü

$$\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta q_i(t)\right]_{t_1}^{t_2} = 0$$

olur ve kısmî integrasyondan artan terimleri δS i veren bağıntıda yerlerine yazarak

$$\delta S = \sum_{i=1}^{3} \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\right]\delta q_i\,dt = 0$$

bulunur. Bu bağıntı keyfî δq_i varyasyonları için doğru olduğundan

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \qquad (i = 1, 2, 3) \qquad \text{(I.1C.5)}$$

sonucuna varılır. Bu denklemlere *LAGRANGE denklemleri* adı verilir.

Şimdi LAGRANGE denklemlerinin gerçekten NEWTON hareket denklemlerinden ibaret olduğunu gösterelim.

$$T = \frac{1}{2}\,m \sum_{i=1}^{3} \dot{q}_i\,\dot{q}_i \qquad \text{(I.1C.6)}$$

olduğunu hatırlayarak (I.1C.1) bağıntısından

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i = p_i, \qquad (i = 1, 2, 3) \qquad \text{(I.1C.7)}$$

ve

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = -\frac{\partial V}{\partial q_i}, \qquad (i = 1, 2, 3) \qquad \text{(I.1C.8)}$$

bağıntıları bulunur. (I.1C.5) bağıntısında yerlerine yazarak

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial q_i}, \qquad (i = 1, 2, 3)$$

veyâ

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V \tag{I.1C.9}$$

sonucuna varılır. Bu ise, (I.1B.1) bağıntısı ile verilen NEWTON hareket denkleminin vektörel ifâdesidir.

(I.1D) HAMİLTON HAREKET DENKLEMLERİ

(I.1B.3) ve (I.1C.1) bağıntılarını yeniden yazalım :

$$H = T + V, \qquad L = T - V$$

Bu iki bağıntıyı taraf tarafa toplarsak

$$H + L = 2T$$

bulunur. Öte yandan, (I.1C.6) ve (I.1C.7) bağıntılarından

$$2T = m\sum_{i=1}^{3} \dot{q}_i\,\dot{q}_i = \sum_{i=1}^{3} p_i\,\dot{q}_i$$

yazılabilir ve böylece

$$H = \sum_{i=1}^{3} p_i\,\dot{q}_i - L \tag{I.1D.1}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntının her iki yanının zamana göre kısmî türevini alırsak

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \tag{I.1.D.2}$$

elde edilir. Şimdi (I.1D.1) bağıntısının her iki yanının tam diferansiyelini alalım :

$$dH = \sum_i d(p_i\,\dot{q}_i) - dL$$

Öte yandan, $L = L(q_i\,,\dot{q}\,;t)$ nin tam diferansiyelini oluşturalım :

$$dL = \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\,dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,d\dot{q}_i\right) + \frac{\partial L}{\partial t}\,dt$$

bulunur. Ayrıca, (I.1C.7) ve (I.1C.5) bağıntılarından

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i \quad \text{ve} \quad \frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = \dot{p}_i$$

yazılabilir. Bu bağıntıları dL nin ifâdesinde yerlerine yazarak

$$dL = \sum_i (\dot{p}_i\, dq_i + p_i\, d\dot{q}_i) + \frac{\partial L}{\partial t}\, dt$$

bulunur. Bu sonucu da dH nin ifâdesinde yerine yazarak

$$dH = \sum_i (\dot{q}_i\, dp_i + p_i\, d\dot{q}_i - \dot{p}_i\, dq_i - p_i\, d\dot{q}_i) - \frac{\partial L}{\partial t}\, dt$$

veyâ

$$dH = \sum_i (\dot{q}_i\, dp_i - \dot{p}_i\, dq_i) - \frac{\partial L}{\partial t}\, dt \qquad \text{(I.1D.3)}$$

sonucuna varılır. Şimdi de $H = H(p_i, q_i; t)$ nin tam diferansiyelini oluşturalım:

$$dH = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\, dp_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\, dq_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t}\, dt \qquad \text{(I.1D.4)}$$

bulunur. (I.1D.4) ün (I.1D.3) ile karşılaştırılmasından

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i, \qquad (i = 1, 2, 3) \qquad \text{(I.1D.5)}$$

sonuçları ve ayrıca âşikâr olan (I.1D.2) bağıntısı elde edilir. (I.1D.5) bağıntılarına *HAMİLTON denklemleri* veyâ *kanonik hareket denklemleri* adı verilir. p_i ve q_i bağımsız değişkenlerine biribirlerine *kanonik eşlenik dinamik değişkenler* adı verilir. Kanonik eşlenik değişkenlerin boyutlarının çarpımı aksiyon boyutundadır. Böylece, meselâ, enerji ve zaman kanonik eşlenik dinamik değişkenlerdir. Benzer şekilde, açısal momentum bileşeni ve bu bileşenin ait olduğu eksen etrafındaki dönme açısı gene kanonik eşlenik dinamik değişkenlerdir.

(I.1E.) HAMİLTON - JACOBI DİFERANSİYEL DENKLEMİ

S aksiyon büyüklüğünü veren (I.1C.2) belirli integralinin üst limitini t değişkeni olarak alalım. Böylece

$$S = \int_{t_1}^{t} L(q_i, \dot{q}_i; t)\, dt \qquad \text{(I.1E.1)}$$

yazılabilir. (I.1D.1) bağıntısı kullanılırsa (I.1E.1) bağıntısından hemen

$$\frac{dS}{dt} = L = \sum_{i=1}^{3} p_i \dot{q}_i - H$$

yazılabilir. Bu bağıntının her iki yanı dt ile çarpılırsa

$$dS = \sum_{i=1}^{3} p_i \, dq_i - H \, dt$$

veyâ

$$d S = \mathbf{p} \, . \, d\mathbf{r} - H \, dt \tag{I.1E.2}$$

sonucuna varılır. Bu son bağıntı S aksiyonunun

$$S = S(\mathbf{r}, t) \tag{I.1E.3}$$

şeklinde sâdece **r** yer vektörünün ve t zamanının bir fonksiyonu olduğunu gösterir. Buna göre, aksiyonun tam diferansiyelinin ifâdesi

$$dS = (\nabla S) \, . \, d\mathbf{r} + \frac{\partial S}{\partial t} \, dt \tag{I.1E.4}$$

şeklindedir. (I.1E.2) ve (I.1E.4) bağıntılarının karşılaştırılmasından

$$\nabla S = \mathbf{p}, \quad \frac{\partial S}{\partial t} = - H \tag{I.1E.5}$$

sonuçlarına varılır. Buna göre

$$H = H(\mathbf{p}, \mathbf{r} \, ; t) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}, t) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t)$$

bağıntısı

$$H = H(\nabla S, \mathbf{r}; t) = \frac{1}{2m} \, | \, \nabla S \, |^2 + V(\mathbf{r}, t)$$

şeklinde yazılabilir. Öte yandan, (I.1E.5) bağıntılarından ikincisi

$$H(\nabla S, \mathbf{r}; t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{I.1E.6}$$

veyâ

$$\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{I.1E.7}$$

şeklinde yazılabilir. Bu kısmî türevli diferansiyel denkleme *HAMİLTON-JACOBİ diferansiyel denklemi* adı verilir.

(I.1F) HAMİLTON - JACOBİ TEORİSİNE GÖRE DALGA DENKLEMİ

HAMİLTON - JACOBİ teorisine göre bir aksiyon dalgasının yüzeyi, yâni *dalga cephesi*

$$S(\mathbf{r}, t) = C = \text{sâbit} \tag{I.1F.1}$$

veyâ

$$dS = (\nabla S) \, . \, d\mathbf{r} + \frac{\partial S}{\partial t} \, dt = 0 \tag{I.1F.2}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Aksiyon dalgasının yüzeyi zamanla değişir, yâni hareket eder. Bu da aksiyon dalgasının uzayda yayılması demektir. Belirli bir $t = t_0$ ânında aksiyon dalgasının yüzeyi

$$S(\mathbf{r}, t_0) = C \tag{I.1F.3}$$

veyâ

$$f(\mathbf{r}) = C_0 = \text{sâbit} \tag{I.1F.4}$$

bağıntısı ile belirlidir. Bu yüzeyin herhangi bir noktasındaki normal birim vektörü de

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla f}{|\nabla f|} = \frac{\nabla S}{|\nabla S|} \tag{I.1F.5}$$

bağıntısı ile belirlidir. (I.1F.4) bağıntısından

$$d_1 f = (\nabla f) \, . \, d_1 \mathbf{r} = 0 \tag{I.1F.6}$$

elde edilir. Burada $d_1 \mathbf{r}$ vektörü (I.1F.4) yüzeyinin herhangi bir noktasındaki teğet düzlemi içindeki keyfî teğet vektörlerinden biridir ve (I.1F.6) bağıntısı $d_1 \mathbf{r}$ teğet vektörünün söz konusu noktadaki ∇f normal vektörüne dik olduğunu göstermektedir. (I.1F.6) bağıntısı (I.1F.5) bağıntısının yardımı ile

$$d_1 S = (\nabla S) \, . \, d_1 \mathbf{r} = 0 \tag{I.1F.7}$$

şeklinde yazılabilir. (I.1F.7) bağıntısı (I.1F.2) bağıntısı ile karşılaştırılırsa $dS = d_1 S$ olabilmesi için

$$d\mathbf{r} = d_1 \mathbf{r} \quad \text{ve} \quad \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

olmasının gerektiği görülür. O hâlde, dalga yüzeyi uzayda yayılmıyorsa $d\mathbf{r}$ vektörü $d_1 \mathbf{r}$ teğet vektörüne çakışır. Genel hâlde, yâni dalga yüzeyi uzayda yayılırken

$$\frac{\partial S}{\partial t} \neq 0 \quad \text{için} \quad d\mathbf{r} \neq d_1 \mathbf{r}$$

olmalıdır. S aksiyon dalgasının yayılma hızı

$$\mathbf{u} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \tag{I.1F.8}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Böylece (I.1F.2) bağıntısından

$$(\nabla S) \,.\, \mathbf{u} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{I.1F.9}$$

sonucuna varılır. $\mathbf{u}$ doğrultusu ve yönündeki birim vektör

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{u}}{u} \tag{I.1F.10}$$

bağıntısı ile belirlidir. Aksiyon dalgası yüzeyinin herhangi bir noktasında, dalganın $\mathbf{q}$ yayılma doğrultusu ile $\mathbf{n}$ yüzey normali arasındaki açı $\alpha = \sphericalangle(\mathbf{q}, \mathbf{n})$ olsun. O hâlde,

$$\mathbf{q} \,.\, \mathbf{n} = \cos\alpha \tag{I.1F.11}$$

sonucuna varılır. Dalga yüzeyinin söz konusu noktasındaki $d_1 \mathbf{r}$ teğet vektörünün doğrultu ve yönündeki birim vektör $\mathbf{T}$ olsun. O hâlde,

$$\mathbf{q} = \mathbf{T}\sin\alpha + \mathbf{n}\cos\alpha \tag{I.1F.12}$$

yazılabilir. (I.1F.5), (I.1F.10) ve (1.F.I.11) bağıntılarını kullanarak

$$(\nabla S) \,.\, \mathbf{u} = |\nabla S|\, u \cos\alpha \tag{I.1F.13}$$

bulunur. Bu sonuç (I.1F.9) bağıntısında yerine yazılırsa aksiyon dalgasının yayılma hızının genel ifâdesini veren

$$u = \frac{-\dfrac{\partial S}{\partial t}}{|\nabla S| \cos\alpha} \tag{I.1F.14}$$

bağıntısı elde edilir. Bu bağıntı, her iki yanın karesini alarak

$$|\nabla S|^2 = \frac{1}{u^2 \cos^2\alpha} \left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2 \tag{I.1F.15}$$

şeklinde de yazılabilir. Ayrıca, (I.1E.5) bağıntılarını (I.1F.14) bağıntısında yerine yazarak

$$u = \frac{H}{p\cos\alpha} \tag{I.1F.16}$$

veyâ $\nabla S = \mathbf{p} = m\mathbf{v}$ ve $\alpha = \sphericalangle(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ olduğunu hatırlayarak

$$H = m\,\mathbf{u} \,.\, \mathbf{v} = m\,u\,v\cos\alpha \tag{I.1F.17}$$

bağıntıları elde edilir.

$\nabla S = m\mathbf{v}$ bağıntısı noktasal parçacığın $\mathbf{v}$ hızının dalga cephesine dik olduğuuu göstermektedir. Şimdi S aksiyon dalgasının $\mathbf{u}$ yayılma hızının da dalga cephesine dik olduğunu farz edelim. O hâlde $\alpha = 0$ olur ve (I.1F.10) bağıntısı ile tanımlanan $\mathbf{q}$ birim vektörünü veren (I.1F.12) bağıntısı

$$\frac{\mathbf{u}}{u} = \mathbf{q} = \mathbf{n} \qquad \text{(I.1F.18)}$$

şeklini alır. Ayrıca, (I.1F.15) bağıntısı da

$$|\nabla S|^2 = \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2 \qquad \text{(I.1F.19)}$$

şeklini alır. Bu bağıntı S aksiyon dalgasının yayılma kanununu verir ve *HAMİLTON dalga denklemi* adını alır. Öte yandan, $\alpha = 0$ için S aksiyon dalgasının yayılma hızının ifâdesini veren (I.1F.16) bağıntısı da

$$u = \frac{H}{p} \qquad \text{(I.1F.20)}$$

şeklini alır.

Şimdi de $\frac{\partial V}{\partial t} = 0$ özel hâli için u yayılma hızını hesaplayalım. (I.1B.6) bağıntısına göre

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = E = \text{sâbit} \qquad \text{(I.1F.21)}$$

yazılabilir. Bu bağıntı yardımı ile (I.1F.20) bağıntısı

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m\,(E - V)}} \qquad \text{(I.1F.22)}$$

sonucunu verir. O hâlde, $V(\mathbf{r})$ potansiyel enerjisine sâhip noktasal bir parçacığa ait S aksiyon dalgasının yayılma hızı parçacığın yer vektörünün bir fonksiyonudur. Eğer parçacığın potansiyel enerjisi sıfırsa, yâni parçacık bir *serbest parçacık* ise, bu parçacığa ait S aksiyon dalgasının yayılma hızı sâbittir. Bu takdirde, serbest parçacığın kendi hızının da $\mathbf{v}$ = sâbit olduğu (I.1B.1) bağıntısından âşikâr olarak görülebilir.

(I.2) KLÂSİK MEKANİĞİN YETERSİZLİĞİ

Klâsik mekanik, veyâ daha genel olarak klâsik teorik fizik, gerek yeryüzündeki günlük hayatta karşılaşılan, gerekse dünya dışındaki Evrende olagelen makroskopik alandaki fiziksel olayların büyük bir çoğunluğunu açıklayabilir. Fakat atom fiziğindeki ve özellikle temel parçacıkların söz konusu olduğu mikroskopik alandaki fiziksel olayları klâsik mekanik hemen hemen hiç açıklayamaz.

Klâsik mekaniğin ve klâsik optiğin yetersiz kaldığı ve kuvantum mekaniğinin büyük bir başarı ile uygulanabildiği mikroskopik alandaki geniş fiziksel olaylar topluluğu, iki temel kavram bakımından klâsik fiziğe uymazlar :

i) Klâsik fizikte dalga özelliğine sâhip olduğu bilinen ışık parçacık özelliğine de sâhiptir.

ii) Klâsik fizikte parçacık özelliğine sâhip olduğu bilinen temel parçacıklar dalga özelliğine de sâhiptirler.

Bu kavramlardan birincisi 1900 yılında MAX PLANCK ın kara cismin radyasyon spektrumunu açıklamak üzere yaptığı varsayıma dayanır. PLANCK elektromagnetik radyasyonun kesikli (yâni süreksiz) enerji kuvantumları şeklinde yutulup yayınlanabileceğini kabul etmiştir. Bu enerji kuvantumlarının her birinin E büyüklüğü radyasyonun ν frekansının *PLANCK sâbiti* adı verilen bir h evrensel sâbiti ile çarpılması ile bulunur :

$$E = h\nu \qquad \text{(I.2.1)}$$

Bu varsayım daha sonra 1905 te EİNSTEİN tarafından fotoelektrik olayın açıklanması için kullanılmıştır. Böylece, ışığın *foton* adı verilen ve $h\nu$ enerjisine sâhip parçacıklar gibi davrandığı anlaşılmıştır. Daha sonra COMPTON olayının açıklanması da $h\nu$ enerjisine sâhip bir fotonun

$$p = \frac{h\nu}{c} \qquad \text{(I.2.2)}$$

momentumuna sâhip olduğunu ortaya koymuştur. **p** momentum vektörünün doğrultu ve yönü ışık dalgasının yayılma doğrultusu ve yönündedir. Işığın λ dalga boyu ν frekansına $\lambda\nu = c$ bağıntısı ile bağlıdır. Burada c ışığın hızıdır. Böylece, (I.2.2) bağıntısı

$$p = \frac{h}{\lambda} \qquad \text{(I.2.2a)}$$

şeklinde de yazılabilir.

Yukarda söz konusu edilen ikinci kavram ise, DE BROGLİE nin 1924 te yaptığı varsayıma dayanır. DE BROGLİE serbest hareket eden, yâni potansiyel enerjisi sıfır olan temel parçacıkların her birine birer dalganın eşlik ettiğini varsayarak, LORENTZ koordinat dönüşümü yardımı ile $p = mv$ momentumuna sâhip bir parçacığa eşlik eden dalganın dalga boyunun

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \qquad \text{(I.2.3)}$$

bağıntısı ile belirlendiğini bulmuştur. Bu bağıntıya DE BROGLİE formülü adı verilir. Şüphesiz (I.2.2a) bağıntısı (I.2.3) bağıntısının özel bir hâlidir, yâni foton için yazılmış DE BROGLİE formülüdür. Daha sonra elektronların ve nötronların tıpkı X ışınları gibi kristâl şebekeleri yardımı ile difraksiyona uğradıkları ve λ dalga boyları (I.2.3) bağıntısı ile hesaplanmak üzere θ difraksiyon açısının

$$n\lambda = 2d \sin\theta \tag{I.2.4}$$

BRAGG formülüne uyduğu deneysel olarak ispatlanmıştır.

(I.3) PLANCK VARSAYIMININ VE DE BROGLİE FORMÜLÜNÜN HAMİLTON DALGA DENKLEMİ ARACILIĞI İLE ELDE EDİLMESİ

(I.1F.19) bağıntısı ile verilen

$$(\nabla S)^2 = \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2 \tag{I.3.1}$$

HAMİLTON dalga denkleminin $\nabla S = m\mathbf{v}$ momentumuna sâhip bir noktasal parçacığa eşlik eden S aksiyon dalgasının yayılma kanununu belirlediğini görmüştük. O hâlde, S aksiyon dalgasının u hızı ile yayılan ve

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \tag{I.3.2}$$

genel dalga denklemi ile belirlenen bir ψ dalgası ile yakından ilgisi olması gerekir. Bilindiği gibi, $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$ dalga fonksiyonu $\Phi = \Phi(\mathbf{r}, t)$ faz fonksiyonuna

$$\psi = A\, e^{i\Phi} \tag{I.3.3}$$

bağıntısı ile bağlıdır. Burada A dalganın genliği olup sâbit bir büyüklüktür.

Şimdi (I.3.2) dalga denklemini Φ faz fonksiyonu cinsinden yazalım. Gerekli türev alma işlemlerini kısa yoldan yapabilmek için (I.3.3) bağıntısının her iki yanının e tabanına göre logaritmasını alalım :

$$ln\, \psi = ln\, A + i\,\Phi \tag{I.3.4}$$

elde edilir. Bu bağıntının her iki yanının t ye göre kısmî türevini alalım :

$$\frac{1}{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t} = i\frac{\partial\Phi}{\partial t} \tag{I.3.5}$$

bulunur. (I.3.5) bağıntısının tekrar t ye göre kısmî türevi alınırsa

$$\frac{1}{\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \frac{1}{\psi^2}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^2 = i\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}$$

bağıntısı ve (I.3.5) bağıntısının her iki yanının karesi alınırsa

$$\frac{1}{\psi^2}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^2 = -\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2$$

bağıntısı bulunur. Son iki bağıntı taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{1}{\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = i\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} - \left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2 \tag{I.3.6}$$

sonucuna varılır. Şimdi de (I.3.4) bağıntısının her iki yanının gradyanını alalım :

$$\frac{1}{\psi}\nabla\psi = i\,\nabla\Phi \tag{I.3.7}$$

bulunur. (I.3.7) bağıntısının her iki yanının diverjansı alınırsa

$$\nabla\cdot\left(\frac{1}{\psi}\nabla\psi\right) = i\,\nabla^2\Phi$$

veyâ

$$\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi - \frac{1}{\psi^2}(\nabla\psi)^2 = i\,\nabla^2\Phi$$

elde edilir. (I.3.7) bağıntısının her iki yanının skaler karesi alınırsa

$$\frac{1}{\psi^2}(\nabla\psi)^2 = -(\nabla\Phi)^2$$

bulunur. Son iki bağıntı taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi = i\,\nabla^2\Phi - (\nabla\Phi)^2 \tag{I.3.8}$$

sonucuna varılır. Eğer (I.3.2) bağıntısı

$$\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi = \frac{1}{u^2}\frac{1}{\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$$

şeklinde yazılır ve (I.3.6) ve (I.3.8) bağıntıları bu bağıntıda yerlerine yazılırsa

$$i\,\nabla^2\Phi - (\nabla\Phi)^2 = \frac{1}{u^2}\left[i\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} - \left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2\right]$$

veyâ

$$(\nabla\Phi)^2 - \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2 = i\left[\nabla^2\Phi - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}\right] \tag{I.3.9}$$

sonucuna varılır. Belirli bir anda eş fazlı noktaların geometrik yerine ψ dalgasının *dalga yüzeyi* adı verilir.

DE BROGLİE dalgaları bir serbest parçacığa, yâni potansiyel enerjisi sıfır olan bir parçacığa eşlik eden dalgalardır. Bir serbest parçacık için faz fonksiyonunun ifâdesi ise

$$\Phi = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t \qquad (1.3.10)$$

şeklindedir. Şüphesiz bir DE BROGLİE dalgası için Φ = sâbit dalga yüzeyi bir düzlemdir. (I.3.10) bağıntısında $\mathbf{k}$ *dalga sayısı vektörü* ve ω *açısal frekans*tır. Bu büyüklükler dalganın λ *dalga boyu*na ve ν *frekansı*na

$$|\mathbf{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda}, \qquad \omega = 2\pi\nu \qquad (I.3.11)$$

bağıntıları ile bağlıdır. Bilindiği gibi λ dalga boyu, ν frekansı ve u yayılma hızı arasında

$$\lambda\nu = u \qquad (I.3.12)$$

bağıntısı vardır. $\mathbf{k}$ ve ω büyüklükleri sâbit büyüklükler olduğuna göre (I.3.10) bağıntısından

$$\nabla\Phi = \mathbf{k}, \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial t} = -\omega$$

ve böylece

$$\nabla^2\Phi = 0, \qquad \frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} = 0$$

bulunur. O hâlde, bir DE BROGLİE dalgası için (1.3.9) dalga denklemi

$$(\nabla\Phi)^2 - \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2 = 0 \qquad (I.3.13)$$

şeklini alır. Şimdi (I.3.1) aksiyon dalgası denklemi ile (I.3.13) DE BROGLIE dalgası denklemini karşılaştıralım :

$$\left.\begin{aligned} (\nabla S)^2 &= \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2 \\ (\nabla\Phi)^2 &= \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2 \end{aligned}\right\} \qquad (I.3.14)$$

Görülüyor ki S aksiyon fonksiyonu ve Φ faz fonksiyonu aynı dalga denklemini sağlarlar. O hâlde, bu iki fonksiyon orantılı olmalıdır, yâni $\hbar$ bir sâbit orantı katsayısı olmak üzere

$$S = \hbar\Phi \qquad (I.3.15)$$

bağıntısı gerçeklenmelidir. Aksiyon boyutunda olan $\hbar$ sâbitinin değeri aşağıda tâyin edilecektir.

(I.1B.6) bağıntısının yardımı ile (I.1E.2) bağıntısından aksiyon fonksiyonunun dS diferansiyelini ve (I.3.10) bağıntısından faz fonksiyonunun $d\Phi$ diferansiyelini alt alta yazalım :

$$\left.\begin{aligned} dS &= \mathbf{p}\,.\,d\mathbf{r} - E\,dt \\ d\Phi &= \mathbf{k}\,.\,d\mathbf{r} - \omega\,dt \end{aligned}\right\} \tag{I.3.16}$$

(I.3.15) bağıntısına göre

$$dS = \hbar\, d\Phi$$

olması gerektiğinden

$$\mathbf{p} = \hbar\,\mathbf{k}, \qquad E = \hbar\omega \tag{I.3.17}$$

bağıntıları bulunur. (I.3.11) bağıntılarından yararlanarak (I.3.17) bağıntılarından

$$|\,\mathbf{p}\,| = p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}, \qquad E = 2\pi\hbar\nu \tag{I.3.18}$$

sonuçlarına varılır. Bu bağıntılar, (I.2.3) DE BROGLIE formülünü ve (I.2.1) PLANCK varsayımını veren bağıntılardır :

$$\lambda = \frac{h}{p}, \qquad E = h\nu \tag{I.3.19}$$

(I.3.18) ve (I.3.19) bağıntılarının karşılaştırılmasından $\hbar$ sâbitinin değeri

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \tag{I.3.20}$$

şeklinde PLANCK sâbiti cinsinden elde edilir.

DE BROGLIE dalgasının (I.3.10) bağıntısı ile verilen faz fonksiyonu, bu dalgaya ait (I.3.13) bağıntısı ile verilen faz dalgası denklemini özdeş olarak sağlamalıdır. O hâlde,

$$\nabla\Phi = \mathbf{k}, \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial t} = -\,\omega$$

bağıntılarını yerlerine yazarak

$$k^2 - \frac{\omega^2}{u^2} = 0$$

veyâ

$$\frac{\omega}{k} = u \tag{I.3.21}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (I.3.11) bağıntıları taraf tarafa oranlanırsa (I.3.12) bağıntısı yardımı ile

$$\frac{\omega}{k} = \lambda\nu = u,$$

yâni (I.3.21) bağıntısı tekrar bulunur.

(I.4) SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİ

Bir önceki paragrafta HAMİLTON veyâ DE BROGLİE dalga denklemlerinin PLANCK ve DE BROGLİE bağıntıları ile uyum içinde olduğu görüldü. Fakat bu dalga denklemleri ancak potansiyel enerjisi sıfır olan *serbest bir parçacık* için geçerlidir. Klâsik mekaniğin geçerli olduğu makroskopik alandaki fiziksel olaylarda olduğu gibi kuvantum mekaniğinin geçerli olduğu mikroskopik alandaki fiziksel olayların çoğunda, örneğin atom fiziğinde, parçacıkların potansiyel enerjileri sıfırdan farklıdır. O hâlde, serbest olmayan parçacıklar için, yâni genel hâlde HAMİLTON dalga denklemi yetersizdir.

Aksiyon fonksiyonunun sağladığı denklem,

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \tag{I.4.1}$$

şeklindeki genel dalga denklemine

$$\psi = A\, e^{i S/\hbar} \tag{I.4.2}$$

dönüşümü uygulandıktan sonra elde edilen

$$(\nabla S)^2 = \frac{1}{u^2} \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right)^2 \tag{I.4.3}$$

şeklindeki HAMİLTON dalga denklemidir. Öte yandan, parçacığın potansiyel enerjisini hesaba katması bakımından (I.1E.7) bağıntısı ile verilen

$$\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{I.4.4}$$

şeklindeki HAMİLTON - JACOBİ diferansiyel denklemi çok daha elverişlidir. Fakat bu denklemin mikroskopik alanda, meselâ atom fiziğinde geçersiz olduğunu biliyoruz. O hâlde, (I.4.4) denklemi mikroskopik alanda geçerli olacak şekilde genelleştirilmelidir. Bu genelleştirmenin önce bir serbest parçacık için yapılması daha kolaydır.

Potansiyel enerjisi sıfır olan bir serbest parçacık için HAMİLTON - JACOBİ diferansiyel denklemi

$$(\nabla S)^2 = -2m \frac{\partial S}{\partial t} \tag{I.4.5}$$

şeklinde yazılabilir. Bu denklemdeki $\partial S/\partial t$ kısmî türevi yerine (I.4.3) denkleminde bu türevin karesi yer almaktadır. (I.4.3) ve (I.4.5) denklemleri arasındaki bu fark (I.4.1) dalga denkleminde zamana göre ikinci mertebeden $\partial^2 \psi/\partial t^2$ türevinin bulunmasından ötürüdür. O hâlde, (I.4.1) dalga denklemi yerine zamana göre birinci mertebeden türev ihtiva eden

$$\nabla^2 \psi = -i\alpha \frac{\partial \psi}{\partial t} \tag{I.4.6}$$

şeklindeki bir dalga denklemi kabul edilmelidir. Buradaki α sâbiti aşağıda tâyin edilecektir. Şimdi (I.4.6) denklemine (I.3.3) dönüşümünü uygulayalım. Eğer (I.4.6) bağıntısı

$$\frac{1}{\psi}\nabla^2 \psi = -i\alpha \frac{1}{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial t}$$

şeklinde yazılır ve (I.3.5) ve (I.3.8) bağıntıları bu son bağıntıda yerlerine yazılırsa

$$i\nabla^2 \Phi - (\nabla\Phi)^2 = -i\alpha i \frac{\partial \Phi}{\partial t}$$

veyâ

$$(\nabla\Phi)^2 = -\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial t} + i\nabla^2 \Phi \tag{I.4.7}$$

sonucuna varılır. Burada Φ bir serbest parçacığa ait DE BROGLİE dalgasının faz fonksiyonu olduğundan

$$\Phi = \mathbf{k}\,.\,\mathbf{r} - \omega t \tag{I.4.8}$$

bağıntısı ile belirlidir. O hâlde,

$$\nabla\Phi = \mathbf{k}\,, \qquad \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\omega \tag{I.4.9}$$

ve böylece

$$\nabla^2 \Phi = 0$$

elde edilir ve (I.4.7) denklemi de

$$(\nabla\Phi)^2 = -\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial t} \tag{I.4.10}$$

şeklini alır. Görülüyor ki S aksiyon fonksiyonunun sağladığı (I.4.5) denklemi, Φ faz fonksiyonunun sağladığı (I.4.10) denkleminin aynıdır. O hâlde, bu iki fonksiyon orantılı olmalıdır, yâni

$$S = \hbar\,\Phi \tag{I.4.11}$$

şeklindeki (I.3.15) bağıntısı gene gerçeklenmelidir. (I.4.10) bağıntısında $\Phi = S/\hbar$ yazılırsa

$$\frac{1}{\hbar^2}(\nabla S)^2 = -\frac{\alpha}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}$$

veyâ

$$(\nabla S)^2 = -\alpha\hbar\frac{\partial S}{\partial t} \tag{I.4.12}$$

bulunur. (I.4.12) denklemi (I.4.5) denklemi ile karşılaştırılırsa $\alpha\hbar = 2m$ veyâ

$$\alpha = \frac{2m}{\hbar} \tag{I.4.13}$$

bulunur ve (I.4.6) dalga denklemi de

$$\nabla^2\psi = -i\frac{2m}{\hbar}\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{I.4.14}$$

şeklini alır. (I.4.14) denklemi, her iki yanının $-\hbar^2/2m$ ile çarpılması ve ψ ile bölünmesi ile

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi = \frac{i\hbar}{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{I.4.15}$$

şeklinde de yazılabilir.

DE BROGLİE dalgasının (I.4.8) bağıntısı ile verilen faz fonksiyonu, bu dalganın fazını veren

$$(\nabla\Phi)^2 = -\frac{2m}{\hbar}\frac{\partial\Phi}{\partial t} \tag{I.4.16}$$

denklemini özdeş olarak sağlamalıdır. O hâlde, (I.4.9) bağıntılarını yerlerine yazarak

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

bulunur. Bu bağıntının her iki yanını $\hbar^2/2m$ ile çarparak

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{I.4.17}$$

elde edilir. Serbest parçıcık için

$$E = T = \frac{p^2}{2m}$$

bağıntısının gerçeklendiğini biliyoruz. Serbest parçıcık için $p = \hbar k$ DE BROGLİE bağıntısı da gerçeklendiğinden (I.4.17) bağıntısı

$$\hbar\omega = \frac{p^2}{2m} = E$$

sonucunu verir ve bu da PLANCK varsayımıdır.

Şimdi (I.4.2) bağıntısınının her iki yanının e tabanına göre logaritmasını alalım :

$$\ln \psi = \ln A + \frac{i\,S}{\hbar} \tag{I.4.18}$$

elde edilir. Bu bağıntının her iki yanının t ye göre kısmî türevini alalım :

$$\frac{1}{\psi}\,\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\,\frac{\partial S}{\partial t}$$

veyâ

$$\frac{i\,\hbar}{\psi}\,\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\,\frac{\partial S}{\partial t} \tag{I.4.19}$$

bulunur. Şimdi de (I.4.18) bağıntısının her iki yanının gradyanını alalım :

$$\frac{1}{\psi}\,\nabla\psi = \frac{i}{\hbar}\,\nabla S \tag{I.4.20}$$

bulunur. (I.4.20) bağıntısının her iki yanının diverjansı alınırsa

$$\frac{1}{\psi}\,\nabla^2\,\psi - \frac{1}{\psi^2}\,(\nabla\psi)^2 = \frac{i}{\hbar}\,\nabla^2\,S$$

elde edilir. (I.4.20) bağıntısının her iki yanının skaler karesi alınırsa

$$\frac{1}{\psi^2}\,(\nabla\psi)^2 = -\,\frac{1}{\hbar^2}\,(\nabla S)^2$$

bulunur. Son iki bağıntı taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{1}{\psi}\,\nabla^2\,\psi = \frac{i}{\hbar}\,\nabla^2\,S - \frac{1}{\hbar^2}\,(\nabla S)^2 \tag{I.4.21}$$

sonucuna varılır.

(I.4.4) ile verilen HAMİLTON - JACOBİ diferansiyel denklemi

$$\frac{1}{2m}\,(\nabla S)^2 = -\,\frac{\partial S}{\partial t} - V \tag{I.4.22}$$

şeklinde yazılabilir. Serbest bir parçacık için bu denklem

$$\frac{1}{2m}\,(\nabla S)^2 = -\,\frac{\partial S}{\partial t} \tag{I.4.23}$$

şeklini alır. Öte yandan, serbest bir parçıcık için elde ettiğimiz (I.4.15) denkleminde (I.4.19) ve (I.4.21) bağıntıları yerlerine yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{i}{\hbar}\nabla^2 S - \frac{1}{\hbar^2}(\nabla S)^2\right] = -\frac{\partial S}{\partial t}$$

veyâ

$$-\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 = -\frac{\partial S}{\partial t} \tag{I.4.24}$$

sonucuna varılır. Serbest bir parçacık için (I.4.11) bağıntısına bakarak

$$\nabla^2 S = \hbar\,\nabla^2 \Phi = 0$$

olduğunu biliyoruz. O hâlde, serbest bir parçacık için yazılmış klâsik mekaniğe ait (I.4.23) denklemi ve kuvantum mekaniğine ait (I.4.24) denklemi biribirlerinin aynıdır. Öte yandan, klâsik mekanikte serbest parçacık için yazılmış (I.4.23) denkleminden serbest olmayan bir parçacık için yazılmış (I.4.22) denklemine, öncekinin sağ yanına $-V$ terimini ekleyerek geçildiğini görüyoruz. Benzer şekilde, kuvantum mekaniğinde serbest parçacık için yazılmış (I.4.24) denkleminden serbest olmayan parçacık için yazılmış denkleme gene sağ yana $-V$ terimini ekleyerek geçilebilir. Fakat serbest olmayan bir parçacık için

$$\nabla^2 S \neq 0$$

olduğuna dikkat edilmelidir. O hâlde, kuvantum mekaniğinde serbest olmayan bir parçacık için yazılmış olan S aksiyon dalgasının denklemi

$$-\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 = -\frac{\partial S}{\partial t} - V \tag{I.4.25}$$

şeklindedir Benzer şekilde, (I.4.24) denkleminin elde edildiği ve serbest bir parçacık için ψ dalga fonksiyonunu veren (I.4.15) denkleminin sağ yanına $-V$ terimi eklenirse

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi = \frac{i\hbar}{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t} - V \tag{I.4.26}$$

sonucuna varılır. (I.4.26) denklemi, kuvantum mekaniğinde serbest olmayan bir parçacık için ψ dalga fonksiyonunu veren *SCHRÖDİNGER dalga denklemi*dir. Şüphesiz bu denkleme (I.4.2) dönüşümü uygulanırsa, (I.4.19) ve (I.4.21) bağıntılarını (I.4.26) da yerlerine yazarak (I.4.25) bağıntısı tekrar bulunabilir.

(I.4.25) bağıntısı

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S \tag{I.4.27}$$

şeklinde yazılabilir ve HAMİLTON - JACOBİ denkleminin kuvantum mekaniğindeki genelleştirilmiş şeklinin ifâdesidir. Klâsik mekanikteki (I.4.4) HAMİLTON - JACOBİ denklemi bu bağıntıdan farklı olduğu için S yerine S_0 koyarak

$$\frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2 + V(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial S_0}{\partial t} = 0 \qquad (I.4.4)$$

şeklinde yazılmalıdır. Kuvantum mekaniğinden klâsik mekaniğe, yâni (I.4.27) denkleminden (I.4.4) denklemine iki farklı yoldan geçiş yapılabilir. Birincisi $\hbar$ PLANCK sâbitini sıfır yaparak elde edilen geçiştir ve böylece

$$\lim_{\hbar \to 0} S = S_0 \qquad (I.4.28)$$

yazılabilir. Şüphesiz bu geçiş mikroskopik alandan makroskopik alana geçişi ifâde eder. Öbürü ise V potansiyel enerjisini sıfır yaparak elde edilen geçiştir ve serbest parçacığa ait olan bu geçiş $\nabla^2 S_0 = 0$ şartını da birlikte getirir. Şüphesiz bu geçiş mikroskopik alanda devam eder. (I.4.26) SCHRÖDİNGER dalga denklemi çok kere

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}, t)\,\psi \qquad (I.4.29)$$

alışılmış şeklinde yazılır.

(I.5) DALGA FONKSİYONUNUN YORUMU

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (I.5.1)$$

şeklindeki SCHRÖDİNGER dalga denkleminde ψ dalga fonksiyonunun yorumlanması gerekir. Bu maksatla (I.5.1) denkleminin her iki yanını $i\hbar$ ile bölerek

$$-\frac{\hbar}{2mi}\nabla^2 \psi + \frac{V}{i\hbar}\psi = \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (I.5.2)$$

bulunur. Bu denklemin her iki yanının kompleks eşleniği alınırsa

$$\frac{\hbar}{2mi}\nabla^2 \psi^* - \frac{V}{i\hbar}\psi^* = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \qquad (I.5.3)$$

elde edilir. Burada ψ^*, ψ fonksiyonunun kompleks eşleniğini göstermektedir. (I.5.2) bağıntısının her iki yanını ψ^* ile ve (I.5.3) bağıntısının her iki yanını da ψ ile çarpalım :

$$-\frac{\hbar}{2mi}\psi^*\nabla^2 \psi + \frac{V}{i\hbar}\psi^*\psi = \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (I.5.2a)$$

ve

$$\frac{\hbar}{2mi}\psi\nabla^2\psi^* - \frac{V}{i\hbar}\psi^*\psi = \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \qquad \text{(I.5.3a)}$$

elde edilir. Bu son iki bağıntıyı taraf tarafa toplayarak

$$-\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*) = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$$

veyâ

$$\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*) + \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = 0 \qquad \text{(I.5.4)}$$

sonucuna varılır.

Öte yandan,

$$\nabla\,.\,(\psi\mathbf{A}) = \psi\nabla\,.\,\mathbf{A} + \mathbf{A}\,.\,\nabla\psi$$

vektörel özdeşliğinde

$$\mathbf{A} = \nabla\psi^*$$

yazılırsa

$$\nabla\,.\,\mathbf{A} = \nabla\,.\,(\nabla\psi^*) = \nabla^2\psi^*$$

olacağından

$$\nabla\,.\,(\psi\nabla\psi^*) = \psi\nabla^2\psi^* + (\nabla\psi^*)\,.\,(\nabla\psi)$$

özdeşliği elde edilir. Şimdi bu özdeşliğin her iki yanının kompleks eşleniğini alalım:

$$\nabla\,.\,(\psi^*\nabla\psi) = \psi^*\nabla^2\psi + (\nabla\psi^*)\,.\,(\nabla\psi)$$

elde edilir. Eğer son iki bağıntı taraf tarafa çıkarılırsa

$$\nabla\,.\,(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = \psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^* \qquad \text{(I.5.5)}$$

özdeşliği bulunur.

(I.5.5) özdeşliğinin yardımı ile (I.5.4) bağıntısı

$$\frac{\hbar}{2mi}\nabla\,.\,(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) + \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = 0 \qquad \text{(I.5.6)}$$

şeklini alır. Bu son bağıntı, elektrodinamikte yükün korunumunu veyâ hidrodinamikte kütlenin korunumunu veren

$$\nabla\,.\,(\mu\mathbf{v}) + \frac{\partial\mu}{\partial t} = 0 \qquad \text{(I.5.7)}$$

süreklilik denklemine çok benzemektedir. İşte bu benzerlikten ötürü MAX BORN 1926 da ψ dalga fonksiyonunun yorumunu veren aşağıdaki hipotezi yaptı :

$$\psi^* (\mathbf{r}, t)\, \psi(\mathbf{r}, t)\, d\tau = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau$$

büyüklüğü, bir parçacığın t ânında $\mathbf{r}$ noktası civarındaki bir $d\tau$ hacım elemanı içerisinde bulunma ihtimâlini verir. O h;âlde,

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \tag{I.5.8}$$

fonksiyonu *ihtimal yoğunluğu*nu ifâde etmektedir. Öte yandan,

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla\psi - \psi\nabla \psi^*) \tag{0.5.9}$$

bağıntısı ile *ihtimâl akımı yoğunluğu vektörü* tanımlanırsa (I.5.6) bağıntısı

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial P}{\partial t} = 0 \tag{I.5.10}$$

şeklini alır. Bu son bağıntı (I.5.7) bağıntısı ile karşılaştırılırsa (I.5.10) bağıntısında hidrodinamikteki süreklilik bağıntısında bulunan akışkanın μ kütle yoğunluğu yerine P ihtimâl yoğunluğunun ve akışkanın $\mu\mathbf{v}$ kütle akımı yoğunluğu yerine de $\mathbf{J}$ ihtimâl akımı yoğunluğunun yer aldığı görülür Böylece (I.5.10) bağıntısı *ihtimâlin korunumu*nu ifâde eder.

Şimdi parçacığın kapalı bir S yüzeyi ile sınırlanmış olan sonlu bir V hacminın içerisinde hapsedilmiş olduğunu farz edelim. O hâlde,

$$\int_V P(\mathbf{r}, t)\, d\tau = \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1 \tag{I.5.11}$$

bağıntısı gerçekleşmelidir, çünkü parçacık V hacmının içerisinde hapsedilmiş ise bu hacım içerisinde bulunma ihtimâli 1 dir, yâni kesindir. Bu takdirde, ψ dalga fonksiyonu *sonlu V hacmına göre normlanmıştır* denir. SCHRÖDİNGER denklemi ψ fonksiyonuna göre lineer homogen olduğundan, keyfî bir N sâbiti ile çarpılmış $N\psi$ fonksiyonu da bu denklemin çözümü olur. Bu sebepten, (I.5.11) normlama bağıntısını gerçekleyecek şekilde bir N sâbiti tâyin edilebilir ve bu belirli N sâbitine *normlama sâbiti* adı verilir. Fakat (I.5.11) normlama bağıntısının gerçeklenebilmesi için ψ dalga fonksiyonunun uzayın V bölgesinde sonlu olması ve böylece integralin yakınsak olması gerekir. Ayrıca, normlama integrali zamanla değişmemelidir. Şimdi de normlama integrali bir sonsuz hacım, yâni bütün üç boyutlu uzay üzerinden alınsın. O takdirde (I.5.11) bağıntısı

$$\int P(\mathbf{r}, t)\, d\tau = \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1 \tag{I.5.12}$$

şeklini alır ve ψ dalga fonksiyonu *normlanmış*tır denir. ψ dalga fonksiyonu bütün üç boyutlu uzayda sonlu olsa bile (I.5.12) bağıntısındaki integral ıraksak olabilir. Özellikle

$$\psi = \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \tag{I.5.13}$$

şeklindeki bir DE BROGLİE dalgası için söz konusu integral ıraksaktır. Bu şekildeki fonksiyonların normlama bağıntıları (III.24) ve (III.25) numaralı paragraflarda incelenecektir.

Şimdi parçacığın kapalı bir S yüzeyi ile sınırlanmış olan sonlu bir V hacminın içerisinde bulunduğunu, fakat bu kez hapsedilmemiş olduğunu farz edelim. O hâlde, (I.5.11) normlama bağıntısı artık geçerli değildir ve

$$\int_V P(\mathbf{r}, t)\, d\tau = f(t)$$

integrali zamanın bir fonksiyonudur. Bu integralin zamanla değişimi, (I.5.10) bağıntısını ve GAUSS teoremini kullanarak

$$\frac{d}{dt}\int_V P(\mathbf{r}, t)\, d\tau = \iiint_V \frac{\partial P}{\partial t}\, d\tau = -\iiint_V \nabla \cdot \mathbf{J}\, d\tau = -\iint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\, dS \tag{I.5.14}$$

sonucunu verir. Parçacığın V hacmı içerisinde bulunma ihtimâlinin birim zamandaki azalma miktarı, parçacığın S kapalı yüzeyinden geçerek birim zamanda dışarı çıkma ihtimâline eşittir. O hâlde,

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)\, dS \tag{I.5.15}$$

büyüklüğü, parçacığın t ânında $\mathbf{r}$ noktası civarındaki bir dS yüzey elemanından birim zamanda geçme ihtimâlidir ve böylece

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \tag{I.5.16}$$

fonksiyonu da yüzeyin $\mathbf{n}$ normali doğrultusunda ve yönünde birim yüzeyden birim zamanda parçacığın geçme ihtimâlinin bir ölçüsüdür. $P(\mathbf{r}, t)$ ve $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ her yerde sonlu ve sürekli olmalıdır. Böylece, $\psi(\mathbf{r}, t)$ dalga fonksiyonu ve bu fonksiyonun gradyanı her yerde sonlu, sürekli ve tek değerli olmalıdır.

(I.6) ZAMANA BAĞLI OLMAYAN SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

(I.4.29) bağıntısı ile verilen SCHRÖDİNGER dalga denkleminde V potansiyel enerji fonksiyonu zamana bağlı değilse bu denklem sâdeleşebilir. Çünkü bu takdirde $\Phi(\mathbf{r}, t)$ dalga fonksiyonu için yazılmış olan

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \Phi + V(\mathbf{r})\,\Phi \tag{I.6.1}$$

denkleminin genel çözümü, $\mathbf{r}$ ve t nin ayrı ayrı fonksiyonlarının çarpımlarının bir toplamı olarak yazılabilir. Şimdi (I.6.1) denkleminin

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\, f(t) \tag{I.6.2}$$

şeklindeki bir çarpım olarak yazılabilen bir özel çözümünü düşünelim. Denklemin genel çözümü sonradan bu şeklildeki farklı çözümlerin bir toplamı olarak elde edilebilir. (I.6.2) bağıntısı (I.6.1) denkleminde yerine yazılırsa

$$i\hbar\,\psi\,\frac{df}{dt} = -\,\frac{\hbar^2}{2m}\,f\,\nabla^2\psi + V\psi f$$

bulunur. Bu bağıntının her iki yanı ψf çarpımı ile bölünürse

$$\frac{i\hbar}{f}\,\frac{df}{dt} = -\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{1}{\psi}\,\nabla^2\psi + V(\mathbf{r}) = E \qquad \text{(I.6.3)}$$

elde edilir. (I.6.3) bağıntısının sol yanı sâdece t ye ve sağ yanı da sâdece $\mathbf{r}$ ye bağlı olduğundan, her iki yanın ortak bir E *ayrılma sâbitine* eşit olması gerekir. Şüphesiz bu E ayrılma sâbiti enerji boyutundadır. Böylece, Φ yi veren (I.6.1) denklemi yalnız f yi ve yalnız ψ yi veren iki denkleme ayrılır. $f(t)$ yi veren denklem hemen integre edilebilir ve C keyfî bir sâbit olmak üzere

$$f(t) = C\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$$

bulunur. $\psi(\mathbf{r})$ yi veren öbür denklem

$$-\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\psi + V(\mathbf{r})\,\psi = E\psi \qquad \text{(I.6.4)}$$

şeklinde yazılabilir. Bu denkleme *zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denklemi* adı verilir ve

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\,(E - V)\,\psi = 0 \qquad \text{(I.6.5)}$$

şeklinde de yazılabilir. $f(t)$ nin ifâdesi (I.6.2) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = C\,\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$$

bulunur. (I.6.4) denklemi ψ ye nazaran lineer homogen olduğundan $C\psi$ yerine ψ alınabilir ve

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar} \qquad \text{(I.6.6)}$$

sonucuna varılır. (I.6.6) bağıntısından ihtimâl yoğunluğu hesaplanırsa

$$|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2 = P(\mathbf{r})$$

bulunur. Yâni, eğer potansiyel enerji zamana bağlı değilse ihtimâl yoğunluğu da zamana bağlı değildir. Bu şartı sağlayan (I.6.6) dalga fonksiyonunun bir *duraklı hâli* temsil ettiği söylenir.

(I.7) KUVANTUM MEKANİĞİNDE OPERATÖR FORMALİZMİ

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}, t)\, \psi \qquad \text{(I.7.1)}$$

şeklindeki zamana bağlı genel SCHRÖDİNGER denklemi

$$\nabla \cdot (\nabla \psi) = \nabla^2 \psi$$

vektörel özdeşliğini kullanarak

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi\right) + V(\mathbf{r}, t)\, \psi \qquad \text{(I.7.2)}$$

şeklinde yazılabilir. Şimdi (I.7.2) bağıntısının sağ yanını HAMİLTON fonksiyonunun

$$H = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \qquad \text{(I.7.3)}$$

şeklindeki tanım bağıntısına benzetmeye çalışalım. Eğer *momentum vektör operatörü*

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \qquad \text{(I.7.4)}$$

bağıntısı ile tanımlanırsa

$$\mathbf{p}\psi = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi \qquad \text{(I.7.5)}$$

bulunur. Bu bağıntıya (I.7.4) tanım operatörü taraf tarafa uygulanırsa

$$\mathbf{p}^2 \psi = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}\psi = \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi\right) \qquad \text{(I.7.6)}$$

elde edilir. Bu son bağıntı yardımı ile de

$$\left[\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}{2m} + V(\mathbf{r}, t)\right] \psi = \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi\right) + V(\mathbf{r}, t)\, \psi \qquad \text{(I.7.7)}$$

sonucuna varılır. (I.7.3) ve (I.7.7) bağıntılarının yardımı ile (I.7.2) bağıntısı, yâni *zamana bağlı SCHRÖDİNGER denklemi*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \qquad \text{(I.7.8)}$$

şeklinde yazılabilir.

Kuvantum mekaniğinde *dinamik değişkenler* (I.7.4) bağıntısında olduğu gibi *lineer operatörler* aracılığı ile ifâde edilirler ve her lineer operatör temsil ettiği dinamik değişkenin gösterildiği harf ile gösterilir. III. Bölümde lineer operatörlerin özellikleri genel hâlde incelenecektir. Bu bölümde ise kuvantum mekaniğinde kullanılan operatörlerin özellikleri doğrudan doğruya incelenecektir. Kuvantum mekaniğinde dinamik değişkenleri temsil eden operatörler yâ **r** yer vektörü gibi basit bir *çarpma operatörü*düir, yâ da $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ momentum operatörü gibi bir *diferansiyel operatör*dür. Böylece, klâsik mekanikteki HAMİLTON fonksiyonu kuvantum mekaniğinde *HAMİLTON operatörü*ne dönüşür ve

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \tag{I.7.9}$$

şeklinde yazılabilir. (I.7.9) bağıntısındaki HAMİLTON operatörünün ilk terimi bir diferansiyel operatörüdür ve

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \tag{I.7.10}$$

yazılabildiğinden bu terime *kinetik enerji operatörü* adı verilir. HAMİLTON operatörünün ikinci terimi ise, yer vektörünün ve zamanın bir fonksiyonu olduğundan bir âdi çarpım operatörüdür ve klâsik mekanikteki gibi parçacığın $V(\mathbf{r}, t)$ potansiyel enerjisinden ibarettir. (I.7.10) bağıntısında $\mathbf{p}^2 = p^2$ kısaltması kullanıldı. Burada **p** bir diferansiyel vektör operatör olduğundan modülü, yâni büyüklüğü, tanımlanamaz ve bu sebepten p^2 skaler operatörü **p** vektör operatörünün modülünün karesi demek değildir.

Nasıl ki zamana bağlı SCHRÖDİNGER denkiemi HAMİLTON operatörü aracılğı ile (I.7.8) bağıntısı ile veriliyorsa, benzer şekilde (I.6.4) bağıntısındaki zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denklemi de

$$H\psi = E\psi \tag{I.7.11}$$

bağıntısı ile verilir. (I.7.11) tipindeki bir denkleme *özdeğer denklemi* adı verilir. Buradaki E sâbit sayısına H operatörünün bir *özdeğeri* ve ψ fonksiyonuna da H operatörünün E özdeğerine ait bir *özfonksiyonu* adı verilir. Görülüyor ki, zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denklemi HAMİLTON operatörünün bir özdeğer denklemidir. Böylece, E ayrılma sâbiti HAMİLTON operatörünün bir özdeğeri ve ψ dalga fonksiyonu da bu özdeğere ait bir özfonksiyonudur. Bir önceki paragrafta (I.7.11) denklemindeki ψ fonksiyonunun bir duraklı hâli temsil ettiğini gördük. Öte yandan, (I.7.11) denklemi klâsik mekanikteki enerjinin korunumu ilkesine tekabül eder.

(I.8) OPERATÖRLERİN ÇARPIMI VE KOMÜTATÖRLER

$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ momentum vektör operatörünün

$$p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \tag{I.8.1}$$

şeklindeki üç kartezyen bileşeninin her biri diferansiyel operatördür. Öte yandan, **r** âdi çarpım vektör operatörünün (x, y, z) şeklindeki üç kartezyen bileşeninin her biri de âdi çarpım operatörüdür. Keyfî bir $\psi = \psi(x, y, z, t)$ fonksiyonu yardımı ile x ve p_x operatörlerinin $x p_x$ ve $p_x x$ çarpım operatörleri tanımlanabilir. $x p_x$ çarpım operatörününün ψ fonksiyonuna etkisi

$$x p_x \psi = \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

şeklindedir. $p_x x$ çarpım operatörünün ψ fonksiyonunun üzerindeki etkisi ise

$$p_x x \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \frac{\hbar}{i}\left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi\right)$$

şeklindedir. Burada çarpım sırası değiştiği zaman elde edilen sonucun farklı olduğu görülüyor. Bu iki bağıntı taraf tarafa çıkarılırsa

$$(x p_x - p_x x)\psi = i\hbar\psi \tag{I.8.2}$$

bulunur. $(x p_x - p_x x)$ ifâdesine x ve p_x operatörlerinin *komütatörü* adı verilir ve $[x, p_x]$ ile gösterilir. ψ keyfî olduğu için

$$[x, p_x] \equiv x p_x - p_x x = i\hbar \tag{I.8.3}$$

sonucuna varılır. (I.8.3) bağıntısı **r** ve **p** operatörlerinin ikinci ve üçüncü bileşenleri için de benzer işlemlerle elde edilebilir ve

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar \tag{I.8.4}$$

yazılabilir. Görülüyor ki, momentum vektör operatörünün kartezyen bileşenleri kendilerine karşılık olan kartezyen koordinatlarla komütatif değillerdir. Ancak $\hbar \to 0$ için klâsik mekaniğe geçildiği zaman komütatiflik aksiyomu yeniden yürürlüğe girer. Şimdi de momentum vektör operatörünün kartezyen bileşenlerinin kendilerine karşılık olmayan koordinatlarla çarpımlarını düşünelim. Meselâ $x p_y$ çarpım operatörünün ψ fonksiyonuna etkisi

$$x p_y \psi = \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \psi}{\partial y}$$

şeklindedir. $p_y x$ çarpım operatörünün ψ fonksiyonunun üzerindeki etkisi ise

$$p_y x \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}(x\psi) = \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \psi}{\partial y}$$

şeklindedir. Burada çarpım sırası değişse bile elde edilen sonucun değişmediği görülüyor. Bu iki bağıntı taraf tarafa çıkarılırsa

$$(x p_y - p_y x)\psi = 0 \tag{I.8.5}$$

veyâ

$$[x, p_y] = x p_y - p_y x = 0 \tag{I.8.6}$$

sonucuna varılır. Benzer işlemlerle

$$[x, p_y] = [y, p_x] = [y, p_z] = [z, p_y] = [z, p_x] = [x, p_z] = 0 \tag{I.8.7}$$

sonuçlarına varılır.

Şimdi momentum vektör operatörünün kartezyen bileşenlerinin kendi aralarındaki çarpımlarını düşünelim. Kısmî türev işleminin sırası değişebildiği için

$$p_x p_y \psi = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x\, \partial y} = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y\, \partial x} = p_y p_x \psi$$

yazılabilir. O hâlde, momentum operatörünün p_x, p_y, p_z kartezyen bileşenleri kendi aralarında komütatiftir. Şüphesiz (x, y, z) kartezyen koordinatları da kendi aralarında komütatiftir, çünkü âdi çarpım işlemi komütatiftir.

(I.6.6) bağıntısı, duraklı kuvantum hâllerini temsil eden

$$\psi(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r})\, e^{-i\,Et/\hbar} \tag{I.8.8}$$

şeklindeki bir dalga fonksiyonudur. Öte yandan, zamana göre kısmî türev operatörü aracılığı ile

$$W = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{I.8.9}$$

enerji operatörü tanımlansın. (I.8.8) bağıntısından başlayarak aşağıdaki işlemler yapılabilir :

$$\ln \psi(\mathbf{r}, t) = \ln u(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar} Et\,, \qquad \frac{1}{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi \tag{I.8.10}$$

sonucu veyâ (I.8.9) tanım bağıntısı yardımı ile

$$W\psi = E\psi \tag{I.8.11}$$

özdeğer bağıntısı bulunur. (I.7.8), (I.7.11), (I.8.10) ve (I.8.11) bağıntılarından bir duraklı hâl için HAMİLTON operatörünün E özdeğerinin enerji operatörünün de özdeğeri olduğu görülür. Öte yandan, t zaman operatörü bir âdi çarpım operatörü olarak tanımlanabilir. O hâlde, Wt çarpım operatörünün $\psi(\mathbf{r}, t)$ fonksiyonuna etkisi

$$Wt\,\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(t\psi) = i\hbar \left(t \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi\right)$$

şeklindedir. tW çarpım operatörünün $\psi(\mathbf{r}, t)$ fonksiyonu üzerindeki etkisi

$$tW\psi = i\hbar\, t\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

şeklindedir. Bu iki bağıntı taraf tarafa çıkarılırsa

$$(Wt - tW)\,\psi = i\hbar\,\psi$$

veyâ

$$[W, t] \equiv Wt - tW = i\hbar \tag{I.8.12}$$

sonucuna varılır.

Görülüyor ki, kuvantum mekaniğinde p_x ile x ve W ile t kanonik eşlenik dinamik değişkenleri komütatif değildir.

(I.9) YÖRÜNGE AÇISAL MOMENTUMU VEKTÖR OPERATÖRÜ

Kuvantum mekaniğinde *yörünge açısal momentumu vektörü operatörü* klâsik mekaniktekine benzer şekilde

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\,\mathbf{r}\times\nabla \tag{I.9.1}$$

bağıntısı ile tanımlanır. **r** ve **p** nin kartezyen bileşenleri cinsinden **L** nin kartezyen bileşenleri

$$L_x = y\,p_z - z\,p_y\,,\quad L_y = z\,p_x - x\,p_z\,,\quad L_z = x\,p_y - y\,p_x \tag{I.9.2}$$

şeklindedir. (I.8.1) bağıntılarının yardımı ile (I.9.2) bağıntıları

$$L_y = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),\quad L_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),\quad L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{I.9.3}$$

şeklinde de yazılabilir.

Şimdi $[L_y\,, L_z]$ komütatörünü hesaplayalım. (I.9.2) bağıntılarını kullanarak

$$\begin{aligned} L_y\,L_z &= (z\,p_x - x\,p_z)\,(x\,p_y - y\,p_x) \\ &= p_x\,x\,z\,p_y - p_x^2\,z\,y - x^2\,p_z\,p_y + x\,p_x\,y\,p_z \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned} L_z\,L_y &= (x\,p_y - y\,p_x)\,(z\,p_x - x\,p_z) \\ &= x\,p_x\,z\,p_y - x^2\,p_y\,p_z - p_x^2\,y\,z + p_x\,x\,y\,p_z \end{aligned}$$

bulunur. Bu iki bağıntıyı taraf tarafa çıkararak

$$\begin{aligned} L_y\,L_z - L_z\,L_y &= (p_x\,x - x\,p_x)\,z\,p_y + (x\,p_x - p_x\,x)\,y\,p_z \\ &= (x\,p_x - p_x\,x)\,(y\,p_z - z\,p_y) \end{aligned}$$

elde edilir.

$$x\,p_x - p_x\,x = i\hbar \quad \text{ve} \quad y\,p_z - z\,p_y = L_x$$

bağıntılarını kullanarak

$$L_y\,L_z - L_z\,L_y = i\hbar\,L_x$$

sonucuna varılır. Bu son bağıntıdan dairesel permütasyon aracılığı ile benzer iki bağıntı daha bulunabilir ve

$$[L_y\,,L_z] = i\hbar\,L_x\,, \quad [L_z\,,L_x] = i\hbar\,L_y\,, \quad [L_x\,,L_y] = i\hbar\,L_z \tag{I.9.4}$$

elde edilir. Bu üç komütatiflik bağıntısı

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar\,\mathbf{L} \tag{I.9.5}$$

vektör operatör bağıntısına eşdeğerdir.

L yörünge açısal momentumu vektör operatörü $[\mathbf{e}_x\,,\mathbf{e}_y\,,\mathbf{e}_z]$ kartezyen birim taban vektörleri cinsinden

$$\mathbf{L} = \mathbf{e}_x\,L_x + \mathbf{e}_y\,L_y + \mathbf{e}_z\,L_z \tag{I.9.6}$$

şeklinde yazılabilir. Kartezyen taban vektörleri sâbit vektörler olduğundan, L_x, L_y, L_z kartezyen bileşenleri ile komütatiftir. Bu sebepten (I.9.6) bağıntısı

$$\mathbf{L} = L_x\,\mathbf{e}_x + L_y\,\mathbf{e}_y + L_z\,\mathbf{e}_z \tag{I.9.6a}$$

şeklinde de yazılabilir. (I.9.6a) ve (I.9.6) bağıntıları taraf tarafa skaler olarak çarpılırsa

$$L^2 = \mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \tag{I.9.7}$$

sonucuna varılır. Bu son bağıntı yörünge açısal momentumu vektör operatörünün skaler karesinin kartezyen bileşenleri cinsinden ifâdesidir.

Şimdi de $[\mathbf{L}^2\,,L_x]$ komütatörünü hesaplayalım. Önce (I.9.7) bağıntısını kullanarak

$$\begin{aligned}
[\mathbf{L}^2\,,L_x] &= \mathbf{L}^2\,L_x - L_x\,\mathbf{L}^2 \\
&= (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)\,L_x - L_x\,(L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) \\
&= (L_y^2 + L_z^2)\,L_x - L_x\,(L_y^2 + L_z^2) \\
&= (L_y^2\,L_x - L_x\,L_y^2) + (L_z^2\,L_x - L_x\,L_z^2)
\end{aligned} \tag{i}$$

elde edilir. Öte yandan, önce

$$L_x\,L_y - L_y\,L_x = i\hbar\,L_z$$

bağıntısının her iki yanını sağdan ve soldan L_y ile çarpıp taraf tarafa toplayalım :

$$\begin{Bmatrix} L_x\,L_y^2 - L_y\,L_x\,L_y = i\hbar\,L_z\,L_y \\ L_y\,L_x\,L_y - L_y^2\,L_x = i\hbar\,L_y\,L_z \end{Bmatrix}$$

$$L_x L_y^2 - L_y^2 L_x = i\hbar\,(L_z L_y + L_y L_z) \tag{ii}$$

bulunur. Sonra da

$$L_z L_x - L_x L_z = i\hbar\, L_y$$

bağıntısının her iki yanını soldan ve sağdan L_z ile çarpıp taraf tarafa toplayalım:

$$\left\{\begin{array}{l} L_z^2 L_x - L_z L_x L_z = i\hbar\, L_z L_y \\ L_z L_x L_z - L_x L_z^2 = i\hbar\, L_y L_z \end{array}\right\}$$

$$L_z^2 L_x - L_x L_z^2 = i\hbar\,(L_z L_y + L_y L_z) \tag{iii}$$

bulunur. (ii) ve (iii) bağıntıları (i) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$[\mathbf{L}^2, L_x] = -\,i\hbar\,(L_z L_y + L_y L_z) + i\hbar\,(L_z L_y + L_y L_z) = 0$$

sonucuna varılır. O hâlde, $\mathbf{L}^2$ operatörü L_x ile kömütatiftir ve L_x, L_y, L_z arasındaki simetriye göre L_y ve L_z operatörleri ile de komütatiftir :

$$[\mathbf{L}^2, L_x] = 0, \quad [\mathbf{L}^2, L_y] = 0, \quad [\mathbf{L}^2, L_z] = 0 \tag{I.9.8}$$

Şimdi L_x, L_y, L_z operatörlerinin x, y, z operatörleri ile oluşan komütatörlerini hesaplayalım. L_z nin x, y, z ile oluşan komütatörleri :

$$\begin{aligned} [L_z, x] &= (x p_y - y p_x)\,x - x\,(x p_y - y p_x) \\ &= x p_y x - y p_x x - x^2 p_y + x y p_x \\ &= y\,(x p_x - p_x x) \\ &= i\hbar\, y, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [L_z, y] &= (x p_y - y p_x)\,y - y\,(x p_y - y p_x) \\ &= x p_y y - y p_x y - y x p_y + y^2 p_x \\ &= -\,x\,(y p_y - p_y y) \\ &= -\,i\hbar\, x \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned} [L_z, z] &= (x p_y - y p_x)\,z - z\,(x p_y - y p_x) \\ &= x p_y z - y p_x z - z x p_y + z y p_x = 0 \end{aligned}$$

sonuçlarını verirler. Bu bağıntılardan dairesel permütasyon aracılığı ile aşağıdaki sonuçlara varılır :

$$\left.\begin{array}{lll} [L_x, x] = 0, & [L_y, x] = -\,i\hbar\, z, & [L_z, x] = i\hbar\, y, \\ [L_x, y] = i\hbar\, z, & [L_y, y] = 0, & [L_z, y] = -\,i\hbar\, x, \\ [L_x, z] = -\,i\hbar\, y, & [L_y, z] = i\hbar\, x, & [L_z, z] = 0. \end{array}\right\} \tag{I.9.9}$$

Benzer şekilde, L_z nin p_x, p_y, p_z ile oluşan komütatörleri :

$$\begin{aligned}
[L_z, p_x] &= (x p_y - y p_x) p_x - p_x (x p_y - y p_x) \\
&= x p_y p_x - y p_x^2 - p_x x p_y + p_x y p_x \\
&= (x p_x - p_x x) p_y \\
&= i \hbar p_y ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[L_z, p_y] &= (x p_y - y p_x) p_y - p_y (x p_y - y p_x) \\
&= x p_y^2 - y p_x p_y - p_y x p_y + p_y y p_x \\
&= -(y p_y - p_y y) p_x \\
&= - i \hbar p_x
\end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned}
[L_z, p_z] &= (x p_y - y p_x) p_z - p_z (x p_y - y p_x) \\
&= x p_y p_z - y p_x p_z - p_z x p_y + p_z y p_x = 0
\end{aligned}$$

sonuçlarını verirler. Bu bağıntılardan da dairesel permütasyon aracılığı ile aşağıdaki sonuçlara varılır :

$$\begin{aligned}
&[L_x, p_x] = 0, && [L_y, p_x] = - i \hbar p_z , && [L_z, p_x] = i \hbar p_y , \\
&[L_x, p_y] = i \hbar p_z , && [L_y, p_y] = 0, && [L_z, p_y] = - i \hbar p_x , \\
&[L_x, p_z] = - i \hbar p_y , && [L_y, p_z] = i \hbar p_x , && [L_z, p_z] = 0.
\end{aligned} \tag{I.9.10}$$

(I.10) KÜRESEL KOORDİNATLARDA YÖRÜNGE AÇISAL MOMENTUMU VEKTÖR OPERATÖRÜ

Küresel koordinatlardan kartezyen koordinatlara dönüşüm bağıntıları

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \cos \varphi, \quad z = r \cos \theta \tag{I.10.1}$$

şeklindedir. Yer vektörünün kartezyen koordinatlarda kartezyen birim taban vektörleri cinsinden ifâdesi

$$\mathbf{r} = x \, \mathbf{e}_x + y \, \mathbf{e}_y + z \, \mathbf{e}_z \tag{I.10.2}$$

şeklindedir. (I.10.1) bağıntıları (I.10.2) de yerlerine yazılırsa

$$\mathbf{r} = r \left[\sin \theta \left(\cos \varphi \, \mathbf{e}_x + \sin \varphi \, \mathbf{e}_y \right) + \cos\theta \, \mathbf{e}_z \right] \tag{I.10.3}$$

elde edilir. (I.10.3) bağıntısı yer vektörünü (r, θ, φ) küresel koordinatlarının bir fonksiyonu olarak verir. Küresel koordinatlara ait taban vektörleri bu fonksiyonun kısmî türevlerinden ibarettir :

$$\mathbf{r}_1 = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r} = \sin\theta\,(\cos\varphi\,\mathbf{e}_x + \sin\varphi\,\mathbf{e}_y) + \cos\theta\,\mathbf{e}_z$$

$$\mathbf{r}_2 = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = r\,[\cos\theta\,(\cos\varphi\,\mathbf{e}_x + \sin\varphi\,\mathbf{e}_y) - \sin\theta\,\mathbf{e}_z]$$

$$\mathbf{r}_3 = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \varphi} = r\sin\theta\,(-\sin\varphi\,\mathbf{e}_x + \cos\varphi\,\mathbf{e}_y)$$

$[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3]$ taban vektörlerinin modülleri

$$h_1 = |\mathbf{r}_1| = 1, \quad h_2 = |\mathbf{r}_2| = r, \quad h_3 = |\mathbf{r}_3| = r\sin\theta \qquad \text{(I.10.4)}$$

olduğundan, küresel koordinatlara ait $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ birim taban vektörlerinin kartezyen koordinatlara ait $[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z]$ birim taban vektörleri cinsinden ifâdeleri

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \sin\theta\,(\cos\varphi\,\mathbf{e}_x + \sin\varphi\,\mathbf{e}_x) + \cos\theta\,\mathbf{e}_z \\ \mathbf{e}_2 &= \cos\theta\,(\cos\varphi\,\mathbf{e}_x + \sin\varphi\,\mathbf{e}_y) - \sin\theta\,\mathbf{e}_z \\ \mathbf{e}_3 &= -\sin\varphi\,\mathbf{e}_x + \cos\varphi\,\mathbf{e}_y \end{aligned}\right\} \qquad \text{(I.10.5)}$$

şeklindedir. (I.10.5) bağıntılarından, $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ birim taban vektörlerinin biribirlerine ikişer ikişer dik oldukları ve böylece

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_k = \delta_{ik} \qquad (i, k = 1, 2, 3) \qquad \text{(I.10.6)}$$

bağıntılarını sağladıkları kolaylıkla görülür. Bu son bağıntıdaki δ_{ik} KRONECKER sembolü kuvantum mekaniğinde sıklıkla kullanılır ve bilindiği gibi

$$i = k \text{ için } \delta_{ik} = 1 \text{ ve } i \neq k \text{ için } \delta_{ik} = 0$$

özelliğine sâhiptir. $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ taban vektörleri kartezyen taban vektörleri gibi sâbit değildir ve her biri küresel koordinatların bir fonksiyonudur. Fakat bu vektörler r radyal koordinatına bağlı olmayıp her biri sâdece (θ, φ) açısal koordinatlarının bir fonksiyonudur.

$[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ taban vektörlerinin θ ve φ ye göre kısmî türevlerinin gene bu vektörlerin birer lineer kombinezonu olarak ifâdeleri uygulamada çok elverişlidir. (I.10.5) bağıntılarından $\mathbf{e}_1$ ve $\mathbf{e}_2$ nin θ ya göre kısmî türevlerini alarak

$$\frac{\partial \mathbf{e}_1}{\partial \theta} = \cos\theta\,(\cos\varphi\,\mathbf{e}_x + \sin\varphi\,\mathbf{e}_y) - \sin\theta\,\mathbf{e}_z = \mathbf{e}_2$$

$$\frac{\partial \mathbf{e}_2}{\partial \theta} = -\sin\theta\,(\cos\varphi\,\mathbf{e}_x + \sin\varphi\,\mathbf{e}_y) - \cos\theta\,\mathbf{e}_z = -\mathbf{e}_1$$

sonuçları hemen bulunur. Öte yandan, $\mathbf{e}_1$ ve $\mathbf{e}_2$ nin φ ye göre kısmî türevlerini alarak

$$\frac{\partial e_1}{\partial \varphi} = \sin\theta\,(-\sin\varphi\, e_x + \cos\varphi\, e_y) = \sin\theta\, e_3$$

$$\frac{\partial e_2}{\partial \varphi} = \cos\theta\,(-\sin\varphi\, e_x + \cos\varphi\, e_y) = \cos\theta\, e_3$$

elde edilir. e_3 birim taban vektörü sâdece φ nin bir fonksiyonudur ve bu vektörün φ ye göre türevini alarak

$$\frac{de_3}{d\varphi} = -\cos\varphi\, e_x - \sin\varphi\, e_y$$

bulunur. (I.10.5) bağıntılarının ilk ikisinden

$$\sin\theta\, e_1 + \cos\theta\, e_2 = \cos\varphi\, e_x + \sin\varphi\, e_y$$

bağıntısı bulunur ve böylece

$$\frac{de_3}{d\varphi} = -\sin\theta\, e_1 - \cos\theta\, e_2$$

sonucuna varılır. Şimdi bulduğumuz sonuçları sıralayalım :

$$\left.\begin{aligned} &\frac{\partial e_1}{\partial \theta} = e_2, \quad \frac{\partial e_2}{\partial \theta} = -e_1, \quad \frac{\partial e_3}{\partial \theta} = 0, \\ &\frac{\partial e_1}{\partial \varphi} = e_3 \sin\theta, \quad \frac{\partial e_2}{\partial \varphi} = e_3\cos\theta, \quad \frac{\partial e_3}{\partial \varphi} = -e_1\sin\theta - e_2\cos\theta. \end{aligned}\right\} \qquad (I.10.7)$$

Küresel koordinatlarda *gradyan vektör operatörü*nün ifâdesi

$$\nabla = e_1 \frac{1}{h_1}\frac{\partial}{\partial r} + e_2 \frac{1}{h_2}\frac{\partial}{\partial \theta} + e_3 \frac{1}{h_3}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

veyâ (I.10.4) bağıntılarının kullanılması ile

$$\nabla = e_1 \frac{\partial}{\partial r} + e_2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + e_3 \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad (I.10.8)$$

şeklindedir. Öte yandan, (I.10.3) ve (I.10.5) bağıntılarının yardımı ile küresel koordinatlarda yer vektörünün e_1 taban vektörü cinsinden ifâdesi

$$r = r\, e_1 \qquad (I.10.9)$$

şeklindedir. (I.10.9) bağıntısı ile (I.10.8) bağıntısı soldan taraf tarafa vektörel olarak çarpılırsa

$$r \times \nabla = e_3 \frac{\partial}{\partial \theta} - e_2 \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad (I.10.10)$$

bulunur. Burada (I.10.5) veyâ (I.10.6) bağıntılarından kolayca elde edilebilen

$$\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1\,, \quad \mathbf{e}_3 \times \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2\,, \quad \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_3 \qquad \text{(I.10.11)}$$

bağıntıları kullanıldı. (I.9.1) bağıntısının aracılığı ile (I.10.10) bağıntısından yörünge açısal momentumu vektör operatörünün küresel koordinatlar ve $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ taban vektörleri cinsinden

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{e}_3 \frac{\partial}{\partial\theta} - \mathbf{e}_2 \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad \text{(I.10.12)}$$

şeklindeki ifâdesi bulunur. Bu bağıntının sağ yanının r radyal koordinatına ve bu koordinata ait $\mathbf{e}_1$ taban vektörüne bağlı olmadığına dikkat edilmelidir.

Şimdi $\mathbf{L}$ nin küresel koordinatlar cinsinden kartezyen bileşenlerinin ifâdelerini yazacağız. (I.9.6) bağıntısının yardımı ile (I.10.12) bağıntısından

$$L_x = \mathbf{e}_x \,.\, \mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{e}_x \,.\, \mathbf{e}_3 \frac{\partial}{\partial\theta} - \mathbf{e}_x \,.\, \mathbf{e}_2 \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L_y = \mathbf{e}_y \,.\, \mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{e}_y \,.\, \mathbf{e}_3 \frac{\partial}{\partial\theta} - \mathbf{e}_y \,.\, \mathbf{e}_2 \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L_z = \mathbf{e}_z \,.\, \mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{e}_z \,.\, \mathbf{e}_3 \frac{\partial}{\partial\theta} - \mathbf{e}_z \,.\, \mathbf{e}_2 \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

bağıntıları bulunur (I.10.5) bağıntılarından

$$\mathbf{e}_x \,.\, \mathbf{e}_2 = \cos\theta\cos\varphi, \quad \mathbf{e}_y \,.\, \mathbf{e}_2 = \cos\theta\sin\varphi, \quad \mathbf{e}_z \,.\, \mathbf{e}_2 = -\sin\theta,$$

$$\mathbf{e}_x \,.\, \mathbf{e}_3 = -\sin\varphi, \quad \mathbf{e}_y \,.\, \mathbf{e}_3 = \cos\varphi, \quad \mathbf{e}_z \,.\, \mathbf{e}_3 = 0.$$

bağıntıları elde edilir. Bu bağıntıları L_x, L_y, L_z yi veren bağıntılarda yerlerine yazarak

$$\left.\begin{aligned} L_x &= -\frac{\hbar}{i}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{cotg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{cotg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \end{aligned}\right\} \qquad \text{(I.10.13)}$$

ve

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad \text{(I.10.14)}$$

sonuçlarına varılır.

Son olarak yörünge açısal momentumu vektör operatörünün $\mathbf{L}^2$ skaler karesinin küresel koordinatlar cinsinden ifâdesini bulacağız. Bu maksatla da (I.10.10) bağıntısının yardımı ile $\mathbf{r} \times \nabla$ vektör operatörünün $(\mathbf{r} \times \nabla)\,.\,(\mathbf{r} \times \nabla)$ skaler karesini hesaplayacağız. Önce (I.10.10) bağıntısının sağ yanındaki terimlerde $\mathbf{e}_3$ ve $\mathbf{e}_2$ taban vektörleri en sağa kaydırılmalıdır.

$$\mathbf{r} \times \nabla = \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{e}_3 - \frac{1}{\sin \theta} \mathbf{e}_2 \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

bağıntısı hemen yazılabilir. Çünkü $\mathbf{e}_3$, θ ya bağlı olmadığı için $\partial/\partial\theta$ operatörü ile komütatiftir ve $1/\sin\theta$ ile $\mathbf{e}_2$ âdi çarpım operatörleri oldukları için komütatiftir. Fakat $\mathbf{e}_2$, φ ye bağlı olduğu için $\partial/\partial\varphi$ ile komütatif değildir. Keyfî bir $\psi(r, \theta, \varphi)$ fonksiyonu için

$$\frac{\partial}{\partial \varphi}(\mathbf{e}_2 \psi) = \mathbf{e}_2 \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{\partial \mathbf{e}_2}{\partial \varphi} \psi$$

veyâ (I.10.7) bağıntılarına bakarak

$$\frac{\partial}{\partial \varphi}(\mathbf{e}_2 \psi) = \mathbf{e}_2 \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \mathbf{e}_3 \cos\theta\, \psi$$

bulunur. ψ keyfî olduğu için

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_2 \frac{\partial}{\partial \varphi} + \mathbf{e}_3 \cos\theta$$

veya

$$\mathbf{e}_2 \frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_2 - \cos\theta\, \mathbf{e}_3 \qquad \text{(I.10.15)}$$

elde edilir. Bu sonucu yukardaki $\mathbf{r} \times \nabla$ ın ifâdesinde yerine yazarak

$$\mathbf{r} \times \nabla = \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{e}_3 - \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_2 - \cos\theta\, \mathbf{e}_3\right)$$

veyâ

$$\mathbf{r} \times \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{cotg}\theta\right) \mathbf{e}_3 - \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_2 \qquad \text{(I.10.16)}$$

sonucuna varılır. Şimdi artık (I.10.16) bağıntısı (I.10.10) bağıntısı ile soldan taraf tarafa skaler olarak çarpılabilir ve

$$(\mathbf{r} \times \nabla) \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) = \left[\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{cotg}\theta\right)\mathbf{e}_3 - \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\mathbf{e}_2\right] \cdot \left(\mathbf{e}_3 \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_2 \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{cotg}\theta\right)\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

yazılabilir. Böylece

$$(\mathbf{r} \times \nabla) \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{cotg}\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \qquad \text{(I.10.17)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (I.9.1) bağıntısından

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 (\mathbf{r} \times \nabla) \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) \tag{I.10.18}$$

yazılabilir ve böylece $\mathbf{L}^2$ operatörünün küresel koordinatlardaki ifâdesi elde edilir.

(I.11) KLÂSİK MEKANİKTE POTANSİYEL ENERJİSİ KÜRESEL SİMETRİK OLAN BİR PARÇACIĞIN HAREKETİNİN BELİRLENMESİ

Klâsik mekanikte yer vektörü $\mathbf{r}$ ve momentumu

$$\mathbf{p} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \tag{I.11.1}$$

olan bir noktasal parçacığa ait yörünge açısal momentumu

$$L = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{I.11.2}$$

bağıntısı ile tanımlanır. (I.11.2) bağıntısının her iki yanının zamana göre türevi alınır ve (I..11.1) bağıntısı kullanılırsa

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{p} = \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} + \frac{\mathbf{p}}{m} \times \mathbf{p} = \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt}$$

bulunur. Öte yandan, potansiyel enerjisi V olan bir parçacığın hareket denklemi bilindiği gibi

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V \tag{I.11.3}$$

şeklindedir ve böylece

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\mathbf{r} \times \nabla V \tag{I.11.4}$$

sonucuna varılır. Küresel koordinatlarda $V = V(r, \theta, \varphi, t)$ olduğundan, parçacığa ait potansiyel enerji fonksiyonunun gradyanı (I.10.8) bağıntısından yararlanarak

$$\nabla V = \frac{\partial V}{\partial r} \mathbf{e}_1 + \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial \theta} \mathbf{e}_2 + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial V}{\partial \varphi} \mathbf{e}_3 \tag{I.11.5}$$

şeklinde yazılabilir.

Şimdi parçacığa ait potansiyel enerji fonksiyonunun küresel simetrik, yâni $V = V(r)$ şeklinde olduğunu farz edelim. Bu takdirde (I.11.5) bağıntısı

$$\nabla V = \frac{dV}{dr} \mathbf{e}_1 \tag{I.11.6}$$

şeklini alır. Öte yandan $\mathbf{r} = r\,\mathbf{e}_1$ olduğundan, (I.11.6) bağıntısı yardımı ile

$$\mathbf{r} \times \nabla V = r \frac{dV}{dr} \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_1 = 0$$

bulunur ve (I.11.4) bağıntısı da

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = 0 \qquad \text{(I.11.7)}$$

veyâ

$$\mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{L} = \text{sâbit} \qquad \text{(I.11.8)}$$

şeklini alır. Bu sonuç **L** ye dik olan (**r**, **p**) düzleminin sâbit bir doğrultuya sâhip olduğunu gösterir. Ayrıca, (**r**, **p**) düzlemi koordinatların sâbit O başlangıç noktasından geçtiği için sâbit bir düzlemdir. O hâlde, parçacığın yörüngesi (**r**, **p**) sâbit düzlemi içinde bulunan düzlemsel bir eğridir ve $|\mathbf{L}| = L$ büyüklüğü yörünge boyunca sâbit kalır. (I.11.7) bağıntısından dolayı **L** ye bir *hareket sâbiti* adı verilir. (I.11.8) bağıntısı da *açısal momentumun korunumu*nu ifâde etmektedir.

$\mathbf{r} = r\,\mathbf{e}_1$ bağıntısından yer vektörünün diferansiyeli hesaplanırsa

$$d\mathbf{r} = dr\,\mathbf{e}_1 + r\,d\mathbf{e}_1 = dr\,\mathbf{e}_1 + r\left(\frac{\partial \mathbf{e}_1}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial \mathbf{e}_1}{\partial \varphi} d\varphi\right)$$

veyâ (I.10.7) bağıntılarının yardımı ile

$$d\mathbf{r} = dr\,\mathbf{e}_1 + r\,(d\theta\,\mathbf{e}_2 + \sin\theta\, d\varphi\,\mathbf{e}_3) \qquad \text{(I.11.9)}$$

bulunur. (I.11.9) bağıntısı (I.11.1) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\mathbf{p} = m\frac{dr}{dt}\mathbf{e}_1 + m\,r\left(\frac{d\theta}{dt}\mathbf{e}_2 + \sin\theta\frac{d\varphi}{dt}\mathbf{e}_3\right) \qquad \text{(II.11.10)}$$

elde edilir. $\mathbf{r} = r\,\mathbf{e}_1$ olduğuna dikkat ederek (I.11.10) bağıntısı (I.11.2) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\mathbf{L} = m\,r^2\left(\frac{d\theta}{dt}\mathbf{e}_3 - \sin\theta\frac{d\varphi}{dt}\mathbf{e}_2\right) \qquad \text{(I.11.11)}$$

sonucuna varılır. Momentum vektörünün küresel koordinatlara ait $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ taban vektörlerine göre

$$p_r = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{p}, \qquad p_\theta = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{p}, \qquad p_\varphi = \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{p}$$

bileşenleri (I.11.10) bağıntısından yararlanarak

$$p_r = m\frac{dr}{dt}, \qquad p_\theta = m\,r\frac{d\theta}{dt}, \qquad p_\varphi = m\,r\sin\theta\frac{d\varphi}{dt} \qquad \text{(I.11.12)}$$

şeklinde bulunur. Böylece, (I.11.10) ve (I.11.11) bağıntıları

$$\mathbf{p} = p_r \, \mathbf{e}_1 + p_\theta \, \mathbf{e}_2 + p_\varphi \, \mathbf{e}_3 \tag{I.11.10a}$$

ve

$$\mathbf{L} = r \, (p_\theta \, \mathbf{e}_3 - p_\varphi \, \mathbf{e}_2) \tag{I.11.11a}$$

şekillerinde de yazılabilirler. p_r bileşenine momentum vektörünün *radyal bileşeni* ve p_θ ve p_φ bileşenlerine de momentum vektörünün *açısal bileşenleri* adı verilir. (I.11.10a) ve (I.11.11a) bağıntılarının her iki yanlarının skaler kareleri alınırsa

$$p^2 = p_r^2 + p_\theta^2 + p_\varphi^2 \tag{I.11.10b}$$

$$L^2 = r^2 (p_\theta^2 + p_\varphi^2) \tag{I.11.11b}$$

bağıntıları bulunur. (I.11.11b) bağıntısından elde edilen

$$p_\theta^2 + p_\varphi^2 = \frac{L^2}{r^2}$$

değeri (I.11.10b) bağıntısında yerine yazılırsa

$$p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \tag{I.11.13}$$

sonucuna varılır.

Küresel simetrik bir potansiyel enerji fonksiyonu için H HAMİLTON fonksiyonu bir hareket sâbitidir ve

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) = E = \text{sâbit} \tag{I.11.14}$$

şeklindeki toplam enerjinin korunumu bağıntısını gerçekler. Düzlemsel hareketin $\theta = \pi/2$ düzlemi içinde vuku bulduğunu farz edersek (I.11.11) bağıntısı (I.10.5) bağıntılarının ikincisi yardımı ile

$$\mathbf{L} = - m \, r^2 \frac{d\varphi}{dt} \, \mathbf{e}_2 = m \, r^2 \frac{d\varphi}{dt} \, \mathbf{e}_z \tag{I.11.15}$$

şeklini alır. Bu bağıntının her iki yanının modülü alınırsa açısal momentumun korunumu

$$m \, r^2 \frac{d\varphi}{dt} = L = \text{sâbit} \tag{I.11.16}$$

bağıntısını verir. Öte yandan, (I.11.13) bağıntısı (I.11.14) bağıntısında yerine yazılırsa toplam enerjinin korunumu (I.11.12) bağıntısının yardımı ile

$$\frac{1}{2} m \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) = E = \text{sâbit} \tag{I.11.17}$$

bağıntısını verir. (I.11.16) ve (I.11.17) bağıntıları bir arada parçacığın $\theta = \pi/2$ düzlemi veyâ (x, y) kartezyen düzlemi içerisindeki (r, φ) kutupsal koordinatları cinsinden $r = r(\varphi)$ bağıntısı ile yörüngesini belirler.

(I.12) MOMENTUM VEKTÖR OPERATÖRÜNÜN RADYAL BİLEŞENİ

Bir önceki paragrafta klâsik mekanikte momentumun radyal bileşeni

$$p_r = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{r} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$$

bağıntısı ile tanımlanmıştı. Kuvantum mekaniğinde $\mathbf{r}/r$ ve $\mathbf{p}$ operatörleri komütatif olmadıkları için momentum operatörünün radyal bileşineni

$$p_r = \frac{1}{2} (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_1)$$

veyâ

$$p_r = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{r} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right] \tag{I.12.1}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Bu tanım bağıntısında $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ yazarak ve p_r operatörünü keyfî $\psi(r, \theta, \varphi)$ fonksiyonuna uygulayarak

$$p_r \psi = \frac{\hbar}{2i} \left[\frac{1}{r} (\mathbf{r} \cdot \nabla\psi) + \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \psi \right) \right] \tag{I.12.2}$$

veyâ

$$p_r \psi = \frac{\hbar}{2i} \left[\mathbf{e}_1 \cdot \nabla\psi + \nabla \cdot (\mathbf{e}_1 \psi) \right] \tag{I.12.2a}$$

elde edilir. Öte yandan,

$$\nabla \cdot (\mathbf{e}_1 \psi) = \nabla \cdot \left(\frac{\psi}{r} \mathbf{r} \right) = \frac{\psi}{r} \nabla \cdot \mathbf{r} + \mathbf{r} \cdot \nabla \left(\frac{\psi}{r} \right)$$

vektörel özdeşliğinde $\nabla \cdot \mathbf{r} = 3$ özdeşliğini kullanarak ve $\nabla (\psi/r)$ işlemini yaparak

$$\nabla \cdot \left(\frac{\psi}{r} \mathbf{r} \right) = 3 \frac{\psi}{r} + \mathbf{r} \cdot \left(\frac{\nabla\psi}{r} - \frac{\psi}{r^2} \nabla r \right)$$

bulunur. Şimdi de

$$\nabla r = \mathbf{e}_1, \quad \mathbf{e}_1 \cdot \nabla\psi = \frac{\partial\psi}{\partial r}$$

özdeşliklerini kullanarak

$$\nabla \cdot \left(\frac{\psi}{r}\mathbf{r}\right) = 3\frac{\psi}{r} + \mathbf{e}_1 \cdot \left(\nabla\psi - \frac{\psi}{r}\mathbf{e}_1\right)$$

veyâ

$$\nabla \cdot (\mathbf{e}_1 \psi) = 3\frac{\psi}{r} + \frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{\psi}{r} = \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{2}{r}\psi \tag{I.12.3}$$

elde edilir. (I.12.3) bağıntısını (I.12.2a) bağıntısında yerine yazarak

$$p_r \psi = \frac{\hbar}{2i}\left(\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{2}{r}\psi\right) = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r}\psi\right)$$

ve böylece

$$p_r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \tag{I.12.4}$$

sonucuna varılır.

Şimdi de p_r operatörünün karesi olan p_r^2 operatörünü hesaplayalım. $p_r \psi$ ye tekrar p_r operatörünü uygulayarak

$$\begin{aligned} p_r^2 \psi &= -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r}\psi\right) \\ &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\psi + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\psi\right) \\ &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) \end{aligned}$$

ve böylece

$$p_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{I.12.5}$$

sonucuna varılır.

(I.13) p^2 OPERATÖRÜNÜN p_r^2 VE L^2 OPERATÖRLERİ CİNSİNDEN İFÂDESİ

Küresel koordinatlarda LAPLACE operatörünün ifâdesi

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \operatorname{cotg}\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{I.13.1}$$

şeklindedir. (I.10.17) bağıntısı (I.13.1) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}(\mathbf{r} \times \nabla) \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) \tag{I.13.2}$$

bulunur. (I.13.2) bağıntısının her iki yanı $-\hbar^2$ ile çarpılırsa (I.7.10), (I.10.18) ve (1.12.5) bağıntılarının yardımı ile

$$p^2 = p_r^2 + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \tag{I.13.3}$$

sonucuna varılır. Kuvantum mekaniğine ait (I.13.3) operatör bağıntısı klâsik mekaniğe ait (I.11.13) bağıntısı ile karşılaştırılırsa $\mathbf{p}$, p_r ve $\mathbf{L}$ dinamik değişkenlerinin aynı cebirsel denklemi sağladıkları görülür.

(I.14) KÜRESEL SİMETRİK BİR POTANSİYFL ENERJİ İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMÜ

$V = V(r)$ şeklindeki küresel simetrik bir potansiyel enerji fonksiyonu için (I.6.5) bağıntısı ile verilen

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \tag{I.14.1}$$

şeklindeki zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denkleminin küresel koordinatlardaki çözümlerini arayacağız. LAPLACE operatörünün küresel koordinatlardaki ifâdesi (I.13.2) bağıntısına göre

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}(\mathbf{r} \times \nabla) \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) \tag{I.14.2}$$

şeklindedir. Burada (I.10.18) bağıntısına göre

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 (\mathbf{r} \times \nabla) \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) \tag{I.14.3}$$

olduğu bilindiğine göre (I.14.2) bağıntısı

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2} \tag{I.14.4}$$

şeklinde de yazılabilir. (I.14.4) bağıntısı (I.14.1) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2 \psi}{\hbar^2 r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \tag{I.14.5}$$

sonucuna varılır.

Şimdi (I.14.5) kısmî türevli diferansiyel denkleminin

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(r\,\theta, \varphi) = R(r)\,Y(\theta, \varphi) \tag{I.14.6}$$

şeklindeki çözümlerini arayalım. (I.10.17) bağıntısına göre

$$-\frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2} = \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \operatorname{cotg}\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{I.14.7}$$

olduğu için $\mathbf{L}^2$ operatörü sâdece $Y(\theta, \varphi)$ fonksiyonuna etki eder. O hâlde, (I.14.6) bağıntısı (I.14.5) denkleminde yerine yazılırsa

$$Y\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} Y \frac{dR}{dr} - R\frac{\mathbf{L}^2 Y}{\hbar^2 r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V) R Y = 0$$

bulunur. Bu denklemin her iki yanı r^2 ile çarpılıp $R\,Y$ çarpımına bölünürse

$$\frac{r^2}{R}\left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) - \frac{\mathbf{L}^2 Y}{\hbar^2 Y} + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - V) = 0$$

veyâ

$$r^2\left[\frac{1}{R}\left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\right] = \frac{\mathbf{L}^2 Y}{\hbar^2 Y} = l(l+1) \tag{I.14.8}$$

sonucuna varılır. (I.14.8) bağıntısının sol yanı sâdece r nin ve sağ yanı da sâdece θ ve φ nin fonksiyonu olduğu için her iki yanının ortak bir $l(l+1)$ boyutsuz ayrılma sâbitine eşit olması gerekir. Böylece (I.14.8) denklemi

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0 \tag{I.14.9}$$

*radyal denklemi*ne ve

$$\mathbf{L}^2 Y = \hbar^2 l(l+1) Y \tag{I.14.10}$$

*açısal denklemi*ne ayrılır. (I.14.9) radyal denklemi, $V(r)$ küresel simetrik potansiyel enerji fonksiyonu bilindiği zaman çözülebilir. (I.14.10) açısal denklemi $\mathbf{L}^2$ operatörünün özdeğer denklemidir ve Y bu operatörün $\hbar^2 l(l+1)$ özdeğerine ait bir özfonksiyonudur. (I.14.7) bağıntısının yardımı ile (I.14.10) açısal denklemi

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2} + \operatorname{cotg}\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} + l(l+1) Y = 0 \tag{I.14.11}$$

veyâ

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} + l(l+1) Y = 0 \tag{I.14.12}$$

şeklinde yazılabilir.

(I.15) AÇISAL DENKLEMİN ÇÖZÜMÜ

Herhangi bir küresel simetrik $V(r)$ potansiyel enerji fonksiyonu için SCHRÖDİNGER denkleminin açısal kısmı olan ve (I.14.12) bağıntısı ile verilen

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+l(l+1)\,Y=0 \qquad \text{(I.15.1)}$$

kısmî türevli denkleminin

$$Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi) \qquad \text{(I.15.2)}$$

şeklindeki çözümlerini arayalım. (I.15.2) bağıntısı (I.15.1) denkleminde yerine yazılırsa

$$\frac{\Phi}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{\Theta}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+l(l+1)\,\Theta\,\Phi=0$$

bulunur. Bu denklemin her iki yanı $\sin^2\theta$ ile çarpılıp $\Theta\,\Phi$ çarpımına bölünürse

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+l(l+1)\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=m^2 \qquad \text{(I.15.3)}$$

elde edilir. (I.15.3) bağıntısının sol yanı sâdece θ nın ve sağ yanı da sâdece φ nin fonksiyonudur ve m^2 boyutsuz ayrılma sâbitidir. Böylece, (I.15.1) denklemi

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta=0 \qquad \text{(I.15.4)}$$

ve

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+m^2\,\Phi=0 \qquad \text{(I.15.5)}$$

denklemlerine ayrılır. (I.15.5) lineer diferansiyel denkleminin genel çözümü

$$\Phi(\varphi)=A\,e^{im\varphi}+B\,e^{-im\varphi} \qquad \text{(I.15.6)}$$

şeklindedir. Şüphesiz $[0, 2\pi]$ aralığında Φ ve $d\Phi/d\varphi$ sonlu, sürekli ve tek değerli olmalıdır. Φ nin tek değerli olabilmesi için bu fonksiyon φ nin peryodu 2π olan bir peryodik fonksiyonu olmalıdır, yâni

$$\Phi(\varphi+2\pi)=\Phi(\varphi)$$

bağıntısı özdeş olarak sağlanmalıdır. Böylece,

$$e^{im(\varphi+2\pi)}=e^{im\varphi}$$

veyâ

$$e^{i2m\pi}=1; \qquad \cos 2m\pi=1, \qquad \sin 2m\pi=0$$

olmalıdır. O hâlde, (I.15.6) bağıntısı $m=0,\ \pm 1,\ \pm 2, \ldots$ olmak üzere

$$\Phi(\varphi)=A\,e^{im\varphi} \qquad \text{(I.15.7)}$$

şeklini alır. Şimdi $x=\cos\theta$ değişken dönüşümü yapılırsa

$$\Theta(\theta) = P_l^m(x) = P_l^m(\cos\theta) \tag{I.15.8}$$

yazılabilir ve (I.15.4) diferansiyel denklemi

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l^m}{dx}\right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]P_l^m = 0 \tag{I.15.9}$$

şeklini alır. Ayrıca, (I.15.7) ve (I.15.8) bağıntılarının yardımı ile (I.15.2) bağıntısı

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = N_{lm} P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \tag{I.15.10}$$

şeklinde yazılabilir. $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ fonksiyonuna *küresel harmonik* adı verilir. Burada N_{lm}, l ve m boyutsuz sâbitleri cinsinden ifâde edilebilen bir sâbittir ve küresel harmoniğin normlanmasının sonucu olan bir değere sâhiptir. $P_l^m(x)$ fonksiyonuna da *asosye LEGENDRE fonksiyonu* adı verilir.

(I.15.9) diferansiyel denkleminin $m = 0$ özel hâli için çözümleri,

$$P_l^0(x) = P_l(x) \tag{I.15.11}$$

bağıntısı ile tanımlanan $P_l(x)$ fonksiyonlarıdır ve diferansiyel denklem bu özel hâl için

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l}{dx}\right] + l(l+1)P_l = 0 \tag{I.15.12}$$

veyâ

$$(1-x^2)\frac{d^2P_l}{dx^2} - 2x\frac{dP_l}{dx} + l(l+1)P_l = 0 \tag{I.15.12a}$$

şeklini alır. Şimdi (I.15.12a) diferansiyel denkleminin

$$P_l(x) = x^s(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots), \quad a_0 \neq 0, \quad s \geqq 0 \tag{I.15.13}$$

veyâ

$$P_l(x) = x^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^{s+k} \tag{I.15.13a}$$

şeklindeki bir çözümünü bulmaya çalışalım. (I.15.13a) bağıntısından P_l nin x e göre birinci ve ikinci mertebeden türevlerini alarak

$$\frac{dP_l}{dx} = \sum_k (s+k)\, a_k x^{s+k-1} = x^s \sum_k (s+k)\, a_k x^{k-1}$$

ve

$$\frac{d^2P_l}{dx^2} = \sum_k (s+k)(s+k-1)\, a_k x^{s+k-2} = x^s \sum_k (s+k)(s+k-1)\, a_k x^{k-2}$$

bulunur. Bu sonuçlar (I.15.12a) diferansiyel denkleminde yerlerine yazılırsa

$$(1 - x^2) \sum_k (s+k)(s+k-1) a_k x^{k-2}$$
$$- 2x \sum_k (s+k) a_k x^{k-1} + l(l+1) \sum_k a_k x^k = 0$$

veyâ

$$\sum_k (s+k)(s+k-1) a_k x^{k-2} - \sum_k [(s+k)(s+k-1) + 2(s+k) - l(l+1)] a_k x^k = 0$$

veyâ

$$\sum_k \{(s+k+1)(s+k+2) a_{k+2} - [(s+k)(s+k+1) - l(l+1)] a_k\} x^k = 0$$

özdeşliği elde edilir. Bu sonuç (I.15.13a) serisinin (I.15.12a) diferansiyel denklemini özdeş olarak sağladığını gösterir ve herhangi bir k için x^k nın katsayısı sıfıra eşit olmalıdır. Böylece

$$(s+k+1)(s+k+2) a_{k+2} = [(s+k)(s+k+1) - l(l+1)] a_k \qquad (I.15.14)$$

sonucuna varılır. $k = -2$ için $a_{-2} = 0$ olduğundan

$$s(s-1) a_0 = 0 \qquad (I.15.15a)$$

bağıntısı ve $k = -1$ için $a_{-1} = 0$ olduğundan

$$s(s+1) a_1 = 0 \qquad (I.15.15b)$$

bağıntısı bulunur. a_0 sıfırdan farklı olduğu için (I.15.15a) bağıntısı $s(s-1) = 0$ *indis denklemini* ve böylece $s = 0$ veyâ $s = 1$ sonucunu verir. $s \geqq 0$ olması gerektiğinden, (I.15.15b) bağıntısına göre $s = 0$ ve $a_1 \neq 0$ olmalıdır veyâ $s = 1$ için $a_1 = 0$ olmalıdır. Şüphesiz $s = 0$, $a_1 = 0$ sonuçları bir arada gerçekleşebilir ve sâdece bu hâlin incelenmesi problemin çözümünün bulunması için yeter. $s = 0$ için (I.15.14) *rekürans bağıntısı*

$$a_{k+2} = \frac{k(k+1) - l(l+1)}{(k+1)(k+2)} a_k \qquad (I.15.16)$$

şeklini alır. Bu bağıntı hemen

$$a_1 = a_3 = a_5 = a_7 = \ldots = 0$$

sonucunu verir. Yâni (I.15.13a) serisinde sâdece dereceleri çift olan terimler bulunmaktadır ve $k = 2q$ alınarak

$$P_l(x) = \sum_{q=0}^{\infty} a_{2q} x^{2q} \qquad (I.15.17)$$

yazılabilir. $x = \cos\theta$ olduğundan $P_l(x)$ in değişim aralığı $-1 \leqq x \leqq 1$ dir ve bu fonksiyonun değişim aralığının sınırlarına ait değerleri (I.15.17) serisinin en yüksek dereceli terimleri ile belirlenebilir. Bu maksatla

$$\lim_{q\to\infty} \frac{a_{2(q+1)}}{a_{2q}}$$

limitinin mertebesi araştırılmalıdır (I.15.16) bağıntısının aracılığı ile

$$\lim_{q\to\infty} \frac{a_{2(q+1)}}{a_{2q}} = \lim_{k\to\infty} \frac{a_{k+2}}{a_k} = \lim_{k\to\infty} \frac{k(k+1) - l(l+1)}{(k+1)(k+2)} = 1 \tag{I.15.18}$$

bulunur. O hâlde (I.15.17) açılımı

$$x = \pm 1 \quad \text{için}: \quad P_l(x) \cong \sum_{q=0}^{\infty} x^{2q} = \frac{1}{1-x^2} \tag{I.15.19}$$

şeklini alır. (I.15.19) bağıntısı $P_l(x)$ in $x = \pm 1$ için sonlu olmadığını gösteriyor. Dalga fonksiyonunun her yerde sonlu olması gerektiğinden $P_l(\pm 1)$ sonlu olmalıdır. O hâlde, $k \to \infty$ olamaz ve (I.15.13a) serisi sonlu sayıda terime sâhip bir polinom olmalıdır. Yâni

$$k = n \quad \text{için}: \quad a_n \neq 0 \quad \text{ve} \quad a_{n+2} = 0 \tag{I.15.20}$$

şartları sağlanmalı ve böylece (I.15.16) bağıntısına göre

$$n(n+1) - l(l+1) = 0$$

veyâ

$$(n-l)(n+l+1) = 0 \tag{I.15.21}$$

olmalıdır. Bu denklemin iki çözümünden $n = l$ çözümünü seçiyoruz. Böylece, $k = n \geqq 0$ bağıntısı $l \geqq 0$ bağıntısını verir ve $n = -l - 1 < 0$ çözümü geçersiz olur. O hâlde, $P_l(x)$ fonksiyonu l inci dereceden bir polinomdur ve bu polinoma *LEGENDRE polinomu* adı verilir. $k = n = 0, 1, 2, 3,$ olduğundan, LEGENDRE polinomları ailesinin dereceleri $l = 0, 1, 2, 3, \ldots, \infty$ dur. (I.15.16) rekürans bağıntısının yardımı ile her l için polinomun katsayıları hesaplanabilir. a_0 keyfî integrasyon sâbitidir ve paragraf (I.16) da LEGENDRE polinomlarının jeneratör fonksiyonunun yardımı ile belirlenecektir. Katsayılar hesaplandıktan sonra (I.15.13a) bağıntısında yerlerine yazılır ve $l =$ çift tamsayı için $s = 0$ ve $l =$ tek tamsayı için $s = 1$ alınır. Şüphesiz $l =$ tek tamsayı için (I.15.16) bağıntısının yerine (I.15.14) bağıntısında $s = 1$ yazarak elde edilen

$$a_{k+2} = \frac{(k+1)(k+2) - l(l+1)}{(k+2)(k+3)} a_k \tag{I.15.22}$$

rekürans bağıntısı kullanılmalıdır.

(I.16) LEGENDRE POLİNOMLARININ DOĞURAN FONKSİYONU

LEGENDRE polinomları, kolaylıkla hesaplanabilmelerini mümkün kılan

$$g(x,t) = \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x)\, t^l\,, \qquad t<1 \tag{I.16.1}$$

şeklindeki bir *doğuran* (*jeneratör*) *fonksiyonu*nun yardımı ile tanımlanabilir. Doğuran fonksiyonun e tabanına göre logaritması alınırsa

$$\ln g(x,t) = -\frac{1}{2}\ln(1-2xt+t^2) \tag{I.16.2}$$

bağıntısı bulunur. (I.16.2) bağıntısının her iki yanının x değişkenine göre kısmî türevi alınırsa

$$\frac{1}{g}\,\frac{\partial g}{\partial x} = \frac{t}{1-2xt+t^2}$$

veyâ

$$(1-2xt+t^2)\frac{\partial g}{\partial x} - tg = 0 \tag{I.16.3}$$

bulunur. (I.16.1) bağıntısından yararlanarak g ve $\partial g/\partial x$ in LEGENDRE polinomları ve türevleri cinsinden açılımları (I.16.3) bağıntısında yerlerine yazıldığı takdirde bu bağıntıyı özdeş olarak sağlamalıdır. Gerekli işlemler yapılırsa :

$$(1-2xt+t^2)\sum_l P'_l\, t^l - t\sum_l P_l\, t^l = 0$$

$$\sum_l P'_l\, t^l - 2x\sum_l P'_l\, t^{l+1} + \sum_l P'_l\, t^{l+2} - \sum_l P_l\, t^{l+1} = 0$$

$$\sum_l P'_{l+1}\, t^{l+1} - 2x\sum_l P'_l\, t^{l+1} + \sum_l P'_{l-1}\, t^{l+1} - \sum_l P_l\, t^{l+1} = 0$$

$$\sum_l (P'_{l+1} - 2x\,P'_l + P'_{l-1} - P_l)\, t^{l+1} = 0 \tag{I.16.4}$$

sonucuna varılır. Bu özdeşlik LEGENDRE polinomlarının arasındaki

$$P'_{l+1} + P'_{l-1} = 2x\,P'_l + P_l \tag{I.16.5}$$

türevli rekürans bağıntısını verir. (I.16.2) bağıntısının her iki yanının t değişkenine göre kısmî türevi alınırsa

$$\frac{1}{g}\,\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{x-t}{1-2xt+t^2}$$

veyâ

$$(1 - 2xt + t^2)\frac{\partial g}{\partial t} + (t - x)\, g = 0 \tag{I.16.6}$$

bulunur. (I.16.1) bağıntısından yararlanarak g ve $\partial g/\partial t$ nin LEGENDRE polinomları cinsinden açılımları (I.16.6) bağıntısında yerlerine yazılır ve gerekli işlemler yapılırsa:

$$(1 - 2xt + t^2)\sum_l lP_l\, t^{l-1} + (t - x)\sum_l P_l\, t^l = 0$$

$$\sum_l lP_l\, t^{l-1} - 2x\sum_l lP_l\, t^l + \sum_l lP_l\, t^{l+1} + \sum_l P_l\, t^{l+1} - x\sum_l P_l\, t^l = 0$$

$$\sum_l lP_l\, t^{l-1} - x\sum_l (2l+1)\, P_l\, t^l + \sum_l (l+1)\, P_l\, t^{l+1} = 0$$

$$\sum_l (l+1)\, P_{l+1}\, t^l - x\sum_l (2l+1)\, P_l\, t^l + \sum_l lP_{l-1}\, t^l = 0$$

$$\sum_l [(l+1)\, P_{l+1} - (2l+1)\, x\, P_l + l\, P_{l-1}]\, t^l \equiv 0 \tag{I.16.7}$$

sonucuna varılır. Bu özdeşlik LEGENDRE polinomlarının arasındaki

$$(l+1)\, P_{l+1} + lP_{l-1} = (2l+1)\, x\, P_l \tag{I.16.8}$$

türevsiz rekürans bağıntısını verir. Biribirlerinden bağımsız olan (I.16.5) ve (I.16.8) rekürans bağıntılarından, biribirlerinden bağımsız olmayan fakat ifâdeleri daha sâde olan rekürans bağıntıları bulunabilir.

(I.16.8) bağıntısının her iki yanının türevi alınıp 2 ile çarpılırsa

$$2\,(l+1)\, P'_{l+1} + 2l\, P'_{l-1} = 2\,(2l+1)\, P_l + 2\,(2l+1)\, x\, P'_l$$

bulunur. Öte yandan, (I.16.5) bağıntısının her iki yanı $(2l + 1)$ ile çarpılırsa

$$(2l+1)\, P'_{l+1} + (2l+1)\, P'_{l-1} = (2l+1)\, P_l + 2\,(2l+1)\, x\, P'_l$$

bulunur. Son iki bağıntı taraf tarafa çıkarılırsa

$$P'_{l+1} - P'_{l-1} = (2l+1)\, P_l \tag{I.16.9}$$

sonucuna varılır. (I.16.5) ve (I.16.9) bağıntılarından P'_{l+1} ve P'_{l-1} çözülürse

$$P'_{l+1} = x\, P'_l + (l+1)\, P_l \tag{I.16.10}$$

ve

$$P'_{l-1} = x\, P'_l - l\, P_l \tag{I.16.11}$$

bağıntıları elde edilir. (I.16.10) bağıntısında l yerine $l - 1$ ve (I.16.11) bağıntısında da l yerine $l + 1$ yazılırsa

$$P_l' = x\, P_{l-1}' + l\, P_{l-1}$$

ve

$$P_l' = x\, P_{l+1}' - (l+1)\, P_{l+1}$$

bulunur. Bu bağıntılar (I.16.10) ve (I.16.11) bağıntılarından yararlanarak

$$P_l' = x\,(x\, P_l' - l\, P_l) + l\, P_{l-1}$$

ve

$$P_l' = x\,[x\, P_l' + (l+1)\, P_l] - (l+1)\, P_{l+1}$$

veyâ

$$(1 - x^2)\, P_l' = l\,(P_{l-1} - x\, P_l) \tag{I.16.12}$$

ve

$$(1 - x^2)\, P_l' = (l+1)\,(x\, P_l - P_{l+1}) \tag{I.16.13}$$

şekillerinde yazılabilir.

(I.16.12) bağıntısının her iki yanının türevi alınırsa

$$[(1 - x^2)\, P_l']' = l\,(P_{l-1}' - x\, P_l' - P_l)$$

bulunur. (I.16.11) bağıntısını kullanarak

$$[(1 - x^2\, P_l']' = l\,(-\,l\, P_l - P_l)$$

veyâ

$$[(1 - x^2)\, P_l']' + l\,(l+1)\, P_l = 0 \tag{I.16.14}$$

sonucuna varılır. (I.16.13) bağıntısından da (I.16.10) bağıntısının yardımı ile aynı sonuç elde edilebilir. (I.16.14) bağıntısı

$$(1 - x^2)\, P_l'' - 2x\, P_l' + l\,(l+1)\, P_l = 0 \tag{I.16.14a}$$

şeklinde de yazılabilir ve LEGENDRE polinomlarının (I.15.12a) bağıntısı ile verilen diferansiyel denklemidir.

(I.17) LEGENDRE POLİNOMLARININ PARİTESİ VE $x = \pm 1$, 0 İÇİN ALDIĞI DEĞERLER

LEGENDRE polinomlarının doğuran fonksiyonunda x yerine $-x$ ve t yerine $-t$ yazılırsa fonksiyonun değeri değişmez e

$$g(x,t) = g(-x,-t) = [1 - 2(-x)(-t) + (-t)^2]^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(-x)\,(-t)^l \tag{I.17.1}$$

yazılabilir. (I.17.1) bağıntısı (I.16.1) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$\sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l P_l(-x)\, t^l = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x)\, t^l$$

yazılabilir ve böylece

$$(-1)^l P_l(-x) = P_l(x)$$

veyâ

$$P_l(-x) = (-1)^l P_l(x) \tag{I.17.2}$$

sonucuna varılır. Bu sonuç LEGENDRE polinomlarının *paritesini* belirlemeyi sağlar. Yâni, l bir çift tamsayı ise LEGENDRE polinomu bir *çift fonksiyon* ve l bir tek tamsayı ise LEGENDRE polinomu bir *tek fonksiyon*dur.

(I.16.1) bağıntısında $x = 1$ yazılırsa

$$\frac{1}{(1-2t+t^2)^{1/2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(1)\, t^l \tag{1.7.I.3a}$$

bulunur. Öte yandan,

$$\frac{1}{(1-2t+t^2)^{1/2}} \equiv \frac{1}{1-t} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l \tag{I.17.3b}$$

olduğunu biliyoruz. (I.17.3a) bağıntısı (I.17.3b) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$P_l(1) = 1 \tag{I.17.4}$$

sonucuna varılır. (I.16.1) bağıntısında şimdi de $x = -1$ yazılırsa

$$\frac{1}{(1+2t+t^2)^{1/2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(-1)\, t^l \tag{I.17.5a}$$

bulunur. Öte yandan,

$$\frac{1}{(1+2t+t^2)^{1/2}} \equiv \frac{1}{1+t} = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l t^l \tag{I.17.5b}$$

olduğunu biliyoruz. (I.17.5a) bağıntısı (I.17.5b) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$P_l(-1) = (-1)^l \tag{I.17.6}$$

sonucuna varılır. Eğer (I.17.2) bağıntısında $x = 1$ yazılırsa ve sonra (I.17.4) bağıntısı kullanılırsa

$$P_l(-1) = (-1)^l P_l(1) = (-1)^l$$

elde edilir, yâni (I.17.6) bağıntısı tekrar bulunur.

(I.16.1) bağıntısında $x = 0$ yazılırsa

$$\frac{1}{(1+t^2)^{1/2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(0)\, t^l \tag{I.17.7a}$$

bulunur. Öte yandan,

$$(1+t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}\, t^{2n} \tag{I.17.7b}$$

olduğunu biliyoruz. (I.17.7a) bağıntısı (I.17.7b) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$l = 2n+1 \quad \text{için} \quad P_{2n+1}(0) = 0 \tag{I.17.8a}$$

ve

$$l = 2n \quad \text{için :} \quad P_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} \tag{I.17.8b}$$

sonuçlarına varılır. Eğer (I.17.2) bağıntısında $l = 2n+1$ ve $x = 0$ yazılırsa (I.17.8a) bağıntısı tekrar bulunur.

(I.18) LEGENDRE POLİNOMLARININ DİKLİK VE NORMLAMA BAĞINTILARI

LEGENDRE polinomlarına ait (I.15.12) bağıntısı ile verilen

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l}{dx}\right] + l(l+1)\,P_l = 0 \tag{I.18.1}$$

diferansiyel denkleminin her iki yanını P_n ile çarpalım ve $-1 \leqq x \leqq 1$ değişim aralığında integre edelim :

$$\int_{-1}^{1} \left\{P_n \frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l}{dx}\right] + l(l+1)\,P_n\,P_l\right\} dx = 0 \tag{I.18.2}$$

elde edilir. Bu bağıntının sol yanındaki birinci terim kısmî integrasyon metodu ile integre edilirse

$$\int_{-1}^{1} P_n \frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l}{dx}\right] dx = \left[(1-x^2)\,P_n \frac{dP_l}{dx}\right]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} (1-x^2)\frac{dP_l}{dx}\frac{dP_n}{dx}\, dx$$

bulunur. Sağ yandaki ilk terim sıfırdır. Bu sonuç (I.18.2) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\int_{-1}^{1} (1 - x^2) \frac{dP_l}{dx} \frac{dP_n}{dx} dx = l(l+1) \int_{-1}^{1} P_n P_l \, dx \tag{I.18.3a}$$

edilir. (I.18.3a) bağıntısının her iki yanında l yerine n ve n yerine de l yazılırsa

$$\int_{-1}^{1} (1 - x^2) \frac{dP_n}{dx} \frac{dP_l}{dx} dx = n(n+1) \int_{-1}^{1} P_l P_n \, dx \tag{I.18.3b}$$

bulunur. (I.18.3a) ve (I.18.3b) bağıntıları tarafa tarafa çıkarılırsa

$$[l(l+1) - n(n+1)] \int_{-1}^{1} P_l P_n \, dx = 0$$

veyâ

$$(l - n)(l + n + 1) \int_{-1}^{1} P_l P_n \, dx = 0 \tag{I.18.4}$$

sonucuna varılır. (I.18.4) bağıntısından

$$l \neq n \quad \text{için} \quad \int_{-1}^{1} P_l P_n \, dx = 0 \tag{I.18.5a}$$

bulunur. Bu bağıntıya LEGENDRE polinomlarının *diklik bağıntısı* adı verilir. Öte yandan, (I.18.4) bağıntısından

$$l = n \quad \text{için :} \quad \int_{-1}^{1} [P_l(x)]^2 \, dx = \gamma_l \neq 0 \tag{I.18.5b}$$

elde edilir. Bu bağıntıya da LEGENDRE polinomlarının *normlama bağıntısı* adı verilir. (I.18.5a) ve (I.18.5b) bağıntılarının ikisi bir arada

$$\int_{-1}^{1} P_l(x) \, P_n(x) \, dx = \gamma_l \, \delta_{ln} \tag{I.18.5c}$$

şeklinde yazılabilir. Bu son bağıntıya da LEGENDRE polinomlarının *ortonormallik bağıntısı* adı verilir.

Şimdi (I.18.5c) bağıntısındaki γ_l sâbitini l cinsinden tâyin edelim Bu maksatla (I.16.1) bağıntısının her iki yanının karesi alınırsa

$$\frac{1}{1 - 2xt + t^2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) \, t^l \sum_{l=0}^{\infty} P_n(x) \, t^n = \sum_l \sum_n P_l(x) \, P_n(x) \, t^{l+n}$$

bulunur. Bu bağıntının her iki yanı $[-1, 1]$ aralığında x değişkenine göre integre edilirse (I.18.5c) bağıntısının yardımı ile

$$\int_{-1}^{1} \frac{dx}{1-2xt+t^2} = \sum_l \sum_n t^{l+n} \int_{-1}^{1} P_l(x)\, P_n(x)\, dx$$

$$= \sum_l \sum_n t^{l+n} \gamma_l\, \delta_{ln}$$

$$= \sum_l \gamma_l\, t^{2l} \tag{I.18.6}$$

elde edilir. (I.18.6) bağıntısının sol yanındaki integralde $y = 1 - 2x\,t + t^2$ bağıntısı ile tanımlanan değişken dönüşümü yapılırsa, $dy = -2t\,dx$ olur ve integralin yeni sınırları da :

$$x = -1 \text{ için } y = (1+t)^2 \quad \text{ve} \quad x = 1 \text{ için } y = (1-t)^2$$

değerlerini alır O hâlde, söz konusu integralin değeri

$$\int_{-1}^{1} \frac{dx}{1-2xt+t^2} = \frac{1}{2t} \int_{(1-t)^2}^{(1+t)^2} \frac{dy}{y}$$

$$= \frac{1}{2t} \Big[\ln y \Big]_{(1-t)^2}^{(1+t)^2}$$

$$= \frac{1}{2t}\, ln \frac{(1+t)^2}{(1-t)^2} = \frac{1}{t}\, ln \left(\frac{1+t}{1-t} \right) \tag{I.18.7}$$

olarak bulunur. (I.18.7) bağıntısının sağ yanı t nin kuvvetlerine göre seriye açılırsa

$$\frac{1}{t}\, ln \left(\frac{1+t}{1-t} \right) = 2\left(1 + \frac{t^2}{3} + \frac{t^4}{5} + \frac{t^6}{7} + \dots\right) = 2 \sum_{l=0}^{\infty} \frac{t^{2l}}{2l+1} \tag{I.18.8}$$

elde edilir. (I.18.6), (I.18.7) ve (I.18.8) bağıntıları karşılaştırılırsa

$$\sum_{l=0}^{\infty} \gamma_l\, t^{2l} \equiv 2 \sum_{l=0}^{\infty} \frac{t^{2l}}{2l+1} \tag{I.18.9}$$

özdeşliği elde edilir ve böylece

$$\gamma_l = \frac{2}{2l+1} \tag{I.18.10}$$

sonucuna varılır. O halde, (I.18.5c) bağıntısı ile verilen LEGENDRE polinomlarının ortonormallik bağıntısı

$$\int_{-1}^{1} P_l(x)\, P_n(x)\, dx = \frac{2}{2l+1}\, \delta_{ln},$$

şeklini alır.

(I.19) LEGENDRE POLİNOMLARININ GENEL İFÂDESİNİ VEREN RODRİGUES FORMÜLÜ

x bağımsız değişkeninin $u(x)$ ve $v(x)$ gibi iki fonksiyonunun çarpımının n inci mertebeden türevini veren LEİBNİTZ formülü

$$(uv)^{(n)} = u^{(n)}\, v + C_n^1\, u^{(n-1)}\, v' + C_n^2\, u^{(n-2)}\, v'' + \dots$$
$$\dots + C_n^p\, u^{(n-p)}\, v^{(p)} + \dots + u\, v^{(n)}$$

şeklindedir. Burada C_n^p katsayıları n şeyin p şer p şer kombinezonlarının sayısı olup

$$C_n^p \equiv \binom{n}{p} = \frac{n!}{p!\,(n-p)!} = \frac{1}{p!}\, n(n-1)(n-2)\dots(n-p+1) \tag{I.19.2}$$

bağıntısı ile belirlidir. $C_n^0 = C_n^n = 1$ dir ve öbür katsayılar

$$C_l^1 = l, \quad C_l^2 = \frac{1}{2}\, l(l-1), \quad C_l^3 = \frac{1}{6}\, l\,(l-1)\,(l-2), \dots \tag{I.19.3}$$

şeklindedir. Buna göre

$$(u\, v)^{(l)} = u^{(l)}\, v + l\, u^{(l-1)}\, v' + \frac{1}{2}\, l\,(l-1)\, u^{(l-2)}\, v'' + \dots \tag{I.19.4}$$

yazılabilir. (I.19.4) bağıntısında önce l yerine $l+1$ ve sonra u yerine u' yazarak

$$\left.\begin{aligned} (uv)^{(l+1)} &= u^{(l+1)}\, v + (l+1)\, u^{(l)}\, v' + \frac{1}{2}\, l\,(l+1)\, u^{(l-1)}\, v'' + \dots \\ (u'v)^{(l+1)} &= u^{(l+2)}\, v + (l+1)\, u^{(l+1)}\, v' + \frac{1}{2}\, l\,(l+1)\, u^{(l)}\, v'' + \dots \end{aligned}\right\} \tag{I.19.5}$$

bağıntıları elde edilir. (I.19.5) bağıntılarının birincisinde

$$v = x, \quad v' = 1, \qquad v'' = 0$$

ve ikincisinde de

$$v = 1 - x^2, \qquad v' = -2x, \qquad v'' = -2, \qquad v''' = 0$$

yazılırsa

$$\left.\begin{aligned}(xu)^{(l+1)} &= x\,u^{(l+1)} + (l+1)\,u^{(l)}\\ [(1-x^2)\,u']^{(l+1)} &= (1-x^2)\,u^{(l+2)} - 2\,(l+1)\,x\,u^{(l+1)} - l\,(l+1)\,u^{(l)}\end{aligned}\right\} \quad (I.19.6)$$

sonuçlarına varılır. Şimdi de u fonksiyonu

$$u = (x^2 - 1) \qquad (I.19.7)$$

şeklinde seçilirse türev alarak

$$u' = 2x\,l\,(x^2-1)^{l-1}$$

bulunur. Bu bağıntının her iki yanı $1 - x^2$ ile çarpılırsa (I.19.7) bağıntısının yardımı ile

$$(1-x^2)\,u' = -\,2l\,x\,(x^2-1)^l = -\,2l\,xu$$

veyâ

$$(1-x^2)\,u' + 2l\,xu = 0 \qquad (I.19.8)$$

bulunur. (I.19.8) bağıntısının her iki yanının $l+1$ inci mertebeden türevi alınırsa

$$[(1-x^2)\,u' + 2l\,xu]^{(l+1)} = 0$$

veyâ

$$[(1-x^2)\,u']^{(l+1)} + 2l\,(xu)^{(l+1)} = 0 \qquad (I.19.9)$$

elde edilir. (I.19.9) bağıntısında (I.19.6) bağıntıları yerlerine yazılırsa

$$\begin{aligned}(1-x^2)\,u^{(l+2)} - 2\,(l+1)\,x\,u^{(l+1)} - l\,(l+1)\,u^{(l)}&\\ + 2\,lx\,u^{(l+1)} + 2l\,(l+1)\,u^{(l)} &= 0\end{aligned}$$

veyâ

$$(1-x^2)\,u^{(l+2)} - 2x\,u^{(l+1)} + l\,(l+1)\,u^{(l)} = 0 \qquad (I.19.10)$$

sonucuna varılır. Bu son bağıntıda

$$P_l\,(x) = \frac{1}{2^l\,l!}\,u^{(l)} \qquad (I.19.11)$$

yazılırsa

$$(1-x^2)\,P_l'' - 2x\,P_l' + l\,(l+1)\,P_l = 0 \qquad (I.19.12)$$

elde edilir. (I.19.12) bağıntısı LEGENDRE polinomlarını veren diferansiyel denklem olduğu için (I.19.11) bağıntısı bu polinomları veren genel ifâdedir. (I.19.7) bağıntısının yardımı ile (I.19.11) bağıntısı sonuç olarak

$$P_l\,(x) = \frac{1}{2^l\,l!}\,\frac{d^l}{dx^l}\,(x^2-1)^l \qquad (I.19.13)$$

şeklinde yazılabilir ve bu sonuca RODRİGUES formülü adı verilir.

RODRIGUES formülü ve (I.16.8) ile verilen

$$P_{l+1} = \frac{1}{l+1}\left[(2l+1)\, x\, P_l - l P_{l-1}\right] \qquad \text{(I.19.14)}$$

şeklindeki türevsiz rekürans bağıntısı aracılığı ile LEGENDRE polinomları hesaplanabilir. $l = 0$ için

$$P_0(x) = C = \text{sâbit} \qquad \text{(I.19.15a)}$$

yazılabilir. (I.17.4) bağıntısına göre

$$P_l(1) = 1$$

olduğu için C sâbiti belirlenebilir ve

$$P_0(x) = P_0(1) = 1 \qquad \text{(I.19.15b)}$$

bulunur. Gerçekten RODRİGUES formülü de $l = 0$ için

$$P_0(x) = \frac{1}{2^0\, 0!}\, 1 = 1 \qquad \text{(I.19.15c)}$$

sonucunu verir. $l = 1$ için RODRİGUES formülü

$$P_1(x) = \frac{1}{2}\, \frac{d}{dx}(x^2 - 1) = \frac{1}{2}\, 2x = x \qquad \text{(I.19.16)}$$

sonucunu verir. Bu sonuç $P_1(1) = 1$ şartını sağlar. $l = 2$ için RODRİGUES formülü

$$\begin{aligned} P_2(x) &= \frac{1}{2^2\, 2!}\, \frac{d^2}{dx^2}(x^4 - 2x^2 + 1) \\ &= \frac{1}{8}\, \frac{d}{dx}(4x^3 - 4x) \\ &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \end{aligned} \qquad \text{(I.19.17a)}$$

sonucunu verir. Bu sonuç $P_2(1) = 1$ şartını sağlar $l > 2$ için LEGENDRE polinomları (I.19.14) bağıntısı ile daha kolay hesaplanabilir. $P_2(x)$ için söz konusu bağıntıda $l = 1$ yazılmalıdır. Böylece

$$P_2 = \frac{1}{2}(3x\, P_1 - P_0) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \qquad \text{(I.19.17b)}$$

bağıntısı tekrar bulunur. $P_3(x)$ için (I.19.14) bağıntısında $l = 2$ yazarak

$$P_3 = \frac{1}{3}(5x\,P_2 - 2P_1)$$

$$= \frac{1}{3}\left[\frac{5}{2}\,x\,(3x^2 - 1) - 2x\right]$$

$$= \frac{x}{6}\,[5\,(3x^2 - 1) - 4]$$

$$= \frac{x}{6}\,(15\,x^2 - 9)$$

$$= \frac{1}{2}\,(5x^3 - 3x)$$

sonucuna varılır. Böylece, LEGENDRE polinomları istenilen dereceye kadar hesaplanabilir. Beşinci dereceye kadar olan LEGENDRE polinomlarının listesi aşağıdadır :

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = x$$

$$P_2 = \frac{1}{2}\,(3x^3 - 1)$$

$$P_3 = \frac{1}{2}\,(5x^3 - 3x) \qquad \text{(I.19.19)}$$

$$P_4 = \frac{1}{8}\,(35\,x^4 - 30\,x^2 + 3)$$

$$P_5 = \frac{1}{8}\,(63\,x^5 - 70\,x^3 + 15\,x)$$

(I.19.19) bağıntılarının hepsi de $P_l\,(-x) = (-1)^l\,P_l\,(x)$, $P_l\,(1) = 1$ ve $P_l(-1) = (-1)^l$ bağıntılarını gerçekler.

(I.20) ASOSYE LEGENDRE FONKSİYONLARININ LEGENDRE POLİNOMLARI CİNSİNDFN İFÂDESİ

Paragraf (I.15) te tanımlanan $P_l^m\,(x)$ asosye LEGENDRE fonksiyonlarının $P_l\,(x)$ LEGENDRE polinomları cinsinden bir ifâdesi bulunabilir. Söz konusu bağıntının bulunabilmesi için LEGENDRE polinomlarını veren

$$(1 - x^2)\,P_l'' - 2x\,P_l' + l\,(l + 1)\,P_l = 0 \qquad \text{(I.20.1)}$$

diferansiyel denklemi asosye LEGENDRE fonksiyonlarını veren diferansiyel denkleme dönüştürülmelidir.

$$u = P_l(x) \tag{I.20.2}$$

vaz edilirse (I.20.1) denklemi

$$(1 - x^2)\, u'' - 2x\, u' + l(l+1)\, u = 0 \tag{I.20.3}$$

şeklinde yazılabilir. Eğer $\mu = |m|$ vaz edilirse $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$ için $\mu = 0, 1, 2, 3, \ldots$ elde edilir. Şimdi (I.20.1) denkleminin her iki yanının μ nüncü mertebeden türevini alalım :

$$[(1 - x^2)\, u'']^{(\mu)} - 2\,(xu')^{(\mu)} + l(l+1)\, u^{(\mu)} = 0 \tag{I.20.4}$$

bulunur. Öte yandan, (I.19.4) bağıntısı ile verilen LEİBNİTZ formülünün aracılığı ile

$$\left.\begin{aligned} (u''\,v)^{(\mu)} &= u^{(\mu+2)}\, v + \mu\, u^{(\mu+1)}\, v' + \frac{1}{2}\,\mu\,(\mu - 1)\, u^{(\mu)}\, v'' + \ldots \\ (u'\,v)^{(\mu)} &= u^{(\mu+1)}\, v + \mu\, u^{(\mu)}\, v' + \frac{1}{2}\,\mu\,(\mu - 1)\, u^{(\mu-1)}\, v'' + \ldots \end{aligned}\right\} \tag{I.20.5}$$

bağıntıları yazılabilir. (I.20.5) bağıntılarından birincisinde

$$v = 1 - x^2\,, \quad v' = -2x, \quad v'' = -2, \quad v''' = 0$$

ve ikincisinde de

$$v = x, \quad v' = 1, \quad v'' = 0$$

yazılırsa

$$\left.\begin{aligned} [(1 - x^2)\, u'']^{(\mu)} &= (1 - x^2)\, u^{(\mu+2)} - 2\mu\, x\, u^{(\mu+1)} - \mu\,(\mu - 1)\, u^{(\mu)} \\ (xu')^{(\mu)} &= x\, u^{(\mu+1)} + \mu\, u^{(\mu)} \end{aligned}\right\} \tag{I.20.6}$$

sonuçlarına varılır. (I.20.4) bağıntısında (I.20.6) bağıntıları yerlerine yazılırsa

$$\begin{aligned} (1 - x^2)\, u^{(\mu+2)} - 2\mu\, x\, u^{(\mu+1)} - \mu\,(\mu - 1)\, u^{(\mu)} \\ - 2x\, u^{(\mu+1)} - 2\mu\, u^{(\mu)} + l(l+1)\, u^{(\mu)} = 0 \end{aligned}$$

veyâ

$$(1-x^2)\, u^{(\mu+2)} - 2\,(\mu+1).x\, u^{(\mu+1)} + [l\,(l+1) - \mu\,(\mu+1)]\, u^{(\mu)} = 0 \tag{I.20.7}$$

sonucuna varılır. Bu son bağıntıda (I.20.2) den yararlanarak

$$w = u^{(\mu)} = \frac{d^{|m|}\, P_l}{dx^{|m|}} \tag{I.20.8}$$

yazılırsa

$$(1 - x^2)\, w'' - 2\,(\mu + 1)\, xw' + [l\,(l+1) - \mu\,(\mu + 1)]\, w = 0 \tag{I.20.9}$$

elde edilir. Bu denklem $P_l^m(x)$ fonksiyonlarını veren (I.15.9) denkleminden farklıdır.

Şimdi de (I.15.9) denklemini elde edebilmek amacı ile

$$f = P_l^m(x) = (1 - x^2)^{\mu/2}\, w = (1 - x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|} P_l}{dx^{|m|}} \qquad \text{(I.20.10)}$$

fonksiyon dönüşümünü yapalım. (I.20.10) bağıntısından

$$w = \frac{f}{(1 - x^2)^{\mu/2}} \qquad \text{(I.20.11)}$$

bulunur. (I.20.11) bağıntısının her iki yanının e tabanına göre logaritması alınırsa

$$\ln w = \ln f - \frac{\mu}{2} \ln(1 - x^2) \qquad \text{(I.20.12)}$$

elde edilir. (I.20.12) bağıntısının her iki yanının x değişkenine göre türevi alınırsa

$$\frac{w'}{w} = \frac{f'}{f} + \frac{\mu x}{1 - x^2} \qquad \text{(I.20.13)}$$

sonucuna varılır. (I.20.13) bağıntısının her iki yanının tekrar türevi alınırsa

$$\frac{w''}{w} - \frac{w'^2}{w^2} = \frac{f''}{f} - \frac{f'^2}{f^2} + \frac{\mu}{1 - x^2} + \frac{2\mu x^2}{(1 - x^2)^2}$$

bulunur. (I.20.13) bağıntısının her iki yanının karesi alınırsa bu kez

$$\frac{w'^2}{w^2} = \frac{f'^2}{f^2} + \frac{2\mu x}{1 - x^2} \frac{f'}{f} + \frac{\mu^2 x^2}{(1 - x^2)^2}$$

bulunur. Son iki bağıntı taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{w''}{w} = \frac{f''}{f} + \frac{2\mu x}{1 - x^2} \frac{f'}{f} + \frac{\mu}{1 - x^2} + \frac{\mu(\mu + 2) x^2}{(1 - x^2)^2} \qquad \text{(I.20.14)}$$

sonucuna varılır. (I.20.9) bağıntısının her iki yanı $(1 - x^2)\, w$ çarpımına bölünürse

$$\frac{w''}{w} - \frac{2(\mu + 1) x}{1 - x^2} \frac{w'}{w} + \frac{l(l + 1)}{1 - x^2} - \frac{\mu(\mu + 1)}{1 - x^2} = 0 \qquad \text{(I.20.9a)}$$

elde edilir. (I.20.13) ve (I.20.14) bağıntıları (I.20.9a) bağıntısında yerlerine yazılır ve gerekli sâdeleştirmeler yapılırsa:

$$\frac{f''}{f}+\frac{2\mu x}{1-x^2}\frac{f'}{f}+\frac{\mu}{1-x^2}+\frac{\mu(\mu+2)x^2}{(1-x^2)^2}-$$

$$-\frac{2(\mu+1)x}{1-x^2}\frac{f'}{f}-\frac{2\mu(\mu+1)x^2}{(1-x^2)^2}+\frac{l(l+1)}{1-x^2}-\frac{\mu(\mu+1)}{1-x^2}=0$$

$$\frac{f''}{f}-\frac{2x}{1-x^2}\frac{f'}{f}-\frac{\mu^2 x^2}{(1-x^2)^2}+\frac{l(l+1)}{1-x^2}-\frac{\mu^2}{1-x^2}=0$$

$$\frac{f''}{f}-\frac{2x}{1-x^2}\frac{f'}{f}+\frac{l(l+1)}{1-x^2}-\frac{\mu^2}{(1-x^2)^2}=0 \qquad \text{(I.20.15)}$$

sonucuna varılır. (I.20.15) bağıntısının her iki yanı $(1-x^2)\,f$ çarpımı ile çarpılırsa ve $\mu^2=|m|^2=m^2$ yazılırsa

$$(1-x^2)f''-2xf'+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]f=0 \qquad \text{(I.20.15a)}$$

elde edilir. (I.20.15a) bağıntısında $f=P_l^m$ yazılırsa

$$(1-x^2)\frac{d^2P_l^m}{dx^2}-2x\frac{dP_l^m}{dx}+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]P_l^m=0 \qquad \text{(I.20.15b)}$$

veyâ

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l^m}{dx}\right]+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]P_l^m=0 \qquad \text{(I.20.16)}$$

sonucuna varılır. (I.20.16) denklemi (I.15.9) denkleminden ibarettir. O hâlde (I.20.10) bağıntısı aranılan bağıntıdır.

(I.20.10) bağıntısı $m>0$ için

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m P_l}{dx^m} \qquad \text{(I.20.17)}$$

şeklinde yazılabilir. Öte yandan, $m>0$ için $P_l^m(x)$ fonksiyonu (I.20.16) denkleminin bir çözümü ise $P_l^{-m}(x)$ de sâbit bir çarpan farkı ile aynı denklemin bir çözümüdür. Bu iki çözüm arasındaki bağıntının

$$P_l^{-m}=(-1)^m\frac{(l-m)!}{(l+\mathrm{m})!}P_l^m \qquad \text{(I.20.18)}$$

olduğu konu ile ilgili kitaplarda ispat edilmiştir. (I.20.17) bağıntısındaki türevin m mertebesi P_l polinomunun l derecesinden daha küçük olmalı veyâ en fazla ona eşit olmalıdır :

$$|m| \leqq l \quad \text{veyâ} \quad -l \leqq m \leqq l \tag{I.20.19}$$

Eğer bu şart gerçekleşmezse P_l^m fonksiyonu sıfır olur. Gene konu ile ilgili kitaplarda asosye LEGENDRE fonksiyonlarına ait normlama bağıntısının

$$\int_{-1}^{1} [P_l^m(x)]^2\, dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \tag{I.20.20}$$

şeklinde olduğu ve ortonormallik bağıntısının da

$$\int_{-1}^{1} P_l^m(x)\, P_{l'}^m(x)\, dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \tag{I.20.21}$$

şeklinde olduğu gösterilmiştir. (I.20.21) bağıntısı $m = 0$ için (I.18.11) bağıntısına indirgenir. LEGENDRE polinomlarına ait (I.19.13) ile verilen RODRİGUES formülü (I.20.17) bağıntısında yerine yazılırsa asosya LEGENDRE fonksiyonlarına ait RODRİGUES formülü elde edilir :

$$P_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l\, l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \tag{I.20.22}$$

(I.20.22) bağıntısında (I.20.19) şartından ötürü $m < 0$ olabilir. $l = 1$ ve $l = 2$ için (I.20.22) bağıntısı

$$P_1^1(x) = (1-x^2)^{1/2} = \sin\theta \tag{I.20.23}$$

$$\left.\begin{aligned} P_2^1(x) &= 3x\,(1-x^2)^{1/2} = 3\cos\theta\sin\theta \\ P_2^2(x) &= 3\,(1-x^2) = 3\sin^2\theta \end{aligned}\right\} \tag{I.20.23a}$$

sonuçlarını verir. (I.19.19) ve (I.20.17) bağıntılarından da bu sonuçlar bulunabilir.

(I.21) KÜRESEL HARMONİK

(I.10.14) bağıntısına göre yörünge açısal momentumu vektör operatörünün L_z kartezyen bileşeninin küresel koordinatlar cinsinden ifâdesi

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{I.21.1}$$

şeklindedir. L_z operatörünün (I.15.10) bağıntısı ile verilen

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm}\, P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \tag{I.21.2}$$

küresel harmonik fonksiyonunun üzerindeki etkisini inceleyelim :

$$L_z Y_{lm} = N_{lm} P_l^m L_z e^{im\varphi}$$

$$= \frac{\hbar}{i} N_{lm} P_l^m \frac{\partial}{\partial\varphi} (e^{im\varphi})$$

$$= \hbar m N_{lm} P_l^m e^{im\varphi}$$

ve böylece

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{I.21.3}$$

sonucuna varılır. (I.21.3) bağıntısı Y_{lm} küresel harmonik fonksiyonunun L_z operatörünün $\hbar m$ özdeğerine ait bir özfonksiyonu olduğunu gösterir. Öte yandan (I.14.10) bağıntısı ile verilen

$$\mathbf{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{I.21.4}$$

özdeğer bağıntısı, (I.21.3) bağıntısı ile karşılaştırılırsa küresel harmoniğin $\mathbf{L}^2$ ve L_z operatörlerinin ortak özfonksiyonu olduğu anlaşılır. Bu sonuç $\mathbf{L}^2$ ve L_z operatörlerinin komütatif olmasından ötürüdür. Şüphesiz $\mathbf{L}^2$ operatörünün $\hbar^2 l(l+1)$ özdeğerleri ile L_z operatörünün $\hbar m$ özdeğerleri arasında (I.20.19) bağıntısı ile verilen

$$-l \leqq m \leqq l \tag{I.21.5}$$

şeklinde bir ilişki vardır. l kuvantum sayısına *yörünge açısal momentumu kuvantum sayısı* adı verilir ve

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

değerlerini alır. m kuvantum sayısına da *magnetik kuvantum sayısı* veyâ *izdüşüm kuvantum sayısı* adı verilir ve belirli bir l için

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots, \pm l$$

şeklinde $2l+1$ farklı değer alır.

Küresel harmonik

$$\iint\limits_{(4\pi)} Y_{lm}^* Y_{l'm'} \, d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \tag{I.21.6}$$

şeklindeki ortonormallik bağıntılarını sağlar. Burada $d\Omega$ katı açı elemanıdır ve küresel koordinatlardaki ifâdesi

$$d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$$

şeklindedir. (I.21.6) daki integral 4π değerindeki katı açı üzerinden alınmıştır ve küresel koordinatlarda

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \tag{I.21.7}$$

şeklinde yazılabilir. Öte yandan (I.21.2) bağıntısından

$$Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = N_{l'm'}\, P_{l'}^{m'}(\cos\theta)\, e^{im'\varphi}$$
$$Y_{lm}^{*}(\theta, \varphi) = N_{lm}\, P_{l}^{m}(\cos\theta)\, e^{-im\varphi}$$

yazılabilir. Bu bağıntıların taraf tarafa çarpılması ile

$$Y_{lm}^{*}(\theta, \varphi)\, Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = N_{lm}\, N_{l'm'}\, P_{l}^{m}(\cos\theta)\, P_{l'}^{m'}(\cos\theta)\, e^{i(m'-m)\varphi}$$

elde edilir. Bu ifâdeyi (I.21.7) bağıntısında yerine yazarak.

$$N_{lm}\, N_{l'm'} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi}\, d\varphi \int_0^{\pi} P_{l}^{m}(\cos\theta)\, P_{l'}^{m'}(\cos\theta)\, \sin\theta\, d\theta = \delta_{ll'}\, \delta_{mm'} \qquad \text{(I.21.8)}$$

bulunur. Öte yandan,

$$m' = m \quad \text{için :} \quad \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi}\, d\varphi = \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi$$

ve

$$m' \neq m \quad \text{için :} \quad \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi}\, d\varphi = \frac{1}{i(m'-m)} \left[e^{i(m'-m)\varphi} \right]_0^{2\pi} = \frac{1-1}{i(m'-m)} = 0$$

bulunur. Bu iki bağıntı bir arada

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi}\, d\varphi = 2\pi\, \delta_{mm'} \qquad \text{(I.21.9)}$$

şeklinde yazılabilir. Asosye LEGENDRE fonksiyonlarının ortonormallik bağıntısı olan (I.20.21) bağıntısında $x = \cos\theta$ değişken dönüşümü yapılırsa

$$\int_0^{\pi} P_{l}^{m}(\cos\theta)\, P_{l'}^{m}(\cos\theta)\, \sin\theta\, d\theta = \frac{2}{2l+1}\, \frac{(l+m)!}{(l-m)!}\, \delta_{ll'} \qquad \text{(I.21.10)}$$

elde edilir (I.21.9) bağıntısı (I.21.8) bağıntısında yerine yazılırsa

$$N_{lm}\, N_{l'm'}\, 2\pi\, \delta_{mm'} \int_0^{\pi} P_{l}^{m}(\cos\theta)\, P_{l'}^{m'}(\cos\theta)\, \sin\theta\, d\theta = \delta_{ll'}\, \delta_{mm'}$$

elde edilir. Bu bağıntının her iki yanında $m' = m$ yazılırsa

$$2\pi\, N_{lm}\, N_{l'm} \int_0^{\pi} P_{l}^{m}(\cos\theta)\, P_{l'}^{m}(\cos\theta)\, \sin\theta\, d\theta = \delta_{ll'} \qquad \text{(I.21.11)}$$

bulunur. Şimdi de (I.21.10) bağıntısı (I.21.11) bağıntısında yerine yazılırsa

$$2\pi\, N_{lm}\, N_{l'm}\, \frac{2}{2l+1}\, \frac{(l+m)!}{(l-m)!}\, \delta_{ll'} = \delta_{ll'}$$

elde edilir. Bu bağıntının her iki yanında $l' = l$ yazılırsa

$$N_{lm}^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \tag{I.21.12}$$

sonucuna varılır. (I.21.12) bağıntısı (I.21.2) bağıntısında yerine yazılırsa normlanmış küresel harmoniğin

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+\mathrm{m})!}\right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \tag{I.21.13}$$

şeklindeki genel ifâdesi elde edilir.

(I.21.13) bağıntısında m yerine $-m$ yazılırsa

$$Y_{l,-m} = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}\right]^{1/2} P_l^{-m}\, e^{-im\varphi}$$

bulunur. Bu bağıntıda P_l^{-m} yerine (I.20.18) bağıntısı ile verilen değeri yazılırsa

$$Y_{l,-m} = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2} P_l^m\, e^{-im\varphi} \tag{I.21.14}$$

elde edilir. Öte yandan, (I.21.13) bağıntısının kompleks eşleniği alınırsa

$$Y_{lm}^* = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2} P_l^m\, e^{-im\varphi} \tag{I.21.15}$$

bulunur. (I.21.14) ve (I.21.15) bağıntıları karşılaştırılırsa

$$Y_{lm}^*(\theta, \varphi) = (-1)^m\, Y_{l,-m}(\theta, \varphi) \tag{I.21.16}$$

sonucuna varılır. (I.21.13) bağıntısından yararlanarak küresel harmoniklerin açık ifâdeleri yazılabilir. Aşağıda $l = 0, 1, 2$ için küresel harmoniklerin açık ifâdeleri verilmiştir :

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{I.21.17}$$

$$Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta, \qquad Y_{1,\pm1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \tag{I.21.18}$$

$$\left.\begin{aligned} Y_{2,0} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1), \qquad Y_{2,\pm1} &= \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \cos\theta \sin\theta\, e^{\pm 2i\varphi} \\ Y_{2,\pm2} &= \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi} \end{aligned}\right\} \tag{I.21.19}$$

Bu ifâdelerin hepsi (I.21.16) simetri bağıntılarını gerçekler.

I. BÖLÜME EK

LİNEER HARMONİK OSİLÂTÖR

(I.EK.1) LİNEER HARMONİK OSİLÂTÖR İÇİN BİR BOYUTLU SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMÜ

Kartezyen koordinatlarda zamana bağlı olmayan bir boyutlu SCHRÖDİNGER denklemi

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi = 0 \qquad \text{(I.EK.1.1)}$$

şeklinde yazılabilir. Lineer harmonik osilâtörün potansiyel enerjisi

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \qquad \text{(I.EK.1.2)}$$

bağıntısı ile tanımlandığı için (I.EK.1.1) denklemi

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \psi = 0 \qquad \text{(I.EK.1.3)}$$

şeklini alır. Burada ω lineer harmonik osilâtörün açısal frekansıdır. (I.EK.1.3) denklemini daha sâde bir şekilde yazabilmek için

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad \text{(I.EK.1.4)}$$

boyutsuz sâbit büyüklüğünü ve uzunluğun tersi boyutuna sâhip

$$\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \qquad \text{(I.EK.1.5)}$$

sâbitini tanımlayalım. Son iki bağıntının yardımı ile ε ve α sâbitleri arasında

$$\alpha^2 \varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \text{(I.EK.1.6)}$$

bağıntısının varlığı kolaylıkla gösterilebilir. (I.EK.1.3) denklemi

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2\right) \psi = 0$$

şeklinde yazılırsa (I.EK.1.5) ve (I.EK.1.6) bağıntılarının yardımı ile

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + (\alpha^2 \varepsilon - \alpha^4 x^2) \psi = 0$$

veyâ

$$\frac{1}{\alpha^2} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + (\varepsilon - \alpha^2 x^2) \psi = 0 \qquad \text{(I.EK.1.7)}$$

bağıntısı bulunur. Bu son bağıntıda x değişkeni

$$y = \alpha x \qquad \text{(I.EK.1.8)}$$

bağıntısının yardımı ile y boyutsuz değişkenine dönüştürülürse

$$dy = \alpha\, dx\,, \qquad dy^2 = \alpha^2 dx^2\,, \qquad y^2 = \alpha^2 x^2$$

olacağından (I.EK.1.7) denklemi

$$\frac{d^2 \psi}{dy^2} + (\varepsilon - y^2) \psi = 0 \qquad \text{(I.EK.1.9)}$$

veyâ

$$\frac{\psi''}{\psi} = y^2 - \varepsilon \qquad \text{(I.EK.1.9a)}$$

şeklini alır.

Şimdi (I.EK.1.9a) denkleminin $x \rightarrow \pm \infty$ veyâ $y \rightarrow \pm \infty$ için asimptotik çözümünü bulmaya çalışalım. Şüphesiz (I.EK.1.9a) denklemi $y \rightarrow \pm \infty$ için

$$\frac{\psi''}{\psi} \cong y^2 \qquad (y \rightarrow \pm \infty) \qquad \text{(I.EK.1.10)}$$

asimptotik şeklini alır. Bu denklemin $y \rightarrow \pm \infty$ için çözümünün

$$\psi \cong y^n e^{\pm \frac{1}{2} y^2} \qquad (y \rightarrow \pm \infty)$$

şeklinde olduğu gösterilebilir. Buradan n sonlu değere sâhip bir sâbittir. $y \rightarrow \pm \infty$ için ψ dalga fonksiyonunun sonlu değerler alabilmesi gerektiği için ancak

$$\psi \cong y^n e^{-\frac{1}{2} y^2} \qquad (y \rightarrow \pm \infty) \qquad \text{(I.EK.1.11)}$$

olabilir. Bu son bağıntının her iki yanının e tabanına göre logaritması alınırsa

$$\ln \psi \cong n \ln y - \frac{1}{2} y^2 \qquad \text{(I.EK.1.12)}$$

elde edilir. (I.EK.1.12) bağıntısının her iki yanının türevi alınırsa

$$\frac{\psi'}{\psi} \cong \frac{n}{y} - y \qquad \text{(I.EK.1.13)}$$

bulunur. (I.EK.1.13) bağıntısının tekrar türevi alınırsa

$$\frac{\psi''}{\psi} - \frac{\psi'^2}{\psi^2} \cong -\frac{n}{y^2} - 1$$

bağıntısı ve (I.EK.1.13) bağıntısının her iki yanının karesi alınırsa

$$\frac{\psi'^2}{\psi^2} \cong \frac{n^2}{y^2} - 2n + y^2$$

bağıntısı bulunur. Son iki bağıntı taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{\psi''}{\psi} \cong y^2 - (2n + 1) + \frac{n(n-1)}{y^2} \qquad \text{(I.EK.1.14)}$$

sonucuna varılır. (I.EK.1.14) bağıntısı $y \to \pm\infty$ için (I.EK.1.10) bağıntısını verir ve böylece (I.EK.1.11) bağıntısının asimptotik çözüm olduğu anlaşılır. (I.EK.1.14) bağıntısı (I.EK.1.9a) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$y \to \pm\infty \quad \text{için} \quad \varepsilon \cong 2n + 1 \qquad \text{(I.EK.1.15)}$$

sonucuna varılır.

(I.EK.1.9a) denkleminin (I.EK.1.11) asimptotik çözümüne uygun bir çözümü

$$\psi(y) = H(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2} \qquad \text{(I.EK.1.16)}$$

şeklinde olmalıdır. Bu son bağıntının her iki yanının e tabanına göre logaritması alınırsa

$$\ln \psi = \ln H - \frac{1}{2} y^2 \qquad \text{(I.EK.1.17)}$$

elde edilir. (I.EK.1.17) bağıntısının her iki yanının türevi alınırsa

$$\frac{\psi'}{\psi} = \frac{H'}{H} - y \qquad \text{(I.EK.1.18)}$$

bulunur. (I.E.K.1.18) bağıntısının tekrar türevi alınırsa

$$\frac{\psi''}{\psi} - \frac{\psi'^2}{\psi^2} = \frac{H''}{H} - \frac{H'^2}{H^2} - 1$$

bağıntısı ve (I.EK.1.18) bağıntısının her iki yanının karesi alınırsa

$$\frac{\psi'^2}{\psi^2} = \frac{H'^2}{H^2} - 2y\frac{H'}{H} + y^2$$

bulunur. Son iki bağıntı taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{H''}{H} - 2y\frac{H'}{H} + y^2 - 1 \qquad \text{(I.EK.1.19)}$$

sonucuna varılır. Bu sonuç (I.EK.1.9a) diferansiyel denkleminde yerine yazılırsa $H(y)$ fonksiyonunu veren

$$H'' - 2y\,H' + (\varepsilon - 1)\,H = 0 \qquad \text{(I.EK.1.20)}$$

diferansiyel denklemi bulunur. Şimdi (I.EK.1.20) diferansiyel denkleminin

$$H(y) = y^s(a_0 + a_1\,y + a_2\,y^2 + \ldots), \qquad a_0 \neq = 0, \quad s \geqq 0 \quad \text{(I.EK.1.21)}$$

veyâ

$$H(y) = y^s\sum_{k=0}^{\infty} a_k\,y^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\,y^{s+k} \qquad \text{(I.EK.1.21a)}$$

şeklindeki bir çözümünü bulmaya çalışalım. (I.EK.1.21a) bağıntısından H nin y ye göre birinci ve ikinci mertebeden türevlerini alarak

$$H' = \sum_k (s+k)\,a_k\,y^{s+k-1} = y^s\sum_k (s+k)\,a_k\,y^{k-1}$$

ve

$$H'' = \sum_k (s+k-1)(s+k)\,a_k\,y^{s+k-2} = y^s\sum_k (s+k-1)(s+k)\,a_k\,y^{k-2}$$

bulunur. Bu sonuçlar (I.EK.1.20) diferansiyel denkleminde yerlerine yazılırsa

$$\sum_k (s+k-1)(s+k)\,a_k\,y^{k-2} - 2y\sum_k (s+k)\,a_k\,y^{k-1} + (\varepsilon - 1)\sum_k a_k\,y^k = 0$$

veyâ

$$\sum_k (s+k+1)(s+k+2)\,a_{k+2}\,y^k - 2\sum_k (s+k)\,a_k\,y^k + (\varepsilon - 1)\sum_k a_k\,y^k = 0$$

veyâ

$$\sum_k \{(s+k+1)(s+k+2)\,a_{k+2} - [2(s+k) + 1 - \varepsilon]\,a_k\}\,y^k = 0$$

özdeşliği elde edilir. Bu sonuç (I.EK.1.21a) serisinin (I.EK.1.20) diferansiyel denklemini özdeş olarak sağladığını gösterir ve herhangi bir k için y^k nın katsayısı sıfıra eşit olmalıdır. Böylece

$$(s+k+1)(s+k+2)\,a_{k+2} = [2(s+k)+1-\varepsilon]\,a_k \tag{I.EK.1.22}$$

sonucuna varılır. $k = -2$ için $a_{-2} = 0$ olduğundan

$$s(s-1)\,a_0 = 0 \tag{I.EK.1.23a}$$

bağıntısı ve $k = -1$ için $a_{-1} = 0$ olduğundan

$$s(s+1)\,a_1 = 0 \tag{I.EK.1.23b}$$

bağıntısı bulunur. a_0 sıfırdan farklı olduğu için (I.EK.1.23a) bağıntısı

$$s(s-1) = 0$$

indis denklemini ve böylece $s = 0$ veyâ $s = 1$ sonucunu verir. $s \geqq 0$ olması gerektiğinden (I.EK.1.23b) bağıntısına göre $s = 0$ ve $a_1 \neq 0$ olmalıdır veyâ $s = 1$ için $a_1 = 0$ olmalıdır. Şüphesiz $s = 0$, $a_1 = 0$ sonuçları bir arada gerçekleşebilir ve böylece $a_1 = 0$ olmak üzere $s = 0$ veyâ $s = 1$ olabilir. (I.EK.1.22) bağıntısına göre, $a_1 = 0$ için $k \geqq 0$ olmak üzere k her zaman bir *çift tamsayı* olmalıdır.

$H(y)$ fonksiyonunun $y \to \pm\infty$ için asimptotik değerleri (I.EK.1.21a) serisinin en yüksek dereceli terimleri ile belirlenebilir. Bu maksatla

$$\lim_{k\to\infty} \frac{a_{k+2}\,y^{k+2}}{a_k\,y^k} = y^2 \lim_{k\to\infty} \frac{a_{k+2}}{a_k}$$

limitinin mertebesi araştırılmalıdır. (I.EK.1.22) bağıntısının aracılığı ile

$$\lim_{k\to\infty} \frac{a_{k+2}\,y^{k+2}}{a_k\,y^k} = y^2 \lim_{k\to\infty} \frac{2(s+k)+1-\varepsilon}{(s+k+1)(s+k+2)} \cong \frac{2}{k}\,y^2 \tag{I.EK.1.24}$$

bulunur. m sonlu bir büyüklük olmak üzere $y^m \exp(y^2)$ fonksiyonuna ait seri $H(y)$ fonksiyonuna ait serinin (I.EK.1.24) bağıntısı ile belirlenen özelliğine sâhiptir. Gerçekten

$$y^m e^{y^2} = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{1}{q!}\,y^{2q+m} \tag{I.EK.1.25a}$$

serisi $k = 2q$ alınarak

$$y^m e^{y^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{k}{2}\right)!}\,y^{k+m} \tag{I.EK.1.25b}$$

şeklinde yazılabilir. Bu bağıntılardan

$$\frac{q!\, y^{2(q+1)+m}}{(q+1)!\, y^{2q+m}} \cong \frac{y^2}{q+1} = \frac{y^2}{\dfrac{k}{2}+1}$$

veyâ

$$\lim_{q\to\infty} \frac{q!\, y^{2(q+1)+m}}{(q+1)!\, y^{2q+m}} = \lim_{k\to\infty} \frac{y^2}{\dfrac{k}{2}+1} \cong \frac{2}{k}\, y^2 \qquad \text{(I.EK.1.26)}$$

sonucuna varılır. (I.EK.1.26) sonucu (I.EK.1.24) sonucunun aynıdır. O hâlde

$$y \to \pm\,\infty \quad \text{için :} \qquad H(y) \cong y^m\, e^{y^2} \qquad \text{(I.EK.1.27)}$$

elde edilir. Bu sonuç (I.EK.1.16) bağıntısında yerine yazılırsa

$$y \to \pm\,\infty \quad \text{için :} \qquad \psi(y) = H(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2} \cong y^m\, e^{y^2}\, e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

veyâ

$$y \to \pm\,\infty \quad \text{için :} \qquad \psi(y) \cong y^m\, e^{\frac{1}{2}y^2} \qquad \text{(I.EK.1.28)}$$

sonucuna varılır. O hâlde $y \to \pm\,\infty$ için $\psi(y)$ sonlu değildir ve bu sebepten $k \to \infty$ olamaz, yâni (I.EK.1.21a) serisi $k = k_0$ terimi ile kesilmeli ve k_0 ıncı dereceden bir polinom olmalıdır. Böylece, $a_{k_0} \neq 0$ ve $a_{k_0+2} = 0$ şartları sağlanmalıdır ve (I.EK.1.22) bağıntısına göre $k = k_0$ için

$$(s + k_0 + 1)(s + k_0 + 2)\, a_{k_0+2} = [2(s + k_0) + 1 - \varepsilon]\, a_{k_0}$$

yazılabildiğinden

$$\varepsilon = 2(s + k_0) + 1 \qquad \text{(I.EK.1.29)}$$

sonucuna varılır. k_0 bir çift tamsayı ve $s = 0$ veyâ $s = 1$ olduğundan,

$$n = s + k_0 \qquad (k_0 = 0, 2, 4, 6, \ldots) \qquad \text{(I.EK.1.30)}$$

sayısı $s = 0$ için bir çift tamsayı ve $s = 1$ için bir tek tamsayıdır. O hâlde, (I.EK.1.30) bağıntısı ile tanımlanan n sayısı her zaman bir tamsayıdır ve (I.EK.1.29) bağıntısı bu tamsayı cinsinden

$$\varepsilon = 2n + 1 \qquad (n = 0, 1, 2, 3, \ldots) \qquad \text{(I.EK.1.31)}$$

şeklinde yazılabilir. (I.EK.1.31) bağıntısı (I.EK.1.4) bağıntısında yerine yazılırsa

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n = 0, 1, 2, 3, \ldots) \qquad \text{(I.EK.1.32)}$$

sonucuna varılır. (I.EK.1.31) bağıntısı $H_n(y)$ polinomlarını veren (I.EK.1.20) diferansiyel denkleminde yerine yazılırsa

$$H_n'' - 2y\,H_n' + 2n\,H_n = 0 \qquad \text{(I.EK.1.33)}$$

diferansiyel denklemi elde edilir. $H_n(y)$ polinomlarına HERMİTE polinomları adı verilir.

(I.EK.2) HERMİTE POLİNOMLARININ DOĞURAN FONKSİYONU

HERMİTE polinomları, kolaylıkla hesaplanabilmelerini mümkün kılan

$$g(y, t) = e^{y^2-(t-y)^2} = e^{-t^2+2ty} = \sum_{n=0}^{\infty} H(y)\,\frac{t^n}{n!} \qquad \text{(I.EK.2.1)}$$

şeklindeki bir *doğuran fonksiyon* yardımı ile tanımlanabilir. Doğuran fonksiyonun e tabanına göre logaritması alınırsa

$$\ln g(y, t) = -\,t^2 + 2y\,t \qquad \text{(I.EK.2.2)}$$

bağıntısı bulunur. (I.EK.2.2.) bağıntısının her iki yanının y değişkenine göre kısmî türevi alınırsa

$$\frac{1}{g}\,\frac{\partial g}{\partial y} = 2t$$

veyâ

$$\frac{\partial g}{\partial y} - 2t\,g = 0 \qquad \text{(I.EK.2.3)}$$

bulunur. (I.EK.2.1) bağıntısından yararlanarak g ve $\partial g/\partial y$ nin HERMİTE polinomları ve türevleri cinsinden açılımları (I.EK.2.3) bağıntısında yerlerine yazıldığı takdirde bu bağıntıyı özdeş olarak sağlamalıdır. Gerekli işlemler yapılırsa :

$$\sum_n H_n'\,\frac{t^n}{n!} - 2t\sum_n H_n\,\frac{t^n}{n!} = 0$$

$$\sum_n H_n'\,\frac{t^n}{n!} - 2\sum_n H_n\,\frac{t^{n+1}}{n!} = 0$$

$$\sum_n H_n'\,\frac{t^n}{n!} - 2\sum_n H_{n-1}\,\frac{t^n}{(n-1)!} = 0$$

veyâ

$$\sum_n (H_n' - 2n\,H_{n-1})\,\frac{t^n}{n!} = 0 \qquad \text{(I.EK.2.4)}$$

sonucuna varılır. Bu özdeşlik HERMİTE polinomlarının arasındaki

$$H'_n = 2n\, H_{n-1} \tag{I.EK.2.5}$$

türevli rekürans bağıntısını verir. (I.EK.2.2) bağıntısının her iki yanının t değişkenine göre kısmî türevi alınırsa

$$\frac{1}{g}\,\frac{\partial g}{\partial t} = -\,2t + 2y$$

veyâ

$$\frac{\partial g}{\partial t} + 2\,(t - y)\,g = 0 \tag{I.EK.2.6}$$

bulunur. (I.EK.2.1) bağıntısından yararlanarak g ve $\partial g/\partial t$ nin HERMİTE polinomları cinsinden açılımları (I.EK.2.6) bağıntısında yerlerine yazılır ve gerekli işlemler yapılırsa :

$$\sum_n H_n \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} + 2(t-y) \sum_n H_n \frac{t^n}{n!} = 0$$

$$\sum_n H_{n+1} \frac{t^n}{n!} + 2 \sum_n H_n \frac{t^{n+1}}{n!} - 2y \sum_n H_n \frac{t^n}{n!} = 0$$

$$\sum_n H_{n+1} \frac{t^n}{n!} + 2 \sum_n H_{n-1} \frac{t^n}{(n-1)!} - 2y \sum_n H_n \frac{t^n}{n!} = 0$$

veyâ

$$\sum_n (H_{n+1} + 2n\, H_{n-1} - 2y\, H_n) \frac{t^n}{n!} \equiv 0 \tag{I.EK.2.7}$$

sonucuna varılır. Bu özdeşlik HERMİTE polinomlarının arasındaki

$$H_{n+1} = 2y\, H_n - 2n\, H_{n-1} \tag{I.EK.2.8}$$

türevsiz rekürans bağıntısını verir.

Türevli ve türevsiz rekürans bağıntılarının yardımı ile HERMİTE polinomlarını veren diferansiyel denklem bulunabilir. (I.EK.2.8) bağıntısında (I.EK.2.5) bağıntısı yerine yazılırsa

$$H_{n+1} = 2y\, H_n - H'_n \tag{I.EK.2.9}$$

bulunur. Bu bağıntının her iki yanının türevi alınırsa

$$H'_{n+1} = 2\, H_n + 2y\, H'_n - H''_n \tag{I.EK.2.10}$$

elde edilir. Öte yandan, (I.EK.2.5) bağıntısında n yerine $n + 1$ yazılırsa

$$H'_{n+1} = 2\,(n+1)\,H_n \qquad \text{(I.EK.2.11)}$$

elde edilir. Birinci yanları eşit olan (I.EK.2.10) ve (I.EK.2.11) bağıntılarının ikinci yanlarının eşitliği yazılırsa

$$2n\,H_n + 2\,H_n = 2\,H_n + 2y\,H'_n - H''_n$$

veyâ

$$H''_n - 2y\,H'_n + 2n\,H_n = 0 \qquad \text{(I.EK.2.12)}$$

sonucuna varılır. (I.EK.2.12) bağıntısı HERMİTE polinomlarının (I.EK.1.33) bağıntısı ile verilen diferansiyel denklemidir.

(I.EK.3) HERMİTE POLİNOMLARI İÇİN RODRİGUES TİPİ FORMÜL

Bir x değişkeninin $f(x)$ şeklindeki bir keyfî fonksiyonunda $x = t - y$ yazılırsa $f(t-y)$ fonksiyonu

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t-y) = -\frac{\partial}{\partial y} f(t-y) \qquad \text{(I.EK.3.1)}$$

kısmî türevli bağıntısını sağlar. Eğer

$$f(t-y) = \mathrm{e}^{-(t-y)^2}$$

seçilirse (I.EK.3.1) bağıntısı

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{e}^{-(t-y)^2} = -\frac{\partial}{\partial y}\,\mathrm{e}^{-(t-y)^2} \qquad \text{(I.EK.3.2)}$$

şeklini alır. (I.EK.2.1) bağıntısı ile verilen

$$g(y,t) = \mathrm{e}^{y^2}\,\mathrm{e}^{-(t-y)^2}$$

doğuran fonksiyonunun t değişkenine göre kısmî türevi alınırsa (I.EK.3.2) bağıntısının yardımı ile

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \mathrm{e}^{y^2}\frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{e}^{-(t-y)^2} = -\,\mathrm{e}^{y^2}\frac{\partial}{\partial y}\,\mathrm{e}^{-(t-y)^2} \qquad \text{(I.EK.3.3)}$$

bulunur. Bu son bağıntıda t değişkenine göre kısmî türev alma işlemi $n-1$ kez tekrar edilirse

$$\frac{\partial^n g}{\partial t^n} = \mathrm{e}^{y^2}\frac{\partial^n}{\partial t^n}\,\mathrm{e}^{-(t-y)^2} = (-1)^n\,\mathrm{e}^{y^2}\frac{\partial^n}{\partial y^n}\,\mathrm{e}^{-(t-y)^2} \qquad \text{(I.EK.3.4)}$$

elde edilir. $g(y,t)$ doğuran fonksiyonunun t değişkenine göre MACLAURİN serisine açılımı

$$g(y, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\partial^n g}{\partial t^n}\right)_{t=0} \frac{t^n}{n!}$$

şeklindedir. Bu açılım (I.EK.2.1) bağıntısı ile verilen

$$g(y, t) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(y) \frac{t^n}{n!}$$

açılımı ile karşılaştırılırsa

$$H_n(y) = \left(\frac{\partial^n g}{\partial t^n}\right)_{t=0} \qquad \text{(I.EK.3.5)}$$

sonucuna varılır. (I.E.K.3.5) bağıntısı (I.EK.3.4) bağıntısının yardımı ile

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-y^2} \qquad \text{(I.EK.3.6)}$$

şeklinde yazılabilir. (I.EK.3.6) bağıntısı HERMİTE polinomlarını veren RODRİGUES tipi formüldür.

(I.EK.3.6) bağıntısının yardımı ile HERMİTE polinomları hesaplanabilir. $n = 0$ için bu bağıntı

$$H_0(y) = (-1)^0 e^{y^2} e^{-y^2} = 1 \qquad \text{(I.EK.3.7)}$$

sonucunu verir. (I.EK.3.6) bağıntısı $n = 1$ için

$$H_1(y) = -e^{y^2} \frac{\partial}{\partial y} e^{-y^2} = -e^{y^2}(-2y\, e^{-y^2}) = 2y \qquad \text{(I.EK.3.8)}$$

sonucunu ve $n = 2$ için

$$H_2(y) = e^{y^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} e^{-y^2} = e^{y^2} \frac{\partial}{\partial y}(-2y\, e^{-y^2})$$

$$= -2 e^{y^2}(-2y^2 + 1) e^{-y^2} = 4y^2 - 2 \qquad \text{(I.EK.3.9a)}$$

sonucunu verir. $n > 2$ için HERMİTE polinomları (I.EK.2.8) bağıntısı ile verilen

$$H_{n+1} = 2y\, H_n - 2n\, H_{n-1} \qquad \text{(I.EK.3.10)}$$

şeklindeki türevsiz rekürans bağıntısının aracılığı ile daha kolay hesaplanabilir. $H_2(y)$ için bu bağıntıda $n = 1$ yazılmalıdır. Böylece

$$H_2 = 2y\, H_1 - 2\, H_0 = 2y\,(2y) - 2 = 4y^2 - 2 \qquad \text{(I.EK.3.9b)}$$

bağıntısı tekrar bulunur. $H_3(y)$ için (I.EK.3.10) bağıntısında $n = 2$ yazarak

$$H_3 = 2y\,H_2 - 4\,H_1 = 2y\,(4y^2 - 2) - 4\,(2y) = 8\,y^3 - 12\,y \qquad \text{(I.EK.3.11)}$$

sonucuna varılır. Böylece HERMİTE polinomları istenilen dereceye kadar hesaplanabilir. Beşinci dereceye kadar olan HERMİTE polinomlarının listesi aşağıdadır :

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 \\ H_1 &= 2y \\ H_2 &= 4y^2 - 2 \\ H_3 &= 8y^3 - 12y \\ H_4 &= 16\,y^4 - 48\,y^2 + 12 \\ H_5 &= 32\,y^5 - 160\,y^3 + 120\,y \end{aligned} \qquad \text{(I.EK.3.12)}$$

(I.EK.4) HARMONİK OSİLÂTÖRE AİT ÖZFONKSİYONLAR ARASINDAKİ DİKLİK VE NORMLAMA BAĞINTILARI

(I.EK.1.8) ve (I.EK.1.16) bağıntılarına göre harmonik osilâtöre ait normlanmış özfonksiyonların genel ifâdesi

$$\psi_n(x) = N_n\,H_n(\alpha\,x)\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \qquad \text{(I.EK.4.1)}$$

şeklindedir. Burada N_n *normlama sâbiti*dir. $\psi_n(x)$ normlanmış olduğu için ve $\psi_n^* = \psi_n$ olduğu için

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*\,\psi_n\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} [\psi_n(x)]^2\,dx = 1 \qquad \text{(I.EK.4.2)}$$

bağıntısı gerçeklenir. (I.EK.1.8) ile verilen

$$y = \alpha\,x \qquad \text{(I.EK.4.3)}$$

değişken dönüşümü (I.EK.4.2) bağıntısına uygulanırsa (I.EK.4.1) bağıntısının yardımı ile

$$\frac{N_n^2}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(y)\,e^{-y^2}\,dy = 1 \qquad \text{(I.EK.4.4)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (I.EK.2.1) bağıntısını kullanarak

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(y,t)\, g(y,s)\, e^{-y^2}\, dy = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2+2ty}\, e^{-s^2+2sy}\, e^{-y^2}\, dy =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \frac{s^m}{m!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)\, H_m(y)\, e^{-y^2}\, dy \qquad \text{(I.EK.4.5)}$$

yazılabilir. Bu bağıntının sol yanındaki integralin sonucu

$$e^{2ts} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-[y-(t+s)]^2}\, dy = \sqrt{\pi}\, e^{2ts} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2ts)^n}{n!} \qquad \text{(I.EK.4.6)}$$

şeklindedir. Bu sebepten (I.EK.4.5) bağıntısı ancak $m = n$ özel hâlinde gerçekleşebilir ve

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ts)^n}{n!\, n!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(y)\, e^{-y^2}\, dy = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\pi}\, 2^n\, n!\, \frac{(ts)^n}{n!\, n!} \qquad \text{(I.EK.4.7)}$$

yazılabilir. (I.EK.4.7) bağıntısından

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(y)\, e^{-y^2}\, dy = \sqrt{\pi}\, 2^n\, n! \qquad \text{(I.EK.4.8)}$$

şeklindeki normlama bağıntısı bulunur. Öte yandan, (I.EK.4.5) bağıntısında $m \neq n$ hâllerine ait terimlerin sıfır olması gerektiğinden

$$m \neq n \text{ için}: \quad \int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)\, H_m(y)\, e^{-y^2}\, dy = 0 \qquad \text{(I.EK.4.9)}$$

şeklindeki diklik bağıntısı bulunur. (I.EK.4.8) bağıntısı (I.EK.4.4) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\frac{N_n^2}{\alpha} \sqrt{\pi}\, 2^n\, n! = 1$$

veyâ

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\, 2^n\, n!} \right)^{1/2} \qquad \text{(I.EK.4.10)}$$

sonucuna varılır. (I.EK.4.10) bağıntısı kullanılarak (I.EK.4.8) ve (I.EK.4.9) bağıntıları bir arada

$$\frac{N_n^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)\, H_m(y)\, e^{-y^2}\, dy = \delta_{mn} \qquad \text{(I.EK.4.11)}$$

şeklinde yazılabilir. Bu bağıntıda $y = \alpha x$ dönüşümü yapılarak (I.EK.4.1) bağıntısı yerine yazılırsa harmonik osilâtöre ait özfonksiyonların

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)\, \psi_m(x)\, dx = \delta_{mn} \qquad \text{(I.EK.4.12)}$$

şeklindeki ortonormallik bağıntıları bulunur.

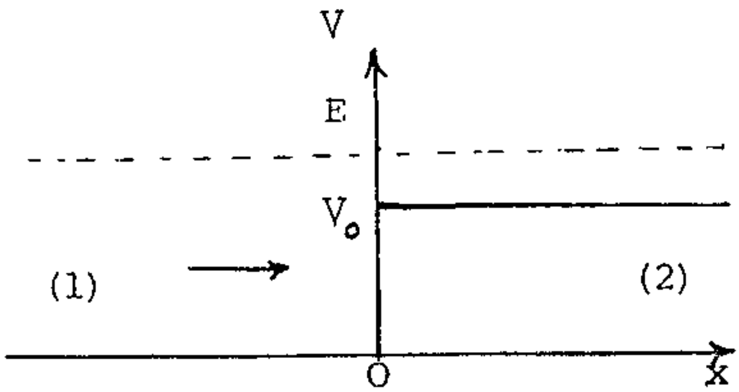
ALIŞTIRMALAR VE PROBLEMLER

I.1. *Basamak fonksiyonu* adı verilen ve

$$x < 0 \text{ için}: \quad V = 0$$

$$x > 0 \text{ için}: \quad V = V_0 > 0$$

bağıntıları ile tanımlanan bir *potansiyel enerji engeli* veriliyor. E toplam enerjisine ve m kütlesine sâhip parçacıklar soldan gelip engele çarpmaktadır.



Şekil I.1.

a) $E > V_0$ hâli için :

i) Bir boyutlu SCHRÖDİNGER denklemini çözünüz.

ii) T geçiş ve R yansıma oranlarını hesaplayınız ve $T + R = 1$ olduğunu gösteriniz.

iii) $J_1 = J_2$ olduğunu gösterinz.

b) $0 < E < V_0$ hâli için yukardaki sorularda sorulanları yeniden cevaplandırınız.

ÇÖZÜM :

a) $E > V_0$ HÂLİ İÇİN ÇÖZÜM :

i) Bir boyutlu SCHRÖDİNGER denklemi

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\,\psi = 0 \tag{1}$$

şeklindedir. $\psi = \psi(x)$ olduğu için, bu denkleme ait ihtimâl akımı yoğunluğu vektörünün kartezyen bileşenleri

$$J_x = |\mathbf{J}| = J = \frac{\hbar}{2m\,i}\left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{d\psi^*}{dx}\right), \qquad J_y = J_z = 0 \tag{2}$$

şeklindedir.

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E\,, \qquad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0 \tag{3}$$

vaz edilecek olursa (1) denklemi

$$x < 0 \text{ için}: \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0 \text{ ve } x > 0 \text{ için}: \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0 \tag{4}$$

şeklinde yazılabilir. (4) denklemlerinin genel çözümleri

$$\psi_1 = B\,e^{ik_1x} + C\,e^{-ik_1x}\,, \quad \psi_2 = A\,e^{ik_2x} + D\,e^{-ik_2x} \tag{5}$$

şeklindedir. Burada $\psi_1 = \psi_0 + \psi_R$ olmak üzere

$$\psi_0 = B\,e^{ik_1x} \tag{6}$$

(1) bölgesinde potansiyel enerji engeline gelen dalgayı ve

$$\psi_R = C\,e^{-ik_1x} \tag{7}$$

(1) bölgesinde potansiyel enerji engelinden yansıyan dalgayı belirlemektedir. (1) bölgesinden engeli aşarak (2) bölgesine geçen dalga

$$\psi_T = A\,e^{ik_2x} \tag{8}$$

şeklindedir. (2) bölgesinde yansıyan dalga olmadığı için $D = 0$ dır ve $\psi_2 = \psi_T$ yazılabilir. $x = 0$ noktasında süreksiz olan basamak fonksiyonuna ait dalga fonksiyonu bu noktada sürekli olmalıdır. *Süreklilik şartları*

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \qquad \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \tag{9}$$

şeklindedir.

$$\psi_1'(x) = ik_1 B\,e^{ik_1x} - ik_1 C\,e^{-ik_1x}\,, \quad \psi_2'(x) = ik_2 A\,e^{ik_2x} \tag{10}$$

olduğundan, (9) süreklilik şartları

$$B + C = A\,, \quad ik_1(B - C) = ik_2 A$$

veyâ

$$B + C = A, \quad B - C = \frac{k_2}{k_1} A \tag{11}$$

şeklini alır. Buradan B ve C çözülürse

$$B = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) A\,, \quad C = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) A \tag{12}$$

elde edilir.

ii) (2) ve (6) bağıntılarını kullanarak

$$J_0 = \frac{\hbar}{2m\,i}\left(\psi_0^* \frac{d\psi_0}{dx} - \psi_0 \frac{d\psi_0^*}{dx}\right), \quad \frac{d\psi_0}{dx} = ik_1 B\, e^{ik_1 x} = ik_1 \psi_0$$

$$\psi_0^* \frac{d\psi_0}{dx} = ik_1 \mid \psi_0 \mid^2, \quad \psi_0 \frac{d\psi_0^*}{dx} = -\, ik_1 \mid \psi_0 \mid^2$$

$$J_0 = \frac{\hbar}{2m\,i}\, 2i\, k_1 \mid \psi_0 \mid^2 = \frac{\hbar\, k_1}{m} \mid \psi_0 \mid^2 = \frac{\hbar\, k_1}{m} \mid B \mid^2 \tag{13}$$

elde edilir. Öte yandan, (2) ve (7) bağıntılarını kullanarak

$$J_R = -\frac{\hbar\, k_1}{m} \mid \psi_R \mid^2 = -\frac{\hbar\, k_1}{m} \mid C \mid^2 \tag{14}$$

ve (2) ve (8) bağıntılarını kullanarak

$$J_2 = J_T = \frac{\hbar\, k_2}{m} \mid \psi_2 \mid^2 = \frac{\hbar\, k_2}{m} \mid A \mid^2 \tag{15}$$

bulunur.

Potansiyel enerji engelini *geçiş oranı* T ve potansiyel engelinden *yansıma oranı* R

$$T = \left| \frac{J_T}{J_0} \right|, \qquad R = \left| \frac{J_R}{J_0} \right| \tag{16}$$

bağıntıları ile tanımlanır. (15), (14) ve (13) de bulunan J_T, J_R ve J_0 değerleri (16) da yerlerine yazılırsa

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{\mid A \mid^2}{\mid B \mid^2}, \qquad R = \frac{\mid C \mid^2}{\mid B \mid^2} \tag{17}$$

elde edilir. (12) bağıntılarından

$$\frac{A}{B} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}\,, \qquad \frac{C}{B} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \tag{18}$$

bulunur. (18) bağıntıları (17) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$T = \frac{4k_1\, k_2}{(k_2 + k_2)^2}\,, \qquad R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \tag{19}$$

sonuçlarına varılır. (19) bağıntıları taraf tarafa toplanırsa

$$4k_1\, k_2 + (k_1 - k_2)^2 \equiv (k_1 + k_2)^2$$

özdeşliğinden ötürü

$$T + R = 1 \tag{20}$$

sonucuna varılır.

iii) $\psi_1 = \psi_0 + \psi_R$ bağıntısından

$$\frac{d\psi_1}{dx} = \frac{d\psi_0}{dx} + \frac{d\psi_R}{dx} \tag{21}$$

elde edilir. (6) ve (7) bağıntılarından

$$\frac{d\psi_0}{dx} = ik_1\, \psi_0\,, \qquad \frac{d\psi_R}{dx} = -\, ik_1\, \psi_R \tag{22}$$

bulunur. (22) bağıntıları (21) bağıntısında yerlerine yazılarak

$$\frac{d\psi_1}{dx} = ik_1\, (\psi_0 - \psi_R) \tag{23}$$

elde edilir. Bu bağıntıyı $\psi_1^* = \psi_0^* + \psi_R^*$ bağıntısı ile taraf tarafa çarparak

$$\psi_1^*\, \frac{d\psi_1}{dx} = ik_1\, (\psi_0^* + \psi_R^*)\, (\psi_0 - \psi_R)$$

veyâ

$$\psi_1^*\, \frac{d\psi_1}{dx} = ik_1\, (\,|\,\psi_0\,|^2 - |\,\psi_R\,|^2 + \psi_R^*\, \psi_0 - \psi_0^*\, \psi_R) \tag{24}$$

sonucuna varılır. (24) bağıntısının kompleks eşleniği alınırsa

$$\psi_1\, \frac{d\psi_1^*}{dx} = -\, ik_1\, (\,|\,\psi_0\,|^2 - |\,\psi_R\,|^2 + \psi_R\, \psi_0^* - \psi_0\, \psi_R^*) \tag{25}$$

bulunur. (24) ve (25) bağıntıları taraf tarafa çıkarılırsa

$$\psi_1^*\, \frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1\, \frac{d\psi_1^*}{dx} = 2\, ik_1\, (\,|\,\psi_0\,|^2 - |\,\psi_R\,|^2) \tag{26}$$

elde edilir. (26) bağıntısı

$$J_1 = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_1^* \frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1 \frac{d\psi_1^*}{dx}\right) \tag{27}$$

bağıntısında yerine yazılırsa, (6) ve (7) bağıntılarının yardımı ile

$$J_1 = \frac{\hbar k_1}{m}(|B|^2 - |C|^2) \tag{28}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntı (13) ve (14) bağıntılarının yardımı ile

$$J_1 = J_0 + J_R \tag{29}$$

şeklinde de yazılabilir.

Öte yandan, (12) bağıntılarının yardımı ile

$$|B|^2 - |C|^2 = \frac{1}{4}\left[\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)^2 - \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right)^2\right]|A|^2$$

veyâ sâdeleştirerek

$$|B|^2 - |C|^2 = \frac{k_2}{k_1}|A|^2 \tag{30}$$

elde edilir. (30) bağıntısı (28) bağıntısında yerine yazılırsa

$$J_1 = \frac{\hbar k_2}{m}|A|^2 \tag{31}$$

bulunur. (31) bağıntısı (15) bağıntısı ile karşılaştırılırsa $J_1 = J_2$ sonucuna varılır.

b) $0 < E < V_0$ HÂLİ İÇİN ÇÖZÜM :

$$\text{i) } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E, \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0 \tag{32}$$

vaz edilecek olursa (1) denklemi

$$x < 0 \text{ için}: \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^2\psi_1 = 0 \text{ ve } x > 0 \text{ için}: \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \alpha^2\psi_2 = 0 \tag{33}$$

şeklinde yazılabilir. (33) denklemlerinin genel çözümleri

$$\psi_1 = C\,e^{ikx} + D\,e^{-ikx}, \qquad \psi_2 = A\,e^{\alpha x} + B\,e^{-\alpha x} \tag{34}$$

şeklindedir. (1) bölgesindeki ψ_1 dalgası DE BROGLİE dalgasıdır ve $\psi_1 = \psi_0 + \psi_R$ olmak üzere

$$\psi_0 = C\,e^{ikx}, \qquad \psi_R = D\,e^{-ikx} \tag{35}$$

şekillerindeki gelen ve yansıyan dalgaların toplamından oluşur. Öte yandan, ψ_1 dalgası cos kx ve sin kx fonksiyonlarının bir lineer toplamı şeklinde yazılabildiği için her yerde sonludur. (2) bölgesindeki ψ_2 dalgası DE BROGLİE dalgası değildir ve bu sebepten gelen ve yansıyan dalgalar söz konusu olamaz. Fakat ψ_2 dalgasına ait

$$B\,e^{-\alpha x}$$

terimi (2) bölgesindeki her yerde sonludur ve sonsuzda sıfır değerini alır. Öte yandan, ψ_2 dalgasına ait öbür terim

$$A\,e^{\alpha x}$$

sonsuzda sonsuz değerini alır ve bu sonuç ihtimâlin korunumu ilkesine uymadığı için $A = 0$ olmalıdır. Buna göre

$$\psi_1'(x) = ik\,(C\,e^{ikx} - D\,e^{-ikx}), \qquad \psi_2'(x) = -\,\alpha\,B^{-\alpha x} \tag{36}$$

olduğundan, (9) süreklilik şartları

$$C + D = B, \qquad ik\,(C - D) = -\,\alpha\,B$$

veyâ

$$C + D = B, \qquad C - D = i\,\frac{\alpha}{k}\,B \tag{37}$$

şeklini alır. Buradan C ve D çözülürse

$$C = \frac{1}{2}\left(1 + i\,\frac{\alpha}{k}\right)B, \qquad D = \frac{1}{2}\left(1 - i\,\frac{\alpha}{k}\right)B \tag{38}$$

elde edilir.

ii) (2) ve (35) bağıntılarını kullanarak

$$J_0 = \frac{\hbar k}{m}\,|\,C\,|^2, \qquad J_R = -\,\frac{\hbar k}{m}\,|\,D\,|^2 \tag{39}$$

bulunur ve böylece

$$R = \left|\frac{J_R}{J_0}\right| = \frac{|\,D\,|^2}{|\,C\,|^2} \tag{40}$$

elde edilir. Öte yandan, (38) bağıntılarından

$$|\,C\,|^2 = |\,D\,|^2 = \frac{1}{4}\left(1 + \frac{\alpha^2}{k^2}\right)|\,B\,|^2 \tag{41}$$

yazılabildiği için (40) bağıntısından

$$R = 1 \tag{42}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (2) bağıntısında

$$\psi_T = \psi_2 = B\,e^{-\alpha x}$$

yazılırsa

$$\psi_2^* \frac{d\psi_2}{dx} = \psi_2 \frac{d\psi_2^*}{dx} = -\alpha \mid B \mid^2 e^{-2\alpha x}$$

olduğu için $J_T = J_2 = 0$ bulunur ve böylece

$$T = 0 \tag{43}$$

sonucuna varılır. (42) ve (43) bağıntıları bu özel hâl için $T + R = 1$ bağıntısının gene sağlandığını gösteriyor.

iii) (2) bağıntısında

$$\psi_1 = C\, e^{ikx} + D\, e^{-ikx}$$

yazılırsa a) şıkkındaki hesapların tekrarı ile (28) bağıntısına benzer şekilde

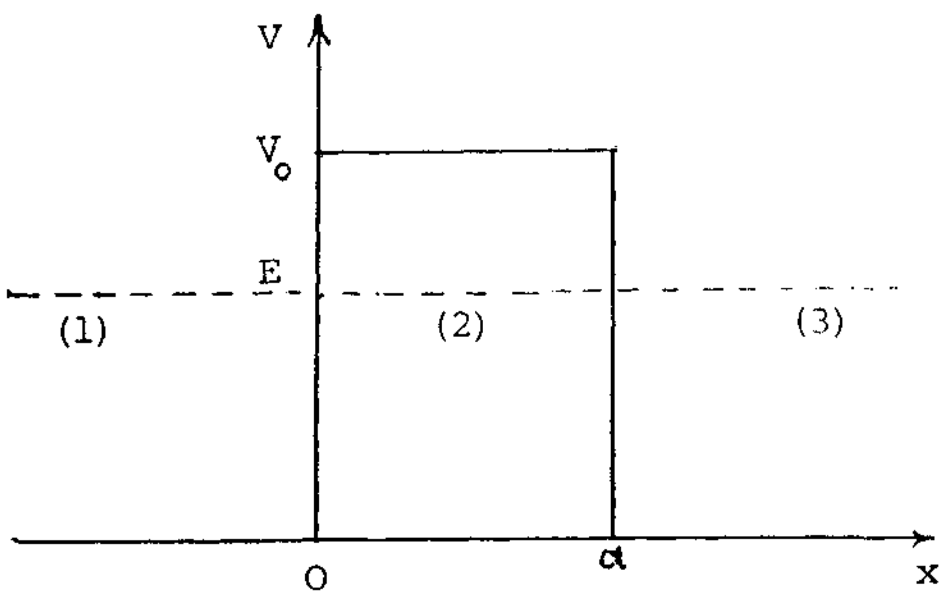
$$J_1 = \frac{\hbar k}{m} (\mid C \mid^2 - \mid D \mid^2) \tag{44}$$

sonucuna varılır. (41) bağıntısına göre $\mid C \mid^2 = \mid D \mid^2$ olduğundan (44) bağıntısı $J_1 = 0$ sonucunu verir. Öte yandan, yukarda $J_2 = 0$ bulunmuştu. Böylece

$$J_1 = J_2 = 0 \tag{45}$$

sonucu gene elde edilir.

I.2. $x < 0$ için : $V = 0$
$0 < x < a$ için : $V = V_0$
$a < x$ için : $V = 0$



Şekil I.2.

ile tanımlanan *potansiyel engeli* verildiğine göre, bir boyutlu SCHRÖDİNGER denklemini toplam E enerjisi $0 < E < V_0$ şartını sağlayan ve m kütlesine sâhip bir parçacık için çözünüz. Parçacığın potansiyel engelini T geçiş oranını ve engelden R yansıma oranını hesaplayınız ve $T + R = 1$ olduğunu gösteriniz. $0 < V_0 < E$ şartını sağlayan parçacıklar için problemi tekrar çözünüz.

SONUÇLAR : $0 < E < V_0$ için : $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$ vaz ederek :

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 \alpha a + 4E(V_0 - E)}, \quad R = \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{V_0^2 \sinh^2 \alpha a + 4E(V_0 - E)}$$

$0 < V_0 < E$ için : $K^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$ vaz ederek :

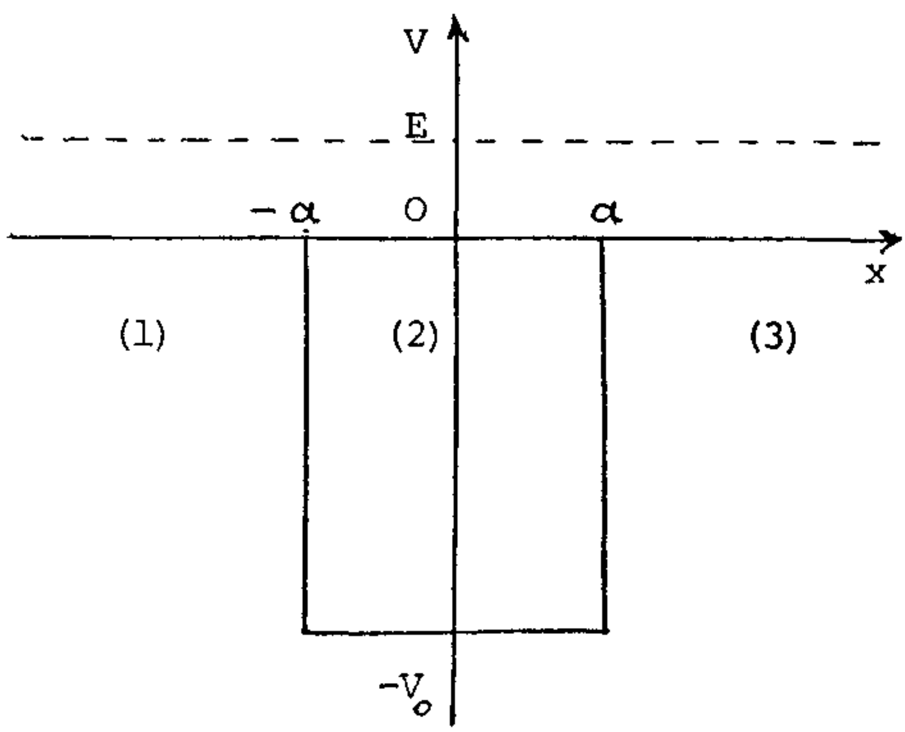
$$T = \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 Ka + 4E(E - V_0)}, \quad R = \frac{V_0^2 \sin^2 Ka}{V_0^2 \sin^2 Ka + 4E(E - V_0)}$$

I.3. $x < -a$ için : $V = 0$

$-a < x < a$ için : $V = -V_0$

$a < x$ için : $V = 0$

ile tanımlanan *kare kuyu potansiyeli* verildiğine göre, bir boyutlu SCHRÖDİNGER denklemini :



Şekil I.3.

a) Toplam E enerjisi $E > 0$ şartını sağlayan ve m kütlesine sâhip bir parçacık için çözünüz. T geçiş oranını ve R yansıma oranını hesaplayınız. T nin $\sqrt{2mE}/\hbar = k$ ye göre değişimini inceleyiniz ve maksimumlarını veren E_n enerji seviyelerini bulunuz. *Geçiş rezonansları* adı verilen bu maksimumların Δk *yarı değer genişliklerini* hesaplayınız.

b) Toplam E enerjisi $-V_0 < E < 0$ şartını sağlayan ve m kütlesine sâhip bir parçacık için bir boyutlu SCHRÖDİNGER denklemini çözünüz. $E < 0$ için parçacık potansiyel kuyusuna bağlıdır. *Bağlı hâllerin* enerjilerini veren bağıntıları bulunuz.

SONUÇLAR : a) $\varkappa^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$ vaz ederek :

$$T = \frac{4E(E+V_0)}{V_0^2 \sin^2 2\varkappa a + 4E(E+V_0)}, \quad R = \frac{V_0^2 \sin^2 2\varkappa a}{V_0^2 \sin^2 2\varkappa a + 4E(E+V_0)}$$

$$E_n = -V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8ma^2}, \qquad \Delta k \cong \frac{2}{a}\left(1 + \frac{E}{V_0}\right)$$

b)

$$\left(\frac{|E|}{V_0 - |E|}\right)^{1/2} = \begin{cases} tg\left[\dfrac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - |E|)}\right] & (n \text{ çift}) \\ -\operatorname{cotg}\left[\dfrac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - |E|)}\right] & (n \text{ tek}) \end{cases}$$

I.4. $x = \pm a$ için : $V = \infty$,

ve $-a < x < a$ için : $V = 0$

ile tanımlanan *katı duvar potansiyeli* için bir boyutlu SCHRÖDİNGER denklemini çözünüz ve $E > 0$ toplam enerjisine ve m kütlesine sâhip bir parçacığın E_n enerji seviyelerini bulunuz.

SONUÇ :

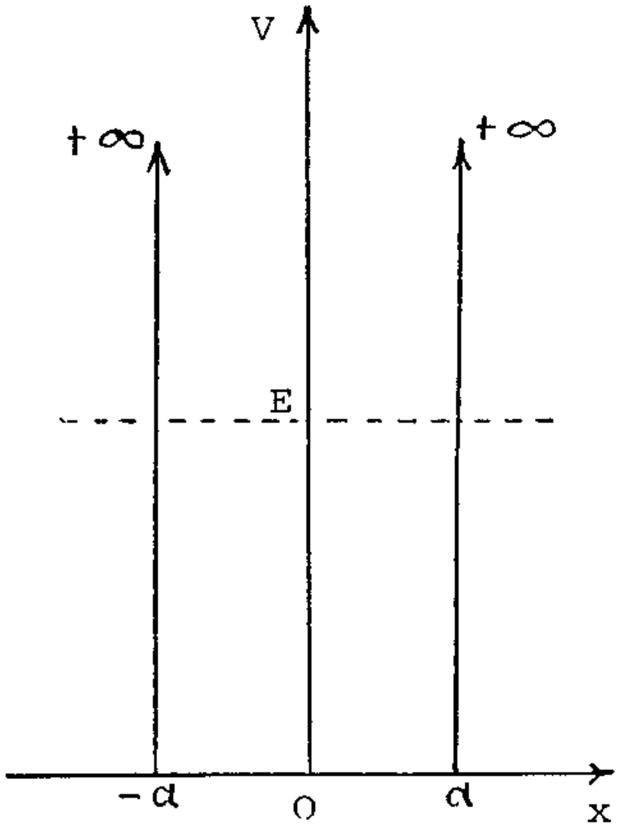
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8\, ma^2}$$

I.5. $x < 0$ için : $V = 0$

$0 < x < a$ için : $V = V_0$

$a < x$ için : $V = 2V_0$

ile tanımlanan *iki basamak* şeklindeki bir *potansiyel engeli* veriliyor. $E = 3V_0$ toplam enerjisine ve m kütlesine sâhip parçacıklar engele soldan x ekseninin doğrultu ve yönünde gelmektedir. Bir boyutlu SCHRÖDİNGER denklemini bu



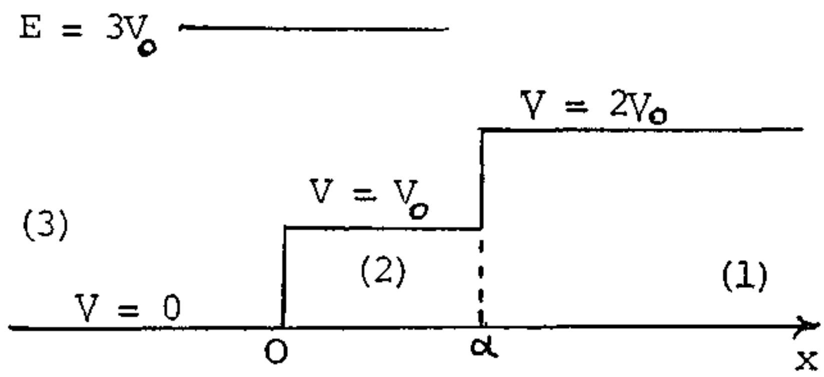
Şekil I.4.

potansiyel için çözerek T geçiş ve R yansıma oranlarını a parametresinin fonksiyonları olarak hesaplayınız ve $T + R = 1$ olduğunu gösteriniz. a parametresinin hangi değerleri için T geçiş oranı en büyük ve en küçük olur?

SONUÇLAR : $k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2} V_0$ vaz ederek :

$$T = \frac{16\sqrt{3}}{15 + 8\sqrt{3} + \cos(2\sqrt{2}\,ka)}, \qquad R = \frac{15 - 8\sqrt{3} + \cos(2\sqrt{2}\,ka)}{15 + 8\sqrt{3} + \cos(2\sqrt{2}\,ka)}$$

$n=0, 1, 2, 3, \ldots$ olmak üzere : $ka = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\dfrac{\pi}{\sqrt{2}}$ için T en büyük ve $ka = n\dfrac{\pi}{\sqrt{2}}$ için T en küçük olur.



Şekil I.5.

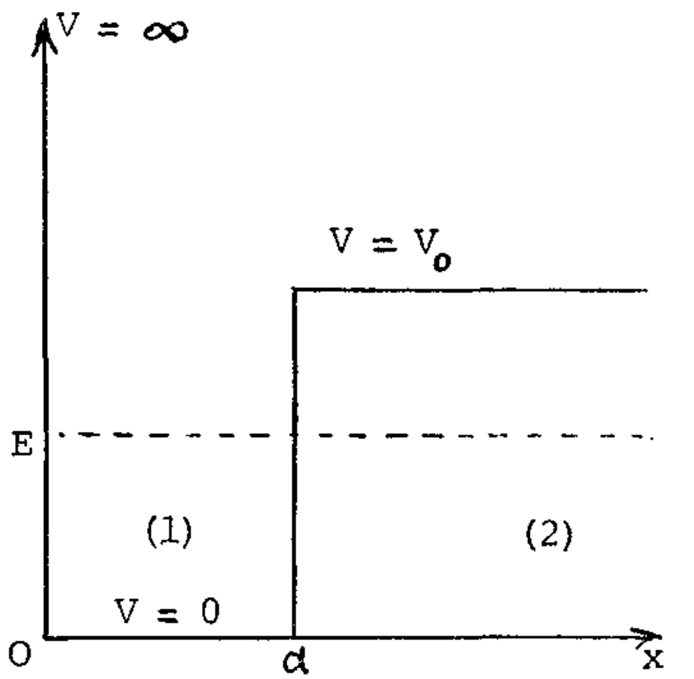
I.6. $x = 0$ için : $V = \infty$

$0 < x < a$ için : $V = 0$

$a < x$ için : $V = V_0$

ile tanımlanan bir *potansiyel kuyusu* verildiğine göre, bir boyutlu SCHRÖDİNGER denklemini toplam E enerjisi $0 < E < V_0$ şartını sağlayan ve m kütlesine sâhip bir parçacık için çözünüz. Bağlı bir hâlin var olabilmesi için kuyunun derinliği en az ne büyüklükte olmalıdır?

SONUÇ : $V_0 \geqq \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$



Şekil I.6.

I.7. İki boyutlu SCHRÖDİNGER denklemini kartezyen koordinatlarda verilmiş olan

$$V = \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2 + 2\mu\, xy), \qquad |\mu| < 1$$

şeklindeki potansiyel enerji fonksiyonu için çözünüz ve enerji seviyelerini bulunuz.

Yol gösterme: SCHRÖDİNGER denklemini

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + y), \qquad Y = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - y)$$

koordinat dönüşümü ile dönüştürünüz ve yeni koordinat sisteminde çözünüz.

SONUÇ : $$E_{n_x, n_y} = \left[\sqrt{1+\mu}\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{1-\mu}\left(n_y + \frac{1}{2}\right)\right]\hbar\omega$$

$$n_x = 0, 1, 2, 2, 3, \ldots, \qquad n_y = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

I.8. $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ yörünge açısal momentumu vektör operatörü olduğuna göre:

a) $\mathbf{L} \times \mathbf{r} + \mathbf{r} \times \mathbf{L} = 2i\hbar\, \mathbf{r}$ olduğunu gösteriniz.

b) $\mathbf{K} = \mathbf{r} \times \mathbf{L} - i\hbar\, \mathbf{r}$ bağıntısı ile $\mathbf{K}$ vektör operatörü tanımlandığına göre : $[\mathbf{L}^2, \mathbf{r}] = 2i\hbar\, \mathbf{K}$ olduğunu gösteriniz.

c) $\mathbf{K}$ operatörünün HERMİTsel bir operatör olduğunu gösteriniz. (HERMİTselliğin tanımı ve özellikleri için üçüncü bölüme bakınız).

d) $\mathbf{L} \cdot \mathbf{p} = 0$ ve $\mathbf{L} \cdot \mathbf{r} = 0$ olduğunu gösteriniz.

e) $[L_x, r^2] = [L_y, r^2] = [L_z, r^2] = 0$ olduğunu gösteriniz.

f) $[L_x^2, L_y^2] = [L_y^2, L_z^2] = [L_z^2, L_x^2] = 0$ olduğunu gösteriniz.

I.9. Küresel koordinatlarda $V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$ potansiyel enerji fonksiyonu ile tanımlanan bir üç boyutlu izotropik harmonik osilâtör için küresel koordinatlarda SCHRÖDİNGER denkleminin radyal kısmını çözerek enerji seviyelerini ve radyal kuvantum sayısının ilk üç değerine ait, yâni $n' = 1, 2, 3$ için radyal dalga fonksiyonlarını bulunuz. Her enerji seviyesinin soysuzlaşması nedir? (Soysuzlaşma için paragraf (II.6) ya bakınız.)

SONUÇLAR : $$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

$$n = 2(n' - 1) + l, \quad n' = 1, 2, 3, \ldots, \quad l = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

$\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$ olmak üzere, $R_{l,n'}(r)$ normlanmış radyal dalga fonksiyonları :

$$R_{l,1} = \pi^{-1/4}\,\alpha^{3/2}\sqrt{\frac{2^{l+2}}{(2l+1)!!}}\,(\alpha r)^l\, e^{-\frac{1}{2}(\alpha r)^2}$$

$$R_{l,2} = \pi^{-1/4}\,\alpha^{3/2}\sqrt{\frac{2^{l+3}}{(2l+3)!!}}\,(\alpha r)^l\left[\frac{2l+3}{2} - (\alpha r)^2\right] e^{-\frac{1}{2}(\alpha r)^2}$$

$$R_{l,3} = \pi^{-1/4}\,\alpha^{3/2}\sqrt{\frac{2^{l+3}}{(2l+5)!!}}\,(\alpha r)^l\,.$$

$$\cdot\left[\frac{(2l+3)\,(2l+5)}{4} - (2l+5)\,(\alpha r)^2 + (\alpha r)^4\right] e^{-\frac{1}{2}(\alpha r)^2}$$

Soysuzlaşma : $\dfrac{1}{2}\,(n+1)\,(n+2)$

I.10. LEGENDRE polinomlarına ait

$$(1 - x^2)\,P_l' = \frac{l\,(l+1)}{2l+1}\,(P_{l-1} - P_{l+1})$$

bağıntısını ispatlayınız.

II. BÖLÜM

İKİ PARÇACIĞA AİT SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİ

(II.1) İKİ NOKTASAL PARÇACIK İÇİN LÂBORATUVAR REFERANS SİSTEMİ VE KÜTLE MERKEZİ REFERANS SİSTEMİ

Gerek klâsik mekanikte, gerekse kuvantum mekaniğinde m kütlesine sâhip bir parçacık hacmı ve şekli ne olursa olsun bütün kütlesi kütle merkezinde toplanmış bir *maddesel nokta* veyâ bir *noktasal parçacık* olarak düşünülebilir. Bir P noktasal parçacığının yeri başlangıç noktası O olan koordinat sisteminde $\mathbf{OP} = \mathbf{r}$ yer vektörü ile belirlenir. Eğer bir noktasal parçacık belirli bir koordinat sistemine göre hareket ediyorsa bu koordinat sistemindeki yer vektörü zamanın $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ şeklindeki bir fonksiyonu olur. Bir noktasal parçacığın hareketinin izafe edildiği koordinat sistemine *referans sistemi* adı verilir. Deneylerin yapıldığı bir lâboratuvara göre hareketsiz olan bir koordinat sistemine *lâboratuvar referans sistemi* veyâ kısaca *lâboratuvar sistemi* adı verilir.

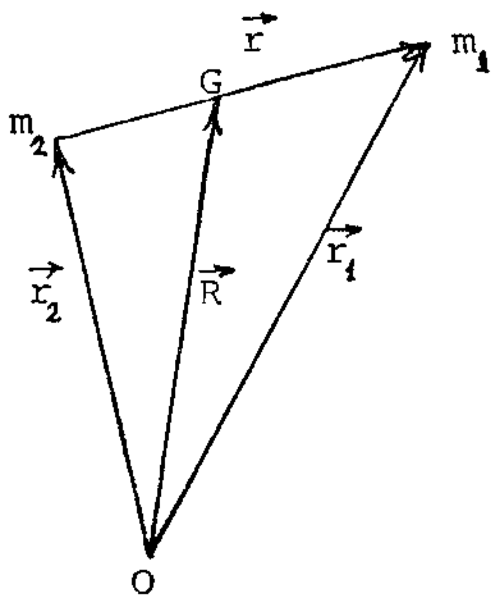
m_1 ve m_2 kütlelerine sâhip iki noktasal parçacığa ait lâboratuvar referans sistemindeki yer vektörleri mütekabilen $\mathbf{r}_1$ ve $\mathbf{r}_2$ olsun. m_1 ve m_2 kütlelerinin G kütle merkezinin lâboratuvar referans sistemindeki yer vektörü de $\mathbf{R}$ olsun. *Kütle merkez*inin tanım bağıntısı

$$(m_1 + m_2)\,\mathbf{R} = m_1\,\mathbf{r}_1 + m_2\,\mathbf{r}_2 \qquad \text{(II.1.1)}$$

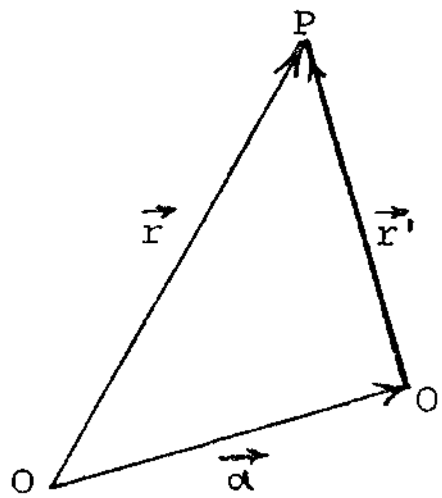
şeklindedir. Öte yandan, m_1 kütlesinin m_2 kütlesine göre *izafi yer vektörü* $\mathbf{r}$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \qquad \text{(II.1.2)}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Şimdi lâboratuvar referans sistemindeki koordinatların O başlangıç noktasını O' noktasına öteleyelim. Uzayın herhangi bir P noktasının O koordinat sistemine göre yer vektörü $\mathbf{O\,P} = \mathbf{r}$ ve O' koordinat sistemine göre yer vektörü de $\mathbf{O'\,P} = \mathbf{r}'$ dür. Şüphesiz



Şekil II.1.



Şekil II.2.

$$\mathbf{OP} = \mathbf{OO'} + \mathbf{O'P}$$

bağıntısı yazılabilir. Koordinat sisteminin O dan O' e ötelenme miktarı $\mathbf{OO'} = \mathbf{a}$ vektörü ile belirli olduğuna göre yukardaki bağıntı

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{a} \qquad \text{(II.1.3)}$$

şeklinde yazılabilir. (II.1.3) bağıntısı lâboratuvar referans sistemindeki *koordinatların keyfî öteleme dönüşümü*nü ifâde eder. Eğer O noktası sâbit ve keyfî bir $\mathbf{V}$ hızı ile O' noktasına ötelenirse ve ötelenme süresi t ise, $\mathbf{a} = \mathbf{V}t$ dir ve (II.1.3) bağıntısı

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{V}t \qquad \text{(II.1.3.a)}$$

şeklinde yazılabilir. (II.1.3a) bağıntısına *GALİLE dönüşümü* adı verilir. m_1 ve m_2 kütlelerine ve G kütle merkezine öteleme dönüşümü uygulanırsa (II.1.3) bağıntısına göre

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1' + \mathbf{a}, \qquad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_2' + \mathbf{a}, \qquad \mathbf{R} = \mathbf{R}' + \mathbf{a} \qquad \text{(II.1.4)}$$

bağıntıları yazılabilir. (II.1.4) bağıntıları (II.1.1) ve (II.1.2) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$(m_1 + m_2)(\mathbf{R}' + \mathbf{a}) = m_1(\mathbf{r}_1' + \mathbf{a}) + m_2(\mathbf{r}_2' + \mathbf{a})$$

ve

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1' + \mathbf{a} - (\mathbf{r}_2' + \mathbf{a})$$

bağıntıları bulunur. Bu iki bağıntıda $\mathbf{a}$ lı terimler kısalır ve

$$(m_1 + m_2)\,\mathbf{R}' = m_1\,\mathbf{r}_1' + m_2\,\mathbf{r}_2' \qquad \text{(II.1.5)}$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2' \qquad \text{(II.1.6)}$$

elde edilir. Görülüyor ki (II.1.1) ve (II.1.2) bağıntılarının şekilleri (II.1.3) ile verilen koordinatların öteleme dönüşümü ile değişmez, yâni *invaryant* kalır.

Şimdi koordinat sisteminin ötelenmiş başlangıcı olan O' noktası G kütle merkezine çakışsın. Böylece (II.1.4) bağıntılarının üçüncüsünden $\mathbf{O'G} = \mathbf{R}' = 0$, $\mathbf{OG} = \mathbf{R} = \mathbf{a}$ elde edilir ve (II.1.3) bağıntısı

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{R} \qquad \text{(II.1.7)}$$

şeklini alır. (II.1.7) bağıntısı lâboratuvar referans sisteminden *kütle merkezi referans sistemi*ne dönüşüm bağıntısıdır. Böylece (II.1.4) bağıntıları

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1' + \mathbf{R}, \qquad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_2' + \mathbf{R}, \qquad \mathbf{R}' = 0 \qquad \text{('I.1.8)}$$

şekillerini alır. (II.1.8) bağıntılarına göre (II.1.5) bağıntısı

$$m_1\,\mathbf{r}_1' + m_2\,\mathbf{r}_2' = 0 \qquad \text{(II.1.9)}$$

şeklini alır. (II.1.2) ve (II.1.6) bağıntıları bir arada

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2' \qquad \text{(I'.1.10)}$$

şeklinde yazılabilir. (II.1.1) ve (II.1.2) bağıntılarından m_1 ve m_2 kütlelerinin lâboratuvar sistemindeki $\mathbf{r}_1$ ve $\mathbf{r}_2$ yer vektörleri, $\mathbf{r}$ ve $\mathbf{R}$ yer vektörleri cinsinden çözülürse

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{m_1 + m_2}\,\mathbf{r}, \qquad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{m_1 + m_2}\,\mathbf{r} \qquad \text{(II.1.11)}$$

sonuçlarına varılır. (II.1.9) ve (II.1.10) bağıntılarından da m_1 ve m_2 kütlelerinin kütle merkezi sistemindeki $\mathbf{r}_1'$ ve $\mathbf{r}_2'$ yer vektörleri, $\mathbf{r}$ yer vektörü cinsinden çözülürse

$$\mathbf{r}_1' = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\,\mathbf{r}, \qquad \mathbf{r}_2' = -\frac{m_1}{m_1 + m_2}\,\mathbf{r} \qquad \text{(II.1.12)}$$

bulunur. (II.1.12) bağıntıları, G kütle merkezinin m_1 ve m_2 kütlelerine ait maddesel noktaları birleştiren doğru üzerinde olduğunu gösterir. Öte yandan, (II.1.12) bağıntılarına göre, kütle merkezi sistemindeki $\mathbf{r}_1'$ ve $\mathbf{r}_2'$ yer vektörleri yerine $\mathbf{r}$ izafî yer vektörü kullanılabilir.

(II.2) KUVANTUM MEKANİĞİNDE İKİ CİSİM PROBLEMİ VE SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN LABORATUVAR SİSTEMİNDEN KÜTLE MERKEZİ SİSTEMİNE DÖNÜŞTÜRÜLMESİ

Lâboratuvar sisteminde m_1 ve m_2 kütlelerine sâhip P_1 ve P_2 parçacıklarından oluşan sisteme ait HAMİLTON operatörü

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tag{II.2.1}$$

olduğuna göre, lâboratuvar sisteminde zamandan bağımsız SCHRÖDİNGER denklemi

$$H\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_t \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tag{II.2.2}$$

şeklinde yazılabilir. (II.2.1) bağıntısında

$$\mathbf{p}_1 = \frac{\hbar}{i}\nabla_1, \qquad \mathbf{p}_2 = \frac{\hbar}{i}\nabla_2 \tag{II.2.3}$$

olmak üzere

$$p_1^2 = -\hbar^2\nabla_1^2, \qquad p_2^2 = -\hbar^2\nabla_2^2 \tag{II.2.4}$$

yazılabilir. Böylece HAMİLTON operatörü

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tag{II.2.5}$$

şeklinde yazılabilir. m_1 ve m_2 kütlelerine sâhip P_1 ve P_2 noktasal parçacıklarının lâboratuvar sistemindeki kartezyen koordinatları (x_1, y_1, z_1) ve (x_2, y_2, z_2) olduğuna göre ∇_1^2 ve ∇_2^2 LAPLACE operatörlerinin kartezyen koordinatlardaki ifâdeleri

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}, \qquad \nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \tag{II.2.6}$$

şeklinde olur. Son olarak, (II.2.5) bağıntısı (II.2.2) bağıntısında yerine yazılırsa lâboratuvar sisteminde zamandan bağımsız SCHRÖDİNGER denklemi

$$\left[\frac{1}{m_1}\nabla_1^2 + \frac{1}{m_2}\nabla_2^2 + \frac{2}{\hbar^2}(E_t - V)\right]\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0 \tag{II.2.7}$$

şeklini alır. Bu denklemde $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, lâboratuvar sisteminde P_1 ve P_2 parçacıklarının arasındaki etkileşme kuvvetinin potansiyel enerjisidir ve E_t de parçacık sisteminin toplam enerjisidir.

Şimdi (II.2.7) bağıntısı ile verilen ve $\mathbf{r}_1$ ve $\mathbf{r}_2$ koordinatlarına göre yazılmış olan SCHRÖDİNGER denklemini (II.1.1) ve (II.1.2) dönüşüm bağıntılarının yardımı ile $\mathbf{r}$ ve $\mathbf{R}$ koordinatlarına göre yazılmış olan SCHRÖDİNGER denklemine dönüştürebiliriz. **R** vektörünün kartezyen bileşenleri (X, Y, Z) ve **r** vektörünün kartezyen bileşenleri de (x, y, z) olsun. Önce (II.1.1) ve (II.1.2) dönüşüm bağıntılarının x ekseni üzerindeki izdüşümleri olan

$$(m_1 + m_2)\, X = m_1\, x_1 + m_2\, x_2\,, \qquad x = x_1 - x_2 \tag{II.2.8}$$

bağıntılarını göz önüne alacağız. $(x\,, X)$ değişkenleri yalnız $(x_1\,, x_2)$ değişkenlerine bağlı olduğundan

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x}\,, \qquad \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial X}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x}$$

kısmî türev bağıntıları yazılabilir. Öte yandan, (II.2.8) bağıntılarından

$$\frac{\partial X}{\partial x_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2}\,, \quad \frac{\partial x}{\partial x_1} = 1, \quad \frac{\partial X}{\partial x_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\,, \quad \frac{\partial x}{\partial x_2} = -1$$

bulunur ve böylece

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}\,, \qquad \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} \tag{II.2.9}$$

kısmî türev bağıntıları elde edilir. (II.2.9) bağıntılarının birincisinden

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}\right)$$

veyâ

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2}\frac{\partial^2}{\partial X\, \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{II.2.10a}$$

bulunur. Benzer şekilde, (II.2.9) bağıntılarının ikincisinden de

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{2m_2}{m_1 + m_2}\frac{\partial^2}{\partial X\, \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{II.2.10b}$$

bulunur. (II.2.10a) bağıntısı m_1 ile ve (II.2.10b) bağıntısı da m_2 ile bölünüp taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{1}{m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{1}{m_1 + m_2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{m_1 + m_2}{m_1\, m_2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{II.2.11}$$

elde edilir. x eksenine ait kartezyen koordinatlar için elde edilen (II.2.11) bağıntısının y ve z eksenlerine ait kartezyen koordinatlar için benzerleri yazılır ve elde edilen iki bağıntı (II.2.11) bağıntısı ile taraf tarafa toplanırsa (II.2.6) bağıntılarının yardımı ile

$$\frac{1}{m_1}\nabla_1^2 + \frac{1}{m_2}\nabla_2^2 = \frac{1}{M}\nabla_{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{m}\nabla_{\mathbf{r}}^2 \tag{II.2.12}$$

sonucuna varılır. Buradaki M ve m kütleleri

$$M = m_1 + m_2 , \qquad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{II.2.13}$$

bağıntıları ile tanımlanır. M ye parçacık sisteminin *toplam kütlesi* ve m ye de parçacık sisteminin *indirgenmiş kütlesi* adı verilir. Öte yandan, $\nabla_{\mathbf{R}}^2$ ve $\nabla_{\mathbf{r}}^2$ LAPLACE operatörlerinin kartezyen koordinatlardaki ifâdeleri

$$\nabla_{\mathbf{R}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} , \quad \nabla_{\mathbf{r}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{II.2.14}$$

şeklindedir. (II.12.2) bağıntısı (II.2.7) denkleminde yerine yazılırsa, (II.1.11) bağıntılarının yardımı ile

$$\left[\frac{1}{M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \frac{2}{\hbar^2} (E_t - V) \right] \Phi (\mathbf{r} , \mathbf{R}) = 0 \tag{II.2.15}$$

sonucuna varılır.

Şimdi eğer potansiyel enerji yalnız $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ izafî koordinatlarının $V = V(\mathbf{r})$ şeklindeki bir fonksiyonu ise, yâni parçacık sistemine dış kuvvetlerin etkisi yoksa (II.2.15) denkleminin

$$\Phi (\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi (\mathbf{r}) \chi (\mathbf{R}) \tag{II.2.16}$$

şeklindeki bir çözümü bulunabilir. (II.2.16) bağıntısı (II.2.15) denkleminde yerine yazılırsa

$$\frac{\psi (\mathbf{r})}{M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \chi (\mathbf{R}) + \frac{\chi (\mathbf{R})}{m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi (\mathbf{r}) + \frac{2}{\hbar^2} [E_t - V (\mathbf{r})] \psi (\mathbf{r}) \chi (\mathbf{R}) = 0$$

bulunur. Bu bağıntının her iki yanı $\psi \chi$ çarpımına bölünürse

$$\frac{1}{M\chi} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \chi + \frac{1}{m\psi} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi + \frac{2}{\hbar^2} (E_t - V) = 0$$

veyâ

$$\frac{1}{M\chi} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \chi + \frac{2}{\hbar^2} E_t = - \frac{1}{m\psi} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi + \frac{2}{\hbar^2} V = \frac{2}{\hbar^2} E_{km} \tag{II.2.17}$$

sonucuna varılır. (II.2.17) denkleminin sol yanı yalnız $\mathbf{R}$ nin ve sağ yanı da yalnız $\mathbf{r}$ nin fonksiyonu olduğu için her iki yanın ortak bir $2E_{km}/\hbar^2$ ayrılma sâbitine eşit olması gerekir. Böylece (II.2.17) denklemi

$$\nabla_{\mathbf{R}}^2 \chi + \frac{2M}{\hbar^2} (E_t - E_{km}) \chi = 0 \tag{II.2.18}$$

ve

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E_{km} - V) \psi = 0 \tag{II.2.19}$$

denklemlerine ayrılır. Bu denklemlerin her ikisi de tek bir parçacığa ait SCHRÖDİNGER denklemleridir. (II.2.18) denklemi M toplam kütlesine sâhip G kütle merkezinin lâboratuvar sisteminde bir serbest noktasal parçacık olarak hareketini belirler. Kütle merkezinin dalga fonksiyonu

$$\chi(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{K}.\mathbf{R}} \tag{II.2.20}$$

şeklinde bir DE BROGLİE dalgasıdır. (II.2.20) bağıntısından

$$\nabla_{\mathbf{R}}\chi = i\,\mathbf{K}\chi \tag{II.2.21}$$

bulunur. O hâlde, kütle merkezinin momentumu $\hbar\mathbf{K}$ ve kinetik enerjisi de $\hbar^2 K^2/2M$ dir. (II.2.21) bağıntısının her iki yanının diverjansını alarak

$$\nabla_{\mathbf{R}}^2\chi = i\,\mathbf{K}\,.\,\nabla_{\mathbf{R}}\chi = -K^2\chi$$

elde edilir. Bu bağıntı (II.2.18) denklemi ile karşılaştırılırsa

$$K^2 = \frac{2M}{\hbar^2}(E_t - E_{km})$$

veyâ

$$E_t = E_{km} + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} \tag{II.2.22}$$

sonucuna varılır. E_t enerjisi, P_1, P_2 parçacık sisteminin lâboratuvar sistemindeki toplam enerjisidir. Öte yandan, (II.2.19) denklemi m indirgenmiş kütlesine ve $V(\mathbf{r})$ potansiyel enerjisine sâhip bir noktasal parçacığın kütle merkez sistemindeki hareketini belirler. Söz konusu denkleme göre, parçacık sisteminin kütle merkezi sistemindeki toplam enerjisi E_{km} dir. Böylece (II.2.22) denklemi, P_1, P_2 parçacık sistemi için :

lâb. sistemindeki toplam enerji = km. sistemindeki toplam enerji + kütle merkezinin lâb. sistemindeki enerjisi.

eşitliğini ifâde eder. Böylece iki cisim problemi, kütle merkezi sisteminde kütlesi indirgenmiş kütleye eşit olan ve yeri izafî koordinatlarla belirlenen tek cisim problemine indirgenmiş oluyor. Söz konusu tek cisme ait SCHRÖDİNGER denklemi de (II.2.19) denklemidir.

(II.3) HİDROJEN ATOMU

Hidrojen atomu, M_p kütlesine ve $+e$ elektrik yüküne sâhip bir proton ile bu protonun etrafında dönen m_e kütlesine ve $-e$ elektrik yüküne sâhip bir elektrondan oluşur. Elektronun protona göre izafî hareketine ait E enerji özdeğerlerini ve ψ özfonksiyonlarını bulmak üzere (II.2.19) diferansiyel denklemini çözeceğiz. Söz konusu denklem $\nabla_r^2 \equiv \nabla^2$ ve $E_{km} \equiv E$ alınarak

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \tag{II.3.1}$$

şeklinde yazılabilir. (II.3.1) denklemindeki m indirgenmiş kütlesi

$$m = \frac{m_e M_p}{m_e + M_p} \equiv \frac{m_e}{1 + \dfrac{m_e}{M_p}} \tag{II.3.2}$$

bağıntısının yardımı ile hesaplanabilir. $M_p = 1836\, m_e$ olduğu için $m \cong m_e$ dir. Elektronla proton arasındaki COULOMB etkileşmesi

$$V(\mathbf{r}) = V(r) = -\frac{e^2}{r} \tag{II.3.3}$$

küresel simetrik potansiyel enerjisi ile belirlidir. Burada $r = |\mathbf{r}|$ elektronun protona olan uzaklığıdır. (II.3.1) denkleminin küresel koordinatlardaki çözümü paragraf (I.14) te incelenmişti ve bu denklemin

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{II.3.4}$$

şeklindeki çözümleri aranmıştı. (II.3.4) bağıntısında dalga fonksiyonunun açısal kısmı olan $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, küresel harmonik adı ile bilinen bir fonksiyondur. Küresel harmoniğin genel matematiksel ifâdesi (I.21.13) bağıntısı ile verilmiştir. Dalga fonksiyonunun radyal kısmı ise (I.14.9) bağıntısı ile verilen

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0 \tag{II.3.5}$$

radyal denklemini sağlar. (II.3.5) denklemi

$$u(r) = r\, R(r) \tag{II.3.6}$$

dönüşümü aracılığı ile sâdeleştirilebilir. Paragraf (I.5) te açıklandığı gibi ψ fonksiyonu her yerde sonlu olmalı ve bu sebepten ötürü $R(r)$ fonksiyonu da her yerde sonlu olmalıdır. (II.3.6) bağıntısına göre, $r = 0$ için $R(0) =$ sonlu olabilmesi için $u(r)$ fonksiyonu

$$u(0) = 0 \tag{II.3.7}$$

sınır şartını sağlamalıdır. Öte yandan, (II.3.6) bağıntısının her iki yanının birinci ve ikinci mertebeden türevleri alınırsa

$$\frac{du}{dr} = r\frac{dR}{dr} + R, \qquad \frac{d^2 u}{dr^2} = r\frac{d^2 R}{dr^2} + 2\frac{dR}{dr}$$

bulunur. Öte yandan, (II.3.5) denkleminin her iki yanı r ile çarpılırsa

$$r\frac{d^2 R}{dr^2} + 2\frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] r R = 0$$

elde edilir. Böylece

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u = 0 \qquad \text{(II.3.8)}$$

sonucuna varılır. Hidrojen atomunun bağlı hâlleri için $E < 0$ dır ve böylece

$$E = -|E| \qquad \text{(II.3.9)}$$

yazılabilir. (II.3.3) ve (II.3.9) bağıntıları çözmek istediğiniz (II.3.8) denkleminde yerlerine yazılırsa

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r} - |E|\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u = 0 \qquad \text{(II.3.10)}$$

bulunur. (II.3.10) denklemini daha sâde bir şekilde yazabilmek için

$$\gamma^2 = \frac{8m|E|}{\hbar^2} \qquad \text{(II.3.11)}$$

bağıntısı ile uzunluğun tersi boyutuna sâhip γ sâbitini ve bu sâbite bağlı olarak

$$\lambda = \frac{2m\, e^2}{\gamma\, \hbar^2} \qquad \text{(II.3.12)}$$

boyutsuz sâbit büyüklüğünü tanımlayalım. (II.3.11) ve (II.3.12) bağıntıları arasında γ sâbiti yok edilirse (II.3.9) bağıntısının yardımı ile

$$E = -\frac{m\, e^4}{2\hbar^2 \lambda^2} \qquad \text{(II.3.13)}$$

elde edilir. (II.3.11) ve (II.3.12) bağıntılarının yardımı ile (II.3.10) diferansiyel denklemi

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{\gamma\lambda}{r} - \frac{1}{4}\gamma^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u = 0$$

veyâ

$$\frac{1}{\gamma^2}\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{\lambda}{\gamma r} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\gamma^2 r^2}\right] u = 0 \qquad \text{(II.3.14)}$$

şeklini alır. Bu son bağıntıda r değişkeni

$$\rho = \gamma r \qquad \text{(II.3.15)}$$

bağıntısının yardımı ile ρ boyutsuz değişkenine dönüştürülürse

$$d\rho = \gamma\, dr, \qquad d\rho^2 = \gamma^2 dr^2, \qquad \rho^2 = \gamma^2 r^2$$

olacağından (II.3.14) denklemi

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u = 0 \qquad \text{(II.3.16)}$$

veyâ

$$\frac{u''}{u} = \frac{1}{4} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \qquad \text{(II.3.16a)}$$

şeklini alır.

Şimdi (II.3.16a) denkleminin $r \to \infty$ veyâ $\rho \to \infty$ için asimptotik şeklini bulmaya çalışalım. $\rho \to \infty$ için $u'' \cong u/4$ olduğu için

$$u \cong e^{\pm \frac{1}{2}\rho} \qquad (\rho \to \infty)$$

bulunur. $\rho \to \infty$ için $u/r = R$ nin sonlu değerler alabilmesi gerektiği için ancak

$$u \cong e^{-\frac{1}{2}\rho} \qquad (\rho \to \infty)$$

olabilir. $\rho \to \infty$ için (II.3.16a) denkleminin çözümünün daha iyi bir yaklaşıklıkla

$$u \cong \rho^n e^{-\frac{1}{2}\rho} \qquad (\rho \to \infty) \qquad \text{(II.3.17)}$$

şeklinde olduğu gösterilebilir. Burada n sonlu değere sâhip bir sâbittir. (II.3.17) bağıntısının her iki yanının e tabanına göre logaritması alınırsa

$$\ln u \cong n \ln \rho - \frac{1}{2}\rho \qquad \text{(II.3.18)}$$

elde edilir. Bu bağıntının her iki yanının türevi alınırsa

$$\frac{u'}{u} \cong \frac{n}{\rho} - \frac{1}{2} \qquad (\rho \to \infty) \qquad \text{(II.3.19)}$$

bulunur. (II.3.19) bağıntısının tekrar türevi alınırsa

$$\frac{u''}{u} - \frac{u'^2}{u^2} \cong -\frac{n}{\rho^2}$$

bağıntısı ve (II.3.19) bağıntısının her iki yanının karesi alınırsa

$$\frac{u'^2}{u^2} \cong \frac{1}{4} - \frac{n}{\rho} + \frac{n^2}{\rho^2}$$

bağıntısı bulunur. Son iki bağıntı taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{u''}{u} \cong \frac{1}{4} - \frac{n}{\rho} + \frac{n(n-1)}{\rho^2} \qquad (\rho \to \infty) \qquad \text{(II.3.20)}$$

sonucuna varılır. (II.3.20) bağıntısı (II.3.16a) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$L(0) = a_0 \neq 0 \tag{II.3.29}$$

sınır şartını sağladığı kabul ediliyor. $F(\rho)$ fonksiyonu (II.3.23) sınır şartını sağladığı için (II.3.29) şartının gerçekleşebilmesi için

$$s > 0 \tag{II.3.30}$$

olmalıdır. (II.3.28) bağıntısının her iki yanının e tabanına göre logaritması alınırsa

$$\ln F = \ln L + s \ln \rho \tag{II.3.31}$$

elde edilir. Bu bağıntının her iki yanının türevi alınırsa

$$\frac{F'}{F} = \frac{L'}{L} + \frac{s}{\rho} \tag{II.3.32}$$

bulunur. (II.3.32) bağıntısının tekrar türevi alınırsa

$$\frac{F''}{F} - \frac{F'^2}{F^2} = \frac{L''}{L} - \frac{L'^2}{L^2} - \frac{s}{\rho^2}$$

bağıntısı ve (II.3.32) bağıntısının her iki yanının karesi alınırsa

$$\frac{F'^2}{F^2} = \frac{L'^2}{L^2} + \frac{2s}{\rho}\frac{L'}{L} + \frac{s^2}{\rho^2}$$

bağıntısı bulunur. Son iki bağıntı taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{F''}{F} = \frac{L''}{L} + \frac{2s}{\rho}\frac{L'}{L} + \frac{s(s-1)}{\rho^2} \tag{II.3.33}$$

sonucuna varılır. (II.3.32) ve (II.3.33) bağıntıları (II.3.27) diferansiyel denkleminde yerlerine yazılırsa

$$\frac{L''}{L} + \left(\frac{2s}{\rho} - 1\right)\frac{L'}{L} + \frac{\lambda - s}{\rho} + \frac{s(s-1) - l(l+1)}{\rho^2} = 0$$

veyâ

$$\rho^2 L'' + \rho(2s - \rho)L' + [\rho(\lambda - s) + s(s-1) - l(l+1)]\,L = 0 \tag{II.3.34}$$

diferansiyel denklemi bulunur. Bu diferansiyel denklemin her iki yanının $\rho = 0$ için limiti alınırsa, (II.3.29) ile verilen $L(0) \neq 0$ şartına göre

$$s(s-1) - l(l+1) = 0$$

veyâ

$$(s + l)(s - l - 1) = 0 \tag{II.3.35}$$

indis denklemi bulunur. İndis denkleminin farklı iki çözümü $s = -l$ ve $s = l + 1$ dir. (II.3.30) şartına göre $s > 0$ olması gerektiği için $s = l + 1$ sonucuna varılır. $s = l + 1$ için (II.3.34) diferansiyel denklemi

$$\rho L'' + [2(l+1) - \rho] L' + (\lambda - l - 1) L = 0 \qquad \text{(II.3.36)}$$

şeklini alır.

Şimdi (II.3.36) diferansiyel denkleminin

$$L(\rho) = a_0 + a_1 \rho + a_2 \rho^2 + \dots, \qquad a_0 \neq 0 \qquad \text{(II.3.37)}$$

veyâ

$$L(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \qquad \text{(II.3.37a)}$$

şeklindeki bir çözümünü bulmaya çalışalım. (II.3.37a) bağıntısından L nin ρ ya göre birinci ve ikinci mertebeden türevlerini alarak

$$L' = \sum_k k\, a_k \rho^{k-1}, \qquad L'' = \sum_k k(k-1)\, a_k \rho^{k-2}$$

bulunur. Bu sonuçlar (II.3.36) diferansiyel denkleminde yerlerine yazılırsa

$$\sum_k k(k-1)\, a_k \rho^{k-1} + 2(l+1) \sum_k k\, a_k \rho^{k-1} - \sum_k k\, a_k \rho^k +$$

$$+ (\lambda - l - 1) \sum_k a_k \rho^k = 0$$

veyâ

$$\sum_k k[k - 1 + 2(l+1)]\, a_k \rho^{k-1} - \sum_k (k + l + 1 - \lambda)\, a_k \rho^k = 0$$

veyâ

$$\sum_k [(k+1)(k+2l+2) \;{}_{k+1} - (k + l + 1 - \lambda)\, a_k]\, \rho^k \equiv 0$$

özdeşliği elde edilir. Bu sonuç (II.3.37a) serisinin (II.3.36) diferansiyel denklemini özdeş olarak sağladığını gösterir ve herhangi bir k için ρ^k nın katsayısı sıfıra eşit olmalıdır. Böylece

$$a_{k+1} = \frac{k + l + 1 - \lambda}{(k+1)(k+2l+2)}\, a_k \qquad \text{(II.3.38)}$$

sonucuna varılır.

$L(\rho)$ fonksiyonunun $\rho \to \infty$ için asimptotik değerleri (II.3.37a) serisinin en yüksek dereceli terimleri ile belirlenebilir. Bu da $k \to \infty$ limitinin araştırılması demektir. (II.3.38) bağıntısından

$$\lim_{k\to\infty} \frac{a_{k+1}}{a_k} = \lim_{k\to\infty} \frac{k + l + 1 - \lambda}{(k + 1)(k + 2l + 2)} \cong \frac{1}{k} \qquad \text{(II.3.39)}$$

bulunur. Eğer bu sonuç

$$e^{\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\rho^k}{k!} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} b_k \, \rho^k , \qquad b_k = \frac{1}{k!}$$

fonksiyonuna ait serinin b_k açılım katsayılarının özellikleri ile karşılaştırılırsa

$$\frac{b_{k+1}}{b_k} = \frac{k!}{(k + 1)!} \equiv \frac{1}{k + 1} , \quad \lim_{k\to\infty} \frac{b_{k+1}}{b_k} \cong \frac{1}{k}$$

olduğu için

$$\rho \to \infty \quad \text{için :} \quad L(\rho) \cong \rho^n \, e^{\rho} \qquad \text{(II.3.40)}$$

sonucuna varılır. Buradan n sonlu bir değere sâhiptir. Öte yandan (II.3.6), (II. 3.22) ve (II.3.28) bağıntılarından $s = l + 1$ olduğunu hatırlayarak

$$R(\rho) = \frac{1}{\rho} \, u(\rho) = \frac{1}{\rho} \, F(\rho) \, e^{-\frac{1}{2}\rho} = \frac{1}{\rho} \, \rho^{l+1} \, L(\rho) \, e^{-\frac{1}{2}\rho}$$

veyâ

$$R(\rho) = e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^l \, L(\rho) \qquad \text{(II.3.41)}$$

sonucuna varılır. (II.3.40) asimptotik bağıntısı (II.3.41) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\rho \to \infty \quad \text{için :} \quad R(\rho) \cong e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^l \, \rho^n \, e^{\rho}$$

veyâ

$$\rho \to \infty \quad \text{için :} \quad R(\rho) \cong e^{\frac{1}{2}\rho} \rho^{l+n} \qquad \text{(II.3.42)}$$

bulunur. O hâlde $\rho \to \infty$ için $R(\rho)$ sonlu değildir ve bu sebepten $k \to \infty$ olamaz, yâni (II.3.37a) serisi $k = n'$ terimi ile kesilmeli ve n' üncü dereceden bir polinom olmalıdır. Böylece, $a_{n'} \neq 0$ ve $a_{n'+1} = 0$ şartları bir arada sağlanmalıdır ve (II.3.38) bağıntısına göre $k = n'$ için

$$a_{n'+1} = \frac{n' + l + 1 - \lambda}{(n' + 1)(n' + 2l + 2)} \, a_{n'} = 0$$

yazılabildiğinden

$$\lambda = n' + l + 1 = n \qquad \text{(II.3.43)}$$

sonucuna varılır. k, $k \geqq 0$ şartını sağlayan bir tamsayı olduğu için, n' de $n' \geqq 0$ şartını sağlayan bir tamsayıdır. n' e *radyal kuvantum sayısı* adı verilir. Birinci bölümde görüldüğü gibi, l ye *yörünge açısal momentumu kuvantum sayısı* adı verilir ve l, $l \geqq 0$ şartını sağlayan bir tamsayıdır. O hâlde, (II.3.43) bağıntısına göre n, $n > 0$ şartını sağlayan bir tamsayıdır ve bu sayıya *toplam kuvantum sayısı* adı verilir. Öte yandan, (II.3.43) bağıntısından

$$n' = n - 1 - l \geqq 0$$

yazılabilir ve böylece l ve n kuvantum sayılarının arasında

$$0 \leqq l \leqq n - 1 \qquad \text{(II.3.44)}$$

bağıntısı elde edilir. (II.3.43) bağıntısı (II.3.13) bağıntısında yerine yazılırsa hidrojen atomunun enerji seviyelerini veren

$$E_n = -\frac{m\, e^4}{2\hbar^2\, n^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots) \qquad \text{(II.3.45)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (II.3.36) diferansiyel denklemi

$$\rho\, L'' + [2\,(l + 1) - \rho]\, L' + (n - l - 1)\, L = 0 \qquad \text{(II.3.46)}$$

şeklini alır. (II.3.43) bağıntısını kullanarak (II.3.46) ve (II.3.38) bağıntıları

$$\rho\, L'' + [2\,(l + 1) - \rho]\, L' + n'\, L = 0 \qquad \text{(II.3.46a)}$$

ve

$$a_{k+1} = \frac{k - n'}{(k + 1)\,(k + 2l + 2)}\, a_k \qquad \text{(II.3.38a)}$$

şekillerinde yazılabilir. Bu son iki bağıntı, $L(\rho)$ fonksiyonunun derecesi n' olan bir polinom olarak hesaplanmasını sağlar.

(II.3.45) bağıntısına göre E_{n_2} enerji seviyesinden E_{n_1} enerji seviyesine atlayan bir elektronun enerji kaybının büyüklüğü

$$\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{m\, e^4}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

bağıntısı ile hesaplanabilir. Bu enerji kaybına karşılık açığa çıkan fotonun dalga boyu da

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\Delta E}{ch} = \frac{m\, e^4}{4\pi\, c\hbar^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad \text{(II.3.47)}$$

veyâ

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad \text{(II.3.47a)}$$

bağıntısı ile hesaplanabilir. Burada R_H, hidrojen atomuna ait *RYDBERG sâbiti*dir ve

$$R_H = \frac{m\, e^4}{4\pi\, c\hbar^3} \tag{II.3.48}$$

formülü ile hesaplanabilir. (II.3.2) bağıntısına göre sonsuz çekirdek kütlesi için, yâni $M_p = \infty$ için, $m = m_e$ olduğundan RYDBERG sâbitinin sayısal değeri

$$R_\infty = \frac{m_e\, e^4}{4\pi\, c\hbar^3} = \frac{\alpha}{4\pi\, a_0} \tag{II.3.49}$$

bağıntısı ile hesaplanabliir. Burada α, boyutsuz *ince yapı sabiti*dir ve sayısal değeri

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar c}{e^2} = 137{,}036$$

dır. a_0 da birinci dairesel BOHR yörüngesinin yarıçapıdır ve sayısal değeri

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e\, e^2} = 0{,}52917723 \times 10^{-8}\ \text{cm}$$

dir. Bu sayısal değerlerin kullanılması ile

$$R_\infty = 109737{,}31\ \text{cm}^{-1}$$

bulunur. (II.3.48) ve (II.3.49) bağıntıları taraf tarafa bölünürse

$$R_H = \frac{m}{m_e} R_\infty \tag{II.3.48a}$$

elde edilir. Öte yandan (II.3.2) bağıntısına göre, $M_p = 1836{,}15152\, m_e$ olduğunu hatırlayarak

$$\frac{m}{m_e} = \frac{1}{1 + \dfrac{m_e}{M_p}} = \frac{1836{,}15152}{1837{,}15152}$$

sayısal değeri bulunur. Bu sayısal değer, R_∞ un sayısal değeri ile birlikte (II.3.48a) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$R_H = 109677{,}58\ \text{cm}^{-1} \tag{II.3.50}$$

sonucuna varılır.

(II.4) LAGUERRE POLİNOMLARI VE ASOSYE LAGUERRE POLİNOMLARI

LAGUERRE polinomları, kolaylıkla hesaplanabilmelerini mümkün kılan

$$g(\rho, t) = \frac{e^{\frac{-\rho t}{1-t}}}{1-t} = \sum_{q=0}^{\infty} L_q(\rho) \frac{t^q}{q!}, \qquad t < 1 \tag{II.4.1}$$

şeklindeki bir *doğuran fonksiyon* yardımı ile tanımlanabilir. Doğuran fonksiyonun e tabanına göre logaritması alınırsa

$$\ln g(\rho, t) = -\frac{\rho t}{1-t} - \ln(1-t) \tag{II.4.2}$$

bağıntısı bulunur. (II.4.2) bağıntısının her iki yanının ρ değişkenine göre kısmî türevi alınırsa

$$\frac{1}{g}\frac{\partial g}{\partial \rho} = -\frac{t}{1-t}$$

veyâ

$$(1-t)\frac{\partial g}{\partial \rho} + tg = 0 \tag{II.4.3}$$

bulunur. (II.4.1) bağıntısından yararlanarak g ve $\partial g/\partial \rho$ nun LAGUERRE polinomları ve türevleri cinsinden açılımları (II.4.3) bağıntısında yerlerine yazıldığı takdirde bu bağıntıyı özdeş olarak sağlamalıdır. Gerekli işlemler yapılırsa :

$$(1-t)\sum_q L'_q \frac{t^q}{q!} + t\sum_q L_q \frac{t^q}{q!} = 0$$

$$\sum_q L'_q \frac{t^q}{q!} - \sum_q L'_q \frac{t^{q+1}}{q!} + \sum_q L_q \frac{t^{q+1}}{q!} = 0$$

$$\sum_q L'_q \frac{t^q}{q!} - \sum_q L'_{q-1} \frac{t^q}{(q-1)!} + \sum_q L_{q-1} \frac{t^q}{(q-1)!} = 0$$

$$\sum_q (L'_q - q\,L'_{q-1} + q\,L_{q-1})\frac{t^q}{q!} = 0 \tag{II.4.4}$$

sonucuna varılır. Bu özdeşlik LAGUERRE polinomlarının arasındaki

$$q\,L_{q-1} + L'_q - q\,L'_{q-1} = 0 \tag{II.4.5}$$

türevli rekürans bağıntısını verir. (II.4.2) bağıntısının her iki yanının t değişkenine göre kısmî türevi alınırsa

$$\frac{1}{g}\frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{\rho t}{(1-t)^2} - \frac{\rho}{1-t} + \frac{1}{1-t}$$

veyâ

$$\frac{1}{g}\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{-\rho t + (1-\rho)(1-t)}{(1-t)^2} = \frac{-\rho + 1 - t}{(1-t)^2}$$

veyâ

$$(1-t)^2 \frac{\partial g}{\partial t} + (\rho - 1 + t)\, g = 0 \tag{II.4.6}$$

bulunur. (II.4.1) bağıntısından yararlanarak g ve $\partial g/\partial t$ nin LAGUERRE polinomları cinsinden açılımları (II.4.6) bağıntısında yerlerine yazılır ve gerekli işlemler yapılırsa :

$$\sum_q L_q \frac{t^{q-1}}{(q-1)!} - 2t \sum_q L_q \frac{t^{q-1}}{(q-1)!} + t^2 \sum_q L_q \frac{t^{q-1}}{(q-1)!} +$$
$$+ (\rho - 1) \sum_q L_q \frac{t^q}{q!} + t \sum_q L_q \frac{t^q}{q!} = 0$$

$$\sum_q L_q \frac{t^{q-1}}{(q-1)!} - 2 \sum_q L_q \frac{t^q}{(q-1)!} + \sum_q L_q \frac{t^{q+1}}{(q-1)!} +$$
$$+ (\rho - 1) \sum_q L_q \frac{t^q}{q!} + \sum_q L_q \frac{t^{q+1}}{q!} = 0$$

$$\sum_q L_{q+1} \frac{t^q}{q!} - 2 \sum_q L_q \frac{t^q}{(q-1)!} + \sum_q L_{q-1} \frac{t^q}{(q-2)!} +$$
$$+ (\rho - 1) \sum_q L_q \frac{t^q}{q!} + \sum_q L_{q-1} \frac{t^q}{(q-1)!} = 0$$

$$\sum_q [L_{q+1} - 2q\, L_q + q(q-1)\, L_{q-1} + (\rho - 1)\, L_q + q\, L_{q-1}] \frac{t^q}{q!} = 0 \tag{II.4.7}$$

sonucuna varılır. Bu özdeşlik LAGUERRE polinomlarının arasındaki

$$(\rho - 1 - 2q)\, L_q + q^2\, L_{q-1} + L_{q+1} = 0 \tag{II.4.8}$$

türevsiz rekürans bağıntısını verir.

Türevli ve türevsiz rekürans bağıtılarının yardımı ile LAGUERRE polinomlarını veren diferansiyel denklem bulunabilir. (II.4.5) ve (II.4.8) bağıntıları

$$L_q' = q\, (L_{q-1}' - L_{q-1}) \tag{II.4.9}$$

ve

$$L_{q+1} = (2q + 1 - \rho)\, L_q - q^2\, L_{q-1} \tag{II.4.10}$$

şekillerinde yazılabilir. (II.4.9) bağıntısının her iki yanında q yerine $q+1$ yazılarak

$$L'_{q+1} = (q + 1)(L'_q - L_q) \qquad \text{(II.4.11)}$$

bağıntısı ve (II.4.10) bağıntısının her iki yanının türevi alınarak

$$L'_{q+1} = (2q + 1 - \rho) L'_q - L_q - q^2 L'_{q-1} \qquad \text{(II.4.12)}$$

bağıntısı bulunur. (II.4.11) ve (II.4.12) bağıntıları taraf tarafa çıkarılırsa

$$(q - \rho) L'_q + q L_q - q^2 L'_{q-1} = 0 \qquad \text{(II.4.13)}$$

bağıntısı elde edilir. (II.4.5) veyâ (II.4.9) bağıntısı

$$q L'_{q-1} = L'_q + q L_{q-1} \qquad \text{(II.4.14)}$$

şeklinde de yazılabilir. (II.4.14) bağıntısı (II.4.13) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(q - \rho) L'_q + q L_q - q L'_q - q^2 L_{q-1} = 0$$

veyâ

$$\rho L'_q - q L_q + q^2 L_{q-1} = 0 \qquad \text{(II.4.15)}$$

elde edilir. (II.4.15) bağıntısının her iki yanının türevi alınırsa

$$\rho L''_q + (1 - q) L'_q + q^2 L'_{q-1} = 0 \qquad \text{(II.4.16)}$$

bulunur. (II.4.13) ve (II.4.16) bağıntıları taraf tarafa toplanırsa

$$\rho L''_q + (1 - \rho) L'_q + q L_q = 0 \qquad \text{(II.4.17)}$$

sonucuna varılır. Bu son bağıntı LAGUERRE polinomlarını veren ikinci mertebeden diferansiyel denklemdir.

Kitaplarda LAGUERRE polinomlarının doğrudan doğruya hesabını sağlayan

$$L_q(\rho) = e^\rho \frac{d^q}{d\rho^q} (\rho^q e^{-\rho}) \qquad \text{(II.4.18)}$$

şeklindeki RODRİGUES tipi formül verilir. (II.4.18) formülü ve

$$L_{q+1} = (2q + 1 - \rho) L_q - q^2 L_{q-1} \qquad \text{(II.4.10)}$$

şeklindeki türevsiz rekürans bağıntısı aracılığı ile LAGUERRE polinomları hesaplanabilir. (II.4.1) bağıntısı $\rho = 0$ için

$$g(0, t) = \frac{1}{1 - t} = \sum_{q=0}^{\infty} L_q(0) \frac{t^q}{q!} = \sum_{q=0}^{\infty} t^q$$

şeklini alır. Bu son bağıntı hemen

$$L_q(0) = q! \qquad \text{(II.4.19)}$$

sonucunu verir. Öte yandan, $q = 0$ için

$$L_0(\rho) = C = \text{sâbit} \qquad \text{(II.4.20a)}$$

yazılabilir. (II.4.19) bağıntısına göre

$$L_0(0) = 1$$

olduğu için C sâbiti belirlenebilir ve

$$L_0(\rho) \equiv L_0(0) = 1 \qquad \text{(II.4.20b)}$$

bulunur. Gerçekten (II.4.18) formülü de $q = 0$ için

$$L_0(\rho) = e^{\rho}\, e^{-\rho} \equiv 1 \qquad \text{(II.4.20c)}$$

sonucunu verir. $q = 1$ için, (II.14.9) bağıntısına göre

$$L_1(0) = 1$$

olduğu için

$$L_1(\rho) = 1 + a\rho\,, \qquad L_1'(\rho) = a \qquad \text{(II.4.21a)}$$

yazılabilir. Öte yandan, (II.4.17) diferansiyel denklemi $q = 1$ için

$$\rho\, L_1'' + (1 - \rho)\, L_1' + L_1 = 0$$

şeklinde yazılabilir. (II.4.21a) yı bu denklemde yerine yazarak

$$0 + (1 - \rho)\, a + 1 + a\rho = 0$$

veyâ

$$a + 1 = 0$$

elde edilir. O hâlde, (II.4.21a) bağıntısı

$$L_1(\rho) = 1 - \rho \qquad \text{(II.4.21b)}$$

şeklini alır. Gerçekten (II.4.18) formülü de $q = 1$ için

$$L_1(\rho) = e^{\rho} \frac{d}{d\rho}(\rho\, e^{-\rho}) = e^{\rho}(-\rho + 1)\, e^{-\rho} \equiv -\rho + 1 \qquad \text{(II.4.21c)}$$

sonucunu verir. (II.4.18) formülü $q = 2$ için

$$\begin{aligned} L_2(\rho) &= e^{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2}(\rho^2 e^{-\rho}) \\ &= e^{\rho} \frac{d}{d\rho}\left[(-\rho^2 + 2\rho)\, e^{-\rho}\right] \\ &= e^{\rho}\left[-(-\rho^2 + 2\rho) - 2\rho + 2\right] e^{-\rho} \\ &= \rho^2 - 4\rho + 2 \qquad \text{(II.4.22a)} \end{aligned}$$

sonucunu verir. $q > 2$ için LAGUERRE polinomları (II.4.10) bağıntısı ile daha kolay hesaplanabilir. $L_2(\rho)$ için söz konusu bağıntıda $q = 1$ yazılmalıdır. Böylece

$$\begin{aligned} L_2 &= (3-\rho) L_1 - L_0 \\ &= (3-\rho)(1-\rho) - 1 \\ &= \rho^2 - 4\rho + 2 \end{aligned} \qquad \text{(II.4.22b)}$$

sonucu tekrar bulunur. $L_3(\rho)$ için (II.4.10) bağıntısında $q = 2$ yazarak

$$\begin{aligned} L_3 &= (5-\rho) L_2 - 4 L_1 \\ &= (5-\rho)(\rho^2 - 4\rho + 2) - 4(1-\rho) \\ &= -\rho^3 + 4\rho^2 - 2\rho + 5\rho^2 - 20\rho + 10 + 4\rho - 4 \\ &= -\rho^3 + 9\rho^2 - 18\rho + 6 \end{aligned} \qquad \text{(II.4.23)}$$

sonucuna varılır. Böylece, LAGUERRE polinomları istenilen dereceye kadar hesaplanabilir. Beşinci dereceye kadar olan LAGUERRE polinomlarının listesi aşağıdadır :

$$\begin{aligned} L_0 &= 1 \\ L_1 &= -\rho + 1 \\ L_2 &= \rho^2 - 4\rho + 2 \\ L_3 &= -\rho^3 + 9\rho^2 - 18\rho + 6 \\ L_4 &= \rho^4 - 16\rho^3 + 72\rho^2 - 96\rho + 24 \\ L_5 &= -\rho^5 + 25\rho^4 - 200\rho^3 + 600\rho^2 - 600\rho + 120 \end{aligned} \qquad \text{(II.4.24)}$$

Şimdi (II.4.17) diferansiyel denkleminin her iki yanının p kere türevini alalım:

$$(\rho L_q'')^{(p)} + L_q^{(p+1)} - (\rho L_q')^{(p)} + q L_q^{(p)} = 0 \qquad \text{(I˙.4.25)}$$

elde edilir. (I.19.6) bağıntısında olduğu gibi LEİBNİTZ formülünü uygulayarak

$$(\rho L_q'')^{(p)} = \rho L_q^{(p+2)} + p L_q^{(p+1)} \qquad \text{(II.4.26a)}$$

ve

$$(\rho L_q')^{(p)} = \rho L_q^{(p+1)} + p L_q^{(p)} \qquad \text{(II.4.26b)}$$

bağıntıları yazılabilir. Bu bağıntılar (II.4.25) denkleminde yerlerine yazılırsa

$$\rho L_q^{(p+2)} + p L_q^{(p+1)} + L_q^{(p+1)} - \rho L_q^{(p+1)} - p L_q^{(p)} + q L_q^{(p)} = 0$$

veyâ

$$\rho L_q^{(p+2)} + (p + 1 - \rho) L_q^{(p+1)} + (q - p) L_q^{(p)} = 0 \qquad \text{(II.4.27)}$$

bağıntısı bulunur. Öte yandan, *asosye LAGUERRE polinomları*

$$L_q^p(\rho) \equiv L_q^{(p)}(\rho) \qquad \text{(II.4.28)}$$

bağıntısı ile tanımlanır. (II.4.28) bağıntısı (II.4.27) bağıntısında yerine yazılırsa asosye LAGUERRE polinomlarını veren

$$\rho L_q^{p''} + (p + 1 - \rho) L_q^{p'} + (q - p) L_q^p = 0 \qquad \text{(II.4.29)}$$

şeklindeki ikinci mertebeden diferansiyel denklem bulunur. $p = 0$ için (II.4.28) bağıntısına göre

$$L_q^0(\rho) \equiv L_q(\rho) \qquad \text{(II.4.30)}$$

olur ve (II.4.29) denklemi (II.4.17) denklemine indirgenir. (II.4.28) bağıntısındaki türevin p mertebesi L_q polinomunun q derecesinden daha küçük olmalı veyâ en fazla ona eşit olmalıdır :

$$p \leqq q \qquad \text{(II.4.31)}$$

Eğer bu şart gerçekleşmezse L_q^p polinomu sıfır olur. Gene konu ile ilgili kitaplarda asosye LAGUERRE polinomlarına ait normlama bağıntısının

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{p+1} [L_q^p(\rho)]^2 d\rho = \frac{(2q + 1 - p)(q!)^3}{(q - p)!} \qquad \text{(II.4.32)}$$

şeklinde olduğu gösterilmiştir. (II.4.24) ve (III.4.28) bağıntılarından

$$L_1^1 = -1; \qquad L_2^1 = 2\rho - 4, \qquad L_2^2 = 2 \qquad \text{(II.4.33)}$$

ve

$$L_3^1 = -3\rho^2 + 18\rho - 18, \qquad L_3^2 = -6\rho + 18, \qquad L_3^3 = -6 \qquad \text{(II.4.34)}$$

sonuçları elde edilir.

(II.5) HİDROJEN ATOMUNUN DALGA FONKSİYONLARI

Hidrojen atomuna ait bütün matematiksel bağıntılar, eski kuvantum mekanide söz konusu olan hidrojen atomunun birinci dairesel BOHR yörüngesinin

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \qquad \text{(II.5.1)}$$

bağıntısı ile verilen yarıçapı cinsinden daha sâde şekillerde yazılabilir. Örneğin, hidrojen atomunun enerji seviyelerini veren (II.3.45) bağıntısı

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2a_0 n^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots) \qquad \text{(II.5.2)}$$

şeklinde yazılabilir. Öte yandan (II.3.12) bağıntısı, (II.3.43) bağıntısının yardımı ile

$$\gamma = \frac{2}{a_0 n} \qquad \text{(II.5.3)}$$

şeklinde ve (II.3.15) bağıntısı da

$$\rho = \frac{2r}{a_0\, n} \tag{II.5.4}$$

şeklinde yazılabilir.

Hidrojen atomuna ait dalga fonksiyonunun radyal kısmı (II.3.41) bağıntısına göre

$$R(\rho) = e^{-\frac{1}{2}\rho}\, \rho^l\, L(\rho) \tag{II.5.5}$$

şeklindedir. Burada $L(\rho)$ polinomu (II.3.46) bağıntısı ile verilen

$$\rho\, L'' + [2(l+1) - \rho]\, L' + (n - l - 1)\, L = 0 \tag{II.5.6}$$

diferansiyel denklemini sağlar. Öte yandan (II.4.29) bağıntısına göre, asosye LAGUERRE polinomlarını veren

$$\rho\, L_q^{p\,''} + (p + 1 - \rho)\, L_q^{p\,'} + (q - p)\, L_q^p = 0 \tag{II.5.7}$$

diferansiyel denklemi (II.5.6) diferansiyel denkleminin aynıdır ve $L = L_q^p$ dir. O hâlde, n, l, p ve q tamsayıları arasında

$$p + 1 = 2(l + 1), \qquad q - p = n - l - 1$$

veyâ

$$p = 2l + 1, \qquad q = n + l \tag{II.5.8}$$

bağıntıları vardır. Asosye LAGUERRE polinomlarının derecesi, (II.3.43) bağıntısının yardımı ile

$$q - p = n - l - 1 = n' \tag{II.5.9}$$

olarak bulunur. O hâlde, (II.5.5) bağıntısı

$$R_{nl}(\rho) = N_{nl}\, e^{-\frac{1}{2}\rho}\, \rho^l\, L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \tag{II.5.10}$$

şeklinde yazılabilir. Burada N_{nl} *normlama sabiti*dir. Böylece, (II.3.4) bağıntısı ile verilen hidrojen atomunun dalga fonksiyonu

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{II.5.11}$$

şeklinde yazılabilir. ψ_{nlm} fonksiyonu

$$1 = \int |\psi_{nlm}|^2\, d\tau = \iint_{(4\pi)} |Y_{lm}|^2\, d\Omega \int_0^\infty (R_{nl})^2\, r^2\, dr$$

bağıntısının yardımı ile normlanabilir. Burada

$$d\tau = r^2\, dr\, d\Omega, \qquad d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

dir. (I.21.6) bağıntısına göre

$$\iint_{4\pi)} |Y_{lm}|^2 \, d\Omega = 1$$

olduğundan

$$\int_0^\infty (R_{nl})^2 \, r^2 \, dr = 1 \qquad \text{(II.5.12)}$$

sonucuna varılır. (II.5.12) bağıntısı radyal fonksiyonun normlama bağıntısıdır. Bu bağıntıdaki r integrasyon değişkeni (II.3.15) bağıntısının yardımı ile $\rho = \gamma r$ integrasyon değişkenine dönüştürülebilir. Böylece (II.5.10) bağıntısı (II.5.12) bağıntısında yerine yazılarak

$$\frac{1}{\gamma^3} N_{nl}^2 \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l} [L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^2 \, d\rho = 1 \qquad \text{(II.5.13)}$$

elde edilir. Öte yandan, asosye LAGUERRE polinomlarına ait (II.4.32) ile verilen normlama bağıntısında (II.5.8) bağıntıları yerlerine yazılırsa

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l} [L_{n+1}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^2 \, d\rho = \frac{2n \, [(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \qquad \text{(II.5.14)}$$

bulunur. (II.5.14) bağıntısı (II.5.13) bağıntısında yerine yazılırsa, (II.5.3) bağıntısının yardımı ile

$$N_{nl}^2 = \left(\frac{2}{a_0 \, n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n \, [n+l)!]^3} \qquad \text{(II.5.15)}$$

bulunur. (II.5.15) bağıntısı (II.5.10) bağıntısında yerine yazılırsa, (II.5.4) bağıntısının yardımı ile

$$R_{nl}(r) = -\left\{\left(\frac{2}{n \, a_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n \, [(n+l)!]^3}\right\}^{1/2} e^{-\frac{r}{n a_0}} \left(\frac{2r}{n \, a_0}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n \, a_0}\right) \qquad \text{(II.5.16)}$$

sonucuna varılır. (II.5.16) bağıntısı hidrojen atomuna ait normlanmış radyal dalga fonksiyonunu verir. (II.5.8) bağıntıları (II.4.31) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$2l + 1 \leqq n + l$$

veyâ

$$0 \leqq l \leqq n - 1 \qquad \text{(II.5.17)}$$

elde edilir. Böylece l ve n kuvantum sayıları arasındaki (II.3.44) bağıntısı yeniden bulundu.

(II.4.33) ve (II.4.34) bağıntılarının yardımı ile (II.5.16) bağıntısından bulunan ilk üç radyal dalga fonksiyonu

$$R_{10}(r) = \frac{1}{a_0^{3/2}}\, 2\, e^{-\frac{r}{a_0}} \tag{II.5.18a}$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{(2\, a_0)^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2 a_0}} \tag{II.5.18b}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{(2\, a_0)^{3/2}}\, \frac{r}{a_0 \sqrt{3}}\, e^{-\frac{r}{2 a_0}} \tag{II.5.18c}$$

şekillerindedir.

(II.6) HİDROJEN ATOMUNUN ENERJİ ÖZDEĞERLERİNİN SOYSUZLAŞMIŞLIĞI

(II.3.1) bağıntısı ile verilen zamandan bağımsız SCHRÖDİNGER denklemi hidrojen atomu için

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \tag{II.6.1}$$

olmak üzere

$$H\, \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = E_n\, \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \tag{II.6.2}$$

şeklinde yazılabilir. Paragraf (I.7) de açıklandığı gibi, (II.6.2) bağıntısı H HAMİLTON operatörüne ait *özdeğer denklemi*dir. H operatörünün herhangi bir *özdeğeri* E_n dir. H operatörünün E_n özdeğerine ait *özfonksiyonu* ψ_{nlm} dir. Bir operatörün belirli bir özdeğerine ait birden fazla özfonksiyonu varsa, operatörün o özdeğer için *soysuzlaşmış* olduğu söylenir ve eğer özfonksiyonların sayısı N ise, operatör *N-katlı bir soysuzlaşma*ya sâhiptir denir. Eğer bir operatörün her bir özdeğerine ait bir ve yalnız bir lineer bağımsız özfonksiyonu varsa, operatörün *soysuzlaşmamış* olduğu söylenir. (II.6.2) bağıntısına göre hidrojen atomuna ait E enerji özdeğerleri yalnız n toplam kuvantum sayısına bağlı olduğu hâlde, ψ_{nlm} özfonksiyonları n, l, m kuvantum sayılarının üçüne birden bağlıdır. Verilmiş bir E_n enerjisi için, yâni belirli bir n için l kuvantum sayısı (II.5.17) ile verilen

$$0 \leqq l \leqq n - 1 \tag{II.6.3}$$

bağıntısı ile sınırlıdır. Öte yandan, (II.6.3) ile elde edilen bir l kuvantum sayısı için de m kuvantum sayısı (I.21.5) ile verilen

$$-l \leqq m \leqq l \tag{II.6.4}$$

bağıntısı ile sınırlıdır. Böylece enerji özdeğerleri hem l, hem de m kuvantum sayısına göre soysuzlaşmıştır. (II.6.3) bağıntısının sonucu olarak, yalnız l ye göre soysuzlaşma n-katlıdır. (II.6.4) bağıntısının sonucu olarak da yalnız m ye göre soysuzlaşma $(2l+1)$ - katlıdır. O hâlde, E_n enerji seviyesi için toplam soysuzlaşma derecesi, yâni ψ_{nlm} özfonksiyonlarının sayısı

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2\frac{1}{2}n(n-1) + n = n^2 \qquad \text{(II.6.5)}$$

dir. $n = 1$ *temel hâli* için soysuzlaşma ortadan kalkar ve yalnız bir ψ_{100} özfonksiyonu vardır.

Paragraf (I.14) te açıklandığı gibi, potansiyel enerjinin küresel simetrik olduğu, yâni yalnız r radyal koordinatına bağlı olduğu herhangi bir merkezî kuvvet alanı için dalga fonksiyonu (II.5.11) şeklinde yazılabilir. ve böylece yalnız m ye göre soysuzlaşma vardır. Öte yandan, l ye göre soysuzlaşma merkezî kuvvet alanlarının özel bir hâli olan COULOMB alanından ötürü ortaya çıkar.

Enerjinin l nin bir fonksiyonu olmaması özelliği yalnız hidrojen atomunda ve üç boyutlu izotropik harmonik osilâtörde görülür. Hidrojenden başka atomlarda enerji yalnız n nin değil, l nin de bir fonksiyonudur. Çünkü Z sayıda elekrona sâhip olan atomlarda elektronlardan birinin potansiyel enerjisi $-Ze^2/r$ değildir ve diğer elektronların *perdeleme etkisi* ile değişmiştir. COULOMB potansiyelinden sapma büyüdükçe aynı n ye ve farklı l ye sâhip seviyeler arasındaki enerji farkı artar. En ağır atomlarda söz konusu sapma en büyük olduğundan, aynı n ye ve farklı l ye sahip enerji seviyelerinin birbirlerinden ayrılması Z atom numarası ile birlikte artar. Öte yandan, hidrojen atomuna bir dış elektrik alanı uygulandığı zaman aynı n ye sâhip seviyelerin soysuzlaşması ortadan kalkar ve her seviyenin enerjisi l ye bağlı olarak değişir. Bu olay birinci mertebeden STARK olayı olarak bilinmektedir. STARK olayı pertürbasyon teorisi ile ilgili olarak ilerde incelenecektir.

Aynı n ve l ye ve farklı m ye sâhip seviyelerin soysuzlaşması bütün merkezî kuvvet alanlarının, yâni bütün küresel simetrik potansiyel enerji fonksiyonlarının ortak özelliğidir. Gerçekten, (II.5.11) bağıntısındaki $R_{nl}(r)$ radyal fonksiyonu m ye bağlı değildir. Bununla beraber, kuvvet alanı merkezî olmadığı zaman söz konusu soysuzlaşma ortadan kalkar. İncelenmekte olan atoma bir dış magnetik alanın uygulanması ile böyle bir merkezî olmayan kuvvet alanı sağlanabilir. Böylece, farklı m ye sâhip seviyeler farklı enerjilere sâhip olurlar. Bir dış magnetik alanın etkisi ile enerji seviyelerinin bu şekilde ayrılmasına ZEEMAN olayı adı verilir. ZEEMAN olayı da pertürbasyon teorisi ile ilgili olarak ilerde incelenecektir.

ALIŞTIRMALAR VE PROBLEMLER

II.1. Sâbit bir eksen etrafında dönen ve bu eksene göre I atalet momentine sâhip olan bir katı cisme ait SCHRÖDİNGER denklemi

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}$$

şeklindedir. Burada $\psi(\varphi, t)$, t zamanının ve dönme ekseni etrafındaki φ dönme açısının bir fonksiyonudur. Bu denklemin çözümlerine hangi sınır şartları uygulanmalıdır? Normlanmış enerji özfonksiyonlarını ve enerji özdeğerlerini bulunuz. Herhangi bir soysuzlaşma var mıdır ?

II.2. Hidrojen atomuna ait (II.5.16) bağıntısı ile verilen $R_{nl}(r)$ radyal dalga fonksiyonunu ve

$$< f(r) > = \int_0^\infty f(r)\,(R_{nl})^2\, r^2\, dr$$

bağıntısı ile verilen beklenen değer tanımını kullanarak $<r>$, $<1/r>$, $<1/r^2>$, ve $< 1/r^3 >$ beklenen değerlerini hesaplayınız. Beklenen değerin genel tanımı için paragraf (II.5) e bakınız. Çözüm için Emine Rızaoğlu'nun "Kuvantum Mekaniği Çözümlü Problem Kitabı"na bakınız: Problem IV.16.

SONUÇLAR :

$$< r > = n^2\left[1 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2}\right)\right] a_0 ,$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2}\,\frac{1}{a_0}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{n^3\left(l + \frac{1}{2}\right)}\,\frac{1}{a_0^2},$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{n^3\, l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)}\,\frac{1}{a_0^3} .$$

II.3. Kuvantum mekaniğinde HAMİLTON operatörünün $H\psi = E\psi$ ile verilen özdeğer denklemindeki E özdeğerlerinin işaretine göre *bağlı hâller* tanımlanır. Kolaylık olsun diye klâsik mekanikteki bağlı hâlleri inceleyelim. Klâsik mekanikte bağlı hâller, $T + V = E$ toplam enerjisinin işaretine göre tanımlanır.

Her zaman $T > 0$ dır. *Bağlı olmayan hâller* $E \geqq 0$ bağıntısı ile tanımlanır. $V > 0$ için $E > 0$ hâli, yâni bağlı olmayan hâl elde edilir. Bağlı olmayan hâl için parçacıklar biribirlerinden sonsuz uzaklaşırlar. $V > 0$ hâline örnek olarak itici COULOMB potansiyeli gösterilebilir. Bu takdirde yörünge hiperbol şeklinde olur.

$V < 0$ için $T - |V| = E$ yazılabilir. $|V| \leqq T$ ise, $E \geqq 0$ bağıntısı ve böylece bağlı olmayan hâl elde edilir. Çekici COULOMB potansiyeli veyâ NEWTON un evrensel çekim potansiyeli demek olan gravitasyon potansiyeli için yörünge, $E > 0$ hâlinde hiperbol şeklinde ve $E = 0$ hâlinde de parabol şeklinde olur.

$V < 0$ için $|V| > T$ ise, $E < 0$ hâli elde edilir. $E < 0$ hâline *bağlı hâl* adı verilir ve bu takdirde parçacıklar biribirlerinden sonsuz uzaklaşamazlar. Çekici COULOMB veyâ gravitasyon potansiyeli için yörünge elips şeklinde olur. Hidrojen atomunda ve gezegenlerin hareketinde bu çeşit bağlı hâller söz konusudur.

Bir örnek olmak üzere, yeryüzünden yarıçap doğrultusunda fırlatılan bir füzenin yerçekiminden kurtulabilmesi için gerekli olan en küçük hızı hesaplayınız.

SONUÇ : Yerin çekim şiddeti g ve yerkürenin yarıçapı R olmak üzere :

$$v \geqq \sqrt{2gR} = \sqrt{\frac{392}{\pi}} \cong 11,17 \text{ km/sn.}$$

III. BÖLÜM

DİNAMİK DEĞİŞKENLER VE LİNEER OPERATÖRLER

(III.1) İKİ FONKSİYONUN SKALER ÇARPIMI

İki fonksiyonun skaler çarpımının tanımı, iki vektörün skaler çarpımının tanımına benzetilerek yapılır. Bu kitapta, tersi söylenmedikçe, reel vektörler Lâtin harfleri ile ve kompleks vektörler de Grek harfleri ile gösterilecektir. $\mathbf{u}$ ve $\mathbf{v}$ reel vektörlerinin *skaler çarpımı* N boyutlu uzayda

$$(u, v) \equiv \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \sum_{k=1}^{N} u_k v_k = u_1 v_1 + u_2 v_2 + \ldots + u_N v_N \qquad \text{(III.1.1)}$$

bağıntısı ile tanımlanır ve bir reel sayıdır. Gene N boyutlu uzayda ψ ve Φ kompleks vektörlerinin *skaler çarpımı* da

$$(\psi, \Phi) = \sum_{k=1}^{N} \psi_k^* \Phi_k = \psi_1^* \Phi_1 + \psi_2^* \Phi_2 + \ldots + \psi_N^* \Phi_N \qquad \text{(III.1.2)}$$

bağıntısı ile tanımlanır ve bir kompleks sayıdır. Burada ψ_k^*, ψ_k nın *kompleks eşleniğini* göstermektedir. (III.1.2) bağıntısına göre hemen

$$(\Phi, \psi) = (\psi, \Phi)^* \qquad \text{(III.1.3)}$$

yazılabilir. Yâni, iki kompleks vektörün skaler çarpımı komütatif değildir. Ancak iki reel vektörün skaler çarpımı komütatif olabilir. Bir kompleks vektörün kendi kendisi ile skaler çarpımına söz konusu vektörün *normu* adı verilir. O hâlde ψ vektörünün normu,

$$\|\psi\| = (\psi, \psi) = \sum_{k=1}^{N} |\psi_k|^2 \qquad \text{(III.1.4)}$$

bağıntısı ile tanımlanır ve reel ve pozitif bir sayıdır. Bir vektörün normunun sıfır olması için gerek ve yeter şart vektörün kendisinin sıfıra eşit olmasıdır. Böylece

$$\|\psi\| \geqq 0 \tag{III.1.5}$$

bağıntısı yazılabilir. Burada eşitlik $\psi = 0$ için geçerlidir. O hâlde,

$$\psi \neq 0 \text{ için : } \quad \|\psi\| > 0 \tag{II.1.5a}$$

yazılabilir. Bir ψ vektörünün $|\psi|$ ile gösterilen *uzunluğu*, bu vektörün (ψ, ψ) normunun pozitif kareköküdür. Eğer bir vektörün normu bire eşitse, bu vektöre *normlanmış vektör* denir. İki kompleks vektörün skaler çarpımı sıfıra eşitse, bu iki kompleks vektör *diktir* denir,

x reel değişkeninin $a \leqq x \leqq b$ aralığında tanımlanmış olan $\psi(x)$ ve $\Phi(x)$ gibi iki kompleks fonksiyonunun *skaler çarpımı*

$$(\psi, \Phi) = \int_a^b \psi^*(x)\,\Phi(x)\,dx \tag{III.1.6a}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Burada ψ^*, ψ fonksiyonunun *kompleks eşleniğini* göstermektedir. Fonksiyonların tanım aralığı $(-\infty, \infty)$ olduğu zaman (III.1.6a) bağıntısı

$$(\psi, \Phi) = \int \psi^*(x)\,\Phi(x)\,dx \tag{III.1.6b}$$

şeklinde yazılır. İki kompleks fonksiyonun skaler çarpımını tanımlayan (III.1.6b) bağıntısı, iki kompleks vektörün skaler çarpımına ait (III.1.3) özelliğini gerçekler. Ayrıca (III.1.6b) tanım bağıntısı, bütün üç boyutlu uzayda tanımlanmış olan $\psi(\mathbf{r})$ ve $\Phi(\mathbf{r})$ fonksiyonlarına teşmil edilebilir. Böylece $\psi(\mathbf{r})$ ve $\Phi(\mathbf{r})$ kompleks fonksiyonlarının skaler çarpımı

$$(\psi, \Phi) = \int \psi^*(\mathbf{r})\,\Phi(\mathbf{r})\,d\tau \tag{III.1.7}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Buradaki integral bütün üç boyutlu uzay üzerinden alınmıştır. Öte yandan, bir kompleks fonksiyonun *normu*, (III.1.4) bağıntısına benzer şekilde

$$\|\psi\| = (\psi, \psi) = \int |\psi(\mathbf{r})|^2\,d\tau \tag{III.1.8}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Şüphesiz bu tanımın sonucu olarak, (III.1.5) bağıntısı fonksiyonlar için de geçerlidir. Normu bire eşit olan fonksiyona *normlanmış fonksiyon* adı verilir. Normlanmış fonksiyon tanımı (1.5.12) bağıntısı ile evvelce de verilmişti. İki kompleks fonksiyonun skaler çarpımı sıfıra eşitse, bu iki fonksiyon *diktir* denir. Harmonik osilâtörün özfonksiyonlarının diklik ve normlama bağıntıları (I.EK.4.12) bağıntısı ile verilmişti.

Kuvantum mekaniğinde kompleks vektörler ve reel değişkenli kompleks fonksiyonlar bir arada kullanılır ve yukarıda da görüldüğü gibi bunların pek çok benzer özellikleri vardır. Fonksiyonların vektörler ile ortak bir genel teori içerisinde incelenebilmesi sonsuz sayıda boyuta sâhip bir vektör uzayına ihtiyaç gösterir. Kuvantum mekaniğindeki sonsuz boyutlu uzaylar ya *sayılabilen sonsuz boyutlu*, ya da *sayılamayan sonsuz boyutlu* olabilir. Sayılabilen sonsuz boyutlu bir uzaya örnek olmak üzere (III.1.4) bağıntısı $N \rightarrow \infty$ için yazılabilir ve böylece

$$\|\psi\| = (\psi, \psi) = \sum_{k=1}^{\infty} |\psi_k|^2 \qquad \text{(III.1.9)}$$

bağıntısı elde edilir. Burada ψ vektörünün $k = 1, 2, 3, \ldots$ şeklinde sayılabilen sonsuz sayıdaki sıralama indislerine tekabül eden sayılabilir sonsuz sayıda bileşeni vardır ve $\|\psi\|$ normunun sonlu olabilmesi için (III.1.9) bağıntısının sağ yanındaki serinin yakınsak olması gerekir. Öte yandan, eğer k indisi sürekli olarak değişecek olursa, ψ_k sonlu bir değişim aralığında bile sonsuz sayıda değer alır. Bu takdirde k indisi yerine sürekli ve reel bir x değişkeni alınmalıdır. Böylece $\psi(x)$ kompleks fonksiyonu, sayılamayan sonsuz sayıdaki x indisine sâhip bir vektör gibi düşünülebilir ve bu $\psi(x)$ vektörünün ait olduğu vektör uzayı da sayılamayan sonsuz sayıda boyuta sâhip bir uzaydır. Sayılabilen sonsuz veyâ sayılamayan sonsuz boyutlu uzaylara *HİLBERT uzayı* adı verilir. HİLBERT uzaylarında vektörlerin sayılabilen sonsuz sayıdaki bileşenlerinin hepsi sonlu olmalı veyâ $\psi(x)$ fonksiyon vektörleri değişken x indisinin bütün değerleri için sonlu olmalıdır. Bu da kuvantum mekaniğinde dalga fonksiyonları için koşulan şartlardan biridir. Öte yandan, k indisi sürekli bir x değişkeni hâline dönüştüğü zaman (II.1.9) toplamı da

$$\|\psi\| = (\psi, \psi) = \int |\psi(x)|^2\, dx \qquad \text{(III.1.10)}$$

integraline veyâ daha genel olarak (III.1.8) integraline dönüşür.

(III.2) LİNEER OPERATÖRLER

HİLBERT uzayındaki bir *A operatörü*, HİLBERT uzayına ait bir ψ vektörünü (veyâ fonksiyonunu) gene bu uzaya ait başka bir Φ vektörüne (veyâ fonksiyonuna) dönüştüren bir nesnedir. Söz konusu dönüşüm

$$\Phi = A\psi \qquad \text{(III.2.1)}$$

tanım bağıntısı ile ifâde edilir. (III.2.1) denklemi şöyle yorumlanır: A operatörü *sağına* yazılan ψ vektörü üzerinde bir işlem yaparak onu başka bir Φ vektörüne dönüştürmüştür. HİLBERT uzayının herhangi iki vektörü ψ_1 ve ψ_2 ise, $\psi_1 + \psi_2$ de bu uzayın bir vektörüdür. Öte yandan, ψ HİLBERT uzayının bir vektörü ise, keyfî bir kompleks c sâbit sayısı için $c\psi$ de bu uzayın bir vektörüdür. Bu söylediklerimize ve (III.2.1) tanımına uygun olmak üzere

$$A(\psi_1 + \psi_2) = A\,\psi_1 + A\,\psi_2 \tag{III.2.2}$$

$$A(c\psi) = cA\,\psi \tag{III.2.3}$$

şartlarını sağlayan bir A operatörüne *lineer operatör* adı verilir. Kuvantum mekaniğinde kullanılan bütün operatörler lineer operatördür. (III.2.2) ve (III.2.3) şartlarının ikisi bir arada

$$A(c_1\,\psi_1 + c_2\,\psi_2) = c_1\,A\,\psi_1 + c_2\,A\,\psi_2 \tag{III.2.4}$$

şeklindeki tek bir *lineerlik şartı* olarak yazılabilir.

Paragraf (I.7) de söz konusu edildiği gibi kuvantum mekaniğinde dinamik değişkenler, lineer operatörlerin aracılığı ile ifâde edilirler ve bu lineer operatörler esas itibariyle ya $\mathbf{r}$ yer vektörü gibi bir âdi çarpma operatörüdür, ya da $\mathbf{p} = -i\hbar\,\nabla$ momentum operatörü gibi bir diferansiyel operatördür. Öte yandan,

$$\mathbf{r}\,[c_1\,\psi_1(\mathbf{r}) + c_2\,\psi_1(\mathbf{r})] \equiv c_1\,\mathbf{r}\,\psi_1(\mathbf{r}) + c_2\,\mathbf{r}\,\psi_2(\mathbf{r})$$

ve

$$\nabla\,[c_1\,\psi_1(\mathbf{r}) + c_2\,\psi_2(\mathbf{r})] \equiv c_1\,\nabla\,\psi_1(\mathbf{r}) + c_2\,\nabla\,\psi_2(\mathbf{r})$$

âşikâr bağıntıları $\mathbf{r}$ ve $\mathbf{p}$ operatörlerinin (III.2.4) lineerlik şartını gerçeklediğini gösterir. Operatörler arasındaki çarpma ve toplama işlemlerinin yardımı ile bu iki tipin özelliklerini bir arada içeren lineer operatörler elde edilebilir. (I.9.1) bağıntısı ile tanımlanan

$$\mathbf{L} = r \times \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\mathbf{r} \times \nabla$$

yörünge açısal momentumu vektör operatörü buna bir örnektir.

İlerde lineer operatörlerin kare matrislerle temsil edilebildikleri görülecektir. Böylece kuvantum mekaniğinde kullanılan lineer operatörlerin bir kısmı da *matris operatörler*dir. Matris operatörlere bir örnek olmak üzere, bir elektrona ait *spin açısal momentumu vektör opearatörünün* üç kartezyen bileşenini temsil eden

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

PAULİ spin matrisleri gösterilebilir. Örneğin, σ_x matris operatörü (III.2.1) bağıntısını

$$\Phi = \sigma_x\,\psi = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$

şeklinde sağlar. σ_x in (III.2.4) lineerlik şartını sağladığı da kolaylıkla gösterilebilir.

(III.3) LİNEER OPERATÖRLER ARASINDAKİ DÖRT İŞLEM

A, B ve C, HİLBERT uzayındaki üç lineer operatör ve ψ de bu uzaya ait keyfî bir vektör olsun. Eğer keyfî ψ vektörü için

$$A\psi + B\psi = C\psi \tag{III.3.1}$$

bağıntısı gerçekleniyorsa, A ve B operatörlerinin *toplamı* C operatörüdür denir ve bu *toplama işlemi*

$$A + B = C \tag{III.3.2}$$

bağıntısı ile belirtilir. Eğer (III.3.2) bağıntısı (III.3.1) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(A + B)\,\psi = A\psi + B\psi \tag{III.3.3}$$

bağıntısı ile ifâde edilen *distribütiflik* (*dağıtıcılık*) özelliği elde edilir.

B lineer operatörü keyfî bir ψ vektörünü $B\psi$ vektörüne dönüştürür. A lineer operatörü de $B\psi$ vektörünü $A(B\psi)$ vektörüne dönüştürür. Eğer keyfî ψ vektörü için

$$A(B\psi) = C\psi \tag{III.3.4}$$

bağıntısı gerçekleniyorsa, A ve B operatörlerinin A, B sırasındaki *çarpımı* C operatörüdür denir ve bu *çarpma işlemi*

$$AB = C \tag{III.3.5}$$

bağıntısı ile belirtilir. Eğer (III.3.5) bağıntısı (III.3.4) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(AB)\,\psi = A(B\psi) = C\psi \tag{III.3.6}$$

bulunur. Öte yandan, A lineer operatörü keyfî ψ vektörünü $A\psi$ vektörüne dönüştürür. B lineer operatörü de $A\psi$ vektörünü $B(A\psi)$ vektörüne dönüştürür. Eğer keyfî ψ vektörü için

$$B(A\psi) = D\psi \tag{III.3.7}$$

bağıntısı gerçekleniyorsa, B ve A operatörlerinin B, A sırasındaki *çarpımı* D operatörüdür denir ve bu *çarpma işlemi*

$$BA = D \tag{III.3.8}$$

bağıntısı ile belirtilir. Eğer (III.3.8) bağıntısı (III.3.7) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(BA)\,\psi = B(A\psi) = D\psi \tag{III.3.9}$$

bulunur. Genel hâlde C ve D operatörleri eşit değildir. Böylece (III.3.5) ve (III.3.8) bağıntılarının karşılaştırılması ile

$$C \neq D \text{ ise :} \qquad AB \neq BA \tag{III.3.10}$$

yazılabilir. Genel olarak iki lineer operatörün çarpımı, *çarpım sırasına* bağlıdır ve bu takdirde bu iki operatör *komütatif değildir* denir. Özel hâlde iki lineer operatörün çarpımı, çarpım sırasına bağlı olmayabilir ve bu takdirde iki operatör *komütatiftir* denir. A ve B operatörleri komütatifseler tanım olarak

$$AB = BA \tag{III.3.11}$$

yazılır. Her operatör kendi kendisiyle komütatiftir. Bir operatörün kendi kendisiyle çarpımına o *operatörün karesi* veyâ *ikinci kuvveti* adı verilir ve

$$A^2 = AA \tag{III.3.12}$$

şeklinde yazılır. Benzer şekilde, bir *operatörün kübü* veyâ *üçüncü kuvveti*

$$A^3 = A^2A = AA^2 = AAA \tag{III.3.13}$$

şeklinde yazılır. Genel hâlde

$$A^n = AAA \dots A \qquad (n \text{ çarpan}) \tag{III.3.14}$$

bağıntısı ile bir *operatörün n inci kuvveti* tanımlanır. A, B ve C gibi üç lineer operatör göz önüne alınırsa

$$A\,[B\,(C\psi)] = A\,(BC)\,\psi$$

$$(AB)\,(C\psi) = [(AB)\,C]\,\psi$$

ve

$$A\,[B\,(C\psi)] = (AB)\,(C\psi)$$

olduğundan

$$(AB)\,C = A\,(BC) = ABC \tag{III.3.15}$$

yazılabilir. (III.3.15) bağıntısına operatörlerin çarpma işlemine göre *asosyatiflik* (*ortaklaştırıcılık*) özelliği adı verilir.

Lineer operatörler arasındaki toplama ve çarpma işlemleri bir arada göz önüne alınırsa

$$A\,(B + C) = AB + AC \tag{III.3.16a}$$

$$(B + C)\,A = BA + CA \tag{III.3.16b}$$

şekillerindeki *distribütiflik* (*dağıtıcılık*) özellikleri hemen yazılabilir.

A ve B operatörlerinin *eşitliği* keyfî ve sıfırdan farklı bir ψ vektörünün yardımı ile

$$\psi \neq 0 \text{ ve } A\psi = B\psi \text{ ise :} \qquad A = B \text{ dir.} \tag{III.3.17}$$

bağıntısı ile tanımlanır.

Şimdi temel öneme sâhip iki lineer operatörü, yâni sıfır operatörünü ve birim operatörü tanımlayacağız.

$$\psi \neq 0 \text{ ve } A\psi = 0 \text{ ise :} \qquad A = 0 \text{ dır.} \tag{III.3.18}$$

şeklinde tanımlanan operatöre *sıfır operatörü* adı verilir. (III.3.3) bağıntısında $B = 0$ yazılırsa, (III.3.18) tanım bağıntısına göre

$$(A + 0)\,\psi = A\psi + 0\,\psi = A\psi$$

veyâ

$$A + 0 = A \tag{III.3.18a}$$

sonucuna varılır. Öte yandan,

$$\psi \neq 0 \text{ için :} \qquad I\psi = \psi \tag{III.3.19}$$

bağıntısı ile tanımlanan I operatörüne *birim operatör* adı verilir. (III.3.6) ve (III.3.9) bağıntılarında $B = I$ yazılırsa

$$(AI)\,\psi = A\,(I\psi) = C\psi$$

$$(IA)\,\psi = I(A\psi) = D\psi$$

elde edilir. (III.3.19) tanım bağıntısına göre bu bağıntılar

$$(AI)\,\psi = A\psi = C\psi$$

$$(IA)\,\psi = A\psi = D\psi$$

şekillerini alırlar. (III.3.17) bağıntısına göre

$$C = D = A$$

ve

$$AI = IA = A \tag{III.3.20}$$

sonucuna varılır. Görülüyor ki, herhangi bir operatörün birim operatör ile çarpımı komütatiftir ve çarpımın sonucu operatörün kendisidir.

Eğer keyfî bir ψ vektörü için

$$C\psi - B\psi = A\psi \tag{III.3.21}$$

bağıntısı gerçekleniyorsa, C ve B operatörlerinin *farkı* A operatörüdür denir ve bu *çıkarma işlemi*

$$C - B = A \tag{III.3.22}$$

bağıntısı ile belirtilir. Eğer (III.3.22) bağıntısı (III.3.21) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(C - B)\,\psi = C\psi - B\psi \tag{III.3.23}$$

bağıntısı bulunur. Eğer (III.3.23) bağıntısında $C = B$ yazılırsa

$$(B - B)\,\psi = B\psi - B\psi \equiv 0 \tag{III.3.24}$$

elde edilir. (III.3.18) tanım bağıntısına göre (III.3.24) bağıntısından

$$B - B = 0 \tag{III.3.25}$$

sonucuna varılır.

A bir lineer operatör olduğuna göre

$$AA^{-1} = A^{-1} A = I \tag{III.3.26}$$

bağıntısını sağlayan bir A^{-1} lineer operatörü bulunabiliyorsa, yâni A operatörü *regüler* ise, bu A^{-1} operatörüne *A operatörünün tersi* adı verilir. Eğer söz konusu bağıntıyı sağlayan bir A^{-1} oeperatörü bulunamıyorsa A operatörü *singüler*dir denir. m, n ve p herhangi tamsayılar olduğuna göre (III.3.14) tanım bağıntısından

$$A^m A^n = A^n A^m = A^{m+n} \tag{III.3.27a}$$

ve

$$(A^n)^p = (A^p)^n = A^{np} \tag{III.3.27b}$$

olduğu gösterilebilir. (III.3.27a) bağıntısında $m = 1$ ve $n = -1$ yazılırsa

$$AA^{-1} = A^{-1} A = A^{\circ} \tag{III.3.26a}$$

elde edilir. Eğer (III.3.26a) bağıntısı (III.3.26) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$A^{\circ} = I \tag{III.3.28}$$

sonucuna varılır. A ve B herhangi iki lineer operatör olduğuna göre, eğer A regüler ise, B operatörünü *soldan A operatörüne bölme işlemi*

$$A^{-1} B = C \tag{III.3.29a}$$

bağıntısı ile, ve B operatörünü *sağdan A operatörüne bölme işlemi* de

$$BA^{-1} = D \tag{III.3.29b}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Şüphesiz (III.3.26) ve (III.3.20) bağıntılarının yardımı ile (III.3.29a) ve (III.3.29b) bağıntılarından

$$B = AC = DA$$

bağıntıları bulunur. Genel hâlde C ve D operatörleri eşit değildir. Böylece (III.3.29a) ve (III.3.29b) bağıntılarının karşılaştırılması ile

$$C \neq D \text{ ise}: \qquad A^{-1} B \neq BA^{-1} \tag{III.3.30a}$$

yazılabilir. Yâni, genel hâlde soldan ve sağdan bölme işlemleri aynı sonucu vermez. Soldan bölmenin sağdan bölmeye eşit olduğu özel hâl için

$$A^{-1} B = AB^{-1} = B/A \tag{III.3.30b}$$

yazılır.

A ve B herhangi iki lineer operatör olduğuna göre

$$[A, B] \equiv AB - BA \tag{III.3.31}$$

bağıntısı ile tanımlanan $[A, B]$ operatörüne *komütatör* adı verilir. (III.3.11) ve (III.3.31) tanım bağıntılarına göre, iki operatör komütatif ise bunların komütatörü sıfırdır. (III.3.31) tanım bağıntısına göre

$$[A, A] = A^2 - A^2 = 0 \tag{III.3.32}$$

$$[A, B] = AB - BA \equiv -(BA - AB) = -[B, A] \tag{III.3.33}$$

bağıntıları hemen bulunur. Ayrıca gene tanım bağıntısından

$$\begin{aligned}[A, B + C] &= A(B + C) - (B + C)A \equiv AB - BA + AC - CA = \\ &= [A, B] + [A, C]\end{aligned} \tag{III.3.34}$$

ve

$$\begin{aligned}B[A, C] + [A, B]C &= B(AC - CA) + (AB - BA)C = BAC - BCA + \\ &+ ABC - BAC = A(BC) - (BC)A = [A, BC]\end{aligned} \tag{III.3.35}$$

bağıntıları elde edilir. (III.3.31), (III.3.33), (III.3.4) ve (III.3.35) bağıntılarının kullanılması ile de *JACOBİ bağıntısı* adı verilen

$$\begin{aligned}[A, [B, C]] &= [A, BC - CB] \\ &= [A, BC] - [A, CB] \\ &= B[A, C] + [A, B]C - C[A, B] - [A, C]B \\ &= -[B, [C, A]] - [C, [A, B]]\end{aligned} \tag{III.3.36}$$

bağıntısı bulunur. Komütatörlere ait yukarda elde edilen bağıntılar aşağıda sıralanmıştır :

$$[A, A] = 0 \tag{III.3.32}$$

$$[A, B] = -[B, A] \tag{III.3.33}$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C] \tag{III.3.34}$$

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C] \tag{III.3.34a}$$

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C \tag{III.3.35}$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \tag{III.3.35a}$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \tag{III.3.36}$$

(III.4) FONKSİYON OPERATÖRLERİ

Bir z değişkeninin $f(z)$ fonksiyonunu düşünelim. $f(z)$ fonksiyonunun yakınsak bir MACLAURİN serisine açılabildiğini varsayalım. Böylece

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k = a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \ldots \tag{III.4.1}$$

yazılabilir. Burada a_k sayıları, $f(z)$ fonksiyonunun MACLAURİN serisine açılım katsayılarıdır. Şimdi bir A lineer operatörünü ve bu operatörün bütün A^k şeklindeki kuvvetlerini göz önüne alalım. k nın bütün tamsayı değerleri için A^k lar birer lineer operatördür. Şüphesiz A^k ların a_k açılım katsayıları ile çarpımlarının toplamı da bir lineer operatördür. Böylece (III.4.1) bağıntısının sağ yanındaki MACLAURİN serisinde z değişkeni yerine A lineer operatörü yerleştirilirse sonuçta $f(A)$ şeklinde bir lineer operatör elde edilir ve bu lineer operatöre, A lineer operatörünün fonksiyonu olan bir *fonksiyon operatör* adı verilir. O hâlde $f(A)$ fonksiyon operatörü, $A^\circ = I$ olduğunu hatırlayarak

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k A^k = a_0 I + a_1 A + a_2 A^2 + \ldots \qquad \text{(III.4.2)}$$

açılımı ile tanımlanabilir.

Bir örnek olmak üzere kuvantum mekaniğinde çok kullanılan *üstel fonksiyon operatörünü* gösterebiliriz. Bir üstel fonksiyonun MACLAURİN serisine açılımı

$$e^z = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} z^k = 1 + z + \frac{1}{2!} z^2 + \ldots$$

şeklinde olduğundan, üstel fonksiyon operatörünü

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k = I + A + \frac{1}{2!} A^2 + \ldots \qquad \text{(III.4.3)}$$

MACLAURİN serisi ile tanımlayabiliriz. A ve B herhangi iki lineer operatör olduğuna göre, genel hâlde $\exp(A)$ ve $\exp(B)$ üstel fonksiyon operatörlerinin çarpımı komütatif değildir. Yâni :

$$[A, B] \neq 0 \text{ ise}: \qquad e^A e^B \neq e^B e^A \qquad \text{(III.4.4)}$$

Ancak A ve B operatörleri komütatif olduğu zaman bunlara ait üstel fonksiyon operatörleri âdi üstel fonksiyonların çarpımı kuralına uyarlar. Yâni :

$$[A, B] = 0 \text{ ise}: \qquad e^A e^B = e^B e^A = e^{A+B} \qquad \text{(III.4.5)}$$

bağıntısı yazılabilir.

(III.5) BİR LİNEER OPERATÖRÜN BEKLENEN DEĞERİ VE DİNAMİK DEĞİŞKENLERİN ÖLÇÜLMESİ

Klâsik mekanikte dinamik değişkenler reel sayılar aracılığı ile ifâde edilirler ve bu sebepten ötürü deneysel olarak ölçülen değerleri ile doğrudan doğruya karşılaştırılabilirler (Bak. (I.1A)).

Kuvantum mekaniğinde dinamik değişkenler aynı harf ile gösterilen lineer operatörler aracılığı ile temsil edilirler ve bu sebepten ötürü de deneysel olarak ölçülen değerleri ile doğrudan doğruya karşılaştırılamazlar. O hâlde, her lineer operatöre bir reel sayı tekabül ettirmek gerekir. Keyfî bir $\psi(\mathbf{r})$ vektörünün aracılığı ile bir A lineer operatörüne

$$\langle A \rangle = \frac{(\psi, A\psi)}{(\psi, \psi)} \tag{III.5.1}$$

bağıntısı ile tanımlanan bir sayı tekabül ettirilir ve bu sayıya *A lineer operatörünün beklenen değeri* adı verilir. (III.5.1) bağıntısının sonucu olarak, $\langle A \rangle$ ile gösterilen beklenen değerin fiziksel boyutu, A lineer operatörünün fiziksel boyutunun aynıdır. (III.1.7) bağıntısında $\Phi = A\psi$ yazılırsa

$$(\psi, A\psi) = \int \psi^*(\mathbf{r})\, A\, \psi(\mathbf{r})\, d\tau \tag{III.5.2}$$

elde edilir. Ayrıca (III.1.8) bağıntısına göre

$$\|\psi\| = (\psi, \psi) = \int |\psi(\mathbf{r})|^2\, d\tau \tag{III.5.3}$$

yazılabilir. (III.5.2) ve (III.5.3) bağıntıları (III.5.1) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\langle A \rangle = \frac{\int \psi^*(\mathbf{r})\, A\, \psi(\mathbf{r})\, d\tau}{\int |\psi(\mathbf{r})|^2\, d\tau} \tag{III.5.4}$$

bulunur. *Fiziksel olarak gözlenebilen* bir dinamik değişkeni temsil eden bir lineer operatörün beklenen değerleri mevcut olmalıdır. (III.5.4) bağıntısındaki keyfî $\psi(\mathbf{r})$ vektörü veyâ dalga fonksiyonu $\psi(\mathbf{r}, t)$ şeklinde zamanın da bir fonksiyonu olabilir. Bu durum yazdığımız bağıntılarda bir değişikliğe neden olmaz, yalnız $\langle A \rangle$ beklenen değeri artık zamanın bir fonksiyonu olur. ψ vektörünün, tersi söylenmedikçe, *normlanmış* olduğunu varsayacağız. Böylece

$$\|\psi\| = (\psi, \psi) = \int |\psi(\mathbf{r})|^2\, d\tau = 1 \tag{III.5.5}$$

olur ve (III.5.1) ve (III.5.4) tanım bağıntıları sâdeleşmiş olarak

$$\langle A \rangle = (\psi, A\psi) = \int \psi^*(\mathbf{r})\, A\, \psi(\mathbf{r})\, d\tau \tag{III.5.6}$$

şeklinde yazılabilir. Şüphesiz $\langle A \rangle$ beklenen değeri genel hâlde bir kompleks sayıdır ve ancak A operatörünün bazı özelliklerinin sonucu olarak reel olabilir. Bundan sonraki iki paragrafta bu özellikleri inceleyeceğiz.

(III.6) BİR LİNEER OPERATÖRÜN HERMİTSEL EŞLENİĞİ

Bir A lineer operatörünün A^+ ile gösterilen *HERMİTsel eşleniği* $\psi_m(\mathbf{r})$ ve $\psi_n(\mathbf{r})$ keyfî vektörlerinin aracılığı ile

$$(\psi_n , A^+ \psi_m) = (A \psi_n , \psi_m) \equiv (\psi_m , A \psi_n)^* \qquad \text{(III.6.1)}$$

veyâ

$$\left(\int \psi_m^* A \psi_n d\tau \right)^* = \int \psi_n^* A^+ \psi_m d\tau \qquad \text{(III.6.2a)}$$

veyâ

$$\int (A \psi_n)^* \psi_m d\tau \equiv \int \psi_m A^* \psi_n^* d\tau = \int \psi_n^* A^+ \psi_m d\tau \qquad \text{(III.6.2b)}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Burada A^*, A operatörünün kompleks eşleniğini göstermektedir. (III.6.1) tanım bağıntısında ψ_m ve ψ_n vektörleri keyfî olduğundan, $\psi_m = \psi_n = \psi$ yazılabilir ve böylece

$$(\psi, A^+ \psi) = (A\psi, \psi) \equiv (\psi, A\psi)^* \qquad \text{(III.6.3)}$$

elde edilir. Eğer $(\psi, \psi) = 1$ ise, (III.5.6) bağıntısına göre (III.6.3) bağıntısı

$$\langle A^+ \rangle = \langle A \rangle^* \qquad \text{(III.6.4)}$$

sonucunu verir. Bu sonuca göre, bir lineer operatörün HERMİTsel eşleniğinin beklenen değeri, o operatörün beklenen değerinin kompleks eşleniğine eşittir.

(III.6.1) tanım bağıntısında A operatörü yerine AB çarpım operatörü yazılırsa ve

$$\Phi = B \psi_n , \qquad \chi = A^+ \psi_m$$

vektörleri tanımlanırsa

$$\begin{aligned}(\psi_n , (AB)^+ \psi_m) &= (AB \psi_n , \psi_m) = (A\Phi , \psi_m) = (\Phi, A^+ \psi_m) = (B \psi_n , \chi) = \\ &= (\psi_n , B^+ \chi) = (\psi_n , B^+ A^+ \psi_m)\end{aligned}$$

veyâ

$$(\psi_n , (AB)^+ \psi_m) = (\psi_n , B^+ A^+ \psi_m) \qquad \text{(III.6.5)}$$

elde edilir. ψ_n ve ψ_m vektörleri keyfî olduğu için

$$(AB)^+ = B^+ A^+ \qquad \text{(III.6.6)}$$

sonucuna varılır. (III.6.6) bağıntısına göre, iki operatörün çarpımının HERMİTsel eşleniği, bu iki operatörün HERMİTsel eşleniklerinin *ters sırada* çarpımına eşittir. Bu kural hemen, üç operatörün çarpımının HERMİTsel eşleniği için genelleştirilebilir. (III.6.6) kuralının uygulanması ile

$$(ABC)^+ = [(AB) C]^+ = C^+ (AB)^+ = C^+ B^+ A^+ \qquad \text{(III.6.7)}$$

sonucuna varılır. Herhangi sayıdaki operatörlerin çarpımı için de bu kuralın doğru olduğu kolaylıkla gösterilebilir. Bu kuralın (III.3.14) tanım bağıntısına uygulanması ile

$$(A^n)^+ = (A^+)^n \tag{III.6.8}$$

sonucuna varılır.

Lineer operatörlerin çarpımlarının kompleks eşleniği, bu operatörlerin kompleks eşleniklerinin *aynı sırada* çarpımına eşittir. Yâni

$$(ABC)^* = A^* B^* C^* \tag{III.6.9}$$

yazılabilir.

(III.7) HERMİTSEL OPERATÖRLER

Bir lineer operatör kendi HERMİTsel eşleniğine eşitse, o lineer operatöre *HERMİTsel operatör* adı verilir. Bir A lineer operatörü HERMİTsel ise, bu tanıma göre

$$A^+ = A \tag{III.7.1}$$

bağıntısını gerçekler. (III.7.1) bağıntısı (III.6.1), (III.6.2a) ve (III.6.2b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa A HERMİTsel operatörünü tanımlayan

$$(\psi_n\, , A\, \psi_m) = (A\, \psi_n\, , \psi_m) \equiv (\psi_m\, , A\, \psi_n)^* \tag{III.7.2}$$

veyâ

$$\left(\int \psi_m^*\, A\, \psi_n\, d\tau\right)^* = \int \psi_n^*\, A\, \psi_m\, d\tau \tag{III.7.3a}$$

veyâ

$$\int (A\, \psi_n)^*\, \psi_m\, d\tau \equiv \int \psi_m\, A^*\, \psi_n^*\, d\tau = \int \psi_n^*\, A\, \psi_m\, d\tau \tag{III.7.3b}$$

bağıntıları elde edilir. (III.7.2) tanım bağıntısında ψ_m ve ψ_n vektörleri keyfî olduğundan $\psi_m = \psi_n = \psi$ yazılabilir ve böylece

$$(\psi, A\psi) = (A\psi, \psi) \equiv (\psi, A\psi)^* \tag{III.7.4}$$

elde edilir. Eğer $(\psi, \psi) = 1$ ise, (III.5.6) bağıntısına göre (III.7.4) bağıntısı

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle^* \tag{III.7.5}$$

sonucunu verir. Bu sonuç, (III.6.4) bağıntısında $A^+ = A$ yazarak ta elde edilebilirdi. (III.7.5) bağıntısına göre, bir HERMİTsel operatörün beklenen değeri reeldir. Bunun karşıtı da doğrudur. Yâni, beklenen değeri reel olan bir operatör HERMİTseldir.

Kuvantum mekaniğinde lineer operatörler ile ifâde edilen dinamik değişkenler, ancak kendilerini temsil eden lineer operatörlerin beklenen değerleri aracılığı ile deneysel olarak ölçülen değerler ile karşılaştırılabilirler. Bu karşılaştırmanın yapılabilmesi için beklenen değerlerin reel olması ve bu sebepten ötürü de dinamik değişkenleri temsil eden lineer operatörlerin HERMİTsel olması gerekir. Aşağıda kuvantum mekaniğinde kullanılan dinamik değişkenleri temsil eden lineer operatörlerin hepsinin HERMİTsel olduğu gösterilecektir.

Paragraf (I.5) in sonunda herhangi bir $\psi(\mathbf{r}, t)$ dalga fonksiyonunun ve bu fonksiyonun $\nabla\psi$ gradyanının her yerde sonlu, sürekli ve tek değerli olmasının gerektiği belirtilmişti. Dalga fonksyonunun (I.5) te verilen BORN yorumuna göre, yalnız x kartezyen koordinatına bağlı $\psi(x)$ dalga fonksiyonunun normu

$$\|\psi(x)\| = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = \text{sonlu bir sayı}$$

olmalıdır. Bu özelliğin gerçekleşebilmesi için $\psi(x)$ dalga fonksiyonu

$$x \to \pm\infty \text{ için :} \qquad \psi(x) \to 0 \tag{III.7.6}$$

gerek (fakat yetmeyen) şartını sağlamalıdır. (III.7.6) şartı, kabul edilebilir dalga fonksiyonları için bir kriterdir.

Momentum peratörünün p_x kartezyen bileşeninin beklenen değeri

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, p_x\, \psi(x)\, dx \tag{III.7.7}$$

şeklindedir. Buradaki keyfî $\psi(x)$ dalga fonksiyonu

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1$$

şartını gerçeklemelidir. (I.8.1) bağıntısına göre

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \tag{III.7.8a}$$

yazılabilir ve buradan

$$p_x^* = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = -p_x \tag{III.7.8b}$$

bulunur. (III.7.8a) bağıntısını (III.7.7) bağıntısında yerine yazarak

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial\psi}{\partial x} \, dx \tag{III.7.9}$$

veyâ

$$\langle p_x \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} \, dx \tag{III.7.9a}$$

elde edilir. Kısmî integrasyonla

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \Big[\psi^* \psi\Big]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$$

bulunur. (III.7.6) ile verilen kritere göre

$$\Big[\psi^*(x)\, \psi(x)\Big]_{-\infty}^{\infty} = 0$$

olduğundan (III.7.9a) bağıntısı

$$\langle p_x \rangle = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$$

şeklini alır ve böylece

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

veyâ (III.7.9) bağıntısı ile karşılaştırarak

$$\langle p_x \rangle = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \right)^* = \langle p_x \rangle^* \qquad \text{(III.7.10)}$$

sonucuna varılır. O hâlde, $\langle p_x \rangle$ reeldir ve (III.7.5) bağıntısına göre p_x HERMİTseldir :

$$p_x^+ = p_x \qquad \text{(III.7.11)}$$

Benzer şekilde,

$$p_y^+ = p_y\,, \qquad p_z^+ = p_z\,; \qquad \mathbf{p}^+ = \mathbf{p} \qquad \text{(III.7.11a)}$$

bağıntıları da geçerlidir.

Koordinatların $f(\mathbf{r})$ şeklindeki bir kompleks fonksiyonu bir âdi çarpma operatörü olarak düşünülebilir. O hâlde, $f(\mathbf{r})$ operatörünün beklenen değeri

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int \psi^* f(\mathbf{r})\, \psi\, d\tau = \int \psi f(\mathbf{r})\, \psi^*\, d\tau$$

şeklinde yazılabilir. Buradan

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \left(\int \psi^* f^*(\mathbf{r})\, \psi\, d\tau \right)^* = \langle f^*(\mathbf{r}) \rangle^*$$

veyâ her iki yanın kompleks eşleniğini alarak

$$\langle f^*(\mathbf{r}) \rangle = \langle f(\mathbf{r}) \rangle^* \qquad \text{(III.7.12)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (III.6.4) bağıntısı $f(\mathbf{r})$ operatörü için yazılırsa

$$\langle f^{+}(\mathbf{r})\rangle = \langle f(\mathbf{r})\rangle^{*} \qquad \text{(III.7.13)}$$

elde edilir. (III.7.12) ve (III.7.13) bağıntılarının sağ yanları eşit olduğundan

$$\langle f^{+}(\mathbf{r})\rangle = \langle f^{*}(\mathbf{r})\rangle \qquad \text{(III.7.14)}$$

bulunur ve $\psi(\mathbf{r})$ fonksiyonu keyfî olduğu için de

$$f^{+}(\mathbf{r}) = f^{*}(\mathbf{r}) \qquad \text{(III.7.15)}$$

sonucuna varılır. (III.7.15) bağıntısına göre, kompleks $f(\mathbf{r})$ fonksiyonu bir HERMİTsel operatör değildir.

Eğer özel hâlde $f(\mathbf{r})$ fonksiyonu reel ise,

$$f^{*}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \text{ için : } \qquad f^{+}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \qquad \text{(III.7.15a)}$$

sonucuna varılır. Yâni, koordinatların $f(\mathbf{r})$ şeklindeki bir reel fonksiyonu bir HERMİTsel operatördür. Gerçekten, bu özel hâl için (III.7.12) bağıntısı

$$f^{*}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \text{ için : } \qquad \langle f(\mathbf{r})\rangle = \langle f(\mathbf{r})\rangle^{*} \qquad \text{(III.7.12a)}$$

şeklini alır ve bu da $f^{+}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})$ sonucunu gene verir. Öte yandan, bu özel hâlin kapsamına giren $\mathbf{r}$ yer vektörü ve x, y, z kartezyen koordinatları birer HERMİTsel operatördür :

$$\mathbf{r}^{+} = \mathbf{r}\,; \qquad x^{+} = x, \qquad y^{+} = y, \qquad z^{+} = z \qquad \text{(III.7.16)}$$

(III.6.8) bağıntısına göre

$$A^{+} = A \text{ için : } \qquad (A^{n})^{+} = A^{n} \qquad \text{(III.7.17)}$$

sonucuna varılır. $n=2$ için (III.7.17) bağıntısını uygulayarak (III.7.11) ve (III.7.11a) bağıntılarından

$$(p_x^2)^{+} = p_x^2\,, \qquad (p_y^2)^{+} = p_y^2\,, \qquad (p_z^2)^{+} = p_z^2 \qquad \text{(III.7.18)}$$

elde edilir. Öte yandan

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{p} = p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\,, \qquad T = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

olduğu için

$$(p^2)^{+} = p^2\,, \qquad T^{+} = T \qquad \text{(III.7.19)}$$

sonuçlarına varılır. Yâni, kinetik enerji operatörü HERMİTseldir. (III.7.15a) bağıntısına göre de

$$V^{*}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \text{ için : } \qquad V^{+}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \qquad \text{(III.7.20)}$$

elde edilir. Yâni, potansiyel enerji fonksiyonu reelse potansiyel enerji operatörü HERMİTseldir. HAMİLTON operatörü

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

şeklinde olduğundan, (III.7.19) ve (III.7.20) bağıntılarından

$$V^*(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \text{ için : } \qquad H^+ = H \tag{III.7.21}$$

sonucuna varılır. Yâni, potansiyel enerji reelse HAMİLTON operatörü HERMİTseldir.

(III.6.6) bağıntısı

$$(AB)^+ = B^+ A^+$$

olduğunu gösteriyordu. Buna göre

$$A^+ = A, \quad B^+ = B \text{ için : } \qquad (AB)^+ = BA \tag{III.7.22}$$

elde edilir. Yâni, A ve B operatörleri HERMİTsel olsalar bile AB çarpım operatörü HERMİTsel olmayabilir. Eğer A ve B HERMİTsel operatörleri aynı zamanda komütatif iseler, ancak o zaman AB çarpım operatörü de HERMİTseldir:

$$A^+ = A, \quad B^+ = B, \quad AB = BA \text{ için : } \qquad (AB)^+ = AB \tag{III.7.23}$$

Öte yandan,

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\, \mathbf{r} \times \nabla$$

bağıntısı ile tanımlanan yörünge açısal momentumu vektör operatörünün

$$L_z = x\,p_y - y\,p_x \tag{III.7.24}$$

şeklindeki üçüncü kartezyen bileşeninin birinci ve ikinci terimlerindeki operatörlerin çarpımları (I.8.7) bağıntısına göre komütatiftir :

$$x\,p_y = p_y\,x, \qquad y\,p_x = p_x\,y$$

Böylece, (III.7.24) bağıntısının her iki yanının HERMİTsel eşleniğini alarak ve sonra da (III.7.23) bağıntısını uygulayarak

$$L_z^+ = (xp_y)^+ - (yp_x)^+ = x\,p_y - y\,p_x = L_z \tag{III.7.25}$$

sonucuna varılır. Yâni, L_z bir HERMİTsel operatördür. Benzer şekilde,

$$L_x^+ = L_x\,, \qquad L_y^+ = L_y\,; \qquad \mathbf{L}^+ = \mathbf{L} \tag{III.7.25a}$$

bağıntıları da geçerlidir.

(III.8) ANTİ-HERMİTSEL OPERATÖRLER

Bir A lineer operatörü

$$A^+ = -A \tag{III.8.1}$$

bağıntısını gerçekliyorsa, o lineer operatöre *ati-HERMİTsel operatör* adı verilir. (III.8.1) tanım bağıntısının her iki yanının beklenen değeri alınırsa

$$\langle A^+ \rangle = -\langle A \rangle \tag{III.8.2}$$

bulunur. Öte yandan, (III.6.4) bağıntısına göre

$$\langle A^+ \rangle = \langle A \rangle^*$$

olduğundan, (III.8.2) bağıntısında yerine yazarak

$$\langle A \rangle^* = -\langle A \rangle \tag{II.8.3}$$

elde edilir. Böylece, bir anti-HERMİTsel operatörün beklenen değeri bir saf imajiner sayıdır. Özel hâlde, $\langle A \rangle = i = \sqrt{-1}$ olabilir ve $i^* = -i$ olduğundan (III.8.3) bağıntısı gerçeklenir.

(III.6.2b) ile verilen

$$\int \psi_n^* A^+ \psi_m \, d\tau = \int \psi_m A^* \psi_n^* \, d\tau$$

şeklindeki HERMİTsel eşleniğin tanım bağıntısında $A \equiv i$ yazılırsa

$$\int \psi_n^* i^+ \psi_m \, d\tau = \int \psi_m i^* \psi_n^* \, d\tau \tag{III.8.4}$$

veyâ

$$i^+ \int \psi_n^* \psi_m \, d\tau = i^* \int \psi_n^* \psi_m \, d\tau \tag{III.8.4a}$$

veyâ

$$i^+ = i^* \tag{III.8.5}$$

elde edilir. $i^* = -i$ olduğu hatırlanırsa

$$i^+ = -i \tag{III.8.6}$$

sonucuna varılır. O hâlde, (III.8.1) tanım bağıntısına göre i bir anti-HERMİTsel operatördür.

(III.6.1) ile verilen A operatörünün HERMİTsel eşleniğinin tanımı bağıntısını yazalım :

$$(\psi_n , A^+ \psi_m) = (A \psi_n , \psi_m) \equiv (\psi_m , A \psi_n)^* \tag{III.8.7}$$

(III.8.7) bağıntısında A operatörü yerine B operatörünü yazalım ve m ve n indislerinin yerlerini değiştirelim :

$$(\psi_m , B^+ \psi_n) = (B \psi_m , \psi_n) \equiv (\psi_n , B \psi_m)^* \tag{III.8.7a}$$

bulunur. (III.8.7a) bağıntısının kompleks eşleniği alınırsa

$$(\psi_n , B \psi_m) = (B^+ \psi_n , \psi_m) \equiv (\psi_m , B^+ \psi_n)^* \tag{III.8.8}$$

elde edilir. Eğer (III.8.8) bağıntısında

$$B = A^+$$

yazılırsa

$$(\psi_n, A^+ \psi_m) = [(A^+)^+ \psi_n, \psi_m] \qquad \text{(III.8.9)}$$

elde edilir. (III.8.9) bağıntısı (III.8.7) bağıntısı ile karşılaştırılırsa, ψ_m ve ψ_n vektörleri keyfî olduğundan

$$(A^+)^+ = A \qquad \text{(III.8.10)}$$

sonucuna varılır.

C herhangi bir lineer operatör olduğuna göre

$$C \equiv \frac{1}{2}(C + C^+) + \frac{1}{2}(C - C^+) \qquad \text{(III.8.11)}$$

özdeşliği yazılabilir. Eğer

$$A = \frac{1}{2}(C + C^+), \qquad D = \frac{1}{2}(C - C^+) \qquad \text{(III.8.12)}$$

bağıntıları ile A ve D lineer operatörleri tanımlanırsa ve (III.8.10) bağıntısına göre

$$(C^+)^+ = C \qquad \text{(III.8.10a)}$$

yazılırsa, (III.8.12) bağıntılarından

$$A^+ = \frac{1}{2}[C^+ + (C^+)^+] = \frac{1}{2}(C^+ + C) = A$$

$$D^+ = \frac{1}{2}[C^+ - (C^+)^+] = \frac{1}{2}(C^+ - C) \equiv -\frac{1}{2}(C - C^+) = -D$$

veyâ

$$A^+ = A, \qquad D^+ = -D \qquad \text{(III.8.13)}$$

elde edilir. (III.8.12) bağıntıları (III.8.11) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$C = A + D \qquad \text{(III.8.14)}$$

bulunur. (III.8.13) ve (III.8.14) bağıntılarına göre, herhangi bir C lineer operatörü, bir A HERMİTsel operatörü ile bir D anti-HERMİTsel operatörünün toplamı olarak yazılabilir. (III.8.13) bağıntılarını göz önünde bulundurarak (III.8.14) bağıtısının her iki yanının HERMİTsel eşleneği alınırsa

$$C^+ = A - D \qquad \text{(III.8.15)}$$

bulunur.

(III.8.6) ve (III.8.13) bağıntıları kullanılırsa ve eğer

$$iD = Di$$

olduğuna dikkat edilirse, (III.6.6) kuralına göre

$$(iD)^+ = i^+ D^+ = -i(-D) \equiv iD \tag{III.8.16}$$

bulunur. Öte yandan,

$$-i \equiv 1/i$$

olduğuna dikkat edilirse, (III.8.16) bağıntısından

$$(-iD)^+ = -iD$$

ve böylece

$$\left(\frac{D}{i}\right)^+ = \frac{D}{i} \tag{III.8.17}$$

elde edilir. (III.8.16) ve (III.8.17) bağıntılarına göre, D operatörü anti-HERMİTsel ise, iD ve D/i operatörleri HERMİTseldir.

$$B = D/i = -iD \tag{III.8.18}$$

bağıntısı ile B operatörü tanımlanırsa, (III.8.17) bağıntısının yardımı ile (III.8.13) bağıntıları

$$A^+ = A, \qquad B^+ = B \tag{III.8.19}$$

şekillerini alırlar. Öte yandan, (III.8.18) bağıntısından

$$D = iB \tag{III.8.18a}$$

yazılabilir ve böylece (III.8.14) ve (III.8.15) bağıntıları

$$C = A + iB \tag{III.8.20}$$

ve

$$C^+ = C - iB \tag{III.8.21}$$

şekillerini alırlar.

Kuvantum mekaniğinde *iki HERMİTsel operatörün komütatörü* çok kullanılır.

$$A^+ = A, \quad B^+ = B$$

olmak üzere

$$[A, B] = AB - BA$$

komütatör operatörünün HERMİTsel eşleniğini alalım :

$$[A, B]^+ = (AB)^+ - (BA)^+ = BA - AB = -[A, B] \tag{III.8.22}$$

bulunur. Yâni, iki HERMİTsel operatörün komütatörü bir anti-HERMİTsel operatörüdür. O hâlde, (III.8.16) bağıntısına göre $i[A, B]$ operatörü HERMİTseldir. Öte yandan, (III.3.20) bağıntısının, yâni, keyfî A operatörü için I birim operatörünün

$$AI = IA = A$$

şeklindeki tanım bağıntısının HERMİTsel eşleniği alınırsa

$$I^+ A^+ = A^+ I^+ = A^+$$

bulunur. Bu son bağıntı yukardaki tanım bağıntısı ile karşılaştırılarsa $I^+ = I$ sonucuna varılır. Yâni, birim operatör bir HERMİTsel operatördür.

Kuvantum mekaniğinde kullanılan bütün denklemler, ya HERMİTsel operatörler arasındaki bağıntılar şeklindedir, ya da bu operatörlerin bir ψ dalga fonksiyonu üzerindeki işlemleri arasındaki bağıntılar şeklindedir. HERMİTsel operatörler arasındaki bir denklemin her iki yanı da ya HERMİTsel, ya da anti-HERMİTsel olmalıdır. Örneğin, (I.8.3) bağıntısı ile verilen

$$[x, p_x] = i\hbar I \qquad \text{(III.8.23)}$$

denkleminin sol yanı x ve p HERMİTsel operatörlerinin komütatörü olduğundan anti-HERMİTseldir. Denklemin sağ yanı ise, I HERMİTsel operatörü ile i nin çarpımından ibaret olduğu için gene anti-HERMİTseldir.

Bir keyfî C operatörünün ve bu operatörün C^+ HERMİTsel eşleniğinin A ve B HERMİTsel operatörleri cinsinden (III.8.20) ve (III.8.21) bağıntılarında gösterildiği şekillerde yazılması ile, bir z kompleks sayısının ve bu kompleks sayının z^* kompleks eşleniğinin x ve y reel sayıları cinsinden

$$z = x + iy, \qquad z^* = x - iy$$

şekillerinde yazılması arasında tam bir benzerlik vardır. x ve y reel sayıları komütatif olduğu hâlde, A ve B operatörleri genel hâlde komütatif olmadığı için, örneğin bir kompleks sayının modülünün karesini veren

$$|z|^2 = zz^* = z^*z = (x + iy)(y - iy) \equiv x^2 + y^2$$

reel ifâdesi ile bunun operatörler için olan karşılığı tamamen eşdeğer değildir. Önce C ve C^+ operatörleri komütatif değildir :

$$CC^+ \neq C^+ C$$

Bununla beraber, bu çarpımlar ayrı ayrı HERMİTseldir :

$$(CC^+)^+ = CC^+, \qquad (C^+ C)^+ = C^+ C \qquad \text{(III.8.24)}$$

Öte yandan,

$$(A + iB)(A - iB) \equiv A^2 + B^2 + i(BA - AB)$$

ve

$$(A - iB)(A + iB) \equiv A^2 + B^2 + i(AB - BA)$$

bağıntılarından ötürü

$$CC^+ = A^2 + B^2 - i\,[A, B] \tag{III.8.25a}$$

$$C^+ C = A^2 + B^2 + i\,[A, B] \tag{III.8.25b}$$

sonuçlarına varılır. CC^+ ve $C^+ C$ HERMİTsel operatörleri $A^2 + B^2$ ye eşit olmayıp, bunları farklı kılan $\mp i\,[A, B]$ ek terimlerine sâhiptir. Şüphesiz A^2, B^2 ve $i\,[A, B]$ HERMİTseldir.

A ve B herhangi iki lineer operatör olduğuna göre

$$[A, B]_+ = AB + BA \tag{III.8.26}$$

bağıntısı ile tanımlanan lineer operatöre *antikomütatör* adı verilir. Eğer A ve B operatörleri HERMİTsel ise

$$[A, B]_+^+ = (AB)^+ + (BA)^+ = BA + AB = [A, B]_+ \tag{III.8.27}$$

bulunur. Yâni, iki HERMİTsel operatörün antikomütatörü bir HERMİTsel operatördür. İki HERMİTsel vektör operatörün skaler çarpımının HERMİTsel eşleniği

$$(\mathbf{P}\,.\,\mathbf{Q}) = (P_x Q_x)^+ + (P_y Q_y)^+ + (P_z Q_z)^+ = Q_x P_x + Q_y P_y + Q_z P_z = \mathbf{Q}\,.\,\mathbf{P}$$

olduğundan, $\mathbf{P}\,.\,\mathbf{Q}$ HERMİTsel değildir. Fakat

$$(\mathbf{P}\,.\,\mathbf{Q} + \mathbf{Q}\,.\,\mathbf{P})^+ = \mathbf{Q}\,.\,\mathbf{P} + \mathbf{P}\,.\,\mathbf{Q} \tag{III.8.28}$$

ifâdesi HERMİTseldir ve kartezyen bileşenler arasındaki üç antikomütatörün toplamına eşittir :

$$\mathbf{P}\,.\,\mathbf{Q} + \mathbf{Q}\,.\,\mathbf{P} = [P_x\,, Q_x]_+ + [P_y\,, Q_y]_+ + [P_z\,, Q_z]_+ \tag{III.8.28a}$$

Antikomütatörlerin HERMİTselliğinin bir uygulaması olarak, momentum vektör operatörünün (I.12.1) bağıntısı ile tanımlanan radyal bileşeni incelenebilir.

$$p_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\,.\,\mathbf{p} + \mathbf{p}\,.\,\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \tag{III.8.29}$$

tanım bağıntısındaki $\mathbf{r}/r$ vektörünün kartezyen bileşenleri

$$\frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{x\,\mathbf{e}_x + y\,\mathbf{e}_y + z\,\mathbf{e}_z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \tag{III.8.30}$$

şeklinde kartezyen koordinatların reel fonksiyonları olduklarından, (III.7.15a) kuralına göre

$$\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right)^+ = \frac{\mathbf{r}}{r} \tag{III.8.30a}$$

yazılabilir ve böylece (III.8.28) bağıntısının bir uygulaması olmak üzere

$$p_r^+ = p_r \tag{III.8.31}$$

sonucuna varılır.

(III.9) İHTİMÂLİN KORUNUMU VE HAMİLTON OPERATÖRÜNÜN HERMİTSELLİĞİ

$\psi(\mathbf{r}, t)$ dalga fonksiyonu cinsinden ihtimâl yoğunluğu

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^*(\mathbf{r}, t)\,\psi(\mathbf{r}, t) \qquad \text{(III.9.1)}$$

şeklindeki (I.5.8) bağıntısı ile tanımlanmıştı. $P(\mathbf{r}, t)$ fonksiyonunun bütün üç boyutlu uzay üzerinden alınan integrali zamanın bir fonksiyonu olur. Şimdi bu fonksiyonun zamana göre türevini alalım :

$$\frac{d}{dt}\int P(\mathbf{r}, t)\, d\tau = \frac{d}{dt}\int \psi^*\psi\, d\tau = \int \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)\, d\tau$$

veyâ

$$\frac{d}{dt}\int P\, d\tau = \int \left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) d\tau \qquad \text{(III.9.2)}$$

elde edilir. Öte yandan, zamana bağlı SCHRÖDİNGER denklemi (I.7.8) bağıntısına göre

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \qquad \text{(III.9.3)}$$

şeklindedir. Burada H, HAMİLTON operatörüdür. (III.9.3) denkleminden $\partial\psi/\partial t$ çözülürse

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}H\psi \qquad \text{(III.9.3a)}$$

elde edilir. Bu denklemin her iki yanının kompleks eşleniği alınırsa

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}H^*\psi^* \qquad \text{(III.9.3b)}$$

bulunur. (III.9.3a) ve (III.93b) bağıntıları (III.9.2) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\frac{d}{dt}\int P\, d\tau = \frac{i}{\hbar}\int (\psi H^*\psi^* - \psi^* H\psi)\, d\tau \qquad \text{(III.9.4)}$$

elde edilir. (III.6.3) bağıntısına göre, H operatörünün H^+ HERMİTsel eşleniğinin tanım bağıntısı

$$(\psi, H\psi)^* = (\psi, H^+\psi) \qquad \text{(III.9.5a)}$$

veyâ

$$\left(\int \psi^* H\psi\, d\tau\right)^* = \int \psi H^*\psi^*\, d\tau = \int \psi^* H^+\psi\, d\tau \qquad \text{(III.9.5b)}$$

şeklindedir. (III.9.5b) bağıntısı, (III.9.4) bağıntısında sağ taraftaki birinci integralin yerine yazılırsa

$$\frac{d}{dt}\int P\,d\tau = \frac{i}{\hbar}\int (\psi^* H^+ \psi - \psi^* H \psi)\,d\tau$$

veyâ

$$\frac{d}{dt}\int P\,d\tau = \frac{i}{\hbar}\int \psi^* (H^+ - H)\,\psi\,d\tau \qquad \text{(III.9.6)}$$

sonucuna varılır. Eğer ihtimâl korunuyorsa

$$\int P\,d\tau = 1, \qquad \frac{d}{dt}\int P\,d\tau = 0 \qquad \text{(III.9.7a)}$$

olmalıdır. O hâlde, ψ keyfî olduğundan

$$H^+ = H \qquad \text{(III.9.7b)}$$

elde edilir. Tersine, eğer (III.9.7b) şartı gerçekleşiyorsa (III.9.6) bağıntısında yerine yazarak (III.9.7a) bağıntısı elde edilir. Görülüyor ki, ihtimâlin korunması için gerek ve yeter şart HAMİLTON operatörünün HERMİTsel olmasıdır. (III.7.21) bağıntısına göre de HAMİLTON operatörünün HERMİTsel olabilmesi için gerek ve yeter şart potansiyel enerji fonksiyonunun reel olmasıdır. Çekirdek fiziğinde bir parçacığın bir çekirdek tarafından yutulmasına ait tesir kesitini hesaplamak için kompleks potansiyel enerji fonksiyonu kullanılır. (Bak. Çetin CANSOY, Teorik Fizik Dersleri Cild 10: ÇEKİRDEK TEORİSİ, Sayfa: 161).

(III.10) BİR OPERATÖRÜN BEKLENEN DEĞERİNİN ZAMANA GÖRE TÜREVİ İÇİN GENEL FORMÜL

Herhangi bir A lineer operatörünün beklenen değeri (III.5.6) bağıntısına göre

$$\langle A \rangle = (\psi\,, A\psi) = \int \psi^* A\psi\,d\tau \qquad \text{(III.10.1)}$$

şeklindedir. Burada $\psi(\mathbf{r}, t)$ dalga fonksiyonu zamana da bağlıdır. O hâlde, $\langle A \rangle$ beklenen değeri zamanın bir fonksiyonudur. Ayrıca, genel hâlde A operatörünün kendisi de zamanın bir açık fonksiyonudur. $\langle A \rangle$ beklenen değerinin zamana göre türevini hesaplamak üzere (III.10.1) bağıntısının her iki yanının türevi alınırsa

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \int \frac{\partial}{\partial t}(\psi^* A\psi)\,d\tau$$

veyâ

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} A\psi + \psi^* A \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) d\tau + \int \psi^* \frac{\partial A}{\partial t}\psi\,d\tau \qquad \text{(III.10.2)}$$

elde edilir. Burada $\partial A/\partial t$, A operatörünün zamana açık olarak bağlı olduğunu göstermektedir. Öte yandan, zamana bağlı SCHRÖDİNGER denkleminden elde edilen (III.9.3a) ve (III.9.3b) bağıntıları (III.10.2) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\int [(H^*\psi^*)(A\psi) - \psi^* A H \psi]\, d\tau + \int \psi^* \frac{\partial A}{\partial t}\psi\, d\tau \qquad \text{(III.10.3)}$$

bulunur. Eğer sağ taraftaki birinci integralde

$$\Phi = A\psi \qquad \text{(III.10.4a)}$$

yazılırsa bu integral

$$\int (H^*\psi^*) A\psi\, d\tau = \int (H^*\psi^*)\Phi\, d\tau = \int \Phi H^* \psi^*\, d\tau \qquad \text{(III.10.4b)}$$

şeklini alır. H operatörünün HERMİTsel eşleniği (III.6.2b) bağıntısına göre

$$\int \Phi H^*\psi^*\, d\tau = \int \psi^* H^+ \Phi\, d\tau \qquad \text{(III.10.4c)}$$

bağıntısı ile tanımlanabilir. (III.10.4a), (III.10.4b) ve (III.10.4c) bağıntıları karşılaştırılırsa

$$\int (H^*\psi^*) A\psi\, d\tau = \int \psi^* H^+ A\psi\, d\tau \qquad \text{(III.10.5)}$$

elde edilir. (III.10.5) bağıntısı (III.10.3) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\int (\psi^* H^+ A\psi - \psi^* A H\psi)\, d\tau + \int \psi^* \frac{\partial A}{\partial t}\psi\, d\tau$$

veyâ

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\int \psi^* (H^+ A - AH)\psi\, d\tau + \int \psi^* \frac{\partial A}{\partial t}\psi\, d\tau \qquad \text{(III.10.6)}$$

sonucuna varılır. H operatörünün HERMİTsel olması gerektiği için (III.10.6) bağıntısı, $H^+ = H$ yazarak,

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\int \psi^* (HA - AH)\psi\, d\tau + \int \psi^* \frac{\partial A}{\partial t}\psi\, d\tau \qquad \text{(III.10.7)}$$

bağıntısına indirgenir. (III.10.7) bağıntısı, beklenen değer tanımına göre, yalnız beklenen değerler cinsinden

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, A]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \qquad \text{(III.10.8)}$$

şeklinde de yazılabilir.

(III.11) KUVANTUM MEKANİĞİNDE KULLANILAN KOMÜTATÖRLERLE İLGİLİ BAĞINTILAR

Koordinatların $f(\mathbf{r}) = f(x, y, z)$ şeklindeki bir reel fonksiyonunun bir HERMİTsel operatör olduğunu görmüştük. ((III.7.15a) bağıntısına bakınız). Şimdi $[f(\mathbf{r}), p_x]$ komütatörünü hesaplayacağız. $\psi(\mathbf{r})$ keyfî bir dalga fonksiyonu olduğuna göre, fp_x çarpım operatörünün ψ fonksiyonuna etkisi

$$f p_x \psi = -i\hbar f \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

şeklindedir. $p_x f$ çarpım operatörünün ψ fonksiyonu üzerindeki etkisi ise

$$p_x f \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(f\psi) = -i\hbar\left(f\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial x}\psi\right)$$

şeklindedir. Bu iki bağıntı taraf tarafa çıkarılırsa

$$(fp_x - p_x f)\psi = i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}\psi \qquad \text{(III.11.1)}$$

elde edilir. ψ keyfî olduğu için (III.11.1) bağıntısından

$$[f(\mathbf{r}), p_x] \equiv fp_x - p_x f = i\hbar \frac{\partial f}{\partial x} \qquad \text{(III.11.2)}$$

sonucuna varılır. $f(\mathbf{r}) = f(x) = x^n$ özel hâli için (III.11.2) bağıntısı

$$[x^n, p_x] = i\hbar\, n\, x^{n-1} \qquad \text{(III.11.3)}$$

şeklini alır.

Şimdi $[A^n, B]$ şeklindeki komütatörlerin hesaplanmasını sağlayan bir teorem ispatlayacağız :

TEOREM : $A[A, B] = [A, B]A$ ise, $[A^n, B] = n A^{n-1}[A, B]$ bağıntısı doğrudur.

Bu teoremi *matematiksel tümevarım metodu* ile ispatlayabiliriz. $n = 1$ için, $A^\circ = I$ olduğundan, $[A, B] = [A, B]$ bulunur ve teorem doğrudur. Şimdi de teoremin $n \to n-1$ için doğru olduğunu kabul edip n için doğru olduğunu ispatlamalıyız. O hâlde

$$[A^{n-1}, B] = (n-1)A^{n-2}[A, B] \qquad \text{(III.11.4)}$$

bağıntısının doğru olduğunu kabul ediyoruz. Öte yandan, (III.3.35a) bağıntısına göre

$$[CA, B] = C[A, B] + [C, B]A$$

yazılabilir. Eğer bu bağıntıda $C = A^{n-1}$ yazılırsa

$$[A^{n-1} A , B] = A^{n-1} [A, B] + [A^{n-1}, B] A \qquad \text{(III.11.5)}$$

bulunur. (III.3.27a) bağıntısına göre

$$A^{n-1} A = A^n$$

olduğuna dikkat edilirse ve (III.11.4) bağıntısı (III.11.5) bağıntısında yerine yazılırsa

$$[A^n , B] = A^{n-1} [A, B] + (n - 1) A^{n-2} [A , B] A \qquad \text{(III.11.6)}$$

elde edilir. Öte yandan

$$[A , B] A = A[A , B] , \qquad A^{n-2} A = A^{n-1}$$

olduğu için

$$[A^n , B] = A^{n-1} [A, B] + (n - 1) A^{n-1} [A, B]$$

veyâ

$$[A^n , B)] = n A^{n-1} [A, B] \qquad \text{(III.11.7)}$$

sonucuna varılır. Bu teoremin $[A, B] A \neq A [A, B]$ genel hâli için problem III.1. e bakınız.

(III.11.7) bağıntısı ile verilen teoremin ilk uygulaması olarak $A \equiv x$ ve $B \equiv p_x$ seçelim.

$$[x, p_x] = i\hbar I, \qquad xI = Ix$$

olduğu için

$$x [x, p_x] = [x, p_x] x$$

bağıntısı doğrudur ve teoremin hipotez kısmı gerçekleşir. O hâlde, (III.11.7) bağıntısından

$$[x^n , p_x] = n x^{n-1} [x, p_x]$$

elde edilir ve böylece

$$[x^n , p_x] = i \hbar n x^{n-1} \qquad \text{(III.11.3)}$$

bağıntısı tekrar bulunur.

Söz konusu teoremin çok kullanılan başka bir uygulaması $A \equiv p_x$ ve $B \equiv x$ seçilerek elde edilir.

$$[p_x , x] = \frac{\hbar}{i} I, \qquad p_x I = I p_x$$

olduğu için

$$p_x [p_x , x] = [p_x , x] p_x$$

bağıntısı doğrudur ve teoremin hipotez kısmı gerçekleşir. O hâlde, (III.11.7) bağıntısından

$$[p_x^n, x] = n\, p_x^{n-1} [p_x, x]$$

elde edilir ve böylece

$$[p_x^n, x] = \frac{\hbar}{i} n\, p_x^{n-1} \tag{III.11.8}$$

sonucuna varılır.

(III.12) EHRENFEST TEOREMİ

Klâsik mekanikte parçacığın hareketini belirleyen iki temel bağıntı

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \qquad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V$$

veyâ bu bağıntıların x ekseninin üzerindeki izdüşümleri olan

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{m}, \qquad \frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

bağıntıları, kuvantum mekaniğinde de (III.10.8) ile verilen

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \tag{III.12.1}$$

bağıntısının yardımı ile x, p_x ve $\partial V/\partial x$ operatörlerinin beklenen değerleri cinsinden elde edilebilir.

$A \equiv x$ için (III.12.1) bağıntısı, $\partial x/\partial t = 0$ olduğuna dikkat edilirse

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, x] \rangle \tag{III.12.2}$$

şeklinde yazılabilir. Öte yandan,

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

olduğu için

$$[H, x] = \frac{1}{2m}[p^2, x] + [V, x]$$

bulunur.

$$[V, x] = Vx - xV = 0$$

ve

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

olduğu için (III.3.34a) bağıntısının yardımı ile

$$[H, x] = \frac{1}{2m} ([p_x^2, x] + [p_y^2, x] + [p_z^2, x]) \tag{III.12.3}$$

yazılabilir. (III.3.35a) bağıntısına göre yazılan

$$[CA, B] = C[A, B] + [C, B]A \tag{III.12.4a}$$

bağıntısı $C = A$ için

$$[A^2, B] = A[A, B] + [A, B]A \tag{III.12.4b}$$

şeklini alır. (I.8.4) ve (I.8.7) bağıntılarına göre

$$[p_x, x] = \frac{\hbar}{i}, \qquad [p_y, x] = [p_z, x] = 0$$

olduğundan, (III.12.4b) bağıntısına göre

$$[p_x^2, x] = p_x[p_x, x] + [p_x, x]p_x = 2\frac{\hbar}{i}p_x \tag{III.12.5a}$$

$$[p_y^2, x] = p_y[p_y, x] + [p_y, x]p_y = 0 \tag{III.12.5b}$$

$$[p_z^2, x] = p_z[p_z, x] + [p_z, x]p_z = 0 \tag{III.12.5c}$$

elde edilir. (III.12.5a) bağıntısı, (III.11.8) bağıntısından $n = 2$ yazılarak da elde edilebilirdi. (III.12.5a), (III.12.5b) ve (III.12.5c) bağıntıları (III.12.3) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$[H, x] = \frac{1}{2m} 2 \frac{\hbar}{i} p_x \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{p_x}{m} \tag{III.12.6a}$$

ve böylece

$$\frac{i}{\hbar} \langle [H, x] \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \tag{III.12.6b}$$

bulunur. (III.12.6b) bağıntısı (III.12.2) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \tag{III.12.7}$$

sonucuna varılır.

$A \equiv p_x$ için (III.12.1) bağıntısı, $\partial p_x / \partial t = 0$ olduğuna dikkat edilirse

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, p_x] \rangle \tag{III.12.8}$$

şeklinde yazılabilir. Öte yandan,

$$[H, p_x] = \frac{1}{2m} [p^2, p_x] + [V, p_x] \tag{III.12.9}$$

ve

$$[p^2, p_x] = [p_x^2, p_x] + [p_y^2, p_x] + [p_z^2, p_x] \tag{III.12.10}$$

yazılabilir. (III.12.10) bağıntısından,

$$p_x^2 p_x = p_x p_x^2 = p_x^3 , \qquad p_y^2 p_x = p_x p_y^2 , \qquad p_z^2 p_x = p_x p_z^2$$

olduğu için,

$$[p^2, p_x] = 0 \tag{III.12.10a}$$

bulunur. (III.11.2) bağıntısında $f(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$ yazılırsa

$$[V, p_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \tag{III.12.11}$$

elde edilir. (III.12.10a) ve (III.12.11) bağıntıları (III.12.9) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$[H, p_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \tag{III.12.12a}$$

ve böylece

$$\frac{i}{\hbar} \langle [H, p_x] \rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \tag{III.12.12b}$$

bulunur. (III.12.12b) bağıntısı (III.12.8) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \tag{III.12.13}$$

sonucuna varılır.

(III.12.7) ve (III.12.13) bağıntıları, klâsik mekanikte parçacığın hareketini belirleyen iki temel bağıntının kuvantum mekaniğinde de beklenen değerler cinsinden doğru olduğunu göstermektedir. Bu sonuca *EHRENFEST teoremi* adı verilir.

(III.13) SCHWARTZ EŞİTSİZLİĞİ

Kuvantum mekaniğinde belirsizlik ilkesinin genel ifâdesinin elde edilmesinde kullanılan *SCHWARTZ eşitsizliğini* ispatlayacağız.

$f(\mathbf{r})$ ve $g(\mathbf{r})$ koordinatların herhangi iki kompleks fonksiyonu olsun. Bu fonksiyonların skaler çarpımları

$$\alpha = (f, f) = \int |f|^2 d\tau, \qquad \beta = (g, g) = \int |g|^2 d\tau \qquad \text{(III.13.1a)}$$

$$\gamma = (f, g)^* = (g, f) = \int g^* f d\tau \qquad \text{(III.13.1b)}$$

şekillerindedir. Şüphesiz α ve β reel ve pozitif, γ ise kompleks sâbitlerdir. Öte yandan,

$$\int |\beta f - \gamma g|^2 d\tau \geqq 0 \qquad \text{(III.13.2)}$$

eşitsizliği âşikâr olarak her zaman doğrudur. Buradaki eşitlik hâli ise, λ bir kompleks sâbit olmak üzere $g = \lambda f$ için geçerlidir. Gerçekten,

$$g = \lambda f \text{ için}: \qquad \beta = |\lambda|^2 \alpha, \qquad \gamma = \lambda^* \alpha \qquad \text{(III.13.3a)}$$

olduğundan

$$g = \lambda f \text{ için}: \qquad |\beta f - \gamma g|^2 = |\,|\lambda|^2 \alpha f - \lambda^* \alpha \lambda f|^2 = 0 \qquad \text{(III.13.3b)}$$

sonucuna varılır.

Öte yandan,

$$|\beta f - \gamma g|^2 = (\beta f - \gamma g)(\beta f^* - \gamma^* g^*)$$
$$= \beta^2 |f|^2 + |\gamma|^2 |g|^2 - \beta \gamma^* g^* f - \beta \gamma f^* g$$

olduğundan, (III.13.2) bağıntısı

$$\beta^2 \int |f|^2 d\tau + |\gamma|^2 \int |g|^2 d\tau - \beta \gamma^* \int g^* f d\tau - \beta \gamma \int f^* g \, d\tau \geqq 0 \qquad \text{(III.13.2a)}$$

şeklini alır. (III.13.1a) ve (III.13.1b) bağıntıları (III.13.2a) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\beta^2 \alpha + |\gamma|^2 \beta - \beta \gamma^* \gamma - \beta \gamma \gamma^* \geqq 0$$

veyâ

$$\beta (\alpha\beta - |\gamma|^2) \geqq 0 \qquad \text{(III.13.4)}$$

elde edilir. $\beta > 0$ olduğu için (III.13.4) bağıntısı

$$\alpha \beta \geqq |\gamma|^2 \qquad \text{(III.13.4a)}$$

şeklini alır. (III.13.1a) ve (III.13.1b) bağıntıları (III.13.4a) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$(f, f)(g, g) \geqq |(f, g)|^2 \qquad \text{(III.13.5a)}$$

veyâ

$$\left(\int |f|^2 d\tau \right) \left(\int |g|^2 d\tau \right) \geqq \left| \int f^* g \, d\tau \right|^2 \qquad \text{(III.13.5b)}$$

sonucuna varılır. (III.13.5a) veyâ (III.13.5b) bağıntısına *SCHWARTZ eşitsizliği* adı verilir. Buradaki eşit işareti $g = \lambda f$ özel hâline tekabül eder.

(III.14) HEİSENBERG BELİRSİZLİK İLKESİNİN EN GENEL İFÂDESİ

Kuvantum mekaniğinde bir A dinamik değişkeni aynı harf ile gösterilen bir A HERMİTsel operatörü ile temsil edilir. A dinamik değişkeni, kendisini temsil eden lineer operatörün reel bir sayı olan

$$(\psi, \psi) = 1, \qquad \langle A \rangle = (\psi, A\psi) = \int \psi^* A\psi \, d\tau$$

şeklindeki beklenen değeri ile ölçülür. A dinamik değişkeninin $\langle A \rangle$ beklenen değerindeki ΔA ile gösterilen *belirsizlik*

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \int \psi^* (A - \langle A \rangle)^2 \psi \, d\tau \qquad \text{(III.14.1)}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Kısaltma amacı ile

$$P = A - \langle A \rangle \qquad \text{(III.14.2)}$$

HERMİTsel operatörü tanımlanırsa (III.14.1) bağıntısı

$$(\Delta A)^2 = \langle P^2 \rangle = (\psi, P^2 \psi) \qquad \text{(III.14.1a)}$$

şeklini alır. Eğer

$$f = P\psi \qquad \text{(III.14.3)}$$

bağıntısı ile f fonksiyonu tanımlanırsa, (III.7.2) HERMİTsellik bağıntısının yardımı ile

$$(\Delta A)^2 = \langle P^2 \rangle = (\psi, Pf) = (f, P\psi)^* \equiv (P\psi, f) = (f, f) \qquad \text{(III.14.4)}$$

sonucuna varılır. İkinci bir B dinamik değişkeni için yukardaki hesaplar tekrarlanırsa,

$$Q = B - \langle B \rangle \qquad \text{(III.14.5)}$$

ve

$$g = Q\psi \qquad \text{(III.14.6)}$$

tanım bağıntılarının yardımı ile

$$(\Delta B)^2 = \langle Q^2 \rangle = (g, g) \qquad \text{(III.14.7)}$$

bulunur. Şimdi (III.14.4) ve (III.14.7) bağıntılarını taraf tarafa çarpalım ve (III.13.5a) ile verilen SCHWARTZ eşitsizliğini uygulayalım :

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 = (f, f)(g, g) \geqq |(f, g)|^2 \qquad \text{(III.14.8)}$$

elde edilir. Öte yandan, (III.14.3) ve (III.14.6) bağıntıları ve P operatörünün HERMİTsellik özelliği bir arada kullanılırsa

$$(f, g) = (P\psi, g) \equiv (g, P\psi)^* = (\psi, Pg) = (\psi, PQ\,\psi) = \langle PQ \rangle$$

bulunur ve böylece (III.14.8) bağıntısı

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geqq | \langle PQ \rangle |^2 \tag{III.14.9}$$

şeklini alır.

(III.7.22) bağıntısına göre

$$P^+ = P, \quad Q^+ = Q \text{ için: } \quad (PQ)^+ = QP, \quad \langle PQ \rangle^* = \langle QP \rangle$$

olduğunu biliyoruz. O hâlde, $D^+ = D$ ve $C^+ = C$ olmak üzere

$$PQ = D + i\frac{1}{2} C \tag{III.14.10a}$$

$$QP = D - i\frac{1}{2} C \tag{III.14.10b}$$

bağıntıları yazılabilir. Bu bağıntılardan C çözülürse

$$C = \frac{1}{i} (PQ - QP) = \frac{1}{i} [P, Q] \tag{III.14.11}$$

bulunur. (III.14.2) ve (III.14.5) bağıntıları taraf tarafa çarpılırsa

$$PQ = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle)$$
$$QP = (B - \langle B \rangle)(A - \langle A \rangle)$$

veyâ

$$PQ = AB - \langle B \rangle A - \langle A \rangle B + \langle A \rangle \langle B \rangle$$
$$QP = BA - \langle A \rangle B - \langle B \rangle A + \langle A \rangle \langle B \rangle$$

elde edilir. Bu bağıntılar taraf tarafa çıkarılırsa

$$PQ - QP = AB - BA, \qquad [P, Q] = [A, B] \tag{III.14.12}$$

sonucuna varılır. (III.14.12) bağıntısı (III.14.11) bağıntısında yerine yazılırsa

$$C = \frac{1}{i} [A, B] \tag{III.14.13}$$

bulunur. Öte yandan, (III.14.10a) ve (III.14.10 b) bağıntılarının her iki yanlarının beklenen değerleri alınırsa

$$\langle PQ \rangle = \langle D \rangle + i\frac{1}{2} \langle C \rangle \tag{III.14.14a}$$

$$\langle QP \rangle = \langle D \rangle - i\frac{1}{2} \langle C \rangle \tag{III.14.14b}$$

bağıntıları bulunur. Bu bağıntılardan

$$| \langle PQ \rangle |^2 = | \langle QP \rangle |^2 = \langle D \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle C \rangle^2 \tag{III.14.15}$$

elde edilir. (III.14.15) bağıntısı (III.14.9) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geqq \langle D \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle C \rangle^2 \geqq \frac{1}{4} \langle C \rangle^2$$

bulunur. Burada ikinci eşitlik işareti $\langle D \rangle = 0$ için doğrudur. Böylece, $\Delta A > 0$ ve $\Delta B > 0$ olmak üzere,

$$\Delta A \, \Delta B \geqq \frac{1}{2} | \langle C \rangle |$$

veyâ (III.14.13) bağıntısını kullanarak

$$\Delta A \, \Delta B \geqq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{1}{i} [A, B] \right\rangle \right| \qquad \text{(III.14.16)}$$

sonucuna varılır. (III.14.16) bağıntısı *HEİSENBERG belirsizlik ilkesi*nin en genel ifâdesidir.

HEİSENBERG belirsizlik ilkesinin en çok kullanılan iki özel şekli, x, p_x ve W, t kanonik eşlenik dinamik değişkenlerine ait olanlarıdır. (I.8.3) ve (I.8.12) bağıntılarına göre

$$[x, p_x] = i\hbar, \qquad [W, t] = i\hbar$$

olduğu için

$$\left\langle \frac{1}{i} [x, p_x] \right\rangle = \hbar, \qquad \left\langle \frac{1}{i} [W, t] \right\rangle = \hbar$$

bağıntıları bulunur. Bu bağıntılar (III.14.16) genel bağıntısında yerine yazılırsa

$$\Delta x \, \Delta p_x \geqq \frac{1}{2} \hbar \qquad \text{(III.14.17a)}$$

ve

$$\Delta W \, \Delta t \geqq \frac{1}{2} \hbar \qquad \text{(III.14.17b)}$$

sonuçlarına varılır. Küresel korordinatlarda yörünge açısal momentumu vektör operatörünün L_z kartezyen bileşeni (I.10.14) bağıntısına göre

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

şeklindedir. L_z dinamik değişkeninin kanonik eşleniği olan φ dönme açısı ile oluşturduğu komütatör

$$[L_z, \varphi] = \frac{\hbar}{i}, \qquad \left\langle \frac{1}{i} [L_z, \varphi] \right\rangle = -\hbar$$

bağıntılarını verdiği için, (III.14.16) genel bağıntısında yerine yazarak

$$\Delta L_z \, \Delta\varphi \geqq \frac{1}{2} \hbar \qquad \text{(III.14.17c)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (I.9.4) bağıntısına göre

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

olduğundan

$$\left\langle \frac{1}{i} [L_x , L_y] \right\rangle = \hbar \, \langle L_z \rangle$$

bağıntısı bulunur. Bu bağıntı (III.14.16) genel bağıntısında yerine yazılırsa

$$\Delta L_x \, \Delta L_y \geqq \frac{1}{2} \hbar \, | \langle L_z \rangle | \qquad \text{(III.14.18a)}$$

sonucuna varılır. Eğer $\langle L_z \rangle$ beklenen değeri, L_z operatörünün (I.21.3) sayılı

$$L_z \, Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar \, m \, Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

şeklindeki özdeğer bağıntısında bulunan Y_{lm} özfonksiyonları cinsinden hesaplanırsa

$$\langle L_z \rangle = \iint_{(4\pi)} Y_{lm}^* \, L_z \, Y_{lm} \, d\Omega = \hbar \, m \iint_{(4\pi)} Y_{lm}^* \, Y_{lm} \, d\Omega = \hbar \, m$$

elde edilir. Bu sonuç (III.14.18a) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\Delta L_x \, \Delta L_y \geqq \frac{1}{2} \hbar^2 \, | m | \qquad \text{(III.14.18b)}$$

sonucuna varılır.

(III.15) BELİRSİZLİK ÇARPIMININ EN KÜÇÜK OLDUĞU HÂL

(III.14.16) genel bağıntısındaki eşitlik işaretinin geçerli olduğu hâl, $\Delta A \, \Delta B$ belirsizlik çarpımının en küçük (minimum) olduğu hâldir. Bu hâlin gerçekleşmesi için

$$\langle D \rangle = 0 \qquad \text{(III.15.1a)}$$

ve $g = \lambda f$ veyâ

$$Q\psi = \lambda P \psi \qquad \text{(III.15.1b)}$$

şartları sağlanmalıdır. (III.15.1a) şartının sağlanmasının sonucu olarak, (III.14.14a) ve (III.14.14b) bağıntıları

$$\langle PQ \rangle = - \langle QP \rangle = i \frac{1}{2} \langle C \rangle \qquad \text{(III.15.2)}$$

şekillerini alır. Öte yandan, (III.15.1b) bağıntısını kullanarak

$$\langle PQ \rangle = (\psi, PQ\,\psi) = \lambda\,(\psi, P^2\,\psi) = \lambda\,\langle P^2 \rangle \tag{III.15.3a}$$

ve

$$\langle QP \rangle = (\psi, QP\,\psi) = \frac{1}{\lambda}\,(\psi, Q^2\,\psi) = \frac{1}{\lambda}\,\langle Q^2 \rangle \tag{III.15.3b}$$

bağıntıları bulunur. (III.14.1a) ve (III.14.7) bağıntıları, (III.15.3a), (III.15.3b) ve (III.15.2) bağıntıları ile karşılaştırılırsa

$$(\Delta A)^2 = \langle P^2 \rangle = \frac{1}{\lambda}\,\langle PQ \rangle = \frac{i}{2\lambda}\,\langle C \rangle \tag{III.15.4a}$$

ve

$$(\Delta B)^2 = \langle Q^2 \rangle = \lambda\,\langle QP \rangle = -\,\frac{i\lambda}{2}\,\langle C \rangle \tag{III.15.4b}$$

sonuçlarına varılır. (III.14.13) bağıntısına göre

$$iC = [A, B] \tag{III.15.4c}$$

olduğu için (III.15.4a) ve (III.15.4b) bağıntıları

$$(\Delta A)^2 = \frac{1}{2\lambda}\,\langle [A, B] \rangle \tag{III.15.5a}$$

ve

$$(\Delta B)^2 = -\,\frac{\lambda}{2}\,\langle [A, B] \rangle \tag{III.15.5b}$$

şekillerini alırlar. Öte yandan, (III.15.4a) ve (III.15.4b) bağıntıları taraf tarafa çarpılırsa

$$(\Delta A)^2\,(\Delta B)^2 = \frac{1}{4}\,\langle C \rangle^2$$

veyâ

$$\Delta A\,\Delta B = \frac{1}{2}\,|\,\langle C \rangle\,|$$

bulunur. (III.15.4c) bağıntısı bu son bağıntıda yerine yazılırsa

$$\Delta A\,\Delta B = \frac{1}{2}\left|\left\langle \frac{1}{i}\,[A, B] \right\rangle\right| \tag{III.15.6}$$

sonucuna varılır. (III.15.6) bağıntısı (III.14.16) bağıntısının özel hâlidir ve bu özel hâl için $\Delta A\,\Delta B$ belirsizlik çarpımı en küçüktür. Öte yandan bu özel hâl için, beklenen değerlerin hesaplanmasında kullanılan ψ dalga fonksiyonu (III.15.1b) bağıntısını gerçekler. (III.14.2) ve (III.14.5) bağıntılarının yardımı ile (III.15.1b) bağıntısı

$$(B - \langle B \rangle)\, \psi = \lambda\, (A - \langle A \rangle)\, \psi \qquad \text{(III.15.7a)}$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki λ sayısı (III.15.5a) bağıntısından

$$\lambda = \frac{\langle [A, B] \rangle}{2\,(\Delta A)^2} \qquad \text{(III.15.7b)}$$

şeklinde çözülebilir.

ÖRNEK : $A = x$ VE $B = p_x$ ÖZEL HÂLİ İÇİN $\psi = \psi(x)$ FONKSİYONUNUN BELİRLENMESİ

Bu özel hâl için

$$[x, p_x] = i\hbar, \qquad \Delta x\, \Delta p_x = \frac{1}{2}\hbar$$

bağıntıları vardır. O hâlde, (III.15.7a) bağıntısı

$$(p - \langle p_x \rangle)\, \psi = \lambda\, (x - \langle x \rangle)\, \psi \qquad \text{(III.15.8a)}$$

şeklini alır. (III.15.7b) bağıntısı da λ yı

$$\lambda = \frac{\langle [x, p_x] \rangle}{2\,(\Delta x)^2} = \frac{i\hbar}{2\,(\Delta x)^2} \qquad \text{(III.15.8b)}$$

şeklinde verir. λ yı (III.15.8a) bağıntısında yerine yazarak ve

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

olduğunu hatırlayarak $\psi(x)$ dalga fonksiyonunu veren

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - \langle p_x \rangle\right)\psi = \frac{i\hbar}{2\,(\Delta x)^2}\,(x - \langle x \rangle)\,\psi \qquad \text{(III.15.9)}$$

diferansiyel denklemi elde edilir. Bu denklemin her iki yanı ψ ile bölünürse

$$\frac{1}{\psi}\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} - \langle p_x \rangle = \frac{i\hbar}{2\,(\Delta x)^2}\,(x - \langle x \rangle)$$

bulunur. Bu denklemin her iki yanı $i/\hbar$ ile çarpılırsa

$$\frac{1}{\psi}\frac{d\psi}{dx} = -\frac{x - \langle x \rangle}{2\,(\Delta x)^2} + \frac{i}{\hbar}\langle p_x \rangle$$

elde edilir. Bu denklemin her iki yanı x e göre integre edilirse

$$\ln \psi = \ln N - \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4\,(\Delta x)^2} + \frac{i}{\hbar}\langle p_x \rangle\, x$$

veyâ

$$\psi = N \exp\left[-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{4(\Delta x)^2} + \frac{i}{\hbar}\langle p_x\rangle x\right] \tag{III.15.10}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntıdaki N integrasyon sâbiti, ψ dalga fonksiyonunu normlayarak hesaplanabilir.

$$|\psi|^2 = N^2 \exp\left[-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{2(\Delta x)^2}\right]$$

olduğundan

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dx = 1$$

şeklindeki normlama bağıntısı, $a = 1/2\,(\Delta x)^2$ yazarak

$$N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x-\langle x\rangle)^2} \, dx = 1$$

şeklini alır. Belirli integralin cetvellerdeki değerini yazarak

$$N^2 \sqrt{\frac{\pi}{a}} = 1$$

veyâ

$$N^2 = \sqrt{\frac{a}{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta x)^2}}$$

bulunur. Bu sonuç (III.15.10) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\psi(x) = [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4} \exp\left[-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{4(\Delta x)^2} + \frac{i}{\hbar}\langle p_x\rangle x\right] \tag{III.15.11}$$

şeklinde aranan dalga fonksiyonu bulunur. Bu dalga fonksiyonuna *minimum belirsizliğe ait dalga paketi* adı verilir.

(III.16) BİR LİNEER OPERATÖRÜN ÖZDEĞERLERİ VE ÖZFONKSİYONLARI

Herhangi bir A dinamik değişkeninin $\langle A\rangle$ beklenen değerindeki ΔA belirsizliği (III.14.1) bağıntısı ile

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle \tag{III.16.1a}$$

şeklinde tanımlanmıştı. Bu bağıntı aşağıda gösterilen şekilde sâdeleştirilebilir :

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 - 2\langle A\rangle A + \langle A\rangle^2\rangle = \langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle\langle A\rangle + \langle A\rangle^2$$

ve böylece

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \qquad \text{(III.16.1b)}$$

elde edilir.

Şüphesiz A dinamik değişkeninin ölçümünü veren $\langle A \rangle$ beklenen değeri ve bu ölçümdeki belirsizlik, beklenen değerlerin hesaplanmasında kullanılan ψ dalga fonksiyonuna sıkı sıkıya bağlıdır. ψ dalga fonksiyonuna, göz önüne alınan bir sistemin *kuvantum hâlini* belirleyen *hâl fonksiyonu* adı verilir. ψ dalga fonksiyonu ΔA belirsizliğini sıfır yapacak şekilde seçilebilir. Bu özel hâlde (III.16.1b) bağıntısına göre

$$\Delta A = 0 \text{ için}: \qquad \langle A^2 \rangle = \langle A \rangle^2 \qquad \text{(III.16.2)}$$

elde edilir. (III.16.2) bağıntısı sağlandığı zaman göz önüne alınan sistem, A dinamik değişkeninin *belirli* olduğu bir ψ kuvantum hâlindedir ve bu kuvantum hâlinde A *dinamik değişkeninin ölçülebilir* olduğu söylenir.

Kuvantum mekaniğinde (III.16.2) şartını sağlayacak şekildeki ψ_n dalga fonksiyonlarının seçimi

$$A\,\psi_n = \lambda_n\,\psi_n \qquad \text{(III.16.3)}$$

bağıntısının yardımı ile yapılır. Bu bağıntıda λ_n bir sâbittir. Eğer (III.16.3) bağıntısı sağlanırsa λ_n sâbitine A operatörünün bir *özdeğeri,* ve ψ_n fonksiyonuna da A operatörünün λ_n özdeğerine ait bir *özfonksiyonu* adı verilir. Ayrıca, (III.16.3) bağıntısına da A operatörüne ait *özdeğer denklemi* adı verilir. Paragraf (III.1) de ψ dalga fonksiyonunun HİLBERT uzayına ait bir vektör olarak yorumlanabileceğini görmüştük. Bu bakımdan, özdeğer denklemindeki ψ_n fonksiyonuna A operatörünün λ_n özdeğerine ait bir *özvektörü* adı da verilir. ψ_n özfonksiyonları A operatörüne ait *kuvantum hâllerini* belirler. (III.16.3) bağıntısının her iki yanını soldan ψ_n ile skaler olarak çarparsak

$$(\psi_n\,,\,A\,\psi_n) = \lambda_n\,(\psi_n\,,\,\psi_n) \qquad \text{(III.16.4)}$$

elde edilir. Öte yandan, A operatörünün ψ_n kuvantum hâline göre beklenen değeri

$$\langle A \rangle = \frac{(\psi_n\,,\,A\,\psi_n)}{(\psi_n\,,\,\psi_n)}$$

şeklinde olduğundan

$$\langle A \rangle = \lambda_n \qquad \text{(III.16.5)}$$

sonucuna varılır. ψ_n fonksiyonunun normlanmış olduğunu varsayıyoruz. O hâlde,

$$(\psi_n\,,\,\psi_n) = 1, \qquad \lambda_n = (\psi_n\,,\,A\,\psi_n) = \langle A \rangle \qquad \text{(III.16.5a)}$$

yazılabilir. Öte yandan, (III.16.3) bağıntısının her iki yanı soldan A ile çarpılırsa

$$A^2 \psi_n = \lambda_n A \psi_n = \lambda_n \lambda_n \psi_n$$

veyâ

$$A^2 \psi_n = \lambda_n^2 \psi_n \tag{III.16.6}$$

elde edilir. Bu işlem (III.16.6) bağıntısı üzerinde $k - 2$ kere tekrar edilirse

$$A^k \psi_n = \lambda_n^k \psi_n \tag{III.16.7}$$

sonucuna varılır. (III.16.6) ve (III.16.7) bağıntılarını soldan ψ_n ile skaler olarak çarparsak

$$\langle A^2 \rangle = (\psi_n , A^2 \psi_n) = \lambda_n^2 \tag{III.16.8}$$

ve

$$\langle A^k \rangle = (\psi_n , A^k \psi_n) = \lambda_n^k \tag{III.16.9}$$

bulunur. (III.16.5) bağıntısı, (III.16.8) ve (III.16.9) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\langle A^2 \rangle = \langle A \rangle^2 \tag{III.16.10}$$

ve

$$\langle A^k \rangle = \langle A \rangle^k \tag{III.16.11}$$

bağıntıları elde edilir. (III.16.10) bağıntısı (III.16.2) bağıntısının aynıdır. O hâlde, herhangi bir A dinamik değişkeni, kendi özfonksiyonlarından biri ile belirlenen bir kuvantum hâli için belirlidir ve bu özfonksiyona ait olan özdeğer ile ölçülür. Ayrıca, (III.4.2) bağıntısı ile tanımlanan

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k A^k \tag{III.16.12}$$

şeklindeki bir fonksiyon operatörünün beklenen değeri

$$\langle f(A) \rangle = (\psi_n , f(A) \psi_n) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (\psi_n , A^k \psi_n)$$

şeklinde yazılabildiği için (III.16.9) ve (III.16.11) bağıntılarının yardımı ile

$$\langle f(A) \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \langle A^k \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \langle A \rangle^k$$

bulunur. O hâlde, (III.16.12) bağıntısının yardımı ile

$$\langle f(A) \rangle = f(\langle A \rangle) \tag{III.16.13}$$

sonucuna varılır. Böylece eğer ψ_n, A operatörünün bir özfonksiyonu ise, A nın bir keyfî fonksiyonunun beklenen değeri, söz konusu fonksiyonun A nın kendi beklenen değeri için aldığı değere eşittir.

(III.17) BİR HERMİTSEL OPERATÖRÜN ÖZDEĞERLERİ VE ÖZFONKSİYONLARI

Bir önceki paragrafta bir lineer operatörle temsil edilen bir dinamik değişkenin, söz konusu operatörün özdeğerleri ile ölçüldüğünü gördük. Kuvantum mekaniğinde dinamik değişkenleri temsil için HERMİTsel operatörlerin kullanıldığını biliyoruz. Aşağıda HERMİTsel operatörlerin özdeğerleri ve özfonksiyonları hakkındaki bir teoremi ispatlayacağız :

TEOREM : Bir HERMİTsel operatörün özdeğerleri reeldir ve farklı iki özdeğerine ait özfonksiyonları diktir.

Bir HERMİTsel operatörün özdeğerinin reel olduğu (III.16.5) bağıntısının yardımı ile hemen ispatlanabilir. (III.16.5) bağıntısına göre, bir A operatörünün ψ_n kuvantum hâlindeki beklenen değeri, ψ_n özfonksiyonuna ait λ_n özdeğerine eşittir :

$$\langle A \rangle = \lambda_n \qquad \text{(III.17.1)}$$

Öte yandan (III.7.5) bağıntısına göre, bir HERMİTsel operatörün beklenen değeri reeldir :

$$\langle A \rangle^* = \langle A \rangle \qquad \text{(III.17.2)}$$

(III.17.1) bağıntısının her iki yanının kompleks eşleniği alınırsa, (III.17.2) bağıntısının yardımı ile

$$\lambda_n^* = \langle A \rangle^* = \langle A \rangle = \lambda_n \qquad \text{(III.17.3)}$$

sonucuna varılır. Yâni, bir HERMİTsel operatörün özdeğeri reeldir.

A operatörünün farklı iki λ_m ve λ_n özdeğerine ait özfonksiyonları ψ_m ve ψ_n ise

$$A\,\psi_m = \lambda_m\,\psi_m \qquad \text{(III.17.4a)}$$

ve

$$A\,\psi_n = \lambda_n\,\psi_n \qquad \text{(III.17.4b)}$$

özdeğer denklemleri yazılabilir. (III.17.4a) denklemini soldan ψ_n ile ve (III.17.4b) denklemini de soldan ψ_m ile skaler olarak çarpalım :

$$(\psi_n\,,A\,\psi_m) = \lambda_m\,(\psi_n\,,\psi_m) \qquad \text{(III.17.5a)}$$

ve

$$(\psi_m\,,A\,\psi_n) = \lambda_n\,(\psi_m\,,\psi_n) \qquad \text{(III.17.5b)}$$

bulunur. (III.17.5b) bağıntısının her iki yanının kompleks eşleniğini alarak

$$(\psi_m\,,A\,\psi_n)^* = \lambda_n^*\,(\psi_m\,,\psi_n)^*$$

elde edilir. Öte yandan, (III.6.1) ve (III.1.3) bağıntılarına göre

$$(\psi_m, A\,\psi_n)^* = (\psi_n, A^+\,\psi_m), \qquad (\psi_m, \psi_n)^* = (\psi_n, \psi_m)$$

olduğu için son bağıntı

$$(\psi_n, A^+\,\psi_m) = \lambda_n^*\,(\psi_n, \psi_m) \tag{III.17.5c}$$

şeklini alır. (III.17.5a)ve (III.17.5c) bağıntıları taraf tarafa çıkarılırsa

$$(\psi_n, (A^+ - A)\,\psi_m) = (\lambda_n^* - \lambda_m)\,(\psi_n, \psi_m) \tag{III.17.6}$$

elde edilir. A operatörü HERMİTsel olduğu için (III.17.6) bağıntısında $A^+ = A$ yazılarak

$$(\lambda_n^* - \lambda_m)\,(\psi_n, \psi_m) = 0 \tag{III.17.7}$$

sonucuna varılır. $m = n$ için (III.17.7) bağıntısı

$$(\lambda_n^* - \lambda_n)\,(\psi_n, \psi_n) = 0 \tag{III.17.8}$$

şeklini alır ve bu bağıntıdan (III.1.5a) bağıntısının yardımı ile yeniden

$$(\psi_n, \psi_n) > 0, \qquad \lambda_n^* = \lambda_n \tag{III.17.3a}$$

sonucuna varılır. Yâni, bir HERMİTsel operatörün özdeğeri reeldir. (III.17.7) bağıntıstnda $\lambda_n^* = \lambda_n$ yazılırsa

$$(\lambda_n - \lambda_m)\,(\psi_n, \psi_m) = 0 \tag{III.17.9}$$

elde edilir. (III.17.9) bağıntısı, $m \neq n$ olmak üzere

$$\lambda_m \neq \lambda_n \text{ için}: \qquad (\psi_n, \psi_m) = 0 \tag{III.17.10}$$

sonucunu verir. Yâni, bir HERMİTsel operatörün farklı iki özdeğerine ait özfonksiyonları diktir.

Bir HERMİTsel operatörün her bir özdeğerine ait bir ve yalnız bir lineer bağımsız özfonksiyonu varsa, o operatörün *soysuzlaşmamış* olduğu söylenir. Aksi hâlde, bir HERMİTsel operatörün belirli bir özdeğerine ait birden fazla özfonksiyonu varsa, söz konusu operatörün o özdeğer için *soysuzlaşmış* olduğu söylenir ve ayrıca, söz konusu özdeğere de *soysuzlaşmış özdeğer* adı verilir. Paragraf (II.6) da hidrojen atomunun enerji özdeğerlerinin soysuzlaşmışlığı incelenmişti. Bir HERMİTsel operatörün bütün özfonksiyonları normlanmışsa ve bütün özdeğerleri soysuzlaşmamışsa, o operatörün özfonksiyonları bir *ortonormal takım* oluşturur. Bu özellik, *ortonommallik bağıntısı* adı verilen

$$(\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm} \tag{III.17.11}$$

bağıntısı ile ifâde edilir. (III.17.11) bağıntısından

$$m = n \text{ için}: \qquad (\psi_n, \psi_n) = 1$$

şeklindeki *normlama bağıntısı* ve

$$m \neq n \text{ için}: \qquad (\psi_n, \psi_m) = 0$$

şeklindeki *diklik bağıntısı* elde edilir ve bu da (III.17.10) bağıntısından ibarettir.

(III.18) İKİ HERMİTSEL OPERATÖRÜN ORTAK ÖZFONKSİYONLARI

A ve B gibi iki dinamik değişkeni, veyâ bu dinamik değişkenleri temsil eden A ve B HERMİTsel operatörlerini göz önüne alalım. A operatörü kendi λ özdeğeri ile belirli olarak ölçülür ve böylece $\Delta A = 0$ dır. Benzer şekilde, B operatörü de kendi μ özdeğeri ile ölçülür ve bu kez $\Delta B = 0$ dır. A ve B operatörlerinin aynı zamanda belirli olarak ölçülebilmesi için bu iki operatörün ortak özfonksiyonlara sâhip olması gerekir ve bu takdirde $\Delta A \, \Delta B = 0$ olur. (III.14.16) ile verilen belirsizlik ilkesinin

$$\Delta A \, \Delta B \geqq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{1}{i} [A, B] \right\rangle \right| \tag{III.18.1}$$

şeklindeki ifâdesine göre $[A, B] = 0$ olmalıdır. İki operatörün ortak özfonksiyonlara sâhip olabilmesi ile ilgili olarak aşağıdaki teoremi ispatlayacağız :

TEOREM : İki operatörün ortak özfonksiyonlara sâhip olması için gerek ve yeter şart bu iki operatörün komütatif olmasıdır.

Önce şartın *gerek* olduğunu ispatlayalım. A ve B operatörlerinin ortak özfonksiyonu ψ olsun. O hâlde, bu iki operatöre ait özdeğer denklemleri

$$A\psi = \lambda \, \psi \tag{III.18.2a}$$

ve

$$B\psi = \mu \, \psi \tag{III.18.2b}$$

şeklindedir. Burada A nın ψ ye ait özdeğeri λ ve B nin ψ ye ait özdeğeri de μ dür. (III.18.2a) denklemini soldan B ile ve (III.18.2b) denklemini de soldan A ile çarpalım :

$$BA \, \psi = \lambda \, B\psi = \lambda \, \mu \, \psi$$

$$AB \, \psi = \mu \, A\psi = \mu \, \lambda \, \psi$$

bulunur. Bu denklemler taraf tarafa çıkarılırsa

$$(AB - BA) \, \psi = 0 \tag{III.18.3}$$

elde edilir ve böylece

$$AB = BA \tag{III.18.4}$$

sonucuna varılır. Yâni, A ve B operatörleri ortak özfonksiyonlara sâhipseler bu operatörlerin komütatif olmaları gerekir.

Şimdi de şartın *yeter* olduğunu ispatlayacağız. A operatörünün bir özdeğeri λ ve bu özdeğere ait özfonksiyonu ψ olsun. O hâlde, A operatörüne ait özdeğer denklemi

$$A\psi = \lambda\, \psi \tag{III.18.5}$$

şeklindedir. (III.18.5) denklemini soldan B ile çarpalım :

$$BA\, \psi = \lambda\, B\psi \tag{III.18.6a}$$

bulunur. $AB = BA$ olduğuna göre

$$AB\, \psi = \lambda\, B\psi \tag{III.18.6b}$$

veyâ

$$B\psi = \Phi \tag{III.18.6c}$$

yazarak

$$A\Phi = \lambda\Phi \tag{III.18.7}$$

elde edilir. Genel hâlde $\Phi \neq 0$ dır. (III.18.5) ve (III.18.7) bağıntılarına göre, ψ ve Φ fonksiyonları A operatörünün aynı λ özdeğerine ait özfonksiyonlarıdır. Burada esas itibariyle farklı iki hâl ortaya çıkıyor :

Birinci hâl : λ özdeğeri soysuzlaşmamış ise, yâni λ özdeğerine ait yalnız bir kuvantum hâli varsa, ψ ve Φ özfonksiyonları aynı kuvantum hâlini gösteriyor demektir. O hâlde, Φ ve ψ orantılı olmalıdır ve μ bir sâbit çarpan olmak üzere

$$\Phi = \mu\, \psi \tag{III.18.8}$$

yazılabilir. Gerçekten, eğer (III.18.7) denkleminde $\Phi = \mu\, \psi$ yazılırsa, (III.18.5) denklemi yeniden elde edilir. Eğer (III.18.8) bağıntısı (III.18.6c) bağıntısında yerine yazılırsa

$$B\psi = \mu\, \psi \tag{III.18.9}$$

sonucuna varılır. Böylece ψ fonksiyonu B operatörünün de bir özfonksiyonudur ve bu operatörün μ özdeğerine aittir. Yâni, A ve B operatörleri komütatifseler, bunların ψ gibi ortak özfonksiyonları vardır.

İkinci hâl : λ özdeğeri soysuzlaşmış ise (III.18.8) bağıntısı yazılamaz. Çünkü Φ ve ψ artık farklı kuvantum hâllerini göstermektedir. O hâlde, teoremin karşıtının ispatı olan (III.18.9) bağıntısı da yazılamaz. En basit soysuzlaşma olan *iki katlı soysuzlaşma* özel hâli için teoremi ispatlayacağız. O hâlde, (III.18.5) bağıntısının yerine

$$A\, \psi_1 = \lambda\, \psi_1\,, \qquad A\, \psi_2 = \lambda\, \psi_2$$

bağıntıları yazılabilir. Soysuzlaşmanın gereği olarak ψ_1 ve ψ_2 lineer bağımsız özfonksiyonlar olduğu için, c_1 ve c_2 keyfî sâbitlerinin yardımı ile bu özfonksiyonların

$$\psi = c_1\, \psi_1 + c_2\, \psi_2 \tag{III.18.10}$$

şeklindeki bir lineer toplamını alabiliriz. A operatörünün lineerlik özelliğinden ötürü

$$A\,(c_1\,\psi + c_2\,\psi_2) = c_1\,A\,\psi_1 + c_2\,A\,\psi_2 = c_1\,\lambda\,\psi_1 + c_2\,\lambda\,\psi_2 = \lambda\,(c_1\,\psi_2 + c_2\,\psi_2)$$

veyâ

$$A\psi = \lambda\,\psi \qquad \text{(III.18.5a)}$$

sonucuna varılır. c_1 ve c_2 keyfî katsayıları öyle seçilebilir ki (III.18.9) bağıntısı gene gerçekleşir. O hâlde, (III.18.10) bağıntısı (III.18.9) denkleminde yerine yazılabilir ve

$$c_1\,B\,\psi_1 + c_2\,B\,\psi_2 = \mu\,(c_1\,\psi_1 + c_2\,\psi_2) \qquad \text{(III.18.11)}$$

elde edilir. Öte yandan, (III.18.11) bağıntısı soldan ψ_1 ve ψ_2 ile ayrı ayrı skaler olarak çarpılırsa ve sonra da

$$B_{11} = (\psi_1\,,\,B\,\psi_1), \qquad B_{12} = (\psi_1\,,\,B\,\psi_2)$$
$$B_{21} = (\psi_2\,,\,B\,\psi_1), \qquad B_{22} = (\psi_2\,,\,B\,\psi_2)$$

yazılırsa ve ayrıca c_1 ve c_2 nin keyfîliğinden ötürü

$$(\psi_1\,,\,\psi_1) = (\psi_2\,,\,\psi_2) = 1, \qquad (\psi_1\,,\,\psi_2) = (\psi_2\,,\,\psi_1) = 0$$

olarak seçilirse

$$\left.\begin{aligned} c_1\,(B_{11} - \mu) + c_2\,B_{12} = 0 \\ c_1\,B_{21} + c_2\,(B_{22} - \mu) = 0 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(III.18.12)}$$

bağıntıları bulunur. (III.18.12) denklem sisteminin c_1 ve c_2 nin sıfırdan farklı çözümlerini verebilmesi için

$$\begin{vmatrix} B_{11} - \mu & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} - \mu \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{(III.18.13a)}$$

bağıntısı gerçeklenmelidir. $B^{+} = B$ olduğu için B_{11} ve B_{22} reeldir ve $B_{12}^{*} = B_{21}$ dir. Böylece (III.18.13a) denklemi

$$(B_{11} - \mu)\,(B_{22} - \mu) - |\,B_{12}\,|^2 = 0 \qquad \text{(III.18.13b)}$$

veyâ

$$\mu^2 - (B_{11} + B_{22})\,\mu + B_{11}\,B_{22} - |\,B_{12}\,|^2 = 0 \qquad \text{(III.18.13c)}$$

şeklinde yazılabilir. (III.18.13c) denklemi μ ye göre ikinci derecedendir ve çözümü

$$\mu_{1,2} = \frac{1}{2}\,[B_{11} + B_{22} \pm \sqrt{(B_{11} - B_{22})^2 + 4\,|\,B_{12}\,|^2}] \qquad \text{(III.18.14)}$$

şeklindedir. Bu çözüme göre μ_1 ve μ_2 her zaman reeldir. μ_1 ve μ_2 aynı zamanda $B_{\mu\nu}$ HERMİTsel matrisinin özdeğerleridir. Öte yandan, $\mu_1 = \mu_2$ olabilmesi için gerek ve yeter şart

$$B_{11} = B_{22}\,, \qquad B_{12} = 0$$

olmasıdır. Bu takdirde B operatörü için de soysuzlaşma vardır ve böylece, ψ_1 ve ψ_2, A ve B operatörlerinin ortak özfonksiyonlarıdır, yâni teorem ispatlanmış olur. Eğer $\mu_1 \neq \mu_2$ ise, (III.18.12) denklemlerinin birinden μ_1 ve μ_2 için iki ayrı çözüm takımı, yâni c_1/c_2 değeri elde edilir. c_1 ve c_2 nin çözülebilmesi için ikinci bir bağıntıya gerek vardır. (III.18.10) bağıntısına göre, ψ nın normu

$$(\psi , \psi) = | c_1 |^2 (\psi_1 , \psi_1) + | c_2 |^2 (\psi_2 , \psi_2) + $$
$$+ c_1^* c_2 (\psi_1 , \psi_2) + c_2^* c_1 (\psi_2 , \psi_1)$$

veyâ ψ_1 ve ψ_2 ortonormal olarak seçildiklerinden

$$(\psi, \psi) = | c_1 |^2 + | c_2 |^2$$

şeklindedir. Eğer ψ normlanmış ise, c_1 ve c_2 arasındaki ikinci bağıntı olarak

$$| c_1 |^2 + | c_2 |^2 = 1 \tag{III.18.15}$$

bulunur. Böylece (III.18.10) bağıntısı, her μ değeri için (III.18.9) denklemini gerçekleyen iki farklı ψ özfonksiyonunu verir ve bu özfonksiyonlar A operatörü için soysuzlaşmış olduğu hâlde B operatörü için soysuzlaşmamıştır. Böylece teoremin ispatı tamamlanmış oluyor. Fakat son olarak bu iki ortak özfonksiyonun dik olduğunu göstermek gerekir. Ortak özfonksiyonlar (III.18.10) bağıntısına bakarak

$$\mu = \mu_1 \text{ için}: \qquad \psi(1) = c_{11}\psi_1 + c_{12}\psi_2$$
$$\mu = \mu_2 \text{ için}: \qquad \psi(2) = c_{21}\psi_1 + c_{22}\psi_2$$

şeklinde yazılabilir. ψ_1 ve ψ_2 ortonormal olduklarından, ispatlanması gereken

$$(\psi(1), \psi(2)) = 0$$

şeklindeki diklik bağıntısı

$$c_{11}^* c_{21} + c_{12}^* c_{22} = 0 \tag{III.18.16}$$

şeklini alır. Ayrıca, (III.18.15) bağıntısına göre

$$| c_{11} |^2 + | c_{12} |^2 = 1, \qquad | c_{21} |^2 + | c_{22} |^2 = 1 \tag{III.18.15a}$$

normlama bağıntıları da yazılabilir. Öte yandan, μ ye göre ikinci dereceden denklemin diskriminantı için

$$\Delta = (B_{11} - B_{22})^2 + 4 | B_{12} |^2$$

yazılırsa (III.18.14) çözümleri

$$\mu_1 = \frac{1}{2} (B_{11} + B_{22} - \sqrt{\Delta}) \tag{III.18.4a}$$

$$\mu_2 = \frac{1}{2} (B_{11} + B_{22} + \sqrt{\Delta}) \tag{III.18.14b}$$

şekillerini alırlar. Çözümü istenen (III.18.12) denklemleri

$$\left.\begin{aligned} c_{11}(B_{11}-\mu_1)+c_{12}B_{12}=0 \\ c_{21}B_{21}+c_{22}(B_{22}-\mu_2)=0 \end{aligned}\right\} \quad \text{(III.18.12a)}$$

veyâ (III.18.14a) ve (III.18.14b) bağıntılarının yardımı ile

$$\left.\begin{aligned} c_{11}\frac{1}{2}(B_{11}-B_{22}+\sqrt{\Delta})+c_{12}B_{12}=0 \\ c_{21}B_{21}+c_{22}\frac{1}{2}(B_{22}-B_{11}-\sqrt{\Delta})=0 \end{aligned}\right\} \quad \text{(III.18.12b)}$$

şekillerinde yazılabilir. (III.18.12b) denklemlerinden birincisinin kompleks eşleniğini alarak

$$\left.\begin{aligned} c_{11}^*(B_{11}-B_{22}+\sqrt{\Delta})=-2c_{12}^*B_{21} \\ 2c_{21}B_{21}=c_{22}(B_{11}-B_{22}+\sqrt{\Delta}) \end{aligned}\right\} \quad \text{(III.18.12c)}$$

sonuçlarına varılır. (III.18.12c) denklemleri taraf tarafa çarpılırsa

$$c_{11}^*c_{21}=-c_{12}^*c_{22}$$

sonucuna varılır, yâni (III.18.16) diklik bağıntısı ispatlanmış olur.

Soysuzlaşma dereceleri ikiden fazla, fakat sonlu ise, teorem benzer metotlarla ispatlanabilir. N-katlı soysuzlaşmış bir kuvantum hâli için (III.18.13a) denklemi N inci dereceden olur ve N adet kökü vardır. Köklerin hepsi farklı ise, yukardakine tamamen benzer bir yol takip edilebilir. Fakat köklerin bir kısmı eşitse, ispat daha karmaşık bir hâl alır.

(III.19) BENZERLİK DÖNÜŞÜMÜ VE ÜNİTER DÖNÜŞÜM

Bir A operatörü, bir regüler S *dönüşüm operatörü* aracılığı ile ve

$$A' = S^{-1}AS \quad \text{(III.19.1)}$$

bağıntısı ile A' operatörüne dönüştürülebilir. (III.19.1) bağıntısına *benzerlik dönüşümü* adı verilir. S operatörü regüler olduğu için

$$S^{-1}S = SS^{-1} = I \quad \text{(III.19.2)}$$

bağıntısını gerçekler. Bu bağıntının yardımı ile (III.19.1) bağıntısından A operatörü

$$A = SA'S^{-1} \quad \text{(III.19.3)}$$

şeklinde çözülebilir. (III.19.3) bağıntısına *ters benzerlik dönüşümü* veyâ kısaca *ters dönüşüm* adı verilir. S dönüşüm operatörü regüler olmak şartiyle herhangi bir operatör olabilir.

Bir operatör denkleminin şekli benzerlik dönüşümü ile değişmez. Örneğin

$$C = AB - BA \qquad \text{(III.19.4)}$$

şeklindeki bir operatör denklemini benzerlik dönüşümü ile dönüştürelim :

$$S^{-1} C S = S^{-1} AB S - S^{-1} BA S$$

veyâ

$$S^{-1} C S = S^{-1} A S S^{-1} B S - S^{-1} B S S^{-1} A S$$

veyâ

$$C' = A' B' - B' A' \qquad \text{(III.19.5)}$$

sonucuna varılır. Yâni, $[A, B]$ komütatörünün dönüşmüşü $[A', B']$ komütatörüdür.

Kuvantum mekaniğinde HERMİTsel operatörler kullanılır. Fakat bir HERMİTsel operatörün benzerlik dönüşümü ile dönüştürülmüşü genel hâlde HERMİTsel değildir. Bu sebepten ötürü HERMİTselliği koruyan özel benzerlik dönüşümleri kullanılmalıdır. Bu maksatla

$$U^{+} = U^{-1} \qquad \text{(III.19.6)}$$

bağıntısı ile tanımlanan *üniter operatör*ler dönüşüm operatörü olarak seçilir. (III.19.6) bağıntısı

$$U^{-1}\, U = UU^{-1} = I$$

bağıntısında yerine yazılırsa U üniter operatörünün tanım bağıntısı

$$U^{+}\, U = UU^{+} = I \qquad \text{(III.19.7)}$$

şeklini alır. U operatörüne *üniter* veyâ *birimsel* adı (III.19.7) bağıntısından ötürü verilir. Üniter operatörün kullanılması ile elde edilen

$$A' = U^{+} AU \qquad \text{(III.19.8)}$$

şeklindeki benzerlik dönüşümüne *üniter dönüşüm* adı verilir. (III.19.8) bağıntısının her iki yanının HERMİTsel eşleniği alınırsa

$$A'^{+} = U^{+} A^{+} U \qquad \text{(III.19.9)}$$

bağıntısı elde edilir. Yâni, bir operatörün HERMİTsel eşleniğinin dönüştürülmüşü, dönüştürülmüş operatörün HERMİTsel eşleniğidir. Bunun sonucu olarak eğer $A^{+} = A$ ise (III.19.9) bağıntısından ve (III.19.8) bağıntısının kullanılması ile

$$A'^{+} = U^{+} AU = A'$$

elde edilir. Yâni, bir operatör HERMİTsel ise, bu operatörün dönüştürülmüşü de HERMİTseldir. İşte bu özellik, kuvantum mekaniği için gerekli bir özelliktir. Bir ψ dalga fonksiyonunun bir üniter dönüşümle dönüştürülmesi de

$$\psi' = U^{+} \psi \qquad \text{(III.19.10)}$$

bağıntısı ile tanımlanır Buna göre, bir A operatörünün

$$\Phi = A\,\psi \tag{III.19.11}$$

şeklindeki tanım bağıntısını bir üniter dönüşümle dönüştürelim. Bu maksatla (III.19.11) bağıntısının her iki yanını soldan U^+ ile çarpalım :

$$U^+ \Phi = U^+ A\,\psi$$

veyâ

$$U^+ \Phi = U^+ A U U^+ \psi$$

veyâ

$$\Phi' = A'\,\psi' \tag{III.19.12}$$

elde edilir. (III.19.11) ve (III.19.12) bağıntılarının şekilleri aynıdır.

Şimdi de bir A HERMİTsel operatörünün

$$A\,\psi_n = \lambda_n\,\psi_n \tag{IIIt19.13}$$

şeklindeki özdeğer denklemini bir üniter dönüşümle dönüştürelim. Bu maksatla (III.19.13) bağıntısının her iki yanını soldan U^+ ile çarpalım :

$$U^+ A\,\psi_n = \lambda_n\,U^+\,\psi_n$$

veyâ

$$U^+ A U U^+ \psi_n = \lambda_n\,U^+\,\psi_n$$

veyâ

$$A'\,\psi_n' = \lambda_n\,\psi_n' \tag{III.19.14}$$

elde edilir. (III.19.14) bağıntısı, dönüştürülmüş A' operatörünün özdeğer denklemidir. Görülüyor ki, bir operatörün özdeğeri üniter dönüşümle değişmez, yâni *invaryant*tır.

(III.20) PARİTE OPERATÖRÜ

Kartezyen koordinatlarda

$$x \to -x, \qquad y \to -y, \qquad z \to -z$$

dönüşümüne *parite dönüşümü* ve bu dönüşümü gerçekleştiren ve

$$\Pi\,\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z) \tag{III.20.1}$$

bağıntısı ile tanımlanan operatöre de *parite operatörü* adı verilir. Parite operatörü $\psi(x, y, z)$ fonksiyonuna arka arkaya iki kere uygulanırsa

$$\Pi^2\,\psi(x, y, z) = \Pi\,\psi(-x, -y, -z) = \psi(x, y, z) \tag{III.20.2}$$

elde edilir. O hâlde, Π^2 birim operatördür :

$$\Pi^2 = I \tag{III.20.3}$$

Küresel koordinatlarda (III.20.1) tanım bağıntısı

$$\Pi\,\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \pi - \theta, \pi + \varphi) \tag{III.20.4}$$

şeklini alır. Gerçekten, kartezyen koordinatlardan küresel koordinatlara geçişi gerçekleştiren

$$x = r \sin\theta \cos\varphi, \qquad y = r \sin\theta \sin\varphi, \quad z = r\cos\theta$$

şeklindeki dönüşüm bağıntılarına (III.20.4) işlemi uygulanırsa

$$r \sin(\pi - \theta) \cos(\pi + \varphi) = - x$$

$$r \sin(\pi - \theta) \sin(\pi + \varphi) = - y$$

$$r \cos(\pi - \theta) = - z$$

sonuçlarına varılır.

Şimdi parite operatörünün asosye LEGENDRE fonksiyonları üzerindeki etkisini inceleyelim (I.20.22) bağıntısı ile verilen RODRİGUES formülüne göre söz konusu fonksiyonlar

$$P_l^m(\xi) = \frac{(1 - \xi^2)^{m/2}}{2^l\, l!}\, \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} (\xi^2 - 1)^l \tag{III 20.5}$$

şeklindedir. Burada $\xi = \cos\theta$ olduğu için

$$\cos(\pi - \theta) = - \xi$$

elde edilir. O hâlde,

$$\Pi\, P_l^m(\xi) = P_l^m(-\xi)$$

olmalıdır. Öte yandan,

$$(-\xi)^2 = \xi^2, \qquad [d(-\xi)]^{l+m} = (-1)^{l+m}\, d\xi^{l+m}$$

olduğundan, $\xi = \cos\theta$ olmak üzere

$$\Pi\, P_l^m(\xi) = P_l^m(-\xi) = (-1)^{l+m}\, P_l^m(\xi) \tag{III.20.6}$$

sonucuna varılır. Şimdi de parite operatörünün küresel harmonik üzerindeki etkisini inceleyelim. Küresel harmonik (I.21.2) bağıntısına göre

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm}\, P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \tag{III.20.7}$$

şeklindedir. O hâlde

$$\Pi\, Y_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi)$$

yazılabilir. (III.20.6) bağıntısına göre

$$P_l^m[\cos(\pi - \theta)] = P_l^m(-\xi) = (-1)^{l+m}\, P_l^m(\cos\theta)$$

bulunur. Öte yandan

$$e^{im\pi} = \cos m\pi + i \sin m\pi = (-1)^m, \qquad e^{im(\pi+\varphi)} = (-1)^m\, e^{im\varphi}$$

olduğundan

$$\Pi\, Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm}(-1)^{l+m}\, P_l^m(\cos\theta)\, (-1)^m\, e^{im\varphi}$$

veyâ

$$\Pi\, Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l\, N_{lm}\, P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$$

veyâ

$$\Pi\, Y_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\pi - \theta, + \varphi) = (-1)^l\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \qquad \text{(III.20.8)}$$

sonucuna varılır.

Kartezyen koordinatlarda parite operatörünün özdeğer denklemi

$$\Pi\, \psi(x, y, z) = K\, \psi(x, y, z) \qquad \text{(III.20.9)}$$

şeklindedir. (III.20.9) bağıntısından (III.16.6) bağıntısına benzer şekilde

$$\Pi^2\, \psi(x, y, z) = K^2\, \psi(x, y, z) \qquad \text{(III.20.10)}$$

bulunur. (III.20.10) bağıntısı (III.20.2) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$K^2 = 1, \qquad K = \pm 1 \qquad \text{(III.20.11)}$$

sonucuna varılır. Eğer (III.20.9) bağıntısında $K = \pm 1$ yazarsak ve (III.20.1) tanım bağıntısı ile karşılaştırırsak

$$\psi(-x, -y, -z) = \pm\, \psi(x, y, z) \qquad \text{(III.20.12)}$$

sonucuna varılır. (III.20.12) bağıntısı $\psi(x, y, z)$ dalga fonksiyonunun (+) işareti için *çift fonksiyon* ve (—) işareti için de *tek fonksiyon* olduğunu gösterir. Çift fonksiyonların *paritesi çifttir* veyâ çift fonksiyonlar *çift pariteye sâhiptir* denir. Benzer şekilde, tek fonksiyonların *paritesi tektir* veyâ tek fonksiyonlar *tek pariteye sâhiptir* denir. Genel hâlde, bir $\psi(x, y, z)$ fonksiyonu ne tektir, ne de çifttir ve böyle fonksiyonların *paritesi yoktur* denir. Eğer bir $\psi(x, y, z)$ fonksiyonu parite operatörünün bir özfonksiyonu ise (III.20.12) bağıntılarından birini sağlar ve böylece çift veyâ tek pariteye sâhip olur.

Küresel koordinatlarda parite operatörünün özdeğer denklemi

$$\Pi\, \psi(r, \theta, \varphi) = K\, \psi(r, \theta, \varphi) \qquad \text{(III.20.13)}$$

şeklindedir. Eğer $\psi(r, \theta, \varphi)$ dalga fonksiyonu $V(r)$ küresel simetrik potansiyeli için SCHRÖDİNGER denkleminin çözümü ise

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \qquad \text{(III.20.14)}$$

şeklinde yazılabilir. (III.20.4) bağıntısına göre,

$$\Pi\, \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi) \qquad \text{(III.20.15)}$$

elde edilir. (III.20.8) bağıntısı (III.20.15) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\Pi\, \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\, (-1)^l\, Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

veyâ

$$\Pi\,\psi(r,\theta,\varphi) = (-1)^l\,\psi(r,\theta,\varphi) \tag{III.20.15a}$$

sonucuna varılır. Bu sonuç (III.20.13) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$K = (-1)^l\,, \qquad l = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{III.20.16}$$

bulunur. O hâlde, SCHRÖDİNGER denkleminin $V(r)$ küresel simetrik potansiyeli için çözümleri pariteye sâhip fonksiyonlardır ve l kuvantum sayısının çift değerleri için çift pariteye, tek değerleri için de tek pariteye sâhiptirler.

Genel hâlde, $V(x, y, z)$ veyâ $V(r, \theta, \varphi)$ potansiyel enerji fonksiyonu bir çift fonksiyonsa, yâni

$$\Pi\, V(x,y,z) = V(-x,-y,-z) = V(x,y,z) \tag{III.20.17}$$

ise, zamandan bağımsız SCHRÖDİNGER denkleminin çözümü olan $\psi(x, y, z)$ dalga fonksiyonlarının partiye sâhip olduklarını göstereceğiz. Zamandan bağımsız SCHRÖDİNGER denklemi

$$H\psi_n = E_n\,\psi_n \tag{III.20.18}$$

şeklindedir. Öte yandan, HAMİLTON eporatörü

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z) \tag{III.20.19}$$

şeklinde ve LAPLACE operatörünün kartezyen koordinatlardaki ifâdesi de

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{III.20.20}$$

şeklindedir. (III.20.20) bağıntısından

$$\Pi\,\nabla^2 = \nabla^2 \tag{III.20.21}$$

bağıntısının her zaman gerçeklendiği sonucu çıkar. (III.20.19) bağıntısına önce parite dönüşümü uygulanır ve sonra da (III.20.17) ve (III.20.21) bağıntıları yerlerine yazılırsa

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

veyâ

$$\Pi\,H = H \tag{III.20.22}$$

sonucuna varılır. (III.20.18) denklemine parite dönüşümü uygulanırsa

$$(\Pi H)(\Pi\,\psi_n) = E_n\,\Pi\,\psi_n$$

denklemi elde edilir. (III.20.17) şartına bağlı olan (III.20.22) şartının yardımı ile bu son denklem

$$H\,\Pi\,\psi_n = E_n\,\Pi\,\psi_n \qquad \text{(III.20.23)}$$

şeklini alır. Öte yandan, gene (III.20.22) şartını kullanarak

$$\Pi\,(H\,\psi_n) \equiv (\Pi\,H)\,(\Pi\,\psi_n) = H\,\Pi\,\psi_n$$

bulunur ve böylece

$$(\Pi\,H - H\,\Pi)\,\psi_n = 0 \qquad \text{(III.20.24a)}$$

veyâ

$$\Pi\,H = H\,\Pi \qquad \text{(III.20.24b)}$$

sonucuna varılır. (III.20.24b) bağıntısına göre parite operatörü HAMİLTON operatörü ile komütatiftir ve paragraf (III.18) deki teoreme göre bu iki operatör ortak özfonksiyonlara sâhiptir. O hâlde,

$$\Pi\,\psi_n = \pm\,\psi_n \qquad \text{(III.20.25)}$$

yazılabilir ve bu bağıntının yardımı ile (III.20.23) denklemi (III.20.18) denklemine dönüşür. Böylece, (III.20.18) denklemi parite dönüşümüne göre invaryanttır ve bu denklemin ψ_n çözümleri pariteye sâhip fonksiyonlardır.

(III.21) BİR DALGA FONKSİYONUNUN TABAN VEKTÖRLERİ CİNSİNDEN AÇILIMI

Herhangi bir $\psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonu, bir HERMİTsel A operatörünün normlanmış özfonksiyonları veyâ özvektörleri cinsinden

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k c_k\,\psi_k(\mathbf{r}) \qquad \text{(III.21.1)}$$

şeklinde bir fonksiyon serisine açılabilir. Bu fonksiyon serisinin yakınsaklık şartlarının gerçeklendiğini varsayıyoruz. A operatörü HERMİTsel olduğundan $\psi_k(\mathbf{r})$ özvektörleri ortonomaldir, yâni

$$(\psi_n\,,\,\psi_k) = \int \psi_n^*(\mathbf{r})\,\psi_k(\mathbf{r})\,d\tau = \delta_{nk} \qquad \text{(III.21.2)}$$

bağıntılarını sağlarlar. Genel hâlde sayılabilir sonsuz sayıda olan $\psi_k(\mathbf{r})$ vektörleri âşikâr olarak lineer bağımsızdır ve bu sebepten ötürü sonsuz boyutlu bir vektör uzayı olan HİLBERT uzayının *taban vektörleri* olarak seçilebilir. Böylece herhangi bir $\psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonu bu uzayın bir vektörü olarak düşünülebilir ve söz konusu taban vektörlerinin bir lineer toplamı olarak (III.21.1) açılımı ile ifâde edilebilir. c_k *açılım katsayıları*, $\psi(\mathbf{r})$ vektörünün $\psi_k(\mathbf{r})$ taban vektörlerinin doğrultulardaki *bileşenleri*dir. Gerçekten, ψ vektörünün ψ_n taban vektörünün doğrultusundaki bileşeni, (III.21.1) ve (III.21.2) bağıntılarına göre,

$$(\psi_n , \psi) = \sum_k c_k (\psi_n , \psi_k) = \sum_k c_k \delta_{nk} \equiv c_n \tag{III.21.3}$$

olarak bulunur.

ψ vektörünün *normu* veyâ *uzunluğunun karesi* (veyâ *büyüklüğünün karesi*), (III.21.1) ve (III.21.2) bağıntılarına göre

$$(\psi, \psi) = \Big(\sum_n c_n \psi_n , \sum_k c_k \psi_k \Big) = \sum_n \sum_k c_n^* c_k (\psi_n , \psi_k) = \sum_n \sum_k c_n^* c_k \delta_{nk}$$

veyâ

$$(\psi , \psi) = \sum_k c_k^* c_k \tag{III.21.4a}$$

veyâ

$$\int | \psi |^2 d\tau = \sum_k | c_k |^2 \tag{III.21.4b}$$

şekillerinde bulunur. Eğer ψ vektörü normlanmış ise, yâni $(\psi, \psi) = 1$ ise,

$$\sum_k | c_k |^2 = 1 \tag{III.21.5}$$

elde edilir.

Çok sayıda $\psi(\mathbf{r})$ fonksiyonu (III.21.1) şeklinde $\psi_k(\mathbf{r})$ fonksiyonları cinsinden açılabilir. Bu şekildeki açılımları mümkün kılan bütün $\psi(\mathbf{r})$ fonksiyonları için $\psi_k(\mathbf{r})$ fonksiyonlarının bir *tam takım* oluşturdukları söylenir. Şüphesiz (III.21.1) açılımının yakınsak olduğu her $\psi(\mathbf{r})$ fonksiyonu için $\{\psi_k(\mathbf{r})\}$ takımı tamdır. Bu takdirde, (III 21.4a) bağıntısına $\{\psi_k\}$ takımı için *tamlık bağıntısı* adı verilir.

(III.22) *A* OPERATÖRÜNÜN KENDİ ÖZFONKSİYONLARINA AÇILMIŞ BİR FONKSİYON CİNSİNDEN $f(A)$ NIN BEKLENEN DEĞERİ

Eğer bir keyfî ψ fonksiyonu bir A HERMİTsel operatörünün

$$A \psi_k = \lambda_k \psi_k \tag{III.22.1}$$

şeklindeki özdeğer denklemi ile tanımlanan ortonormal ψ_k özvektörleri cinsinden

$$\psi = \sum_k c_k \psi_k \tag{III.22.2}$$

şeklinde seriye açılmış ise, $A\psi$ fonksiyonu da ψ_k özvektörleri cinsinden seriye açılabilir. Gerçekten, (III.22.2) bağıntısının her iki yanı soldan A operatörü ile çarpılırsa (III.22.1) denkleminin yardımı ile

$$A\psi = \sum_k c_k\, A\, \psi_k = \sum_k \lambda_k\, c_k\, \psi_k \qquad \text{(III.22.3)}$$

elde edilir. Paragraf (III.16) da görüldüğü gibi (III.22.1) bağıntısından hemen

$$A^n\, \psi_k = \lambda_k^n\, \psi_k$$

yazılabilir ve yukardakine benzer işlemlerle

$$A^n\, \psi = \sum_k \lambda_k^n\, c_k\, \psi_k \qquad \text{(III.22.4)}$$

bulunur. (III.4.2) bağıntısı ile tanımlanan

$$f(A) = \sum_n a_n\, A^n \qquad \text{(III.22.5)}$$

şeklindeki bir fonksiyon operatörü için

$$f(A)\, \psi_k = \sum_n a_n\, A^n\, \psi_k = \sum_n a_n\, \lambda_k^n\, \psi_k \equiv \psi_k \sum_n a_n\, \lambda_k^n$$

veyâ

$$f(\lambda_k) = \sum_n a_n\, \lambda_k^n$$

olduğu için

$$f(A)\, \psi_k = f(\lambda_k)\, \psi_k \qquad \text{(III.22.6)}$$

elde edilir. (III.22.6) bağıntısının yardımı ile $f(A)\,\psi$ fonksiyonu da ψ_k özvektörleri cinsinden seriye açılabilir. Gene (III.22.2) bağıntısından

$$f(A)\, \psi = \sum_k c_k\, f(A)\, \psi_k = \sum_k c_k\, f(\lambda_k)\, \psi_k$$

veyâ

$$f(A)\, \psi = \sum_k f(\lambda_k)\, c_k\, \psi_k \qquad \text{(III.22.7)}$$

sonucuna varılır.

$f(A)$ fonksiyon operatörünün beklenen değerini ψ cinsinden hesaplayalım. (III.22.7) bağıntısını kullanarak

$$\begin{aligned} \langle f(A)\rangle &= (\psi, f(A)\, \psi) \\ &= \Big(\sum_n c_n\, \psi_n\, , \sum_k f(\lambda_k)\, c_k\, \psi_k \Big) \\ &= \sum_n \sum_k c_n^*\, c_k\, f(\lambda_k)\, (\psi_n\, , \psi_k) \\ &= \sum_k \sum_n c_n^*\, c_k\, f(\lambda_k)\, \delta_{nk} \end{aligned}$$

veyâ

$$\langle f(A)\rangle = \sum_k | c_k |^2 f(\lambda_k) \qquad \text{(III.22.8)}$$

sonucuna varılır. Ayrıca, (III.21.5) bağıntısına göre

$$\sum_k | c_k |^2 = 1 \qquad \text{(III.22.9)}$$

olduğunu biliyoruz.

Şimdi A dinamik değişkeninin arka arkaya ölçüldüğünü varsayalım. Belirli bir ölçme işleminin sonucunda A dinamik değişkeninin sayısal değerinin λ_k olmasının ihtimâli $P(\lambda_k)$ olsun. Öte yandan, A dinamik değişkeninin her λ_k değeri için $f(A)$ dinamik değişkeni $f(\lambda_k)$ değerini alır. O hâlde, $f(A)$ dinamik değişkeninin beklenen değeri

$$\langle f(A)\rangle = \sum_k P(\lambda_k)\, f(\lambda_k) \qquad \text{(III.22.10)}$$

şeklinde olur. Şüphesiz burada

$$\sum_k P(\lambda_k) = 1 \qquad \text{(III.22.11)}$$

bağıntısı gerçeklenmelidir. f fonksiyonu keyfî olduğundan, (III.22.10) bağıntısının (III.22.8) bağıntısı ile özdeş olması için

$$P(\lambda_k) = | c_k |^2 \qquad \text{(III.22.12)}$$

bağıntısı gerçeklenmelidir. Öte yandan, (III.22.12) bağıntısı (III.22.9) bağıntısında yerine yazılırsa (III.22.11) bağıntısı kendiliğinden gerçeklenir. Görülüyor ki, A dinamik değişkeninin ölçülmesi sonucunda λ_k değerinin bulunması ihtimâli, ψ fonksiyonunun A operatörünün özfonksiyonları cinsinden açılımında, λ_k özdeğerine ait ψ_k özfonksiyonunun c_k açılım katsayısının modülünün karesine eşittir.

(III.23) DİRAC IN DELTA FONKSİYONU

Bilindiği gibi, KRONECKER deltası adı verilen δ_{mn} sembolü (simgesi), m ve n, pozitif veyâ negatif tamsayılar veyâ sıfır olmak üzere,

$$\left.\begin{aligned} m = n \text{ için}: \quad & \delta_{nn} = 1 \\ m \neq n \text{ için}: \quad & \delta_{mn} = 0 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(III.23.1)}$$

bağıntıları ile tanımlanır. (III.23.1) tanımına göre, δ_{mn} sembolü aşağıdaki özelliklere sâhiptir :

$$\delta_{mn} = \delta_{nm} \tag{III.23.2a}$$

$$\delta_{m\pm k, n\pm k} = \delta_{mn} \tag{III.23.2b}$$

$$f_m\, \delta_{mn} = f_n\, \delta_{mn} \tag{III.23.2c}$$

(III.23.2c) bağıntısında f_n, n indisine bağlı herhangi bir büyüklüktür, örneğin ψ_n gibi dalga fonksiyonları dizisidir.

δ_{mn} sembolündeki ancak tamsayı veyâ buçuklu tamsayı değerleri alabilen m ve n indisleri yerine sürekli değişen x ve y reel değişkenleri gelirse, elde edilen $\delta(x, y)$ fonksiyonuna *DİRAC delta fonksiyonu* adı verilir. Bu fonksiyon (III.23.2) bağıntılarına benzer şekilde

$$\delta(y, x) = \delta(x, y)$$

$$\delta(x \pm z, y \pm z) = \delta(x, y)$$

$$f(x)\, \delta(x, y) = f(y)\, \delta(x, y)$$

bağıntılarını sağlamalıdır. Fakat δ fonksiyonu x ve y değişkenlerinin ayrı ayrı iki değişkenli bir fonksiyonu olmayıp $x - y$ farkının tek değişkenli bir fonksiyonudur. Yâni

$$\delta(x, y) \equiv \delta(x - y)$$

dir. Böylece, yukardaki bağıntılardan ikincisi özdeş olarak sağlanır. Birinci ve üçüncü bağıntılar da

$$\delta(y - x) = \delta(x - y) \tag{III.23.3a}$$

$$f(x)\, \delta(x - y) = f(y)\, \delta(x - y) \tag{III.23.3b}$$

şekillerinde yazılabilirler. $y = 0$ için (III.23.3a) ve (III.23.3b) bağıntıları

$$\delta(-x) = \delta(x) \tag{III.23.4a}$$

$$f(x)\, \delta(x) = f(0)\, \delta(x) \tag{III.23.4b}$$

şekillerini alırlar.

DİRAC ın delta fonksiyonu, yâni $\delta(x)$

$$x \neq 0 \text{ için :} \quad \delta(x) = 0, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\, dx = 1 \tag{III.23.5}$$

bağıntıları ile tanımlanır. (III.23.5) tanımına eşdeğer bir tanım, $f(x)$ fonksiyonu $x = 0$ noktasında sürekli olan bir keyfî fonksiyon olmak üzere,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \delta(x)\, dx = f(0) \tag{III.23.6}$$

bağıntısı ile yapılır. (III.23.5) veyâ (III.23.6) tanımı $\delta(x)$ fonksiyonunun $x = 0$ noktasında singüler (tekil) olduğunu göstermektedir. $\delta(x)$ fonksiyonu $x = 0$ dan başka her yerde sıfır olduğu için $x = 0$ noktasında o kadar büyük olmalıdır ki, kendisi ile x ekseni arasındaki alan bire eşit olabilsin. Bu sebepten ötürü $\delta(x)$ fonksiyonu, çeşitli şekillerde bir analitik fonksiyonlar dizisinin limiti olarak tanımlanabilir. Böylece

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} D(x, \varepsilon), \qquad \varepsilon > 0 \tag{III.23.7}$$

yazılabilir. Buradaki $D(x, \varepsilon)$ fonksiyonu,

$$D(-x, \varepsilon) = D(x, \varepsilon) \tag{III.23.8a}$$

$$x \neq 0 \text{ için : } \lim_{\varepsilon \to 0} D(x, \varepsilon) = 0 \tag{III.23.8b}$$

$$\lim_{x \to \pm\infty} D(x, \varepsilon) = 0 \tag{III.23.8c}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} D(x, \varepsilon)\, dx = 1 \tag{III.23.8d}$$

ve C bir pozitif sâbit olmak üzere

$$D(0, \varepsilon) = C/\varepsilon, \qquad C > 0 \tag{III.23.8e}$$

bağıntılarını gerçeklemelidir. Şimdi bu bağıntıları gerçekleyen üç ayrı özel $D(x, \varepsilon)$ fonksiyonunu inceleyeceğiz.

i) İlk olarak, (III.23.8a), (III.23.8b) ve (III.23.8c) bağıntılarını gerçekleyen

$$D(x, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}, \qquad \varepsilon > 0 \tag{III.23.9}$$

fonksiyonunu inceleyelim. $y = x/\varepsilon$ değişken dönüşümü ile

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + \varepsilon^2} = \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{1 + y^2} = \frac{1}{\varepsilon} \Big[\operatorname{arc} tg\, y\Big]_{-\infty}^{\infty}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon}\left[\frac{\pi}{2} - \left(-\frac{\pi}{2}\right)\right] = \frac{\pi}{\varepsilon}$$

bulunur ve bölece (III.23.8d) bağıntısının gerçeklendiğini gösteren

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon\, dx}{x^2 + \varepsilon^2} = 1$$

sonucuna varılır. (III.23.9) bağıntısından da

$$D(0, \varepsilon) = \frac{1}{\pi \varepsilon}, \qquad C = \frac{1}{\pi}$$

bulunur ve böylece (III.23.8e) bağıntısı da gerçeklenmiş olur.

ii) İkinci olarak, (III.23.8a), (III.23.8b) ve (III.23.8c) bağıntılarını gerçekleyen

$$D(x, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon \sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\varepsilon^2}}, \qquad \varepsilon > 0 \qquad \text{(III.23.10)}$$

fonksiyonunu inceleyelim.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\varepsilon^2}} dx = \sqrt{\pi}\, \varepsilon$$

olduğu için (III.23.8d) bağıntısının gerçeklendiğini gösteren

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon \sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\varepsilon^2}} dx = 1$$

sonucuna varılır. (III.23.10) bağıntısından da

$$D(0, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon \sqrt{\pi}}, \qquad C = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$

bulunur ve böylece (III.23.8e) bağıntısı da gerçeklenmiş olur.

iii) Üçüncü olarak,

$$D(x, \varepsilon) = \frac{\sin 2\pi \dfrac{x}{\varepsilon}}{\pi x}, \qquad \varepsilon > 0 \qquad \text{(III.23.11)}$$

fonksiyonunu inceleyelim. Bu fonksiyon (III.23.8a) ve (III.23.8c) bağıntılarını gerçekler, fakat (III.23.8b) bağıntısını gerçeklemez, çünkü

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \sin 2\pi \frac{x}{\varepsilon}$$

limiti mevcut değildir. Bunun da nedeni, $\sin\infty$ un, -1 ile 1 arasında belirsiz bir değere sâhip olmasıdır. Buna karşılık, $D(x, \varepsilon)$, $|x|$ artıkça genliği azalan bir peryodik fonksiyondur ve peryodu ε cinsinden hesaplanabilir. Gerçekten λ peryodu,

$$\sin 2\pi \frac{x + \lambda}{\varepsilon} \equiv \sin\left(2\pi \frac{x}{\varepsilon} + 2\pi\right)$$

özdeşliği ile tanımlanabilir ve $\lambda = \varepsilon$ sonucuna varılır. Böylece, ε peryodu limitte sıfıra yaklaşmaktadır.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin 2\pi \dfrac{x}{\varepsilon}}{x}\, dx = \pi$$

olduğu için (III.23.8d) bağıntısının gerçeklendiğini gösteren

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin 2\pi \dfrac{x}{\varepsilon}}{\pi x}\, dx = 1$$

sonucuna varılır. (III.23.11) bağıntısından da

$$D(0, \varepsilon) = 2/\varepsilon, \qquad C = 2$$

bulunur ve böylece (III.23.8e) bağıntısı da gerçeklenmiş olur.

(III.23.11) bağıntısında

$$K = 2\pi/\varepsilon$$

yazılırsa

$$D(x, K) = \frac{\sin Kx}{\pi x}, \qquad K > 0 \tag{III.23.12}$$

elde edilir. Böylece (III.23.7) tanım bağıntısı

$$\delta(x) = \lim_{K \to \infty} \frac{\sin Kx}{\pi x}, \qquad K > 0 \tag{III.23.13}$$

şeklini alır.

(III.23.5) tanım bağıntısının yardımı ile

$$\delta(-x) = \delta(x) \tag{III.23.14}$$

$$x\,\delta(x) = 0 \tag{III.23.15}$$

$$\delta(ax) = a^{-1}\,\delta(x), \qquad a > 0 \tag{III.23.16}$$

$$\delta(x^2 - a^2) = (2a)^{-1}\,[\delta(x-a) + \delta(x+a)], \qquad a > 0 \tag{III.23.17}$$

$$\int \delta(a-x)\,\delta(x-b)\,dx = \delta(a-b) \tag{III.23.18}$$

$$f(x)\,\delta(x-a) = f(a)\,\delta(x-a) \tag{III.23.19}$$

bağıntıları ispatlanabilir. (III.23.14) bağıntısı (III.23.4a) bağıntısının aynıdır. (III.23.19) bağıntısında $a = y$ yazılırsa (III.23.3b) bağıntısı ve $a = 0$ yazılırsa (III.23.4b) bağıntısı elde edilir. (III.23.19) bağıntısının her iki yanı $(-\infty, \infty)$ aralığında integre edilirse

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x-a)\,dx = f(a)\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)\,dx$$

bulunur. Eğer sağ yandaki integralde $y = x - a$ değişken dönüşümü yapılırsa (III.23.5) tanım bağıntısının yardımı ile

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(y)\,dy = 1$$

elde edilir ve böylece

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x-a)\,dx = f(a) \qquad \text{(III.23.20)}$$

sonucuna varılır. (III.23.20) bağıntısı $a = 0$ için (III.23.6) bağıntısına indirgenir. Eğer $\mathbf{r}$ ve $\mathbf{q}$ vektörleri kartezyen koordinatlarda

$$\mathbf{r} = x\,\mathbf{e}_x + y\,\mathbf{e}_y + z\,\mathbf{e}_z$$

$$\mathbf{q} = a\,\mathbf{e}_x + b\,\mathbf{e}_y + c\,\mathbf{e}_z$$

bağıntıları ile tanımlanırsa, bu bağıntıları taraf tarafa çıkararak

$$\mathbf{r} - \mathbf{q} = (x-a)\,\mathbf{e}_x + (y-b)\,\mathbf{e}_y + (z-c)\,\mathbf{e}_z$$

elde edilir. Bu son bağıntıya göre *genelleştirilmiş DİRAC delta fonksiyonu*

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{q}) \equiv \delta(x-a)\,\delta(y-b)\,\delta(z-c) \qquad \text{(III.23.21)}$$

bağıntısı ile tanımlanır. (III.23.20) bağıntısının üç boyutlu uzay için genelleştirilmiş şekli olarak

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x,y,z)\,\delta(x-a)\,\delta(y-b)\,\delta(z-c)\,dx\,dy\,dz = f(a,b,c)$$

yazılabilir. Bu bağıntı, (III.23.21) bağıntısının yardımı ile ve vektör notasyonu ile

$$\int f(\mathbf{r})\,\delta\,(\mathbf{r}-\mathbf{q})\,d\tau = f(\mathbf{q}) \qquad \text{(III.23.22)}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $d\tau$, $\mathbf{r}$ noktası civarındaki hacım elemanını göstermektedir.

*(III.24) SÜREKLİ ÖZDEĞERLERE ÖRNEK : MOMENTUM OPERATÖ*RÜNÜN ÖZDEĞERLERİ

Momentum vektör operatörüne ait özdeğer denklemi

$$\mathbf{p}\,\psi = \lambda\,\psi$$

veyâ

$$\mathbf{p}\,\psi = \hbar\,\mathbf{k}\,\psi \tag{III.24.1}$$

şeklindedir. Öte yandan, $\mathbf{p} = -\,i\hbar\,\nabla$ olduğu için bu denklem

$$\nabla\,\psi = i\,\mathbf{k}\,\psi \tag{III.24.2}$$

şeklini alır. Kartezyen koordinatlarda (III.24.2) vektörel denklemi

$$\frac{1}{\psi}\,\frac{\partial\psi}{\partial x} = i\,k_x\,, \quad \frac{1}{\psi}\,\frac{\partial\psi}{\partial y} = i\,k_y\,, \quad \frac{1}{\psi}\,\frac{\partial\psi}{\partial z} = i\,k_z \tag{III.24.3}$$

şeklindeki üç skaler denkleme dönüşür. (III.24.3) kısmî türevli denklemlerinin

$$\ln\psi\,(x, y, z) = \ln N + i\,(k_x\,x + k_y\,y + k_z\,z) \tag{III.24.4}$$

şeklinde ortak bir integrali vardır. Bu integral vektörler cinsinden

$$\ln\psi\,(\mathbf{r}) = \ln N + i\,\mathbf{k}\,.\,\mathbf{r} \tag{III.24.5}$$

şeklinde ifade edilebilir ve böylece

$$\psi_{\mathbf{k}}\,(\mathbf{r}) = N\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} \tag{III.24.6}$$

sonucuna varılır. $\psi_{\mathbf{k}}\,(\mathbf{r})$ fonksiyonu, momentum operatörünün $\mathbf{k}$ sürekli özdeğerine ait özfonksiyonudur. Bu özfonksiyon aynı zamanda serbest parçacığa aittir ve zamandan bağımsız DE BROGLİE dalga fonksiyonudur. (III.24.6) bağıntısında N normlama sâbittidir.

Şimdi $\mathbf{k}_1$ ve $\mathbf{k}_2$ özdeğerlerine ait iki özfonksiyonun

$$(\psi_{\mathbf{k}_1}\,, \psi_{\mathbf{k}_2}) = \int \psi^*_{\mathbf{k}_1}\,\psi_{\mathbf{k}_2}\,d\tau = N^2 \int \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1).\mathbf{r}}\,d\tau \tag{III.24.7}$$

şeklindeki skaler çarpımını inceleyelim. Kartezyen koordinatlarda

$$\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 = a\,\mathbf{e}_x + b\,\mathbf{e}_y + c\,\mathbf{e}_z$$

ve

$$\mathbf{r} = x\,\mathbf{e}_x + y\,\mathbf{e}_y + z\,\mathbf{e}_z\,, \qquad d\tau = dx\,dy\,dz$$

yazılacak olursa

$$(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\,.\,\mathbf{r} = ax + by + cz \tag{III.24.8}$$

bulunur. Bu sonuç (III.24.7) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(\psi_{\mathbf{k}_1}\,, \psi_{\mathbf{k}_2}) = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{iax}\,dx \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{iby}\,dy \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{icz}\,dz \tag{III.24.9}$$

elde edilir. (III.24.9) bağıntısının sağ yanındaki integraller $\sin(\infty)$ tipinde belirsizdir, fakat DİRAC delta fonksiyonu cinsinden ifâde edilebilirler. Bunu göstermek için, söz konusu integrallerden birini, belirsizliği kaldırmak üzere

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iax}\, dx = \lim_{K\to\infty} \int_{-K}^{K} e^{iax}\, dx, \qquad K > 0 \tag{III.24.10}$$

şeklinde yazalım. Böylece, sağ yandaki integralin sonucu

$$\int_{-K}^{K} e^{iax}\, dx = \frac{1}{i\,a}\left(e^{iaK} - e^{-iaK}\right) \equiv \frac{2}{a} \sin K a \tag{III.24.11}$$

olarak bulunur. (III.24.11) bağıntısı (III.24.10) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iax}\, dx = 2\pi \lim_{K\to\infty} \frac{\sin K a}{\pi\, a}, \qquad K > 0 \tag{III.24.12}$$

elde edilir. Öte yandan, (III.23.13) bağıntısına göre $\delta(a)$ fonksiyonunun tanımı

$$\delta(a) = \lim_{K\to\infty} \frac{\sin K a}{\pi\, a}, \qquad K > 0 \tag{III.24.13}$$

şeklinde olduğundan

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iax}\, dx = 2\pi\, \delta(a) \tag{III.24.14}$$

sonucuna varılır. Benzer işlemlerle (III.24.9) bağıntısından

$$(\psi_{\mathbf{k}_1}, \psi_{\mathbf{k}_2}) = N^2 (2\pi)^3\, \delta(a)\, \delta(b)\, \delta(c) \tag{III.24.15}$$

elde edilir. Öte yandan (III.23.21) tanım bağıntısına göre, genelleştirilmiş DİRAC delta fonksiyonu

$$\delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) = \delta(a)\, \delta(b)\, \delta(c)$$

şeklinde olduğundan, (III.24.15) bağıntısı

$$(\psi_{\mathbf{k}_1}, \psi_{\mathbf{k}_2}) = N^2 (2\pi)^3\, \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \tag{III.24.15a}$$

şeklini alır. (III.24.15a) bağıntısı *sürekli özdeğerlere* ait özfonksiyonların *diklik bağıntısıdır.* Bu bağıntıda özdeğerlerin sürekliliğinden ötürü, KRONECKER delta sembolü yerine DİRAC delta fonksiyonu gelmiştir. Eğer özfonksiyonlar normlanmış ise

$$(\psi_{\mathbf{k}_1}, \psi_{\mathbf{k}_2}) = \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \tag{III.24.16}$$

şeklindeki *ortonormallik bağıntısı* elde edilir. Bu bağıntının (III.24.15a) bağıntısı ile karşılaştırılmasından

$$N^2 (2\pi)^3 = 1$$

bulunur. Böylece N normlama sâbitini değeri

$$N = (2\pi)^{-3/2} \equiv (8\pi^3)^{-1/2}$$

olarak bulunur ve (III.24.6) bağıntısı da

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi^3}} e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} \qquad \text{(III.24.17)}$$

şeklini alır. Bu son bağıntı, momentum operatörünün normlanmış özfonksiyonunun ifâdesidir.

(III.24.7) bağıntısında normlama sâbitinin değeri yerine yazılırsa (III.24.16) bağıntısının yardımı ile

$$\frac{1}{8\pi^3} \int e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1).\mathbf{r}} \, d\tau = \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \qquad \text{(III.24.18)}$$

elde edilir. $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$ için bu bağıntının sol yanındaki normlama integrali paragraf (I.5) te görüldüğü gibi ıraksar. Öte yandan, bağıntının sağ yanındaki delta fonksiyonu da $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$ için sonsuz büyük olur.

(III.25) SÜREKLİ ÖZDEĞERLER İÇİN ORTONORMALLİK BAĞINTISI VE KAPANIŞ BAĞINTISI

Sayılabilir sonsuz, yâni kesikli k özdeğerlerine ait özfonksiyonların ortonormallik bağıntısının

$$(\psi_k, \psi_{k'}) = \int \psi_k^*(\mathbf{r})\, \psi_{k'}(\mathbf{r})\, d\tau = \delta_{kk'}$$

şeklinde olduğunu gördük. ((III.17.11) bağıntısına bakınız.)

Sayılamayan sonsuz, yâni sürekli k özdeğerlerine ait özfonksiyonların ortonormallik bağıntısı da

$$(\psi_k, \psi_{k'}) = \int \psi_k^*(\mathbf{r})\, \psi_{k'}(\mathbf{r})\, d\tau = \delta(k - k') \qquad \text{(III.25.1)}$$

şeklindedir. Gerçekten, momentum operatörünün özfonksiyonları için ortonormallik bağıntısı, bir önceki paragrafta (III.25.1) bağıntısına benzer şekilde (III.24.16) bağıntısı ile verilmişti.

Şimdi $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ fonksiyonunu ortonormal $\{\psi_n(\mathbf{r})\}$ takımı cinsinden

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_n c_n(\mathbf{r}')\, \psi_n(\mathbf{r}) \qquad \text{(III.25.2)}$$

şeklinde açalım. Bu bağıntının her iki yanını $\psi_k^*(\mathbf{r})$ ile çarpıp bütün üç boyutlu uzay üzerinden $\mathbf{r}$ ye göre integre edelim :

$$\int \psi_k^* (\mathbf{r})\, \delta (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, d\tau = \sum_n c_n (\mathbf{r}') \int \psi_k^* (\mathbf{r})\, \psi_n (\mathbf{r})\, d\tau \qquad \text{(III.25.3a)}$$

elde edilir. Bu bağıntının sol yanındaki integral (III.23.22) bağıntısına göre

$$\int \psi_k^* (\mathbf{r})\, \delta (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, d\tau = \psi_k^* (\mathbf{r}')$$

sonucunu verir. Öte yandan, (III.25.3a) bağıntısının sağ yanındaki integral $\psi_n(\mathbf{r})$-lerin bir ortonormal takım oluşturmalarından ötürü

$$(\psi_k (\mathbf{r})\, , \psi_n (\mathbf{r})) = \int \psi_k^* (\mathbf{r})\, \psi_n (\mathbf{r})\, d\tau = \delta_{kn}$$

sonucunu verir. Bu sonuçlar (III.25.3a) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\psi_k^* (\mathbf{r}') = \sum_n c_n (\mathbf{r}')\, \delta_{kn} = c_k (\mathbf{r}') \qquad \text{(III.25.3b)}$$

elde edilir. (III.25.3b) bağıntısının yardımı ile (III.25.2) bağıntısı

$$\sum_k \psi_k^* (\mathbf{r}')\, \psi_k (\mathbf{r}) = \delta (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \qquad \text{(III.25.4)}$$

şeklini alır. (III.25.4) bağıntısına *kapanış bağıntısı* adı verilir.

Bir operatörün sonsuz sayıdaki özdeğerlerinin cümlesine *özdeğerlerin spektrumu* adı verilir. Sayılabilir özdeğerler için *kesikli spektrum* ve sayılamayan özdeğerler için de *sürekli spektrum* söz konusudur. Hidrojen atomunda olduğu gibi, bazı hâllerde özdeğerler spektrumu kısmen kesikli, kısmen de süreklidir. Hidrojen atomunun *enerji spektrumu* $E_k < 0$ için kesiklidir ve $H \psi_k = E_k\, \psi_k$ özdeğer denklemi ile belirlenen, elektronun ψ_k *bağlı kuvantum halleri* söz konusudur. $E_k > 0$ için *enerji spektrumu* süreklidir ve ψ_k *bağlı olmayan kuvantum hallerini* ifâde eder, yâni elektron artık atoma bağlı değildir ve atom iyonlaşmıştır. Böyle bir *sürekli özdeğerler spektrumu* için (III.25.4) kapanış bağıntısındaki toplam, bir integrale dönüşür ve bağıntı

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^* (\mathbf{r}')\, \psi_k (\mathbf{r})\, dk = \delta (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \qquad \text{(III.25.5)}$$

şeklini alır.

Şimdi momentum operatörünün

$$\psi_{\mathbf{k}} (\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi^3}}\, e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} \qquad \text{(III.25.6)}$$

şeklindeki özfonksiyonlarını göz önüne alalım. (III.25.6) bağıntısına göre

$$\psi_{\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3}\, e^{i\mathbf{k}.(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \qquad \text{(III.25.7a)}$$

yazılabilir. Kartezyen koordinatlarda (III.25.7a) bağıntısı

$$\psi_{\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3}\, e^{ik_x(x-x')}\, e^{ik_y(y-y')}\, e^{ik_z(z-z')} \qquad \text{(III.25.7b)}$$

şeklini alır. Öte yandan, (III.24.14) bağıntısını kullanarak

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_x(x-x')}\, dk_x = 2\pi\, \delta(x - x') \qquad \text{(III.25.8)}$$

elde edilir. (III.25.7b) bağıntısının her iki yanının, kartezyen koordinatları (k_x, k_y, k_z) olan, üç boyutlu uzay üzerinden integrali alınırsa

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, d\tau_k =$$

$$= \frac{1}{8\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_x(x-x')}\, dk_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_y(y-y')}\, dk_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_z(z-z')}\, dk_z \qquad \text{(III.25.9)}$$

bağıntısı bulunur. Burada

$$d\tau_k = dk_x\, dk_y\, dk_z \qquad \text{(III.25.10)}$$

koordinatları (k_x, k_y, k_z) olan bir nokta civarındaki hacım elemanıdır. (III.25.8) bağıntısı ve benzer iki bağıntı (III.25.9) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, d\tau_k = \delta(x - x')\,\delta(y - y')\,\delta(z - z')$$

veyâ

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, d\tau_k = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \qquad \text{(III.25.11)}$$

sonucuna varılır. (III.25.11) bağıntısı, (III.25.5) bağıntısının üç boyutlu **k** uzayı için genelleştirilmiş şeklidir. Öte yandan, (III.25.1) bağıntısının yerine, (III.24.16) bağıntısına benzer şekilde,

$$(\psi_{\mathbf{k}}, \psi_{\mathbf{k}'}) = \int \psi_{\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r})\,\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\, d\tau_k = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \qquad \text{(III.25.12)}$$

bağıntısı yazılabilir.

(III.26) BİR FONKSİYONUN SÜREKLİ BİR ÖZDEĞERLER SPEKTRUMUNA AİT ÖZFONKSİYONLAR CİNSİNDEN AÇILIMI

Paragraf (III.21) de herhangi bir $\psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonunun ortonormal $\psi_k(\mathbf{r})$ özfonksiyonları veyâ özvektörleri cinsinden

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k c_k \, \psi_k(\mathbf{r})$$

şeklinde bir fonksiyon serisine açılabildiğini görmüştük. Burada $\psi_k(\mathbf{r})$ özvektörleri HİLBERT uzayının *sayılabilen sonsuz boyutuna* ait taban vektörleridir. Benzer şekilde, $\psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonu sürekli bir özdeğerler spektrumuna ait $\psi_k(\mathbf{r})$ özfonksiyonları cinsinden

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, \psi_k(\mathbf{r})\, dk \qquad \text{(III.26.1)}$$

şeklinde açılabilir. Görülüyor ki, (III.26.1) bağıntısında k indisine göre bir toplam yerine k sürekli değişkenine göre bir integral gelmiştir. Bu defa $\psi_k(\mathbf{r})$ özvektörleri HİLBERT uzayının *sayılamayan sonsuz boyutuna* ait taban vektörleridir ve

$$(\psi_k\, , \psi_{k'}) = \int \psi_k^*(\mathbf{r})\, \psi_{k'}(\mathbf{r})\, d\tau = \delta(k - k') \qquad \text{(III.26.2)}$$

şeklindeki ortonormallik bağıntılarını sağlarlar. (III.26.1) bağıntısının her iki yanı $\psi_{k'}$ ile skaler olarak çarpılırsa

$$(\psi_{k'}\, , \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, (\psi_{k'}\, , \psi_k)\, dk$$

bulunur ve (III26.2) bağıntısınının yardımı ile de

$$(\psi_{k'}\, , \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, \delta(k - k')\, dk = c(k')$$

veyâ

$$c(k) = (\psi_k\, , \psi) = \int \psi_k^*(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r})\, d\tau \qquad \text{(III.26.3)}$$

sonucuna varılır. Bu son bağıntıya göre, $c(k)$ açılım katsayısı ψ vektörünün ψ_k taban vektörünün doğrultusundaki bileşenidir.

Şimdi $\psi(\mathbf{r})$ fonksiyonunun normunu $c(k)$ fonksiyonu cinsinden bulmaya çalışalım. (III.26.1) ve (III.26.2) bağıntılarına göre ψ nin normu

$$(\psi\, , \psi) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, \psi_k dk, \int_{-\infty}^{\infty} c(k')\, \psi_{k'}\, dk' \right)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c^*(k)\, c(k')\, dk\, dk'\, (\psi_k\, , \psi_{k'})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} c^*(k)\, dk \int_{-\infty}^{\infty} c(k')\, \delta(k - k')\, dk'$$

veyâ

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} c^*(k)\, c(k)\, dk \tag{III.26.4a}$$

veyâ

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} |c(k)|^2 dk \tag{III.26.4b}$$

şekillerinde bulunur. (III.26.4b) bağıntısı (III.21.4b) bağıntısının benzeridir, şu farkla ki, sağ tarafta k indisine göre toplam yerine k değişkenine göre integral gelmiştir.

ALIŞTIRMALAR VE PROBLEMLER

III.1. A ve B herhangi iki lineer operatör olduğuna ve n bir tamsayı olduğuna göre

$$[A^n, B] = \sum_{s=0}^{n-1} A^{n-s-1}\, [A, B]\, A^s$$

bağıntısının doğruluğunu matematiksel tümevarım yöntemi ile ispatlayınız. Ayrıca, $A\,[A, B] = [A, B]\,A$ özel hâli için bu bağıntının (III.11.7) bağıntısına indirgeneceğini gösteriniz.

III.2. H HAMİLTON operatörü ve $H\,u_n = E_n\,u_n$ zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denklemi olduğuna göre, kartezyen koordinatları kullanarak

a) $xH - Hx = \dfrac{\hbar^2}{m}\dfrac{\partial}{\partial x}$ bağıntısını ispatlayınız.

b) Bu bağıntıyı kullanarak :

$$\frac{\hbar^2}{m} \int u_k^* \frac{\partial u_n}{\partial x}\, d\tau = (E_n - E_k) \int u_k^*\, x\, u\, d\tau$$

bağıntısını ispatlayınız.

III.3. $D(\mathbf{a})$ öteleme (yer değiştirme) operatörü

$$D(\mathbf{a})\,\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$$

bağıntısının yardımı ile tanımlanır. $D(\mathbf{a})$ operatörünü $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ momentum vektör operatörü cinsinden ifâde ediniz ve bu operatörün bir üniter (birimsel) operatör olduğunu gösteriniz.

III.4. K bir HERMİTsel operatör, yâni $K^+ = K$ olduğuna göre ve ayrıca

$$\frac{1}{1 - iK} \equiv (1 - iK)^{-1}$$

olduğuna göre :

a) $$\frac{1}{1 - iK}(1 + iK) = (1 + iK)\frac{1}{1 - iK} = \frac{1 + iK}{1 - iK}$$

olduğunu ispatlayınız.

b) $U = \dfrac{1 + iK}{1 - iK}$ operatörünün bir üniter operatör olduğunu ispatlayınız.

c) Bir önceki şıktaki U operatörü için $K = \operatorname{tg}(\alpha/2)$ dönüşümünü yapınız ve bu operatörün α operatörü cinsinden $U = e^{i\alpha}$ şeklinde ifâde edilebileceğini gösteriniz. Ayrıca, $K^+ = K$ ise, $\alpha^+ = \alpha$ olduğunu gösteriniz.

d) $\alpha^+ = \alpha$ için $U = e^{i\alpha}$ operatorünün üniter olduğunu gösteriniz.

e) U operatörü problem III.3. teki $D(\mathbf{a})$ öteleme operatörüne özdeş olacak şekilde α HERMİTsel operatörünü belirleyiniz.

III.5. DİRAC delta fonksiyonunun tanım bağıntısını kullanarak, bu fonksiyonun gerçeklediği (III.23.14) ten (III.23.19) a kadar olan altı bağıntıyı ispatlayınız.

III.6. Bir λ parametresinin açık fonksiyonu olan bir $A(\lambda)$ operatörünün türevi

$$\frac{dA(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{A(\lambda + \varepsilon) - A(\lambda)}{\varepsilon}$$

bağıntısı ile tanımlanıyor.

$$\frac{d}{d\lambda}(AB) = \frac{dA}{d\lambda} B + A \frac{dB}{d\lambda}$$

$$\frac{d}{d\tau}(A^{-1}) = - A^{-1} \frac{dA}{d\lambda} A^{-1}$$

olduğunu gösteriniz.

III.7. A ve B_0, t parametresinden bağımsız operatörler olduğuna göre,

$$B(t) = e^{iAt} B_0 e^{-iAt}$$

bağıntısı ile tanımlanan $B(t)$ operatörünün

$$B(t) = B_0 + i\left[A, \int_0^t B(\tau)\, d\tau\right]$$

integral denkleminin bir çözümü olduğunu gösteriniz.

III.8. Herhangi iki A ve L operatörü için

$$e^{L} A e^{-L} = A + [L, A] + \frac{1}{2!} [L, [L, A]] + \frac{1}{3!} [L, [L, [L, A]]] + \ldots$$

olduğunu gösteriniz. Çözüm için Emine Rızaoğlu'nun "Kuvantum Mekaniği Çözümlü Problem Kitabı"na bakınız. Problem : V. 33.

III.9. Eğer $[[A, B], A] = 0$ ve $[[A, B], B] = 0$ ise,

$$e^{A} e^{B} = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A, B]}$$

olduğunu gösteriniz. Çözüm için Emine Rızaoğlu'nun "Kuvantum Mekaniği Çözümlü Problem Kitabı"na bakınız. Problem : V. 34.

III.10. A ve H herhangi iki operatör olduğuna göre

$$-[A, e^{-\beta H}] = e^{-\beta H} \int_{0}^{\beta} e^{\lambda H} [A, H] e^{-\lambda H} d\lambda$$

bağıntısı ile verilen KUBO özdeşliğini ispatlayınız. Çözüm için Emine Rızaoğlu"nun Kuvantum Mekaniği Çözümlü Problem Kitabı"na bakınız. Problem : V. 37.

Yol gösterme : $F = \int_{0}^{\beta} e^{\lambda H} [A, H] e^{-\lambda H} d\lambda$ yazınız.

III.11. c keyfî bir kompleks sâbit olduğuna göre

$$(\psi_m , Ac\, \psi_n) = c(\psi_m , A\, \psi_n)$$

$$(c\, \psi_m , A\, \psi_n) = c^* (\psi_m , A\, \psi_n)$$

bağıntılarını ispatlayınız.

III.12. S benzerlik dönüşümü ile Φ ve ψ vektörleri $\Phi = S\Phi'$, $\psi = S\psi'$ şeklinde dönüştürülüyor. (Φ, ψ) skaler çarpımının dönüşümle değişmemesi, yâni invaryant kalması için dönüşümün üniter olmasının gerek ve yeter şart olduğunu ispatlayınız.

Yol gösterme : S^+ operatörünün tanım bağıntısını kullanız.

III.13. $\frac{1}{A} = \frac{1}{A+B} + \frac{1}{A} B \frac{1}{A+B}$, $\frac{1}{A} = \frac{1}{A+B} + \frac{1}{A+B} B \frac{1}{A}$

operatör özdeşliklerinin doğru olduğunu gösteriniz.

IV. BÖLÜM

AÇISAL MOMENTUM VE SPİN

(IV.1) AÇISAL MOMENTUM VEKTÖR OPERATÖRÜNÜN GENEL TANIMI, SKALER KARESİNİN VE BİR KARTEZYEN BİLEŞENİNİN ÖZDEĞERLERİ

J *açısal momentum vektör operatörü*

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar\,\mathbf{J}, \qquad \mathbf{J}^+ = \mathbf{J} \tag{IV.1.1}$$

bağıntıları ile tanımlanır. **L** yörünge açısal momentumu vektör operatörünün bu bağıntıları sağladığı paragraf (I.9.) ve (III.7) de gösterilmişti. Gene paragraf (I.9) da, **L** nin (IV.1.1) deki birinci bağıntıyı sağlamasının sonucu olarak kartezyen bileşenlerinin

$$[\mathbf{J}^2, J_x] = 0, \qquad [\mathbf{J}^2, J_y] = 0, \qquad [\mathbf{J}^2, J_z] = 0 \tag{IV.1.2}$$

bağıntılarını sağladığı ispatlanmıştı. **J** nin $[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z]$ kartezyen birim taban vektörleri cinsinden ifâdesi

$$\mathbf{J} = \mathbf{e}_x J_x + \mathbf{e}_y J_y + \mathbf{e}_z J_z \tag{IV.1.3}$$

şeklindedir. J_x, J_y, J_z kartezyen bileşenlerinin kartezyen taban vektörleri ile, komütatif olduğu varsayılıyor. Böylece

$$\beta = \mathbf{J} \,.\, \mathbf{J} = \mathbf{J}^2 \tag{IV.1.4}$$

bağıntısı ile tanımlanan β operatörünün kartezyen bileşenler cinsinden ifâdesi

$$\beta = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{IV.1.5}$$

şeklindedir. O hàlde, (IV.1.1) tanım bağıntısından elde edilen (IV.1.2) bağıntıları

$$[\beta, J_x] = [\beta, J_y] = [\beta, J_z] = 0 \tag{IV.1.2a}$$

şeklinde de yazılabilir. Paragraf (III.18) de ispatlanan teoreme göre, iki operatör komütatif ise, bu iki operatörün ortak özfonksiyonları vardır. O hâlde, (IV.1.2a) bağıntılarının sonucu olarak, β operatörünün J_x, J_y, J_z kartezyen bileşenlerinin her biri ile ortak özfonksiyonları vardır. β nın J_z ile ortak özfonksiyonları ψ olsun. O hâlde

$$\beta\,\psi = \lambda\,\psi \qquad \text{(IV.1.6a)}$$

ve

$$J_z\,\psi = m\hbar\,\psi \qquad \text{(IV.1.6b)}$$

özdeğer denklemleri yazılabilir. (IV.1.6b) bağıntısından, (III.16.6) bağıntısına benzer şekilde

$$J_z^2\,\psi = m^2\,\hbar^2\,\psi \qquad \text{(IV.1.6c)}$$

bağıntısı elde edilir.

(IV.1.1) tanım bağıntılarının kartezyen bileşenler cinsinden ifâdeleri

$$[J_y\,,J_z] = i\hbar\,J_x\,, \qquad [J_z\,,J_x] = i\hbar\,J_y\,, \qquad [J_x\,,J_y] = i\hbar\,J_z \qquad \text{(IV.1.7a)}$$

ve

$$J_x^+ = J_x\,, \qquad J_y^+ = J_y\,, \qquad J_z^+ = J_z \qquad \text{(IV.1.7b)}$$

şekillerindedir. Şimdi

$$\eta = J_x + i\,J_y \qquad \text{(IV.1.8a)}$$

bağıntısı ile η operatörü tanımlanırsa, (IV.1.7b) bağıntılarından ötürü

$$\eta^+ = J_x - i\,J_y \qquad \text{(IV.1.8b)}$$

elde edilir. Son iki bağıntı taraf tarafa sağdan ve soldan çarpılırsa (III.8.25) ba-bağıntılarına benzer şekilde

$$\eta^+\,\eta = (J_x - i\,J_y)\,(J_x + i\,J_y) \equiv J_x^2 + J_y^2 + i\,[J_x\,,J_y] \qquad \text{(IV.1.9a)}$$

$$\eta\,\eta^+ = (J_x + i\,J_y)\,(J_x - i\,J_y) \equiv J_x^2 + J_y^2 - i\,[J_x\,,J_y] \qquad \text{(IV.1.9b)}$$

bağıntıları elde edilir. Bu bağıntılardan da (IV.1.5) ve (IV.1.7a) bağıntılarının kullanılması ile

$$\eta^+\,\eta = \beta - J_z^2 - \hbar\,J_z \qquad \text{(IV.1.10a)}$$

$$\eta\,\eta^+ = \beta - J_z^2 + \hbar\,J_z \qquad \text{(IV.1.10b)}$$

elde edilir. Bu bağıntıların yardımı ile $\eta^+\eta$ ve $\eta\,\eta^+$ operatörleri ψ özfonksiyonu üzerinde işlem yaparlarsa, (IV.1.6a,b,c) bağıntılarını kullanarak

$$\eta^+\,\eta\,\psi = \beta\psi - J_z^2\,\psi - \hbar\,J_z\,\psi = \lambda\psi - m^2\,\hbar^2\,\psi - m\,\hbar^2\,\psi$$

$$\eta\,\eta^+\,\psi = \beta\psi - J_z^2\,\psi + \hbar\,J_z\,\psi = \lambda\psi - m^2\,\hbar^2\,\psi + m\,\hbar^2\,\psi$$

veyâ

$$\eta^+ \eta\, \psi = [\lambda - m(m+1)\hbar^2]\,\psi \qquad \text{(IV.1.11a)}$$

$$\eta\, \eta^+ \psi = [\lambda - m(m-1)\hbar^2]\,\psi \qquad \text{(IV.1.11b)}$$

sonuçlarına varılır. Bu bağıntılar, β, J_z ve J_z^2 nin ortak özfonksiyonları olan ψ nin $\eta^+\eta$ ve $\eta\eta^+$ operatörlerinin de ortak özfonksiyonu olduğunu göstermektedir. (IV.1.11a) ve (IV.1.11b) bağıntıları soldan skaler olarak ψ ile çarpılırsa

$$(\psi, \eta^+ \eta\, \psi) = [\lambda - m(m+1)\hbar^2]\,(\psi, \psi) \qquad \text{(IV.1.12a)}$$

$$(\psi, \eta\, \eta^+ \psi) = [\lambda - m(m-1)\hbar^2]\,(\psi, \psi) \qquad \text{(IV.1.12b)}$$

bağıntıları bulunur.

Bir A lineer operatörünün A^+ ile gösterilen HERMİTsel eşleniği, (III.6.1) tanım bağıntısında ψ_m ve ψ_n keyfî vektörleri aracılığı ile aşağıdaki şekilde verilmiştir :

$$(\psi_n\,, A^+ \psi_m) = (A\, \psi_n\,, \psi_m) \equiv (\psi_m\,, A\, \psi_n)^*$$

Bu tanım bağıntısında

$$\psi_n = \psi, \qquad A = \eta, \qquad \psi_m = \eta\psi$$

yazılırsa

$$(\psi, \eta^+ (\eta\psi)) = (\eta\psi, \eta\psi) \equiv (\eta\psi, \eta\psi)^* \qquad \text{(IV.1.13a)}$$

bağıntısı, ve

$$\psi_n = \psi, \qquad A = \eta^+, \qquad A^+ = \eta, \qquad \psi_m = \eta^+ \psi$$

yazılırsa,

$$(\psi, \eta\, (\eta^+ \psi)) = (\eta^+ \psi, \eta^+ \psi) \equiv (\eta^+ \psi, \eta^+ \psi))^* \qquad \text{(IV.1.13b)}$$

bağıntısı bulunur. Bu bağıntılar, (III.1.4), (III.1.5) ve (III.1.8) bağıntılarına göre

$$(\psi, \eta^+ \eta\, \psi) = (\eta\psi, \eta\psi) = \|\eta\psi\| \geqq 0 \qquad \text{(IV.1.14a)}$$

$$(\psi, \eta\, \eta^+ \psi) = (\eta^+ \psi, \eta^+ \psi) = \|\eta^+ \psi\| \geqq 0 \qquad \text{(IV.1.14b)}$$

sonuçlarını verirler. (IV.1.14a) bağıntısındaki eşitlik işareti $\eta\psi = 0$ için ve (IV.1.14b) bağıntısındaki eşitlik işareti de $\eta^+ \psi = 0$ için geçerlidir. Öte yandan, (III.1.5a) bağıntısına göre

$$\psi \neq 0 \text{ için : } \quad (\psi, \psi) = \|\psi\| > 0$$

olduğundan, (IV.1.14a) bağıntısının (IV.1.12a) bağıntısı ile karşılaştırılmasından

$$\lambda - m(m+1)\hbar^2 \geqq 0$$

veyâ

$$\lambda + \frac{1}{4}\hbar^2 \geqq \left(m + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2 \geqq 0$$

veyâ

$$\left|m + \frac{1}{2}\right| \hbar \leqq \left(\lambda + \frac{1}{4}\hbar^2\right)^{1/2} \tag{IV.1.15a}$$

bağıntısı bulunur. Benzer şekilde, (IV.1.14b) bağıntısının (IV.1.12b) bağıntısı ile karşılaştırılmasından

$$\lambda - m(m-1)\hbar^2 \geqq 0$$

veyâ

$$\lambda + \frac{1}{4}\hbar^2 \geqq \left(m - \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2 \geqq 0$$

veyâ

$$\left|m - \frac{1}{2}\right| \hbar \leqq \left(\lambda + \frac{1}{4}\hbar^2\right)^{1/2} \tag{IV.1.15b}$$

bağıntısı bulunur.

Eğer (IV.1.12a) ve (IV.1.12b) bağıntıları taraf tarafa toplanıp 2 ye bölünürse

$$\frac{1}{2}\left[(\psi, \eta^+ \eta\, \psi) + (\psi, \eta\, \eta^+ \psi)\right] = (\lambda - m^2 \hbar^2)(\psi, \psi) \tag{IV.1.16a}$$

bulunur. (IV.1.14a) ve (IV.1.14b) bağıntılarının yardımı ile (IV.1.16a) bağıntısı

$$(\lambda - m^2 \hbar^2)(\psi, \psi) = \frac{1}{2}\left(\|\eta\psi\| + \|\eta^+ \psi\|\right) \geqq 0 \tag{IV.1.16b}$$

şeklini alır. $(\psi, \psi) > 0$ olduğunu hatırlayarak, (IV.1.16b) bağıntısından

$$\lambda - m^2 \hbar^2 \geqq 0$$

veyâ

$$\lambda \geqq m^2 \hbar^2 \geqq 0 \tag{IV.1.17}$$

sonucuna varılır. Şimdi

$$\left(j + \frac{1}{2}\right)\hbar = \left(\lambda + \frac{1}{4}\hbar^2\right)^{1/2} \tag{IV.1.18a}$$

bağıntısının aracılığı ile j boyutsuz büyüklüğünü tanımlayalım. Bu tanım bağıntısının her iki yanının karesi alınırsa

$$\lambda + \frac{1}{4}\hbar^2 = \left(j^2 + j + \frac{1}{4}\right)\hbar^2$$

veyâ

$$\lambda = j(j+1)\hbar^2 \tag{IV.1.18b}$$

bulunur. (IV.1.17) bağıntısından

$$\lambda + \frac{1}{4}\hbar^2 \geqq \frac{1}{4}\hbar^2$$

veyâ

$$\left(\lambda + \frac{1}{4}\hbar^2\right)^{1/2} \geqq \frac{1}{2}\hbar$$

elde edilir. (IV.1.18a) tanım bağıntısı bu bağıntıda yerine yazılırsa

$$\left(j + \frac{1}{2}\right)\hbar \geqq \frac{1}{2}\hbar$$

veyâ

$$j \geqq 0 \tag{IV.1.19}$$

sonucuna varılır.

Eğer (IV.1.18a) tanım bağıntısı (IV.1.15a) ve (IV.1.15b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\left| m + \frac{1}{2} \right| \leqq j + \frac{1}{2} \tag{IV.1.20a}$$

ve

$$\left| m - \frac{1}{2} \right| \leqq j + \frac{1}{2} \tag{IV.1.20b}$$

bağıntıları bulunur. (IV.1.19) bağıntısına göre

$$j + \frac{1}{2} > 0$$

eşitsizliği elde edilir. Öte yandan, bilindiği gibi, x ve a iki reel sayı ise

$$a > 0 \text{ için } |x| \leqq a$$

bağıntısı

$$-a \leqq x \leqq a$$

sonuçlarını verir. O hâlde,

$$x = m \pm \frac{1}{2}, \qquad a = j + \frac{1}{2} > 0$$

alınırsa, (IV.1.20a,b) bağıntıları

$$-j - \frac{1}{2} \leqq m + \frac{1}{2} \leqq j + \frac{1}{2} \tag{IV.1.21a}$$

$$-j - \frac{1}{2} \leqq m - \frac{1}{2} \leqq j + \frac{1}{2} \tag{IV.1.21b}$$

şekillerini alırlar. Bu iki eşitsizlik takımının birincisinin her üç yanından 1/2 çıkarılır ve ikincisinin her üç yanına 1/2 eklenirse

$$-j-1 \leqq m \leqq j$$
$$-j \leqq m \leqq j+1$$

elde edilir. Bu iki eşitsizlik takımı

$$-j \leqq m \leqq j \qquad \text{(IV.1.22)}$$

şeklindeki bir eşitsizlik takımı olarak yazılabilir. $j \geqq 0$ olduğu için (IV.1.22) bağıntısı

$$|m| \leqq j \qquad \text{(IV.1.22a)}$$

şeklinde de yazılabilir.

(IV.1.8a) ve (IV.1.7a) bağıntılarını kullanarak

$$\begin{aligned} J_z \eta - \eta J_z &= J_z (J_x + i J_y) - (J_x + i J_y) J_z \\ &= J_z J_x - J_x J_z - i (J_y J_z - J_z J_y) \\ &= i\hbar J_y + \hbar J_x \\ &= \hbar (J_x + i J_y) \end{aligned}$$

veyâ

$$J_z \eta - \eta J_z = \hbar \eta \qquad \text{(IV.1.23a)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntının her iki yanının HERMİTsel eşleniği alınırsa ve sonra da -1 ile çarpılırsa (IV.1.7b) bağıntısının yardımı ile

$$J_z \eta^+ - \eta^+ J_z = -\hbar \eta^+ \qquad \text{(IV.1.23b)}$$

sonucuna varılır. Son iki bağıntı

$$J_z \eta = \eta J_z + \hbar \eta \qquad \text{(IV.1.23a)}$$
$$J_z \eta^+ = \eta^+ J_z - \hbar \eta^+ \qquad \text{(IV.1.23b)}$$

şekillerinde de yazılabilir. Bu bağıntıların yardımı ile $J_z \eta$ ve $J_z \eta^+$ operatörleri ψ özfonksiyonu üzerinde işlem yaparlarsa, (IV.1.6b) bağıntısını kullanarak

$$J_z \eta \psi = \eta J_z \psi + \hbar \eta \psi = m\hbar \eta \psi + \hbar \eta \psi$$
$$J_z \eta^+ \psi = \eta^+ J_z \psi - \hbar \eta^+ \psi = m\hbar \eta^+ \psi - \hbar \eta^+ \psi$$

veyâ

$$J_z \eta \psi = (m+1) \hbar \eta \psi \qquad \text{(IV.1.24a)}$$
$$J_z \eta^+ \psi = (m-1) \hbar \eta^+ \psi \qquad \text{(IV.1.24b)}$$

sonuçlarına varılır. Bu bağıntılara göre, eğer ψ, J_z operatörünün bir özfonksiyonu ise, $\eta \psi$ ve $\eta^+ \psi$ de J_z operatörünün birer özfonksiyonudur. Öyle ki, J_z

nin ψ ye ait $\hbar$ cinsinden özdeğeri m ise, $\eta\,\psi$ ye ait özdeğeri $m+1$ ve $\eta^+\,\psi$ ye ait özdeğeri de $m-1$ olur. Öte yandan, m özdeğerler dizisi (IV.1.22) bağıntısına göre hem aşağıdan, hem de yukarıdan sınırlıdır. Böylece J_z operatörünün

$$\psi, \eta\,\psi, \eta^2\,\psi, \eta^3\,\psi\,,\dots, \eta^p\,\psi$$

şeklindeki özfonksiyonları dizisine ait özdeğerler dizisi

$$m, m+1, m+2, m+3\,,\dots, m+p=j$$

şeklindedir ve

$$\psi, \eta^+\,\psi, \eta^{+2}\,\psi, \eta^{+3}\,\psi\,,\dots, \eta^{+q}\,\psi$$

şeklindeki özfonksiyonları dizisine ait özdeğerler dizisi de

$$m, m-1, m-2, m-3\,,\dots, m-q=-j$$

şeklindedir. Şüphesiz burada p ve q, sıfır veyâ pozitif tamsayılardır. O hâlde, m özdeğerinin

$$-j \leqq m \leqq j \tag{IV.1.22}$$

aralığındaki değişimi

$$\Delta m = j-(-j) = m+p-(m-q)$$

veyâ

$$\Delta m = 2j = p+q$$

şeklindedir, yâni $2j$, sıfır veyâ bir pozitif tamsayıdır. $2j$, ya çift, ya da tek bir tamsayı olabilir. $n=0, 1, 2, 3\,,\dots$ olmak üzere

$$2j = 2n \text{ ise:} \qquad j = n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$2j = 2n+1 \text{ ise:} \qquad j = n+\frac{1}{2} = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \dots$$

elde edilir. O hâlde, (IV.1.19) bağıntısına göre $j \geqq 0$ olmak üzere, j kuvantum sayısı

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \frac{7}{2}, \dots$$

değerlerini alır. Yâni, j bir tamsayı veyâ bir buçuklu tamsayı olabilir.

(IV.1.18b) bağıntısı (IV.1.16a) özdeğer denkleminde yerine yazılırsa, (IV.1.6b) özdeğer denklemi ile birlikte

$$\mathbf{J}^2\,\psi_{jm} = j(j+1)\,\hbar^2\,\psi_{jm} \tag{IV.1.25a}$$

$$J_z\,\psi_{jm} = m\,\hbar\,\psi_{jm} \tag{IV.1.25b}$$

yazılabilir. $\mathbf{J}^2$ ve J_z operatörlerinin ψ_{jm} ortak özfonksiyonları, $\mathbf{J}^2$ nin $j(j+1)$ şeklindeki özdeğerini veren j kuvantum sayısına ve J_z nin özdeğeri olan m

kuvantum sayısına bağlıdır. (IV.1.22) bağıntısına göre, j kuvantum sayısının belirli bir değeri için m kuvantum sayısının $2j + 1$ adet farklı değeri vardır ve böylece J_z operatörünün bu m özdeğerine ait $2j + 1$ adet farklı ψ_{jm} özfonksiyonu vardır. j ye *açısal momentum kuvantum sayısı* ve m ye de *izdüşüm kuvantum sayısı* adı verilir.

j sayısı $\hbar$ birimi cinsinden açısal momentumun büyüklüğünü belirler. Klâsik mekaniğe geçildiği zaman, $|\mathbf{J}| = j\hbar$ veyâ $\mathbf{J}^2 = j^2\hbar^2$ yazılabilir. Böylece, $\hbar \to 0$ için $j \to \infty$ elde edilir. $\mathbf{J}^2$ nin özdeğeri olan

$$j(j+1)\hbar^2 = j^2\hbar^2\left(1 + \frac{1}{j}\right)$$

ifâdesinde $1/j$ ek terimi, J_x, J_y, J_z operatörlerinin komütatif olmayışlarının sonucu olan bir kuvantum mekaniği olayını gösterir.

(IV.2) YÖRÜNGE AÇISAL MOMENTUMU VEKTÖR OPERATÖRÜ

Paragraf (I.9) da yörünge açısal momentumu vektör operatörü

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -i\hbar\,\mathbf{r} \times \nabla \tag{IV.2.1}$$

bağıntısı ile tanımlanmıştı $\mathbf{L}$ operatörünün

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar\,\mathbf{L}, \qquad \mathbf{L}^+ = \mathbf{L} \tag{IV.2.2}$$

bağıntılarını, yâni $\mathbf{J}$ açısal momentum vektör operatörünün (IV.1.1) ile verilen genel tanım bağıntılarını sağladığı gösterilmişti. O hâlde, $\mathbf{J} = \mathbf{L}$ *özel hali* için bir önceki paragrafta incelenen bütün özellikler geçerli olmalıdır. Paragraf (I.21) de elde edilen

$$\mathbf{L}^2\, Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{IV.2.3a}$$

$$L_z\, Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{IV.2.3b}$$

bağıntıları (IV.1.25a,b) bağıntılarının aynıdır. Ayrıca, (IV.1.22) bağıntısının bir özel hâli olan ve $j = l$ için elde edilen

$$-l \leqq m \leqq l \tag{IV.2.4}$$

bağıntısı gene geçerlidir ve doğruluğu paragraf (I.20) de gösterilmişti. Fakat l kuvantum sayısı, paragraf (I.15) te gösterildiği gibi yalnız

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$$

tamsayı değerlerini alabilir, fakat buçuklu tamsayı değerlerini alamaz. Öte yandan, genel teoride belirsiz olan ψ_{lm} özfonksiyonları, her özel hâl için olduğu gibi, bu özel hâl için de belirlidir ve

$$\psi_{lm} \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi) \qquad \text{(IV.2.5)}$$

küresel harmonik fonksiyonlarından ibarettir.

(IV.3) BİR LİNEER OPERATÖRÜN MATRİS TEMSİLİ

A herhangi bir lineer operatör ve $\{\psi_m\}$ HİLBERT uzayının herhangi bir ortonormal *taban vektörleri takımı* olduğuna göre, $A\,\psi_m = \Phi_m$ vektörleri söz konusu taban vektörleri cinsinden

$$A\,\psi_m = \Phi_m = \sum_n a_{nm}\,\psi_n \qquad \text{(IV.3.1)}$$

şeklinde seriye açılabilir.

$$(\psi_k\,,\psi_n) = \int \psi_k^*\,\psi_n\,d\tau = \delta_{kn} \qquad \text{(IV.3.2)}$$

ortonormallik bağıntılarını göz önünde bulundurarak (IV.3.1) bağıntısının her iki yanını soldan ψ_k taban vektörü ile skaler olarak çarparsak

$$(\psi_k\,, A\,\psi_m) = \sum_n a_{nm}\,(\psi_k\,,\psi_n) = \sum_n a_{nm}\,\delta_{kn} = a_{km}$$

veyâ

$$a_{nm} = (\psi_n\,, A\,\psi_m) \qquad \text{(IV.3.3)}$$

sonucuna varılır. Böylece, $A\,\psi_m$ vektörlerinin (IV.3.1) bağıntısı ile verilen açılımlarında a_{nm} açılım katsayılarının ψ_n ile $A\,\psi_m$ vektörlerinin skaler çarpımları olduğu ispat edildi. Şüphesiz a_{nm} açılım katsayıları genel hâlde kompleks sayılardır.

A lineer operatörünü temsil eden kare matris gene A harfi ile gösterilir ve bu matrisin $(A)_{mn}$ elemanları a_{mn} açılım katsayıları olarak tanımlanır. O hâlde

$$a_{mn} = (A)_{mn} = (\psi_m\,, A\,\psi_n) = \int \psi_m^*\,A\,\psi_n\,d\tau \qquad \text{(IV.3.4)}$$

bağıntısı, A lineer operatörünün matris temsilinin tanım bağıntısıdır.

A ve B herhangi iki kare matris ve bu matrislerin genel elemanları a_{mn} ve b_{mn} ise, ve c herhangi bir kompleks sayı ise, matrislerin özellikleri aşağıdaki bağıntıların aracılığı ile sıralanabilir :

(i) İki matrisin toplamı

$$(A + B)_{mn} = a_{mn} + b_{mn}$$

(ii) Bir matrisin bir sayı ile çarpımı

$$(cA)_{mn} = c\,a_{mn}$$

(iii) İki matrisin eşitliği

$A = B$ ise, $a_{mn} = b_{mn}$ dir, veyâ $a_{mn} = b_{mn}$ ise, $A = B$ dir.

(iv) İki matrisin çarpımı

$$(AB)_{mn} = \sum_k a_{mk}\, b_{kn}$$

(v) Bir matrisin HERMİTsel eşleniği

$$(A^+)_{mn} = (A^*)_{nm} = (A)^*_{nm} = a^*_{nm}$$

Öte yandan, (IV.3.4) tanım bağıntısının sonucu olarak, lineer operatörlerin matris temsillerinin özelliklerinin matrislerin yukarda verilen özelliklerine uyduğu aşağıda gösterilmiştir :

(i) $(\psi_m\,, (A + B)\,\psi_n) = (\psi_m\,, A\,\psi_n) + (\psi_m\,, B\,\psi_n)$ olduğu için :

$$(A + B)_{mn} = (A)_{mn} + (B)_{mn} = a_{mn} + b_{mn} \qquad \text{(IV.3.5)}$$

(ii) $(\psi_m\,, cA\,\psi_n) = c\,(\psi_m\,, A\,\psi_n)$ olduğu için :

$$(cA)_{mn} = c\,(A)_{mn} = c\,a_{mn} \qquad \text{(IV.3.6)}$$

(iii) $A = B$ ise, $(\psi_m\,, A\,\psi_n) = (\psi_m\,, B\,\psi_n)$ olduğu için :

$A = B$ ise : $(A)_{mn} = (B)_{mn}$ veyâ $a_{mn} = b_{mn}$ (IV.3.7)

(iv) $(B)_{kn} = b_{kn}$ olmak üzere, önce

$$B\,\psi_n = \sum_k b_{kn}\,\psi_k$$

bağıntısını soldan A ile çarparak ve sonra

$$AB\,\psi_n = \sum_k b_{kn}\,A\,\psi_k$$

bağıntısını soldan ψ_m ile skaler olarak çarparak

$$(\psi_m\,, AB\,\psi_n) = \sum_k b_{kn}\,(\psi_m\,, A\,\psi_k)$$

bulunur ve böylece

$$(AB)_{mn} = \sum_k (B)_{kn}\,(A)_{mk} = \sum_k a_{mk}\,b_{kn} \qquad \text{(IV.3.8)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (IV.3.8) bağıntısına göre

$$(AB - BA)_{mn} = \sum_k (a_{mk}\,b_{kn} - b_{mk}\,a_{kn}) \neq 0$$

olduğundan, komütatif olmayan operatörlerin matris temsilleri de komütatif değildir.

(v) A^+ HERMİTsel eşlenik operatörünün (III.6.1) tanım bağıntısına göre

$$(\psi_m , A^+ \psi_n) = (A \psi_m , \psi_n) \equiv (\psi_n , A \psi_m)^*$$

olduğundan

$$(A^+)_{mn} = (A)^*_{nm} = a^*_{nm} \qquad \text{(IV.3.9)}$$

bulunur. Eğer özel hâlde A operatörü HERMİTsel ise, bu operatörü temsil eden matrisin elemanları

$$(A)_{mn} = (A)^*_{nm}$$

veyâ

$$a_{mn} = a^*_{nm} \qquad \text{(IV.3.10)}$$

bağıntısını sağlaı.

Elemanları $a_{nn}\,\delta_{mn}$ şeklinde olan bir kare matrise *köşegen matris* adı verilir ve böyle bir matrisin birinci köşegeni üzerinde olmayan elemanlarının hepsi sıfırdır. Özel hâlde, elemanları δ_{mn} şeklinde olan bir köşegen matrise de *birim matris* adı verilir.

$$(\psi_m , I \psi_n) = (\psi_m , \psi_n) = \delta_{mn}$$

olduğundan, birim operatörün matris temsili birim matristir.

Bir A lineer operatörünün çok özel bir matris temsili, bu operatörün kendi özvektörleri cinsinden olan temsildir. Yâni

$$A \psi_n = \lambda_n \psi_n \qquad \text{(IV.3.11)}$$

özdeğer bağıntısı ile tanımlanan ψ_n özvektörleri *taban vektörleri* olarak seçiliyor. Eğer A operatörü bir dinamik değişkeni temsil etmek üzere HERMİTsel ise taban vektörleri ortonormal olur :

$$A^+ = A \text{ için : } \qquad (\psi_m , \psi_n) = \delta_{mn} \qquad \text{(IV.3.12)}$$

Son iki bağıntıdan

$$(\psi_m , A \psi_n) = \lambda_n (\psi_n , \psi_n) = \lambda_n\,\delta_{mn} = a_{mn}$$

veyâ $\lambda_n = a_{nn}$ olduğundan

$$(A)_{mn} = a_{nn}\,\delta_{mn} \qquad \text{(IV.3.13)}$$

sonucuna varılır. O hâlde, bir HERMİTsel operatörün kendi özvektörleri cinsinden matris temsili bir köşegen matristir ve bu matrisin köşegen elemanları da söz konusu operatörün özdeğerlerinden ibarettir.

A ve B operatörleri komütatif ise, paragraf (III.18) de ispatlanan teoreme göre bu iki operatörün

$$A\,\psi_n = \lambda_n\,\psi_n \tag{IV.3.14a}$$

ve

$$B\,\psi_k = \mu_k\,\psi_k \tag{IV.3.14b}$$

özdeğer denklemleri ile belirlenen ortak ψ_n özvektörleri vardır. O hâlde, A ve B operatörlerinin ψ_n ortak özvektörleri cinsinden matris temsilleri birer köşegen matristir :

$$a_{mk} = (A)_{mk} = \lambda_m\,\delta_{mk} \tag{IV.3.15a}$$

$$b_{kn} = (B)_{kn} = \mu_n\,\delta_{kn} \tag{IV.3.15b}$$

Öte yandan, (iv) üncü özelliğe göre, iki operatörün çarpımının matris temsili bu operatörlerin matris temsillerinin çarpımına eşittir :

$$(AB)_{mn} = \sum_k a_{mk}\,b_{kn} \tag{IV.3.8a}$$

$$(BA)_{mn} = \sum_k b_{mk}\,a_{kn} \tag{IV.3.8b}$$

(IV.3.15b,a) bağıntıları (IV.3.8a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$(AB)_{mn} = \lambda_m\,\mu_n \sum_k \delta_{mk}\,\delta_{kn} \equiv \lambda_m\,\mu_n\,\delta_{mn}$$

$$(BA)_{mn} = \mu_m\,\lambda_n \sum_k \delta_{mk}\,\delta_{kn} \equiv \mu_m\,\lambda_n\,\delta_{mn}$$

veyâ

$$(AB)_{mn} = (BA)_{mn} = \lambda_n\,\mu_n\,\mu_{mn} \tag{IV.3.16}$$

sonucuna varılır. (IV.3.16) bağıntısı köşegen iki matrisin çarpımının komütatif ve gene köşegen bir matris olduğunu ve köşegen elemanlarının da çarpan matrislerin karşılıklı köşegen elemanlarının çarpımlarına eşit olduğunu göstermektedir.

(IV.4) AÇISAL MOMENTUM OPERATÖRLERİNİN MATRİS TEMSİLLERİ

(IV.1.25a,b) bağıntılarına göre $\mathbf{J}^2$ ve J_z operatörlerinin özdeğer denklemleri

$$\mathbf{J}^2\,\psi_{jm} = j\,(j) + 1)\,\hbar^2\,\psi_{jm} \tag{IV.4.1a}$$

$$J_z\,\psi_{jm} = m\,\hbar\,\psi_{jm} \tag{IV.4.1b}$$

şekillerindedir. ψ_{jm} özvektörleri her ikisi de HERMİTsel olan $\mathbf{J}^2$ ve J_z operatörlerinin ortak özvektörleri olduğundan

$$(\psi_{j'm'}\,,\,\psi_{jm}) = \delta_{j'j}\,\delta_{m'm} \tag{IV.4.2}$$

ortonormallik bağıntılarını gerçeklerler. Belirli bir $j' = j$ değeri için bu ortonormallik bağıntıları

$$(\psi_{jm'}\,,\,\psi_{jm}) = \delta_{m'm} \tag{IV.4.2a}$$

şekillerini alırlar. (IV.4.1a,b) bağıntılarını soldan skaler olarak $\psi_{jm'}$ vektörü ile çarparsak

$$(\psi_{jm'}\,,\,\mathbf{J}^2\,\psi_{jm}) = j(j+1)\,\hbar^2\,(\psi_{jm'}\,,\,\psi_{jm})$$

$$(\psi_{jm'}\,,\,J_z\,\psi_{jm}) = m\,\hbar\,(\psi_{jm'}\,,\,\psi_{jm})$$

bulunur. Bu bağıntıların son yanları ψ_{jm} temsiline göre $\mathbf{J}^2$ ve J_z operatörlerinin matris temsilleridir. Öte yandan, (IV.4.2a) bağıntısını bu bağıntıların sağ yanlarında yerine yazarsak

$$(\mathbf{J}^2)_{m'm} = j\,(j+1)\,\hbar^2\,\delta_{m'm} \tag{IV.4.3a}$$

$$(J_z)_{m'm} = m\,\hbar\,\delta_{m'm} \tag{IV.4.3b}$$

sonuçlarına varılır. $\mathbf{J}^2$ ve J_z operatörlerinin matris temsilleri köşegen matrislerdir. J_z matrisinin köşegen elemanları J_z operatörünün $m\hbar$ özdeğerlerinden ibarettir. $\mathbf{J}^2$ operatörünün özdeğerleri m ye bağlı olmadığından, $\mathbf{J}^2$ matrisi I birim matrisi ile orantılıdır :

$$\mathbf{J}^2 = j\,(j+1)\,\hbar^2\,I \tag{IV.4.4}$$

Belirli bir j için $\mathbf{J}^2\,, J_x\,, J_y\,, J_z\,, \eta$ ve η^+ operatörlerini temsil eden kare matrislerin mertebeleri $(2j+1) \times (2j+1)$ dir.

η ve η^+ operatörlerinin ψ_{jm} temsiline göre matris temsillerini bulabilmek için evvelce yazdığımız (IV.1.24a,b) bağıntılarını hatırlayalım :

$$J_z\,\eta\,\psi_{jm} = (m+1)\,\hbar\,\eta\,\psi_{jm} \tag{IV.4.5a}$$

$$J_z\,\eta^+\,\psi_{jm} = (m-1)\,\hbar\,\eta^+\,\psi_{jm} \tag{IV.4.5b}$$

Öte yandan, (IV.4.1b) bağıntısını, m yerine bir kez $m+1$ ve bir kez de $m-1$ koyarak yazalım :

$$J_z\,\psi_{j,m+1} = (m+1)\,\hbar\,\psi_{j,m+1} \tag{IV.4.6a}$$

$$J_z\,\psi_{j,m-1} = (m-1)\,\hbar\,\psi_{j,m-1} \tag{IV.4.6b}$$

(IV.4.5a) bağıntısı (IV.4.6a) bağıntısı ile karşılaştırılırsa J_z operatörünün $m+1$ özdeğerine ait özvektörün $\eta\,\psi_{jm}$ veyâ $\psi_{j,m+1}$ olduğu görülür. O hâlde, $\eta\,\psi_{jm}$ özvektörü, $\psi_{j,m+1}$ özvektörü ile orantılı olmalıdır ve β_m yalnız m ye bağlı bir orantı katsayısı olmak üzere,

$$\eta\,\psi_{jm} = \beta_m\,\psi_{j,m+1} \tag{IV.4.7a}$$

bağıntısı yazılabilir. Benzer şekilde, (IV.4.5b) bağıntısı (IV.4.6b) bağıntısı ile karşılaştırılırsa J_z operatörünün $m-1$ özdeğerine ait özvektörünün $\eta^+\,\psi_{jm}$

veyâ $\psi_{j,m-1}$ olduğu görülür. O hâlde, $\eta^+ \psi_{jm}$ özvektörü, $\psi_{j,m-1}$ özvektörü ile orantılı olmalıdır ve α_m yalnız m ye bağlı bir orantı katsayısı olmak üzere

$$\eta^+ \psi_{jm} = \alpha_m \psi_{j,m-1} \qquad \text{(IV.4.7b)}$$

bağıntısı yazılabilir. Öte yandan, (IV.1.18b) bağıntısı (IV.1.11a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\eta^+ \eta \psi_{jm} = [j(j+1) - m(m+1)] \hbar^2 \psi_{jm} \qquad \text{(IV.4.8a)}$$

$$\eta \eta^+ \psi_{jm} = [j(j+1) - m(m-1)] \hbar^2 \psi_{jm} \qquad \text{(IV.4.8b)}$$

bağıntıları elde edilir. (IV.4.7a,b) bağıntılarından (IV.4,8a,b) bağıntıları elde edilebilirse $\beta_m(j)$ ve $\alpha_m(j)$ katsayıları m ve j nin fonksiyonları olarak bulunabilir. Bu maksatla önce, (IV.4.7a) bağıntısında m yerine $m-1$ ve (IV.4.7b) bağıntısında da m yerine $m+1$ yazalım :

$$\eta \psi_{j,m-1} = \beta_{m-1} \psi_{jm} \qquad \text{(IV.4.9a)}$$

$$\eta^+ \psi_{j,m+1} = \alpha_{m+1} \psi_{jm} \qquad \text{(IV.4.9b)}$$

bulunur. Şimdi de (IV.4.7a) bağıntısını soldan η^+ ile ve (IV.4.7b) bağıntısını da soldan η ile çarpalım ve elde edilen sonuçlarda (IV.4.9b,a) bağıntılarını yerlerine yazalım :

$$\eta^+ \eta \psi_{jm} = \beta_m \eta^+ \psi_{j,m+1} = \beta_m \alpha_{m+1} \psi_{jm} \qquad \text{(IV.4.10a)}$$

$$\eta \eta^+ \psi_{jm} = \alpha_m \eta \psi_{j,m-1} = \alpha_m \beta_{m-1} \psi_{jm} \qquad \text{(IV.4.10b)}$$

(IV.4.10a,b) bağıntıları (IV.4.8a,b) bağıntılarının aynıdır. (IV.4.8a,b) bağıntılarının sağ yanlarını çarpanlara ayırırsak, karşılaştırma yolu ile α_m ve β_m katsayıları arasında

$$\beta_m \alpha_{m+1} = (j-m)(j+m+1) \hbar^2 \qquad \text{(IV.4.11a)}$$

$$\alpha_m \beta_{m-1} = (j+m)(j-m+1) \hbar^2 \qquad \text{(IV.4.11b)}$$

bağıntıları bulunur. (IV.4.11b) bağıntısında m yerine $m+1$ yazılırsa (IV.4.11a) bağıntısı elde edilir. Yâni, bu iki bağıntı biribirlerinden bağımsız değildir. Bu sebepten ötürü, α_m ve β_m katsayılarının belirlenebilmesi için bunlar arasında ikinci bir bağıntıya ihtiyaç vardır.

(IV.4.7a,b) bağıntılarını soldan skaler olarak $\psi_{jm'}$ vektörü ile çarparsak

$$(\psi_{jm'}, \eta \psi_{jm}) = \beta_m (\psi_{jm'}, \psi_{j,m+1})$$

$$(\psi_{jm'}, \eta^+ \psi_{jm}) = \alpha_m (\psi_{jm'}, \psi_{j,m-1})$$

bulunur. Bu bağıntıların sol yanları ψ_{jm} temsiline göre η ve η^+ operatörlerinin matris temsilleridir. Bağıntıların sağ yanları ise, (IV.4.2a) bağıntısında m yerine bir kez $m+1$ ve bir kez de $m-1$ yazarak belirlenebilir :

$$(\psi_{jm'}\,,\,\psi_{j,m+1}) = \delta_{m',\,m+1} \qquad \text{(IV.4.2b)}$$

$$(\psi_{jm'}\,,\,\psi_{j,m-1}) = \delta_{m',\,m-1} \qquad \text{(IV.4.2c)}$$

O hâlde, (IV.4.2b,c) bağıntılarını yukarda yerlerine yazarak

$$\eta_{m'm} = \beta_m\, \delta_{m',m+1} \qquad \text{(IV.4.12a)}$$

$$\eta^{+}_{m'm} = \alpha_m\, \delta_{m',m-1} \qquad \text{(IVt4.12b)}$$

sonuçlarına varılır. Bir matrisin HERMİTsel eşleniğinin tanımına göre $\eta^{+}_{m'm}$ ile $\eta_{m'm}$ arasında

$$\eta^{+}_{m'm} = \eta^{*}_{mm'} \qquad \text{(IV.4.13)}$$

bağıntısı vardır. İşte bu bağıntı α_m ve β_m katsayılarının arasındaki ikinci bağıntıyı verir. Paragraf (III.23) te verilen KRONECKER deltasına ait

$$\delta_{mn} = \delta_{nm} \qquad \text{(IV.4.14a)}$$

$$\delta_{m\pm k,n\pm k} = \delta_{mn} \qquad \text{(IV.4.14b)}$$

$$f_m\, \delta_{mn} = f_n\, \delta_{mn} \qquad \text{(IV.4.14c)}$$

bağıntıları, söz konusu bağıntının elde edilmesini sağlar. (IV.4.12a,b) bağıntıları (IV.4.13) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\alpha_m\, \delta_{m',m-1} = \beta^{*}_{m'}\, \delta_{m,m'+1} \qquad \text{(IV.4.13a)}$$

bulunur. (IV.4.14a,b) bağıntılarına göre

$$\delta_{m,m'+1} = \delta_{m-1,m'} = \delta_{m',m-1}$$

yazılabilir. O hâlde (IV.4.13a) bağıntısı, (IV.4.14c) bağıntısını kullanarak

$$\alpha_m\, \delta_{m',m-1} = \beta^{*}_{m'}\, \delta_{m',m-1} = \beta^{*}_{m-1}\, \delta_{m',m-1} \qquad \text{(IV.4.13b)}$$

şeklini alır. Bu son bağıntıdan

$$\alpha_m = \beta^{*}_{m-1} \qquad \text{(IV.4.15)}$$

sonucuna varılır. (IV.4.15) bağıntısında bir kez m yerine $m+1$ yazarak, bir kez de kompleks eşlenik alarak

$$\alpha_{m+1} = \beta^{*}_{m}\,, \qquad \beta_{m-1} = \alpha^{*}_{m}$$

bağıntıları elde edilir. Bu bağıntılardan birincisi β_m ile ve ikincisi de α_m ile çarpılırsa

$$\beta_m\, \alpha_{m+1} = |\,\beta_m\,|^2\,, \qquad \alpha_m\, \beta_{m-1} = |\,\alpha_m\,|^2$$

bağıntıları bulunur. Bu bağıntılar (IV.4.11a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$|\,\beta_m\,|^2 = (j-m)\,(j+m+1)\,\hbar^2$$

$$|\,\alpha_m\,|^2 = (j+m)\,(j-m+1)\,\hbar^2$$

veyâ

$$|\beta_m| = \hbar\,[(j-m)(j+m+1)]^{1/2} \qquad \text{(IV.4.16a)}$$

$$|\alpha_m| = \hbar\,[(j+m)(j-m+1)]^{1/2} \qquad \text{(IV.4.16b)}$$

sonuçlarına varılır. Böylece $\beta_m(j)$ ve $\alpha_m(j)$ kompleks sayılarının modülleri hesaplandı. Bu kompleks sayıların argümanları θ ve θ' ise

$$\beta_m = |\beta_m|\,e^{i\theta}, \qquad \alpha_m = |\alpha_m|\,e^{i\theta'} \qquad \text{(IV.4.16c)}$$

yazılabilir. $|\beta_{m-1}| = |\alpha_m|$ olduğu için

$$\beta_{m-1} = |\beta_{m-1}|\,e^{i\theta} = |\alpha_m|\,e^{i\theta}$$

ve buradan

$$\beta^*_{m-1} = |\alpha_m|\,e^{-i\theta}$$

bulunur. (IV.4.15) bağıntısında yerlerine yazarak

$$|\alpha_m|\,e^{i\theta'} = |\alpha_m|\,e^{-i\theta}$$

veyâ

$$\theta' = -\theta \qquad \text{(IV.4.17)}$$

sonucuna varılır. ψ_{jm} özvektörünün

$$J_z\,\psi_{jm} = m\hbar\,\psi_{jm} \qquad \text{(IV.4.1b)}$$

özdeğer denklemini sağladığını biliyoruz. C keyfî bir sâbit olmak üzere $C\,\psi_{jm}$ vektörü de aynı özdeğer denklemini sağlar. ψ_{jm} ve $C\,\psi_{jm}$ aynı kuvantum hâlini gösteren vektörler olduğuna göre normları da aynı olmalıdır. O hâlde,

$$(C\,\psi_{jm}\,,\,C\,\psi_{jm}) = (\psi_{jm}\,,\,\psi_{jm}) \qquad \text{(i)}$$

veyâ

$$\int |C\,\psi_{jm}|^2\,d\tau = \int |\psi_{jm}|^2\,d\tau \qquad \text{(ii)}$$

yazılabilir. Bu bağıntılar

$$|C\,\psi_{jm}|^2 = |\psi_{jm}|^2 \qquad \text{(iii)}$$

yazmayla eşdeğerlidir. (i), (ii) ve (iii) bağıntılarından herhangi birinin doğru olabilmesi için C keyfî sâbiti

$$|C|^2 = 1 \qquad \text{(iv)}$$

bağıntısını gerçeklemelidir. α keyfî bir reel sâbit olmak üzere C keyfî sâbiti

$$C = e^{i\alpha} \qquad \text{(v)}$$

şeklinde seçilirse (iv) bağıntısını gerçekler. $e^{i\alpha}$ ya *faz çarpanı* ve α ya *faz açısı* adı verilir. Şimdi η operatörünün

$$\eta_{m'm} = (\psi_{jm'}\ ,\ \eta\ \psi_{jm})$$

şeklindeki matris elemanında ψ_{jm} vektörü yerine $e^{i\alpha}\ \psi_{jm}$ vektörünü ve $\psi_{jm'}$ vektörü yerine de $e^{i\alpha'}\ \psi_{jm'}$ vektörünü alalım :

$$\eta_{m'm} = (\psi_{jm'}\ e^{i\alpha'}\ ,\ \eta\ \psi_{jm}\ e^{i\alpha})$$

veyâ

$$\eta_{m'm} = e^{i(\alpha-\alpha')}\ (\psi_{jm'}\ ,\ \eta\ \psi_{jm}) \tag{vi}$$

bulunur. α ve α' faz açıları arasındaki farka *faz farkı* adı verilir ve

$$\varphi = \alpha - \alpha' \tag{vii}$$

ile gösterilir. O hâlde, (IV.4.12a) bağıntısının yardımı ile (vi) bağıntısı

$$\eta_{m'm} = e^{i\varphi}\ \beta_m\ \delta_{m',m+1} \tag{viii}$$

şeklinde yazılabilir. Benzer şekilde, (IV.4.12b) bağıntısı

$$\overset{+}{\eta}_{m'm} = e^{-i\varphi}\ \alpha_m\ \delta_{m',m-1} \tag{ix}$$

şekline dönüşür. (viii) ve (ix) bağıntılarındaki φ faz farkı keyfîdir ve $e^{\pm i\varphi}$ ye *keyfî faz çarpanı* adı verilir. φ keyfî olduğu için $\varphi = 0$ alınabilir ve (viii) ve (ix) bağıntıları yeniden (IV.4.12a,b) bağıntılarına dönüşür. (IV.4.17) bağıntısını kullanarak (IV.4.16c) bağıntıları

$$\beta_m = |\beta_m|\ e^{i\theta}\ , \qquad \alpha_m = |\alpha_m|\ e^{-i\theta} \tag{IV.4.16d}$$

şeklinde yazılabilir. (IV.4.16d) bağıntıları (IV.4.12a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa bu bağıntılar

$$\eta_{m'm} = e^{i\theta}\ |\beta_m|\ \delta_{m',m+1} \tag{IV.4.18a}$$

$$\overset{+}{\eta}_{m'm} = e^{-i\theta}\ |\alpha_m|\ \delta_{m',m-1} \tag{IV.4.18b}$$

şekillerini alırlar. (IV.4.18a) bağıntısında $e^{i\theta}$, (viii) bağıntısına benzer şekilde keyfî faz çarpanıdır. $\theta = 0$ alınırsa ve (IV.4.16a,b) bağıntıları (IV.4.18a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\eta_{m'm} = \hbar\ [(j-m)(j+m+1)]^{1/2}\ \delta_{m',m+1} \tag{IV.4.19a}$$

$$\overset{+}{\eta}_{m'm} = \hbar\ [(j+m)(j-m+1)]^{1/2}\ \delta_{m',m-1} \tag{IV.4.19b}$$

sonuçlarına varılır. Şüphesiz (IV.1.8a,b) bağıntısılarından elde edilen

$$J_x = \frac{1}{2}(\eta^+ + \eta) \tag{IV.4.20a}$$

$$J_y = \frac{i}{2}(\eta^+ - \eta) \tag{IV.4.20b}$$

bağıntılarının yardımı ile $(J_x)_{m'm}$ ve $(J_y)_{m'm}$ matris elemanları kolayca yazılabilir.

$\theta=0$ için $\beta_m=|\beta_m|$, $\alpha_m=|\alpha_m|$ olduğundan, (IV.4.16a,b) bağıntıları (IV.4.7a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$(J_x + iJ_y)\,\psi_{jm} = \hbar\,[(j-m)(j+m+1)]^{1/2}\,\psi_{j,m+1} \qquad \text{(IV.4.21a)}$$

$$(J_x - iJ_y)\,\psi_{jm} = \hbar\,[(j+m)(j-m+1)]^{1/2}\,\psi_{j,m-1} \qquad \text{(IV.4.21b)}$$

sonuçlarına varılır. Son olarak, (IV.4.21a,b) bağıntılarının $\mathbf{J}=\mathbf{L}$ özel hâline ait bir uygulaması olan

$$(L_x + iL_y)\,Y_{lm} = \hbar\,[(l-m)(l+m+1)]^{1/2}\,Y_{l,m+1} \qquad \text{(IV.4.22a)}$$

$$(L_x - iL_y)\,Y_{lm} = \hbar\,[(l+m)(l-m+1)]^{1/2}\,Y_{l,m-1} \qquad \text{(IV.4.22b)}$$

bağıntılarını yazalım. Bu bağıntılardan paragraf (IV.8) de yararlanacağız.

(IV.5) SPİN AÇISAL MOMENTUMU VEKTÖR OPERATÖRÜ, ELEKTRONUN SPİNİ

SCHRÖDİNGER dalga denklemi atomlardan çıkan ışığa ait spektroskopik çizgilerin deneylere genellikle çok iyi uyan bir açıklamasını vermekle beraber, deneysel sonuçlara uymayan küçük farklar bulunmuştur. Bu küçük farklar, elektronun yörünge açısal momentumuna ek olarak büyüklüğü $\hbar/2$ olan ve *spin* adı verilen bir iç açısal momentuma sâhip olduğu farz edilerek açıklanabilir. Bu iç açısal momentum, sanki elektronun kendi etrafında dönen bir katı cisimmiş gibi farz edilmesi ile açıklanmaya çalışıldı, fakat hiçbir başarı elde edilemedi. Daha sonra DİRAC elektron için bir rölâtivistik dalga denklemi elde etti. DİRAC ın rölâtivistik dalga denklemi elektronun spininin varlığını kendiliğinden ortaya koymaktadır. DİRAC denkleminin rölâtivistik olmayan yaklaşık hâli için elektron gene sanki $\hbar/2$ büyüklüğündeki bir spine sâhipmiş gibi davranmaktadır. Bu sebepten ötürü, bu bölümde PAULİ tarafından ortaya atılan spinin rölâtivistik olmayan teorisini inceleyeceğiz ve nereden geldiğini anlamaya çalışmadan spinin açısal momentuma eklenmesi gerektiğini ampirik olarak kabul edeceğiz.

Spin açısal momentumu vektör operatörü $\mathbf{J}=\mathbf{S}$ ile gösterilir ve açısal momentum kuvantum sayısı da $j=s=1/2$ bağıntısı ile tanımlanır. $\mathbf{S}^2$ ve S_z operatörlerinin ortak özvektörlerine *spinör* adı verilir ve

$$\psi_{1/2,m} \equiv \chi_m$$

ile gösterilir. $\mathbf{J}=\mathbf{S}$ ve $j=s=1/2$ için

$$j(j+1) = s(s+1) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) = \frac{3}{4}$$

olduğundan, (IV.1.25a,b) bağıntıları

$$S^2 \chi_m = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_m \tag{IV.5.1a}$$

$$S_z \chi_m = m\hbar \chi_m \tag{IV.5.1b}$$

şekillerini alır. (IV.5.1b) bağıntısındaki m özdeğerlerinin sayısı

$$2j + 1 = 2s + 1 = 1 + 1 = 2$$

dir. (IV.1.22) bağıntısına göre iki farklı m özdeğeri

$$-\frac{1}{2} \leqq m \leqq \frac{1}{2} \tag{IV.5.2a}$$

bağıntısı ile belirlidir. (IV.5.2a) bağıntısına göre

$$m = \pm \frac{1}{2} \tag{IV.5.2b}$$

yazılabilir. O hâlde, iki farklı özvektör veyâ spinör vardır ve bu spinörler için

$$\chi_{1/2} \equiv \alpha, \qquad \chi_{-1/2} \equiv \beta \tag{IV.5.3}$$

tanımları yapılırsa (IV.5.1b) bağıntısı

$$S_z \alpha = \frac{1}{2} \hbar \alpha, \qquad S_z \beta = -\frac{1}{2} \hbar \beta \tag{IV.5.4}$$

şeklinde iki bağıntı verir.

Şimdi **S** spin vektör operatörü yerine

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} \tag{IV.5.5}$$

bağıntısı ile $\boldsymbol{\sigma}$ *boyutsuz spin vektör operatörünü* tanımlayalım. Öte yandan, açısal momentum vektör operatörünün (IV.1.1) ile verilen genel tanım bağıntılarına göre

$$\mathbf{S} \times \mathbf{S} = i\hbar \mathbf{S}, \qquad \mathbf{S}^+ = \mathbf{S} \tag{IV.5.6}$$

bağıntıları yazılabilir. Eğer (IV.5.5) bağıntısı (IV.5.6) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\frac{1}{4} \hbar^2 \boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\sigma} = i\hbar \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}, \qquad \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}^+ = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}$$

veyâ sâdeleştirerek

$$\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\sigma} = 2i \boldsymbol{\sigma}, \qquad \boldsymbol{\sigma}^+ = \boldsymbol{\sigma} \tag{IV.5.7}$$

bağıntıları elde edilir. Bu bağıntıların birincisinden, $\boldsymbol{\sigma}$ vektör operatörünün σ_x, σ_y, σ_z kartezyen bileşenleri cinsinden

$$\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i\, \sigma_x \tag{IV.5.8a}$$

$$\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\, \sigma_y \tag{IV.5.8b}$$

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\, \sigma_z \tag{IV.5.8c}$$

şeklinde üç bağıntı bulunur. Ayrıca (IV.5.1a,b) bağıntılarında (IV.5.5) bağıntısına bakarak

$$\mathbf{S}^2 = \frac{1}{4} \hbar^2 \boldsymbol{\sigma}^2, \qquad S_z = \frac{1}{2} \hbar\, \sigma_z$$

yazılırsa, sâdeleştirerek

$$\boldsymbol{\sigma}^2 \chi_m = 3\, \chi_m \tag{IV.5.9a}$$

$$\sigma_z \chi_m = 2m\, \chi_m \tag{IV.5.9b}$$

özdeğer denklemleri elde edilir. Öte yandan, (IV.5.2b) bağıntısı

$$2m = \pm 1 \tag{IV.5.2b}$$

şeklinde de yazılabilir. Böylece, (IV.5.3) tanım bağıntılarına göre (IV.5.9b) bağıntısı

$$\sigma_z \alpha = \alpha, \qquad \sigma_z \beta = -\beta \tag{IV.5.10}$$

şekillerindeki iki özdeğer denklemini verir. Eğer (IV.5.9b) bağıntısı soldan σ_z operatörü ile çarpılırsa

$$\sigma_z^2 \chi_m = 2m\, \sigma_z \chi_m = 4m^2 \chi_m$$

elde edilir ve (IV.5.2b) bağıntısına göre de $4m^2 = 1$ olduğundan

$$\sigma_z^2 \chi_m = \chi_m \tag{IV.5.11}$$

sonucuna varılır.

Şimdi de $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ operatörlerinin matris temsillerini bulmaya çalışalım. (IV.4.4) bağıntısına göre $\mathbf{S}^2$ matrisi I birim matrisi ile orantılıdır :

$$\mathbf{S}^2 = s(s+1)\hbar^2 I = \frac{3}{4} \hbar^2 I \tag{IV.5.12a}$$

(IV.5.5) bağıntısının yardımı ile bu bağıntı

$$\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 3I \tag{IV.5.12b}$$

bağıntısına dönüşür. (IV.5.11) bağıntısına göre σ_z^2 operatörünün özdeğerleri m ye bağlı değildir ve 1 e eşittir. Öte yandan

$$(\chi_{m'}, \chi_m) = \delta_{m'm} \tag{IV.5.13}$$

olduğundan (IV.5.11) bağıntısının her iki yanı soldan $\chi_{m'}$ ile skaler olarak çarpılırsa

$$(\sigma_z^2)_{m'm} = (\chi_{m'}\,,\, \sigma_z^2\, \chi_m) = \delta_{m'm} \qquad \text{(IV.5.14)}$$

elde edilir, yâni σ_z^2 operatörünün matris temsili I birim matrisinden ibarettir. Şüphesiz x, y, z koordinat eksenleri biribirlerine eşdeğerdir ve bunun doğal bir sonucu olarak σ_x^2 ve σ_y^2 operatörlerinin matris temsilleri de I birim matrisine eşittir. O hâlde,

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \qquad \text{(IV.5.15)}$$

yazılabilir. (IV.5.15) bağıntıları (IV.5.12b) bağıntısı ile tutarlıdır. Şimdi (IV.5.8c) bağıntısının her iki yanını bir kez soldan ve bir kez de sağdan σ_y operatörü ile çarpalım :

$$\sigma_y\, \sigma_x\, \sigma_y - \sigma_y^2\, \sigma_x = 2i\, \sigma_y\, \sigma_z$$

$$\sigma_x\, \sigma_y^2 - \sigma_y\, \sigma_x\, \sigma_y = 2i\, \sigma_z\, \sigma_y$$

bağıntıları bulunur. $\sigma_y^2 = I$ olduğu için ve

$$I\, \sigma_x = \sigma_x\, I = \sigma_x$$

olduğu için bu bağıntılar

$$\sigma_y\, \sigma_x\, \sigma_y - \sigma_x = 2i\, \sigma_y\, \sigma_z$$

$$\sigma_x - \sigma_y\, \sigma_x\, \sigma_y = 2i\, \sigma_z\, \sigma_y$$

şekillerini alırlar. Son iki bağıntı taraf tarafa toplanırsa

$$2i\,(\sigma_y\, \sigma_z + \sigma_z\, \sigma_y) = 0$$

veyâ

$$\sigma_y\, \sigma_z + \sigma_z\, \sigma_y = 0 \qquad \text{(IV.5.16a)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntıyı sağlayan σ_y ve σ_z operatörlerinin veyâ matrislerinin antikomütatif oldukları söylenir. Benzer işlemlerle

$$\sigma_z\, \sigma_x + \sigma_x\, \sigma_z = 0 \qquad \text{(IV.5.16b)}$$

$$\sigma_x\, \sigma_y + \sigma_y\, \sigma_x = 0 \qquad \text{(IV.5.16c)}$$

bağıntıları bulunur. (IV.5.16a) bağıntısı (IV.5.8a) bağıntısı ile bir kez taraf tarafa toplanır ve bir kez de taraf tarafa çıkarılır ve sonuçlar 2 ye bölünürse

$$\sigma_y\, \sigma_z = -\, \sigma_z\, \sigma_y = i\, \sigma_x \qquad \text{(IV.5.17a)}$$

bağıntıları bulunur. Benzer işlemler (IV.5.16b,c) ve (IV.5.8b,c) bağıntıları arasında yinelenirse

$$\sigma_z\, \sigma_x = -\, \sigma_x\, \sigma_z = i\, \sigma_y \qquad \text{(IV.5.17b)}$$

$$\sigma_x\, \sigma_y = -\, \sigma_y\, \sigma_x = i\, \sigma_z \qquad \text{(IV.5.17c)}$$

bağıntıları bulunur. (IV.5.15) ve (IV.5.17a,b,c) bağıntıları $\sigma_x\,, \sigma_y\,, \sigma_z$ matrisleri arasında matris temsiline bağlı olmayan dokuz bağıntıdır. Şüphesiz söz konusu olan bu dokuz bağıntı σ_x, σ_y, σ_z operatörleri için de geçerlidir. $2s+1=2$ olduğu için $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ matrisleri 2×2 nci mertebeden kare matrislerdir $S_z = \frac{1}{2}\hbar\,\sigma_z$ nin köşegen olduğu temsilde S_z matrisinin elemanları (IV.4.3b) bağıntısına göre

$$(S_z)_{m'm} = m\hbar\,\delta_{m'm}$$

şeklindedir. O hâlde S_z matrisi

$$S_z = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{IV.5.18}$$

şeklindedir. Öte yandan, $j = s = 1/2$ için (IV.4.19a,b) bağıntıları

$$\eta_{m'm} = \hbar\left[\left(\frac{1}{2}-m\right)\left(\frac{3}{2}+m\right)\right]^{1/2}\delta_{m',m+1} \tag{IV.5.19a}$$

$$\overset{+}{\eta}_{m'm} = \hbar\left[\left(\frac{1}{2}+m\right)\left(\frac{3}{2}-m\right)\right]^{1/2}\delta_{m',m-1} \tag{IV.5.19b}$$

şekillerini alırlar. Bu bağıntılara göre η ve η^+ matrislerinin yalnız birer elemanları sıfırdan farklıdır. Söz konusu matris elemanları

$$(\eta)_{1/2,-1/2} = \hbar, \qquad (\eta^+)_{-1/2,1/2} = \hbar \tag{IV.5.20}$$

olduğundan

$$\eta = \hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}, \qquad \eta^+ = \hbar\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{IV.5.21}$$

elde edilir. (IV.4.20a,b) bağıntılarına göre

$$S_x = \frac{1}{2}(\eta^+ + \eta), \qquad S_y = \frac{i}{2}(\eta^+ - \eta) \tag{IV.5.22}$$

olduğundan

$$S_x = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \qquad S_y = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \tag{IV.5.23}$$

sonuçlarına varılır. (IV.5.5) tanım bağıntısına göre (IV.5.23) ve (IV.5.18) bağıntılarından σ_x, σ_y, σ_z matrisleri elde edilir :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{IV.5.24}$$

(IV.5.24) bağıntısı ile verilen matrislere *PAULİ spin matrisleri* adı verilir. Şüphesiz bu matrisler yukarda söz konusu olan dokuz bağıntıyı sağlarlar.

Şimdi (IV.5.9a,b) özdeğer denklemlerindeki χ_m özvektörlerini (yâni spinörlerini) bulalım.

$$\sigma_z \chi = \lambda \chi \tag{IV.5.25}$$

özdeğer denklemindeki χ spinörü

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{IV.5.26}$$

şeklindeki bir sütun vektörü ile temsil edilir. O hâlde, (IV.5.25) özdeğer denklemi

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{IV.5.27}$$

şeklinde veyâ

$$(\sigma_z - \lambda I)\chi \equiv \begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & -1-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \tag{IV.5.27a}$$

şeklinde yazılabilir ve

$$(1-\lambda)\, a = 0, \qquad -(1+\lambda)\, b = 0 \tag{IV.5.28}$$

şeklinde iki lineer homogen denkleme ayrılır. (IV.5.27a) denkleminin sıfırdan farklı bir çözümünün olabilmesi için katsayılar matrisinin determinantı sıfır olmalıdır. Böylece

$$\operatorname{Det}(\sigma_z - \lambda I) \equiv \begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{IV.5.29}$$

veyâ

$$-(1+\lambda)(1-\lambda) = 0$$

denklemi bulunur ve

$$\lambda_1 = 1, \qquad \lambda_2 = -1 \tag{IV.5.30}$$

şeklinde iki çözüm elde edilir. (IV.5.25) özdeğer denklemi (IV.5.9b) özdeğer denklemi ile karşılaştırılırsa

$$\lambda = 2m \tag{IV.5.31}$$

bağıntısı bulunur. O hâlde

$$m = 1/2 \text{ için}: \ \lambda_1 = 1, \quad m = -1/2 \text{ için}: \ \lambda_2 = -1 \tag{IV.5.30a}$$

sonuçlarına varılır. Bu özdeğerlere ait spinörler

$$\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}, \qquad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{IV.5.32}$$

olduğuna göre (IV.5.28) denklem sisteminden

$$\lambda_1 = 1 \quad \text{için}: \quad a_1 \neq 0, \quad b_1 = 0$$

$$\lambda_2 = -1 \quad \text{için}: \quad a_2 = 0, \quad b_2 \neq 0$$

bulunur ve (IV.5.32) spinörleri

$$\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{IV.5.33}$$

şekillerini alır. χ spinörü normlanmışsa

$$\chi^+ \chi = 1 \tag{IV.5.34a}$$

veyâ (IV.5.26) ya bakarak

$$(a^* \; b^*) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a^* a + b^* b = |a|^2 + |b|^2 = 1 \tag{IV.5.34b}$$

bağıntısını sağlamalıdır. O hâlde, (IV.5.32) bağıntısı ile verilen spinörlerin normlama şartları

$$|a_1|^2 + |b_1|^2 = |a_2|^2 + |b_2|^2 = 1 \tag{IV.5.35}$$

şeklinde olmalıdır. Böylece (IV.5.33) teki spinörlerin normlama şartları

$$|a_1|^2 = |b_2|^2 = 1 \tag{IV.5.35a}$$

veyâ

$$a_1 = e^{i\varphi_1}, \qquad b_2 = e^{i\varphi_2} \tag{IV.5.35b}$$

sonuçlarını verir. φ_1 ve φ_2 keyfî faz sâbitleri olduklarından $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$ seçilebilir ve böylece (IV.5.33) bağıntısındaki spinörlerin normlanmış şekilleri olarak, (IV.5.3) tanımlarını da hatırlayarak

$$\chi_{1/2} \equiv \alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi_{-1/2} \equiv \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{IV.5.33a}$$

bulunur. σ_z operatörü veyâ matrisi HERMİTsel olduğundan, bu operatörün özvektörleri olan α ve β spinörleri dik olmalı, yâni

$$\alpha^+ \beta = \beta^+ \alpha = 0 \tag{IV.5.36}$$

diklik bağıntısını sağlamalıdır. Gerçekten, (IV.5.33a) ile verilen α ve β spinörleri söz konusu diklik bağıntısını sağlarlar.

Şimdi de kartezyen taban vektörleri cinsinden ifâde edilen

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{e}_x \sigma_x + \mathbf{e}_y \sigma_y + \mathbf{e}_z \sigma_z$$

spin vektör operatörünün,

$$\mathbf{n} = n_x \mathbf{e}_x + n_y \mathbf{e}_y + n_z \mathbf{e}_z$$

birim vektörü ile tanımlanan keyfî bir eksen üzerindeki izdüşümü olan

$$\sigma_n = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z \tag{IV.5.37}$$

operatörünün özdeğerlerini ve özvektörlerini bulmaya çalışacağız. (IV.5.24) bağıntılarına göre

$$n_x \sigma_x + n_y \sigma_y = n_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + n_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & 0 \end{pmatrix}$$

olduğu için

$$\sigma_n = \mathbf{n} . \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & - n_z \end{pmatrix} \tag{IV.5.37a}$$

bulunur. Böylece

$$\sigma_n \chi = \lambda \chi \tag{IV.5.38}$$

özdeğer denklemi (IV.5.26) bağıntısına göre

$$\begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & - n_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{IV.5.38a}$$

şeklinde veyâ

$$(\sigma_n - \lambda I) \chi \equiv \begin{pmatrix} n_z - \lambda & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & - n_z - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \tag{IV.5.38b}$$

şeklinde de yazılabilir ve bu matris bağıntısı

$$(n_z - \lambda) a + (n_x - i n_y) b = 0 \tag{IV.5.39a}$$

$$(n_x + i n_y) a - (n_z + \lambda) b = 0 \tag{IV.5.39b}$$

şeklinde iki lineer homogen denkleme ayrılır. Bu denklem sisteminin sıfırdan farklı bir çözümünün olabilmesi için katsayılar matrisinin determinantı sıfır olmalıdır. Böylece

$$\operatorname{Det} (\sigma_n - \lambda I) = \begin{vmatrix} n_z - \lambda & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & - n_z - \lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{IV.5.40}$$

veyâ

$$(\lambda - n_z)(\lambda + n_z) - (n_x - i n_y)(n_x + i n_y) = 0$$

$$\lambda^2 - n_z^2 - (n_x^2 + n_y^2) = 0$$

denklemi bulunur. Öte yandan

$$\mathbf{n} . \mathbf{n} = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1 \tag{IV.5.41}$$

olduğundan,

$$\lambda^2 - 1 = 0 \tag{IV.5.40a}$$

sonucuna varılır. Gerçekten, σ_x, σ_y, σ_z matrisleri arasındaki dokuz bağıntının yardımı ile ve (IV.5.41) bağıntısını kullanarak (IV.5.37) bağıntısından

$$\sigma_n^2 = (n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z)^2 = I \tag{IV.5.42}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (IV.5.38) özdeğer bağıntısını soldan σ_n ile çarparak

$$\sigma_n^2 \chi = \lambda \, \sigma_n \chi = \lambda^2 \chi$$

bulunur ve (IV.5.42) bağıntısından ötürü

$$\sigma_n^2 \chi = I \chi = \chi = \lambda^2 \chi$$

veyâ gene

$$\lambda^2 - 1 = 0 \tag{IV.5.40a}$$

bağıntısı bulunur. Görülüyor ki, spin vektör operatörünün herhangi bir eksen üzerindeki izdüşümünün özdeğerleri her zaman ± 1 dir. Şimdi $\lambda_1 = 1$ özdeğerine ait özvektörü bulalım. $\lambda_1 = 1$ için (IV.5.39a,b) denklemleri

$$(1 - n_z)\, a_1 = (n_x - i n_y)\, b_1 \tag{IV.5.43a}$$

$$(1 + n_z)\, b_1 = (n_x + i n_y)\, a_1 \tag{IV.5.43b}$$

şekillerini alırlar. Eğer bu bağıntıların her iki yanlarının modül kareleri alınırsa

$$(1 - n_z)^2 \, | a_1 |^2 = (n_x^2 + n_y^2) \, | b_1 |^2$$

$$(1 + n_z)^2 \, | b_1 |^2 = (n_x^2 + n_y^2) \, | a_1 |^2$$

veyâ (IV.5.41) bağıntısını kullanarak

$$(1 - n_z)^2 \, | a_1 |^2 = (1 - n_z^2) \, | b_1 |^2$$

$$(1 + n_z)^2 \, | b_1 |^2 = (1 - n_z^2) \, | a_1 |^2$$

elde edilir. Gerekli kısaltmalar yapılırsa

$$(1 - n_z) \, | a_1 |^2 = (1 + n_z) \, | b_1 |^2$$

$$(1 + n_z) \, | b_1 |^2 = (1 - n_z) \, | a_1 |^2$$

bulunur. Bu son iki bağıntı biribirinin aynıdır ve

$$(| a_1 |^2 + | b_1 |^2)\, n_z = | a_1 |^2 - | b_1 |^2$$

şeklinde yazılabilir. (IV.5.35) normlama bağıntısının yardımı ile

$$| a_1 |^2 + | b_1 |^2 = 1, \qquad | a_1 |^2 - | b_1 |^2 = n_z$$

bağıntıları bulunur. Bu iki bağıntıdan $| a_1 |^2$ ve $| b_1 |^2$ çözülürse

$$| a_1 |^2 = \frac{1}{2}(1 + n_z), \qquad | b_1 |^2 = \frac{1}{2}(1 - n_z) \tag{IV.5.44}$$

sonuçlarına varılır. Öte yandan, $a_1 = | a_1 | \exp(i\, \alpha_1)$ olduğundan, keyfî faz açısı $\alpha_1 = 0$ seçilebilir ve böylece $a_1 = | a_1 |$ alınabilir. O hâlde, (IV.5.43b) ve (IV.5.44) bağıntılarının yardımı ile

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+n_z)^{1/2}, \qquad b_1 = \frac{n_x + i n_y}{\sqrt{2}\,(1+n_z)^{1/2}} \tag{IV.5.45}$$

sonuçlarına varılır. Öte yandan

$$a\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + b\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

özdeşliğinde (IV.5.26) ve (IV.5.33a) bağıntıları yerlerine yazılırsa χ spinörü için

$$\chi = a\,\alpha + b\,\beta \tag{IV.5.46}$$

bağıntısı bulunur. Ayrıca (IV.5.38) özdeğer denklemi, $\lambda = 2m$ olduğuna dikkat ederek

$$\sigma_n\,\chi_n(m) = 2m\,\chi_n(m) \tag{IV.5.47}$$

şeklinde yazılabilir. Böylece σ_n operatörünün iki özvektörü (IV.5.46) bağıntısına göre

$$\chi_n(1/2) = a_1\,\alpha + b_1\,\beta \tag{IV.5.46a}$$

$$\chi_n(-1/2) = a_2\,\beta + b_2\,\beta \tag{IV.5.46b}$$

şekillerinde yazılabilirler. (IV.5.45) bağıntıları (IV.5.46a) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\chi_n(1/2) = \frac{1}{\sqrt{2\,(1+n_z)}}\,[(1+n_z)\,\alpha + (n_x + i\,n_y)\,\beta] \tag{IV.5.48a}$$

sonucuna varılır. Şimdi de $\lambda_2 = -1$ özdeğerine ait özvektörü bulalım. $\lambda_2 = -1$ için (IV.5.39a,b) denklemleri

$$(1+n_z)\,a_2 = -(n_x - i\,n_y)\,b_2 \tag{IV.5.49a}$$

$$(1-n_z)\,b_2 = -(n_x + i\,n_y)\,a_2 \tag{IV.5.49b}$$

şekillerini alırlar. Eğer bu bağıntıların her iki yanlarının modül kareleri alınırsa

$$(1+n_z)^2\,|a_2|^2 = (n_x^2 + n_y^2)\,|b_2|^2$$

$$(1-n_z)^2\,|b_2|^2 = (n_x^2 + n_y^2)\,|a_2|^2$$

bulunur. Eğer bu bağıntılar evvelce elde ettiğimiz $\lambda_1 = 1$ özdeğerine ait bağıntılarla karşılaştırılırsa

$$|a_2|^2 = |b_1|^2, \qquad |b_2|^2 = |a_1|^2$$

olduğu görülür ve bu sonuçlar (IV.5.35) normlama bağıntıları ile de tutarlıdır. O hâlde (IV.5.44) bağıntılarını

$$|a_2|^2 = |b_1|^2 = \frac{1}{2}(1-n_z), \qquad |b_2|^2 = |a_1|^2 = \frac{1}{2}(1+n_z) \tag{IV.5.44a}$$

şeklinde tekrar yazabiliriz. Öte yandan $a_2 = |a_2|$ seçilebilir ve (IV.5.49b) ve (IV.5.44a) bağıntılarının yardımı ile

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - n_z)^{1/2}, \qquad b_2 = -\frac{n_x + i n_y}{\sqrt{2}(1 - n_z)^{1/2}} \qquad \text{(IV.5.50)}$$

sonuçlarına varılır ve bu sonuçlar (IV.5.46b) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\chi_n(-1/2) = \frac{1}{\sqrt{2(1 - n_z)}}\,[(1 - n_z)\,\alpha - (n_x + i n_y)\,\beta] \qquad \text{(IV.5.48b)}$$

sonucuna varılır.

Şimdi de (IV.5.48a,b) bağıntılarının bazı özel hâllerini bulalım. $\mathbf{n} = \mathbf{e}_x$ veyâ $n_x = 1$, $n_y = n_z = 0$ için (IV.5.37) bağıntısına göre $\sigma_n = \sigma_x$ operatörünün özvektörleri elde edilir. (IV.5.48a,b) bağıntılarında $n_x = 1$, $n_y = n_z = 0$ yazılırsa

$$\chi_x(1/2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.5.51a)}$$

$$\chi_x(-1/2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.5.51b)}$$

sonuçlarına varılır. $\mathbf{n} = \mathbf{e}_y$ veyâ $n_y = 1$, $n_x = n_z = 0$ için (IV.5.37) bağıntısına göre $\sigma_n = \sigma_y$ operatörünün özvektörleri elde edilir. (IV.5.48a,b) bağıntılarında $n_y = 1$, $n_x = n_z = 0$ yazılırsa

$$\chi_y(1/2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + i\beta) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.5.52a)}$$

$$\chi_y(-1/2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - i\beta) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.5.52b)}$$

sonuçlarına varılır. $\mathbf{n} = \mathbf{e}_z$ veyâ $n_z = 1$, $n_x = n_y = 0$ için (IV.5.37) bağıntısına göre $\sigma_n = \sigma_z$ operatörünün özvektörleri elde edilir. Fakat $n_z = 1$, $n_x = n_y = 0$ için (IV.5.48b) bağıntısındaki ikinci terim belirsizdir. Belirli çözümü bulabilmek için, $b_2 = |b_2|$ seçerek (IV.5.49a) ve (IV.5.44a) bağıntılarının yardımı ile

$$a_2 = -\frac{n_x - i n_y}{\sqrt{2}(1 + n_z)^{1/2}}, \qquad b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + n_z)^{1/2} \qquad \text{(IV.5.53)}$$

sonuçlarına varılır ve bu sonuçlar (IV.5.46b) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\chi_n(-1/2) = \frac{1}{\sqrt{2(1 + n_z)}}\,[-(n_x - i n_y)\,\alpha + (1 + n_z)\,\beta] \qquad \text{(IV.5.48c)}$$

sonucuna varılır. Şimdi de (IV.5.48a,c) bağıntılarında $n_z = 1$, $n_x = n_y = 0$ yazılırsa

$$\chi_z(1/2) = \alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{IV.5.54a}$$

$$\chi_z(-1/2) = \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{IV.5.54b}$$

sonuçlarına varılır. Bu sonuçlar da olması gerektiği gibi (IV.5.33a) sonuçlarının aynıdır.

(IV.6) İKİ AÇISAL MOMENTUM VEKTÖR OPERATÖRÜNÜN TOPLAMI

Paragraf (IV.4) te bir açısal momentum vektör operatörünün skaler karesinin ve z bileşeninin ortak özvektörlerinin, bu operatörlerin köşegen matris temsillerini veren bir *taban vektörleri takımı* oluşturduğunu görmüştük. Şimdi de iki açısal momentum vektör operatörüne sâhip bir sisteme ait özvektörlerin bulunması demek olan daha genel problemi inceleyeceğiz. Farklı iki açısal momentum vektör operatörü, ya tek bir parçacığa ait yörünge ve spin açısal momentumları şeklinde, ya da farklı iki parçacığa ait açısal momentumlar şeklinde ortaya çıkar. Öte yandan, belirli açısal momentumlara sâhip kuvantum hâllerinin arasında saçılma veyâ emisyon-absorpsiyon işlemleri olduğu zaman, birden fazla açısal momentum problemi söz konusu olur.

$\mathbf{J}_1$ ve $\mathbf{J}_2$ açısal momentumlarına ait özvektörler mütekabilen $\psi_{j_1m_1}$ ve $\psi_{j_2m_2}$ olsunlar. O hâlde,

$$\mathbf{J}_1^2\,\psi_{j_1m_1} = j_1(j_1+1)\,\hbar^2\,\psi_{j_1m_1}\,, \qquad \mathbf{J}_2^2\,\psi_{j_2m_2} = j_2(j_2+1)\,\hbar^2\,\psi_{j_2m_2} \tag{IV.6.1a}$$

$$J_{1z}\,\psi_{j_1m_1} = m_1\,\hbar\,\psi_{j_1m_1}\,, \qquad J_{2z}\,\psi_{j_2m_2} = m_2\,\hbar\,\psi_{j_2m_2} \tag{IV.6.1b}$$

özdeğer denklemleri yazılabilir. Notasyonu basitleştirmek için her iki özvektör *takımı* için de aynı ψ *sembolü kullanılmıştır.* Fakat her iki özvektör takımı da tamamen farklı uzaylara aittir ve hattâ, yörünge ve spin açısal momentumlarına ait özvektörler için olduğu gibi, yapı bakımından da farklıdır.

$$\psi_{j_1m_1}\,\psi_{j_2m_2} \tag{IV.6.2}$$

çarpımlarından oluşan taban vektörleri takımına *birleştirilmemiş temsil* adı verilir. Şüphesiz birleştirilmemiş temsil için $\mathbf{J}_1^2$, J_{1z} ve $\mathbf{J}_2^2$, J_{2z} operatörlerinin matris temsilleri köşegendir. Öte yandan, toplam açısal momentum vektör operatörü $\mathbf{J}$

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \tag{IV.6.3}$$

bağıntısı ile tanımlanır. İki açısal momentum vektör operatörünün toplamı olan vektör operatörün de gene bir açısal momentum vektör operatörü olması gerektiği ispatlanmalıdır. Bu da

$$\mathbf{J}_1 \times \mathbf{J}_1 = i\hbar\, \mathbf{J}_1\,, \qquad \mathbf{J}_2 \times \mathbf{J}_2 = i\hbar\, \mathbf{J}_2 \tag{i}$$

$$\mathbf{J}_1^+ = \mathbf{J}_1\,, \qquad \mathbf{J}_2^+ = \mathbf{J} \tag{ii}$$

bağıntılarının varlığı bilindiğine göre

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar\, \mathbf{J}, \qquad \mathbf{J}^+ = \mathbf{J}$$

bağıntılarının ispatlanması demektir. İkinci bağıntı, (IV.6.3) tanım bağıntısının her iki yanının HERMİTsel eşleniği alınarak ve (ii) bağıntıları kullanılarak hemen ispatlanabilir :

$$\mathbf{J}^+ = \mathbf{J}_1^+ + \mathbf{J}_2^+ = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 = \mathbf{J} \tag{IV.6.4}$$

Birinci bağıntının ispatı için önce (IV.6.3) vektörel tanım bağıntısına kartezyen bileşenler için eşdeğer olan üç skaler tanım bağıntısını yazalım :

$$J_x = J_{1x} + J_{2x} \tag{IV.6.3a}$$

$$J_y = J_{1y} + J_{2y} \tag{IV.6.3b}$$

$$J_z = J_{1z} + J_{2z} \tag{IV.6.3c}$$

Şimdi de (IV.6.3a) ve (IV.6.3b) bağıntılarını bir kez aynı sırada ve bir kez de ters sırada olmak üzere taraf tarafa çarpalım :

$$J_x\, J_y = J_{1x}\, J_{1y} + J_{2x}\, J_{2y} + J_{1x}\, J_{2y} + J_{2x}\, J_{1y} \tag{iii}$$

$$J_y\, J_x = J_{1y}\, J_{1x} + J_{2y}\, J_{2x} + J_{2y}\, J_{1x} + J_{1y}\, J_{2x} \tag{iv}$$

Farklı uzaylara ait açısal momentumların bileşenleri komütatif olduğundan

$$J_{1x}\, J_{2y} = J_{2y}\, J_{1x}\,, \qquad J_{2x}\, J_{1y} = J_{1y}\, J_{2x} \tag{v}$$

yazılabilir. (iii) ve (iv) bağıntılarını taraf tarafa çıkaralım. (v) bağıntılarını kullanarak

$$J_x\, J_y - J_y\, J_x = J_{1x}\, J_{1y} - J_{1y}\, J_{1x} + J_{2x}\, J_{2y} - J_{2y}\, J_{2x}$$

veyâ

$$[J_x\,, J_y] = [J_{1x}\,, J_{1y}] + [J_{2x}\,, J_{2y}] \tag{vi}$$

bulunur. Öte yandan, (i) vektörel bağıntılarına kartezyen bileşenler için eşdeğer olan skaler bağıntılardan üçüncüleri yazalım :

$$[J_{1x}\,, J_{1y}] = i\hbar\, J_{1z}\,, \qquad [J_{2x}\,, J_{2y}] = i\hbar\, J_{2z} \tag{vii}$$

(vii) bağıntılarını (vi) bağıntısında yerlerine yazarsak

$$[J_x\,, J_y] = i\hbar\, J_{1z} + i\hbar\, J_{2z} = i\hbar\,(J_{1z} + J_{2z}) \tag{viii}$$

elde edilir. Eğer (IV.6.3c) bağıntısı (viii) bağıntısında yerine yazılırsa

$$[J_x\,, J_y] = i\hbar\, J_z \tag{ix}$$

sonucuna varılır. Dairesel permütasyon yolu ile

$$[J_y , J_z] = i\hbar J_x , \qquad [J_z , J_x] = i\hbar J_y \tag{x}$$

bağıntıları bulunur. (ix) ve (x) skaler bağıntılarına eşdeğer olan vektörel bağıntı

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar \mathbf{J} \tag{IV.6.5}$$

olduğundan ispat tamamlanmış oluyor.

(IV.6.4) ve (IV.6.5) bağıntılarına göre **J** açısal momentum vektör operatörü olduğuna göre $\mathbf{J}^2$ ve J_z operatörlerinin

$$\mathbf{J}^2 \psi_{jm} = j(j+1)\hbar^2 \psi_{jm} \tag{IV.6.6a}$$

$$J_z \psi_{jm} = m\hbar \psi_{jm} \tag{IV.6.6b}$$

özdeğer denklemlerini sağlayan ψ_{jm} ortak özvektörleri vardır. ψ_{jm} temsilinde $\mathbf{J}^2$ ve J_z operatörlerinin matris temsilleri köşegen olduğu gibi $\mathbf{J}_1{}^2$ ve $\mathbf{J}_2{}^2$ operatörlerinin matris temsilleri de köşegendir. ψ_{jm} taban vektörleri takımına *birleştirilmiş temsil* adı verilir. Farklı iki matris temsilinin taban vektörleri biribirlerine bir üniter (birimsel) dönüşüm yardımı ile dönüştürülebilir. Böylece (III.19.10) bağıntısında olduğu gibi

$$\psi_j = U^+ \Phi_j \tag{IV.6.7}$$

veyâ

$$\psi_{jm} = \sum_{m'} U^*_{m'm} \Phi_{jm'} \tag{IV.6.7a}$$

yazılabilir. Öte yandan, üniterlik şartı

$$U^+ U = UU^+ = I \tag{IV.6.8}$$

veyâ

$$\sum_{m'} U^*_{m'n} U_{m'k} = \sum_{m'} U_{nm'} U^*_{km'} = \delta_{nk} \tag{IV.6.9}$$

şeklindedir. Benzer şekilde, birleştirilmiş temsilin taban vektörleri birleştirilmemiş temsilin taban vektörlerine

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1 m_2} C(j_1 j_2 j ; m_1 m_2 m) \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2} \tag{IV.6.10}$$

üniter dönüşümü ile dönüştürülebilir. Bu üniter dönüşüm matrisinin $C(j_1 j_2 j ; m_1 m_2 m)$ şeklindeki elemanlarına CLEBSCH-GORDAN (veyâ WİGNER) katsayıları adı verilir. Bu katsayılara kısaca C katsayıları diyeceğiz. Eğer $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ operatörünü (IV.6.10) bağıntısının her iki yanına uygularsak (IV.6.1b) ve (IV.6.6b) bağıntılarını kullanarak

$$m\, \psi_{jm} = \sum_{m_1 m_2} (m_1 + m_2)\, C(j_1 j_2 j ; m_1 m_2 m) \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2}$$

veyâ ψ_{jm} yerine (IV.6.10) bağıntısındaki toplamı yazarak

$$\sum_{m_1 m_2} (m - m_1 - m_2)\, C(j_1 j_2 j\,;\, m_1\, m_2\, m)\, \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2} = 0$$

elde edilir. $\psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2}$ taban vektörleri takımı lineer bağımsız olduğundan, bu toplam her terimin katsayısı özdeş olarak sıfıra eşit olmadıkça sıfır olmaz. O hâlde,

$$(m - m_1 - m_2)\, C(j_1 j_2 j\,;\, m_1\, m_2\, m) = 0$$

şartları sağlanmalıdır. Bu şartlar şöyle de ifâde edilebilir :

$$m = m_1 + m_2 \quad \text{için :} \quad C(j_1 j_2 j\,;\, m_1\, m_2\, m) \neq 0 \qquad \text{(IV.6.11a)}$$

$$m \neq m_1 + m_2 \quad \text{için :} \quad C(j_1 j_2 j\,;\, m_1\, m_2\, m) = 0 \qquad \text{(IV.6.11b)}$$

Böylece üç izdüşüm kuvantum sayısı bağımsız değildir ve (IV.6.10) tanım bağıntısındaki iki katlı toplam gerçekte tek katlı bir toplamdır. O hâlde, m_2 yerine $m - m_1$ yazarak ve C katsayısındaki üçüncü izdüşüm kuvantum sayısını kaldırarak (IV.6.10) bağıntısını

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1} C(j_1 j_2 j\,;\, m_1\,, m - m_1)\, \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2, m - m_1} \qquad \text{(IV.6.12)}$$

şeklinde de yazabiliriz. Şüphesiz m_1 yerine $m - m_2$ de yazılabilirdi ve yukardaki işlemler tekrarlanabilirdi.

C katsayıları bir üniter dönüşüm matrisinin elemanları olduğu için (IV.6.9) şeklindeki üniterlik şartlarını sağlamalıdır. Fakat keyfî faz çarpanı, C katsayıları genellikle reel olacak şekilde seçilir. Böylece (IV.6.12) bağıntısı bir ortogonal dönüşümü ifâde eder. Yâni, C katsayıları gerçekte bir ortogonal dönüşüm matrisinin elemanlarıdır. ψ_{jm} taban vektörleri ortonormal olduğundan (IV.4.2) bağıntısına benzer şekilde

$$(\psi_{jm}\,, \psi_{j'm'}) = \delta_{jj'}\, \delta_{mm'}$$

yazılabilir. (IV.6.12) bağıntısı bu bağıntıdaki yerlerine yazılırsa

$$\sum_{m_1} \sum_{m_1'} C(j_1 j_2 j\,;\, m_1\,, m - m_1)\, C(j_1 j_2 j'\,;\, m_1'\,, m' - m_1')$$

$$\times\, (\psi_{j_1 m_1}\,, \psi_{j_1 m_1'})\, (\psi_{j_2, m - m_1}\,, \psi_{j_2, m' - m_1'}) = \delta_{jj'}\, \delta_{mm'}$$

bulunur. Burada j ve j' değerlerinin her ikisi de aynı j_1 ve j_2 değerlerinden elde edilmiştir. Öte yandan, $\psi_{j_1 m_1}$ ve $\psi_{j_2 m_2}$ vektör takımları da ortonormaldir. Böylece

$$(\psi_{j_1 m_1}\,, \psi_{j_1 m_1'}) = \delta_{m_1 m_1'}\,, \qquad (\psi_{j_2 m_2}\,, \psi_{j_2 m_2'}) = \delta_{m_2 m_2'}$$

bağıntılarından

$$(\psi_{j_1 m_1}\,, \psi_{j_1 m_1'})\, (\psi_{j_2, m - m_1}\,, \psi_{j_2, m' - m_1'}) = \delta_{m_1 m_1'}\, \delta_{mm'}$$

bulunur. Bu son bağıntıyı yukarda yerine yazarak

$$\sum_{m_1} C(j_1 j_2 j ; m_1 , m - m_1) \, C(j_1 j_2 j' ; m_1 , m - m_1) = \delta_{jj'} \qquad \text{(IV.6.13)}$$

sonucuna varılır. Bu ortogonallik şartını kullanarak (IV.6.12) ile verilen ortogonal dönüşümün tersi olan

$$\psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 , m - m_1} = \sum_{j} C(j_1 j_2 j ; m_1 , m - m_1) \, \psi_{jm} \qquad \text{(IV.6.14)}$$

şeklindeki bir dönüşümün doğru olduğu gösterilebilir. (IV.6.12) ortogonal dönüşümünden (IV.6.13) ortogonallik bağıntısının elde edildiği şekilde, (IV.6.14) ters ortogonal dönüşümünden de bir başka ortogonallik şartı çıkarılabilir. Gerçekten, bir ortogonal martiste ortonormallik şartları sütunlar için olduğu gibi satırlar için de doğrudur ve böylece, söz konusu olan ortogonallik şartı

$$\sum_{j} C(j_1 j_2 j ; m_1 , m - m_1) \, C(j_1 j_2 j ; m_1' , m' - m_1') = \delta_{m_1 m_1'} \, \delta_{mm'} \qquad \text{(IV.6.15)}$$

şeklindedir.

(IV.6.11a,b) bağıntılarından görüldüğü gibi, m_1 ve m_2 belli olduğu takdirde, m bu ikisinin cebirsel toplamıdır. Şimdi de j_1 ve j_2 belli olduğu takdirde, j yi bu ikisi cinsinden belirleyelim. Şüphesiz j_1 , j_2 ve j büyüklükleri pozitif veyâ sıfırdır. j birim adımlarla bir en küçük (minimum) değer ile bir en büyük (maksimum) değer arasında değişir ve böylece

$$j_{\min} \leqq j \leqq j_{\max} \qquad \text{(IV.6.16)}$$

yazılabilir. Öte yandan, (IV.1.22) bağıntısının uygulaması olarak yazılabilen

$$-j_1 \leqq m_1 \leqq j_1 , \qquad -j_2 \leqq m_2 \leqq j_2$$

bağıntılarından

$$m = m_1 + m_2 \leqq j_1 + j_2$$

bulunur. O hâlde, en büyük m değeri olarak

$$m_{\max} = j_1 + j_2 \qquad \text{(i)}$$

elde edilir. Öte yandan, herhangi bir j için

$$-j \leqq m \leqq j$$

bağıntısı doğru olduğundan, (IV.6.16) bağıntısına bakarak

$$-j_{\max} \leqq m \leqq j_{\max}$$

yazılabilir ve böylece

$$m_{\max} = j_{\max} \qquad \text{(ii)}$$

elde edilir. O hâlde, (ii) bağıntısı (i) bağıntısında yerine yazılırsa

$$j_{max} = j_1 + j_2 \tag{IV.6 17}$$

sonucuna varılır. Birleştirilmemiş temsilde m_1 ve m_2 nin aldığı değerlere göre bütün kuvantum hâllerinin sayısı $(2j_1 + 1)\ (2j_2 + 1)$ dir. Öte yandan, birleştirilmiş temsilde j nin belirli bir değeri için m nin aldığı değerlerin sayısı $2j + 1$ olduğundan, bütün kuvantum hâllerinin sayısı, $2j + 1$ lerin bütün j değerleri için toplanması ile elde edilir. Şüphesiz birleştirilmiş temsildeki bütün kuvantum hâllerinin sayısı, birleştirilmemiş temsildeki bütün kuvantum hâllerinin sayısına eşit olmalıdır. O hâlde,

$$\sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} (2j + 1) = (2j_1 + 1)\,(2j_2 + 1) \tag{IV.6.18}$$

denklemi yazılabilir. Bu denklemde j_{max}, (IV.6.17) bağıntısı ile belli olduğuna göre j_{min} çözülebilir. Bu maksatla $a = j_{min}$ ve $b = j_{max}$ kısaltmalarını yapalım. j nin yâ bir tamsayı, yâ da bir buçuklu tamsayı olduğunu biliyoruz. Eğer j bir tamsayı ise, a ve b de birer tamsayıdır ve aşağıdaki işlemler yapılabilir :

$$\sum_{j=a}^{b} j = \sum_{j=1}^{b} j - \sum_{j=1}^{a-1} j = \frac{1}{2}\, b\,(b + 1) - \frac{1}{2}\, a\,(a - 1)$$

$$\sum_{j=a}^{b} 1 = \sum_{j=1}^{b} 1 - \sum_{j=1}^{a-1} 1 = b - (a - 1) = b - a + 1$$

$$\sum_{j=a}^{b} (2j + 1) = b(b + 1) - a(a - 1) + b - a + 1$$

$$\sum_{j=a}^{b} (2j + 1) = b^2 - a^2 + 2b + 1 \tag{i}$$

bulunur. Eğer j bir buçuklu tamsayı ise, a ve b de birer buçuklu tam sayıdır ve n bir tamsayı olmak üzere

$$j = n - \frac{1}{2}, \qquad n = j + \frac{1}{2}, \qquad 2n = 2j + 1$$

yazılabilir. O hâlde, yukardakine benzer şekilde aşağıdaki işlemler yapılabilir :

$$\sum_{j=a}^{b}(2j+1)=2\sum_{n=a+\frac{1}{2}}^{b+\frac{1}{2}}n=2\left(\sum_{n=1}^{b+\frac{1}{2}}n-\sum_{n=1}^{a-\frac{1}{2}}n\right)$$

$$\sum_{j=a}^{b}(2j+1)=\left(b+\frac{1}{2}\right)\left(b+\frac{3}{2}\right)-\left(a-\frac{1}{2}\right)\left(a+\frac{1}{2}\right)$$

$$=b^2+2b+\frac{3}{4}-a^2+\frac{1}{4}$$

$$\sum_{j=a}^{b}(2j+1)=b^2-a^2+2b+1 \tag{i}$$

bağıntısı tekrar bulunur. Öte yandan,

$$(2j_1+1)(2j_2+1)\equiv 4j_1j_2+2(j_1+j_2)+1$$

özdeşliğinde (IV.6.17) bağıntısı yerine yazılırsa

$$(2j_1+1)(2j_2+1)=4j_1j_2+2b+1 \tag{ii}$$

elde edilir. (i) ve (ii) bağıntıları (IV.6.18) denkleminde yerlerine yazılırsa

$$b^2-a^2=4j_1j_2 \tag{iii}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntıda (IV.6.17) bağıntısı yerine yazılırsa

$$j^2_{\min}=(j_1+j_2)^2-4j_1j_2\equiv(j_1-j_2)^2 \tag{iv}$$

bulunur. $j_{\min}\geqq 0$ olduğunu hatırlayarak (iv) bağıntısından

$$j_{\min}=|j_1-j_2| \tag{IV.6.19}$$

sonucuna varılır. Eğer (IV.6.17) ve (IV.6.19) bağıntıları (IV.6.16) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$|j_1-j_2|\leqq j\leqq j_1+j_2 \tag{IV.6.20}$$

bağıntısı ve (IV.6.18) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}(2j+1)\equiv(2j_1+1)(2j_2+1) \tag{IV.6.21}$$

özdeşliği elde edilir. Eğer j_1, j_2 ve j büyüklükleri bir üçgenin kenar uzunluklarını gösterseydi, (IV.6.20) bağıntısı söz konusu uzunlukların bir üçgen oluşturabilme şartı olurdu. j_1, j_2 ve j büyüklüklerinin bir üçgen oluşturabilme şartına *üçgen kuralı* adı verilir ve $\Delta(j_1 j_2 j)$ ile gösterilir. Üçgen kuralı şüphesiz söz konusu büyüklüklere göre simetriktir ve CLEBSCH-GORDAN katsayılarının sıfırdan farklı olabilme şartıdır. Aksi hâlde, yâni üçgen kuralı gerçeklenmediği takdirde CLEBSCH-GORDAN katsayıları sıfır olur. Bu şartlar şöyle de ifâde edilebilir :

$$\Delta(j_1 j_2 j) \text{ için : } \quad C(j_1 j_2 j : m_1, m - m_1) \neq 0 \qquad \text{(IV.6.22a)}$$

$$\Delta(j_1 j_2 j) \text{ gerçeklenmiyorsa : } \quad C(j_1 j_2 j ; m_1, m - m_1) = 0 \qquad \text{(IV.6.22b)}$$

(IV.6.22a) bağıntısı, yukarda gördüğümüz gibi, (IV.6.20) bağıntısının sonucudur. (IV.6.22b) bağıntısı ise

$$0 \leqq j < |j_1 - j_2|, \qquad j_1 + j_2 < j < \infty$$

bağıntılarından birinin sonucudur. Görülüyor ki, m_1 ve m_2 izdüşüm kuvantum sayılarının toplamı cebirsel olduğu hâlde, j_1 ve j_2 açısal momentum kuvantum sayılarının toplamı vektöreldir. (IV.6.11a,b) ve (IV.6.22a,b) şartlarına ek olarak

$$|m_1| \leqq j_1, \qquad |m - m_1| \leqq j_2, \qquad |m| \leqq j \qquad \text{(IV.6.23)}$$

şartları da sağlanmalıdır.

(IV.7) İKİ AYRI PARÇACIĞA AİT SPİN AÇISAL MOMENTUMU VEKTÖR OPERATÖRLERİNİN TOPLANMASI

Her biri $\hbar/2$ spinine sâhip iki parçacıktan oluşan bir sistemin toplam spini

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \qquad \text{(IV.7.1)}$$

dir. $s_1 = s_2 = 1/2$ ve $|m_1| = |m_2| = 1/2$ olduğu için (IV.6.1a,b) özdeğer denklemleri

$$\mathbf{S}_1^2 \alpha_1 = \frac{3}{4}\hbar^2 \alpha_1, \quad \mathbf{S}_1^2 \beta_1 = \frac{3}{4}\hbar^2 \beta_1; \quad \mathbf{S}_2^2 \alpha_2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \alpha_2, \quad \mathbf{S}_2^2 \beta_2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \beta_2 \qquad \text{(IV.7.2a)}$$

$$\left.\begin{aligned} S_{1z}\alpha_1 &= \frac{1}{2}\hbar\,\alpha_1, \quad & S_{1z}\beta_1 &= -\frac{1}{2}\hbar\,\beta_1 \\ S_{2z}\alpha_2 &= \frac{1}{2}\hbar\,\alpha_2, \quad & S_{2z}\beta_2 &= -\frac{1}{2}\hbar\,\beta_2 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(IV.7.2b)}$$

şekillerini alırlar. Öte yandan, (IV.6.6a,b) özdeğer denklemleri söz konusu özel hâl için

$$S^2 \chi_{sm} = s(s+1)\hbar^2 \chi_{sm} \qquad \text{(IV.7.3a)}$$

$$S_z \chi_{sm} = m\hbar\, \chi_{sm} \qquad \text{(IV.7.3b)}$$

şekillerinde yazılabilirler. (IV.6.20) bağıntısı ile ifâde edilen ve $\Delta\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,s\right)$ ile gösterilen üçgen kuralına göre

$$\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \leqq s \leqq \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$$

veyâ

$$s = 1, \qquad s = 0 \tag{IV.7.4}$$

sonuçları elde edilir. Öte yandan,

$$-s \leqq m \leqq s \tag{IV.7.5}$$

bağıntısına göre, $s = 1$ için

$$m = 1, \qquad m = 0, \qquad m = -1$$

şeklinde üç farklı m özdeğeri elde edilir ve bu özdeğerlere χ_{1m} özvektörleri ile belirlenen üç kuvantum hâli tekabül eder. Bu kuvantum hâlleri bir *triplet* oluşturur. $s = 0$ için de (IV.7.5) bağıntısı yalnız bir $m = 0$ özdeğerini verir. Bu özdeğere χ_{00} özvektörü ile belirlenen ve bir *singlet* oluşturan bir kuvantum hâli tekabül eder. (IV.7.3a,b) özdeğer denklemleri $s = 1$ ve $s = 0$ hâlleri için aşağıdaki şekilleri alırlar :

$$\mathbf{S}^2 \chi_{1m} = 2\hbar^2 \chi_{1m}, \qquad \mathbf{S}^2 \chi_{00} = 0 \tag{IV.7.3a}$$

$$S_z \chi_{1m} = m\hbar \chi_{1m}, \qquad S_z \chi_{00} = 0 \tag{IV.7.3b}$$

Şimdi

$$\alpha_1 \alpha_2, \alpha_1 \beta_2, \alpha_2 \beta_1, \beta_1 \beta_2 \tag{IV.7.6}$$

şeklindeki *birleştirilmemiş temsile* ait ortonormal taban vektörlerinin birer lineer kombinezonu (toplamı) olarak

$$\chi_{1,1}, \chi_{1,0}, \chi_{1,-1}, \chi_{00} \tag{IV.7.7}$$

şeklindeki *birleştirilmiş temsile* ait ortonormal taban vektörlerini yazmak istiyoruz. Eğer (IV.1.8a,b) bağıntılarına bakarak

$$\eta = S_x + iS_y, \qquad \eta^+ = S_x - iS_y \tag{IV.7.8}$$

yazılacak olursa, (IV.4.21a,b) bağıntılarına göre

$$\eta \chi_m = \hbar \left[\left(\frac{1}{2} - m \right) \left(\frac{3}{2} + m \right) \right]^{1/2} \chi_{m+1} \tag{IV.7.9a}$$

$$\eta^+ \chi_m = \hbar \left[\left(\frac{1}{2} + m \right) \left(\frac{3}{2} - m \right) \right]^{1/2} \chi_{m-1} \tag{IV.7.9b}$$

elde edilir. Bu bağıntılarda $m = \pm 1/2$ yazarak

$$\eta \chi_{1/2} = 0, \quad \eta \chi_{-1/2} = \hbar \chi_{1/2}; \quad \eta^+ \chi_{1/2} = \hbar \chi_{-1/2}, \quad \eta^+ \chi_{-1/2} = 0 \tag{IV.7.10a}$$

veyâ

$$\eta \alpha = 0, \qquad \eta \beta = \hbar \alpha; \qquad \eta^+ \alpha = \hbar \beta, \qquad \eta^+ \beta = 0 \tag{IV.7.10b}$$

sonuçlarına varılır. Şüphesiz (IV.7.10b) bağıntıları 1 sayılı parçacık için

$$\eta_1 \alpha_1 = 0, \quad \eta_1 \beta_1 = \hbar \alpha_1 ; \quad \eta_1^+ \alpha_1 = \hbar \beta_1 , \quad \eta_1^+ \beta_1 = 0 \qquad \text{(IV.7.10c)}$$

şeklinde ve 2 sayılı parçacık için de

$$\eta_2 \alpha_2 = 0, \quad \eta_2 \beta_2 = \hbar \alpha_2 ; \quad \eta_2^+ \alpha_2 = \hbar \beta_2 , \quad \eta_2^+ \beta_2 = 0 \qquad \text{(IV.7.10d)}$$

şeklinde yazılmalıdır. Şimdi de (IV.7.8) bağıntılarını 1 ve 2 sayılı parçacıklar için

$$\eta_1 = S_{1x} + iS_{1y} , \qquad \eta_1^+ = S_{1x} - iS_{1y} \qquad \text{(IV.7.8a)}$$

$$\eta_2^+ = S_{2x} - iS_{2y} , \qquad \eta_2 = S_{2x} + iS_{2y} \qquad \text{(IV.7.8b)}$$

şekillerinde yazalım ve aşağıdaki şekillerde de taraf tarafa çarpalım :

$$\eta_1 \eta_2^+ = S_{1x} S_{2x} + S_{1y} S_{2y} - i(S_{1x} S_{2y} - S_{1y} S_{2x})$$

$$\eta_1^+ \eta_2 = S_{1x} S_{2x} + S_{1y} S_{2y} + i(S_{1x} S_{2y} - S_{1y} S_{2x})$$

bulunur. Bu bağıntılar taraf tarafa toplanıp ikiye bölünürse

$$\frac{1}{2}(\eta_1 \eta_2^+ + \eta_1^+ \eta_2) = S_{1x} S_{2x} + S_{1y} S_{2y}$$

veyâ

$$\mathbf{S}_1 . \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2}(\eta_1 \eta_2^+ + \eta_1^+ \eta_2) + S_{1z} S_{2z} \qquad \text{(IV.7.11)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan

$$\mathbf{S}_1 = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}_1 , \qquad \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}_2 \qquad \text{(IV.7.12)}$$

olduğundan

$$\boldsymbol{\sigma}_1 . \boldsymbol{\sigma}_2 = \frac{2}{\hbar^2}(\eta_1 \eta_2^+ + \eta_1^+ \eta_2) + \sigma_{1z} \sigma_{2z} \qquad \text{(IV.7.13)}$$

elde edilir. (IV.7.10c,d) bağıntılarına ek olarak

$$\sigma_{1z} \alpha_1 = \alpha_1 , \quad \sigma_{1z} \beta_1 = -\beta_1 ; \quad \sigma_{2z} \alpha_2 = \alpha_2 , \quad \sigma_{2z} \beta_2 = -\beta_2 \qquad \text{(IV.7.14)}$$

bağıntıları yazılabilir. Şimdi $\boldsymbol{\sigma}_1 . \boldsymbol{\sigma}_2$ operatörünü (IV.7.13) bağıntısının yardımı ile (IV.7.6) bağıntısı ile verilen birleştirilmemiş temsile ait ortonormal taban vektörlerine uygulayalım. (IV.7.10c,d) ve (IV.7.14) bağıntılarını kullanarak

$$\left.\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}_1 . \boldsymbol{\sigma}_2) \alpha_1 \alpha_2 &= \alpha_1 \alpha_2 \\ (\boldsymbol{\sigma}_1 . \boldsymbol{\sigma}_2) \alpha_1 \beta_2 &= -\alpha_1 \beta_2 + 2 \alpha_2 \beta_1 \\ (\boldsymbol{\sigma}_1 . \boldsymbol{\sigma}_2) \alpha_2 \beta_1 &= -\alpha_2 \beta_1 + 2 \alpha_1 \beta_2 \\ (\boldsymbol{\sigma}_1 . \boldsymbol{\sigma}_2) \beta_1 \beta_2 &= \beta_1 \beta_2 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(IV.7.15)}$$

sonuçlarına varılır. Eğer

$$P_\sigma = \frac{1}{2}(I + \sigma_1 . \sigma_2) \tag{IV.7.16}$$

bağıntısının yardımı ile P_σ operatörü tanımlanırsa (IV.7.15) bağıntılarından

$$P_\sigma \alpha_1 \alpha_2 = \alpha_1 \alpha_2 , \qquad P_\sigma \beta_1 \beta_2 = \beta_1 \beta_2 \tag{IV.7.17a}$$

$$P_\sigma \alpha_1 \beta_2 = \alpha_2 \beta_1 , \qquad P_\sigma \alpha_2 \beta_1 = \alpha_1 \beta_2 \tag{IV.7.17b}$$

elde edilir. (IV.7.17b) bağıntılarına göre P_σ operatörü 1 ve 2 sayılı parçacıkların rollerini aralarında değiştirir ve bu sebepten ötürü, P_σ operatörüne *spin mübadele operatörü* adı verilir. Ayrıca, (IV.7.17b) bağıntıları taraf tarafa bir kez toplanır ve bir kez de çıkarılırsa

$$P_\sigma (\alpha_1 \beta_2 + \alpha_2 \beta_1) = \alpha_1 \beta_2 + \alpha_2 \beta_1 \tag{IV.7.17c}$$

$$P_\sigma (\alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1) = -(\alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1) \tag{IV.7.17d}$$

sonuçlarına varılır. Eğer (IV.7.12) bağıntıları (IV.7.1) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar (\sigma_1 + \sigma_2) \tag{IV.7.18}$$

elde edilir. (IV.7.18) bağıntısının her iki yanının skaler karesi alınırsa

$$\mathbf{S}^2 = \frac{1}{4} \hbar^2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) + \frac{1}{2} \hbar^2 \sigma_1 . \sigma_2$$

bulunur. Öte yandan, (IV.5.12b) bağıntısına göre

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 3I$$

olduğundan

$$\frac{2}{\hbar^2} \mathbf{S}^2 = 3I + \sigma_1 . \sigma_2 \tag{IV.7.19}$$

sonucuna varılır. (IV.7.16) ve (IV.7.19) bağıntıları karşılaştırılırsa

$$P_\sigma = \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{S}^2 - I = \frac{1}{2} (I + \sigma_1 . \sigma_2) \tag{IV.7.20}$$

bulunur. *DİRAC özdeşliğine* göre (Problem IV.1. e bakınız)

$$(\sigma_1 . \mathbf{B})(\sigma_1 . \mathbf{C}) = (\mathbf{B} . \mathbf{C}) I + i \sigma_1 . (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) \tag{IV.7.21}$$

olduğunu biliyoruz. Bu özdeşlikte $\mathbf{B} = \mathbf{C} = \sigma_2$ yazılırsa

$$(\sigma_1 . \sigma_2)^2 = \sigma_2 . \sigma_2 + i \sigma_1 . (\sigma_2 \times \sigma_2)$$

bulunur. (IV.5.7) ve (IV.5.12b) bağıntılarına göre

$$\boldsymbol{\sigma}_2 \times \boldsymbol{\sigma}_2 = 2i\,\boldsymbol{\sigma}_2, \qquad \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 3I$$

olduğundan

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)^2 = 3I - 2\,\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{IV.7.22}$$

özdeşliği bulunur. Öte yandan, (IV.7.16) bağıntısının her iki yanının karesini alarak ve (IV.7.22) özdeşliğini kullanarak

$$P_\sigma^2 = \frac{1}{4}\left[I + (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)^2 + 2\,\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2\right] = \frac{1}{4}(I + 3I)$$

veyâ

$$P_\sigma^2 = I \tag{IV.7.23}$$

sonucuna varılır. O hâlde, P_σ operatörünün özdeğerleri ± 1 dir. (IV.7.20) ve (IV.7.3a) bağıntılarını kullanarak

$$P_\sigma \chi_{sm} = \left(\frac{1}{\hbar^2}\mathbf{S}^2 - I\right)\chi_{sm}$$

veyâ

$$P_\sigma \chi_{sm} = [s(s+1) - 1]\,\chi_{sm} \tag{IV.7.24}$$

elde edilir. Bu bağıntıdan $s = 1$ ve $s = 0$ için

$$P_\sigma \chi_{1m} = \chi_{1m}, \qquad P_\sigma \chi_{00} = -\chi_{00} \tag{IV.7.24a}$$

bulunur. O hâlde, P_σ operatörünün $+1$ özdeğerine ait özvektörleri χ_{1m} ve -1 özdeğerine ait özvektörü de χ_{00} dır. χ_{1m} özvektörleri (IV.7.17a) ve (IV.7.17c) bağıntıları ile belirlidir. χ_{00} özvektörü ise (IV.7.17d) bağıntısı ile belirlidir. Böylece $s = 1$ için *triplet* oluşturan χ_{1m} özvektörleri

$$\chi_{11} = \alpha_1 \alpha_2 \tag{IV.7.25a}$$

$$\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1 \beta_2 + \alpha_2 \beta_1) \tag{IV.7.25b}$$

$$\chi_{1,-1} = \beta_1 \beta_2 \tag{IV.7.25c}$$

şeklindedir. $s = 0$ için *singlet* oluşturan χ_{00} özvektörü de

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1) \tag{IV.7.26}$$

şeklindedir. (IV.7.25b) ve (IV.7.26) bağıntılarındaki $1/\sqrt{2}$ katsayısı normlama sâbitidir. (IV.7.25a,b,c) ve (IV.7.26) bağıntıları (IV.7.7) taban vektörlerini (IV.7.6) taban vektörlerine dönüştüren ortogonal dönüşüm denklemleridir. Triplet hâl için parçacıkların spinleri paralel ve singlet hâl için de parçacıkların spinleri antiparaleldir. (IV.7.14) bağıntılarının aracılığı ile söz konusu ortogonal dönüşüm denklemlerinin (IV.7.3b) özdeğer denklemlerini gerçeklediği kolaylıkla gösterilebilir. Bu maksatla

$$S_z = \frac{1}{2}\hbar(\sigma_{1z} + \sigma_{2z})$$

operatörünü söz konusu dört dönüşüm denklemine ayrı ayrı uygulamak yeter. Gerçekten,

$$S_z\,\alpha_1\,\alpha_2 = \hbar\,\alpha_1\,\alpha_2\,, \qquad S_z\,\beta_1\,\beta_2 = -\hbar\,\beta_1\,\beta_2\,, \qquad S_z\,\alpha_1\,\beta_2 = S_z\,\alpha_2\,\beta_1 = 0$$

olduğundan, ilk iki denklem (IV.7.25a,c) bağıntıları ile karşılaştırılırsa

$$S_z\,\chi_{11} = \hbar\,\chi_{11}\,, \qquad S_z\,\chi_{1,-1} = -\hbar\,\chi_{1,-1}$$

bulunur. Son iki denklem ise

$$S_z\,(\alpha_1\,\beta_2 + \alpha_2\,\beta_1) = 0, \qquad S_z\,(\alpha_1\,\beta_2 - \alpha_2\,\beta_1) = 0$$

bağıntılarını özdeş olarak sağlar. Bu bağıntılar (IV.7.25b) ve (IV.7.26) bağıntıları ile karşılaştırılırsa

$$S_z\,\chi_{10} = 0, \qquad S_z\,\chi_{00} = 0$$

sonuçlarına varılır.

(IV.8) BİR PARÇACIĞA AİT YÖRÜNGE VE SPİN AÇISAL MOMENTUMU VEKTÖR OPERATÖRLERİNİN TOPLANMASI

Bir elektronun veyâ spini $\hbar/2$ olan herhangi bir parçacığın **S** spini ile **L** yörünge açısal momentumunun toplamı

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} = \mathbf{L} + \frac{1}{2}\hbar\,\boldsymbol{\sigma} \tag{IV.8.1}$$

vektör operatörü ile tanımlanıyor. $j_1 = l$, $j_2 = s = 1/2$, $m_1 = m$ ve $|m_2| = |m_s| = 1/2$ olduğu için (IV.6.1a,b) özdeğer denklemleri

$$\mathbf{L}^2\,Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2\,Y_{lm}\,; \qquad \boldsymbol{\sigma}^2\,\alpha = 3\alpha, \qquad \boldsymbol{\sigma}^2\,\beta = 3\beta \tag{IV.8.2a}$$

$$L_z\,Y_{lm} = m\hbar\,Y_{lm}\,; \qquad \sigma_z\,\alpha = \alpha, \qquad \sigma_z\,\beta = -\beta \tag{IV.8.2b}$$

şekillerini alırlar. Öte yandan, (IV.6.6a,b) özdeğer denklemleri söz konusu özel hâl için

$$\mathbf{J}^2\,\chi^j_\mu = j(j+1)\hbar^2\,\chi^j_\mu \tag{IV.8.3a}$$

$$J_z\,\chi^j_\mu = \mu\,\hbar\,\chi^j_\mu \tag{IV.8.3b}$$

şekillerinde yazılabilirler. (IV.6.20) bağıntısı ile ifâde edilen ve $\Delta\left(l\,\frac{1}{2}\,j\right)$ ile gösterilen üçgen kuralına göre

$$\left| l - \frac{1}{2} \right| \leqq j \leqq l + \frac{1}{2}$$

veyâ

$$j = l - \frac{1}{2}, \qquad j = l + \frac{1}{2} \tag{IV.8.4}$$

sonuçları elde edilir. Öte yandan,

$$-j \leqq \mu \leqq j \tag{IV.8.5}$$

bağıntısına göre $2j + 1$ adet μ değeri ve

$$-l \leqq m \leqq l \tag{IV.8.6}$$

bağıntısına göre de $2l + 1$ adet m değeri vardır. Toplam kuvantum hâllerinin sayısı da

$$2\left(l - \frac{1}{2}\right) + 1 + 2\left(l + \frac{1}{2}\right) + 1 = 2(2l + 1)$$

olur.

Şimdi (IV.6.12) bağıntısının incelemekte olduğumuz özel hâle bir uygulaması olarak, $j = l \pm 1/2$ olmak üzere

$$\chi_\mu^j = C\left(l \frac{1}{2} j ; \mu - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) Y_{l,\mu-\frac{1}{2}}\, \alpha + C\left(l \frac{1}{2} j ; \mu + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) Y_{l,\mu+\frac{1}{2}}\, \beta \tag{IV.8.7}$$

ortogonal dönüşümü yazılabilir. $\mathbf{J}^2$, $\mathbf{L}^2$ ve $\boldsymbol{\sigma}^2$ operatörlerinin matris temsilleri hem birleştirilmemiş, hem de birleştirilmiş temsilde köşegen olduğu için (IV.8.2a) özdeğer denklemlerine bakarak

$$\mathbf{L}^2 \chi_\mu^j = l(l+1)\hbar^2 \chi_\mu^j, \qquad \boldsymbol{\sigma}^2 \chi_\mu^j = 3\chi_\mu^j \tag{IV.8.8}$$

özdeğer denklemleri yazılabilir. Öte yandan, (IV.8.1) bağıntısının her iki yanının skaler karesini alarak

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 \boldsymbol{\sigma}^2 + \hbar\, \boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L}$$

veyâ

$$\hbar\, \boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \frac{1}{4}\hbar^2 \boldsymbol{\sigma}^2$$

elde edilir. $\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L}$ operatörünü χ_μ^j özvektörüne uygulayarak

$$\hbar(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L})\chi_\mu^j = \left(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \frac{1}{4}\hbar^2 \boldsymbol{\sigma}^2\right)\chi_\mu^j \tag{IV.8.9}$$

bulunur. Eğer (IV.8.3a) ve (IV.8.8) bağıntıları (IV.8.9) bağıntısının sağ yanında yerlerine yazılırsa

$$(\sigma \,.\, \mathrm{L})\,\chi_\mu^j = \hbar \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \chi_\mu^j \qquad \text{(IV.8.10)}$$

sonucuna varılır (IV 8.10) bağıntısı $\sigma \,.\, \mathbf{L}$ operatörünün

$$(\sigma \,.\, \mathrm{L})\,\chi_\mu^j = -\,(k+1)\,\hbar\,\chi_\mu^j \qquad \text{(IV.8.11)}$$

veyâ

$$(\sigma \,.\, \mathrm{L})\,\chi_{k\mu} = -\,(k+1)\,\hbar\,\chi_{k\mu} \qquad \text{(IV.8.11a)}$$

şeklindeki bir özdeğer denklemidir. $\sigma \,.\, \mathbf{L}$ operatörünün $-(k+1)$ özdeğerine ait özvektörü $\chi_{k\mu} \equiv \chi_\mu^j$ dür. (IV.8.11) denklemi (IV.8.10) denklemi ile karşılaştırılırsa

$$-\,(k+1) = j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}$$

veyâ

$$k = l(l+1) - j(j+1) - \frac{1}{4} \qquad \text{(IV.8.12)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan

$$j = l - \frac{1}{2} \text{ için}: \; j(j+1) = \left(l - \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right) = l^2 - \frac{1}{4} = l(l+1) - l - \frac{1}{4}$$

$$j = l + \frac{1}{2} \text{ için}: \; j(j+1) = \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right) = l^2 + 2l + \frac{3}{4} = l(l+1) + l + 1 - \frac{1}{4}$$

olduğundan, (IV.8.12) bağıntısında yerlerine yazarak

$$\left.\begin{aligned} j = l - \frac{1}{2} \text{ için}: \; k &= l > 0 \\ j = l + \frac{1}{2} \text{ için}: \; k &= -\,(l+1) < 0 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(IV.8.13)}$$

sonuçlarına varılır. Bu bağıntılara göre, her zaman $k \neq 0$ olduğu ve

$$j = l - \frac{1}{2} \text{ için}: \; k > 0, \quad k = 1, 2, 3, 4, \ldots$$

$$j = l + \frac{1}{2} \text{ için}: \; k < 0, \quad k = -1, -2, -3, -4, \ldots$$

olduğu açıkça görülmektedir. Ayrıca, (IV.8.13) bağıntılarına göre

$$\left.\begin{aligned} j = l - \frac{1}{2} \text{ için}: &\quad k = l = j + \frac{1}{2} \\ j = l + \frac{1}{2} \text{ için}: &\quad -k = l + 1 = j + \frac{1}{2} \end{aligned}\right\} \tag{IV.8.13a}$$

elde edilir ve böylece

$$|k| = j + \frac{1}{2} \tag{IV.8.13b}$$

sonucuna varılır. (IV 8.7) bağıntısındaki bilinmeyen C katsayılarını kısalık için

$$C_1 \equiv C\left(l\,\frac{1}{2}\,j\,;\,\mu - \frac{1}{2}\,,\frac{1}{2}\right), \qquad C_2 \equiv C\left(l\,\frac{1}{2}\,j\,;\,\mu + \frac{1}{2}\,,\,-\frac{1}{2}\right) \tag{IV.8.14}$$

şekillerinde gösterelim. Ayrıca,

$$\mu = m + m_s = m \mp \frac{1}{2}$$

olduğundan,

$$m = \mu + \frac{1}{2}\,, \qquad m - 1 = \mu - \frac{1}{2} \tag{IV.8.14a}$$

bağıntıları yazılabilir. Böylece (IV.8.7) bağıntısı

$$\chi_\mu^j = C_1\, Y_{l,m-1}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + C_2\, Y_{lm}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

veyâ

$$\chi_\mu^j = \begin{pmatrix} C_1\, Y_{l,m-1} \\ C_2\, Y_{lm} \end{pmatrix} \tag{IV.8.15}$$

şeklinde yazılabilir. χ_μ^j özvektörlerinin normlama bağıntısı

$$\int_{(4\pi)} \chi_\mu^{j+}\, \chi_\mu^j\, d\Omega = 1 \tag{IV.8.16}$$

şeklindedir. Burada $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ dir. (IV.8.15) bağıntısı (IV.8.16) bağıntısında yerine yazılırsa

$$C_1^2 \int_{(4\pi)} |\, Y_{l,m-1}\,|^2\, d\Omega + C_2^2 \int_{(4\pi)} |\, Y_{lm}\,|^2\, d\Omega = 1$$

veyâ

$$C_1^2 + C_2^2 = 1 \tag{IV.8.16a}$$

sonucuna varılır. Öte yandan

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} = \sigma_x L_x + \sigma_y L_y + \sigma_z L_z$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} L_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} L_y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} L_z$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_z & L_x - i L_y \\ L_x + i L_y & -L_z \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.8.17)}$$

bağıntısı bulunur. (IV.8.17) (ve (IV.8.15) bağıntıları (IV.8.11) özdeğer denkleminde yerlerine yazılırsa

$$\begin{pmatrix} L_z & L_x - i L_y \\ L_x + i L_y & -L_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 Y_{l,m-1} \\ C_2 Y_{lm} \end{pmatrix} = -(k+1)\hbar \begin{pmatrix} C_1 Y_{l,m-1} \\ C_2 Y_{lm} \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.8.18)}$$

veyâ

$$\left.\begin{aligned} C_1 L_z Y_{l,m-1} + C_2 (L_x - i L_y) Y_{lm} &= -(k+1)\hbar C_1 Y_{l,m-1} \\ C_1 (L_x + i L_y) Y_{l,m-1} - C_2 L_z Y_{lm} &= -(k+1)\hbar C_2 Y_{lm} \end{aligned}\right\} \qquad \text{(IV.8.18a)}$$

özdeğer denklemleri bulunur. Ayrıca,

$$\left.\begin{aligned} L_z Y_{l,m-1} &= (m-1)\hbar Y_{l,m-1} \\ L_z Y_{lm} &= m\hbar Y_{lm} \end{aligned}\right\} \qquad \text{(IV.8.19)}$$

özdeğer denklemleri yazılabilir. Öte yandan, (IV.4.22a,b) bağıntılarını hatırlayalım :

$$(L_x + i L_y) Y_{lm} = \hbar [(l-m)(l+m+1)]^{1/2} Y_{l,m+1} \qquad \text{(IV.8.20a)}$$

$$(L_x - i L_y) Y_{lm} = \hbar [(l+m)(l-m+1)]^{1/2} Y_{l,m-1} \qquad \text{(IV.8.20b)}$$

(IV.8.20a) bağıntısında m yerine $m - 1$ yazılırsa

$$(L_x + i L_y) Y_{l,m-1} = \hbar [(l+m)(l-m+1)]^{1/2} Y_{lm} \qquad \text{(IV.8.20c)}$$

bağıntısı bulunur. Eğer bir kısa yazma şekli için

$$\Gamma_{lm} \equiv [(l+m)(l-m+1)]^{1/2} \qquad \text{(IV.8.21)}$$

tanımı yapılırsa (IV.8.20b,c) bağıntıları

$$(L_x - i L_y) Y_{lm} = \hbar \Gamma_{lm} Y_{l,m-1} \qquad \text{(IV.8.20b)}$$

$$(L_x + i L_y) Y_{l,m-1} = \hbar \Gamma_{lm} Y_{lm} \qquad \text{(IV.8.20c)}$$

şekillerinde yazılabilir. Eğer (IV.8.19) ve (IV.8.20b,c) bağıntıları (IV.8.18a) özdeğer denklemlerinde yerlerine yazılırsa, bu denklemlerden birincisinin her iki yanında $\hbar Y_{l,m-1}$ çarpanı ve ikincisinin her iki yanında da $\hbar Y_{lm}$ çarpanı kısaltılabilir. Böylece

$$C_1 (m-1) + C_2 \Gamma_{lm} = -(k+1) C_1$$

$$C_1 \Gamma_{lm} - C_2 m = -(k+1) C_2$$

veyâ

$$\Gamma_{lm}\, C_2 = -\,(k+m)\, C_1$$

$$\Gamma_{lm}\, C_1 = -\,(k-m+1)\, C_2$$

veyâ (IV.8.21) bağıntısını yerine yazarak

$$\frac{C_1}{C_2} = \frac{[(l+m)(l-m+1)]^{1/2}}{-\,(k+m)} = \frac{-\,(k-m+1)}{[(l+m)(l-m+1)]^{1/2}} \tag{IV.8.22}$$

sonuçlarına varılır. (IV.8.22) bağıntılarının ikincisinden

$$(k+m)(k-m+1) = (l+m)(l-m+1)$$

$$k^2 - m^2 + k + m = l^2 - m^2 + l + m$$

$$k^2 + k = l^2 + l$$

$$(k-l)(k+l+1) = 0 \tag{IV.8.23}$$

denklemi elde edilir. Bu denklemin $k = l$ ve $k = -\,(l+1)$ şeklindeki iki çözümü (IV.8.13) bağıntılarına göre $j = l \mp 1/2$ kuvantum hâllerini verir. İki k özdeğerinden her biri için (IV.8.16a) ve (IV.8.22) denklemlerinden çözülebilen C_1, C_2 takımının aracılığı ile (IV.8.15) bağıntısı ile belirlenen bir özvektör bulunur. Şimdi söz konusu C_1, C_2 çözüm takımlarını bulalım. $k = l$ için (IV.8.22) denklemleri

$$\frac{C_1}{C_2} = \frac{[(l+m)(l-m+1)]^{1/2}}{-\,(l+m)} = \frac{-\,(l-m+1)}{[(l+m)(l-m+1)]^{1/2}}$$

veya

$$\frac{C_1}{C_2} = -\left(\frac{l-m+1}{l+m}\right)^{1/2} \tag{IV.8.22a}$$

veyâ

$$\frac{C_1^2}{C_2^2} = \frac{l-m+1}{l+m}$$

şeklini alır. (IV.8.16a) bağıntısının yardımı ile

$$\frac{1}{C_2^2} = \frac{C_1^2}{C_2^2} + 1 = \frac{l-m+1}{l+m} + 1 = \frac{2l+1}{l+m}$$

elde edilir. Böylece $k = l$ için

$$C_1^2 = \frac{l-m+1}{2l+1,}, \qquad C_2^2 = \frac{l+m}{2l+1}$$

veyâ (IV.8.22a) bağıntısı ile tutarlı olmak üzere

$$C_1 = -\frac{\sqrt{l-m+1}}{\sqrt{2l+1}}, \qquad C_2 = \frac{\sqrt{l+m}}{\sqrt{2l+1}} \tag{IV.8.24a}$$

sonuçlarına varılır. O hâlde, $k = l$ özdeğerine ait özvektör veyâ spinör

$$\chi_\mu^{l-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} -\sqrt{l-m+1}\, Y_{l,m-1} \\ \sqrt{l+m}\, Y_{lm} \end{pmatrix} \tag{IV.8.24b}$$

şeklindedir. (IV.8.14a) bağıntısını kullanarak

$$\chi_\mu^{l-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{vmatrix} -\sqrt{l-\mu+\frac{1}{2}}\, Y_{l,\mu-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l+\mu+\frac{1}{2}}\, Y_{l,\mu+\frac{1}{2}} \end{vmatrix} \tag{IV.8.24c}$$

veyâ $l + 1/2 = (2l+1)/2$ özdeşliğini kullanarak

$$\chi_\mu^{l-\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} -\left(\frac{1}{2} - \frac{\mu}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{l,\mu-\frac{1}{2}} \\ \left(\frac{1}{2} + \frac{\mu}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{l,\mu+\frac{1}{2}} \end{vmatrix} \tag{IV.8.24d}$$

sonucuna varılır. $k = -(l+1)$ için benzer işlemler yapılırsa, (IV.8.22) denklemleri

$$\frac{C_1}{C_2} = \frac{[(l+m)(l-m+1)]^{1/2}}{l-m+1} = \frac{l+m}{[(l+m)(l-m+1)]^{1/2}}$$

veyâ

$$\frac{C_1}{C_2} = \left(\frac{l+m}{l-m+1}\right)^{1/2} \tag{IV.8.22b}$$

veyâ

$$\frac{C_1^2}{C_2^2} = \frac{l+m}{l-m+1}$$

şeklini alır. (IV.8.16a) bağıntısının yardımı ile

$$\frac{1}{C_2^2} = \frac{C_1^2}{C_2^2} + 1 = \frac{l+m}{l-m+1} + 1 = \frac{2l+1}{l-m+1}$$

elde edilir. Böylece $k = -(l+1)$ için

$$C_1^2 = \frac{l+m}{2l+1}, \qquad C_2^2 = \frac{l-m+1}{2l+1}$$

veyâ (IV.8.22b) bağıntısı ile tutarlı olmak üzere

$$C_1 = \frac{\sqrt{l+m}}{\sqrt{2l+1}}, \qquad C_2 = \frac{\sqrt{l-m+1}}{\sqrt{2l+1}} \tag{IV.8.25a}$$

sonuçlarına varılır. O hâlde, $k = -(l+1)$ özdeğerine ait vektör veyâ spinör

$$\chi_\mu^{l+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m}\, Y_{l,m-1} \\ \sqrt{l-m+1}\, Y_{lm} \end{pmatrix} \tag{IV.8.25b}$$

şeklindedir. (IV.8.14a) bağıntısını kullanarak

$$\chi_\mu^{l+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{vmatrix} \sqrt{l+\mu+\frac{1}{2}}\, Y_{l,\mu-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l-\mu+\frac{1}{2}}\, Y_{l,\mu+\frac{1}{2}} \end{vmatrix} \tag{IV.8.25c}$$

veyâ $l + 1/2 \equiv (2l+1)/2$ özdeşliğini kullanarak

$$\chi_\mu^{l+\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} \left(\frac{1}{2} + \frac{\mu}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{l,\mu-\frac{1}{2}} \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{\mu}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{l,\mu+\frac{1}{2}} \end{vmatrix} \tag{IV.8.25b}$$

sonucuna varılır. $\chi_\mu^{l\pm\frac{1}{2}}$ spinörlerine *spinör küresel harmonik* adı verilir.

(IV.8.13) bağıntısına bakarak j kuvantum sayısı yerine k kuvantum sayısı kullanılabilir. Böylece (IV.8.24d) bağıntısı ile verilen spinör

$$k > 0 \text{ için}: \chi_{k\mu} = \begin{vmatrix} -\left(\frac{1}{2} - \frac{\mu}{2k+1}\right)^{1/2} Y_{k,\mu-\frac{1}{2}} \\ \left(\frac{1}{2} + \frac{\mu}{2k+1}\right)^{1/2} Y_{k,\mu+\frac{1}{2}} \end{vmatrix} \tag{IV.8.26a}$$

şeklinde yazılabilir. Öte yandan, $j=l+1/2$ veyâ $k=-(l+1)$ için $l=-(k+1)$ ve $2l+1 = -(2k+1)$ olduğundan, (IV.8.25d) bağıntısı ile verilen spinör de

$$k < 0 \text{ için}: \chi_{k\mu} = \begin{vmatrix} \left(\frac{1}{2} - \frac{\mu}{2k+1}\right)^{1/2} Y_{-(k+1),\mu-\frac{1}{2}} \\ \left(\frac{1}{2} + \frac{\mu}{2k+1}\right)^{1/2} Y_{-(k+1),\mu+\frac{1}{2}} \end{vmatrix} \tag{IV.8.26b}$$

şeklinde veyâ k yerine $-k$ yazarak

$$k > 0 \text{ için : } \chi_{-k\mu} = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2} + \frac{\mu}{2k-1}\right)^{1/2} Y_{k-1,\mu-\frac{1}{2}} \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{\mu}{2k-1}\right)^{1/2} Y_{k-1,\mu+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.82.6c)}$$

şeklinde yazılabilir.

DİRAC özdeşliğine göre

$$(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L}) = \mathbf{r} . \mathbf{L} + i\,\boldsymbol{\sigma} . (\mathbf{r} \times \mathbf{L}) \qquad \text{(i)}$$

$$(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L})(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{r}) = \mathbf{L} . \mathbf{r} + i\,\boldsymbol{\sigma} . (\mathbf{L} \times \mathbf{r}) \qquad \text{(ii)}$$

özdeşlikleri yazılabilir. Problem I.8. e bakarak

$$\mathbf{L} \times \mathbf{r} + \mathbf{r} \times \mathbf{L} = 2i\hbar\,\mathbf{r} \qquad \text{(iii)}$$

$$\mathbf{r} . \mathbf{L} = \mathbf{L} . \mathbf{r} = 0 \qquad \text{(iv)}$$

yazılabilir (i) ve (ii) bağıntılarını taraf tarafa toplayarak ve (iii) ve (iv) bağıntılarını yerlerine yazarak

$$(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L}) + (\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L})(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{r}) = -\,2\hbar\,\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{r} \qquad \text{(v)}$$

bulunur $\boldsymbol{\sigma}$ vektör operatörünün $\mathbf{r}$ yer vektörü üzerindeki izdüşümü olan σ_r operatörü

$$r\,\sigma_r = \mathbf{r} . \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} . \mathbf{r} \qquad \text{(IV.8.27)}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Gene DİRAC özdeşliğine göre

$$(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{r}) = \mathbf{r} . \mathbf{r}\,I + i\,\boldsymbol{\sigma} . (\mathbf{r} \times \mathbf{r})$$

veyâ

$$(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{r})^2 = r^2\,I \qquad \text{(IV.8.27a)}$$

olduğundan, (IV.8.27) bağıntısının her iki yanının karesini alarak

$$\sigma_r^2 = I \qquad \text{(IV.8.28)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (IV.8.27) tanım bağıntısı (v) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\sigma_r(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L}) + (\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L})\,\sigma_r + 2\hbar\,\sigma_r = 0 \qquad \text{(IV.8.29)}$$

sonucuna varılır. Şimdi (IV.8.11a) özdeğer denkleminin her iki yanını soldan σ_r operatörü ile çarpalım :

$$\sigma_r(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L})\,\chi_{k\mu} = -\,(k+1)\,\hbar\,\sigma_r\,\chi_{k\mu} \qquad \text{(IV.8.30)}$$

bulunur. Öte yandan, (IV.8.29) operatör bağıntısını $\chi_{k\mu}$ özvektörüne uygulayalım:

$$\sigma_r(\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L})\,\chi_{k\mu} + (\boldsymbol{\sigma} . \mathbf{L})\,\sigma_r\,\chi_{k\mu} + 2\hbar\,\sigma_r\,\chi_{k\mu} = 0 \qquad \text{(IV.8.31)}$$

elde edilir. Eğer (IV.8.30) bağıntısı (IV.8.31) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(\boldsymbol{\sigma} \,.\, \mathbf{L})\, \sigma_r\, \chi_{k\mu} = [(k+1) - 2]\, \hbar\, \sigma_r\, \chi_{k\mu}$$

veyâ

$$(\boldsymbol{\sigma} \,.\, \mathbf{L})\, \sigma_r\, \chi_{k\mu} = (k-1)\, \hbar\, \sigma_r\, \chi_{k\mu} \qquad \text{(IV.8.32)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan,

$$(\boldsymbol{\sigma} .\, \mathbf{L})\, \chi_{k\mu} = -\,(k+1)\, \hbar\, \chi_{k\mu} \qquad \text{(IV.8.11a)}$$

özdeğer denkleminde k yerine $-k$ yazılırsa

$$(\boldsymbol{\sigma} \,.\, \mathbf{L})\, \chi_{-k,\mu} = (k-1)\, \hbar\, \chi_{-k,\mu} \qquad \text{(IV.8.33)}$$

özdeğer denklemi elde edilir. (IV.8.32) ve (IV.8.33) özdeğer denklemleri karşılaştırılırsa $\sigma_r\, \chi_{k\mu}$ ve $\chi_{-k,\mu}$ spinörlerinin, $\boldsymbol{\sigma} \,.\, \mathbf{L}$ operatörünün aynı $k-1$ özdeğerine ait özvektörleri olduğu görülür. O hâlde, bu iki özvektör orantılı olmalıdır. Yâni, a bir sâbit büyüklük olmak üzere

$$\sigma_r\, \chi_{k\mu} = a\, \chi_{-k,\mu} \qquad \text{(IV.8.34)}$$

yazılabilir. (IV.8.34) bağıntısında k yerine $-k$ yazılırsa

$$\sigma_r\, \chi_{-k,\mu} = a\, \chi_{k\mu} \qquad \text{(IV.8.35a)}$$

bağıntısı bulunur. (IV.8.34) bağıntısının her iki yanı soldan σ_r operatörü ile çarpılırsa, (IV.8.28) bağıntısını kullanarak

$$\chi_{k\mu} = a\, \sigma_r\, \chi_{-k,\mu} \qquad \text{(IV.8.35b)}$$

bağıntısı bulunur. (IV.8.35a) bağıntısı (IV.8.35b) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\chi_{k\mu} = a^2\, \chi_{k\mu} \qquad \text{(IV.8.35c)}$$

bağıntısı bulunur. Bu bağıntının gerçeklenmesi için $a^2 = 1$ veyâ $a = \pm\, 1$ olmalıdır. Doğru sonuç $a = -\,1$ dir. Özel bir hâl için $a = -\,1$ olduğunu ispatlamak yeterlidir. (IV.8.27) bağıntısı kartezyen koordinat sisteminde

$$r\, \sigma_r = x\, \sigma_x + y\, \sigma_y + z\, \sigma_z \qquad \text{(IV.8.27b)}$$

şeklini alır. Eğer (x, y, z) kartezyen koordinatları (r, θ, φ) küresel koordinatlarına dönüştürülecek olursa (IV.8.27b) bağıntısı

$$\sigma_r = \sin\theta\, (\cos\varphi\, \sigma_x + \sin\varphi\, \sigma_y) + \cos\theta\, \sigma_z \qquad \text{(IV.8.27c)}$$

şeklini alır. $\theta = 0$ özel hâli için

$$\sigma_r = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\,1 \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.8.36)}$$

elde edilir. Öte yandan, küresel harmoniğin özelliklerinden

$$Y_{lm}(0, \varphi) = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{1/2} \delta_{m0} \qquad \text{(IV.8.37)}$$

olduğu bilinmektedir. (IV.8.37) bağıntısı, $l = k$ ve $m = \mu \mp 1/2$ yazarak

$$Y_{k,\mu\mp\frac{1}{2}}(0,\varphi) = \left(\frac{2k+1}{4\pi}\right)^{1/2} \delta_{\mu,\pm\frac{1}{2}} \qquad \text{(IV.8.37a)}$$

şeklinde ve $l = k - 1$ ve $m = \mu \mp 1/2$ yazarak ta

$$Y_{k-1,\mu\mp\frac{1}{2}}(0,\varphi) = \left(\frac{2k-1}{4\pi}\right)^{1/2} \delta_{\mu,\pm\frac{1}{2}} \qquad \text{(IV.8.37b)}$$

şeklinde yazılabilir. (IV.8.37a) bağıntıları (IV.8.26a) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\chi_{k\mu} = \frac{1}{\sqrt{2(2k+1)}} \begin{pmatrix} -(2k+1-2\mu)^{1/2}\,\delta_{\mu,\frac{1}{2}} \\ (2k+1+2\mu)^{1/2}\,\delta_{\mu,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \frac{\sqrt{2k+1}}{\sqrt{4\pi}}$$

bulunur. Öte yandan, (IV.8.37b) bağıntıları (IV.8.26c) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\chi_{-k,\mu} = \frac{1}{\sqrt{2(2k-1)}} \begin{pmatrix} (2k-1+2\mu)^{1/2}\,\delta_{\mu,\frac{1}{2}} \\ (2k-1-2\mu)^{1/2}\,\delta_{\mu,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \frac{\sqrt{2k-1}}{\sqrt{4\pi}}$$

bulunur. Son iki bağıntıda gerekli kısaltmalar yapılırsa

$$\chi_{k\mu} = \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} -\delta_{\mu,\frac{1}{2}} \\ \delta_{\mu,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.8.38a)}$$

ve

$$\chi_{-k,\mu} = \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} \delta_{\mu,\frac{1}{2}} \\ \delta_{\mu,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.8.38b)}$$

sonuçlarına varılır. (IV.8.36) ve (IV.8.38a,b) bağıntılarını kullanarak

$$\sigma_r \chi_{k\mu} = \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\delta_{\mu,\frac{1}{2}} \\ \delta_{\mu,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = -\frac{\sqrt{k}}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} \delta_{\mu,\frac{1}{2}} \\ \delta_{\mu,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

veyâ

$$\sigma_r \chi_{k\mu} = -\chi_{-k,\mu} \qquad \text{(IV.8.39)}$$

sonucuna varılır. (IV.8.39) bağıntısı, σ_r üniter matrisinin $\chi_{k\mu}$ ve $\chi_{-k,\mu}$ spinörlerini birbirilerine dönüştürdüğünü göstermektedir.

(IV.9) SPİNE BAĞLI GENEL DALGA FONKSİYONU, HİDROJEN ATOMUNA UYGULAMA

Kuvantum mekaniğinde bir noktasal parçacık, bir ψ dalga fonksiyonu veyâ HİLBERT uzayında parçacığın kuvantum hâlini belirleyen bir ψ *hâl vektörü* ile tasvir edilir. Eğer ψ dalga fonksiyonu SCHRÖDİNGER denkleminin çözümü ise, bu takdirde yalnız parçacığın âdi fizik uzayındaki yerini belirleyen $\mathbf{r}$ yer vektörünün bir fonksiyonudur. $\hbar/2$ spinine sâhip bir parçacık için, örneğin bir elektron için yazılan SCHRÖDİNGER denklemi de elektrona ait yer koordinatlarının bir fonksiyonu olan bir dalga fonksiyonu verir, fakat elektronun S_z spini hakkında hiçbir bilgi vermez. Hâlbuki spine sâhip bir parçacığa ait genel dalga fonksiyonu, $\mathbf{r}$ dinamik değişkeninin yanında $S_z = \frac{1}{2}\hbar\,\sigma_z$ dinamik değişkeninin de

$$\Phi = \Phi(\mathbf{r}, S_z) = \Phi(\mathbf{r}, \sigma_z) \tag{IV.9.1}$$

şeklinde bir fonksiyonu olmalıdır. Burada (x, y, z) kartezyen koordinatları fizik uzayının herhangi bir noktasını gösterecek şekilde $(-\infty, \infty)$ aralıklarında değiştiği hâlde, σ_z nin $+1$ ve -1 değerlerini alan iki özdeğeri vardır. Bu özdeğerlerin, z kartezyen koordinat eksenine göre, $+1$ değeri için "spinin yukarı doğru" ve -1 değeri için de "spinin aşağı doğru" yönlendiği söylenir. Elektronun ışık hızının yanında ihmâl edilebilecek kadar küçük hızları için, elektronun spinine ve yerine etki eden kuvvetler kendi aralarında etkileşmezler ve böylece dalga fonksiyonu

$$\Phi(\mathbf{r}, S_z) = \psi(\mathbf{r})\,\chi(S_z) \tag{IV.9.2}$$

şeklinde, yâni yerin ve spinin fonksiyonlarının çarpımı olarak yazılabilir.

Şimdi

$$H_0\,\psi_n = E_n\,\psi_n \tag{IV.9.3}$$

şeklindeki zamanda bağımsız SCHRÖDİNGER denklemini düşünelim. Bu denklemdeki HAMİLTON operatörü

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \tag{IV.9.4}$$

şeklinde olsun, yâni küresel simetrik $V(r)$ potansiyel enerji fonksiyonunu ihtiva etsin. Bu takdirde, I. Bölüm ve II. Bölümdeki bilgilerimize göre, küresel koordinatlarda (IV.9.3) denkleminin çözümü olan özfonksiyonlar

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{IV.9.5}$$

şeklindedir ve n, l ve m kuvantum sayılarına bağlıdır. O hâlde, (IV.9.2) bağıntısı da $m_s = \pm 1/2$ olmak üzere

$$\Phi_{nlmm_s}(\mathbf{r}, S_z) = \psi_{nlm}(\mathbf{r})\,\chi_{m_s}(S_z) \tag{IV.9.6}$$

şeklini alır. Böylece, atom fiziğinde elektronun kuvantum hâlini belirleyen ve n, l ve m harfleri ile gösterilen üç kuvantum sayısının yerine n, l, m ve m_s harfleri ile gösterilen dört kuvantum sayısı kullanılmalıdır. Şüphesiz (IV.9.6) bağıntısı ile verilen Φ fonksiyonu da (IV.9.3) bağıntısı ile verilen SCHRÖDİNGER denkleminin çözümüdür. (IV.9.4) şeklindeki HAMİLTON operatörü için (IV.9.3) denklemi

$$H_0 \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm} \tag{IV.9.3a}$$

şeklini alır.

II. Bölümde hidrojen atomu için (IV.9.3a) bağıntısı ile verilen zamandan bağımsız SCHRÖDİNGER denklemini çözdük, yâni hidrojen atomunun E_n enerji özdeğerlerini ve ψ_{nlm} enerji özfonksiyonlarını bulduk. Bu maksatla (IV.9.4) bağıntısı ile verilen H_0 HAMİLTON operatöründe

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \tag{IV.9.7}$$

şeklindeki potansiyel enerji fonksiyonunu kullandık. Şüphesiz $V(r)$ fonksiyonunun uygun seçimi ile, H_0 HAMİLTON operatörü alkali atomlarının dolu elektron kabuklarının dışındaki tek elektron için de uygulanabilir. Şimdi hidrojen atomunun spektroskopik çizgilerinin *ince yapısını* veren enerji özdeğerlerini inceleyeceğiz. DİRAC denkleminin aracılığı ile rölâtivistik olmayan yaklaşıklık için elektronun spini ile yörünge açısal momentumu arasındaki etkileşmeden kaynaklanan

$$H_{sp} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} \tag{IV.9.8}$$

şeklindeki bir *spin-yörünge enerjisi* teriminin HAMİLTON operatörüne eklenmesi gerektiği bulunmuştur. H_{sp} terimini daha kısa yazabilmek için

$$f(r) \equiv \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr} \tag{IV.9.8a}$$

tanımı yapılırsa (IV.9.8) bağıntısı

$$H_{sp} = f(r)\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} \tag{IV.9.8b}$$

şeklini alır. Böylece, düzeltilmiş HAMİLTON operatörü

$$H = H_0 + H_{sp} \tag{IV.9.9}$$

şeklinde ve zamandan bağımsız SCHRÖDİNGER denklemi de (IV.9.3a) denkleminin genelleştirilmesi ile

$$H\psi_{nku} = E_{nk}\psi_{nku} \tag{IV.9.10}$$

şeklinde yazılabilir. (IV.9.10) denkleminin küresel koordinatlardaki çözümü

$$\psi_{nku} = G_{nk}(r)\,\chi_{ku}(\theta, \varphi) \tag{IV.9.11}$$

şeklindedir. (IV.9.10) denkleminin her iki yanı soldan ψ_{nku} vektörü ile skaler olarak çarpılırsa

$$\langle H \rangle \equiv (\psi_{nku}, H \psi_{nku}) = E_{nk} \qquad \text{(IV.9.12)}$$

bulunur. (IV.9.9) bağıntısının her iki yanının ψ_{nku} vektörüne göre beklenen değeri alınırsa (IV.9.2) bağıntısına bakarak

$$E_{nk} = \langle H \rangle = \langle H_0 \rangle + \langle H_{sp} \rangle \qquad \text{(IV.9.13)}$$

bulunur. Öte yandan, k ve l kuvantum sayılarının arasında

$$k(k+1) = l(l+1)$$

bağıntısı olduğundan, (IV.9.3a) denkleminin bir başka çözümü, (IV.9.5) çözümündeki Y_{lm} küresel harmoniği yerine χ_{ku} spinör küresel harmoniğinin yazılması ile elde edilebilir ve

$$\Phi_{nku}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\, \chi_{ku}(\theta, \varphi) \qquad \text{(IV.9.14)}$$

şeklindedir. Böylece, (IV.9.3a) özdeğer denkleminin yerine

$$H_0 \Phi_{nku} = E_n \Phi_{nku} \qquad \text{(IV.9.15)}$$

özdeğer denklemi alınabilir ve dolayısı ile de H_0 operatörünün iki çeşit beklenen değeri eşit olur :

$$(\Phi_{nku}, H_0 \Phi_{nku}) = (\psi_{nlm}, H_0 \psi_{nlm}) = E_n \qquad \text{(IV.9.16)}$$

Öte yandan, (IV.9.13) bağıntısında

$$|\langle H_{sp} \rangle| \ll |\langle H_0 \rangle| = |E_n| \qquad \text{(IV.9.17a)}$$

olduğundan,

$$E_{nk} = (\psi_{nku}, H \psi_{nku}) \cong (\Phi_{nku}, H \Phi_{nku}) \qquad \text{(IV.9.17b)}$$

yaklaşıklığı yapılabilir ve böylece (IV.9.13) bağıntısının sağ yanındaki beklenen değerler Φ_{nku} vektörü cinsinden olur :

$$E_{nk} \cong (\Phi_{nku}, H_0 \Phi_{nku}) + (\Phi_{nku}, H_{sp} \Phi_{nku}) \qquad \text{(IV.9.17c)}$$

(IV.9.16) bağıntısı (IV.9.17c) bağıntısında yerine yazılırsa

$$E_{nk} \cong E_n + (\Phi_{nku}, H_{sp} \Phi_{nku}) \qquad \text{(IV.9.18)}$$

elde edilir. Öte yandan, (IV.9.8b) ve (IV.9.14) bağıntılarına bakarak

$$(\Phi_{nku}, H_{sp} \Phi_{nku}) = (R_{nl}, f(r) R_{nl})(\chi_{ku}, \mathbf{S} . \mathbf{L} \chi_{ku}) \qquad \text{(IV.9.19)}$$

bağıntısı elde edilir. (IV.8.11a) bağıntısını kullanarak ve $\mathbf{S} = \hbar \boldsymbol{\sigma}/2$ olduğunu hatırlayarak

$$(\chi_{ku}, \mathbf{S} . \mathbf{L} \chi_{ku}) = -\frac{1}{2} \hbar^2 (k+1) \qquad \text{(IV.9.20)}$$

bulunur. Bu bağıntıyı kullanarak ve

$$\langle f(r) \rangle \equiv (R_{nl}, f(r) R_{nl}) \qquad \text{(IV.9.21)}$$

tanımını yaparak, (IV.9.19) bağıntısının aracılığı ile (IV.9.18) bağıntısı

$$E_{nk} = E_n - \frac{1}{2}\hbar^2(k+1)\langle f(r)\rangle \tag{IV.9.22}$$

şeklini alır. (IV.9.7) bağıntısı (IV.9.8a) bağıntısında yerine yazılırsa (IV.9.21) tanımının aracılığı ile

$$\langle f(r)\rangle = \frac{e^2}{2m^2c^2}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle \tag{IV.9.23}$$

bulunur. Problem II.2. ye bakarak (IV.9.23) bağıntısında

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle = \frac{1}{n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)a_0^3}$$

yazılırsa, (IV.9.22) bağıntısında yerine yazarak

$$E_{nk} - E_n = -\frac{e^2\hbar^2(k+1)}{2m^2c^2a_0^3n^3l(l+1)(2l+1)} \tag{IV.9.24}$$

sonucuna varılır. Bu sonucu $\alpha \equiv e^2/\hbar c$ bağıntısı ile tanımlanan ince yapı sâbiti cinsinden yazmaya çalışalım. BOHR yarıçapı $a_0 = \hbar^2/m e^2$ bağıntısı ile verildiği için

$$\frac{\hbar}{mc\,a_0} = \frac{\hbar}{mc}\cdot\frac{m e^2}{\hbar^2} \equiv \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha, \quad \frac{\hbar^2}{m^2c^2a_0^2} = \alpha^2$$

bağıntıları yazılabilir ve böylece (IV.9.24) bağıntısı

$$E_{nk} - E_n = -\frac{\alpha^2(k+1)}{n^3l(l+1)(2l+1)}\frac{e^2}{2a_0} \tag{IV.9.24a}$$

şeklini alır. Hidrojen atomunun spektroskopik çizgilerinin ince yapısını veren enerji farkları herhangi bir l için $j = l - 1/2$ ve $j = l + 1/2$ kuvantum hâllerine ait enerjilerin farkı cinsinden bulunur. (IV.8.13) bağıntılarına göre bu kuvantum hâlleri k kuvantum sayısının $k = l$ ve $k = -(l+1)$ değerlerine aittir. O hâlde, ince yapıya ait olan söz konusu enerji farkları

$$\Delta E = E_{n,-(l+1)} - E_{nl} \tag{IV.9.25}$$

bağıntısı ile tanımlanır (IV.9.24a) bağıntısı (IV.9.25) bağıntısında yerlerine yazılırsa ve

$$\Delta k = -(l+1) - l \equiv -(2l+1)$$

olduğuna dikkat edilirse

$$\Delta E = \frac{\alpha^2}{n^3l(l+1)}\frac{e^2}{2a_0} \tag{IV.9.25a}$$

sonucuna varılır.

ALIŞTIRMALAR VE PROBLEMLER

IV.1. **B** ve **C** iki vektörel alan veyâ $\boldsymbol{\sigma}$ ile komütatif olan iki vektör operatör olduğuna göre, DİRAC özdeşliği adı verilen

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{C}) = (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) I + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})$$

özdeşliğini ispatlayınız. $\mathbf{B} = \mathbf{C} = \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ özel hâli için bu özdeşliğin alacağı şekli bulunuz.

Yol gösterme : σ_x, σ_y ve σ_z operatörlerinin gerçeklediği dokuz bağıntıyı kullanınız.

IV.2. $\mathbf{r}$ yer vektörü olmak üzere $r\, \sigma_r = \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ bağıntısı ile tanımlanan σ_r matris operatörünün küresel koordinatlardaki ifâdesini bularak normlanmış özvektörlerini bulunuz.

SONUÇLAR : $\sigma_r \chi = \lambda \chi$ olmak üzere, $\lambda = \pm 1$ için :

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} \cos \dfrac{\theta}{2} e^{-\frac{1}{2} i\varphi} \\ \sin \dfrac{\theta}{2} e^{\frac{1}{2} i\varphi} \end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} -\sin \dfrac{\theta}{2} e^{-\frac{1}{2} i\varphi} \\ \cos \dfrac{\theta}{2} e^{\frac{1}{2} i\varphi} \end{pmatrix}$$

IV.3. $S_r = \dfrac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{S}$ ve $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ olmak üzere

$$[\mathbf{S}, S_r] = -[\mathbf{L}, S_r] = i\hbar \frac{\mathbf{r}}{r} \times \mathbf{S}$$

bağıntısını ve böylece $[\mathbf{J}, S_r] = 0$ olduğunu ispatlayınız.

IV.4. $\chi^+ \chi = 1$ normlama şartını sağlayan keyfî bir

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

sütun vektörü cinsinden σ_x, σ_y ve σ_z matris operatörlerine ait $\Delta \sigma_x$, $\Delta \sigma_y$ ve $\Delta \sigma_z$ belirsizliklerini ve $\Delta \sigma_x \Delta \sigma_y$ belirsizlik çarpımını hesaplayınız. $\chi = \alpha$ ve $\chi = \beta$ özel hâlleri için sonuçlar ne olur? Bulduğunuz sonuçları HEİSENBERG belirsizlik ilkesinin en genel ifâdesinin aracılığı ile elde edilen bağıntı ile karşılaştırınız.

SONUÇLAR : $\Delta \sigma_x = |a^2 - b^2|$, $\Delta \sigma_y = |a^2 + b^2|$, $\Delta \sigma_z = 2 |a| |b|$

IV.5. n bir tamsayı olduğuna ve A ve B uygun sâbitler olduğuna göre

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)^n = A\, I + B\, (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$$

bağıntısının varlığını ispat ediniz. $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ operatörünün özdeğerlerini ve özvektörlerini bulunuz ve böylece A ve B sâbitlerini n tamsayısı cinsinden hesaplayınız.

Yol gösterme : (IV.7.22), (IV.7.16) ve (IV.7.24a) bağıntılarını kullanınız.

IV.6. $(\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2)^2 = 6I - 2\,\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ bağıntısını ispat ediniz.

IV.7. Spin operatörleri $\mathbf{S}_1$ ve $\mathbf{S}_2$ olan iki parçacıktan oluşan bir sistem veriliyor. Parçacıkların izafî yer vektörü $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ve toplam spin operatörü de

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2}\hbar\,(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$$

olduğuna göre

$$S_{12} \equiv \frac{3}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = \frac{2}{\hbar^2}\left[\frac{3}{r^2}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{r})^2 - \mathbf{S}^2\right]$$

bağıntısını ispat ediniz.

IV.8. $j = 1$ için $\mathbf{J}$ açısal momentum vektör operatörünün kartezyen bileşenlerinin matris temsilleri

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

şeklinde olduğuna göre, $r\,J_r = \mathbf{r} \cdot \mathbf{J}$ bağıntısı ile tanımlanan J_r matris operatörünün küresel koordinatlardaki ifâdesini bularak, özdeğerlerini ve normlanmış özvektörlerini bulunuz.

SONUÇLAR : $J_r\,\chi = \lambda\,\hbar\,\chi$ olmak üzere $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0$ ve $\lambda_3 = -1$ için

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos\theta)\,e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos\theta)\,e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\,e^{-i\varphi} \\ \cos\theta \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\,e^{i\varphi} \end{pmatrix},$$

$$\chi_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 - \cos\theta)\,e^{-i\varphi} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \frac{1}{2}(1 + \cos\theta)\,e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

IV.9. Determinantı bire eşit olan 2×2 nci mertebeden her üniter matrisin

$$I \cos \theta + i\, \mathbf{n} \,.\, \boldsymbol{\sigma} \sin \theta = \exp\,(i\, \theta\, \mathbf{n} \,.\, \boldsymbol{\sigma})$$

şeklinde olduğunu ispat ediniz. Burada θ ve $\mathbf{n}$ birim vektörünün bileşenleri uygun şekilde seçilmiş parametrelerdir. Bu matrisin özdeğerlerini ve özvektörlerini belirleyiniz.

IV.10. $j = 1$ için $\mathbf{J}$ açısal momentum vektör operatörünün kartezyen bileşenlerinin hiçbiri köşegen olmayan matris temsillerinin

$$J_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

şekillerinde olduğu bilinmektedir. $\mathbf{n}$ birim vektörünün kartezyen bileşenleri n_x, n_y ve n_z dir. Önce

$$(\mathbf{n} \,.\, \mathbf{J})^3 = \hbar^2\, \mathbf{n} \,.\, \mathbf{J}$$

olduğunu gösteriniz. Bu bağıntıyı kullanarak

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\, \theta\, \mathbf{n} \,.\, \mathbf{J}\right) = I + \frac{i}{\hbar}\, \mathbf{n} \,.\, \mathbf{J} \sin\theta + \frac{1}{\hbar^2}\, (\mathbf{n} \,.\, \mathbf{J})^2 (\cos \theta - 1)$$

olduğunu gösteriniz. Bu üniter matris $\mathbf{n}$ birim vektörünün belirlediği eksen etrafında θ açısı kadar bir dönmeyi temsil eder. Bu matrisin özdeğerlerini θ açısı cinsinden bulunuz.

IV.11. (IV.9.10) bağıntısı ile verilen

$$H\, \psi_{nku} = E_{nk}\, \psi_{nku}$$

şeklindeki genelleştirilmiş SCHRÖDİNGER denkleminde (IV.9.11) bağıntısı ile verilen

$$\psi_{nku} = G_{nk}(r)\, \chi_{ku}\,(\theta, \varphi)$$

dalga fonksiyonunu yerine yazarak

$$\frac{d^2 G_{nk}}{dr^2} + \frac{2}{r}\, \frac{d\, G_{nk}}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\,(E_{nk} - V) - \frac{k\,(k+1)}{r^2} + m\,(k+1)\, f(r)\right] G_{nk} = 0$$

radyal denklemini bulunuz.

V. BÖLÜM

PARÇACIK SİSTEMLERİ

(V.1) İKİ PARÇACIKTAN OLUŞAN SİSTEMLER

Lâboratuvar sisteminde kütleleri m_1 ve m_2 olan 1 ve 2 sayılı iki parçacığa ait HAMİLTON operatörü paragraf (II.2) de gösterildiği gibi

$$H = H(1, 2) = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \qquad \text{(V.1.1)}$$

şeklindedir. Burada $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ iki parçacıktan oluşan sistemin potansiyel enerjisidir ve

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2) + V_{12}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \qquad \text{(V.1.2)}$$

şeklinde üç potansiyel enerjinin toplamıdır. Bu bağıntıda ilk iki terim dış kuvvetlerin 1 ve 2 sayılı parçacıkların üzerindeki etkisini göstermektedir ve özel hâlde bir 3 sayılı parçacığın varlığını ifâde eder. Üçüncü terim ise, 1 ve 2 sayılı parçacıkların arasındaki *etkileşme potansiyel enerjisidir.* Böylece, zamandan bağımsız SCHRÖDİNGER denklemi

$$H(1, 2)\, \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\, \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \qquad \text{(V.1.3)}$$

şeklinde yazılabilir. Genel hâlde (V.1.3) denklemi çözülemez. Fakat iki özel hâl için bu denklemin çözülebilme olanağı vardır :

Birinci özel hâlde $V_1 = V_2 = 0$ dır, yâni dış kuvvetler sıfırdır. Bu takdirde üç cisim problemi kendiliğinden iki cisim problemine indirgenir. Bu özel hâldeki problemin çözümünü, yâni iki cisim probleminin tek cisim problemine indirgenmesini paragraf (II.2) de gördük.

İkinci özel hâlde $V_{12} = 0$ dır, yâni parçacıkların arasındaki etkileşme potansiyel enerjisi sıfırdır. Bu paragrafta dış kuvvetlerin etkisi altında bulunan, fakat etkileşmeyen iki parçacık için (V.1.3) denkleminin çözümünü inceleyeceğiz. Şimdi (II.2.6) bağıntısında verilen tanımları kullanarak

$$H_1(1) = \frac{p_1^2}{2m_1} + V_1(\mathbf{r}_1) = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 + V_1(\mathbf{r}_1) \tag{V.1.4a}$$

$$H_2(2) = \frac{p_2^2}{2m_2} + V_2(\mathbf{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V_2(\mathbf{r}_2) \tag{V.1.4b}$$

tanımlarını yapalım. $H_1(1)$ ve $H_2(2)$ operatörleri 1 ve 2 sayılı parçacıklara ait HAMİLTON operatörleridir. (V.1.2) bağıntısı (V.1.1) bağıntısında yerine yazılırsa

$$H(1, 2) = \frac{P_1^2}{2m_1} + V_1(\mathbf{r}_1) + \frac{P_2^2}{2m_2} + V_2(\mathbf{r}_2) + V_{12}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

bağıntısı bulunur. Eğer (V.1.4a,b) bağıntıları bu son bağıntıda yerlerine yazılırsa

$$H(1, 2) = H_1(1) + H_2(2) + V_{12} \tag{V.1.5}$$

sonucuna varılır. İncelediğimiz özel hâl için (V.1.5) bağıntısı

$$H(1, 2) = H_1(1) + H_2(2) \tag{V.1.6}$$

şeklini alır. Eğer bu bağıntıyı kullanarak (V.1.3) denkleminde,

$$H_1(1)\,\psi_n(1) = E_n^{(1)}\,\psi_n(1) \tag{V.1.7a}$$

$$H_2(2)\,\psi_k(2) = E_k^{(2)}\,\psi_k(2) \tag{V.1.7b}$$

özdeğer denklemlerinin aracılığı ile tanımlanan $\psi_n(1)$ ve $\psi_k(2)$ özfonksiyonları cinsinden,

$$\Phi_{nk}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \Phi_{nk}(1, 2) = \psi_n(1)\,\psi_k(2) \tag{V.1.8}$$

yazılırsa

$$[H_1(1) + H_2(2)]\,\psi_n(1)\,\psi_k(2) = E_{nk}\,\psi_n(1)\,\psi_k(2)$$

veyâ

$$\psi_k(2)\,H_1(1)\,\psi_n(1) + \psi_n(1)\,H_2(2)\,\psi_k(2) = E_{nk}\,\psi_n(1)\,\psi_k(2)$$

bulunur. Bu bağıntının her iki yanını $\psi_n(1)\,\psi_k(2)$ ile bölerek

$$\frac{H_1(1)\,\psi_n(1)}{\psi_n(1)} + \frac{H_2(2)\,\psi_k(2)}{\psi_k(2)} = E_{nk} \tag{V.1.9}$$

elde edilir. (V.1.7a,b) bağıntılarını (V.1.9) bağıntısında yerlerine yazarak

$$E_n^{(1)} + E_k^{(2)} = E_{nk} \tag{V.1.10}$$

sonucuna varılır. (V.1.8) ve (1.1.10) bağıntılarına bakarak genel hâlde şu sonuca varıyoruz : Herhangi sayıdaki parçacıklardan oluşan bir sistemin hareketini tasvir eden dalga fonksiyonu bu parçacıklardan her birine ait dalga fonksiyonlarının çarpımına eşittir ve sistemin enerjisi de parçacıkların ayrı ayrı enerjilerinin toplamına eşittir.

(V.2) ÖZDEŞ PARÇACIKLAR

Aynı cinsten ve iç özellikleri tamamen aynı olan n tane parçacıktan oluşan bir sistem göz önüne alalım. Biribirlerinin yerlerine en genel mümkün şartlar altında konulduklarında sistemin fiziksel durumunda hiçbir değişiklik olmuyorsa, böyle parçacıkların *özdeş* oldukları söylenir. MAXWELL ve BOLTZMANN ın klâsik istatistiksel mekaniğinde, parçacıkların her birine ait kesin olarak tanımlanabilen yörüngelerin varlığı, yörüngelerinin dışında özdeş olan parçacıkları ilke bakımından biribirlerinden ayırt etmeyi mümkün kılar. Çünkü her parçacık bir deney esnasında yörüngesi boyunca takip edilebilir. Kuvantum mekaniğinde, parçacıkları tek tek tasvir edebilen dalga paketlerinin sonlu büyüklüğü, özellikle biribirleriyle hatırı sayılır ölçüde etkileşiyorlarsa, özdeş parçacıkları yerlerine bakarak biribirlerinden ayırt etmeyi çok kere imkânsız kılar. Bu, özellikle bir atomdaki elektronlar için doğrudur, çünkü bir atomdaki elektronları hareket eden dalga paketlerinin aracılığı ile tasvir etmek imkânsızdır. Bununla beraber, farklı atomlara ait elektronların, biribirlerinden yeteri kadar ayrılmış oldukları için, yaklaşık olarak ayırt edilebilir oldukları kabul edilebilir.

Şimdi iki özdeş parçacık hâlini inceleyelim. İki özdeş parçacık için SCHÖRDİNGER denklemi

$$H(1,2)\,\psi(1,2) = E\,\psi(1,2) \qquad \text{(V.2.1)}$$

şeklindedir. Burada 1 ve 2 sayıları, parçacıklardan her birinin yerini ve spinini belirleyen bütün koordinatlarını göstermektedir. HAMİLTON operatörü 1 ve 2 sayılarına göre simetriktir, yâni

$$H(1,2) = H(2,1) \qquad \text{(V.2.2)}$$

bağıntısını sağlar. Çünkü parçacıkların özdeş olması demek, bu parçacıkların H değişmeden aralarında yer değiştirebilmesi demektir. Öte yandan, (V.2.1) bağıntısı ile verilen SCHRÖDİNGER denklemi, 1 ve 2 sayılı parçacıklar aralarında yer değiştirdiği zaman aynı kalmalıdır. O hâlde, (V.2.2) bağıntısını kullanarak (V.2.1) bağıntısı

$$H(1,2)\,\psi(2,1) = E\,\psi(2,1) \qquad \text{(V.2.3)}$$

şeklini alır. Böylece, 1 ve 2 sayılı parçacıkların yer değiştirmesi ile ortaya çıkan farklı iki özfonksiyon aynı E özdeğerine aittir ve soysuzlaşma vardır. Bu tür bir soysuzlaşmaya *mübadele soysuzlaşması* adı verilir. $\psi(1,2)$ ve $\psi(2,1)$ aynı lineer diferansiyel denklemin çözümü oldukları için bu ikisinin

$$\Phi(1, 2) = A\,\psi(1, 2) + B\,\psi(2, 1) \qquad \text{(V.2.4)}$$

şeklindeki bir lineer toplamı da gene (V.2.1) denkleminin bir çözümüdür. Öte yandan, $|\Phi(1, 2)|^2$ ihtimâl yoğunluğu, özdeş parçacıklar aralarında yer değiştirdiği zaman aynı kalmalıdır ve böylece

$$|\Phi(1, 2)|^2 = |\Phi(2, 1)|^2 \qquad \text{(V.2.5)}$$

bağıntısı gerçeklenmelidir. Öte yandan, $A\psi(1, 2)$ ve $\psi(1, 2)$ aynı kuvantum hâlini gösterdiğinden

$$|A\psi(1, 2)|^2 = |\psi(1, 2)|^2$$

bağıntısı yazılabilir ve buradan $|A|^2 = 1$ elde edilir. Benzer şekilde,

$$|B\psi(2, 1)|^2 = |\psi(2, 1)|^2$$

bağıntısından da $|B|^2 = 1$ bulunur. O hâlde, A ve B kompleks sayıları

$$A = e^{i\alpha_1}, \qquad B = e^{i\alpha_2}$$

şeklinde birer keyfî faz çarpanıdırlar ve böylece (V.2.4) bağıntısı

$$\Phi(1, 2) = e^{i\alpha_1}\psi(1, 2) + e^{i\alpha_2}\psi(2, 1) \qquad \text{(V.2.6)}$$

veyâ $\alpha = \alpha_2 - \alpha_1$ faz farkı cinsinden

$$e^{-i\alpha_1}\Phi(1, 2) = \psi(1, 2) + e^{i\alpha}\psi(2, 1) \qquad \text{(V.2.6a)}$$

şeklinde yazılabilir. Öte yandan,

$$|e^{-i\alpha_1}\Phi(1, 2)|^2 \equiv |\Phi(1, 2)|^2$$

olduğu için $\alpha_1 = 0$ seçilebilir ve (V.2.6a) bağıntısı

$$\Phi(1, 2) = \psi(1, 2) + e^{i\alpha}\psi(2, 1) \qquad \text{(V.2.7)}$$

şeklini alır. (V.2.7) bağıntısı, özdeş parçacıklar şartını ifâde eden (V.2.5) bağıntısında yerine yazılırsa $e^{i\alpha}$ belirlenebilir. Bu maksatla (V.2.7) bağıntısının

$$\Phi^*(1, 2) = \psi^*(1, 2) + e^{-i\alpha}\psi^*(2, 1) \qquad \text{(V.2.7a)}$$

şeklindeki kompleks eşleniği kendisi ile taraf tarafa çarpılırsa

$$|\Phi(1, 2)|^2 = |\psi(1, 2)|^2 + |\psi(2, 1)|^2 + \psi(1, 2)\,\psi^*(2, 1)\,e^{-i\alpha} + \psi(2, 1)\,\psi^*(1, 2)\,e^{i\alpha} \qquad \text{(V.2.8a)}$$

bulunur. Bu bağıntıdaki 1 ve 2 sayıları aralarında değiştirilirse

$$|\Phi(2, 1)|^2 = |\psi(2, 1)|^2 + |\psi(1, 2)|^2 + \psi(2, 1)\,\psi^*(1, 2)\,e^{-i\alpha} + \psi(1, 2)\,\psi^*(2, 1)^{i\alpha} \qquad \text{(V.2.8b)}$$

elde edilir. (V.2.5) bağıntısından ötürü (V.2.8a,b) bağıntılarının sol yanları eşittir ve sağ yanlarının da eşit olabilmesi için

$$e^{i\alpha} = e^{-i\alpha}$$

veyâ

$$e^{2i\alpha} = 1 \equiv e^{2ik\pi}, \qquad k = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

şartı gerçeklenmelidir. Buradan

$$e^{i\alpha} = \pm 1 \equiv e^{ik\pi} \tag{V.2.9}$$

bulunur. Eğer (V.2.9) bağıntısı (V.2.7) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\Phi(1, 2) = \psi(1, 2) \pm \psi(2, 1) \tag{V.2.10}$$

sonucuna varılır. O hâlde özdeş parçacıklar, parçacıkların aralarında yer değiştirmelerine göre, yâ

$$\Phi_s(1, 2) = \psi(1, 2) + \psi(2, 1) = \Phi_s(2, 1) \tag{V.2.11a}$$

şeklinde bir *simetrik dalga fonksiyonu*na, yâ da

$$\Phi_a(1, 2) = \psi(1, 2) - \psi(2, 1) = -\Phi_a(2, 1) \tag{V.2.11b}$$

şeklinde bir *antisimetrik dalga fonksiyonu*na sâhiptir. Bu sonuçlar şüphesiz herhangi sayıdaki özdeş parçacık için de doğrudur. Örneğin, üç özdeş parçacık için simetrik ve antisimetrik dalga fonksiyonları (V.2.10) bağıntısına benzer şekilde

$$\begin{aligned} \Phi(1, 2, 3) = {} & [\psi(1, 2, 3) + \psi(2, 3, 1) + \psi(3, 1, 2)] \\ & \pm [\psi(2, 1, 3) + \psi(1, 3, 2) + \psi(3, 2, 1] \end{aligned} \tag{V.2.12}$$

şeklinde yazılabilir. (V.2.12) bağıntısında $3! = 6$ adet terim vardır ve n adet özdeş parçacık için $n!$ sayıda terim yazmak gerekir.

Şimdi bir dalga fonksiyonunun simetri özelliğinin zamanla değişmediğini göstereceğiz. Bu maksatla bir t ânında simetrik olan bir Φ_s dalga fonksiyonunun

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

şeklindeki zamana bağlı SCHRÖDİNGER denklemini sağladığını varsayalım. Özdeş parçacıklar için H simetrik olduğundan $H\Phi_s$ fonksiyonu da simetriktir. O hâlde, SCHRÖDİNGER denklemine göre, $\partial\Phi_s/\partial t$ fonksiyonu da simetriktir. Böylece t ânında Φ_s simetrik ise, $t + dt$ ânında bu fonksiyon $\Phi_s + (\partial\Phi_s/\partial t)\, dt$ şeklini alır ve simetriktir. Dalga fonksiyonunun bu şekilde adım adım integrasyonu istenildiği kadar uzun zaman aralıkları için devam ettirilebilir ve Φ_s nin her zaman simetrik olduğu görülür. Benzer şekilde, Φ_a herhangi bir anda antisimetrik ise, $H\Phi_a$ ve böylece $\partial\Phi_a/\partial t$ antisimetriktir ve dalga fonksiyonunun adım adım integrasyonu Φ_a nın her zaman antisimetrik olduğunu gösterir.

(V.3) ETKİLEŞMEYEN ÖZDEŞ PARÇACIKLAR, KUVANTUM İSTATİSTİĞİ VE PAULİ DIŞARILAMA İLKESİ

Özdeş parçacıklar için (V.1.4a,b) bağıntıları

$$H(1) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 + V(\mathbf{r}_1) \tag{V.3.1a}$$

$$H(2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_2) \tag{V.3.1b}$$

şekillerini alır. *Etkileşmeyen iki özdeş parçacık* için (V.1.6) bağıntısı da

$$H(1, 2) = H(1) + H(2) \tag{V.3.2}$$

şeklini alır. (V.3.2) ile tanımlanan HAMİLTON operatörü (V.2.2) bağıntısı ile verilen özdeşlik şartını gerçekler. Öte yandan, (V.1.7a,b) denklemleri

$$H(1)\,\psi_n(1) = E_n\,\psi_n(1) \tag{V.3.3a}$$

$$H(2)\,\psi_k(2) = E_k\,\psi_k(2) \tag{V.3.3b}$$

şekillerini alırlar ve

$$H(1, 2)\,\Phi_{nk}(1, 2) = E_{nk}\,\Phi_{nk}(1, 2) \tag{V.3.4}$$

şeklindeki SCHRÖDİNGER denkleminin etkileşmeyen parçacıklara ait (V.1.8) şeklindeki çözümü ile özdeş parçacıklara ait (V.2.10) şeklindeki çözümü birleştirilirse

$$\Phi_{nk}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_n(1)\,\psi_k(2) \pm \psi_n(2)\,\psi_k(1)\right] \tag{V.3.5}$$

sonucuna varılır. (V.3.5) dalga fonksiyonu, (V.3.4) SCHRÖDİNGER denkleminin çözümüdür ve (V.3.2) şeklindeki etkileşmeyen iki özdeş parçacığa ait HAMİLTON operatörünün $E_n + E_k$ özdeğerine ait özfonksiyonudur. $\psi_n(1)$ ve $\psi_k(2)$ özfonksiyonları normlanmış olduğuna göre $1/\sqrt{2}$ katsayısı $\Phi_{nk}(1, 2)$ özfonksiyonunun normlama katsayısıdır.

Simetrik dalga fonksiyonlarına sâhip özdeş parçacıklar BOSE-EİNSTEİN istatistiğine uyarlar ve bu sebepten ötürü *boson* adını alırlar. Antisimetrik dalga fonksiyonlarına sâhip özdeş parçacıklar da FERMİ-DİRAC istatistiğine uyarlar ve bu sebepten ötürü *fermion* adını alırlar. Böylece kuvantum mekaniğinde etkileşmeyen özdeş parçacıklar klâsik istatistiğe uymazlar ve yukarda söz konusu edilen farklı iki istatistikten birine ve yalnız birine uyarlar. Bu istatistiklerin ikisine birden *kuvantum istatistiği* adı verilir. (Bak. Ahmed Yüksel ÖZEMRE, Teorik Fizik Dersleri Cild 5: ISI TEORİSİ).

Bir parçacığın iç spininin değeri ile bu türlü parçacıklardan oluşan sistemlere ait dalga fonksiyonlarının simetri özelliği arasında yakın bir ilişki vardır. Spinleri $\hbar$ nin tam katı değerinde olan parçacıklar bosondur. Spinleri $\hbar$ nin buçuklu tam katı değerinde olan parçacıklar fermiondur. Bu, hiçbir ayrıcalığı olmayan bir ampirik kuraldır. Spini $s = 0$ olan π mezonları ve spini $s = 1$ olan fotonlar bosondur. Öte yandan, spinleri $s = 1/2$ olan elektronlar, protonlar ve nötronlar fermiondur.

(V.3.5) bağıntısı fermionlar için

$$\Phi^a_{nk}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_n(1) & \psi_k(1) \\ \psi_n(2) & \psi_k(2) \end{vmatrix} \tag{V.3.5a}$$

şeklinde yazılabilir. Eğer iki fermion aynı kuvantum hâlinde ise $k = n$ yazılmalıdır. (V.3.5a) bağıntısından $k = n$ için

$$\Phi^a_{nn}(1,2) = 0 \tag{V.3.6}$$

sonucuna varılır. O hâlde, iki fermion aynı kuvantum hâlinde bulunamaz. Bu sonuca *PAULİ dışarılama ilkesi* adı verilir. Dışarılama ilkesi şüphesiz etkileşmeyen fermionlar için geçerlidir. Fakat bu ilke az etkileşen fermionlar için de yaklaşık olarak doğrudur. Örneğin bu ilke bir atomdaki elektronlar için yaklaşık olarak doğrudur. Bu sebepten ötürü, dışarılama ilkesi PAULİ tarafından kimyasal elementlerin peryodik cetvelinin bir açıklamasını yapmak üzere ilk kez postüle edilmiştir. Öte yandan, dışarılama ilkesi bosonlar için geçerli değildir.

Bir atomda $1, 2, \ldots, n$ sayılı elektronlar $a_1, a_2, \ldots, a_n$ ile adlandırılan kuvantum hâllerinden birinde ve yalnız birinde bulunurlar. Burada a_k simgesi, (n, l, m, m_s) kuvantum sayıları ile belirlenen kuvantum hâllerinden herhangi birini göstermektedir. Buna göre, parçacık sisteminin normlanmış dalga fonksiyonu yaklaşık olarak

$$\Phi_{a_1 \cdots a_n}(1, \ldots, n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_{a_1}(1) & \psi_{a_2}(1) \cdots \psi_{a_n}(1) \\ \psi_{a_1}(2) & \psi_{a_2}(2) \cdots \psi_{a_n}(2) \\ \cdot & \cdot \;\cdots\; \cdot \\ \psi_{a_1}(n) & \psi_{a_2}(n) \cdots \psi_{a_n}(n) \end{vmatrix} \tag{V.3.7}$$

şeklindedir. Herhangi iki kuvantum hâli aynı ise, örneğin $a_k = a_j$ ise, (V.3.7) bağıntısının sağ yanındaki determinant ve böylece sistemin yaklaşık dalga fonksiyonu Φ sıfır olur ve dışarılama ilkesi yaklaşık olarak gerçeklenir.

(V.4) HELYUM ATOMU

Özdeş parçacıkların incelenmesine bir örnek olmak üzere, helyum atomuna ait elektronların kuvantum hâllerini inceleyeceğiz. Helyum atomu $+2e$ yüküne sâhip bir çekirdek ve bu çekirdeğin etrafında dönen $-e$ yüküne sâhip iki elektrondan oluşmuştur. Bu parçacık sistemine ait HAMİLTON operatörü

$$H(1,2) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \tag{V.4.1}$$

şeklindedir ve $H(1,2) = H(2,1)$ şartını sağlar. Burada $\mathbf{p}_1$ ve $\mathbf{p}_2$ iki elektrona ait momentum operatörleri ve $\mathbf{r}_1$ ve $\mathbf{r}_2$ de bu elektronların çekirdeğe göre yer vektörleridir. Öte yandan, $r_{12} = |\mathbf{r}| = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ iki elektron arasındaki uzaklıktır. (V.4.1) bağıntısının sağ yanındaki ilk dört terim elektronların kinetik enerji operatörlerini ve çekirdeğin COULOMB alanı içerisindeki potansiyel enerjilerini temsil eder. Son terim ise, iki elektron arasındaki elektrostatik itme ile ilgili olan etkileşme enerjisidir. İlk yaklaşıklıkta bu terim ihmâl edilebilir. Böylece,

$$H(1) = \frac{p_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1}, \quad H(2) = \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_2} \tag{V.4.2}$$

olmak üzere, paragraf (V.3) teki bağıntılar uygulanabilir ve

$$H(1,2) = H(1) + H(2) \tag{V.4.3}$$

yazılabilir. Zamandan bağımsız SCHRÖDİNGER denklemi

$$H(1,2)\,\Phi_{nk}(1,2) = E_{nk}\,\Phi_{nk}(1,2) \tag{V.4.4}$$

şeklinde bir özdeğer denklemidir ve bu denklemin çözümünden $H(1,2)$ nin

$$\Phi_{nk}^a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_n(1)\,\psi_k(2) - \psi_n(2)\,\psi_k(1)\right] \tag{V.4.5a}$$

şeklinde antisimetrik özfonksiyonları

$$\Phi_{nk}^s = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_n(1)\,\psi_k(2) + \psi_n(2)\,\psi_k(1)\right] \tag{V.4.5b}$$

şeklinde de simetrik özfonksiyonları elde edilir. Özdeğerler ise,

$$E_{nk} = E_n + E_k \tag{V.4.6}$$

şeklindedir. Bu son üç bağıntıdaki $\psi_n(1)$ ve E_n, 1 sayılı elektrona ait

$$\left(\frac{p_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1}\right)\psi_n(1) = E_n\,\psi_n(1) \tag{V.4.7a}$$

şeklindeki SCHRÖDİNGER denkleminin ve $\psi_k(2)$ ve E_k da, 2 sayılı elektrona ait

$$\left(\frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_2}\right)\psi_k(2) = E_k\,\psi_k(2) \tag{V.4.7b}$$

şeklindeki SCHRÖDİNGER denkleminin çözümleridir. Şüphesiz $\psi_n(1)$ ve $\psi_k(2)$, *hidrojenimsi* bir atomun özfonksiyonlarıdır ve E_n ve E_k da böyle bir atomun özdeğerleridir. Helyum atomundaki elektronlara ait dalga fonksiyonlarının her biri, paragraf (IV.9) daki bilgilere göre, bir yer fonksiyonu ile bir spin fonksiyonunun çarpımı olarak yazılmalıdır. Söz konusu olan yer fonksiyonları (V.4.5a,b) bağıntıları ile verilmiştir ve spin fonksiyonları ise, (IV.7.25a,b,c) bağıntılarına göre, $m = 1,\ 0,\ -1$ olmak üzere

$$\chi_{1m} = \alpha_1\,\alpha_2\,,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\alpha_1\,\beta_2 + \alpha_2\,\beta_1),\quad \beta_1\,\beta_2 \tag{V.4.8a}$$

şeklindeki simetrik fonksiyonlardan oluşan bir triplet ve

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\alpha_1\,\beta_2 - \alpha_2\,\beta_1) \tag{V.4.8b}$$

şeklindeki bir tek antisimetrik fonksiyondan ibaret olan bir singlettir. Öte yandan, helyum atomuna ait dalga fonksiyonlarının, elektronları belirleyen 1 ve 2 sayılarının aralarında yer değiştirmesine göre antisimetrik olması gerektiğini biliyoruz. O hâlde, söz konusu bu fonksiyonlar, yâ antisimetrik yer fonksiyonlarından biri ile simetrik spin fonksiyonlarının

$$\Phi^a_{nk}\,\chi_{1m} \tag{4.V.9a}$$

şeklindeki çarpımları olarak, yâ da simetrik yer fonksiyonlarından biri ile antisimetrik spin fonksiyonunun

$$\Phi^s_{nk}\,\chi_{00} \tag{V.4.9b}$$

şeklindeki çarpımı olarak yazılmalıdır. Böylece, helyum atomunun antisimetrik dalga fonksiyonları aşağıdaki dört çeşit çarpımlar şeklindedir :

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{1}{\sqrt{2}}\,[\psi_n(1)\,\psi_k(2) - \psi_n(2)\,\psi_k(1)]\,\alpha_1\,\alpha_2\\
&\frac{1}{\sqrt{2}}\,[\psi_n(1)\,\psi_k(2) - \psi_n(2)\,\psi_k(1)]\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\alpha_1\,\beta_2 + \alpha_2\,\beta_1)\\
&\frac{1}{\sqrt{2}}\,[\psi_n(1)\,\psi_k(2) - \psi_n(2)\,\psi_k(1)]\,\beta_1\,\beta_2
\end{aligned}\right\} \tag{V.4.9a}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,[\psi_n(1)\,\psi_k(2) + \psi_n(2)\,\psi_k(1)]\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\alpha_1\,\beta_2 - \alpha_2\,\beta_1) \tag{V.4.9b}$$

Buraya kadar ilk yaklaşıklıkta (V.4.3) HAMİLTON operatörünü kullandık ve (V.4.6) bağıntısı ile verilen E_{nk} enerji özdeğerlerini elde ettik. Öte yandan, helyum atomuna ait HAMİLTON operatörü (V.4.1) bağıntısı ile verilir ve

$$V_{12} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{e^2}{r_{12}} \tag{V.4.10}$$

olmak üzere

$$H(1,2) = H(1) + H(2) + V_{12} \tag{V.4.11}$$

şeklinde de yazılabilir. Enerji özdeğerlerinin gerçeğe daha uygun bir yaklaşık ifâdesini bulabilmek için (V.4.11) bağıntısının her iki yanının (V.4.9a,b) fonksiyonlarına göre beklenen değerleri alınmalıdır. Böylece,

$$E_{nk} \cong \langle H(1,2)\rangle = \langle H(1)\rangle + \langle H(2)\rangle + \langle V_{12}\rangle$$

yazılabilir. (V.4.2) ve (V.4.7a,b) bağıntılarına göre

$$\langle H(1)\rangle = E_n, \qquad \langle H(2)\rangle = E_k$$

olduğundan,

$$E_{nk} = E_n + E_k + \langle V_{12}\rangle \tag{V.4.12}$$

elde edilir. Öte yandan $\langle V_{12}\rangle$ büyüklüğü, (V.4.9a) dalga fonksiyonlarının kullanılması ile

$$\langle V_{12}\rangle = \iint \Phi^{a*}_{nk}\, \overset{+}{\chi}_{1m}\, V_{12}\, \Phi^{a}_{nk}\, \chi_{1m}\, d\tau_1\, d\tau_2 \tag{V.4.13a}$$

integrali ile ve (V.4.9b) dalga fonksiyonlarının kullanılması ile de

$$\langle V_{12}\rangle = \iint \Phi^{s*}_{nk}\, \overset{+}{\chi}_{00}\, V_{12}\, \Phi^{s}_{nk}\, \chi_{00}\, d\tau_1\, d\tau_2 \tag{V.4.13b}$$

integrali ile hesaplanabilir. χ_{1m} ve χ_{00} özvektörlerinin normlama bağıntıları

$$\overset{+}{\chi}_{1m}\, \chi_{1m} = \overset{+}{\chi}_{00}\, \chi_{00} = 1$$

şeklinde olduğu için (V.4.13a,b) bağıntılarından

$$\langle V_{12}\rangle = \iint |\Phi^{a}_{nk}|^2\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 \tag{V.4.14a}$$

ve

$$\langle V_{12}\rangle = \iint |\Phi^{s}_{nk}|^2\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 \tag{V.4.14b}$$

sonuçlarına varılır. (V.4.5a,b) bağıntılarına bakarak (V.4.14a,b) bağıntılarının ikisi bir arada

$$\langle V_{12}\rangle = \frac{1}{2}\iint |\psi_n(1)\,\psi_k(2) \pm \psi_n(2)\,\psi_k(1)|^2\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 \tag{V.4.15}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $d\tau_1$, $\mathbf{r}_1$ yer vektörünün gösterdiği nokta civarındaki hacım elemanıdır ve $d\tau_2$ de $\mathbf{r}_2$ yer vektörünün gösterdiği nokta civarındaki hacım elemanıdır. Eğer

$$Q(1,2) = |\psi_n(1)|^2\, |\psi_k(2)|^2 \pm \psi_n^*(1)\,\psi_k^*(2)\,\psi_n(2)\,\psi_k(1) \tag{V.4.16a}$$

tanımı yapılırsa

$$Q(2,1) = |\psi_n(2)|^2\, |\psi_k(1)|^2 \pm \psi_n^*(2)\,\psi_k^*(1)\,\psi_n(1)\,\psi_k(2) \tag{V.4.16b}$$

bulunur ve böylece (V.4.15) bağıntısı

$$\langle V_{12}\rangle = \frac{1}{2}\int\int [Q(1,2) + Q(2,1)]\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 \qquad \text{(V.4.17)}$$

şeklini alır. Öte yandan

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \equiv |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$$

olduğundan, (V.4.10) bağıntısına bakarak

$$V_{12} = V_{21}$$

elde edilir. Bu sonuç

$$\int\int Q(1,2)\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 \equiv \int\int Q(2,1)\, V_{21}\, d\tau_2\, d\tau_1$$

özdeşliğinde yerine yazılırsa

$$\int\int Q(1,2)\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 = \int\int Q(2,1)\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 \qquad \text{(V.4.18)}$$

bulunur. (V.4.18) bağıntısı (V.4.17) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\langle V_{12}\rangle = \int\int Q(1,2)\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 \qquad \text{(V.4.17a)}$$

elde edilir. (V.4.16a) bağıntısını (V.4.17a) bağıntısında yerine yazarak ve

$$F_{nk} = \int\int |\psi_n(1)|^2\, |\psi_k(2)|^2\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 \qquad \text{(V.4.19a)}$$

ve

$$G_{nk} = \int\int \psi_n^*(1)\, \psi_k^*(2)\, \psi_n(2)\, \psi_k(1)\, V_{12}\, d\tau_1\, d\tau_2 \qquad \text{(V.4.19b)}$$

integrallerini tanımlayarak

$$\langle V_{12}\rangle = F_{nk} \pm G_{nk} \qquad \text{(4.V.20)}$$

sonucuna varılır. F_{nk} ve G_{nk} integralleri

$$F_{nk} = (\psi_n(1)\, \psi_k(2),\, V_{12}\, \psi_n(1)\, \psi_k(2))$$

ve

$$G_{nk} = (\psi_n(1)\, \psi_k(2),\, V_{12}\, \psi_n(2)\, \psi_k(1))$$

skaler çarpımları şeklinde de yazılabilir. (V.4.20) bağıntısı (V.4.12) bağıntısında yerine yazılırsa

$$E_{nk} = E_n + E_k + F_{nk} \pm G_{nk} \qquad \text{(V.4.21)}$$

sonucuna varılır. Buraya kadar helyum atomundaki iki elektrondan her biri için n ve k kuvantum hâllerini farklı kabul etmiştik. Eğer $k = n$ ise, yâni

$$\psi_k(1) = \psi_n(1), \qquad \psi_k(2) = \psi_n(2)$$

şartları gerçekleniyorsa, (V.4.9a) bağıntıları ile belirlenen triplet hâle ait antisimetrik yer fonksiyonları sıfır olur :

$$\Phi^a_{nn} = 0$$

Böylece yalnız (V.4.9b) bağıntısı ile belirlenen singlet hâle ait dalga fonksiyonu sıfırdan farklıdır. Bu dalga fonksiyonunun normlanmış şekli de

$$\Phi^s_{nn}\,\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\psi_n(1)\,\psi_n(2)\,(\alpha_1\,\beta_2 - \alpha_2\,\beta_1) \tag{V.4.22}$$

dir. Böylece $\langle V_{12}\rangle$ büyüklüğü

$$\langle V_{12}\rangle = \iint \Phi^{s*}_{nn}\,\overset{+}{\chi}_{00}\,V_{12}\,\Phi^s_{nn}\,\chi_{00}\,d\tau_1\,d\tau_2$$

veyâ $\overset{+}{\chi}_{00}\,\chi_{00} = 1$ olduğu için

$$\langle V_{12}\rangle = \iint |\Phi^s_{nn}|^2\,V_{12}\,d\tau_1\,d\tau_2$$

integrali ile verilir. Bu bağıntıda

$$\Phi^s_{nn} = \psi_n(1)\,\psi_n(2)$$

yazılırsa

$$\langle V_{12}\rangle = \iint |\psi_n(1)|^2\,|\psi_n(2)|^2\,V_{12}\,d\tau_1\,d\tau_2 \tag{V.4.23}$$

bulunur. (V.4.23) bağıntısı (V.4.19a) ve (V.4.20) bağıntıları ile $k = n$ yazarak karşılaştırılırsa

$$\langle V_{12}\rangle = F_{nn}, \qquad G_{nn} = 0 \tag{V.4.24}$$

sonuçlarına varılır. Son olarak bu sonuçlar $k = n$ için (V.4.21) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$E_{nn} = 2\,E_n + F_{nn} \tag{V.4.25}$$

bulunur. Şüphesiz helyum atomunun temel hâli

$$E_{11} = 2\,E_1 + F_{11}$$

enerjisine sâhip bir singlet hâldir.

(V.4.21) bağıntısının sağ yanındaki G_{nk} terimine ait (+) işareti spin doğrultularının antiparalel olduğu singlet hâle aittir ve bu hâldeki helyuma *parahelyum* adı verilir. G_{nk} terimine ait (—) işareti ise, spin doğrultularının paralel olduğu triplet hâle aittir ve bu hâldeki helyuma da *ortohelyum* adı verilir. G_{nk} nin her zaman pozitif olduğu gösterilebilir ve bu sebepten ötürü, singlet seviye enerji bakımından her zaman triplet seviyeden daha yukarıdadır.

ALIŞTIRMALAR VE PROBLEMLER

V.1. (V.4.19b) bağıntısı ile verilen G_{nk} integralinin pozitif olduğunu ispat ediniz.

Yol gösterme : $$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{2\pi^2}\int \exp\,[i\,\mathbf{k}\,.\,(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]\,\frac{d\tau_k}{k^2}$$
FOURIER dönüşümünü kullanınız. Burada $d\tau_k$, **k** uzayındaki hacım elemanıdır.

V.2. (V.4.19a) bağıntısı ile verilen F_{11} veyâ F_{1s^2} integralini hesaplayınız.

Yol gösterme : $\frac{1}{2}\int \frac{\rho_n(\mathbf{r}_1)\,\rho_k(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\,d\tau_1\,d\tau_2$ şeklindeki bir integral, bir $\rho_k(\mathbf{r}_2)$ yük yoğunluğuna ait alanda bulunan $\rho_n(\mathbf{r}_1)$ yük yoğunluğuna sâhip yük dağılımının elektrostatik enerjisi olarak yorumlanabilir. Bir önceki problemde verilen FOURİER dönüşümünün aracılığı ile, bu integral daha basit bir integrale dönüştürülebilir. Bu metodun uygulanması ile F_{nk} integralinin

$$\int_0^\infty \frac{dk}{(q^2 + k^2)^4}$$

integrali ile orantılı olduğu gösterilebilir. Burada $q = 2Z/a_0$ dır. Sonuç, (VII.5.35) bağıntısı ile verilmiştir.

V.3. Bir önceki problemdeki metodu uygulayarak, F_{1s2s}, G_{1s2s}, F_{1s2p} ve G_{1s2p} integrallerini hesaplayınız. Sonuçlar, problem VII.9. da verilmiştir.

VI. BÖLÜM

MATRİS MEKANİĞİ

(VI.1) BİR DALGA FONKSİYONUNUN BİR SÜTUN MATRİSİ İLE TEMSİL EDİLMESİ

Bir $\psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonunun sonsuz boyutlu HİLBERT uzayına ait $\psi_n(\mathbf{r})$ ortonormal taban vektörleri cinsinden

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) \tag{VI.1.1}$$

şeklinde seriye açılabildiğini paragraf (III.21) de görmüştük. c_n açılım katsayıları

$$c_n = (\psi_n, \psi) \tag{VI.1.2}$$

bağıntısı ile belirlidir. Şüphesiz bütün c_n katsayıları belirlenince $\psi(\mathbf{r})$ fonksiyonu da belirlenmiş olur. Bu anlamda $\psi(\mathbf{r})$ fonksiyonu HİLBERT uzayının bir vektörüdür. Böylece c_n açılım katsayıları, $\psi(\mathbf{r})$ vektörünün $\psi_n(\mathbf{r})$ taban vektörlerinin doğrultularındaki bileşenleridir. Bu bileşenler aşağıdaki gibi bir *sütun matrisi* veyâ bir *sütun vektörü* şeklinde yazılabilir :

$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_n \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \tag{VI.1.3}$$

Bu gösterilim (notasyon), vektör kavramının sonsuz boyutlu bir uzay için genelleştirilmesine eşdeğerdir.

Paragraf (III.2) de A lineer operatörü, HİLBERT uzayında bir ψ vektörünü

$$A\psi = \chi$$

bağıntısının aracılığı ile χ vektörüne dönüştüren bir nesne olarak tanımlanmıştı. ψ_m taban vektörlerine göre χ vektörünün bileşenleri b_m ise,

$$A\psi = \chi = \sum_m b_m \psi_m \tag{VI.1.4}$$

bağıntısı yazılabilir. Öte yandan, paragraf (IV.3) te gördüğümüz gibi A operatörünü temsil eden matrisin ψ_n taban vektörlerine göre matris elemanları

$$A\psi_n = \Phi_n = \sum_m a_{mn} \psi_m \tag{VI.1.5}$$

bağıntısının aracılığı ile tanımlanır ve buradan

$$(A)_{mn} = a_{mn} = (\psi_m , A\, \psi_n) \tag{VI.1.6}$$

tanım bağıntısı elde edilir. Şimdi (VI.1.1) bağıntısının her iki yanını soldan A operatörü ile çarpalım. (VI.1.5) bağıntısını kullanarak

$$A\psi = \sum_n c_n A\, \psi_n = \sum_n c_n \Phi_n = \sum_n c_n \sum_m A_{mn} \psi_m \tag{VI.1.7a}$$

veyâ

$$A\psi = \sum_m \psi_m \sum_n A_{mn}\, c_n = \sum_m b_m \psi_m \tag{VI.1.7b}$$

bulunur. (VI.1.7b) bağıntısından

$$b_m = \sum_n A_{mn}\, c_n \tag{VI.1.8}$$

sonucuna varılır. (VI.1.8) bağıntısı b ve c sütun vektörleri ve A matrisi cinsinden

$$b = A\, c \tag{VI.1.8a}$$

şeklinde yazılır. Bu bağıntı, A operatörünün (VI.1.4) tanım bağıntısının matris temsilleri cinsinden ifâdesidir.

c sütun vektörünün HERMİTsel eşleniği (VI.1.3) bağıntısına bakarak

$$c^+ = [c_1^* \; c_2^* \; c_3^* \ldots c_n^* \ldots] \tag{VI.1.9}$$

satır vektörü ile tanımlanır. Şimdi (VI.1.1) ve (VI.1.4) bağıntıları (ψ, χ) skaler çarpımında yerlerine yazılırsa

$$(\psi, \chi) = \left(\sum_n c_n \psi_n , \sum_m b_m \psi_m\right) = \sum_n \sum_m (c_n \psi_n , b_m \psi_m) = \sum_n \sum_m c_n^* b_m (\psi_n , \psi_m)$$

$$= \sum_n \sum_m c_n^* b_m \delta_{nm}$$

veyâ

$$(\psi, \chi) = \sum_n c_n^* b_n = c^+ b \qquad \text{(VI.1.10)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntı, skaler çarpımın matris temsilleri cinsinden ifâdesidir. (VI.1.4) ve (VI.1.8a) bağıntılarına bakarak (VI.1.10) bağıntısında

$$\chi = A\psi, \qquad b = Ac$$

y zılırsa

$$\langle A \rangle = (\psi, A\psi) = c^+ Ac \qquad \text{(VI.1.11)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntı, A lineer operatörünün beklenen değerinin matris temsilleri cinsinden ifâdesidir. Şimdi de (VI.1.4) ve (VI.1.8) bağıntılarına bakarak (VI.1.10) bağıntısında

$$\chi = A\psi, \qquad b_m = \sum_n A_{mn} c_n$$

yazılırsa

$$\langle A \rangle = (\psi, A\psi) = \sum_m c_m^* b_m = \sum_m c_m^* \sum_n A_{mn} c_n$$

veyâ

$$\langle A \rangle = (\psi, A\psi) = \sum_m \sum_n c_m^* A_{mn} c_n \qquad \text{(VI.1.12)}$$

sonucuna varılır. Bu son bağıntı da A lineer operatörünün beklenen değerinin matris elemanları cinsinden ifâdesidir.

(VI.2) BİR KEYFİ TEMSİLDE SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Zamana bağlı SCHRÖDİNGER denklemini yazalım :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \qquad \text{(VI.2.1)}$$

Bu denklemdeki H HAMİLTON operatörünün $\psi_n(\mathbf{r})$ ortonormal taban vektörleri cinsinden matris elemanları

$$H_{nm} = (\psi_n , H \psi_m) \qquad \text{(VI.2.2)}$$

şeklindedir. SCHRÖDİNGER denkleminin çözümü olan $\psi(\mathbf{r}, t)$ dalga fonksiyonu (VI.1.1) bağıntısına benzer şekilde $\psi_m(\mathbf{r})$ taban vektörleri cinsinden

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_m c_m(t)\, \psi_m(\mathbf{r}) \tag{VI.2.3}$$

şeklinde seriye açılabilir. Fakat bu kez $c_m(t)$ açılım katsayıları zamanın fonksiyonudur. (VI.2.3) bağıntısında her iki yanın zamana göre kısmî türevini alarak

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_m \frac{dc_m}{dt}\, \psi_m \tag{VI.2.4}$$

elde edilir. (VI.2.3) ve (VI.2.4) bağıntıları (VI.2.1) denkleminde yerlerine yazılırsa

$$i\hbar \sum_m \frac{dc_m}{dt}\, \psi_m = \sum_m c_m\, H \psi_m$$

elde edilir. Bu denklemin her iki yanı soldan ψ_n taban vektörü ile skaler olarak çarpılırsa

$$i\hbar \sum_m \frac{dc_m}{dt}\, (\psi_n\,, \psi_m) = \sum_m c_m\, (\psi_n\,, H\psi_m)$$

veyâ (VI.2.2.) bağıntısını kullanarak ve

$$(\psi_n\,, \psi_m) = \delta_{nm}$$

olduğunu hatırlayarak

$$i\hbar \sum_m \frac{dc_m}{dt}\, \delta_{nm} = \sum_m c_m\, H_{nm}$$

veyâ

$$i\hbar\, \frac{dc_n}{dt} = \sum_m H_{nm}\, c_m \tag{VI.2.5}$$

sonucunu varılır. Bu sâbit katsayılı âdi diferansiyel denklem sistemi çözülerek $c_n(t)$ katsayıları bulunursa SCHRÖDİNGER denkleminin $\psi(\mathbf{r}, t)$ çözümü bulunmuş olur. Böylece (VI.2.5) diferansiyel denklem sistemi, (VI.2.1) SCHRÖDİNGER denkleminin matris mekaniğindeki karşılığıdır.

(VI.3) HAMİLTON TEMSİLİNDE SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Şimdi bir önceki paragraftaki problemin bir özel hâlini inceleyeceğiz. $\psi_n(\mathbf{r})$ ortonormal taban vektörleri takımının H HAMİLTON operatörünün özfonksiyonları olduğunu varsayıyoruz. O hâlde,

$$H\psi_n = E_n \psi_n \tag{VI.3.1}$$

özdeğer denkleminden $\psi_n(\mathbf{r})$ özfonksiyonlarının ve E_n özdeğerlerinin bulunabildiğini kabul ediyoruz. (VI.3.1) bağıntısının her iki yanını soldan ψ_s ile skaler olarak çarparak ve (VI.2.2) bağıntısını kullanarak

$$H_{sn} = (\psi_s, H\psi_n) = E_n(\psi_s, \psi_n) = E_n \delta_{sn} \tag{VI.3.2}$$

bulunur. Öte yandan, (VI.2.5) bağıntısını

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = \sum_s H_{ns} c_s \tag{IV.3.3}$$

şeklinde yazalım ve (IV.3.2) bağıntısını da bu bağıntıda yerine yazalım:

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = \sum_s E_n \delta_{sn} c_s = E_n c_n$$

veyâ

$$\frac{dc_n}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E_n c_n \tag{VI.3.4}$$

bulunur. Bu diferansiyel denklem sistemi hemen integre edilebilir:

$$\frac{dc_n}{c_n} = -\frac{i}{\hbar} E_n\, dt$$

$$\ln c_n = -\frac{i}{\hbar} E_n t + \ln c_n^0$$

$$c_n(t) = c_n^0\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \tag{VI.3.5}$$

elde edilir. Buradaki c_n^0 integrasyon sâbitleri $c_n(t)$ fonksiyonlarının $t = 0$ zaman başlangıcında aldıkları değerlerdir:

$$c_n(0) = c_n^0 \tag{VI.3.5a}$$

$\psi_n(\mathbf{r})$ taban vektörleri H HAMİLTON operatörünün özfonksiyonları olduğundan, kullandığımız matris temsiline *HAMİLTON temsili* adı verilir. Eğer

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t)\, \psi_n(\mathbf{r}) \tag{VI.3.6}$$

bağıntısında (VI.3.5) bağıntısı yerine yazılırsa

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n^0\, \psi_n(\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n} \tag{VI.3.7}$$

sonucuna varılır.

(VI.4) SCHRÖDİNGER TEMSİLİ VE HEİSENBERG TEMSİLİ

HAMİLTON temsilinde SCHRÖDİNGER denkleminin çözümü (VI.3.6) veyâ (VI.3.7) bağıntıları ile verilen şekillerdedir. (VI.3.6) bağıntısı ile verilen ve $\psi_n(\mathbf{r})$ taban vektörleri cinsinden olan

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t)\, \psi_n(\mathbf{r}) \tag{VI.4.1}$$

şeklindeki çözüme *SCHRÖDİNGER temsilindeki çözüm* adı verilir. Eğer yeni taban vektörleri için

$$\Phi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \tag{VI.4.2}$$

tanımı yapılacak olursa (VI.3.7) bağıntısı ile verilen öteki çözüm

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n^0\, \Phi_n(\mathbf{r}, t) \tag{VI.4.3}$$

şeklinde yazılabilir ve bu çözüme de *HEİSENBERG temsilindeki çözüm* adı verilir. $\Phi_n(\mathbf{r}, t)$ taban vektörlerinin ortonormal oldukları kolaylıkla gösterilebilir. Eğer

$$f_n(t) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \tag{VI.4.4}$$

tanımı yapılacak olursa (VI.4.2) bağıntısı

$$\Phi_n(\mathbf{r}, t) = f_n(t)\, \psi_n(\mathbf{r}) \tag{VI.4.2a}$$

şeklinde yazılabilir. O hâlde, (VI.4.2a) bağıntısına bakarak ve $|f_n|^2 = 1$ olduğuna dikkat ederek.

$$\begin{aligned}(\Phi_m, \Phi_n) &= (f_m \psi_m, f_n \psi_n) = f_m^* f_n (\psi_m, \psi_n)\\ &= f_m^* f_n\, \delta_{mn} = |f_n|^2\, \delta_{mn} = \delta_{mn}\end{aligned} \tag{VI.4.5}$$

sonucuna varılır.

SCHRÖDİNGER temsilinde bir A operatörüne ait matris elemanı

$$A_{mn}^{(0)} = (\psi_m, A\, \psi_n) \tag{VI.4.6}$$

şeklindedir. Öte yandan, HEİSENBERG temsilinde bir A operatörüne ait matris elemanı da

$$A_{mn}(t) = (\Phi_m, A\, \Phi_n) \tag{VI.4.7}$$

şeklindedir. Eğer (VI.4.2a) bağıntısı (VI.4.7) bağıntısında yerine yazılacak olursa

$$A_{mn}(t) = (f_m \psi_m, A f_n \psi_n) = f_m^* f_n (\psi_m, A\, \psi_n)$$

veyâ (VI.4.4) ve (VI.4.6) bağıntılarının yardımı ile

$$A_{mn}(t) = A_{mn}^{(0)}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)\,t} \tag{VI.4.8}$$

sonucuna varılır. Şüphesiz bu bağıntı $t = 0$ zaman başlangıcı için

$$A_{mn}(0) = A_{mn}^{(0)} \tag{VI.4.8a}$$

şeklini alır.

Bu paragrafın başından beri söylediklerimizi özetleyelim :

SCHRÖDİNGER temsilinde :

Dalga fonksiyonunu temsil eden sütun vektörü zamana bağlıdır. Örneğin : $c_n(t)$ şeklindedir.

Bir operatörü temsil eden matris elemanı sâbittir. Örneğin : $A_{mn}^{(0)}$ şeklindedir.

HEİSENBERG temsilinde :

Dalga fonksiyonunu temsil eden sütun vektörü sâbittir. Örneğin : c_n^0 şeklindedir.

Bir operatörü temsil eden matris elemanı zamana bağlıdır. Örneğin : $A_{mn}(t)$ şeklindedir.

Şimdi bir A operatörünün ψ dalga fonksiyonunun aracılığı ile beklenen değerini SCHRÖDİNGER temsilinde bulalım. (VI.1.12) bağıntısına bakarak

$$\langle A \rangle = \sum_m \sum_n c_m^*(t)\, A_{mn}^{(0)}\, c_n(t) \tag{VI.4.9}$$

yazılabilir. Eğer bu bağıntıda (VI.3.5) bağıntısından elde edilen

$$c_m^*(t) = c_m^{0*}\, e^{\frac{i}{\hbar}E_m t}\,, \qquad c_n(t) = c_n^0\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

bağıntıları ve (VI.4.8) bağıntısından elde edilen

$$A_{mn}^{(0)} = A_{mn}(t)\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\,t}$$

bağıntısı yerlerine yazılırsa

$$\langle A \rangle = \sum_m \sum_n c_m^{0*}\, e^{\frac{}{\hbar}E_m t}\, A_{mn}(t)\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\,t}\, c_n^0\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

bağıntısı veyâ mümkün sâdeleştirmeler yapılarak

$$\langle A \rangle = \sum_m \sum_n c_m^{0*}\, A_{mn}(t)\, c_n^0 \tag{VI.4.10}$$

sonucuna varılır. Bu sonuç A operatörünün ψ dalga fonksiyonunun aracılığı ile beklenen değerinin HEİSENBERG temsilindeki ifâdesidir. Böylece $\langle A \rangle$ beklenen değeri her iki temsilde de biribirinin aynıdır. Gerçekten, beklenen değer genel hâlde temsile bağlı değildir.

(VI.5) BİR ÜNİTER DÖNÜŞÜM ARACILIĞI İLE SCHRÖDİNGER TEMSİLİNİN HEİSBENERG TEMSİLİNE DÖNÜŞTÜRÜLMESİ

Paragraf (III.19) da dalga fonksiyonlarının kendi aralarında ve lineer operatörlerin kendi aralarında üniter dönüşüm aracılığı ile biribirlerine nasıl dönüştürülebildiklerini görmüştük. Aynı şey dalga fonksiyonlarının sütun vektörleri ile ve lineer operatörlerin de kare matrisler ile temsil edilmeleri hâlinde de yapılabilir. Yalnız bu takdirde, üniter dönüşüm için kullanılan *üniter operatörler* yerine bunları temsil eden *üniter matrisler* kullanılmalıdır. O hâlde,

$$U^+ U = UU^+ = I$$

şeklindeki üniterlik şartı, matris temsilinde matris elemanları cinsinden

$$\sum_s U^+_{ms} U_{sn} = \sum_s U_{ms} U^+_{sn} = \delta_{mn}$$

veyâ

$$\sum_s U^*_{sm} U_{sn} = \sum_s U_{ms} U^*_{ns} = \delta_{mn} \qquad \text{(VI.5.1)}$$

bağıntıları ile ifâde edilir.

Şimdi elemanları

$$U_{mn} = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \delta_{mn} \qquad \text{(VI.5.2)}$$

bağıntısı ile tanımlanan bir dönüşüm matrisi düşünelim. Önce bu matrisin üniter olduğunu ispatlayalım :

$$\sum_s U^*_{sm} U_{sn} = \sum_s e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} \delta_{sm} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \delta_{sn} = e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n) t} \delta_{mn} \equiv \delta_{mn}$$

sonucuna göre (VI.5.1) üniterlik şartı sağlanır.

SCHRÖDİNGER temsilindeki $c_s(t)$ sütun vektörünü HEİSENBERG temsilindeki c^0_n sütun vektörüne dönüştüren üniter dönüşümü yazalım :

$$c^0 = U^+ c \qquad \text{(VI.5.3)}$$

veyâ (VI.5.2) bağıntısı ile verilen üniter matrisi kullanarak

$$c_n^0 = \sum_s U_{ns}^+ c_s = \sum_s U_{sn}^* c_s = \sum_s e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \delta_{sn} c_s$$

elde edilir. Buradan

$$c_n^0 = e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n(t)$$

veyâ

$$c_n(t) = c_n^0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \qquad \text{(VI.5.4)}$$

sonucuna varılır. Bu sonuç (VI.3.5) bağıntısının aynı olduğu için doğrudur. O hâlde, (VI.5.2) bağıntısı ile verilen üniter matris, SCHRÖDİNGER temsilini HEİSENBERG temsiline dönüştüren matristir.

Benzer şekilde, SCHRÖDİNGER temsilindeki $A_{mn}^{(0)}$ matrisini HEİSENBERG temsilindeki $A_{mn}(t)$ matrisine dönüştüren üniter dönüşümü yazalım :

$$A = U^+ A^{(0)} U \qquad \text{(VI.5.5)}$$

veyâ (VI.5.2) bağıntısı ile verilen üniter matrisi kullanarak

$$A_{mn}(t) = \sum_p \sum_q U_{mp}^+ A_{pq}^{(0)} U_{qn} = \sum_p \sum_q U_{pm}^* A_{pq}^{(0)} U_{qn}$$

$$= \sum_p \sum_q e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} \delta_{pm} A_{pq}^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \delta_{qn}$$

elde edilir. Buradan

$$A_{mn}(t) = A_{mn}^{(0)} e^{\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) t} \qquad \text{(VI.5.6)}$$

sonucuna varılır. Bu sonuç (VI.4.8) bağıntısının aynı olduğu için, (VI.5.2) bağıntısı ile verilen üniter matrisin SCHRÖDİNGER temsilini HEİSENBERG temsiline dönüştüren matris olduğu bir kez daha kanıtlandı.

(VI.6) HEİSENBERG TEMSİLİNDE OPERATÖRLERİN ZAMANA GÖRE DEĞİŞİMİ VE HEİSENBERG HAREKET DENKLEMİ

Paragraf (VI.4) ve paragraf (VI.5) te A operatörünün SCHRÖDİNGER ve HEİSENBERG temsillerindeki matris elemanları arasındaki bağıntının

$$A_{mn}(t) = A_{mn}^{(0)} e^{\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) t} \qquad \text{(VI.6.1)}$$

şeklinde olduğu görmüştük. Burada A operatörü, genel hâlde dinamik değişken lerin bir fonksiyonudur. (VI.6.1) bağıntısının her iki yanının zamana göre türevini alalım :

$$\frac{d A_{mn}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) A_{mn}^{(0)} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n) t} + \frac{d A_{mn}^{(0)}}{dt} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n) t}$$

veyâ (VI.6.1) bağıntısını kullanarak

$$\frac{d A_{mn}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) A_{mn}(t) + \frac{d A_{mn}^{(0)}}{dt} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n) t} \qquad \text{(VI.6.2)}$$

elde edilir. (VI.4.6) bağıntısına bakarak

$$A_{mn}^{(0)} = (\psi_m , A\, \psi_n) = \int \psi_m^* (\mathbf{r})\, A\, \psi_n (\mathbf{r})\, d\tau \qquad \text{(VI.6.3)}$$

yazılabilir. Eğer A operatörü veyâ dinamik değişkeni açık olarak t değişkenine bağlı ise, (VI.6.3) bağıntısının zamana göre türevini alarak

$$\frac{d A_{mn}^{(0)}}{dt} = \left(\psi_m , \frac{\partial A}{\partial t} \psi_n\right) = \int \psi_m^* (\mathbf{r}) \frac{\partial A}{\partial t} \psi_n (\mathbf{r})\, d\tau \qquad \text{(VI.6.4)}$$

bulunur. (VI.4.2) bağıntısına göre

$$\Phi_n (\mathbf{r}, t) = \psi_n (\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

olduğundan, (VI.6.4) bağıntısının her iki yanını

$$e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n) t}$$

ile çarparak

$$\frac{d A_{mn}^{(0)}}{dt} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n) t} = \int \Phi_m^* (\mathbf{r}, t) \frac{\partial A}{\partial t} \Phi_n (\mathbf{r}, t)\, d\tau$$

veyâ (VI.4.7) bağıntısına bakarak

$$\frac{d A_{mn}^{(0)}}{dt} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n) t} = \left(\Phi_m , \frac{\partial A}{\partial t} \Phi_n\right) = \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_{mn} \qquad \text{(VI.6.5)}$$

elde edilir. Eğer (VI.6.5) bağıntısı (VI.6.2) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\frac{d A_{mn}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) A_{mn} + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_{mn} \qquad \text{(VI.6.6)}$$

sonucuna varılır.

(VI.6.1) bağıntısı $A \equiv H$ için

$$H_{mn}(t) = H_{mn}^{(0)} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} \tag{VI.6.7a}$$

şeklini alır. Öte yandan, (VI.4.6) ve (VI.3.2) bağıntılarına göre

$$H_{mn}^{(0)} = (\psi_m, H\psi_n) = E_n(\psi_m, \psi_n) = E_n \delta_{mn} \tag{VI.6.7b}$$

olduğundan, (VI.6.7a) bağıntısında yerine yazarak

$$H_{mn}(t) = E_n e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} \delta_{mn} \equiv E_n \delta_{mn} \tag{VI.6.7c}$$

sonucuna varılır. Yâni, HAMİLTON operatörünün her iki temsildeki matris elemanları biribirinin aynıdır. (VI.6.7c) bağıntısını kullanarak $[H, A]$ komütatörünün matris elemanını aşağıdaki şekilde hesaplayabiliriz :

$$(HA)_{mn} = \sum_s H_{ms} A_{sn} = \sum_s E_m \delta_{ms} A_{sn} = E_m A_{mn} \tag{VI.6.8a}$$

$$(AH)_{mn} = \sum_s A_{ms} H_{sn} = \sum_s A_{ms} E_n \delta_{sn} = E_n A_{mn} \tag{VI.6.8b}$$

bağıntıları taraf tarafa çıkarılırsa

$$(HA - AH)_{mn} = (E_m - E_n) A_{mn} \tag{VI.6.8c}$$

elde edilir. (VI.6.8c) bağıntısı (VI.6.6) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(HA - AH)_{mn} + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_{mn} \tag{VI.6.9}$$

veyâ

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[A, H] \tag{VI.6.10}$$

sonucuna varılır. (VI.6.10) bağıntısına *HEİSENBERG hareket denklemi* veyâ *matris mekaniğinin temel bağıntısı* adı verilir. Bir parçacığın veyâ bir sistemin hareketi esnâsında dinamik değişkenlerin değeri değişmeyen fonksiyonuna *hareket sâbiti* adı verilir. A operatörünün veyâ matrisinin temsil ettiği, dinamik değişkenlerin bir fonksiyonu bir hareket sâbiti ise, bu özellik

$$\frac{dA}{dt} = 0 \tag{VI.6.11}$$

veyâ (VI.6.10) bağıntısını kullanarak

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[A, H] = 0 \qquad \text{(VI.6.11a)}$$

bağıntısı ile ifâde edilir. Eğer A fonksiyon operatörü zamana açık olarak bağlı değilse

$$[A, H] = 0 \qquad \text{(VI.6.11b)}$$

bağıntısı bu fonksiyon operatörünün bir hareket sâbiti olma şartıdır. Paragraf (III.18) de gördüğümüz teoreme göre, (VI.6.11b) bağıntısı A ve H operatörlerinin ortak ψ_n özfonksiyonlarına sâhip olma şartıdır ve böylece

$$H\,\psi_n = E_n\,\psi_n \qquad \text{(VI.6.12a)}$$

$$A\,\psi_n = \lambda_n\,\psi_n \qquad \text{(VI.6.12b)}$$

özdeğer denklemleri yazılabilir. (VI.6.12b) bağıntısındaki λ_n özdeğerleri, A fonksiyon operatörünün temsil ettiği hareket sâbitinin hareket esnâsındaki değişmeyen değerini verir.

(VI.7) KLÂSİK MEKANİKTE POİSSON BRAKETLERİ VE DİNAMİK DEĞİŞKENLERİN KEYFİ BİR FONKSİYONUNA AİT HAREKET DENKLEMİ

Klâsik mekanikte, örneğin, bir parçacığa ait koordinatların, momentumun ve zamanın

$$A = A(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = A(q_i, p_i, t) \qquad \text{(VI.7.1)}$$

şeklindeki bir fonksiyonunu düşünelim. Şüphesiz A nın kendisi de bir dinamik değişken olabilir. Bu A fonksiyonunun zamanla değişimi, yâni zamana göre tam türevi

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i}\dot{p}_i\right) + \frac{\partial A}{\partial t} \qquad \text{(VI.7.2)}$$

bağıntısı ile belirlidir. Paragraf (I.1) de HAMİLTON hareket denklemlerinin

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad (i = 1, 2, 3) \qquad \text{(VI.7.3)}$$

şeklinde olduğunu görmüştük. Eğer (VI.7.3) bağıntıları (VI.7.2) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i}\right) \qquad \text{(VI.7.4)}$$

sonucuna varılır. $A(q_i, p_i, t)$ ve $B(q_i, p_i, t)$ gibi iki fonksiyon için

$$\{A, B\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \qquad \text{(VI.7.5)}$$

bağıntısı ile *POİSSON braketi* tanımlanır. Eğer (VI.7.5) bağıntısında $B \equiv H$ alınarak (VI.7.4) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\} \qquad \text{(VI.7.6)}$$

sonucuna varılır. (VI.7.6) bağıntısına dinamik değişkenlerin bir A fonksiyonuna ait hareket denklemi adı verilir.

(VI.6.10) bağıntısı ile (VI.7.6) bağıntısı arasında kuvvetli bir benzerlik vardır. Bu benzerliğe dayanarak, kuvantum mekaniğinden klâsik mekaniğe geçiş, genel hâlde

$$\hbar \rightarrow 0 \text{ için: } \quad \frac{1}{i\hbar}(AB - BA) \equiv \frac{1}{i\hbar}[A, B] \rightarrow \{A, B\} \qquad \text{(VI.7.7)}$$

tekabül bağıntısı ile, yâni, $i\hbar$ ile bölünmüş komütatör braketi yerine POİSSON braketi konularak elde edilir. Gerçekten, önemli bir özel hâl için (VI.7.7) bağıntısı gerçeklenir. Bu özel hâl, $A \equiv q_k$, $B = p_n$ özel hâlidir. (VI.7.5) bağıntısında yerine yazarak

$$\{q_k, p_n\} = \sum_i \left(\frac{\partial q_k}{\partial q_i} \frac{\partial p_n}{\partial p_i} - \frac{\partial p_n}{\partial q_i} \frac{\partial q_k}{\partial p_i} \right) = \sum_i \delta_{ki}\, \delta_{ni} = \delta_{kn} \qquad \text{(VI.7.8)}$$

elde edilir. Öte yandan, paragraf (I.8) den

$$q_k p_n - p_n q_k \equiv [q_k, p_n] = i\hbar\, \delta_{kn}\, I \qquad \text{(VI.7.9)}$$

olduğuna biliyoruz. O hâlde,

$$\frac{1}{i\hbar}[q_k, p_n] = \{q_k, p_n\}\, I = \delta_{kn}\, I \qquad \text{(VI.7.10)}$$

sonucuna varılır. Ayrıca, paragraf (I.8) de gördüğümüz

$$[q_k, q_n] = 0, \qquad [p_k, p_n] = 0 \qquad \text{(VI.7.11a)}$$

bağıntılarına tekabül eden

$$\{q_k, q_n\} = 0, \qquad \{p_k, p_n\} = 0 \qquad \text{(VI.7.11b)}$$

bağıntıları hemen elde edilebilir.

(VI.7.7) bağıntısının doğruluğunu pekiştiren öteki kanıt, komütatörler tarafından gerçeklenen (III.3.32-36) bağıntılarının POİSSON braketleri tarafından da aynen gerçeklenmesidir. Yâni, komütatörlerin cebirsel özellikleri POİSSON braketlerinin cebirsel özellikleri ile özdeştir.

(VI.8) LİNEER HARMONİK OSİLÂTÖR (SCHRÖDİNGER TEMSİLİNDE)

Lineer harmonik osilâtöre ait HAMİLTON operatörü

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \tag{VI.8.1}$$

şeklindedir. Zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denklemi, bu operatöre ait

$$H \psi_n = E_n \psi_n \tag{VI.8.2}$$

şeklindeki bir özdeğer denklemidir. Bu özdeğer denklemi

$$\left(- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi_n = E_n \psi_n \tag{VI.8.2a}$$

diferansiyel denklemi şeklinde de yazılabilir. Bu diferansiyel denklemi paragraf (I.EK.1) de çözmüştük. Böylece hem E_n enerji özdeğerlerini, hem de ψ_n ortonormal özfonksiyonlarını veyâ özvektörlerini bulmuştuk. Bu paragrafta ψ_n özvektörlerini bulmadan, bu özvektörlerin taban vektörleri olduğu bir matris temsilini kullanarak enerji özdeğerlerini ve p ve x operatörlerinin matris temsillerini bulacağız.

Eğer

$$\eta = \frac{p + i m \omega x}{\sqrt{2m \hbar \omega}} \tag{VI.8.3a}$$

bağıntısı ile η operatörü tanımlanırsa

$$p^+ = p, \qquad x^+ = x$$

olduğu için

$$\eta^+ = \frac{p - i m \omega x}{\sqrt{2m \hbar \omega}} \tag{VI.8.3b}$$

elde edilir. Öte y ndan,

$$p^* = - p, \qquad x^* = x$$

olduğu için

$$\eta^* = - \eta \tag{VI.8.3c}$$

bulunur. Yâni, η operatörü saf imajinerdir. (VI.8.3a,b) bağıntıları taraf tarafa sağdan ve soldan çarpılırlarsa ve ayrıca

$$xp - px = i\hbar \tag{VI.8.4}$$

bağıntısı kullanılırsa

$$2m\hbar\omega\eta\eta^+ = p^2 + m^2\omega^2x^2 + im\omega(xp - px)$$
$$2m\hbar\omega\eta^+\eta = p^2 + m^2\omega^2x^2 - im\omega(xp - px)$$

veyâ

$$2m\hbar\omega\eta\eta^+ = p^2 + m^2\omega^2x^2 - m\hbar\omega$$
$$2m\hbar\omega\eta^+\eta = p^2 + m^2\omega^2x^2 + m\hbar\omega$$

veyâ

$$\hbar\omega\eta\eta^+ = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{(VI.8.5a)}$$

$$\hbar\omega\eta^+\eta = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{(VI.8.5b)}$$

bağıntıları bulunur. (VI.8.1) bağıntısı (VI.8.5a,b) bağıntılarında yerine yazılırsa

$$\hbar\omega\eta\eta^+ = H - \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{(VI.8.6a)}$$

$$\hbar\omega\eta^+\eta = H + \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{(VI.8.6b)}$$

veyâ

$$\eta\eta^+ = \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \qquad \text{(VI.8.7a)}$$

$$\eta^+\eta = \frac{H}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \qquad \text{(VI.8.7b)}$$

bağıntıları bulunur. (VI.8.7a,b) bağıntılarını bir kez taraf tarafa çıkararak ve bir kez de taraf tarafa toplayarak

$$\eta^+\eta - \eta\eta^+ = I \qquad \text{(VI.8.8a)}$$

ve

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(\eta^+\eta + \eta\eta^+) \qquad \text{(VI.8.8b)}$$

bağıntıları elde edilir. Ayrıca, (VI.8.6a,b) bağıntılarının ikisi bir arada

$$H = \hbar\omega\left(\eta\eta^+ + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\eta^+\eta - \frac{1}{2}\right) \qquad \text{(VI.8.9)}$$

şeklinde yazılabilir.

Şimdi (VI.8.7a,b) bağıntılarının yardımı ile $\eta\eta^+$ ve $\eta^+\eta$ operatörlerini, H operatörünün (VI.8.2) bağıntısı ile tanımlanan ψ_n özvektörüne uygulayalım:

$$\eta\,\eta^+\,\psi_n = \frac{H}{\hbar\,\omega}\,\psi_n - \frac{1}{2}\,\psi_n = \left(\frac{E_n}{\hbar\,\omega} - \frac{1}{2}\right)\psi_n \qquad \text{(VI.8.10a)}$$

$$\eta^+\,\eta\,\psi_n = \frac{H}{\hbar\,\omega}\,\psi_n + \frac{1}{2}\,\psi_n = \left(\frac{E_n}{\hbar\,\omega} + \frac{1}{2}\right)\psi_n \qquad \text{(VI.8.10b)}$$

bağıntıları elde edilir. Bu bağıntılar, harmonik osilâtörün ψ_n özvektörlerinin $\eta^+\eta$ ve $\eta\,\eta^+$ HERMİTsel operatörlerinin de ortak özvektörleri olduğunu göstermektedir. (VI.8.10a) bağıntısının her iki yanı soldan ψ_n özvektörü ile skaler olarak çarpılırsa, $(\psi_n, \psi_n) = 1$ olduğuna dikkat ederek

$$(\psi_n\,,\,\eta\,\eta^+\,\psi_n) = \frac{E_n}{\hbar\,\omega} - \frac{1}{2} \qquad \text{(VI.8.11)}$$

bulunur. Öte yandan, bir A lineer operatörünün A^+ ile gösterilen HERMİTsel eşleniği, (III.6.1) tanım bağıntısında ψ_m ve ψ_n keyfî vektörlerinin aracılığı ile ve aşağıdaki bağıntı ile tanımlanmıştı :

$$(\psi_n\,,\,A^+\,\psi_m) = (A\,\psi_n\,,\,\psi_m) \equiv (\psi_m\,,\,A\,\psi_n)^*$$

Bu tanım bağıntısında

$$A = \eta^+, \qquad A^+ = \eta, \qquad \psi_m = \eta^+\,\psi_n$$

yazılırsa

$$(\psi_n\,,\,\eta\,(\eta^+\,\psi_n)) = (\eta^+\,\psi_n\,,\,\eta^+\,\psi_n) \equiv (\eta^+\,\psi_n\,,\,\eta^+\,\psi_n)^* \qquad \text{(VI.8.12)}$$

bağıntısı bulunur. Bu bağıntılardan, (III.1.4), (III.1.5) ve (III.1.8) bağıntılarına bakarak

$$(\psi_n\,,\,\eta\,\eta^+\,\psi_n) = (\eta^+\,\psi_n\,,\,\eta^+\,\psi_n) = \|\,\eta^+\,\psi_n\,\| \geqq 0 \qquad \text{(VI.8.13)}$$

elde edilir. Bu bağıntıdaki eşitlik işareti

$$\eta^+\,\psi_n = 0 \qquad \text{(VI.8.13a)}$$

özel hâli için geçerlidir. Eğer (VI.8.11) bağıntısı (VI.8.13) bağıntısından yerine yazılırsa

$$\frac{E_n}{\hbar\,\omega} - \frac{1}{2} \geqq 0$$

veyâ

$$E_n \geqq \frac{1}{2}\,\hbar\,\omega \qquad \text{(VI.8.14)}$$

sonucuna varılır. O hâlde, harmonik osilâtörün enerji özdeğerleri aşağıdan sınırlıdır.

(VI.8.9) bağıntılarından birincisini sağdan ve ikincisini de soldan η ile çarparak

$$H\eta = \hbar\omega\left(\eta\,\eta^{+}\eta + \frac{1}{2}\eta\right) \qquad \text{(VI.8.15a)}$$

$$\eta H = \hbar\omega\left(\eta\,\eta^{+}\eta - \frac{1}{2}\eta\right) \qquad \text{(VI.8.15b)}$$

bulunur. Bu bağıntıları taraf tarafa çıkararak

$$H\eta - \eta H = \hbar\omega\eta \qquad \text{(VI.8.16a)}$$

elde edilir. Bu bağıntının her iki yanının HERMİTsel eşleniği alınırsa ve sonra da -1 ile çarpılırsa, $H^{+} = H$ olduğuna dikkat ederek

$$H\eta^{+} - \eta^{+}H = -\hbar\omega\eta^{+} \qquad \text{(VI.816b)}$$

bulunur. Son iki bağıntı

$$H\eta = \eta H + \hbar\omega\eta \qquad \text{(VI.8.16a)}$$

$$H\eta^{+} = \eta^{+}H - \hbar\omega\eta^{+} \qquad \text{(VI.8.16b)}$$

şekillerinde de yazılabilir. Bu bağıntıların yardımı ile $H\eta$ ve $H\eta^{+}$ operatörleri ψ_n özvektörlerine uygulanırsa, (VI.8.2) bağıntısını kullanarak

$$H\eta\psi_n = \eta H\psi_n + \hbar\omega\eta\psi_n = E_n\eta\psi_n + \hbar\omega\eta\psi_n$$

$$H\eta^{+}\psi_n = \eta^{+}H\psi_n - \hbar\omega\eta^{+}\psi_n = E_n\eta^{+}\psi_n - \hbar\omega\eta^{+}\psi_n$$

veyâ

$$H\eta\psi_n = (E_n + \hbar\omega)\eta\psi_n \qquad \text{(VI.8.17a)}$$

$$H\eta^{+}\psi_n = (E_n - \hbar\omega)\eta^{+}\psi_n \qquad \text{(VI.8.17b)}$$

sonuçlarına varılır. Bu bağıntılara göre, eğer ψ_n, H operatörünün bir özvektörü ise, $\eta\psi_n$ ve $\eta^{+}\psi_n$ de H operatörünün birer özvektörüdür. Öyle ki, H nin ψ_n ye ait özdeğeri E_n ise, $\eta\psi_n$ ye ait özdeğeri $E_n + \hbar\omega$ ve $\eta^{+}\psi_n$ ye ait özdeğeri de $E_n - \hbar\omega$ olur. Öte yandan, E_n özdeğerler dizisi, (VI.8.14) bağıntısına göre aşağıdan sınırlıdır. Böylece, H operatörünün

$$\psi_n,\quad \eta\psi_n,\quad \eta^2\psi_n,\quad \eta^3\psi_n,\ldots$$

şeklindeki özvektörleri dizisine ait özdeğerler dizisi,

$$E_n,\quad E_n + \hbar\omega,\quad E_n + 2\hbar\omega,\quad E_n + 3\hbar\omega,\ldots$$

şeklindedir ve yukarıdan sınırsızdır. Öte yandan, H operatörünün

$$\psi_n,\quad \eta^{+}\psi_n,\quad \eta^{+2}\psi_n,\quad \eta^{+3}\psi_n,\ldots,\eta^{+n}\psi_n = \psi_0$$

şeklindeki özvektörleri dizisine ait özdeğerler dizisi de, (VI.8.14) bağıntısını kullanarak,

$$E_n, \quad E_n - \hbar\omega, \quad E_n - 2\hbar\omega, \quad E_n - 3\hbar\omega, \ldots, E_n - n\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

şeklindedir ve aşağıdan sınırlıdır. Bu dizinin

$$E_n - n\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

şeklindeki en küçük elemanından

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad (n = 0, 1, 2, 3, \ldots) \qquad \text{(VI.8.18)}$$

sonucuna varılır. Bu sonuç, harmonik osilâtörün enerji özdeğerlerinin $\hbar\omega$ kuvantumu cinsinden genel ifâdesidir. (VI.8.18) bağıntısındaki n sayısı (VI.8.14) bağıntısından ötürü negatif olamaz. Şüphesiz

$$\eta^{+}\psi_0 = 0, \qquad \eta^{+^n}\psi_n = \psi_0$$

olduğundan

$$\eta^{+^{n+1}}\psi_n = \eta^{+}\psi_0 = 0$$

elde edilir.

(VI.8.18) bağıntısı, (VI.8.2) ve (VI.8.17a,b) bağıntılarında yerine yazılırsa

$$H\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_n \qquad \text{(VI.8.19)}$$

$$H\eta\psi_n = \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\eta\psi_n \qquad \text{(VI.8.20a)}$$

$$H\eta^{+}\psi_n = \left(n - 1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\eta^{+}\psi_n \qquad \text{(VI.8.20b)}$$

bağıntıları bulunur. Öte yandan, (VI.8.19) bağıntısını n yerine bir kez $n+1$ ve bir kez de $n-1$ koyarak yazalım:

$$H\psi_{n+1} = \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_{n+1} \qquad \text{(VI.8.21a)}$$

$$H\psi_{n-1} = \left(n - 1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_{n-1} \qquad \text{(VI.8.21b)}$$

elde edilir. (VI.8.20a) bağıntısı (VI.8.21a) bağıntısı ile karşılaştırılırsa H operatörünün $n + 1 + \frac{1}{2}$ özdeğerine ait özvektörün $\eta\psi_n$ veyâ ψ_{n+1} olduğu görülür. O hâlde $\eta\psi_n$ özvektörü, ψ_{n+1} özvektörü ile orantılı olmalıdır ve β_n yalnız n ye bağlı bir orantı katsayısı olmak üzere

$$\eta\,\psi_n = \beta_n\,\psi_{n+1} \tag{VI.8.22a}$$

bağıntısı yazılabilir. Benzer şekilde, (VI.8.20b) bağıntısı (VI.8.21b) bağıntısı ile karşılaştırılırsa H operatörünün $n - 1 + \dfrac{1}{2}$ özdeğerine ait özvektörün $\eta^+\,\psi_n$ veyâ ψ_{n-1} olduğu görülür. O hâlde $\eta^+\,\psi_n$ özvektörü, ψ_{n-1} özvektörü ile orantılı olmalıdır ve α_n yalnız n ye bağlı bir orantı katsayısı olmak üzere

$$\eta^+\,\psi_n = \alpha_n\,\psi_{n-1} \tag{VI.8.22b}$$

bağıntısı yazılabilir. Öte yandan, (VI.8.18) bağıntısı (VI.8.10a,b) bağıntılarında yerine yazılırsa

$$\eta\,\eta^+\,\psi_n = n\,\psi_n \tag{VI.8.23a}$$

$$\eta^+\,\eta\,\psi_n = (n + 1)\,\psi_n \tag{VI.8.23b}$$

özdeğer denklemleri elde edilir. Eğer (VI.8.22a,b) bağıntılarından (VI.8.23a,b) bağıntıları elde edilebilirse, β_n ve α_n katsayıları n nin fonksiyonları olarak bulunabilir. Bu maksatla önce (VI.8.22a) bağıntısında n yerine $n - 1$ ve sonra (VI.8.22b) bağıntısında da n yerine $n + 1$ yazalım :

$$\eta\,\psi_{n-1} = \beta_{n-1}\,\psi_n \tag{VI.8.24a}$$

$$\eta^+\,\psi_{n+1} = \alpha_{n+1}\,\psi_n \tag{VI.8.24b}$$

bulunur. Şimdi de (VI.8.22b) bağıntısını soldan η ile ve (VI.8.22a) bağıntısını da soldan η^+ ile çarpalım ve elde edilen sonuçlarda (VI.8.24a,b) bağıntılarını yerlerine yazalım :

$$\eta\,\eta^+\,\psi_n = \alpha_n\,\eta\,\psi_{n-1} = \alpha_n\,\beta_{n-1}\,\psi_n \tag{VI.8.25a}$$

$$\eta^+\,\eta\,\psi_n = \beta_n\,\eta^+\,\psi_{n+1} = \beta_n\,\alpha_{n+1}\,\psi_n \tag{VI.8.25b}$$

bulunur. (VI.8.25a,b) bağıntıları (VI.8.23a,b) bağıntılarının aynıdır. O hâlde, karşılaştırma yolu ile α_n ve β_n katsayılarının arasında

$$\alpha_n\,\beta_{n-1} = n \tag{VI.8.26a}$$

$$\beta_n\,\alpha_{n+1} = n + 1 \tag{VI.8.26b}$$

bağıntıları bulunur. (VI.8.26a) bağıntısında n yerine $n + 1$ yazılırsa (VI.8.26b) bağıntısı elde edilir. Yâni, bu iki bağıntı biribirlerinden bağımsız değildir. Bu sebepten ötürü, α_n ve β_n katsayılarının belirlenebilmesi için bunlar arasında ikinci bir bağıntıya ihtiyaç (gereksinim) vardır.

Söz konusu olan ikinci bağıntıyı bulabilmek amacı ile (VI.8.22a,b) bağıntılarını soldan skaler olarak ψ_m özvektörü ile çarparsak

$$(\psi_m , \eta\, \psi_n) = \beta_n (\psi_m , \psi_{n+1})$$

$$(\psi_m , \eta^+ \psi_n) = \alpha_n (\psi_m , \psi_{n-1})$$

bulunur. Bu bağıntıların sol yanları ψ_n taban vektörlerine göre η ve η^+ operatörlerinin matris temsilleridir. Bağıntıların sağ yanları ise, ψ_n taban vektörlerinin

$$(\psi_m , \psi_n) = \delta_{mn} \qquad \text{(VI.8.27a)}$$

şeklindeki ortonormallik bağıntılarında n yerine bir kez $n + 1$ ve bir kez de $n - 1$ yazarak belirlenebilir :

$$(\psi_m , \psi_{n+1}) = \delta_{m,\, n+1} \qquad \text{(VI.8.27b)}$$

$$(\psi_m , \psi_{n-1}) = \delta_{m,\, n-1} \qquad \text{(VI.8.27c)}$$

O hâlde, (VI.8.27b,c) bağıntılarını yukarda yerlerine yazarak

$$\eta_{mn} = \beta_n\, \delta_{m,\, n+1} \qquad \text{(VI.8.28a)}$$

$$\eta^+_{mn} = \alpha_n\, \delta_{m,\, n-1} \qquad \text{(VI.2.28b)}$$

sonuçlarına varılır. Bir matrisin HERMİTsel eşleniğinin tanımına göre η^+_{mn} ile η_{mn} arasında

$$\eta^+_{mn} = \eta^*_{nm} \qquad \text{(VI.8.29)}$$

bağıntısı vardır. İşte bu bağıntı, α_n ve β_n katsayılarının arasındaki ikinci bağıntıyı verir. Paragraf (III.23) te verilen ve paragraf (IV.4) te kullanılan KRONECKER deltasına ait

$$\delta_{mn} = \delta_{nm} \qquad \text{(VI.8.30a)}$$

$$\delta_{m\pm k,\, n\pm k} = \delta_{mn} \qquad \text{(VI.8.30b)}$$

$$f_m\, \delta_{mn} = f_n\, \delta_{mn} \qquad \text{(VI.8.30c)}$$

bağıntıları söz konusu bağıntının elde edilmesini sağlar. (VI.8.28a,b) bağıntıları (VI.8.29) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\alpha_n\, \delta_{m,\, n-1} = \beta^*_m\, \delta_{n,\, m+1} \qquad \text{(VI.8.29a)}$$

bulunur. (VI.8.30a,b) bağıntılarına göre

$$\delta_{n,\, m+1} = \delta_{n-1,\, m} = \delta_{m,\, n-1}$$

yazılabilir. O hâlde (VI.8.29a) bağıntısı, (VI.8.30c) bağıntısını kullanarak

$$\alpha_n\, \delta_{m,\, n-1} = \beta^*_m\, \delta_{m,\, n-1} = \beta^*_{n-1}\, \delta_{m,\, n-1} \qquad \text{(VI.8.29b)}$$

şeklini alır. Bu son bağıntıdan

$$\alpha_n = \beta^*_{n-1} \tag{VI.8.31}$$

sonucuna varılır. (VI.8.31) bağıntısında bir kez kompleks eşlenik alarak, bir kez de n yerine $n+1$ yazarak

$$\beta_{n-1} = \alpha^*_n, \qquad \alpha_{n+1} = \beta^*_n$$

bağıntıları elde edilir. Bu bağıntılardan birincisi α_n ile ve ikincisi de β_n ile çarpılırsa

$$\alpha_n \beta_{n-1} = |\alpha_n|^2, \qquad \beta_n \alpha_{n+1} = |\beta_n|^2$$

bağıntıları bulunur. Bu bağıntılar (VI.8.26a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$|\alpha_n|^2 = n, \qquad |\beta_n|^2 = n+1$$

veyâ

$$|\alpha_n| = \sqrt{n} \tag{VI.8.32a}$$

$$|\beta_n| = \sqrt{n+1} \tag{VI.8.32b}$$

sonuçlarına varılır. Böylece, α_n ve β_n kompleks katsayılarının modülleri hesaplandı. Bu kompleks katsayıların argümanları θ' ve θ ise

$$\alpha_n = |\alpha_n|\, e^{i\theta'}, \qquad \beta_n = |\beta_n|\, e^{i\theta}$$

yazılabilir. $|\beta_{n-1}| = |\alpha_n|$ olduğu için

$$\beta_{n-1} = |\beta_{n-1}|\, e^{i\theta} = |\alpha_n|\, e^{i\theta}$$

ve buradan da

$$\beta^*_{n-1} = |\alpha_n|\, e^{-i\theta}$$

bulunur. (VI.8.31) bağıntısında yerlerine yazarak

$$|\alpha_n|\, e^{i\theta'} = |\alpha_n|\, e^{-i\theta}$$

veyâ

$$\theta' = -\theta \tag{VI.8.33}$$

sonucuna varılır. O hâlde, (VI.8.32a,b) ve (VI.8.33) bağıntılarına bakarak

$$\alpha_n = \sqrt{n}\, e^{-i\theta} \equiv \sqrt{n}\,(\cos\theta - i\sin\theta) \tag{VI.8.34a}$$

$$\beta_n = \sqrt{n+1}\, e^{i\theta} \equiv \sqrt{n+1}\,(\cos\theta + i\sin\theta) \tag{VI.8.34b}$$

bağıntıları bulunur. Burada $e^{i\theta}$, paragraf (IV.4) te açıklandığı gibi, bir keyfî faz çarpanıdır. (VI.8.3c) bağıntısına göre, η operatörü veyâ matrisi saf imajiner olduğu için, (VI.8.28a,b) bağıntıların göre α_n ve β_n kompleks sayıları da saf imajiner olmalıdır. (VI.8.24a,b) bağıntılarında keyfî faz açısı $\theta = \pi/2$ seçilerek bu şart gerçekleştirilebilir. Böylece,

$$\alpha_n = -i\sqrt{n}, \qquad \beta_n = i\sqrt{n+1} \tag{VI.8.35a}$$

veyâ

$$i\,\alpha_n = \sqrt{n}, \qquad -i\,\beta_n = \sqrt{n+1} \tag{VI.8.35b}$$

sonuçlarına varılır. (VI.8.35a) bağıntıları, (VI.8.22a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\eta\,\psi_n = i\sqrt{n+1}\,\psi_{n+1} \tag{VI.8.36a}$$

$$\eta^+\,\psi_n = -i\sqrt{n}\,\psi_{n-1} \tag{VI.8.36b}$$

sonuçlarına, ve (VI.8.28a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\eta_{mn} = i\sqrt{n+1}\,\delta_{m,\,n+1} \tag{VI.8.37a}$$

$$\eta^+_{mn} = -i\sqrt{n}\,\delta_{m,\,n-1} \tag{VI.8.37b}$$

veyâ

$$-i\,\eta_{n'n} = \sqrt{n+1}\,\delta_{n',\,n+1} \tag{VI.8.38a}$$

$$i\,\eta^+_{n'n} = \sqrt{n}\,\delta_{n',\,n-1} \tag{VI.8.38b}$$

sonuçlarına varılır.

(VI.8.36a,b) bağıntıları,

$$a = i\eta^+, \qquad a^+ = -i\eta$$

bağıntıları ile tanımlanan a ve a^+ operatörleri cinsinden

$$a^+\,\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}, \qquad a\,\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}$$

şekillerinde yazılabilir. Alanların kuvantum teorisinden n, belirli bir kuvantum hâlindeki parçacıkların sayısını gösterir. Böylece, a^+ operatörü parçacıkların sayısını bir adet artırdığı için *yaratma operatörü* adını alır. Benzer şekilde, a operatörü parçacıkların sayısını bir adet eksilttiği için *yok etme operatörü* adını alır.

(VI.8.3a,b) bağıntılarını

$$-\sqrt{2m\hbar\omega}\,i\eta = m\omega x - ip \tag{VI.8.39a}$$

$$\sqrt{2m\hbar\omega}\,i\eta^+ = m\omega x + ip \tag{VI.8.39b}$$

şekillerinde yazarak x ve ip yi çözelim :

$$x = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(i\eta^+ - i\eta) \tag{VI.8.40a}$$

$$ip = \left(\frac{1}{2}\,m\hbar\omega\right)^{1/2}(i\eta^+ + i\eta) \tag{VI.8.40b}$$

bulunur. (VI.8.38a,b) bağıntıları (VI.8.40a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa x ve ip operatörlerinin matris elemanları olarak

$$x_{n'n} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \left(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right)$$

$$i p_{n'n} = \left(\frac{1}{2} m\hbar\omega\right)^{1/2} \left(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} - \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right)$$

elde edilir. Eğer paragraf (I.EK.1) de olduğu gibi

$$\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \tag{VI.8.41}$$

sâbitini tanımlarsak, $\hbar\alpha = (m\hbar\omega)^{1/2}$ olur ve

$$x_{n'n} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right) \tag{VI.8.41a}$$

$$p_{n'n} = \frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right) \tag{VI.8.41b}$$

sonuçlarına varılır.

(VI.9) HEİSENBERG TEMSİLİNDE LİNEER HARMONİK OSİLÂTÖRE AİT MATRİS ELEMANLARI

Lineer harmonik osilâtöre ait η matrisinin SCHRÖDİNGER ve HEİSENBERG temsillerinin arasındaki bağıntı (VI.4.8) bağıntısına bakarak

$$\eta_{mn}(t) = \eta_{mn}^{(0)}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} \tag{VI.9.1}$$

şeklinde yazılabilir. Öte yandan, (VI.8.37a) bağıntısına bakarak η matrisinin SCHRÖDİNGER temsili

$$\eta_{mn}^{(0)} = i\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} \tag{VI.9.2}$$

şeklinde yazılabilir. (VI.9.2) bağıntısını (VI.9.1) bağıntısında yerine yazarak

$$\eta_{mn}(t) = i\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t}$$

veyâ KRONECKER deltasının (VI.8.30c) ile verilen özelliğini kullanarak

$$\eta_{mn}(t) = i\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_{n+1} - E_n)t} \tag{VI.9.3}$$

elde edilir. Lineer harmonik osilâtörün enerji seviyelerini veren bağıntı, (VI.8.18) bağıntısına bakarak

$$E_n = n\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{(VI.9.4a)}$$

veyâ n yerine $n+1$ yazarak

$$E_{n+1} = (n+1)\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{(VI.9.4b)}$$

şeklindedir. Bu bağıntıları taraf tarafa çıkararak

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

veyâ

$$\frac{i}{\hbar}(E_{n+1} - E_n) = i\omega \qquad \text{(VI.9.4c)}$$

bulunur. (VI.9.4c) bağıntısı (VI.9.3) bağıntısında yerine yazılırsa, (VI.9.2) bağıntısının yardımı ile

$$\eta_{mn}(t) = \eta_{mn}^{(0)}\, e^{i\omega t} \qquad \text{(VI.9.5)}$$

sonucuna varılır.

η matrisi için (VI.6.10) bağıntısı ile verilen HEİSENBERG hareket denklemi

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{\partial\eta}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\eta, H]$$

şeklinde yazılabilir. η operatörünün veyâ matrisinin (VI.8.3a) ile verilen tanım bağıntısına göre

$$(2m\hbar\omega)^{1/2}\eta = p + im\omega x$$

olduğundan ve ayrıca

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0, \qquad \frac{\partial x}{\partial t} = 0$$

olduğu bilndiğinden

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = 0$$

elde edilir ve böylece HEİSENBERG hareket denklemi

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\eta, H] = \frac{i}{\hbar}[H, \eta] \qquad \text{(VI.9.6)}$$

şeklini alır. Öte yandan, (VI.8.16a) bağıntısına göre

$$[H, \eta] = \hbar \omega \eta \tag{VI.9.7}$$

olduğundan, (VI.9.6) bağıntısı

$$\frac{d\eta}{dt} = i\omega\eta \tag{VI.9.8}$$

şeklini alır. Bu matris diferansiyel denklemi kolaylıkla çözülebilir ve

$$\eta(t) = \eta^{(0)} e^{i\omega t} \tag{VI.9.9}$$

sonucuna varılır. Buradan $\eta^{(0)}$

$$\eta(0) = \eta^{(0)}$$

şartını sağlayan bir integrasyon sâbitidir. Şüphesiz (VI.9.9) bağıntısının matris temsili

$$\eta_{mn}(t) = \eta_{mn}^{(0)} e^{i\omega t} \tag{VI.9.9a}$$

şeklindedir ve bu da (VI.9.5) sonucunun aynıdır.

ALIŞTIRMALAR VE PROBLEMLER

VI.1. Spine bağlı olan

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r) + f(r)\,\mathbf{S}.\mathbf{L}$$

HAMİLTON operatörü veriliyor. $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ olmak üzere :

a) $[H, J_z] = f(r)\,[\mathbf{S}.\mathbf{L}, J_z]$ olduğunu gösteriniz.

b) $[\mathbf{S}.\mathbf{L}, \mathbf{S}_z] = -[\mathbf{S}.\mathbf{L}, \mathbf{L}_z] = i\hbar(S_x L_y - S_y L_x)$ olduğunu gösteriniz.

c) J_z nin bir hareket sâbiti olduğunu gösteriniz.

VI.2. Kütlesesi m ve potansiyel enerjisi $V(\mathbf{r})$ olan bir parçacığa ait HAMİLTON operatörü $H = p^2/2m + V(\mathbf{r})$ şeklindedir. Zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denklemi $H\psi_n = E_n \psi_n$ olduğuna ve parçacığın kartezyen koordinatları x, y, z olduğuna göre

$$\sum_k (E_k - E_n)\,|x_{kn}|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

bağıntısını ispat ediniz. Bu bağıntıya THOMAS-REİCHE-KUHN toplama kuralı adı verilir.

Yol gösterme : Problem III.2. deki bağıntıyı kullanınız.

VI.3. $H = p^2/2m + V(\mathbf{r})$ olmak üzere kütlesi m ve yer vektörü $\mathbf{r}$ olan bir parçacığa ait zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denklemi $H\psi_n = E_n\psi_n$ dir. Buna göre

a) $[[H, e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}], e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{r}}] = -\dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ bağıntısını ispat ediniz.

b) Yukardaki bağıntıyı kullanarak ve

$$A_{qn} = (\psi_q, e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}\psi_n)$$

bağıntısı ile A_{qn} matris elemanı tanımlandığına göre

$$\sum_q (E_q - E_n)\,|A_{qn}|^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

bağıntısı ispat ediniz. Çözüm için Emine Rızaoğlu'nun "Kuvantum Mekaniği Çözümlü Problem Kitabı"na bakınız. Problem: VII.20.

VI.4. Lineer harmonik osilâtöre ait HAMİLTON operatörünü bir köşegen matris şeklinde veren temsilde, p ve x operatörlerinin (VI.8.41a,b) bağıntıları ile verilen matris elemanlarını kullanarak :

a) p ve x operatörlerinin sıfırdan farklı olan matris elemanlarını ve $\langle p\rangle$, $\langle x\rangle$ beklenen değerlerini bulunuz.

b) $(xp)_{n'n}$ matris elemanlarını ve böylece $[x, p]$ komütatörünü bulunuz.

c) p^2 ve x^2 operatörlerinin matris elemanlarını ve böylece lineer harmonik osilâtöre ait HAMİLTON operatörünün matris elemanlarını bulunuz.

d) p^2 ve x^2 operatörlerinin sıfırdan farklı olan matris elemanlarını ve $\langle p^2\rangle$, $\langle x^2\rangle$ beklenen değerlerini bulunuz.

e) Lineer harmonik osilâtör için Δp ve Δx belirsizliklerini ve $\Delta p\,\Delta x$ belirsizlik çarpımını hesaplayınız. Elde ettiğiniz sonucu, HEİSENBERG belirsizlik bağıntısı ile karşılaştırınız.

f) x^3 ve x^4 operatörlerinin sıfırdan farklı olan matris elemanlarını bulunuz.

VI.5. $A(x, p)$ ve $B(x, p)$ fonksiyon operatörleri, x ve p operatörleri cinsinden kuvvet serilerine açılabildiğine göre ve $[x, p] = i\hbar$ olduğuna göre

$$\lim_{\hbar\to 0} \frac{1}{i\hbar}\,[A, B] = \{A, B\}$$

bağıntısını ispat ediniz.

VII. BÖLÜM

PERTÜRBASYON TEORİSİ

(VII.1) SOYSUZLAŞMAMIŞ HAMİLTON OPERATÖRLERİNE AİT DURAKLI HÂLLER İÇİN PERTÜRBASYON TEORİSİ

Kuvantum mekaniğinde, klâsik mekanikte olduğu gibi, fiziksel önemi haiz pek az hâl için hareket denklemleri tam olarak çözülebilir. Bu sebepten ötürü, çok kez yaklaşıklık metotlarının uygulanması gerekir. Söz konusu olan bir problem, tam olarak çözülebilen bir probleme yeteri kadar benzediği zaman yaklaşıklık metotları uygulanabilir.

Duraklı hâllere ait SCHRÖDİNGER denklemi

$$H^{(0)}\,\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\,\psi_n^{(0)} \qquad \text{(VII.1.1)}$$

şeklinde $H^{(0)}$ HAMİLTON operatörüne ait bir özdeğer denklemidir ve zamana bağlı değildir. (VII.1.1) denkleminin tam olarak çözülebildiğini varsayıyoruz. $H^{(0)}$ HAMİLTON operatörüne bir $\varepsilon H'$ operatörünün eklenmesiyle elde edilen

$$H = H^{(0)} + \varepsilon H' \qquad \text{(VII.1.2)}$$

şeklindeki H HAMİLTON operatörüne *pertürbe olmuş* HAMİLTON operatörü adı verilir. Böylece, *pertürbe olmamış* $H^{(0)}$ operatörünün $\varepsilon H'$ *pertürbasyonuna* mâruz kalarak H operatörüne dönüştüğü söylenir. Boyutsuz ε parametresi

$$0 < \varepsilon \ll 1 \qquad \text{(VII.1.3)}$$

şartını gerçekler ve $\varepsilon H'$ teriminin küçüklük mertebesini belirler. H HAMİLTON operatörüne ait özdeğer denklemi de

$$H\,\psi_n = E_n\,\psi_n \qquad \text{(VII.1.4)}$$

şeklindedir ve (VII.1.1) denklemine ε parametresinin küçüklüğü mertebesinde yakındır. Eğer (VII.1.4) hareket denklemi tam olarak çözülemeyen bir denklem ise, tam olarak çözülebilen (VII.1.1) hareket denkleminin çözümlerinin aracılığı ile çözülebilir.

$\psi_n^{(0)}$ ve $\psi_m^{(0)}$ özfonksiyonları (VII.1.1) denkleminin biribirinden farklı olan herhangi iki çözümü olsun. Öte yandan, $H^{(0)}$ operatörünün $\psi_n^{(0)}$ ve $\psi_m^{(0)}$ özfonksiyonlarına ait özdeğerleri $E_n^{(0)}$ ve $E_m^{(0)}$ olsun. Eğer $\psi_n^{(0)} \neq \psi_m^{(0)}$ için $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$ ise, $H^{(0)}$ operatörü ve dolayısiyle $E_n^{(0)}$ özdeğerleri soysuzlaşmamıştır. Bu paragrafta yalnız soysuzlaşmamış herhangi bir $H^{(0)}$ operatörünün herhangi bir pertürbasyona mâruz kalmasiyle elde edilen H operatörünün yaklaşık özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını araştıracağız. Genel hâlde, $\varepsilon H'$ pertürbasyon operatörünün küçük ε parametresi cinsinden

$$\varepsilon H' = \varepsilon H^{(1)} + \varepsilon^2 H^{(2)} + \dots \qquad \text{(VII.1.5)}$$

şeklinde bir kuvvet serisine ve dolayısiyle (VII.1.2) bağıntısına bakarak, H pertürbe olmuş HAMİLTON operatörünün de gene küçük ε parametresi cinsinden

$$H = H^{(0)} + \varepsilon H^{(1)} + \varepsilon^2 H^{(2)} + \dots \qquad \text{(VII.1.6)}$$

şeklinde bir kuvvet serisine açılabildiğini varsayalım. Şüphesiz H operatörünün ψ_n özfonksiyonları ve bu özfonksiyonlara ait E_n özdeğerleri de küçük ε parametresi cinsinden

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \varepsilon \psi_n^{(1)} + \varepsilon^2 \psi_n^{(2)} + \dots \qquad \text{(VII.1.7)}$$

ve

$$E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \dots \qquad \text{(VII.1.8)}$$

şekillerinde birer kuvvet serisine açılabilirler. Bu bağıntılardaki $\psi_n^{(0)}$ özfonksiyonlarına ve $E_n^{(0)}$ özdeğerlerine *pertürbe olmamış* özfonksiyonlar ve özdeğerler adı verilir. Benzer şekilde, ψ_n özfonksiyonlarına ve E_n özdeğerlerine de *pertürbe olmuş* özfonksiyonlar ve özdeğerler adı verilir. Öte yandan, $\varepsilon \psi_n^{(1)}$ ve $\varepsilon^2 \psi_n^{(2)}$ terimlerine, mütekabilen, dalga fonksiyonlarının mâruz kald kları *birinci mertebeden* ve *ikinci mertebeden pertürbasyonlar* adı verilir. Benzer şekilde, $\varepsilon E_n^{(0)}$ ve $\varepsilon^2 E_n^{(0)}$ terimlerine de mütekabilen, enerji özdeğerlerinin mâruz kaldıkları *birinci mertebeden* ve *ikinci mertebeden pertürbasyonlar* adı verilir.

(VII.1.7.8) bağıntıları (VII.1.4) özdeğer denkleminde yerlerine yazılırsa

$$\begin{aligned}(H^{(0)} + \varepsilon H^{(1)} + \varepsilon^2 H^{(2)} + \dots)(\psi_n^{(0)} + \varepsilon \psi_n^{(1)} + \varepsilon^2 \psi_n^{(2)} + \dots) \\ = (E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \dots)(\psi_n^{(0)} + \varepsilon \psi_n^{(1)} + \varepsilon^2 \psi_n^{(2)} + \dots)\end{aligned} \qquad \text{(VII.1.9)}$$

bulunur. Şüphesiz (VII.1.7,8) bağıntıları (VII.1.4) denkleminin çözümleridir ve bu sebepten ötürü, bu denklemi özdeş olarak sağlamaları gerekir. O hâlde (VII.1.9) bağıntısı, ε parametresinin bütün keyfî değerleri için özdeş olarak gerçeklenmelidir. (VII.1.9) bağıntısının her iki yanındaki parantezler açıldığında, ε parametresi cinsinden birer kuvvet serisi elde edilir. Bu kuvvet serilerinin özdeş olabilmesi için, ε parametresinin aynı dereceden kuvvetlerinin katsayıları eşit olmalıdır. O hâlde,

$$H^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} \qquad \text{(VII.1.10a)}$$

$$H^{(1)}\psi_n^{(0)} + H^{(0)}\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} \qquad \text{(VII.1.10b)}$$

$$H^{(2)}\psi_n^{(0)} + H^{(1)}\psi_n^{(1)} + H^{(0)}\psi_n^{(2)} = E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} \qquad \text{(VII.1.10c)}$$

bağıntıları elde edilir. (VII.1.10a) denklemi tam olarak çözülebilen (VII.1.1) denkleminin aynıdır. Uygulamada sâdece birinci ve ikinci mertebeden pertürbasyonları hesaplamak yeter. (VII.1.10a) denkleminden $E_n^{(0)}$ ve $\psi_n^{(0)}$ çözülebildiğine göre, (VII.1.10b) denkleminden $E_n^{(1)}$ ve $\psi_n^{(1)}$ pertürbasyonları çözülebilir ve dolayısiyle (VII.1.10c) denkleminden de $E_n^{(2)}$ ve $\psi_n^{(2)}$ pertürbasyonları çözülebilir. Aşağıda (VII.1.10b,c) denklemlerinin bu pertürbasyonları veren çözümlerini bulacağız.

$H^{(0)}$ operatörü HERMİTsel olduğu için bu operatörün $\psi_n^{(0)}$ özfonksiyonları

$$(\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(0)}) = \delta_{mn} \qquad \text{(VII.1.11)}$$

ortonormallik bağıntılarını gerçekler. Öte yandan, H operatörü de HERMİTsel olduğu için bu operatörün ψ_n özfonksiyonları

$$(\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn} \qquad \text{(VII.1.12)}$$

ortonormallik bağıntılarını gerçekler. Pertürbe olmuş ψ_n özfonksiyonları pertürbe olmamış $\psi_n^{(0)}$ özfonksiyonları cinsinden

$$\psi_n = \sum_i A_{ni}\,\psi_i^{(0)} \qquad \text{(VII.1.13a)}$$

şeklinde seriye açılabilir. Benzer şekilde, (VII.1.7) bağıntısındaki k inci mertebeden pertürbasyon fonksiyonu $\psi_n^{(k)}$ da $\psi_n^{(0)}$ özfonksiyonları cinsinden

$$\psi_n^{(k)} = \sum_i A_{ni}^{(k)}\,\psi_i^{(0)} \qquad \text{(VII.1.13b)}$$

şeklinde seriye açılabilir. Eğer (VII.1.13a,b) bağıntıları soldan $\psi_m^{(0)}$ özvektörü ile skaler olarak çarpılırsa (VII.1.11) bağıntılarını kullanarak

$$(\psi_m^{(0)}, \psi_n) = \sum_i A_{ni}\,(\psi_m^{(0)}, \psi_i^{(0)}) = \sum_i A_{ni}\,\delta_{mi} = A_{nm}$$

$$(\psi_m^{(0)}, \psi_k^{(k)}) = \sum_i A_{ni}^{(k)}\,(\psi_m^{(0)}, \psi_i^{(0)}) = \sum_i A_{ni}^{(k)}\,\delta_{mi} = A_{nm}^{(k)}$$

veyâ

$$A_{nm} = (\psi_m^{(0)}, \psi_n) \tag{VII.1.14a}$$

$$A_{nm}^{(k)} = (\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(k)}) \tag{VII.1.14b}$$

sonuçlarına varılır. (VII.1.14b) bağıntısı $k = 0$ özel hâli için

$$A_{nm}^{(0)} = \delta_{nm} \tag{VII.1.14c}$$

sonucunu verir. (VII.1.7) bağıntısının her iki yanı soldan $\psi_m^{(0)}$ özvektörü ile skaler olarak çarpılırsa

$$(\psi_m^{(0)}, \psi_n) = (\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(0)}) + \varepsilon (\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(1)}) + \varepsilon^2 (\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(2)}) + \dots$$

bulunur. Bu bağıntıda (VII.1.11) ve (VII.1.14a,b) bağıntıları yerlerine yazılırsa

$$A_{nm} = \delta_{nm} + \varepsilon A_{nm}^{(1)} + \varepsilon^2 A_{nm}^{(2)} + \dots \tag{VII.1.15}$$

sonucuna varılır. (VII.1.15) bağıntısı A_{nm} açılım katsayılarının ε parametresinin kuvvetlerine göre açılımıdır ve bu açılımın katsayıları da $A_{nm}^{(k)}$ dir. Şimdi de (VII.1.13a) bağıntısını

$$\psi_m = \sum_k A_{mk} \psi_k^{(0)}$$

bağıntısı ile taraf tarafa skaler olarak çarpalım :

$$(\psi_m, \psi_n) = \Big(\sum_k A_{mk} \psi_k^{(0)}, \sum_i A_{ni} \psi_i^{(0)} \Big)$$

$$= \sum_k \sum_i A_{mk}^* A_{ni} (\psi_k^{(0)}, \psi_i^{(0)})$$

$$= \sum_i \sum_k A_{mk}^* A_{ni} \delta_{ki} = \sum_i A_{mi}^* A_{ni}$$

veyâ (VII.1.12) bağıntısını kullanarak

$$\sum_i A_{mi}^* A_{ni} = \delta_{mn} \tag{VII.1.16}$$

sonucuna varılır. (VII.1.16) bağıntısı A_{ni} matrisinin bir üniter matris olduğunu gösterir. Şüphesiz (VII.1.15) açılımı (VII.1.16) bağıntısını özdeş olarak sağlamalıdır. O hâlde, yerlerine yazarak

$$\sum_i (\delta_{mi} + \varepsilon A_{mi}^{(1)*} + \varepsilon^2 A_{mi}^{(2)*} + \dots)(\delta_{ni} + \varepsilon A_{ni}^{(1)} + \varepsilon^2 A_{ni}^{(2)} + \dots) = \delta_{mn}$$

$$\sum_i [\delta_{mi} \delta_{ni} + \varepsilon (\delta_{mi} A_{ni}^{(1)} + \delta_{ni} A_{mi}^{(1)*}) +$$

$$+ \varepsilon^2 (\delta_{mi} A_{ni}^{(2)} + \delta_{ni} A_{mi}^{(2)*} + A_{mi}^{(1)*} A_{ni}^{(1)}) + \dots] = \delta_{mn}$$

$$\delta_{mn} + \varepsilon (A_{nm}^{(1)} + A_{mn}^{(1)*}) + \varepsilon^2 \Big(A_{nm}^{(2)} + A_{mn}^{(2)*} + \sum_i A_{mi}^{(1)*} A_{ni}^{(1)} \Big) + \dots = \delta_{mn} \tag{VII.1.17}$$

özdeşliği elde edilir. Bu özdeşliğin gerçeklenmesi için ε un her kuvvetinin katsayısı sıfır olmalıdır. Böylece ε ve ε^2 nin katsayılarının sıfır olmaları şartını kullanarak

$$A_{nm}^{(1)} + A_{mn}^{(1)*} = 0 \tag{VII.1.18a}$$

$$A_{nm}^{(2)} + A_{mn}^{(2)*} + \sum_i A_{mi}^{(1)*} A_{ni}^{(1)} = 0 \tag{VII.1.18b}$$

sonuçlarına varılır. $m = n$ özel hâli için bu bağıntılar

$$A_{nn}^{(1)} + A_{nn}^{(1)*} = 0 \tag{VII.1.19a}$$

$$A_{nn}^{(2)} + A_{nn}^{(2)*} + \sum_i A_{ni}^{(1)*} A_{ni}^{(1)} = 0 \tag{VII.1.19b}$$

şekillerini alırlar. (VII.1.19a) bağıntısı $A_{nn}^{(1)}$ katsayılarının saf imajiner sayılar olduğunu gösterir. Öte yandan, (VII.1.15) bağıntısı $m = n$ için

$$A_{nn} = 1 + \varepsilon A_{nn}^{(1)} + \varepsilon^2 A_{nn}^{(2)} + \ldots \tag{VII.1.20}$$

şeklinde yazılabilir. Eğer bu bağıntıda

$$A_{nn}^{(1)} = i\,\alpha$$

yazılırsa

$$A_{nn} = 1 + i\,\varepsilon\,\alpha + O(\varepsilon^2)$$

elde edilir. Şüphesiz

$$e^{i\varepsilon\alpha} = 1 + i\,\varepsilon\,\alpha + O(\varepsilon^2)$$

olduğundan, (VII.1.20) bağıntısı yaklaşık olarak

$$A_{nn} \cong e^{i\varepsilon\alpha} \tag{VII.1.20a}$$

şeklini alır. Öte yandan (VII.1.13a) açılımı,

$$\psi_n = A_{nn}\, \psi_n^{(0)} + \sum_{i \neq n} A_{ni}\, \psi_i^{(0)} \tag{VII.1.21}$$

şeklinde yazılabilir ve (VII.1.20a) bağıntısının yardımı ile

$$\psi_n \cong e^{i\varepsilon\alpha}\, \psi_n^{(0)} + \sum_{i \neq n} A_{ni}\, \psi_i^{(0)} \tag{VII.1.21a}$$

yaklaşık şeklini alır. Bu bağıntının ilk teriminde $\psi_n^{(0)}$ dalga fonksiyonu keyfî bir faz çarpanı ile çarpılmıştır ve bu çarpanın bire eşit alınması fiziksel olarak gözlenebilir bir değişiklik doğurmaz. O hâlde,

$$i\alpha = A_{nn}^{(1)} = 0 \qquad \text{(VII.1.22)}$$

sonucuna varılır. (VII.1.19b) bağıntısı da, $A_{nn}^{(2)}$ katsayısının yalnız reel kısmını belirler. $A_{nn}^{(2)}$ katsayısının keyfî olan imajiner kısmının seçimi, pertürbe olmamış $\psi_n^{(0)}$ dalga fonksiyonu için bir yeni fazın seçimine eşdeğerdir ve fiziksel önemi yoktur. O hâlde, söz konusu fazı sıfır seçerek $A_{nn}^{(2)}$ nin imajiner kısmı sıfıra eşit alınabilir ve

$$A_{nn}^{(2)*} = A_{nn}^{(2)}$$

yazılabilir. Bu son bağıntının (VII.1.19b) bağıntısında yerine yazılması ile

$$A_{nn}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq n} |A_{ni}^{(1)}|^2 \qquad \text{(VII.1.23)}$$

sonucuna varılır.

HAMİLTON operatörünün (VII.1.6) bağıntısı ile verilen kuvvet serisi açılımında ε^p nin katsayısı $H^{(p)}$ operatörü olsun. Şimdi (VII.1.13b) bağıntısının her iki yanına soldan sol $H^{(p)}$ operatörünü uygulayalım.

$$H^{(p)} \psi_n^{(k)} = \sum_i A_{ni}^{(k)} H^{(p)} \psi_i^{(0)}$$

bulunur. Şimdi de bu bağıntının her iki yanını soldan $\psi_m^{(0)}$ özvektörü ile skaler olarak çarpalım.

$$(\psi_m^{(0)}, H^{(p)} \psi_n^{(k)}) = \sum_i A_{ni}^{(k)} (\psi_m^{(0)}, H^{(p)} \psi_i^{(0)}) \qquad \text{(VII.1.24)}$$

elde edilir. Eğer $H^{(p)}$ operatörünün $\psi_n^{(0)}$ taban vektörlerine göre matris elemanları

$$H_{mi}^{(p)} = (\psi_m^{(0)}, H^{(p)} \psi_i^{(0)}) \qquad \text{(VII.1.25)}$$

bağıntısı ile tanımlanırsa (VII.1.24) bağıntısı

$$(\psi_m^{(0)}, H^{(p)} \psi_n^{(k)}) = \sum_i A_{ni}^{(k)} H_{mi}^{(p)} \qquad \text{(VII.1.26)}$$

şeklinde yazılabilir. Şüphesiz $p = 0$ için (VII.1.25) bağıntısı, (VII.1.1) bağıntısının yardımı ile

$$H_{mi}^{(0)} = E_m^{(0)} \delta_{mi} \qquad \text{(VII.1.27)}$$

şeklini alır.

Birinci Mertebeden Pertürbasyon Hesabı

Şimdi (VII.1.10b) bağıntısının her iki yanını soldan $\psi_m^{(0)}$ özvektörü ile skaler olarak çarpalım:

$$(\psi_m^{(0)}, H^{(1)} \psi_n^{(0)}) + (\psi_m^{(0)}, H^{(0)} \psi_n^{(1)}) = E_n^{(1)} (\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(0)}) + E_n^{(0)} (\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(1)}) \quad \text{(VII.1.28)}$$

bulunur. Öte yandan, $p = 0$ ve $k = 1$ için (VII.1.26) bağıntısından, (VII.1.27) bağıntısını da kullanarak

$$(\psi_m^{(0)}, H^{(0)} \psi_n^{(1)}) = \sum_i A_{ni}^{(1)} H_{mi}^{(0)} = \sum_i A_{ni}^{(1)} E_m^{(0)} \delta_{mi} = A_{nm}^{(1)} E_m^{(0)} \quad \text{(VII.1.29)}$$

elde edilir. (VII.1.25), (VII.1.29), (VII.1.11) ve (VII.1.14b) bağıntılarını (VII.1.28) bağıntısında yerlerine yazarak

$$H_{mn}^{(1)} + A_{nm}^{(1)} E_m^{(0)} = E_n^{(1)} \delta_{mn} + E_n^{(0)} A_{nm}^{(1)}$$

veyâ

$$E_n^{(1)} \delta_{mn} + A_{nm}^{(1)} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) = H_{mn}^{(1)} \quad \text{(VII.1.30)}$$

sonucuna varılır. (VII.1.30) bağıntısı bir kez $m = n$ için ve bir kez de $m \neq n$ için yazılırsa

$$m = n \text{ için:} \qquad E_n^{(1)} = H_{nn}^{(1)} \quad \text{(VII.1.31a)}$$

$$m \neq n \text{ için:} \qquad A_{nm}^{(1)} = \frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad \text{(VII.1.31b)}$$

sonuçlarına varılır.

İkinci Mertebeden Pertürbasyon Hesabı

Şimdi (VII.1.10c) bağıntısının her iki yanını soldan $\psi_m^{(0)}$ özvektörü ile skaler olarak çarpalım:

$$(\psi_m^{(0)}, H^{(2)} \psi_n^{(0)}) + (\psi_m^{(0)}, H^{(1)} \psi_n^{(1)}) + (\psi_m^{(0)}, H^{(0)} \psi_n^{(2)}) =$$
$$= E_n^{(2)} (\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(0)}) + E_n^{(1)} (\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(1)}) + E_n^{(0)} (\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(2)}) \quad \text{(VII.1.32)}$$

bulunur. $p = 1$ ve $k = 1$ için (VII.1.26) bağıntısından

$$(\psi_m^{(0)}, H^{(1)} \psi_n^{(1)}) = \sum_{i \neq n} A_{ni}^{(1)} H_{mi}^{(1)} \quad \text{(VII.1.33)}$$

bulunur. Öte yandan, $p = 0$ ve $k = 2$ için (VII.1.26) bağıntısından, (VII.1.27) bağıntısını da kullanarak

$$(\psi_m^{(0)}, H^{(0)} \psi_n^{(2)}) = \sum_i A_{ni}^{(2)} H_{mi}^{(0)} = \sum_i A_{ni}^{(2)} E_m^{(0)} \delta_{mi} = A_{nm}^{(2)} E_m^{(0)} \quad \text{(VII.1.34)}$$

elde edilir. (VII.1.25), (VII.1.33), (VII.1.34), (VII.1.11) ve (VII.1.14b) bağıntılarını (VII.1.32) bağıntısında yerlerine yazarak

$$H^{(2)}_{mn} + \sum_{i \neq n} A^{(1)}_{ni} H^{(1)}_{mi} + A^{(2)}_{nm} E^{(0)}_{m} = E^{(2)}_{n} \delta_{mn} + E^{(1)}_{n} A^{(1)}_{nm} + E^{(0)}_{n} A^{(2)}_{nm} \qquad \text{(VII.1.35)}$$

veyâ

$$E^{(2)}_{n} \delta_{mn} + A^{(2)}_{nm} (E^{(0)}_{n} - E^{(0)}_{m}) = H^{(2)}_{mn} + \sum_{i \neq n} A^{(1)}_{ni} H^{(1)}_{mi} - A^{(1)}_{nm} E^{(1)}_{n} \qquad \text{(VII.1.36)}$$

sonucuna varılır. (VII.1.36) bağıntısı bir kez $m = n$ için ve bir kez de $m \neq n$ için yazılırsa, (VII.1.22) bağıntısını da kullanarak

$$m = n \text{ için :} \qquad E^{(2)}_{n} = H^{(2)}_{nn} + \sum_{i \neq n} A^{(1)}_{ni} H^{(1)}_{ni} \qquad \text{(VII.1.37)}$$

$$m \neq n \text{ için :} \qquad A^{(2)}_{nm} (E^{(0)}_{n} - E^{(0)}_{m}) = H^{(2)}_{mn} + \sum_{i \neq n} A^{(1)}_{ni} H^{(1)}_{mi} - A^{(1)}_{nm} E^{(1)}_{n} \qquad \text{(VII.1.38)}$$

sonuçlarına varılır.

(VII.1.31b) bağıntısında $m = i$ alınarak

$$i \neq n \text{ için :} \qquad A^{(1)}_{ni} = \frac{H^{(1)}_{in}}{E^{(0)}_{n} - E^{(0)}_{i}} \qquad \text{(VII.1.31b)}$$

elde edilir ve bu da (VII.1.37) bağıntısında yerine yazılırsa

$$E^{(2)}_{n} = H^{(2)}_{nn} + \sum_{i \neq n} \frac{H^{(1)}_{in} H^{(1)}_{ni}}{E^{(0)}_{n} - E^{(0)}_{i}}$$

bulunur. $H^{(1)}$ operatörü HERMİTsel olduğu için bu operatöre ait matris elemanları

$$H^{(1)}_{in} = H^{(1)*}_{ni}$$

şartını sağlar ve böylece

$$H^{(1)}_{in} H^{(1)}_{ni} = H^{(1)*}_{ni} H^{(1)}_{ni} = | H^{(1)}_{ni} |^2$$

bulunur. O hâlde, $E^{(2)}_{n}$ yi veren bağıntı

$$E^{(2)}_{n} = H^{(2)}_{nn} + \sum_{i \neq n} \frac{| H^{(1)}_{ni} |^2}{E^{(0)}_{n} - E^{(0)}_{i}} \qquad \text{(VII.1.39)}$$

şeklini alır.

(VII.1.38) bağıntısında $m = i$ alınırsa ve sağ yandaki i toplama indisi yerine de karışıklığı önlemek için $i = k$ alınırsa

$$i \neq n \text{ için}: \quad A_{ni}^{(2)}(E_n^{(0)} - E_i^{(0)}) = H_{in}^{(2)} + \sum_{k \neq n} A_{nk}^{(1)} H_{ik}^{(1)} - A_{ni}^{(1)} E_n^{(1)} \qquad \text{(VII.1.38)}$$

elde edilir. (VII.1.31a,b) bağıntıları (VII.1.38) bağıntısında yerlerine yazılırsa $i \neq n$ için

$$A_{ni}^{(2)} = \frac{H_{in}^{(2)}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} + \sum_{k \neq n} \frac{H_{ik}^{(1)} H_{kn}^{(0)}}{(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} - \frac{H_{in}^{(1)} H_{nn}^{(1)}}{(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})^2} \qquad \text{(VII.1.40)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, $i = n$ için (VII.1.23) bağıntısında (VII.1.31b) bağıntısı yerine yazılarak

$$A_{nn}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq n} \frac{|H_{ni}^{(1)}|^2}{(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})^2} \qquad \text{(VII.1.41)}$$

sonucuna varılır. Ayrıca, $k = 2$ için (VII.1.31b) bağıntısı

$$\psi_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} A_{ni}^{(2)} \psi_i^{(0)} + A_{nn}^{(2)} \psi_n^{(0)} \qquad \text{(VII.1.42)}$$

şeklinde yazılabilir. (VII.1.40) ve (VII.1.41) bağıntıları (VII.1.42) bağıntısında yerlerine yazılarak $\psi_n^{(2)}$ pertürbasyon özfonksiyonunun hesabı tamamlanır.

Elde edilen sonuçlar (VII.1.8) ve (VII.1.7) bağıntılarında yerlerine yazılırsa ikinci mertebeye kadar olan enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlar için aşağıdaki sonuçlar bulunur :

$$E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon H_{nn}^{(1)} + \varepsilon^2 \left\{ H_{nn}^{(2)} + \sum_{i \neq n} \frac{|H_{ni}^{(1)}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \right\} \qquad \text{(VII.1.43)}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \varepsilon \sum_{i \neq n} \frac{H_{in}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \psi_i^{(0)} +$$

$$+ \varepsilon^2 \sum_{i \neq n} \left\{ \left[\frac{H_{in}^{(2)}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} + \sum_{k \neq n} \frac{H_{ik}^{(1)} H_{kn}^{(1)}}{(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} - \right.\right.$$

$$\left.\left. - \frac{H_{in}^{(1)} H_{nn}^{(1)}}{(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})^2} \right] \psi_i^{(0)} - \frac{1}{2} \frac{|H_{ni}^{(1)}|^2}{(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})^2} \psi_n^{(0)} \right\} \qquad \text{(VII.1.44)}$$

(VII.2) DURAKLI HÂLLER İÇİN BİR HAMİLTON OPERATÖRÜNÜN SOYSUZLAŞMIŞ BİR ENERJİ ÖZDEĞERİNE AİT PERTÜRBASYON TEORİSİ

Duraklı hâller için tam olarak çözülebilen SCHRÖDİNGER denklemini, yâni pertürbe olmamış $H^{(0)}$ HAMİLTON operatörüne ait özdeğer denklemini yazalım :

$$H^{(0)}\,\psi_i^{(0)} = E_i^{(0)}\,\psi_i^{(0)} \tag{VII.2.1}$$

Şimdi $H^{(0)}$ operatörünün belirli bir E_0 özdeğeri için N adet biribirinden farklı özfonksiyonu olsun :

$$\psi_1^{(0)} \neq \psi_2^{(0)} \neq \psi_3^{(0)} \neq \ldots \neq \psi_N^{(0)} \tag{VII.2.2}$$

Söz konusu olan N adet özfonksiyon için $H^{(0)}$ operatörünün ortak bir E_0 özdeğeri olduğu için

$$E_1^{(0)} = E_2^{(0)} = E_3^{(0)} = \ldots = E_N^{(0)} = E_0 \tag{VII.2.3}$$

yazılabilir ve (VII.2.1) özdeğer denklemi

$$H^{(0)}\,\psi_i^{(0)} = E_0\,\psi_i^{(0)} \qquad (i = 1\,,\ldots, N) \tag{VII.2.1a}$$

şeklini alır. O hâlde, E_0 özdeğeri bir *soysuzlaşmış özdeğer*dir. Dolayısiyle $H^{(0)}$ operatörü, E_0 özdeğeri için bir *soysuzlaşmış operatör*dür ve soysuzlaşma mertebesi N dir. Bu tür bir soysuzlaşmaya *N katlı soysuzlaşma* adı da verilir. Bir önceki paragrafta soysuzlaşmamış hâl için uygulanan pertürbasyon teorisinin sonucunda elde edilen (VII.1.43,44) bağıntılarının paydalarındaki $E_n^{(0)} - E_i^{(0)}$ şeklindeki enerji farkları, soysuzlaşmış hâl için sıfır olur ve bu sebepten ötürü, söz konusu olan pertürbasyon teorisi artık geçerli değildir. Bu paragrafta soysuzlaşmış hâle uygulanabilen bir pertürbasyon teorisinin esasları araştırılacaktır.

Bu paragrafta yalnız birinci mertebeden pertürbasyonlar incelenecek ve pertürbe olmuş HAMİLTON operatörü

$$H = H^{(0)} + \varepsilon\,H' \tag{VII.2.4}$$

şeklinde alınacaktır. Duraklı hâller için tam olarak çözülemeyen SCHRÖDİNGER denklemi H operatörüne ait

$$H\,\psi_n = E_n\,\psi_n \tag{VII.2.5}$$

şeklindeki özdeğer denklemidir. Bu denklemde birinci mertebeden pertürbasyonların soysuzlaşmayı ortadan kaldırdığını farz ediyoruz. Bir önceki paragrafta yaptığımız gibi, (VII.2.5) denkleminin çözümü olan ψ_n özfonksiyonlarının ortonormal $\psi_n^{(0)}$ özfonksiyonları cinsinden seriye açılımını yazalım :

$$\psi_n = \sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, \psi_i^{(0)} \qquad \text{(VII.2.6)}$$

(VII.2.6) bağıntısında soysuzlaşmamış enerji seviyelerini ihmâl ediyoruz ve yalnız E_0 soysuzlaşmış enerji özdeğerine ait olan N adet $\psi_i^{(0)}$ özfonksiyonu cinsinden açılım yapıyoruz. (VII.2.6) bağıntısını (VII.2.5) denkleminde yerine yazalım:

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, H\, \psi_i^{(0)} = E_n \sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, \psi_i^{(0)} \qquad \text{(VII.2.7)}$$

elde edilir. (VII.2.4) bağıntısını kullanarak

$$H\, \psi_i^{(0)} = H^{(0)}\, \psi_i^{(0)} + \varepsilon\, H'\, \psi_i^{(0)} \qquad \text{(VII.2.8a)}$$

veyâ (VII.2.1) bağıntısının yardımı ile

$$H\, \psi_i^{(0)} = E_i^{(0)}\, \psi_i^{(0)} + \varepsilon\, H'\, \psi_i^{(0)} \qquad \text{(VII.2.8b)}$$

bulunur. (VII.2.8b) bağıntısı (VII.2.7) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, E_i^{(0)}\, \psi_i^{(0)} + \varepsilon \sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, H'\, \psi_i^{(0)} = E_n \sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, \psi_i^{(0)}$$

veyâ

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, (E_n - E_i^{(0)})\, \psi_i^{(0)} = \varepsilon \sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, H'\, \psi_i^{(0)} \qquad \text{(VII.2.9)}$$

elde edillr. (VII.2.9) bağıntısının her iki yanını soldan $\psi_m^{(0)}$ özvektörü ile skaler olarak çarpalım :

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, (E_n - E_i^{(0)})\, (\psi_m^{(0)}\,,\, \psi_i^{(0)}) = \varepsilon \sum_{i=1}^{N} A_{ni}\, (\psi_m^{(0)}\,,\, H'\, \psi_i^{(0)}) \qquad \text{(VII.2.9a)}$$

bulunur. Eğer $\psi_i^{(0)}$ özvektörlerine ait

$$(\psi_m^{(0)}\,,\, \psi_i^{(0)}) = \delta_{mi} \qquad \text{(VII.2.10)}$$

ortonormallik bağıntısını ve H' pertürbasyon eperatörünün matris elemanlarını tanımlayan

$$H'_{mi} = (\psi_m^{(0)}\,,\, H'\, \psi_i^{(0)}) \qquad \text{(VII.2.11)}$$

bağıntısını (VII.2.9a) bağıntısında yerlerine yazarsak,

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ni}\,(E_n - E_i^{(0)})\,\delta_{mi} = \varepsilon \sum_{i=1}^{N} A_{ni}\,H'_{mi}$$

veyâ

$$A_{nm}\,(E_n - E_m^{(0)}) = \varepsilon \sum_{i=1}^{N} A_{ni}\,H'_{mi} \qquad \text{(VII.2.12)}$$

elde edilir. Eğer (VII.2.3) bağıntısı ile verilen $E_m^{(0)} = E_0$ soysuzlaşma şartı kullanılırsa (VII.2.12) bağıntısından, $m = 1, 2, \ldots, N$ olmak üzere,

$$(E_n - E_0)\,A_{nm} = \varepsilon \sum_{i=1}^{N} H'_{mi}\,A_{ni} \qquad \text{(VII.2.13a)}$$

veyâ

$$\sum_{i=1}^{N} (E_n - E_0)\,\delta_{mi}\,A_{ni} = \varepsilon \sum_{i=1}^{N} H'_{mi}\,A_{ni}$$

veyâ

$$\sum_{i=1}^{N} [\varepsilon\,H'_{mi} - (E_n - E_0)\,\delta_{mi}]\,A_{ni} = 0 \qquad \text{(VII.2.13b)}$$

sonucuna varılır. $n =$ sâbit için (VII.2.13b) bağıntısı A_{ni} katsayılarına göre N bilinmeyenli N denklemden oluşan bir lineer homogen cebirsel denklem sistemidir. A_{ni} katsayılarından en az birinin sıfırdan farklı olabilmesi için, bu denklem sisteminin katsayılarından oluşan $N \times N$ inci mertebeden kare matrisin determinatı sıfır olmalıdır. Böylece

$$\text{Det}\,[\varepsilon\,H'_{mi} - (E_n - E_0)\,\delta_{mi}] = 0 \qquad \text{(VII.2.14)}$$

bulunur. (VII.2.14) bağıntısı, E_n enerji özdeğerlerine göre N inci dereceden bir cebirsel denklemdir. Bu denklemin genel hâlde biribirinden farklı N adet kökü vardır. Böylece birinci mertebeden pertürbasyon, soysuzlaşmayı ortadan kaldırır. E_n özdeğerlerinden her biri için (VI.2.13b) denklem sisteminin A_{ni} bilinmeyenlerine göre bir çözüm takımı vardır. N adet A_{ni} çözüm takımına karşılık olmak üzere (VII.2.6) bağıntısı N adet pertürbe olmuş ψ_n özfonksiyonunu belirler.

Şimdi N adet ψ_n özfonksiyonundan herhangi ikisinin aracılığı ile $\varepsilon H'$ pertürbasyon operatörünün matris elemanını tanımlayalım. Söz konusu matris elemanlarının sıfır olduğunu, yâni

$$m \neq n \text{ için}: \qquad \varepsilon\,(\psi_m\,, H'\,\psi_n) = 0 \qquad \text{(VII.2.15)}$$

bağıntılarını ispat edeceğiz. (VII.2.6) bağıntısı ile verilen ψ_n açılımlarını matris elemanının ifadesinde yerlerine yazalım :

$$\varepsilon(\psi_m, H' \psi_n) = \varepsilon\Big(\sum_k A_{mk}\, \psi_k^{(0)}, \sum_i A_{ni}\, H' \psi_i^{(0)}\Big)$$

$$= \varepsilon \sum_k \sum_i A_{mk}^* A_{ni} (\psi_k^{(0)}, H' \psi_i^{(0)})$$

bulunur. (VII.2.11) tanım bağıntısını kullanarak

$$\varepsilon(\psi_m, H' \psi_n) = \varepsilon \sum_k \sum_i A_{mk}^* H'_{ki} A_{ni} \qquad \text{(VII.2.16)}$$

elde edilir. Önce (VII.2.16) bağıntısını

$$\varepsilon(\psi_m, H' \psi_n) = \sum_k A_{mk}^* \, \varepsilon \sum_i H'_{ki} A_{ni} \qquad \text{(VII.2.16a)}$$

şeklinde yazalım ve (VII.2.13a) bağıntısını da $m = k$ için

$$(E_n - E_0) A_{nk} = \varepsilon \sum_i H'_{ki} A_{ni} \qquad \text{(VII.2.13c)}$$

şeklinde yazalım. (VII.2.13c) bağıntısı (VII.2.16a) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(E_n - E_0) \sum_k A_{mk}^* A_{nk} = \varepsilon(\psi_m, H' \psi_n) \qquad \text{(VII.2.17)}$$

sonucuna varılır. (VII.2.16) bağıntısını bir kez de

$$\varepsilon(\psi_m, H' \psi_n) = \sum_i A_{ni} \, \varepsilon \sum_k H'^*_{ik} A_{mk}^* \qquad \text{(VII.2.16b)}$$

şeklinde yazalım. Burada H' operatörünün HERMİTsellik özelliği, yâni

$$H'^+ = H', \qquad H'^+_{ki} = H'^*_{ik} = H'_{ki}$$

bağıntısı kullanıldı. Öte yandan, önce (VII.2.13c) bağıntısını $n = m$ için

$$(E_m - E_0) A_{mk} = \varepsilon \sum_i H'_{ki} A_{mi}$$

şeklinde yazalım ve sonra da, i ve k indislerinin yerlerini aralarında değiştirerek bulunan bağıntının kompleks eşleniğini alalım :

$$(E_m - E_0) A_{mi}^* = \varepsilon \sum_k H'^*_{ik} A_{mk}^* \qquad \text{(VII.2.13d)}$$

bulunur. (VII.2.13d) bağıntısı (VII.2.16b) bağıntısında yerine yazılırsa

$$(E_m - E_0) \sum_i A_{mi}^* A_{ni} = \varepsilon(\psi_m, H' \psi_n) \qquad \text{(VII.2.18)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (VII.2.17) bağıntısında toplama indisi $k = i$ olarak seçilirse

$$(E_n - E_0) \sum_i A^*_{mi} A_{ni} = \varepsilon\,(\psi_m\,,\, H'\,\psi_n) \qquad \text{(VII.2.17a)}$$

bulunur. Şimdi (VII.2.18) ve (VII.2.17a) bağıntılarını taraf tarafa çıkaralım:

$$(E_m - E_n) \sum_i A^*_{mi} A_{ni} = 0 \qquad \text{(VII.2.19)}$$

elde edilir. Eğer soysuzlaşma ortadan kalkmışsa, yâni $E_m \neq E_n$ ise:

$$m \neq n \text{ için :} \qquad \sum_{i=1}^{N} A^*_{mi} A_{ni} = 0 \qquad \text{(VII.2.20)}$$

bulunur. (VII.2.20) bağıntısı (VII.2.18) veyâ (VII.2.17a) bağıntısında yerine yazılırsa

$$m \neq n \text{ için :} \qquad \varepsilon\,(\psi_m\,,\, H'\,\psi_n) = 0 \qquad \text{(VII.2.15)}$$

sonucuna varılır. Böylece ispat tamamlandı.

(VII.2.6) ve (VII.2.10) bağıntılarını kullanarak

$$(\psi_m\,,\,\psi_n) = \Big(\sum_k A_{mk}\,\psi_k^{(0)}\,,\, \sum_i A_{ni}\,\psi_i^{(0)}\Big)$$

$$= \sum_k \sum_i A^*_{mk}\, A_{ni}\, (\psi_k^{(0)}\,,\,\psi_i^{(0)})$$

$$= \sum_i \sum_k A^*_{mk}\, A_{ni}\, \delta_{ki}$$

veyâ

$$(\psi_m\,,\,\psi_n) = \sum_i A^*_{mi} A_{ni} \qquad \text{(VII.2.21)}$$

bulunur. (VII.2.20) bağıntısını kullanarak (VII.2.21) bağıntısından

$$m \neq n \text{ için :} \qquad (\psi_m\,,\,\psi_n) = \sum_i A^*_{mi} A_{ni} = 0 \qquad \text{(VII.2.22)}$$

elde edilir. Böylece, pertürbe olmuş ψ_n özfonksiyonlarının dik oldukları sonucuna varılır. Soysuzlaşmış enerji özdeğerlerine bir örnek olmak üzere paragraf (II.6) ya bakınız.

(VII.3) ÖZEL HÂL : İKİ KATLI BİR SOYSUZLAŞMA İÇİN PERTÜRBASYON TEORİSİ

Bu paragrafta iki katlı soysuzlaşma özel hâli için pertürbe olmuş enerji özdeğerlerini ve enerji özfonksiyonlarını hesaplayacağız.

$N = 2$ özel hâli için (VII.2.13b) denklemleri

$$\left.\begin{aligned} [\varepsilon H'_{11} - (E_n - E_0)]\, A_{n1} + \varepsilon H'_{12}\, A_{n2} = 0 \\ \varepsilon H'_{21}\, A_{n1} + [\varepsilon H'_{22} - (E_n - E_0)]\, A_{n2} = 0 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.3.1)}$$

şeklinde yazılabilir. Bu bağıntılar, A_{nl} katsayılarına göre lineer homogen bir denklem sistemidir ve

$$\begin{bmatrix} \varepsilon H'_{11} - (E_n - E_0) & \varepsilon H'_{12} \\ \varepsilon H'_{21} & \varepsilon H'_{22} - (E_n - E_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{n1} \\ A_{n2} \end{bmatrix} = 0 \qquad \text{(VII.3.1a)}$$

şeklinde bir matris bağıntısı olarak ta yazılabilir. A_{nl} katsayılarından en az birinin sıfırdan farklı olabilmesi için, (VII.3.1a) bağıntısındaki 2×2 nci mertebeden kare matrisin determinantı sıfır olmalıdır :

$$\begin{vmatrix} \varepsilon H'_{11} - (E_n - E_0) & \varepsilon H'_{12} \\ \varepsilon H'_{21} & \varepsilon H'_{22} - (E_n - E_0) \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{(VII.3.2)}$$

(VII.3.2) bağıntısı, (VII.2.14) bağıntısının $N = 2$ ye ait bir özel hâli olarak ta yazılabilirdi. H' pertürbasyon operatörü HERMİTsel olduğu için H'_{mn} kare matrisi de HERMİTseldir ve bu sebepten ötürü, H'_{11} ve H'_{22} matris elemanları reeldir. Ayrıca,

$$H'^{*}_{12} = H'_{21}\,, \qquad H'_{12} = H'^{*}_{21}$$

yazılabilir ve böylece

$$H'_{12}\, H'_{21} = |\, H'_{12}\,|^2 = |H'_{21}\,|^2 \qquad \text{(VII.3.3)}$$

sonucuna varılır. (VII.3.2) bağıntısı, (VII.3.3) bağıntısını kullanarak

$$[(E_n - E_0) - \varepsilon H'_{11}]\, [(E_n - E_0) - \varepsilon H'_{22}] - \varepsilon^2\, |\, H'_{12}\,|^2 = 0$$

veyâ

$$(E_n - E_0)^2 - \varepsilon\, (H'_{11} + H'_{22})\, (E_n - E_0) + \varepsilon^2\, (H'_{11}\, H'_{22} - |\, H'_{12}\,|^2) = 0 \qquad \text{(VII.3.4)}$$

şeklinde yazılabilir ve E_n ye göre ikinci dereceden bir denklemdir. Eğer kısaltma için

$$x = E_n - E_0\,, \quad a = \varepsilon\, H'_{11}\,, \quad b = \varepsilon\, H'_{22}\,, \quad c = \varepsilon\, |\, H'_{12}\,| = \varepsilon\, |\, H'_{21}\,|$$

yazılırsa, (VII.3.4) denklemi

$$x^2 - (a + b)\, x + ab - c^2 = 0$$

şeklini alır. Bu denklemin diskriminantı

$$\Delta = (a + b)^2 - 4\,(ab - c^2)$$

veyâ

$$\Delta = (a - b)^2 + 4c^2 > 0$$

şeklinde olduğundan, her zaman reel iki kökü vardır. Söz konusu iki reel kök

$$x_{1,2} = \frac{1}{2}\,[a + b \pm \sqrt{(a - b)^2 + 4c^2}]$$

şeklinde çözülebilir. $E_1 < E_2$ olmak üzere yukardaki değerler yerlerine yazılırsa

$$\left.\begin{aligned} E_1 - E_0 &= \frac{\varepsilon}{2}\,[H'_{11} + H'_{22} - \sqrt{(H'_{11} - H'_{22})^2 + 4\,|\,H'_{12}\,|^2}] \\ E_2 - E_0 &= \frac{\varepsilon}{2}\,[H'_{11} + H'_{22} + \sqrt{(H'_{11} - H'_{22})^2 + 4\,|\,H'_{12}\,|^2}] \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.3.5)}$$

sonuçlarına varılır. Eğer $\Delta = \varepsilon^2 D$ veyâ

$$D = (H'_{11} - H'_{22})^2 + 4\,|\,H'_{12}\,|^2 \qquad \text{(VII.3.6)}$$

tanımı yapılırsa (VII.3.5) bağıntıları

$$\left.\begin{aligned} E_1 - E_0 &= \frac{\varepsilon}{2}\,(H'_{11} + H'_{22} - \sqrt{D}) \\ E_2 - E_0 &= \frac{\varepsilon}{2}\,(H'_{11} + H'_{22} + \sqrt{D}) \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.3.7)}$$

şekillerinde de yazılabilir.

Eğer (VII.3.7) bağıntıları

$$s_1 = -1, \quad s_2 = +1, \quad s_n = (-1)^n \qquad \text{(VII.3.8a)}$$

bağıntıları ile tanımlanan bir s_n işaret çarpanı cinsinden

$$E_n - E_0 = \frac{\varepsilon}{2}\,(H'_{11} + H'_{22} + s_n\sqrt{D}) \qquad \text{(VII.3.8b)}$$

şeklinde yazılırsa

$$\begin{aligned} \varepsilon\,H'_{11} - (E_n - E_0) &= \frac{\varepsilon}{2}\,(H'_{11} - H'_{22} - s_n\sqrt{D}) \\ \varepsilon\,H'_{22} - (E_n - E_0) &= \frac{\varepsilon}{2}\,(H'_{22} - H'_{11} - s_n\sqrt{D}) \end{aligned} \qquad \text{(VII.3.9)}$$

bağıntıları elde edilir. Eğer bu bağıntılar (VII.3.1a) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\begin{bmatrix} H'_{11} - H'_{22} - s_n\sqrt{D} & 2H'_{12} \\ 2H'_{21} & H'_{22} - H'_{11} - s_n\sqrt{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{n1} \\ A_{n2} \end{bmatrix} = 0 \qquad \text{(VII.3.10)}$$

bağıntısı bulunur. (VII.3.10) bağıntısından da $n = 1$ için

$$\begin{bmatrix} H'_{11} - H'_{22} + \sqrt{D} & 2H'_{12} \\ 2H'_{21} & H'_{22} - H'_{11} + \sqrt{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{12} \end{bmatrix} = 0 \qquad \text{(VII.3.10a)}$$

bağıntısı ve $n = 2$ için de

$$\begin{bmatrix} H'_{11} - H'_{22} - \sqrt{D} & 2H'_{12} \\ 2H'_{21} & H'_{22} - H'_{11} - \sqrt{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{21} \\ A_{22} \end{bmatrix} = 0 \qquad \text{(VII.3.10b)}$$

bağıntısı bulunur. (VII.3.10a) bağıntısından

$$\left.\begin{aligned} (H'_{11} - H'_{22} + \sqrt{D})\,A_{11} + 2H'_{12}\,A_{12} &= 0 \\ 2H'_{21}\,A_{11} + (H'_{22} - H'_{11} + \sqrt{D})\,A_{12} &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.3.11a)}$$

denklem sistemi ve (VII.3.10b) bağıntısından da

$$\left.\begin{aligned} (H'_{11} - H'_{22} - \sqrt{D})\,A_{21} + 2H'_{12}\,A_{22} &= 0 \\ 2H'_{21}\,A_{21} + (H'_{22} - H'_{11} - \sqrt{D})\,A_{22} &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.3.11b)}$$

denklem sistemi bulunur. (VII.3.11a,b) denklem sistemlerinden de

$$\frac{A_{12}}{A_{11}} = \frac{2H'_{21}}{H'_{11} - H'_{22} - \sqrt{D}} = \frac{H'_{22} - H'_{11} - \sqrt{D}}{2H'_{12}} \qquad \text{(VII.3.12a)}$$

$$\frac{A_{21}}{A_{22}} = \frac{2H'_{12}}{H'_{22} - H'_{11} + \sqrt{D}} = \frac{H'_{11} - H'_{22} + \sqrt{D}}{2H'_{21}} \qquad \text{(VII.3.12b)}$$

çözüm takımları bulunur. $N = 2$ için (VII.2.6) bağıntısı ile verilen pertürbe olmuş özfonksiyonlar

$$\left.\begin{aligned} \psi_1 &= A_{11}\,\psi_1^{(0)} + A_{12}\,\psi_2^{(0)} \\ \psi_2 &= A_{21}\,\psi_1^{(0)} + A_{22}\,\psi_2^{(0)} \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.3.13)}$$

şeklinde yazılabilir. Şüphesiz ψ_1 ve ψ_2 özfonksiyonları normlanabilir ve (VII.2.22) bağıntısının sonucu olarak ta biribirlerine diktir. O hâlde,

$$(\psi_1\,,\,\psi_1) = (\psi_2\,,\,\psi_2) = 1, \qquad (\psi_1\,,\,\psi_2) = (\psi_2\,,\,\psi_1) = 0$$

normlama ve diklik bağıntıları yazılabilir. (VII.3.13) bağıntıları bu bağıntılarda yerlerine yazılırsa

$$\left.\begin{array}{c} |A_{11}|^2 + |A_{12}|^2 = |A_{21}|^2 + |A_{22}|^2 = 1 \\ A_{11}^* A_{21} + A_{12}^* A_{22} = 0 \end{array}\right\} \qquad \text{(VII.3.14)}$$

bağıntıları bulunur. Böylece (VII.3.12a,b) bağıntıları, (VII.3.14) bağıntıları ile birlikte (VII.3.13) bağıntılarındaki dört adet A_{nl} açılım katsayısını belirler. Genel hâlde bu hesap basit olmasına karşılık uzundur. Aşağıda çok rastlanan bir özel hâl için bu hesabı tamamlayacağız.

$H'_{11} = H'_{22}$ **Özel Hâli :**

$H'_{11} = H'_{22}$ özel hâli için (VII.3.6) bağıntısına bakarak

$$D = 4\,|H'_{12}|^2, \qquad \sqrt{D} = 2\,|H'_{12}| \qquad \text{(VII.3.15)}$$

bulunur ve (VII.3.7) bağıntıları ile verilen enerji özdeğerlerinin ifâdeleri

$$\left.\begin{array}{l} E_1 = E_0 + \varepsilon\,(H'_{11} - |H'_{12}|) \\ E_2 = E_0 + \varepsilon\,(H'_{11} + |H'_{12}|) \end{array}\right\} \qquad \text{(VII.3.16)}$$

şekillerini alırlar.

$H'_{11} = H'_{22}$ özel hâli için (VII.3.12a,b) b.ğıntıları

$$\frac{A_{12}}{A_{11}} = -\frac{H'_{21}}{|H'_{21}|} = -\frac{|H'_{12}|}{H'_{12}} \qquad \text{(VII.3.17a)}$$

$$\frac{A_{21}}{A_{22}} = \frac{H'_{12}}{|H'_{12}|} = \frac{|H'_{21}|}{H'_{21}} \qquad \text{(VII.3.17b)}$$

şekillerini alırlar. H'_{21} kompleks büyüklüğünün argümanı θ ise,

$$H'_{12} = |H'_{12}|\,e^{-i\theta}, \qquad H'_{21} = H'^{*}_{12} = |H'_{21}|\,e^{i\theta} \qquad \text{(VII.3.17c)}$$

olduğu için (VII.3.17a,b) bağıntıları

$$\frac{A_{12}}{A_{11}} = -\,e^{i\theta}, \qquad \frac{A_{21}}{A_{22}} = e^{-i\theta} \qquad \text{(VII.3.17d)}$$

şekillerini alırlar. Bu bağıntılardan $|A_{12}| = |A_{11}|$ ve $|A_{21}| = |A_{22}|$ bulunur. Bu sonuçlar, (VII.3.14) bağıntılarından ilk ikisinde yerlerine yazılırsa

$$2\,|A_{11}|^2 = 2\,|A_{22}|^2 = 1$$

veyâ

$$|A_{11}| = |A_{22}| = |A_{12}| = |A_{21}| = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad \text{(VII.3.18)}$$

elde edilir. Burada $1/\sqrt{2}$ normlama sâbitidir. (VII.3.14) bağıntılarından üçüncüsü $A_{11}^{*} A_{22}$ ile bölünürse, elde edilen bağıntıyı (VII.3.17d) bağıntıları özdeş olarak sağlar :

$$\frac{A_{21}}{A_{22}} + \frac{A_{12}^{*}}{A_{11}^{*}} = e^{-i\theta} - e^{-i\theta} \equiv 0$$

(VII.3.17d) bağıntıları (VII.3.13) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\left.\begin{aligned} \psi_1 &= A_{11}\left(\psi_1^{(0)} + \frac{A_{12}}{A_{11}}\psi_2^{(0)}\right) = A_{11}\,(\psi_1^{(0)} - e^{i\theta}\,\psi_2^{(0)}) \\ \psi_2 &= A_{21}\left(\psi_1^{(0)} + \frac{A_{22}}{A_{21}}\psi_2^{(0)}\right) = A_{21}\,(\psi_1^{(0)} + e^{i\theta}\,\psi_2^{(0)}) \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.3.19)}$$

bulunur. A_{11} ve A_{21} in (VII.3.17d) bağıntılarına bakarak reel oldukları varsayılabilir. O hâlde, (VII.3.18) bağıntılarından

$$A_{11} = |A_{11}| = A_{21} = |A_{21}| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

elde edilir ve (VII.3.19) bağıntılarında yerlerine yazarak

$$\left.\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\psi_1^{(0)} - e^{i\theta}\,\psi_2^{(0)}) \\ \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\psi_1^{(0)} + e^{i\theta}\,\psi_2^{(0)}) \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.3.20)}$$

sonuçlarına varılır.

(VII.4) HELYUM ATOMU VE MÜBADELE SOYSUZLAŞMASI

İki veyâ daha fazla sayıdaki özdeş parçacıkların oluşturduğu bir sistemde soysuzlaşma ortaya çıkar. Örneğin, helyum atomunda iki elektron vardır. Eğer bu iki elektron aralarında mübadele (değiş tokuş) edilirse, genel olarak başlangıçtaki enerji özfonksiyonundan farklı bir enerji özfonksiyonu elde edilir. Fakat bütün elektronlar özdeş olduğu için, herhangi ikisinin aralarında değiş tokuş edilmesi sistemin enerjisini değiştirmez. Bu sebepten ötürü, iki enerji özfonksiyonu ortak bir enerji özdeğerine ait olur ve iki katlı bir soysuzlaşma ortaya çıkar. Bu tür bir soysuzlaşmaya *mübadele soysuzlaşması* adı verilir.

Helyum atomu paragraf (V.4) te özdeş parçacıkların özellikleri ile ilgili olarak incelenmişti. Orada kullanılan notasyonlara bakarak

$$H(1) = \frac{p_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1}, \qquad H(2) = \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_2} \tag{VII.4.1}$$

ve

$$V_{12} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{e^2}{r_{12}} \tag{VII.4.2}$$

olmak üzere sistemin HAMİLTON operatörü

$$H = H(1) + H(2) + V_{12} \tag{VII.4.3}$$

şeklindedir. Şüphesiz H pertürbe olmuş HAMİLTON operatörüdür. Pertürbe olmamış HAMİLTON operatörü

$$H^{(0)} = H(1) + H(2) \tag{VII.4.4}$$

dir ve pertürbasyon operatörü de

$$\varepsilon H' = V_{12} = \frac{e^2}{r_{12}} \tag{VII.4.5}$$

dir. Öte yandan, V. Bölümdeki işlemlere bakarak

$$H(1)\,\psi_n(1) = E_n^{(0)}\,\psi_n(1), \qquad H(2)\,\psi_k(2) = E_k^{(0)}\,\psi_k(2) \tag{VII.4.6a}$$

$$H(1)\,\psi_k(1) = E_k^{(0)}\,\psi_k(1), \qquad H(2)\,\psi_n(2) = E_n^{(0)}\,\psi_n(2) \tag{VII.4.6b}$$

olduğuna göre

$$H^{(0)}\,\psi_n(1)\,\psi_k(2) = (E_n^{(0)} + E_k^{(0)})\,\psi_n(1)\,\psi_k(2) \tag{VII.4.7a}$$

$$H^{(0)}\,\psi_k(1)\,\psi_n(2) = (E_n^{(0)} + E_k^{(0)})\,\psi_k(1)\,\psi_n(2) \tag{VII.4.7b}$$

sonuçlarına varıldığını biliyoruz. Görülüyor ki, pertürbe olmamış $H^{(0)}$ operatörünün enerji özdeğerleri $E_n^{(0)} + E_k^{(0)}$ dır ve ve iki katlı bir soysuzlaşma vardır. Böylece,

$$E_0 = E_n^{(0)} + E_k^{(0)} \tag{VII.4.8}$$

olmak üzere,

$$H^{(0)}\,\psi_1^{(0)} = E_0\,\psi_1^{(0)} \tag{VII.4.9a}$$

$$H^{(0)}\,\psi_2^{(0)} = E_0\,\psi_2^{(0)} \tag{VII.4.9b}$$

bağıntıları yazılabilir. (VII.4.9a,b) bağıntıları (VII.4.7a,b) bağıntıları ile karşılaştırılırsa

$$\left.\begin{aligned} \psi_1^{(0)} &= \psi_1^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_n(1)\,\psi_k(2) \\ \psi_2^{(0)} &= \psi_2^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_k(1)\,\psi_n(2) \end{aligned}\right\} \tag{VII.4.10}$$

sonuçlarına varılır.

Şimdi bir önceki paragrafta ayrıntılarını verdiğimiz iki katlı soysuzlaşmaya ait pertürbasyon teorisini helyum atomuna uygulayacağız. (VII.4.5) bağıntısı ile tanımlanan pertürbasyon operatörünün matris elemanları

$$\varepsilon H'_{ab} = \varepsilon(\psi_a^{(0)}, H' \psi_b^{(0)}) = e^2 \int\int \psi_a^{(0)*} \psi_b^{(0)} \frac{d\tau_1 \, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.4.11}$$

veyâ

$$\varepsilon H'_{11} = e^2 \int\int |\psi_1^{(0)}|^2 \frac{d\tau_1 \, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.4.11a}$$

$$\varepsilon H'_{22} = e^2 \int\int |\psi_2^{(0)}|^2 \frac{d\tau_1 \, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.4.11b}$$

$$\varepsilon H'_{12} = e^2 \int\int \psi_1^{(0)*} \psi_2^{(0)} \frac{d\tau_1 \, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.4.11c}$$

$$\varepsilon H'_{21} = e^2 \int\int \psi_2^{(0)*} \psi_1^{(0)} \frac{d\tau_1 \, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.4.11d}$$

integralleri ile yazılabilir. Eğer (VII.4.10) bağıntıları (VII.4.11a,b) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\varepsilon H'_{11} = e^2 \int\int |\psi_n(1)|^2 \, |\psi_k(2)|^2 \frac{d\tau_1 \, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.4.12a}$$

$$\varepsilon H'_{22} = e^2 \int\int |\psi_k(1)|^2 \, |\psi_n(2)|^2 \frac{d\tau_1 \, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.4.12b}$$

bulunur. (VII.4.12a,b) bağıntıları paragraf (V.4) teki (V.4.19a) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$\varepsilon H'_{11} = F_{nk} \, , \qquad \varepsilon H'_{22} = F_{kn}$$

elde edilir. $r_{12} = r_{21}$ olduğu için $F_{nk} = F_{kn}$ dir ve böylece

$$\varepsilon H'_{11} = \varepsilon H'_{22} = F_{nk} \tag{VII.4.13}$$

sonucuna varılır. Eğer (VII.4.10) bağıntıları (VII.4.11c,d) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$\varepsilon H'_{12} = e^2 \int\int \psi_n^*(1) \, \psi_k^*(2) \, \psi_k(1) \, \psi_n(2) \frac{d\tau_1 \, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.4.14a}$$

$$\varepsilon H'_{21} = e^2 \int\int \psi_k^*(1) \, \psi_n^*(2) \, \psi_n(1) \, \psi_k(2) \frac{d\tau_1 \, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.4.14b}$$

bulunur. Şüphesiz bu bağıntılar

$$H'^{*}_{12} = H'_{21} \tag{VII.4.15a}$$

HERMİTsellik şartını sağlarlar. (VII.4.14a,b) bağıntıları paragraf (V.4) teki (V.4.19b) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$\varepsilon H'_{12} = G_{nk}\,, \qquad \varepsilon H'_{21} = G_{kn}$$

elde edilir. $r_{12} = r_{21}$ olduğu için $G_{nk} = G_{kn}$ dir ve böylece

$$\varepsilon H'_{12} = \varepsilon H'_{21} = G_{nk} \tag{VII.4.15b}$$

sonucuna varılır. (VII.4.15a,b) bağıntıları karşılaştırılırsa

$$H'^{*}_{12} = H'_{12}\,, \qquad G^{*}_{nk} = G_{nk} \tag{VII.4.15c}$$

bulunur. Yâni G_{nk} reeldir ve ayrıca pozitif olduğu da gösterilebilir. (Bak. Prob. V.1). (VII.4.13) bağıntısına göre $H'_{11} = H'_{22}$ özel hâli söz konusu olduğu için, (VII.4.15b,c) bağıntılarını kullanarak helyum atomunun pertürbe olmuş enerji özdeğerleri (VII.3.16) bağıntılarına bakarak

$$\left.\begin{aligned} E_1 &= E_0 + \varepsilon (H'_{11} - H'_{12}) \\ E_2 &= E_0 + \varepsilon (H'_{11} + H'_{12}) \end{aligned}\right\} \tag{VII.4.16a}$$

veyâ

$$\left.\begin{aligned} E_1 &= E^{(0)}_n + E^{(0)}_k + F_{nk} - G_{nk} \\ E_2 &= E^{(0)}_n + E^{(0)}_k + F_{nk} + G_{nk} \end{aligned}\right\} \tag{VII.4.16b}$$

şekillerinde yazılabilir. (VII.4.16b) bağıntıları (V.4.21) bağıntılarının aynıdır.

Paragraf (V.4) te $G_{nn} = 0$ olduğu gösterilmişti. O hâlde, $k = n$ için

$$E_1 = E_2 = 2\,E^{(0)}_n + F_{nn} \tag{VII.4.17}$$

elde edilir. $n = 1$ için helyum atomunun temel hâli bulunur :

$$E_1 = E_2 = 2\,E^{(0)}_1 + F_{11} \tag{VII.4.18}$$

Görülüyor ki, bhelyum atomunun temel hâli için soysuzlaşma yoktur.

(VII.5) HELYUM ATOMUNUN TEMEL HÂLİ İÇİN ENERJİ ÖZDEĞERLERİNİN HESABI

Helyum atomunun temel hâli için pertürbe olmuş enerji seviyesinin

$$E_1 = E_2 = 2\,E^{(0)}_1 + F_{11} \tag{VII.5.1}$$

şeklinde olduğunu bir önceki paragrafta görmüştük. (VII.4.12a,b) ve (VII.4.13) bağıntılarına bakarak

$$F_{nk} = e^2 \int\int |\psi_n(1)|^2 |\psi_k(2)|^2 \frac{d\tau_1\, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.5.2}$$

yazılabilir. Bu bağıntıda helyumun temel hâlini göstermek üzere $n = k = 1$ alınırsa

$$F_{11} = e^2 \int\int |\psi_1(1)|^2 \; |\psi_1(2)|^2 \frac{d\tau_1\, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.5.3}$$

bağıntısı elde edilir. Paragraf (V.4) te söz konusu edildiği gibi, $\psi_n(1)$ ve $\psi_k(2)$ özfonksiyonları ve $E_n^{(0)}$ ve $E_k^{(0)}$ özdeğerleri, (VII.4.6a,b) özdeğer denklemlerinin çözümleri olduğu için hidrojenimsi bir atomun enerji özfonksiyonları ve enerji özdeğerleridir. Örneğin,

$$\psi_n(1) \equiv \psi_{nlm}(r_1, \theta_1, \varphi_1) = R_{nl}(r_1)\; Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1) \tag{VII.5.4}$$

ve e^2 yerine Ze^2 ve a_0 yerine a_0/Z yazarak,

$$E_n^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0 n^2} \tag{VII.5.5}$$

alınması gerekir. Öte yandan, $n = 1$ için hidrojenimsi atomun temel hâli elde edilir ve

$$\psi_1(1) \equiv \psi_{100}(r_1) = R_{10}(r_1)\; Y_{00} \tag{VII.5.4a}$$

ve

$$E_1^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \tag{VII.5.5a}$$

elde edilir. (II.5.18a) ve (I.21.17) bağıntılarına bakarak

$$R_{10}(r_1) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2\, e^{-Z\frac{r_1}{a_0}}, \qquad Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

yazılabilir ve (VII.5.4a) bağıntısında yerlerine yazarak

$$\psi_1(1) \equiv \psi_{100}(r_1) = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi}\, a_0^{3/2}}\, e^{-Z\frac{r_1}{a_0}} \tag{VII.5.4b}$$

bulunur. Bu bağıntılarda Z, hidrojenimsi atomun atom numarasını gösterir. Şüphesiz böyle bir atomun çekirdeğinin elektrik yükü Ze dir. $Z = 2$ için helyum atomu elde edilir. Öte yandan,

$$|\psi_1(1)|^2 = \frac{Z^3}{\pi\, a_0^3}\, e^{-2Z\frac{r_1}{a_0}}$$

ve benzer şekilde

$$| \psi_1 (2) |^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-2Z \frac{r_2}{a_0}}$$

yazılabilir. Şimdi r_1 ve r_2 radyal koordinat değişkenlerinin yerine

$$u_1 = 2\, Z\, r_1/a_0 , \qquad u_2 = 2\, Z\, r_2/a_0 \tag{VII.5.6}$$

boyutsuz değişkenlerini ve

$$\rho (u) \equiv e^{-u} \tag{VII.5.7}$$

fonksiyonunu tanımlayalım. (VII.5.6,7) bağıntılarını, $| \psi_1 (1) |^2$ ve $| \psi_1 (2) |^2$ nin yukarıdaki ifâdelerinde yerlerine yazalım :

$$| \psi_1 (1) |^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-u_1}, \qquad | \psi_1 (2) |^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-u_2} \tag{VII.5.8}$$

veyâ

$$| \psi_1 (1) |^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \rho (u_1), \qquad | \psi_1 (2) |^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \rho (u_2) \tag{VII.5.9}$$

bağıntıları bulunur. (VII.5.9) bağıntıları (VII.5.3) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$F_{11} = \frac{Z^6 e^2}{\pi a_0^6} \int \int \rho (u_1)\, \rho (u_2) \frac{d\tau_1\, d\tau_2}{r_{12}} \tag{VII.5.10}$$

sonucuna varılır.

(VII.4.2) bağıntısına göre

$$r_{12} = r_{21} \equiv | \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 | \tag{VII.5.11}$$

olduğunu biliyoruz. Kartezyen koordinatlarda yer vektörünün

$$\mathbf{r} = x\, \mathbf{e}_x + y\, \mathbf{e}_y + z\, \mathbf{e}_z$$

şeklindeki ifâdesinde x, y, z kartezyen koordinatları,

$$x = r \sin\theta \cos\varphi, \qquad y = r \sin\theta \sin\varphi, \qquad z = r \cos\theta$$

bağıntıları kullanılarak r, θ, φ küresel koordinatlarına dönüştürülürse

$$\mathbf{r} = r\, [\sin\theta\, (\cos\varphi\, \mathbf{e}_x + \sin\varphi\, \mathbf{e}_y) + \cos\theta\, \mathbf{e}_z]$$

elde edilir. O hâlde, bu bağıntıya benzer şekilde

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= r_1\, [\sin\theta_1\, (\cos\varphi_1\, \mathbf{e}_x + \sin\varphi_1\, \mathbf{e}_y) + \cos\theta_1\, \mathbf{e}_z] \\ \mathbf{r}_2 &= r_2\, [\sin\theta_2\, (\cos\varphi_2\, \mathbf{e}_x + \sin\varphi_2\, \mathbf{e}_y) + \cos\theta_2\, \mathbf{e}_z] \end{aligned}\right\} \tag{VII.5.12}$$

bağıntıları yazılabilir. (VII.5.11) bağıntısının her iki yanının karesi alınırsa

$$r_{12}^2 = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2\, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 \tag{VII.5.13}$$

bulunur. Öte yandan,

$$\theta = \sphericalangle(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \text{ için}: \quad \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = r_1 r_2 \cos\theta \tag{VII.5.14}$$

yazılabilir ve bu bağıntının yardımı ile (VII.5.13) bağıntısı

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2 r_1 r_2 \cos\theta \tag{VII.5.15}$$

şeklini alır. Öte yandan, (VII.5.12) bağıntıları skaler olarak taraf tarafa çarpılırsa

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = r_1 r_2 \{\sin\theta_1 \sin\theta_2 (\cos\varphi_1 \cos\varphi_2 + \sin\varphi_1 \sin\varphi_2) + \cos\theta_1 \cos\theta_2]$$

elde edilir. Eğer bu bağıntı (VII.5.14) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$\cos\theta = \cos\theta_1 \cos\theta_2 + \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \tag{VII.5.16}$$

sonucuna varılır.

(VII.5.15) bağıntısı

$$r_{12} = r_1 \left(1 - 2\frac{r_2}{r_1}\cos\theta + \frac{r_2^2}{r_1^2}\right)^{1/2} \tag{VII.5.17a}$$

şeklinde yazılabilir. Eğer $t = r_2/r_1$ ve $x = \cos\theta$ tanımları yapılırsa (VII.5.17a) bağıntısı

$$r_{12} = r_1 \sqrt{1 - 2xt + t^2} \tag{VII.5.17b}$$

şeklini alır. Öte yandan (I.16.1) bağıntısına göre, LEGENDRE polinomlarının doğuran fonksiyonunun

$$g(x, t) \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x)\, t^l, \quad t < 1 \tag{VII.5.18}$$

şeklinde olduğunu biliyoruz. O hâlde, (VII.5.18) bağıntısından faydalanarak (VII.5.17a,b) bağıntılarından

$$\left.\begin{aligned} r_2 < r_1 \quad \text{için}: \quad \frac{1}{r_{12}} &= \frac{1}{r_1}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos\theta) \\ r_1 < r_2 \quad \text{için}: \quad \frac{1}{r_{12}} &= \frac{1}{r_2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l P_l(\cos\theta) \end{aligned}\right\} \tag{VII.5.19}$$

açılımları elde edilir. Öte yandan (VII.5.16) bağıntısına bakarak, $P_l(\cos\theta)$ nın, θ_1, θ_2, φ_1 ve φ_2 nin trigonometrik fonksiyonları cinsinden ifâde edilebileceği görülür. Gerçekten bu bağıntı,

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1)\, Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2) \tag{VII.5.20}$$

şeklindedir ve *küresel harmoniklerin toplamı teoremi* adını alır. Bu teoremi ispatlamayacağız. Fakat söz konusu olan bu ispat, örneğin, M.E. ROSE un "Elementary Theory of Angular Momentum" adlı kitabında bulunabilir. Eğer (VII.5.20) bağıntısı (VII.5.19) bağıntılarında yerlerine yazılırsa ve ayrıca

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Q_{lm} = \sum_{l,m} Q_{lm} \tag{VII.5.21}$$

tanımı yapılırsa

$$\left.\begin{aligned} r_2 < r_1 \text{ için}: \quad \frac{1}{r_{12}} &= \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_2^l}{r_1^{l+1}} Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1)\, Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2) \\ r_1 < r_2 \text{ için}: \quad \frac{1}{r_{12}} &= \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_1^l}{r_2^{l+1}} Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1)\, Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2) \end{aligned}\right\} \tag{VII.5.22}$$

sonuçlarına varılır. (VII.5.22) bağıntıları (VII.5.6) bağıntıları ile tanımlanan u_1 ve u_2 boyutsuz değişkenleri cinsinden

$$\left.\begin{aligned} u_2 < u_1 \text{ için}: \quad \frac{1}{u_{12}} &= \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{u_2^l}{u_2^{l+1}} Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1)\, Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2) \\ u_1 < u_2 \text{ için}: \quad \frac{1}{u_{12}} &= \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{u_1^l}{u_2^{l+1}} Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1)\, Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2) \end{aligned}\right\} \tag{VII.5.23}$$

şekillerinde yazılabilir. Buradaki u_{12} boyutsuz değişkeni

$$u_{12} = 2\, Z\, r_{12}/a_0 \tag{VII.5.24}$$

bağıntısı ile tanımlanmıştır. Öte yandan (VII.5.10) bağıntısı, u_1, u_2 ve u_{12} boyutsuz değişkenleri cinsinden yazılmalıdır. Fakat bunun yapılabilmesi için, örneğin,

$$d\Omega_i = \sin\theta_1\, d\theta_1\, d\varphi_1, \qquad d\tau_1 = r_1^2\, dr_1\, d\Omega_1, \qquad d\tau_{u_1} = u_1^2\, du_1\, d\Omega_1$$

olduğuna dikkat edilmelidir. Böylece

$$d\tau_1 = \frac{a_0^3}{8Z^3}\, d\tau_{u_1}, \qquad d\tau_2 = \frac{a_0^3}{8Z^3}\, d\tau_{u_2}$$

ve

$$d\tau_1\, d\tau_2 = \frac{a_0^6}{64Z^6}\, d\tau_{u_1}\, d\tau_{u_2} \tag{VII.5.25}$$

elde edilir ve (VII.5.10) bağıntısı da

$$F_{11} = \frac{Z e^2}{32 \pi^2 a_0} \int\int \rho(u_1)\, \rho(u_2)\, \frac{d\tau_{u_1}\, d\tau_{u_2}}{u_{12}} \tag{VII.5.26}$$

şeklini alır. Eğer

$$I = \int\int \rho(u_1)\, \rho(u_2)\, \frac{d\tau_{u_1}\, d\tau_{u_2}}{u_{12}} \tag{VII.5.26a}$$

bağıntısı ile boyutsuz I integrali tanımlanırsa F_{11} büyüklüğü

$$F_{11} = \frac{Z e^2 I}{32 \pi^2 a_0} \tag{VII.5.26b}$$

şeklinde yazılabilir.

Eğer (VII.5.23) bağıntıları (VII.5.26a) bağıntısında yerlerine yazılırsa, I integrali I_1 ve I_2 integrallerinin toplamı olarak yazılabilir :

$$I = I_1 + I_2 \tag{VII.5.27}$$

Burada I_1 integrali $u_2 < u_1$ hâline ve I_2 integrali de $u_1 < u_2$ hâline aittir. O hâlde,

$$I_1 = \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \int \frac{\rho(u_1)}{u_1^{l+1}}\, Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1)\, d\tau_{u_1} \int u_2^l\, \rho(u_2)\, Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2)\, d\tau_{u_2} \tag{VII.5.28a}$$

$$I_2 = \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \int u_1^l\, \rho(u_1)\, Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1)\, d\tau_{u_1} \int \frac{\rho(u_2)}{u_2^{l+1}}\, Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2)\, d\tau_{u_2} \tag{VII.5.28b}$$

bağıntıları bulunur. Öte yandan, keyfî bir $f(u_2)$ fonksiyonu için $d\tau_{u_2} = u_2^2\, du_2\, d\Omega_2$ olduğunu hatırlayarak

$$\int f(u_2)\, Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2)\, d\tau_{u_2} = \int f(u_2)\, u_2^2\, du_2 \iint_{(4\pi)} Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2)\, d\Omega_2 \tag{i}$$

yazılabilir. Küresel harmoniklerin diklik ve normlama bağıntısı

$$\iint_{(4\pi)} Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2)\, Y_{l'm'}(\theta_2, \varphi_2)\, d\Omega_2 = \delta_{ll'}\, \delta_{mm'}$$

şeklindedir ve $l' = 0$, $m' = 0$ için $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$ olduğunu hatırlayarak

$$\iint_{(4\pi)} Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2)\, d\Omega_2 = \sqrt{4\pi}\, \delta_{l0}\, \delta_{m0}$$

şeklini alır. Böylece (i) bağıntısından

$$\int f(u_2)\, Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2)\, d\tau_{u_2} = \sqrt{4\pi}\, \delta_{l0}\, \delta_{m0} \int f(u_2)\, u_2^2\, du_2 \tag{ii}$$

elde edilir. (ii) bağıntısından faydalanarak (VII.5.28a,b) bağıntılarından

$$I_1 = \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \sqrt{4\pi}\, \delta_{l0}\, \delta_{m0} \int \frac{\rho(u_1)}{u_1^{l+1}} Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1)\, d\tau_{u_1} \int_0^{u_1} u_2^l\, \rho(u_2)\, u_2^2\, du_2$$

$$I_2 = \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \sqrt{4\pi}\, \delta_{l0}\, \delta_{m0} \int u_1^l\, \rho(u_1)\, Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1)\, d\tau_{u_1} \int_{u_1}^{\infty} \frac{\rho(u_2)}{u_2^{l+1}}\, u_2^2\, du_2$$

bağıntıları bulunur. Bu bağıntılarda $m = 0$ ve $l = 0$ yazılarak m ve l ye göre toplamlar kaldırılmalıdır. O hâlde, $\sqrt{4\pi}\, Y_{00} = 1$ olduğunu hatırlayarak,

$$I_1 = 4\pi \int_0^{\infty} \frac{\rho(u_1)}{u_1} u_1^2\, du_1 \iint_{(4\pi)} d\Omega_1 \int_0^{u_1} \rho(u_2)\, u_2^2\, du_2$$

$$I_2 = 4\pi \int_0^{\infty} \rho(u_1)\, u_1^2\, du_1 \iint_{(4\pi)} d\Omega_1 \int_{u_1}^{\infty} \frac{\rho(u_2)}{u_2} u_2^2\, du_2$$

veyâ

$$\left.\begin{aligned} I_1 &= (4\pi)^2 \int_0^{\infty} \rho(u_1)\, u_1\, du_1 \int_0^{u_1} \rho(u_2)\, u_2^2\, du_2 \\ I_2 &= (4\pi)^2 \int_0^{\infty} \rho(u_1)\, u_1^2\, du_1 \int_{u_1}^{\infty} \rho(u_2)\, u_2\, du_2 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.5.29)}$$

elde edilir. Bu bağıntılar (VII.5.7) bağıntısını kullanarak

$$\left.\begin{aligned} I_1 &= (4\pi)^2 \int_0^{\infty} e^{-u_1}\, u_1\, du_1 \int_0^{u_1} e^{-u_2}\, u_2^2\, du_2 \\ I_2 &= (4\pi)^2 \int_0^{\infty} e^{-u_1}\, u_1^2\, du_1 \int_{u_1}^{\infty} e^{-u_2}\, u_2\, du_2 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.5.30)}$$

şekillerinde yazılabilir. Öte yandan,

$$\int e^{-u_2}\, u_2^2\, du_2 = -\, e^{-u_2}\, [u_2^2 + 2(u_2 + 1)]$$

$$\int e^{-u_2}\, u_2\, du_2 = -\, e^{-u_2}\, (u_2 + 1)$$

olduğu için

$$\left.\begin{aligned} &\int_0^{u_1} e^{-u_2}\, u_2^2\, d u_2 = -\, e^{-u_1}\, [u_1^2 + 2\,(u_1 + 1) + 2 \\ &\int_{u_1}^{\infty} e^{-u_2}\, u_2\, d u_2 = e^{-u_1}\, (u_1 + 1) \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.5.31)}$$

bulunur. (VII.5.30) bağıntıları (VII.5.27) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$I = (4\pi)^2 \int_0^{\infty} e^{-u_1}\, d u_1 \left(u_1 \int_0^{u_1} e^{-u_2}\, u_2^2\, d u_2 + u_1^2 \int_{u_1}^{\infty} e^{-u_2}\, u_2\, d u_2 \right) \qquad \text{(VII.5.32)}$$

elde edilir. (VII.5.31) bağıntılarını kullanarak

$$\begin{aligned} & u_1 \int_0^{u_1} e^{-u_2}\, u_2^2\, d u_2 + u_1^2 \int_{u_1}^{\infty} e^{-u_2}\, u_2\, d u_2 = \\ & = -\, e^{-u_1}\, [u_1^3 + 2\, u_1 (u_1 + 1) - u_1^2\, (u_1 + 1)] + 2\, u_1 \\ & = -\, e^{-u_1}\, (u_1^2 + 2\, u_1) + 2\, u_1 \end{aligned}$$

bulunur ve (VII.5.32) bağıntısında yerine yazarak

$$I = (4\pi)^2 \int_0^{\infty} e^{-u_1}\, [2\, u_1 - e^{-u_1}\, (u_1^2 + 2\, u_1)]\, d u_1 \qquad \text{(VII.5.33a)}$$

veyâ

$$I = (4\pi)^2 \left(2 \int_0^{\infty} e^{-u_1}\, u_1\, d u_1 - \int_0^{\infty} e^{-2\, u_1}\, u_1^2\, d u_1 - 2 \int_0^{\infty} e^{-2\, u_1}\, u_1\, d u_1 \right) \qquad \text{(VII.5.33b)}$$

elde edilir. Öte yandan,

$$\int_0^{\infty} e^{-b\, u_1}\, u_1^n\, d u_1 = n\,!/b^{n+1}, \qquad b > 0, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

bağıntısını kullanarak $b = 1$ için

$$\int_0^{\infty} e^{-u_1}\, u_1\, d u_1 = 1$$

ve $b = 2$ için

$$\int_0^{\infty} e^{-2\, u_1}\, u_1^2\, d u_1 = \frac{2}{2^3} = \frac{1}{4}\,, \qquad \int_0^{\infty} e^{-2\, u_1}\, u_1\, d u_1 = \frac{1}{2^2} = \frac{1}{4}$$

bulunur ve (VII.5.33b) bağıntısında yerlerine yazarak

$$I = (4\pi)^2 \left(2 - \frac{1}{4} - \frac{2}{4}\right) = (4\pi)^2 \left(2 - \frac{3}{4}\right) = 16\,\pi^2 \frac{5}{4}$$

veyâ

$$I = 20\,\pi^2 \qquad \text{(VII.5.34)}$$

sonucuna varılır.

(VII.5.34) bağıntısı (VII.5.26b) bağıntısında yerine yazılırsa

$$F_{11} = \frac{5}{8}\,\frac{Z\,e^2}{a_0} \qquad \text{(VII.5.35)}$$

elde edilir. (VII.5.5a) ve (VII.5.35) bağıntıları (VII.5.1) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$E_1 = E_2 = -\frac{Z^2\,e^2}{a_0} + \frac{5}{8}\,\frac{Z\,e^2}{a_0}$$

bulunur. Helyum atomu için $Z = 2$ olduğundan

$$E_1 = E_2 = -\frac{4\,e^2}{a_0} + \frac{5}{4}\,\frac{e^2}{a_0} = -\frac{11}{4}\,\frac{e^2}{a_0}$$

veyâ $e^2/a_0 = 27{,}2116\ eV$ olduğuna dikkat ederek

$$E_1 = E_2 = -\,2{,}75\,\frac{e^2}{a_0} = -\,74{,}83\ eV \qquad \text{(VII.5.36)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, deneysel değer

$$E_1 = E_2 = -\,2{,}904\,\frac{e^2}{a_0} = -\,79{,}022\ eV \qquad \text{(VII.5.37)}$$

olup, pertürbasyon hesabı ile bulunan yukardaki değerden 4,19 eV daha aşağıdadır.

(VII.6) HİDROJEN ATOMUNDA BİRİNCİ MERTEBEDEN STARK OLAYI

Hidrojen atomunun M_p kütlesine ve $+\,e$ elektrik yüküne sâhip bir proton ile bu protonun etrafında dönen m_e kütlesine ve $-\,e$ elektrik yüküne sâhip bir elektrondan oluştuğunu biliyoruz. Böylece, hidrojen atomuna ait pertürbe olmamış HAMİLTON operatörü

$$H^{(0)} = -\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \qquad \text{(VII.6.1)}$$

şeklindedir. Burada m,

$$m = \frac{m_e\, M_p}{m_e + M_p} \qquad \text{(VII.6.2)}$$

bağıntısı ile belirlenen indirgenmiş kütledir.

Eğer hidrojen atomu üniform bir **E** elektrik alanına konulursa, bir potansiyel enerji kazanır. Pertürbasyon operatörü bu potansiyel enerjiye eşittir ve

$$\varepsilon H' = V = -e\,\Phi \qquad \text{(VII.6.3)}$$

şeklinde yazılabilir. Burada Φ, skaler elektrik potansiyelidir ve **E** elektrik alanı bu potansiyel cinsinden

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi \qquad \text{(VII.6.3a)}$$

bağıntısı ile belirlenir. Şimdi

$$\Phi = -\mathbf{E}\cdot\mathbf{r} \qquad \text{(VII.6.4)}$$

olduğunu farz edelim. Eğer **E** alanı üniform ise, yâni sâbit bir elektrik alanı ise, (VII.6.4) bağıntısı ile verilen elektrik potansiyeli (VII.6.3a) bağıntısını sağlar. Gerçekten, kartezyen koordinatlarda (VII.6.4) bağıntısı,

$$\Phi = -E_x\,x - E_y\,y - E_z\,z$$

şeklinde yazılabilir ve böylece

$$\frac{\partial\Phi}{\partial x} = -E_x, \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial y} = -E_y, \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial z} = -E_z$$

bulunur. Bu bağıntıları kullanarak

$$\nabla\Phi = \frac{\partial\Phi}{\partial x}\mathbf{e}_x + \frac{\partial\Phi}{\partial y}\mathbf{e}_y + \frac{\partial\Phi}{\partial z}\mathbf{e}_z = -E_x\,\mathbf{e}_x - E_y\,\mathbf{e}_y - E_z\,\mathbf{e}_z = -\mathbf{E}$$

elde edilir, yâni, (VII.6.3a) bağıntısı yeniden bulunur. Öte yandan, hidrojen atomunu oluşturan $e_2 = +e$ yüküne sâhip proton, $e_1 = -e$ yüküne sâhip elektronla birlikte bir **D** *elektrik dipol moment*ini oluşturur. Eğer protonun yer vektörü $\mathbf{r}_2$ ve elektronun yer vektörü de $\mathbf{r}_1$ ise, elektrik dipol momentinin tanımından

$$\mathbf{D} = e_1\,\mathbf{r}_1 + e_2\,\mathbf{r}_2 = -e\,(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \qquad \text{(VII.6.5a)}$$

bağıntısı bulunur. Elektronun protona göre izafî yer vektörü

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

bağıntısı ile verildiğinden

$$\mathbf{D} = -e\,\mathbf{r} \qquad \text{(VII.6.5b)}$$

elde edilir. (VII.6.4) bağıntısı (VII.6.3) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\varepsilon H' = V = e\,\mathbf{r}\cdot\mathbf{E} \qquad \text{(VII.6.6a)}$$

bulunur. Öte yandan, (VII.6.5b) bağıntısı (VII.6.6a) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\varepsilon H' = V = -\mathbf{D}\cdot\mathbf{E} \qquad \text{(VII.6.6b)}$$

elde edilir. Bu son bağıntı, sâbit (üniform) **E** elektrik alanının içerisinde bulunan **D** elektrik dipol momentinin potansiyel enerjisinin ifâdesidir. **E** elektrik alanı, sâbit olduğu için, z koordinat ekseninin doğrultu ve yönünde alınabilir, yâni $E_x = E_y = 0$, $E_z = E$ olmak üzere

$$\mathbf{E} = E\,\mathbf{e}_z$$

yazılabilir ve böylece (VII.6.6a) bağıntısında yerine yazılarak

$$\varepsilon H' = V = e\,E\,\mathbf{e}_z\cdot\mathbf{r} = e\,E\,z = e\,E\,r\cos\theta \qquad \text{(VII.6.7)}$$

sonucuna varılır. E yeteri kadar küçükse $0 < \varepsilon \ll 1$ şartı gerçeklenir.

Sâbit bir **E** elektrik alanının içerisinde bulunan bir hidrojen atomunun enerji seviyelerinin ve dolayısiyle de spektral çizgilerinin ayrılmasına *STARK olayı* adı verilir. Önce hidrojen atomunun temel hâlde bulunduğunu varsayalım. Temel hâlde bulunan hidrojen atomunun $E_0 = E_1^{(0)}$ enerji özdeğeri soysuzlaşmamıştır ve pertürbe olmamış özfonksiyonu da ψ_{100} dır. O hâlde, birinci mertebeden enerji pertürbasyonu (VII.1.31a) bağıntısına göre

$$\varepsilon E_1^{(1)} = \varepsilon H_{11}^{(1)} = e\,E \int \psi_{100}^{*}\, z\, \psi_{100}\, d\tau \qquad \text{(VII.6.8)}$$

integrali ile belirlenebilir Paragraf (III.20) deki bilgilere göre ψ_{100} ın paritesi çift ve z nin paritesi tek olduğu için, bu integralin integrandının paritesi tektir. O hâlde, söz konusu integral sıfıra eşittir ve $n = 1$ temel hâli için hidrojen atomunda birinci mertebeden STARK olayı yoktur.

Şimdi $n = 2$ için yâni hidrojen atomunun birinci uyarılmış hâli için, birinci mertebeden STARK olayını inceleyelim. Birinci uyarılmış hâle ait $E_0 = E_2^{(0)}$ enerji özdeğeri dört katlı soysuzlaşmıştır. Gerçekten, l ve m kuvantum sayılar

$$(l, m) = (0, 0), \quad (1, 0), \quad (1, 1), \quad (1, -1)$$

değerlerini alabilir. (I.9.9) bağıntılarına bakarak $[L_z, z] = 0$ olduğu görülür. Bu bağıntı (VII.6.7) bağıntısı ile karşılaştırılırsa $[L_z, H'] = 0$ elde edilir. (IV.4.3b) bağıntısına göre, L_z operatörünün matris elemanları $(L_z)_{kn} = \hbar m_k\, \delta_{kn}$ şeklinde yazılabildiği için, $[L_z, H']$ komütatörünün matris elemanları aşağıdaki şekilde hesaplanabilir :

$$\begin{aligned}
[L_z, H']_{kn} &= \sum_s (L_z)_{ks} H'_{sn} - \sum_s H'_{ks} (L_z)_{sn} \\
&= \sum_s \hbar\, m_k\, \delta_{ks}\, H'_{sn} - \sum_s H'_{ks}\, \hbar\, m_n\, \delta_{sn} \\
&= \hbar\, m_k\, H'_{kn} - \hbar\, m_n\, H'_{kn} \\
&= (m_k - m_n)\, \hbar\, H'_{kn}
\end{aligned}$$

bulunur. O hâlde,

$$[L_z, H']_{kn} = (m_k - m_n)\,\hbar\, H'_{kn} = 0 \qquad \text{(VII.6.9a)}$$

elde edilir ve böylece

$$\left.\begin{array}{lll} k \neq n & \text{için}: & m_k \neq m_n, \quad H'_{kn} = 0 \\ k = n & \text{için}: & m_k = m_n, \quad H'_{kn} \neq 0 \end{array}\right\} \qquad \text{(VII.6.9b)}$$

sonuçlarına varılır. Öte yandan, H' pertürbasyon operatörünün matris elemanları

$$H'_{(l_1, m_1)(l_2, m_2)} = (\psi_{2\, l_1\, m_1}, H'\, \psi_{2\, l_2\, m_2}) \qquad \text{(VII.6.10a)}$$

skaler çarpımı veyâ

$$H'_{(l_1, m_1)(l_2, m_2)} = e\, E \int \psi^*_{2\, l_1\, m_1}\, z\, \psi_{2\, l_2\, m_2}\, d\tau \qquad \text{(VII.6.10b)}$$

integrali ile hesaplanabilir. Bu integralin sıfırdan farklı olabilmesi için integrandı çift pariteye sâhip olmalıdır, veyâ z nin paritesi tek olduğu için $\psi_{2\, l_1\, m_1}$ ve $\psi_{2\, l_2\, m_2}$ fonksiyonları zıt paritelere sâhip olmalıdır. Böylece, (VII.6.10a) matris elemanlarının sıfırdan farklı olabilmeleri için $l_1 \neq l_2$ olmalıdır ve (VII.6.9b) bağıntısına göre de $m_1 = m_2$ olmalıdır. Öte yandan,

$$(l, m) = (0, 0), \quad (1, 0), \quad (1, 1), \quad (1, -1)$$

şeklindeki dört kuvantum hâlinden yalnız ilk ikisine ait matris elemanları $l_1 \neq l_2$ ve $m_1 = m_2$ şartlarını bir arada sağlayabilir. O hâlde, dört katlı bir soysuzlaşmanın pertürbasyon teorisi, iki katlı bir soysuzlaşmanın pertürbasyon teorisine indirgenir ve bu teorisiye ait matris elemanları aşağıda sıralanmıştır :

$$\left.\begin{array}{ll} H'_{11} \equiv H'_{(00)(00)} = 0, & H'_{12} \equiv H'_{(00)(10)} \neq 0, \\ H'_{21} \equiv H'_{(10)(00)} \neq 0, & H'_{22} \equiv H'_{(10)(10)} = 0, \end{array}\right\} \qquad \text{(VII.6.11)}$$

(VII.6.11) ile verilen sonuçlara bakarak, (VII.6.10b) bağıntısı ile verilen dört pertürbasyon matris elemanından ikisinin, yâni H'_{11} ve H'_{22} nin sıfır olduğu görülür. ψ_{210} ve ψ_{200} özfonksiyonları reel oldukları için, kalan matris elemanları, yâni H'_{12} ve H'_{21} eşittir ve

$$\varepsilon\, H'_{12} = \varepsilon\, H'_{21} = e\, E \int \psi_{210}(\mathbf{r})\, r \cos\theta\, \psi_{200}\, d\tau \qquad \text{(VII.6.12)}$$

integrali ile hesaplanabilir. Öte yandan, (II.5.11) bağıntısına bakarak

$$\psi_{210}(\mathbf{r}) = R_{21}(r)\, Y_{10}(\theta, \varphi), \qquad \psi_{200}(\mathbf{r}) = R_{20}(r)\, Y_{00}$$

olduğu bilindiğine göre, (II.5.18b,c) ve (I.21.17,18) bağıntılarını kullanarak

$$\left.\begin{array}{l} \psi_{210}(\mathbf{r}) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}\,(2\, a_0)^{3/2}}\, \dfrac{r \cos\theta}{2\, a_0}\, e^{-\frac{r}{2 a_0}} \\[2ex] \psi_{200}(\mathbf{r}) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}\,(2\, a_0)^{3/2}} \left(1 - \dfrac{r}{2\, a_0}\right) e^{-\frac{r}{2 a_0}} \end{array}\right\} \qquad \text{(VII.6.13)}$$

elde edilir. (VII.6.13) bağıntılarını (VII.6.12) bağıntısında yerlerine yazarak ve küresel koordinatlarda $d\tau = r^2\, dr\, \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ olduğunu hatırlayarak

$$\varepsilon H'_{12} = \frac{eE}{8\pi a_0^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \cos^2\theta \sin\theta\, d\theta \int_0^{\infty} \frac{r^4}{4a_0}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}} dr \qquad \text{(VII.6.14)}$$

bulunur. Bu integrallerde $x = \cos\theta$ ve $u = r/a_0$ değişken değiştirmeleri yapılırsa, $dx = -\sin\theta\, d\theta$ ve $dr = a_0\, du$ olduğu için

$$\varepsilon H'_{12} = \frac{eEa_0}{16} \int_{-1}^{1} x^2\, dx \int_0^{\infty} u^4 (2-u)\, e^{-u}\, du \qquad \text{(VI.I6.15a)}$$

veyâ birinci integralin değerinin 2/3 olduğu dikkat ederek

$$\varepsilon H'_{12} = \frac{eEa_0}{24} \int_0^{\infty} e^{-u} u^4 (2-u)\, du \qquad \text{(VII.6.15b)}$$

elde edilir. Öte yandan

$$\int_0^{\infty} e^{-u} u^n\, du = n\,!\,, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

bağıntısını kullanarak

$$\varepsilon H'_{12} = \frac{eEa_0}{4\,!}(2\,.\,4\,! - 5\,!) = e\,E\,a_0\,(2-5)$$

veya

$$\varepsilon H'_{12} = \varepsilon H'_{21} = -3\,e\,E\,a_0 \qquad \text{(VII.6.16)}$$

sonucuna varılır.

Birinci mertebeden pertürbasyonun ortadan kaldırdığı iki katlı soysuzlaşma hâli için, pertürbe olmuş enerji özdeğerleri

$$\begin{vmatrix} \varepsilon H'_{11} - (E_n - E_0) & \varepsilon H'_{12} \\ \varepsilon H'_{21} & \varepsilon H'_{22} - (E_n - E_0) \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{(VII.6.17a)}$$

şeklindeki (VII.3.2) bağıntısı ile verilir. Öte yandan, (VII.6.11) ve (VII.6.16) bağıntılarına göre, (VII.6.17a) bağıntısı

$$\begin{vmatrix} -(E_n - E_0) & \varepsilon H'_{12} \\ \varepsilon H'_{12} & -(E_n - E_0) \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{(VII.6.17b)}$$

veyâ

$$(E_n - E_0)^2 - \varepsilon^2 H_{12}'^2 = 0 \qquad \text{(VII.6.17c)}$$

şeklini alır. Buradan

$$\left.\begin{aligned} E_1 &= E_0 + \varepsilon H_{12}' \\ E_2 &= E_0 - \varepsilon H_{12}' \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VII.6.18)}$$

bulunur. $n = 2$ için pertürbe olmamış enerji özdeğeri

$$E_0 = E_2^{(0)} = -\frac{e^2}{8\,a_0}$$

olduğu için, (VII.6.16) bağıntısını kullanarak (VII.6.18) bağıntılarından

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{e^2}{8\,a_0} - 3\,e\,E\,a_0 \\ E_2 &= -\frac{e^2}{8\,a_0} + 3\,e\,E\,a_0 \end{aligned} \qquad \text{(VII.6.19)}$$

sonuçlarına varılır.

(VII.7) KLÂSİK MEKANİKTE BİR ELEKTROMAGNETİK ALANIN ETKİSİ ALTINDA HAREKET EDEN ELEKTRİK YÜKLÜ BİR PARÇACIĞA AİT HAMİLTON FONKSİYONU

Elektromagnetik alan, koordinatların ve zamanın fonksiyonları olan $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ elektrik alanı ve $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ magnetik alanından oluşur. $\mathbf{E}$ ve $\mathbf{B}$ vektör alanları

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \qquad \text{(VII.7.1a)}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{J}, \qquad \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \qquad \text{(VII.7.1b)}$$

şekillerindeki MAXWELL denklemlerini sağlarlar. Burada $\rho(\mathbf{r}, t)$ *elektrik yükü yoğunluğu* ve $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ *elektrik akımı yoğunluğu*dur. $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ elektrik yüklerinin hız alanı olduğuna göre, $\mathbf{J} = \rho\,\mathbf{v}$ dir. $\mathbf{E}$ ve $\mathbf{B}$ vektör alanları, $\Phi(\mathbf{r}, t)$ *skaler potansiyel* alanına ve $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ *vektör potansiyel* alanına

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \qquad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \qquad \text{(VII.7.2)}$$

bağıntıları ile bağlıdır. (VII.7.2) bağıntıları (VII.7.1a) bağıntılarını özdeş olarak sağlarlar. Gerçekten, $\nabla \times (\nabla\Phi) \equiv 0$ olduğu için

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{A}) = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

bağıntısı ve $\nabla . (\nabla \times \mathbf{A}) = 0$ olduğu için de $\nabla . \mathbf{B} = 0$ bağıntısı elde edilir.

E ve **B** elektromagnetik alanının etkisi altında **v** hızı ile hareket eden ve kütlesi m ve elektrik yükü e olan bir elektrona etki eden *LORENTZ kuvveti*

$$\mathbf{F} = e\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}\right)$$

şeklindedir. LORENTZ kuvveti,

$$\mathbf{F} = \frac{d}{dt}(m\,\mathbf{v}) = m\frac{d\mathbf{v}}{dt}$$

şeklindeki NEWTON hareket kanununda yerine yazılırsa

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = e\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}\right) \qquad \text{(VII.7.3)}$$

bağıntısı elde edilir. Bu bağıntı, elektrik yüklü bir parçacığın, örneğin bir elektronun bir elektromagnetik alan içerisindeki klâsik hareket denklemidir. LORENTZ kuvveti, **B** magnetik alanının etkisinden ötürü hıza bağlı olduğu için, bir potansiyel enerji fonksiyonundan türetilemez ve dolayısiyle SCHRÖDİNGER denklemi LORENTZ kuvveti için buraya kadar kullandığımız şekilde yazılamaz. Bu sebepten ötürü, SCHRÖDİNGER denkleminin LORENTZ kuvveti için uygun bir genelleştirilmesinin yapılması gerekir. Bu maksatla klâsik mekanikteki HAMİLTON fonksiyonunun LORENTZ kuvveti için genelleştirilmiş şekli bulunmalıdır. Ancak bu yapıldıktan sonra kuvantum mekaniğinde buna karşılık olan HAMİLTON operatörü ve böylece genelleştirilmiş SCHRÖDİNGER denklemi bulunabilir.

Eğer yüklü parçacığa ait **r** yer vektörünün kartezyen bileşenleri x_1, x_2, x_3 ve **v** hız vektörünün bileşenleri de v_1, v_1, v_3, ise, bu parçacığa ait LAGRANGE fonksiyonu

$$L = L(x_i, v_i\,; t) = L(\mathbf{r}, \mathbf{v}\,; t)$$

şeklinde olur. Buna göre (VII.7.3) hareket denklemi, (I.1C.5) sayılı

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial v_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \qquad (i = 1, 2, 3) \qquad \text{(VII.7.4)}$$

bağıntısı ile verilen LAGRANGE denklemleri şeklinde yazılabilir. Şimdi (VII.7.3) denkleminin (VII.7.4) denkleminin aynı olabilmesi için $L(\mathbf{r}, \mathbf{v}\,; t)$ LAGRANGE fonksiyonunun açık ifâdesini belirleyeceğiz. Bu maksatla

$$\nabla(\mathbf{v} . \mathbf{A}) = \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) + \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{v}) + (\mathbf{v} . \nabla)\mathbf{A} + (\mathbf{A} . \nabla)\mathbf{v}$$

özdeşliğini kullanacağız. $L(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t)$ fonksiyonunda $\mathbf{r}$ ve $\mathbf{v}$ nin bileşenleri bağımsız değişkenler olduğu için

$$\mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{v}) = 0, \qquad (\mathbf{A} \cdot \nabla)\,\mathbf{v} = 0$$

olmalıdır. O hâlde, yukardaki özdeşlik

$$\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) = \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\,\mathbf{A} \tag{VII.7.5}$$

şeklini alır. (VII.7.2) bağıntıları (VII.7.3) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$m\,\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\,e\,\nabla\Phi - \frac{e}{c}\left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A})\right]$$

bulunur. Bu bağıntıda (VII.7.5) özdeşliğinden elde edilen

$$-\,\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) = (\mathbf{v} \cdot \nabla)\,\mathbf{A} - \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$$

ifâdesi yerine yazılırsa

$$m\,\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\,e\,\nabla\Phi - \frac{e}{c}\left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\,\mathbf{A}\right] + \frac{e}{c}\,\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \tag{VII.7.6}$$

elde edilir. Öte yandan, $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ olmak üzere,

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\,\mathbf{A} \tag{VII.7.7}$$

yazılabilir. (VII.7.7) bağıntısının her iki yanı e/c ile çarpıldıktan sonra (VII.7.6) bağıntısı ile taraf tarafa toplanırsa

$$\frac{d}{dt}\left(m\,\mathbf{v} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right) = -\,e\,\nabla\Phi + \frac{e}{c}\,\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \tag{VII.7.8}$$

bulunur. Ayrıca

$$\nabla\left[\left(m\,\mathbf{v} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e^2}{c^2}\,\mathbf{A}^2\right] = \nabla\left(m^2 v^2 + 2m\frac{e}{c}\,\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}\right) = 2m\,\frac{e}{c}\,\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$$

işlemleri yapılırsa

$$\frac{1}{2m}\nabla\left[\left(m\,\mathbf{v} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e^2}{c^2}\,A^2\right] = \frac{e}{c}\,\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \tag{VII.7.9}$$

özdeşliği elde edilir. (VII.7.9) bağıntısı (VII.7.8) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\frac{d}{dt}\left(m\,\mathbf{v} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right) - \nabla\left[\frac{1}{2m}\left(m\,\mathbf{v} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e^2}{2mc^2}\,A^2 - e\,\Phi\right] = 0 \tag{VII.7.10}$$

bulunur. Öte yandan, (I.1C.7) bağıntısına göre

$$\frac{\partial L}{\partial v_i} = p_i, \qquad (i = 1, 2, 3) \qquad \text{(VII.7.11)}$$

olduğu için, (VII.7.4) bağıntısından

$$\frac{d p_i}{d t} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \qquad (i = 1, 2, 3)$$

bulunur. O hâlde LAGRANGE denklemleri,

$$\frac{d \mathbf{p}}{d t} - \nabla L = 0 \qquad \text{(VII.7.12)}$$

şeklindeki bir vektörel bağıntı olarak yazılabilir. (VII.7.10) ve (VII.7.12) bağıntılarının özdeş olabilmesi için LAGRANGE fonksiyonu

$$L = \frac{1}{2m}\left(m\,\mathbf{v} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e^2}{2\,m\,c^2}A^2 - e\,\Phi \qquad \text{(VII.7.13a)}$$

bağıntısı ile ve $\mathbf{p}$ momentumu da

$$\mathbf{p} = m\,\mathbf{v} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A} \qquad \text{(VII.7.14a)}$$

bağıntısı ile belirlenmelidir. Son olarak (VII.7.13a) ve (VII.7.14a) bağıntılarının (VII.7.11) bağıntısı ile tutarlı olup olmadıklarını araştıralım. Şüphesiz (VII.7.13a) bağıntısı

$$L = \frac{1}{2}\,m\,v^2 + \frac{e}{c}\,\mathbf{v}\,.\,\mathbf{A} - e\,\Phi \qquad \text{(VII.7.13b)}$$

veyâ

$$L = \frac{1}{2}\,m\sum_{i=1}^{3} v_i^2 + \frac{e}{c}\sum_{i=1}^{3} A_i\,.\,v_i - e\,\Phi \qquad \text{(VII.7.13c)}$$

şeklinde de yazılabilir. (VII.7.13c) bağıntısı (VII.7.11) bağıntısında yerine yazılırsa

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial v_i} = m\,v_i + \frac{e}{c}\,A_i \qquad \text{(VII.7.14b)}$$

bulunur. (VII.7.14b) bağıntısının vektörel şekli (VII.7.14a) bağıntısıdır.

Şimdi eğer (VII.7.14a) bağıntısı (VII.7.13a) bağıntısında yerine yazılırsa

$$L = \frac{1}{2m}\left(p^2 - \frac{e^2}{c^2}A^2\right) - e\,\Phi \qquad \text{(VII.7.15)}$$

bağıntısı bulunur. Öte yandan HAMİLTON fonksiyonu, (I.1D.1) sayılı

$$H = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L \tag{VII.7.16}$$

bağıntısı ile LAGRANGE fonksiyonu cinsinden belirlenir. Ayrıca, (VII.7.14a) bağıntısından $\mathbf{v}$ hızı

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right) \tag{VII.7.14c}$$

şeklinde çözülebilir ve böylece

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{2m}\left(2p^2 - 2\frac{e}{c}\,\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}\right) \tag{VII.7.17}$$

bulunur. (VII.7.15) ve (VII.7.17) bağıntıları (VII.7.16) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$H = \frac{1}{2m}\left(p^2 - 2\frac{e}{c}\,\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \frac{e^2}{c^2}A^2\right) + e\,\Phi$$

veyâ

$$H = H(\mathbf{p}\,,\mathbf{r}\,;t) = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 + e\,\Phi \tag{VII.7.18}$$

sonucuna varılır. Görülüyor ki, HAMİLTON fonksiyonu, (VII.7.14c) bağıntısını göz önünde bulundurarak,

$$H = \frac{1}{2}\,m\,v^2 + e\,\Phi \tag{VII.7.19}$$

şeklinde de yazılabilir. (VII.7.14a) bağıntısına göre $\mathbf{p}$, toplam momentumu göstermektedir ve $m\,\mathbf{v}$ momentumu ile e/c ile çarpılmış $\mathbf{A}$ vektör potansiyelinin toplamıdır. Bazen $m\,\mathbf{v}$ ye *kinetik momentum* ve $\frac{e}{c}\,\mathbf{A}$ ya da *potansiyel momentum* adı verilir. (VII.7.19) bağıntısında H, (VII.7.14a) bağıntısına benzer şekilde, $mv^2/2$ kinetik enerjisi ile $e\,\Phi$ potansiyel enerjisinin toplamıdır ve böylece toplam enerjiyi göstermektedir.

(VII.8) BİR ELEKTROMAGNETİK ALAN İÇERİSİNDE BULUNAN ELEKTRİK YÜKLÜ BİR PARÇACIĞA AİT SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Bir elektromagnetik alan içerisinde bulunan elektrik yüklü bir parçacığa ait HAMİLTON operatörü, (VII.7.18) bağıntısında $\mathbf{p}$ yerine

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\,\nabla \tag{VII.8.1}$$

momentum operatörünü yazarak elde edilir. Böylece, bir elektromagnetik alan içerisinde bulunan elektrik yüklü bir parçacığa ait zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denklemi

$$H\psi = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 \psi + e\,\Phi\,\psi = E\,\psi \qquad \text{(VII.8.2)}$$

şeklindedir. Şüphesiz bu denklemde $\mathbf{p}$ ve $\mathbf{A}$ vektör operatörleri skaler çarpıma göre komütatif değildir. O hâlde,

$$\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 = p^2 - \frac{e}{c}\,(\mathbf{p}\,.\,\mathbf{A} + \mathbf{A}\,.\,\mathbf{p}) + \frac{e^2}{c^2}\,A^2 \qquad \text{(VII.8.3)}$$

bulunur. Eğer (VII.8.1) bağıntısı bu bağıntıda yerine yazılırsa, (VII.8.2) denkleminin sol yanı

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\psi - \frac{e\hbar}{2imc}\,[\nabla\,.\,(\mathbf{A}\,\psi) + \mathbf{A}\,.\,\nabla\,\psi] + \frac{e^2}{2mc^2}\,A^2\,\psi + e\,\Phi\,\psi \qquad \text{(VII.8.4)}$$

şeklini alır. Öte yandan bu bağıntıda,

$$\nabla\,.\,(\mathbf{A}\,\psi) = \mathbf{A}\,.\,\nabla\,\psi + (\nabla\,.\,\mathbf{A})\,\psi \qquad \text{(VII.8.5)}$$

özdeşliği kullanılırsa (VII.8.2) SCHRÖDİNGER denklemi daha açık bir şekilde yazılabilir :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\,\psi + \frac{ie\hbar}{mc}\,\mathbf{A}\,.\,\nabla\,\psi + \frac{ie\hbar}{2mc}(\nabla\,.\,\mathbf{A})\,\psi + \frac{e^2}{2\,m\,c^2}\,A^2\,\psi + e\,\Phi\,\psi = E\,\psi \qquad \text{(VII.8.6)}$$

Şüphesiz (VII.8.1) bağıntısı (VII.8.5) özdeşliğinde yerine yazılırsa, ψ nin keyfî olduğu göz önünde bulundurularak, $\mathbf{p}\,.\,\mathbf{A}$ ile $\mathbf{A}\,.\,\mathbf{p}$ arasında

$$\mathbf{p}\,.\,\mathbf{A} = \mathbf{A}\,.\,\mathbf{p} + \frac{\hbar}{i}\,(\nabla\,.\,\mathbf{A}) \qquad \text{(VII.8.7)}$$

bağıntısı bulunur.

Üniform bir $\mathbf{B}$ magnetik alanı ve $\mathbf{r}$ yer vektörü için bilinen

$$\nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = (\nabla\,.\,\mathbf{r})\,\mathbf{B} - (\nabla\,.\,\mathbf{B})\,\mathbf{r} + (\mathbf{r}\,.\,\nabla)\,\mathbf{B} - (\mathbf{B}\,.\,\nabla)\,\mathbf{r}$$

özdeşliğini yazalım. Üniform magnetik alanın tanımına göre $\mathbf{B}$ vektörü sâbittir ve $\nabla\,.\,\mathbf{B} = 0$ MAXWELL denklemini özdeş olarak sağlar. Ayrıca,

$$\nabla\,.\,\mathbf{r} = 3, \qquad (\mathbf{r}\,.\,\nabla)\,\mathbf{B} = 0, \qquad (\mathbf{B}\,.\,\nabla)\,\mathbf{r} = \mathbf{B}$$

olduğu için

$$\nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = 3\,\mathbf{B} - \mathbf{B} = 2\,\mathbf{B}$$

veyâ

$$\mathbf{B} = \nabla \times \left(\frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right) \qquad \text{(VII.8.8a)}$$

özdeşliği bulunur. Öte yandan, (VII.7.2) bağıntılarından ikincisine göre

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

olduğu için, (VII.8.8a) bağıntısı ile karşılaştırarak

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \qquad \text{(VII.8.8b)}$$

sonucuna varılır. (VII.8.8b) bağıntısı, $\mathbf{B}$ üniform magnetik alanına ait $\mathbf{A}$ vektör potansiyelini belirlemektedir. Şimdi de

$$2\,\nabla \cdot \mathbf{A} = \nabla \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \mathbf{r} \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) - \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{r})$$

özdeşliğini yazalım. $\mathbf{B}$ vektörü sâbit olduğu için $\nabla \times \mathbf{B} = 0$ dır. Ayrıca $\nabla \times \mathbf{r} = 0$ olduğu için,

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \qquad \text{(VII.8.8c)}$$

sonucuna varılır. (VII.8.6) denkleminin sol yanındaki ikinci terimde (VII.8.8b) bağıntısı yerine yazılırsa

$$\frac{ie\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi = \frac{ie\hbar}{2mc} (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla \psi = \frac{ie\hbar}{2mc} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla \psi)$$

elde edilir. Bu bağıntıda yörünge açısal momentumunun

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \times \nabla$$

şeklindeki ifâdesi yerine yazılırsa

$$\frac{ie\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi = -\frac{e}{2mc} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \psi \qquad \text{(VII.8.9)}$$

bulunur. (VII.8.9) ve (VII.8.8b,c) bağıntıları (VII.8.6) denkleminde yerlerine yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{e}{2mc} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \psi + \frac{e^2}{8mc^2} (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 \psi + e\Phi\psi = E\psi \qquad \text{(VII.8.10)}$$

sonucuna varılır. (VII.8.10) denkleminin sol yanında magnetik alanın etkisinin olduğu terimler, ikinci ve üçüncü terimlerdir. İkinci terimdeki operatör, sâbit $\mathbf{B}$ magnetik alanının içerisinde bulunan $\boldsymbol{\mu}$ magnetik dipol momentinin $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ şeklindeki potansiyel enerjisidir. O hâlde, yüklü parçacığın yörünge hareketinden ötürü sâhip olduğu *magnetik dipol moment*

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2mc} \mathbf{L} \qquad \text{(VII.8.11)}$$

vektör operatörü ile belirlenir. Eğer sâbit **B** magnetik alanı z koordinat ekseninin doğrultu ve yönünde alınırsa, $B_x = B_y = 0$, $B_z = B$ olmak üzere

$$\mathbf{B} = B\,\mathbf{e}_z$$

yazılabilir ve böylece (VII.8.10) denkleminin sol yanındaki ikinci terim

$$-\boldsymbol{\mu}\,.\,\mathbf{B}\,\psi = -\frac{e}{2mc}\,B\,\mathbf{e}_z\,.\,\mathbf{L}\,\psi = -\frac{e}{2mc}\,B\,L_z\,\psi \qquad \text{(VII.8.12)}$$

şeklini alır. (VII.8.10) denkleminin sol yanındaki üçüncü terim ise,

$$\frac{e^2}{8mc^2}\,B^2\,(\mathbf{e}_z \times \mathbf{r})^2\,\psi = \frac{e^2}{8mc^2}\,B^2\,r^2\sin^2\theta\,\psi \qquad \text{(VII.8.13)}$$

şeklinde yazılabilir ve eğer B magnetik alanı çok büyük değilse B^2 yi ihtiva eden bu terim öbür terimlerin yanında ihmâl edilebilir.

(VII.9) HİDROJEN ATOMU İÇİN NORMAL ZEEMAN OLAYI

Şimdi **B** üniform magnetik alanının içerisinde bulunan bir hidrojen atomunu göz önüne alalım.

$$H = H^{(0)} + \varepsilon\,H' \qquad \text{(VII.9.1)}$$

olmak üzere (VII.8.10) SCHRÖDİNGER denklemi

$$H\,\psi = E\,\psi \qquad \text{(VII.9.2)}$$

şeklinde yazılabilir. Hidrojen atomu için $e\,\Phi$ yerine $-\,e^2/r$ alarak

$$H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \qquad \text{(VII.9.3)}$$

olduğunu biliyoruz. Öte yandan, magnetik alanın etkisini belirleyen terim

$$\varepsilon\,H' = -\frac{e}{2mc}\,B\,L_z \qquad \text{(VII.9.4a)}$$

dir. Bu terime DİRAC dalga denkleminin rölâtivistik olmayan yaklaşık şekli için elde edilen ve elektronun iç magnetik momentini ihtiva eden terim eklenince

$$\varepsilon\,H' = -\frac{e}{2mc}\,B\,L_z - \frac{e\,\hbar}{2mc}\,B\,\sigma_z \qquad \text{(VII.9.4b)}$$

bulunur.

$$S_z = \frac{1}{2}\,\hbar\,\sigma_z$$

olduğu için (VII.9.4b) bağıntısından

$$\varepsilon\, H' = -\frac{e}{2mc} B(L_z + 2S_z) \qquad \text{(VII.94c)}$$

elde edilir.

Hidrojen atomu için, $B = 0$ özel hâlinde

$$H^{(0)}\,\psi = E_n^{(0)}\,\psi \qquad \text{(VII.9.5)}$$

şeklindeki zamana bağlı olmayan SCHRÖDİNGER denklemi sağlanır. Burada $E_n^{(0)}$ enerji özdeğerleri

$$E_n^{(0)} = -\frac{e^2}{2a_0\, n^2} \qquad \text{(VII.9.6)}$$

bağıntısı ile ve ψ özfonksiyonları da

$$\psi = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)\, \chi_{m_s} = R_{nl}(r)\; Y_{lm_l}\, \chi_{m_s} \qquad \text{(VII.9.7)}$$

bağıntısı ile verilir. Öte yandan,

$$L_z\, Y_{lm_l} = \hbar\, m_l\; Y_{lm_l}, \quad |\, m_l \,| \leqq l \qquad \text{(VII.9.8)}$$

ve

$$S_z\, \chi_{m_s} = \hbar\, m_s\, \chi_{m_s}, \quad |\, m_s \,| = 1/2 \qquad \text{(VII.9.9)}$$

bağıntılarından ötürü, (VII.9.7) bağıntısından

$$L_z\, \psi = \hbar\, m_l\, \psi \qquad \text{(VII.9.10)}$$

ve

$$S_z\, \psi = \hbar\, m_s\, \psi \qquad \text{(VII.9.11)}$$

bağıntıları elde edilir. (I.13.3) bağıntısına göre (VII.9.3) bağıntısı

$$H^{(0)} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \qquad \text{(VII.9.3a)}$$

şeklinde de yazılabilir. Ayrıca

$$[\mathbf{L}^2, L_z] = 0, \quad L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad p_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

bağıntılarını hatırlayarak

$$[L_z, H^{(0)}] = 0, \quad [S_z, H^{(0)}] = 0$$

veyâ (VII.9.4c) bağıntısına bakarak

$$\varepsilon\, [H', H^{(0)}] = 0$$

elde edilir. $\varepsilon\, H'$ ve $H^{(0)}$ operatörleri komütatif olduklarından, ortak özfonksiyonlara sâhiptirler. O hâlde, (VII.9.1), (VII.9.2) ve (VII.9.5) bağıntılarına göre

$$[H, H^{(0)}] = 0; \quad H^{(0)} \psi = E_n^{(0)} \psi, \quad H \psi = E \psi$$

veyâ

$$(H^{(0)} + \varepsilon H') \psi = E \psi$$

veyâ

$$E_n^{(0)} \psi + \varepsilon H' \psi = E \psi \tag{VII.9.12}$$

elde edilir. Öte yandan, (VII.9.10.11) bağıntıları (VII.9.4c) bağıntısında yerlerine yazılırsa,

$$\varepsilon H' \psi = - \frac{e\hbar}{2mc} B (m_l + 2m_s) \psi \tag{VII.9.13}$$

ve böylece (VII.9.12) bağıntısından

$$E = E_n^{(0)} - \frac{e\hbar}{2mc} B (m_l + 2m_s) \tag{VII.9.14}$$

sonucuna varılır. Burada $2m_s = \pm 1$ dir.

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} \tag{VII.9.15}$$

büyüklüğü magnetik moment birimi olarak kullanılır ve bu birime atom fiziğinde *BOHR magnetonu* adı verilir. (VII.9.14) bağıntısı BOHR magnetonu cinsinden

$$E = E_n^{(0)} - \mu_0 B (m_l + 2m_s) \tag{VII.9.14a}$$

şeklinde yazılabilir. $|m_l| \leqq l$ olduğu için (VII.9.14a) bağıntısına göre m_l kuvantum sayısı ile ilgili olan soysuzlaşmış enerji seviyeleri magnetik alan tarafından $2l + 1$ farklı bileşene ayrılır. Bu bileşenler enerji birimi cinsinden eşit aralıklıdır. l her zaman tamsayı olduğu için, $2l + 1$ bileşen sayısı tektir. Fakat $2m_s = \pm 1$ olduğu için, bileşen sayısı bazen çift olabilir ve bu durum deneylerde gözlenmiştir.

$2m_s = \pm 1$ olduğu için, (VII.9.14a) bağıntısından spektroskopik çizgileri veren enerji farkları için

$$\Delta E = - \mu_0 B \Delta m_l \tag{VII.9.16}$$

elde edilir. (EK. 1) deki seçim kurallarına göre

$$\Delta m_l = \pm 1, \qquad \Delta m_l = 0$$

olduğu için,

$$\Delta E = \pm \mu_0 B, \qquad \Delta E = 0 \tag{VII.9.16a}$$

sonuçlarına varılır. O hâlde, hidrojen atomuna ait $B = 0$ için elde edilen bir spektroskopik çizgi, $B \neq 0$ için magnetik alanın etkisi ile üç çizgiye ayrılır. Deneylerle de doğrulanan bu olaya, *normal ZEEMAN olayı* adı verilir.

(VII.9.14a) bağıntısında magnetik alanın etkisini gösteren ek terimler bir μ magnetik momentinin göstermektedir. Bu magnetik moment.

$$\mu = \mu_l + \mu_s \tag{VII.9.17a}$$

şeklinde iki ayrı magnetik momentin toplamıdır. Birincisi elektronun yörünge açısal momentumundan ötürü,

$$\mu_l = \mu_0 \, m_l \tag{VII.9.17b}$$

yörünge magnetik momentidir. Öbürü de elektronun spin açısal momentumundan ötürü,

$$\mu_s = 2\mu_0 \, m_s = \pm \mu_0 \tag{VII.9.17c}$$

spin veyâ iç magnetik momentidir. DİRAC denkleminin aracılığı ile elde edilen (VII.9.17c) bağıntısına göre, elektronun iç magnetik momenti 1 BOHR magnetonu büyüklüğündedir ve deneylere uymaktadır (VII.9.17b) bağıntısına göre, yörünge magnetik momentinin yörünge açısal momentumuna oranı

$$\frac{\mu_l}{m_l} = \mu_0 \tag{VII.9.18}$$

ve (VII.9.17c) bağıntısına göre de, spin magnetik momentinin spin açısal momentumuna oranı

$$\frac{\mu_s}{m_s} = 2\,\mu_0 \tag{VII.9.19}$$

dır. Sonucu oran, öncekinin iki katıdır. Bu sonuç bazen "spin magnetik momentinin kural dışı oluşu" şeklinde ifâde edilir.

(VII.10) ANORMAL ZEEMAN OLAYI

Pertürbasyon metodunun en basit örneklerinden biri, üniform bir magnetik alanın içerisinde bulunan bir atomun enerji seviyelerinde bu alanın oluşturduğu birinci mertebeden değişmenin hesabıdır. Bir hidrojen atomuna ait *ZEEMAN olayı* bir önceki paragrafta incelendi. Bu özel hâlde pertürbasyon teorisini uygulamak gereksiz olduğu için uygulanmadı. Şimdi genel hâlde herhangi bir atom için problemi çözeceğiz.

Önce magnetik alanın mevcut olmadığı hâl için hareket sâbitlerini veyâ yaklaşık olarak hareket sâbiti olan büyüklükleri araştıralım. Atomun toplam **J** açısal momentumu kesinlikle bir hareket sâbitidir. Toplam **J** açısal momentumu, toplam **L** yörünge açısal momentumu ile toplam **S** spin açısal momentumunun toplamıdır:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{VII.10.1}$$

Atomdaki Z adet elektrondan her birinin yörünge açısal momentumu $\mathbf{L}_k$ olduğuna göre toplam yörünge açısal momentumu

$$\mathbf{L} = \sum_{k=1}^{Z} \mathbf{L}_k \qquad \text{(VII.10.2)}$$

bağıntısı ile verilir. Benzer şekilde, atomdaki Z adet elektrondan her birinin spin açısal momentumu $\mathbf{S}_k$ olduğuna göre toplam spin açısal momentumu da

$$\mathbf{S} = \sum_{k=1}^{Z} \mathbf{S}_k \qquad \text{(VII.10.3)}$$

bağıntısı ile verilir. Spin magnetik momentlerinin elektronların hareketi üzerindeki etkisi, COULOMB kuvvetlerinin etkisine kıyasla küçüktür ve ilk yaklaşıklıkta ihmâl edilebilir. Bu yaklaşıklığa göre, her bir elektronun spin açısal momentumu bir hareket sâbitidir, çünkü bunların doğrultularını değiştirebilecek hiçbir kuvvet yoktur. Böylece $\mathbf{S}$, ve dolayısiyle $\mathbf{L}$ birer hareket sâbitidir. Eğer $H^{(0)}$ pertürbe olmamış HAMİLTON operatörü, problem VI.1. de olduğu gibi, $f(r)\,\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ şeklinde bir *spin-yörünge enerjisi* terimi ihtiva ediyorsa $\mathbf{L}$ ve $\mathbf{S}$ artık hareket sâbitleri değillerdir. Fakat $\mathbf{L}^2$ ve $\mathbf{S}^2$ gene hareket sâbitleridir.

Pertürbe olmamış bir sistem olarak düşünülen bir atoma $\mathbf{B} = B\,\mathbf{e}_z$ üniform magnetik alanı uygulanırsa, pertürbe olmuş HAMİLTON operatörü

$$H = H^{(0)} + \varepsilon H' \qquad \text{(VII.10.4)}$$

şeklindedir ve pertürbasyon operatörü hidrojen atomonunkine benzer şekilde

$$\varepsilon H' = -\frac{e}{2mc} B(L_z + 2S_z) = -\frac{e}{2mc} B(J_z + S_z) \qquad \text{(VII.10.5)}$$

bağıntısı ile verilir. Genel hâlde J_z bir hareket sâbiti olduğu hâlde, L_z ve S_z hareket sâbitleri değillerdir. Bu sebepten ötürü, S_z nin hareket sâbitleri cinsinden ifâde edilmesi gerekir.

$$J_z S_z = S_z J_z \qquad \text{(VII.10.6)}$$

olduğu için,

$$\begin{aligned} S_z \mathbf{J}^2 &= S_z (J_x^2 + J_y^2 + J_z^2) \\ &= J_z (S_x J_x + S_y J_y + S_z J_z) + \\ &+ (S_z J_x - J_z S_x) J_x + (S_z J_y - J_z S_y) J_y \end{aligned}$$

bağıntısı doğrudur. Bu bağıntı

$$S_z \mathbf{J}^2 = J_z (\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}) + Q_z \qquad \text{(VII.10.7)}$$

şeklinde de yazılabilir. (VII.10.7) bağıntısında Q_z

$$Q_z = (S_z J_x - J_z S_x) J_x + (S_z J_y - J_z S_y) J_y$$

veyâ

$$Q_z = (S_z J_y - J_z S_y) J_y - (J_z S_x - S_z J_x) J_x \qquad \text{(VII.10.8)}$$

bağıntısı ile tanımlanmıştır. Eğer

$$\Gamma_x = S_z J_y - J_z S_y \qquad \text{(VII.10.9a)}$$

$$\Gamma_y = J_z S_x - S_z J_x \qquad \text{(VII.10.9b)}$$

tanımları yapılırsa, (VII.10.8) bağıntısı

$$Q_z = \Gamma_x J_y - \Gamma_y J_x \qquad \text{(VII.10.10)}$$

şeklinde yazılabilir. (VII.10.10) bağıntısı

$$\mathbf{Q} = \mathbf{\Gamma} \times \mathbf{J} \qquad \text{(VII.10.11)}$$

vektörel bağıntısı ile tanımlanan **Q** vektör operatörünün z bileşenini ifâde etmektedir. Öte yandan, (VII.10.9a,b) bağıntılarında (VII.10.1) bağıntısına bakarak

$$J_x = L_x + S_x, \quad J_y = L_y + S_y, \quad J_z = L_z + S_z$$

yazılırsa

$$\Gamma_x = S_z (L_y + S_y) - (L_z + S_z) S_y$$

$$\Gamma_y = (L_z + S_z) S_x - S_z (L_x + S_x)$$

veyâ

$$\Gamma_x = L_y S_z - L_z S_y \qquad \text{(VII.10.12a)}$$

$$\Gamma_y = L_z S_x - L_x S_z \qquad \text{(VII.10.12b)}$$

ve benzer şekilde

$$\Gamma_z = L_x S_y - L_y S_x \qquad \text{(VII.10.12c)}$$

bağıntıları bulunur. (VII.10.12.a,b,c) bağıntıları

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{L} \times \mathbf{S} \qquad \text{(VII.10.13)}$$

vektörel bağıntısına eşdeğerdir.

Öte yandan, $\mathbf{L} . \mathbf{S} = \mathbf{S} . \mathbf{L}$ olduğu için

$$\mathbf{L} . \mathbf{S} + \mathbf{S}^2 = \mathbf{S} . \mathbf{L} + \mathbf{S}^2$$

$$(\mathbf{L} + \mathbf{S}) . \mathbf{S} = \mathbf{S} . (\mathbf{L} + \mathbf{S})$$

veyâ

$$\mathbf{J} . \mathbf{S} = \mathbf{S} . \mathbf{J} \qquad \text{(VII.10.14)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntıyı kullanarak

$$\mathbf{L} = \mathbf{J} - \mathbf{S}$$

bağıntısının her iki yanının skaler karesi alınırsa

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{J} - \mathbf{S})^2 = \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - 2\,\mathbf{S}\,.\,\mathbf{J}$$

veyâ

$$\mathbf{S}\,.\,\mathbf{J} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2) \qquad \text{(VII.10.15)}$$

bağıntısı bulunur. (VII.10.7) bağıntısından, ψ, $\mathbf{J}^2$ nin özfonksiyonu olmak üzere

$$S_z\,\mathbf{J}^2\,\psi = J_z\,(\mathbf{S}\,.\,\mathbf{J})\,\psi + Q_z\,\psi$$

bağıntısı elde edilir ve (VII.10.15) bağıntısı bu bağıntıda yerine yazılırsa

$$S_z\,\mathbf{J}^2\,\psi = \frac{1}{2}J_z\,(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2)\,\psi + Q_z\,\psi \qquad \text{(VII.10.16)}$$

bağıntısı elde edilir. Kendi aralarında komütatif olan J_z, $\mathbf{J}^2$, $\mathbf{L}^2$ ve $\mathbf{S}^2$ operatörleri hareket sâbitleri olduklarından, (VII.10.4) bağıntısı ile verilen H HAMİLTON operatörü ile ortak özfonksiyonlara sâhiptirler. O hâlde,

$$H\,\psi = E\,\psi$$

olmak üzere,

$$J_z\,\psi = \hbar\,m_j\,\psi\,, \qquad \mathbf{J}^2\,\psi = \hbar^2 j\,(j+1)\,\psi \qquad \text{(VII.10.17)}$$

ve

$$\mathbf{L}^2\,\psi = \hbar^2\,l\,(l+1)\,\psi\,, \qquad \mathbf{S}^2\,\psi = \hbar^2\,s\,(s+1)\,\psi \qquad \text{(VII.10.18)}$$

bağıntıları elde edilir. m_j, j, l ve s kuvantum sayıları arasında

$$-j \leqq m_j \leqq j\,, \qquad |\,l - s\,| \leqq j \leqq l + s \qquad \text{(VII.10.19)}$$

bağıntıları vardır. (VII.10.17,18) bağıntıları (VII.10.16) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$\hbar^2 j\,(j+1)\,S_z\,\psi = \frac{1}{2}\hbar^3\,m_j\,[j\,(j+1) - l\,(l+1) + s\,(s+1)]\,\psi + Q_z\,\psi$$

veyâ

$$S_z\,\psi = \frac{\hbar\,m_j}{2j\,(j+1)}\,[j\,(j+1) - l\,(l+1) + s\,(s+1)]\,\psi + \frac{Q_z\,\psi}{\hbar^2 j\,(j+1)}$$

(VII.10.20)

bulunur. *LANDÉ çarpanı* adı verilen

$$g = 1 + \frac{j\,(j+1) - l\,(l+1) + s\,(s+1)}{2j\,(j+1)} \qquad \text{(VII.10.21)}$$

boyutsuz büyüklüğü tanımlanırsa (VII.10.20) bağıntısı

$$S_z \psi = \hbar\, m_j (g-1)\psi + \frac{Q_z \psi}{\hbar^2 j(j+1)} \qquad \text{(VII.10.20a)}$$

şeklini alır. Bu bağıntı (VII.10.17) bağıntılarından birincisi ile taraf tarafa toplanırsa

$$(J_z + S_z)\psi = \hbar\, m_j\, g\, \psi + \frac{Q_z \psi}{\hbar^2 j(j+1)} \qquad \text{(VII.10.22)}$$

bağıntısı bulunur. Bu sonuç (VII.10.5) bağıntısında

$$\frac{e}{2mc} = \frac{\mu_0}{\hbar}$$

yazarak elde edilen

$$\varepsilon H' \psi = -\frac{\mu_0}{\hbar} B (J_z + S_z)\psi$$

bağıntısında yerine yazılırsa,

$$\varepsilon H' \psi = -\mu_0 B\, m_j\, g\, \psi - \frac{\mu_0 B\, Q_z \psi}{\hbar^3 j(j+1)} \qquad \text{(VII.10.23)}$$

sonucuna varılır. $\psi = \psi_{j m_j}$ temsiline göre enerji pertürbasyonları,

$$\Delta E = E - E_n^{(0)} = \varepsilon H'_{j m_j, j m_j} \qquad \text{(VII.10.24)}$$

şeklindedir. (VII.10.23) bağıntısı (VII.10.24) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\Delta E = \varepsilon(\psi, H'\psi) = -\mu_0 B\, m_j\, g - \frac{\mu_0 B}{\hbar^3 j(j+1)} (\psi, Q_z \psi)$$

veyâ

$$\Delta E = -\mu_0 B\, m_j\, g - \frac{\mu_0 B}{\hbar^3 j(j+1)} (Q_z)_{j m_j, j m_j} \qquad \text{(VIIt10.25)}$$

bulunur. EK.1 deki seçim kurallarına göre, ancak

$$\Delta m_j = m_j' - m_j = \pm 1, \qquad \Delta m_j = 0; \qquad \Delta j = j' - j = \pm 1$$

olduğu zaman,

$$(Q_z)_{j' m_j', j m_j} \neq 0$$

şeklinde sıfırdan farklı matris elemanları elde edilebilir. Böylece, $j' = j$ ve $m_j' = m_j$ için

$$(Q_z)_{j m_j, j m_j} = 0 \qquad \text{(VII.10.26)}$$

olması gerekir. O hâlde, (VII.10.25,26) bağıntılarından

$$\Delta E = -\mu_0 B m_j g \tag{VII.10.27}$$

sonucuna varılır. Bu sonuç, B magnetik alanı zayıf olduğu zaman, yâni $\varepsilon H'$ pertürbasyon terimi spin-yörünge enerjisi teriminden çok daha küçük olduğu zaman doğrudur.

Anormal ZEEMAN olayının formülleri, $s = 0$ veyâ $g = 1$ ile belirlenen singlet hâller için normal ZEEMAN olayının formüllerine dönüşür.

ALIŞTIRMALAR VE PROBLEMLER

VII.1.

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 2\varepsilon & 0 \\ 2\varepsilon & 2+\varepsilon & 3\varepsilon \\ 0 & 3\varepsilon & 3+2\varepsilon \end{pmatrix}, \qquad 0 < \varepsilon \ll 1$$

matrisinin özdeğerlerini ve özvektörlerini küçük ε parametresine göre ikinci mertebeye kadar hesaplayınız. H matrisinin özdeğerlerini bir kez de tam olarak hesaplayınız ve ε a göre seriye açınız. Böylece, ikinci mertebeden özvektörleri

$$E_n^{(1)} = \frac{(\psi_n^{(0)}, H\,\psi_n^{(0)})}{(\psi_n^{(0)}, \psi_n^{(0)})}$$

bağıntısında yerine yazarak, özdeğerlerin üçüncü mertebeye kadar elde edilebileceğini gösteriniz.

VII.2.

$$H = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & \varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 2 \end{pmatrix}$$

matrisinin birinci mertebeden özvektörlerini bulunuz. Bu özvektörleri kullanarak H matrisinin ikinci mertebeden özdeğerlerini hesaplayınız.

VII.3. HAMİLTON operatörü

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\,\omega^2 x^2$$

bağıntısı ile verilen lineer harmonik osilâtörün

$$\varepsilon H' = \varepsilon \hbar \omega \alpha^4 x^4$$

şeklindeki bir pertürbasyon için enerji özdeğerlerini ε parametresine göre ikinci mertebeye kadar hesaplayınız. Burada $\alpha^2 = m\omega/\hbar$ dir.

SONUÇ :

$$\frac{E_n}{\hbar\omega} = n + \frac{1}{2} + \frac{3}{2}\varepsilon\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\varepsilon^2}{8}(34n^3 + 51n^2 + 59n + 21).$$

VII.4. Bir atoma ait

$$Q = \sum_{i=1}^{Z} e_i \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i$$

bağıntısı ile verilen *kuvadrupol moment* tansörünün kartezyen altı bağımsız bileşeni

$$Q_{xx} = \sum_i e_i x_i^2 \qquad Q_{yy} = \sum_i e_i y_i^2 , \qquad Q_{zz} = \sum_i e_i z_i^2$$

$$Q_{yz} = \sum_i e_i y_i z_i , \qquad Q_{zx} = \sum_i e_i z_i x_i , \qquad Q_{xy} = \sum_i e_i x_i y_i$$

şekl ndedir. Bu altı bileşenin

$$Q_m = \sum_i e_i r_i^2 Y_{2m}(\theta_i , \varphi_i) , \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2$$

$$T = \sum_i e_i r_i^2$$

bağıntıları ile verilen altı büyüklüğün lineer kombinezonları olduğunu gösteriniz. Burada (x_i , y_i , z_i) ve $(r_i , \theta_i , \varphi_i)$, i ninci elektrona ait kartezyen ve küresel koordinatlardır.

VII.5. $J_+ = J_x + i J_y$ ve $J_- = J_x - i J_y$ olmak üzere bir önceki problemde tanımlanan beş Q_m büyüklüğünün J_+ , J_- ve J_z operatörleri ile olan komütatörlerinin

$$[J_+ , Q_m] = \hbar \sqrt{(2 - m)(3 + m)}\, Q_{m+1}$$

$$[J_- , Q_m] = \hbar \sqrt{(2 + m)(3 - m)}\, Q_{m-1}$$

$$[J_z , Q_m] = \hbar m Q_m$$

bağıntıları ile verildiğini ispatlayınız.

Yol gösterme : Problem VII.4. teki küresel harmoniklerin (x_i , y_i , z_i) cinsinden ifâdelerini bulunuz ve EK.1 de **V** vektör operatörü için ispatlanan

$$[J_+, V_+] = 0, \qquad [J_z, V_+] = \hbar V_+, \qquad [J_-, V_+] = -2\hbar V_z$$
$$[J_+, V_z] = -\hbar V_+, \qquad [J_z, V_z] = 0, \qquad [J_-, V_z] = \hbar V_-$$
$$[J_+, V_-] = 2\hbar V_z, \qquad [J_z, V_-] = -\hbar V_-, \qquad [J_-, V_-] = 0$$

bağıntılarını kullanınız.

VII.6. Φ potansiyel fonksiyonundan türeyen bir statik elektrik alanında bulunan e_i elektrik yüklerinden oluşan bir sistemin elektrostatik potansiyel enerjisi

$$V = \sum_i e_i \Phi(\mathbf{r}_i)$$

bağıntısı ile verilir. Eğer elektrik alanı yükleri ihtiva eden hacım içerisinde yavaş değişiyorsa, Φ potansiyel fonksiyonu

$$\Phi(\mathbf{r}_i) = \Phi(0) + [\mathbf{r}_i \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r})]_{r=0} + \frac{1}{2}[(\mathbf{r}_i \cdot \nabla)^2 \Phi(\mathbf{r})]_{r=0} + \cdots$$

şeklinde seriye açılabilir. Bu açılımdan

$$V = \sum_i e_i \Phi(0) - \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} Q_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_\alpha \, \partial x_\beta} \right)_{r=0} + \cdots$$

bağıntısının bulunabileceğini gösteriniz. Burada $\mathbf{D}$ *elektrik dipol moment*idir ve

$$Q_{\alpha\beta} = \sum_i e_i \, x_{i\alpha} \, x_{i\beta}$$

elektrik kuvadrupol momenti tansörüdür. Q nun bileşenlerin problem VII.4. te tanımlanan Q_m bileşenleri cinsinden ifâde ediniz ve T nin potansiyel enerjiye hiçbir katkısının olmadığını gösteriniz.

VII.7. Bir önceki problemde çıkarılan elektrostatik potansiyel enerjinin ifâdesini kullanarak, bir yüklü parçacıklar sisteminin bir zayıf elektrik alanının içerisinde bulunduğu zaman, enerji seviyelerindeki birinci mertebeden kaymayı hesaplayınız.

VII.8. (α, J, M) kuvantum hâline ait pertürbe olmamış $\psi^{(0)}_{\alpha JM}$ özfonksiyonu için kuvadrupol etkileşme pertürbasyon enerjisinin köşegen matris elemanlarının

$$\frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_3^2} \right)_{r=0} \frac{Q}{J(2J-1)} [3M^3 - J(J+1)]$$

şeklinde olduğunu gösteriniz. Burada Q,

$$Q = \left(\psi^{(0)}_{\alpha JJ}, \sum_i e_i (3\, x_{i3}^2 - r_i^2)\, \psi^{(0)}_{\alpha JJ} \right)$$

bağıntısı ile verilmiştir. Kuvadrupol enerjinin α kuvantum sayılarına sâdece, sistemin *kuvadrupol momenti* adı verilen Q büyüklüğünün aracılığı ile bağlı olduğuna dikkat ediniz. Yukardaki bağıntının elektrik alanına niçin sâdece

$$(\partial^2 \Phi / \partial x_3^2)_{r=0}$$

türevinin aracılığı ile bağlı olduğunun fiziksel sebebini açıklayınız.

VII.9. Helyum atomuna ait aşağıdaki F_{nk} ve G_{nk} matris elemanlarını hesaplayınız ve verilen sonuçları bulunuz.

$$F_{1s2s} = \frac{34}{81}\,\frac{Z e^2}{2a_0}, \qquad G_{1s2s} = \frac{2^5}{3^6}\,\frac{Z e^2}{2a_0}$$

$$F_{1s2p} = \frac{118}{234}\,\frac{Z e^2}{2a_0}, \qquad G_{1s2p} = \frac{7.2^5}{3^8}\,\frac{Z e^2}{2\,a_0}$$

EK. 1

SEÇİM KURALLARI

(EK.1.1) BİR VEKTÖRÜN, BAĞLI BULUNDUĞU REFERANS SİSTEMİNİN DÖNMESİ İLE İLGİLİ OLARAK DEĞİŞİMİ

Bir referans sistemini

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_k = \delta_{ik} \qquad \text{(EK.1.1.1)}$$

ortonormallik şartlarını sağlayan $\mathbf{e}_i$ taban vektörlerinin aracılığı ile belirleyebiliriz. Bu taban vektörlerinin zamana göre türevi, gene bu vektörlerin lineer toplamı olarak yazılabilir :

$$\dot{\mathbf{e}}_i = \frac{d\mathbf{e}}{dt} = b_{ik}\, \mathbf{e}_k \qquad \text{(EK.1.1.2)}$$

Burada ve EK.1 in her yerinde, k tekrarlayan indisine göre, *EİNSTEİN toplama kuralı* kullanılmıştır. Yâni,

$$b_{i1}\, \mathbf{e}_1 + b_{i2}\, \mathbf{e}_2 + b_{i3}\, \mathbf{e}_3 = \sum_{k=1}^{3} b_{ik}\, \mathbf{e}_k \equiv b_{ik}\, \mathbf{e}_k \qquad \text{(EK.1.1.2a)}$$

bağıntısı geçerlidir. (EK.1.1.2) bağıntısındaki k toplama indisi s ile değiştirildikten sonra elde edilen

$$\dot{\mathbf{e}}_i = b_{is}\, \mathbf{e}_s$$

bağıntısının her iki yanı $\mathbf{e}_k$ ile skaler olarak çarpılırsa

$$\dot{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{e}_k = b_{is}\, \mathbf{e}_s \cdot \mathbf{e}_k = b_{is}\, \delta_{sk} = b_{ik}$$

veyâ

$$b_{ik} = \dot{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{e}_k \qquad \text{(EK.1.1.3)}$$

sonucuna varılır. Öte yandan, (EK.1.1.1) bağıntısının her iki yanının zamana göre türevi alınırsa

$$\dot{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{e}_k + \dot{\mathbf{e}}_k \cdot \mathbf{e}_i = 0 \qquad \text{(EK.1.1.4)}$$

bulunur. Eğer (EK.1.1.3) bağıntıları (EK.1.1.4) bağıntılarında yerlerine yazılırsa

$$b_{ik} + b_{ki} = 0 \qquad \text{(EK.1.1.5)}$$

bulunur. Yâni, b_{ik} katsayıları ikinci mertebeden antisimetrik bir tansörün bileşenleridir. b_{ik} antisimetrik tansörüne düal olan vektör, ε_{ikl} LEVİ-CİVİTA tansörünü kullanarak

$$\omega_i = \frac{1}{2}\,\varepsilon_{ikl}\, b_{kl} \qquad \text{(EK.1.1.6)}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Şüphesiz ω_i vektörüne düal olan b_{ik} antisimetrik tansörü de, (EK.1.1.6) bağıntısından çözülebilir ve

$$b_{ik} = \varepsilon_{ikl}\, \omega_l \qquad \text{(EK.1.1.6a)}$$

bağıntısı ile belirlenir.

$$\boldsymbol{\omega} = \omega_i\, \mathbf{e}_i \qquad \text{(EK.1.1.7)}$$

vektörüne, referans sisteminin veyâ bu sisteme bağlı olan bir katı cismin *âni dönme vektörü* adı verilir. Eğer $\mathbf{n}$, $\boldsymbol{\omega}$ vektörünün doğrultu ve yönündeki bir birim vektör ise, $\omega = |\,\boldsymbol{\omega}\,|$ olmak üzere

$$\boldsymbol{\omega} = \omega\, \mathbf{n} \qquad \text{(EK.1.1.8)}$$

yazılabilir. $\mathbf{n}$ birim vektörünün belirlediği eksene, *âni dönme ekseni* adı verilir. Bu âni dönme ekseni etrafında referans sisteminin açısal hızı

$$\omega = \dot{\theta} = \frac{d\theta}{dt} \qquad \text{(EK.1.1.9)}$$

dir. $\mathbf{n}$ vektörünün bileşenleri n_i ise,

$$\mathbf{n} = n_i\, \mathbf{e}_i \qquad \text{(EK.1.1.10)}$$

yazılabilir. Öte yandan, n_i bileşenleri,

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = n_i\, n_i = 1 \qquad \text{(EK.1.1.11)}$$

bağıntısını gerçeklerler. (EK.1.1.10) bağıntısı (EK.1.1.18) bağıntısında yerine yazılır ve elde edilen sonuç (EK.1.1.7) bağıntısı ile karşılaştırılırsa

$$\omega_i = \omega\, n_i = \dot{\theta}\, n_i \qquad \text{(EK.1.1.12)}$$

bulunur. Ayrıca, (EK.1.1.9) bağıntısı (EK.1.1.8) bağıntısında yerine yazılırsa

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{d\theta}{dt}\, \mathbf{n} \qquad \text{(EK.1.1.9a)}$$

elde edilir.

Şimdi referans sistemine bağlı olan bir **V** vektörünün veyâ vektör operatörünün, referans sisteminin dönmesi ile ilgili olarak değişimini hesaplayalım. **V** vektörü, bileşenlerinin cinsinden

$$\mathbf{V} = V_i\, \mathbf{e}_i \qquad \text{(EK.1.1.13)}$$

şeklinde yazılabilir. Bu bağıntının her iki yanının zamana göre türevini alarak

$$\dot{\mathbf{V}} = \dot{V}_i\, \mathbf{e}_i + V_i\, \dot{\mathbf{e}}_i \qquad \text{(EK.1.1.14)}$$

bulunur. (EK.1.1.2) bağıntısı bu bağıntıda yerine yazılırsa

$$\dot{\mathbf{V}} = \dot{V}_i\, \mathbf{e}_i + V_i\, b_{ik}\, \mathbf{e}_k \qquad \text{(EK.1.1.15)}$$

bulunur. (EK.1.1.16a) bağıntısı bu bağıntıda yerine yazılırsa

$$\dot{\mathbf{V}} = \dot{V}_i\, \mathbf{e}_i + V_i\, \varepsilon_{ikl}\, \omega_l\, \mathbf{e}_k$$

veyâ

$$\dot{\mathbf{V}} = \dot{V}_i\, \mathbf{e}_i + \varepsilon_{lik}\, \omega_l\, V_i\, \mathbf{e}_k \qquad \text{(EK.1.1.16)}$$

elde edilir. $\boldsymbol{\omega}$ ve **V** vektörlerinin vektörel çarpımının, bileşenler cinsinden ifâdesi

$$\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{V} = \varepsilon_{lik}\, \omega_l\, V_i\, \mathbf{e}_k \qquad \text{(EK,1.1.16a)}$$

şeklinde olduğu için

$$\dot{\mathbf{V}} = \dot{V}_i\, \mathbf{e}_i + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{V} \qquad \text{(EK.1.1.17)}$$

sonucuna varılır. Bu sonuç, herhangi bir **V** vektörü için doğrudur.

(EK.1.1.17) genel bağıntısını

$$\mathbf{V} = \mathbf{r} = x_i\, \mathbf{e}_i \qquad \text{(EK.1.1.18)}$$

yer vektörüne uygulayalım. Burada yer vektörünün zamanla değişiminin sâdece referans sisteminin dönmesine bağlı olduğunu varsayıyoruz. O hâlde $\dot{x}_i = 0$ olmalıdır ve

$$\dot{\mathbf{r}} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} \qquad \text{(EK.1.1.19)}$$

bulunur. (EK.1.1.9a) bağıntısını kullanarak

$$d\mathbf{r} = d\theta\, \mathbf{n} \times \mathbf{r} \qquad \text{(EK.1.1.20a)}$$

veyâ

$$\frac{d\mathbf{r}}{d\theta} = \mathbf{n} \times \mathbf{r} \qquad \text{(EK.1.1.20b)}$$

elde edilir. Eğer yer vektörü, geçici olarak,

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

sütun vektörü ile gösterilirse ve

$$K = \begin{pmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{(EK.1.1.21)}$$

matrisi tanımlanırsa, matrislerin çarpılması kuralına göre

$$\begin{pmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_2\,x_3 - n_3\,x_2 \\ n_3\,x_1 - n_1\,x_3 \\ n_1\,x_2 - n_2\,x_1 \end{pmatrix}$$

elde edilir. O hâlde, (EK.1.1.20b) diferansiyel denklemi

$$\frac{d\mathbf{r}}{d\theta} = K\,\mathbf{r} \qquad \text{(EK.1.1.22)}$$

şeklinde de yazılabilir. Bu diferansiyel denklemin çözümü

$$\mathbf{r}' = e^{K\theta}\,\mathbf{r} = e^{\theta\mathbf{n}\times}\,\mathbf{r} \qquad \text{(EK.1.1.23)}$$

şeklindedir. Burada $\theta\,K = \theta\,\mathbf{n}\times$ operatörü referans sisteminin $\mathbf{n}$ ekseni ektarafında θ sonlu açısı kadar dönmesini temsil eder. Referans sisteminin bu sonlu dönmesinin sonucu olarak, $\mathbf{r}$ yer vektörü $e^{K\theta}$ operatörünün etkisi ile $\mathbf{r}'$ yer vektörüne dönüşür. $e^{\theta K}$ fonksiyon operatörünün anlamı,

$$e^{\theta K} = 1 + \theta\,K + \frac{\theta^2}{2!}\,K^2 + \frac{\theta^3}{3!}\,K^3 + \ldots \qquad \text{(EK.1.1.24)}$$

operatör serisi ile açıklığa kavuşur. (EK.1.1.23) bağıntısına göre, benzer şekilde

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \theta\,\mathbf{n}\times\mathbf{r} + \frac{\theta^2}{2!}\,\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\times\mathbf{r}) + \frac{\theta^3}{3!}\,\mathbf{n}\times[\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\times\mathbf{r})] + \ldots \qquad \text{(EK.1.1.25)}$$

açılımı yapılabilir. Eğer sonlu θ dönme açısı yerine sonsuz küçük $d\theta$ açısı alınırsa, bu son bağıntıda $d\theta^2$ li, $d\theta^3$ lü ve daha yüksek dereceli terimler ihmâl edilebilir ve

$$\mathbf{r}' - \mathbf{r} = d\mathbf{r} = d\theta\,\mathbf{n}\times\mathbf{r} \qquad \text{(EK.1.1.26)}$$

bulunur. Bu son bağıntı, (EK.1.1.20a) bağıntısının yeniden elde edildiğini gösteriyor.

(EK.1.2) DÖNME OPERATÖRLERİ VE AÇISAL MOMENTUM OPERATÖRÜ

Şimdi **r** yer vektörünün keyfî bir fonksiyonu olan $\psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonunun referans sisteminin sonsuz küçük bir dönmesine tekabül eden değişimini hesaplayalım. Yer vektörünün sonsuz küçük dönmeye tekabül eden değişimi, (EK.1.1.26) bağıntısına bakarak

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + d\mathbf{r} \qquad \text{(EK.1.2.1)}$$

bağıntısı ile, ve $\psi(\mathbf{r})$ fonksiyonunun değişimi ise

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) + d\mathbf{r} \,.\, \nabla \psi(\mathbf{r}) \qquad \text{(EK.1.2.2)}$$

bağıntısı ile belirlidir. Burada $d\mathbf{r}$ yerine, (EK.1.1.26) bağıntısındaki değeri yazılırsa

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) + d\theta\,(\mathbf{n} \times \mathbf{r}) \,.\, \nabla \psi(\mathbf{r})$$

veyâ

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) + d\theta\, \mathbf{n} \,.\, (\mathbf{r} \times \nabla)\, \psi(\mathbf{r}) \qquad \text{(EK.1.2.3)}$$

elde edilir. Yörünge açısal momentumu vektör operatörünün

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}\, \mathbf{r} \times \nabla = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \qquad \text{(EK.1.2.4)}$$

şeklindeki tanım bağıntısı kullanılırsa (EK.1.2.3) bağıntısından

$$\psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}) = d\psi = \frac{i}{\hbar}\, d\theta\, \mathbf{n} \,.\, \mathbf{L}\, \psi \qquad \text{(EK.1.2.5)}$$

sonucuna varılır. Sonlu θ dönme açısına ait olan dönme dönüşümünü bulmak üzere bu son bağıntı integre edilirse

$$\psi(\mathbf{r}') = e^{\frac{i}{\hbar}\theta\, \mathbf{n} \,.\, \mathbf{L}}\, \psi(\mathbf{r}) \qquad \text{(EK.1.2.6)}$$

sonucuna varılır. Buradaki

$$R(\mathbf{n}, \theta) = e^{\frac{i}{\hbar}\theta\, \mathbf{n} \,.\, \mathbf{L}} \qquad \text{(EK.1.2.6a)}$$

operatörüne *dönme operatörü* adı verilir. **L** yerine **J** genel açısal momentum vektör operatörü alınarak, dönme operatörünün en genel şekli elde edilir :

$$R(\mathbf{n}, \theta) = e^{\frac{i}{\hbar}\theta\, \mathbf{n} \,.\, \mathbf{J}} \qquad \text{(EK.1.2.7)}$$

J operatörü HERMİTsel olduğu için dönme operatörü bir üniter operatördür. Yâni,

$$R^{+} R = R R^{+} = I \qquad \text{(EK.1.2.8)}$$

yazılabilir.

$R(\mathbf{n}, \theta)$ dönme operatörleri bir sürekli grup oluştururlar. n_1, n_2, n_3 ve θ bu grubun sürekli değişen parametreleridir. n_1, n_2 ve n_3 parametreleri arasında

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^3 = 1$$

bağıntısı olduğu için, dönme dönüşümleri grubu üç parametreli bir sürekli gruptur. $\mathbf{J}$ açısal momentum vektör operatörünün J_1, J_2 ve J_3 bileşenlerine dönme dönüşümleri grubunun jeneratörleri adı verilir. Jeneratörler, açısal momentum teorisinden bilindiği gibi,

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar\, \mathbf{J}$$

vektörel bağıntısına eşdeğer olan

$$[J_2, J_3] = i\hbar\, J_1, \qquad [J_3, J_1] = i\hbar\, J_2, \qquad [J_1, J_2] = i\hbar\, J_3$$

bağıntılarını gerçeklerler.

(EK.1.3) BİR VEKTÖR OPERATÖRÜN AÇISAL MOMENTUM VEKTÖR OPERATÖRÜ İLE OLAN KOMÜTATÖRLERİ

Bir $\mathbf{V}$ vektör operatörü dönme dönüşümüne göre dönüştürülürse, sonlu θ dönme açısı için

$$e^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}}\, \mathbf{V}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}} = e^{\theta\mathbf{n}\times}\, \mathbf{V} \qquad \text{(EK.1.3.1)}$$

bağıntısı yazılabilir. Sonsuz küçük dönme dönüşümü hâlinde bu bağıntı

$$\left(1 + \frac{i}{\hbar}\, d\theta\, \mathbf{n}\cdot\mathbf{J}\right) \mathbf{V} \left(1 - \frac{i}{\hbar}\, d\theta\, \mathbf{n}\cdot\mathbf{J}\right) = \mathbf{V} + d\theta\, \mathbf{n} \times \mathbf{V} \qquad \text{(EK.1.3.2)}$$

şeklinde yazılabilir. Gerekli işlemler yapılırsa,

$$\frac{i}{\hbar}\, d\theta\, (\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}\,\mathbf{V} - \mathbf{V}\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}) = d\theta\, \mathbf{n} \times \mathbf{V}$$

veyâ

$$[\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}, \mathbf{V}] = -\, i\hbar\, \mathbf{n} \times \mathbf{V} \qquad \text{(EK.1.3.3)}$$

bağıntısı bulunur. Bu bağıntıda sırası ile $\mathbf{n} = \mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ yazarak

$$[J_x, \mathbf{V}] = -\, i\hbar\, \mathbf{e}_x \times \mathbf{V}, \qquad [J_y, \mathbf{V}] = -\, i\hbar\, \mathbf{e}_y \times \mathbf{V}, \qquad [J_z, \mathbf{V}] = -\, i\hbar\, \mathbf{e}_z \times \mathbf{V} \qquad \text{(EK.1.3.4)}$$

bağıntıları elde edilir. $\mathbf{V}$ vektör operatörünün kartezyen bileşenleri cinsinden ifâdesi

$$\mathbf{V} = \mathbf{e}_x V_x + \mathbf{e}_y V_y + \mathbf{e}_z V_z$$

şeklindedir ve böylece (EK.1.3.4) bağıntıları

$$[J_x\,, \mathbf{V}] = i\hbar\,(\mathbf{e}_y\, V_z - \mathbf{e}_z\, V_y) \qquad \text{(EK.1.3.5a)}$$

$$[J_y\,, \mathbf{V}] = i\hbar\,(\mathbf{e}_z\, V_x - \mathbf{e}_x\, V_z) \qquad \text{(EK.1.3.5b)}$$

$$[J_z\,, \mathbf{V}] = i\hbar\,(\mathbf{e}_x\, V_y - \mathbf{e}_y\, V_x) \qquad \text{(EK.1.3.5c)}$$

şekillerini alırlar. Bu bağıntıların her biri sıra ile $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$ ve $\mathbf{e}_z$ ile skaler olarak çarpılırsa

$$\left.\begin{array}{lll} [J_x\,, V_x] = 0, & [J_y\,, V_x] = -\,i\hbar\, V_z\,, & [J_z\,, V_x] = i\hbar\, V_y\,, \\ [J_x\,, V_y] = i\hbar\, V_z\,, & [J_y\,, V_y] = 0, & [J_z\,, V_y] = -\,i\hbar\, V_x\,, \\ [J_x\,, V_z] = -\,i\hbar\, V_y\,, & [J_y\,, V_z] = i\hbar\, V_x\,, & [J_z\,, V_z] = 0. \end{array}\right\} \qquad \text{(EK.1.3.6)}$$

komütatörleri bulunur.

Eğer J_x, J_y, V_x ve V_y operatörleri cinsinden

$$J_+ = J_x + i\,J_y\,, \qquad J_- = J_x - i\,J_y \qquad \text{(EK.1.3.7a)}$$

$$V_+ = V_x + i\,V_y\,, \qquad V_- = V_x - i\,V_y \qquad \text{(EK.1.3.7b)}$$

operatörleri tanımlanırsa, (EK.1.3.6) bağıntılarının yardımı ile kolaylıkla

$$\left.\begin{array}{lll} [J_+\,, V_+] = 0, & [J_z\,, V_+] = \hbar\, V_+\,, & [J_-\,, V_+] = -2\hbar\, V_z\,, \\ [J_+\,, V_z] = -\,\hbar\, V_+\,, & [J_z\,, V_z] = 0, & [J_-\,, V_z] = \hbar\, V_-\,, \\ [J_+\,, V_-] = 2h\, V_z\,, & [J_z\,, V_-] = -\,\hbar\, V_-\,, & [J_-\,, V_-] = 0. \end{array}\right\} \qquad \text{(EK.1.3.8)}$$

komütatörleri bulunur.

(EK.1.4) ψ_{jm} TEMSİLİNDE OPERATÖRLERİN MATRİS ELEMANLARI VE SEÇİM KURALLARI

Dinamik değişkenleri temsil eden lineer operatörler, dönme dönüşümleri altında gösterdikleri özelliklere göre sınıflandırılabilirler. Böyle bir sınıflandırmanın, özellikle söz konusu operatörlerin ψ_{jm} temsilindeki matris elemanlarının bulunmasında büyük bir önemi vardır. Çünkü ancak bu şekilde, sıfırdan farklı olan matris elemanlarının belirlenmesine ait *seçim kuralları* elde edilebilir.

Bir S invaryant skaler operatörü dönme dönüşümü altında değişmez. Yâni S operatörü,

$$RSR^+ = S \qquad \text{(EK.1.4.1a)}$$

veyâ $RR^+ = R^+ R = I$ olduğunu hatırlayarak

$$RS - SR = 0 \qquad \text{(EK.1.4.1b)}$$

bağıntısını gerçekler. Bu bağıntı, sonsuz küçük $d\theta$ açısına ait

$$R \cong 1 + \frac{i}{\hbar} d\theta\, \mathbf{n} \,.\, \mathbf{J}$$

operatörü için yazılırsa

$$(\mathbf{n} \,.\, \mathbf{J})\, S - S(\mathbf{n} \,.\, \mathbf{J}) = 0$$

veyâ

$$\mathbf{n} \,.\, (\mathbf{J}S - S\mathbf{J}) = 0$$

veyâ

$$[S \,,\, \mathbf{J}] = 0 \qquad \text{(EK.1.4.2)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntıdan

$$[S \,,\, J_z] = 0, \qquad [S \,,\, \mathbf{J}^2] = 0 \qquad \text{(EK.1.4.3)}$$

bağıntıları kolaylıkla elde edilebilir. Öte yandan,

$$[\mathbf{J}^2 \,,\, J_z] = 0$$

olmak üzere

$$\mathbf{J}^2 \psi_{jm} = \hbar^2 j\,(j+1)\, \psi_{jm} \qquad \text{(EK.1.4.4)}$$

ve

$$J_z\, \psi_{jm} = \hbar\, m\, \psi_{jm} \qquad \text{(EK.1.4.5)}$$

özdeğer denklemleri yazılabilir. Bu şekilde belirlenen ψ_{jm} özvektörleri taban vektörleri olarak alınmak üzere (EK.1.4.3) bağıntılarına tekabül eden matris bağıntılarını yazalım. S nin matris elemanları

$$S_{j'm'\,,\,jm} = (\psi_{j'm'} \,,\, S\, \psi_{jm}) \qquad \text{(EK.1.4.6)}$$

bağıntısı ile tanımlanır. Öte yandan, (EK.1.4.4) bağıntısından

$$(\mathbf{J}^2)_{j'm'\,,\,jm} = \hbar^2 j\,(j+1)\, \delta_{j'j}\, \delta_{m'm} \qquad \text{(EK.1.4.7)}$$

bağıntısının ve (EK.1.4.5) bağıntısından da

$$(\mathbf{J}_z)_{j'm'\,,\,jm} = \hbar\, m\, \delta_{j'j}\, \delta_{m'm} \qquad \text{(EK.1.4.8)}$$

bağıntısının elde edildiğini biliyoruz. O hâlde, (EK.1.4.8) bağıntısını kullanarak (EK.1.4.3) bağıntılarından birincisine tekabül eden

$$\sum_{\alpha,\beta} S_{j'm'\,,\,\alpha\beta}\, (J_z)_{\alpha\beta\,,\,jm} = \sum_{\alpha,\beta} (J_z)_{j'm'\,,\,\alpha\beta}\, S_{\alpha\beta\,,\,jm} = 0$$

$$\sum_{\alpha,\beta} S_{j'm'\,,\,\alpha\beta}\, \hbar\, m\, \delta_{\alpha j}\, \delta_{\beta m} - \sum_{\alpha,\beta} \hbar\, m'\, \delta_{j'\alpha}\, \delta_{m'\beta}\, S_{\alpha\beta\,,\,jm} = 0$$

$$\hbar\, m\, S_{j'm'\,,\,jm} - \hbar\, m'\, S_{j'm'\,,\,jm} = 0$$

$$[S \,,\, J_z]_{j'm'\,,\,jm} = \hbar\,(m - m')\, S_{j'm'\,,\,jm} = 0 \qquad \text{(EK.1.4.9)}$$

matris bağıntısı bulunur. Benzer şekilde (EK.1.4.7) bağıntısını kullanarak (EK.1.4.3) bağıntılarından ikincisine tekabül eden

$$[S\,,\,\mathbf{J}^2]_{j'm'\,,\,jm} = \hbar^2\,[j\,(j+1) - j'\,(j'+1)]\,S_{j'm'\,,\,jm} = 0 \qquad \text{(EK.1.4.10)}$$

matris bağıntısı bulunur. Bu son bağıntı, ikinci tarafın katsayısını çarpanlara ayırarak

$$\hbar^2\,(j-j')\,(j+j'+1)\,S_{j'm'\,,\,jm} = 0 \qquad \text{(EK.1.4.10a)}$$

şeklinde de yazılabilir. (EK.1.4.9,10) bağıntılarına göre $S_{j'm'\,,\,jm}$ matris elemanları, $m = m'$ ve $j = j'$ olmadıkça sıfır olur. O hâlde, S skaler operatörüne ait olan

$$m' - m = \Delta\, m = 0, \qquad j' - j = \Delta\, j = 0 \qquad \text{(EK.1.4.11)}$$

seçim kurallarını elde etmiş bulunuyoruz.

Şimdi de herhangi bir $\mathbf{V}$ vektör operatörünün V_+ , V_z ve V_- bileşenlerinin ψ_{jm} temsilindeki sıfırdan farklı olan matris elemanlarını araştıralım. m ye ait seçim kuralları, (EK.1.3.8) deki J_z yi ihtiva eden

$$[J_z\,,\,V_+] = \hbar\,V_+\,, \qquad [J_z\,,\,V_z] = 0, \qquad [J_z\,,\,V_-] = -\,\hbar\,V_- \qquad \text{(EK.f4.12)}$$

komütatörlerinden hemen elde edilebilir. Gerçekten,

$$[J_z\,,\,V_+] \equiv J_z\,V_+ - V_+\,J_z = \hbar\,V_+$$

komütatörünün matris elemanlarının hesabı için

$$(V_+)_{m'm} = (\psi_{jm'}\,,\,V_+\,\psi_{jm})$$
$$(J_z)_{m'm} = (\psi_{jm'}\,,\,J_z\,\psi_{jm}) = \hbar\,m\,\delta_{m'm}$$

matris elemanlarını kullanarak aşağıdaki işlemler yapılırsa :

$$\begin{aligned}[J_z\,,\,V_+]_{m'm} &= \sum_s (J_z)_{m's}\,(V_+)_{sm} - \sum_s (V_+)_{m's}\,(J_z)_{sm} \\ &= \sum_s \hbar\,m'\,\delta_{m's}\,(V_+)_{sm} - \sum_s (V_+)_{m's}\,\hbar\,m\,\delta_{sm} \\ &= \hbar\,m'\,(V_+)_{m'm} - (V_+)_{m'm}\,\hbar\,m\end{aligned}$$

veyâ

$$[J_z\,,\,V_+]_{m'm} = \hbar\,(m'-m)\,(V_+)_{m'm} = \hbar\,(V_+)_{m'm} \qquad \text{(EK.14..13a)}$$

sonucuna varılır. Benzer işlemlerle,

$$[J_z\,,\,V_z]_{m'm} = \hbar\,(m'-m)\,(V_z)_{m'm} = 0 \qquad \text{(EK.1.4.13b)}$$

ve

$$[J_z\,,\,V_-]_{m'm} = \hbar\,(m'-m)\,(V_-)_{m'm} = -\,\hbar\,(V_-)_{m'm} \qquad \text{(EK.1.4.13c)}$$

sonuçlarına varılır. O hâlde, aşağıdaki seçim kuralları elde edilir :

$$m' - m = \Delta m = 1 \text{ için}: \quad (V_+)_{m'm} \neq 0 \qquad \text{(EK.1.4.14a)}$$

$$m' - m = \Delta m = 0 \text{ için}: \quad (V_z)_{m'm} \neq 0 \qquad \text{(EK.1.4.14b)}$$

$$m' - m = \Delta m = -1 \text{ için}: \quad (V_-)_{m'm} \neq 0 \qquad \text{(EK.1.4.14c)}$$

j ye ait seçim kurallarının bulunabilmesi için, **J** ve **V** vektör operatörlerinin arasındaki iki ayrı vektörel bağıntının elde edilmesi gerekir. Bu bağınlardan birincisi için :

$$\mathbf{J} \times \mathbf{V} = \mathbf{e}_x (J_y V_z - J_z V_y) + \mathbf{e}_y (J_z V_x - J_x V_z) + \mathbf{e}_z (J_x V_y - J_y V_x)$$

$$\mathbf{V} \times \mathbf{J} = \mathbf{e}_x (V_y J_z - V_z J_y) + \mathbf{e}_y (V_z J_x - V_x J_z) + \mathbf{e}_z (V_x J_y - V_y J_x)$$

vektörel çarpım bağıntıları taraf tarafa toplanırsa

$$\mathbf{V} \times \mathbf{J} + \mathbf{J} \times \mathbf{V} = \mathbf{e}_x ([J_y , V_z] - [J_z , V_y]) + \mathbf{e}_y ([J_z , V_x] - [J_x , V_z]) - $$
$$+ \mathbf{e}_z ([J_x , V_y] - [J_y , V_x]) \qquad \text{(EK.1.4.15)}$$

bulunur. (EK.1.3.6) bağıntılarının yardımı ile bu bağıntıdan

$$V \times \mathbf{J} + \mathbf{J} \times V = \mathbf{e}_x (i\hbar V_x + i\hbar V_x) + \mathbf{e}_y (i\hbar V_y + i\hbar V_y) + \mathbf{e}_z (i\hbar V_z + i\hbar V_z)$$

veyâ

$$\mathbf{V} \times \mathbf{J} + \mathbf{J} \times \mathbf{V} = 2 i\hbar \mathbf{V} \qquad \text{(EK.1.4.16)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntı, istenen birinci vektörel bağıntıdır. Diğer vektörel bağıntı için

$$[\mathbf{J}^2 , \mathbf{V}] = \mathbf{e}_x [\mathbf{J}^2 , \mathbf{V}_x] + \mathbf{e}_y [\mathbf{J}^2 , \mathbf{V}_y] + \mathbf{e}_z [\mathbf{J}^2 , \mathbf{V}_z] \qquad \text{(EK.1.4.17)}$$

bağıntısının sağ yanındaki komütatörlerin hesaplanması gerekir. Örneğin, bu komütatörlerden birincisi

$$[\mathbf{J}^2 , V_x] = [J_x^2 , V_x] + [J_y^2 , V_x] + [J_z^2 , V_x] \qquad \text{(EK.1.4.17a)}$$

şeklinde yazılabilir. $J_x V_x = V_x J_x$ olduğu için

$$J_x^2 V = J_x V_x J_x = V_x J_x^2 , \qquad [J_x^2 , V_x] = 0 \qquad \text{(EK.14.18a)}$$

bulunur. Öte yandan, (EK.1.3.6) bağıntılarından biri olan

$$J_y V_x - V_x J_y = - i\hbar V_z$$

bağıntısı bir kez soldan ve bir kez de sağdan J_y ile çarpılırsa

$$J_y^2 V_x - J_y V_x J_y = - i\hbar J_y V_z$$

$$J_y V_x J_y - V_x J_y^2 = - i\hbar V_z J_y$$

elde edilir. Bu bağıntılar taraf tarafa toplanırsa

$$[J_y^2 , V_x] \equiv J_y^2 V_x - V_x J_y^2 = - i\hbar (J_y V_z + V_z J_y) \qquad \text{(EK.1.4.18b)}$$

bulunur. (EK.1.3.6) bağıntılarından başka biri olan

$$J_z V_x - V_x J_z = i\hbar V_y$$

bağıntısı bir kez soldan ve bir kez de sağdan J_z ile çarpılırsa

$$J_z^2 V_x - J_z V_x J_z = i\hbar J_z V_y$$

$$J_z V_x J_z - V_x J_z^2 = i\hbar V_y J_z$$

elde edilir. Bu bağıntılar taraf tarafa toplanırsa

$$[J_z^2, V_x] \equiv J_z^2 V_x - V_x J_z^2 = i\hbar (J_z V_y + V_y J_z) \qquad \text{(EK.1.4.18c)}$$

bulunur. (EK.1.4.18a,b,c) bağıntıları (EK.1.4.17a) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$[\mathbf{J}^2, V_x] = i\hbar [(V_y J_z - V_z J_y) - (J_y V_z - J_z V_y)] \qquad \text{(EK.1.4.19a)}$$

sonucuna varılır. (EK.1.4.17) bağıntısındaki öbür iki komütatör benzer işlemlerle hesaplanabilir. Şüphesiz sonuçlar, kartezyen bileşenlerin dairesel permütasyonu ile de kolayca yazılabilir ve aşağıdaki bağıntılar elde edilir :

$$[\mathbf{J}^2, V_y] = i\hbar [(V_z J_x - V_x J_z) - (J_z V_x - J_x V_z)] \qquad \text{(EK.1.4.19b)}$$

$$[\mathbf{J}^2, V_z] = i\hbar [(V_x J_y - V_y J_x) - (J_x V_y - J_y V_x)] \qquad \text{(EK.1.4.19c)}$$

(EK.1.4.19a,b,c) bağıntıları (EK.1.4.17) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{V}] = i\hbar (\mathbf{V} \times \mathbf{J} - \mathbf{J} \times \mathbf{V}) = 2\, i\hbar\, \mathbf{K} \qquad \text{(EK.1.4.20)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntı da, istenen ikinci vektörel bağıntıdır. Sağdaki ikinci eşitlik HERMİTsel $\mathbf{K}$ vektör operatörünün tanımını verir :

$$\mathbf{V} \times \mathbf{J} - \mathbf{J} \times \mathbf{V} = 2\,\mathbf{K} \qquad \text{(EK.1.4.21a)}$$

(EK.1.4.21a) bağıntısı (EK.1.4.16) bağıntısı ile taraf tarafa bir kez toplanır ve bir kez de çıkarılırsa, ikiye bölerek

$$\mathbf{V} \times \mathbf{J} = i\hbar \mathbf{V} + \mathbf{K}, \qquad \mathbf{J} \times \mathbf{V} = i\hbar \mathbf{V} - \mathbf{K}$$

bağıntıları bulunur. Bu bağıntılardan $\mathbf{K}$ çözülürse,

$$\mathbf{K} = \mathbf{V} \times \mathbf{J} - i\hbar \mathbf{V} = i\hbar \mathbf{V} - \mathbf{J} \times \mathbf{V} \qquad \text{(EK.1.4.21b)}$$

sonuçlarına varılır. Öte yandan, bu son bağıntının birinci ve üçüncü yanları $\mathbf{J}$ ile skaler olarak çarpılırsa

$$\mathbf{J} \,.\, \mathbf{K} = i\hbar\, \mathbf{J} \,.\, \mathbf{V} - \mathbf{J} \,.\, (\mathbf{J} \times \mathbf{V})$$

veyâ

$$\mathbf{J} \,.\, \mathbf{K} = i\hbar\, \mathbf{J} \,.\, \mathbf{V} - (\mathbf{J} \times \mathbf{J}) \,.\, \mathbf{V}$$

elde edilir.

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar\, \mathbf{J}$$

olduğu için

$$\mathbf{J}\,.\,\mathbf{K} = 0 \tag{EK.1.4.22}$$

sonucuna varılır.

(EK.1.4.21b) bağıntısından

$$K_x = V_y J_z - V_z J_y - i\hbar V_x = i\hbar V_x - J_y V_z + J_z V_y$$

yazılabilir. Ayrıca,

$$[J_z, V_y] \equiv J_z V_y - V_y J_z = -i\hbar V_x$$

komütatör bağıntısından,

$$V_y J_z - i\hbar V_x = J_z V_y$$

ve

$$i\hbar V_x + J_z V_y = V_y J_z$$

bağıntıları elde edilir. Bu bağıntılar, yukardaki K_x bileşenini veren bağıntıda yerlerine yazılırsa

$$K_x = J_z V_y - V_z J_y = V_y J_z - J_y V_z \tag{EK.1.4.23a}$$

sonucuna varılır. Dairesel permütasyonla $\mathbf{K}$ nın öbür bileşenleri kolaylıkla yazılabilir :

$$K_y = J_x V_z - V_x J_z = V_z J_x - J_z V_x \tag{EK.1.4.23b}$$

$$K_z = J_y V_x - V_y J_x = V_x J_y - J_x V_y \tag{EK.1.4.23c}$$

(EK.1.4.23a,b,c) bağıntılarını kullanarak

$$K_y J_z - K_z J_y = (J_x V_z - V_x J_z) J_z - (V_x J_y - J_x V_y) J_y$$

$$J_y K_z - J_z K_y = J_y (J_y V_x - V_y J_x) - J_z (V_z J_x - J_z V_x)$$

yazılırsa, parantezleri yeniden düzenleyerek

$$K_y J_z - K_z J_y = J_x (V_y J_y + V_z J_z) - V_x (J_y^2 + J_z^2)$$

$$J_y K_z - J_z K_y = (J_y^2 + J_z^2) V_x - (J_y V_y + J_z V_z) J_x$$

elde edilir. Öte yandan,

$$J_x V_x J_x - V_x J_x^2 = 0, \qquad J_x^2 V_x - J_x V_x J_x = 0$$

olduğundan,

$$K_y J_z - K_z J_y = J_x (V_x J_x + V_y J_y + V_z J_z) - V_x (J_x^2 + J_y^2 + J_z^2)$$

$$J_y K_z - J_z K_y = (J_x^2 + J_y^2 + J_z^2) V_x - (J_x V_x + J_y V_y + J_z V_z) J_x$$

veyâ

$$K_y J_z - K_z J_y = J_x (\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}) - V_x (\mathbf{J}^2) \qquad \text{(EK.1.4.24a)}$$

$$J_y K_z - J_z K_y = (\mathbf{J}^2) V_x - (\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}) J_x \qquad \text{(EK.1.4.24b)}$$

sonuçlarına varılır. Öte yandan, (EK.1.3.6) bağıntılarına göre

$$[J_x, V_x] = [J_y, V_y] = [J_z, V_z] = 0$$

olduğu için,

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{V} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{J}$$

elde edilir. Şimdi

$$(\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}) J_x = J_x (\mathbf{J} \cdot \mathbf{V})$$

olduğunu göstereceğiz. $J_x V_x J_x = J_x J_x V_x$ olduğu için,

$$(J_y V_y + J_z V_z) J_x = J_x (J_y V_y + J_z V_z)$$

olduğunu göstermek yeter. Aşağıdaki işlemler yapılırsa :

$$\begin{aligned} J_x J_y V_y &= (J_y J_x + i\hbar J_z) V_y \\ &= J_y J_x V_y + i\hbar J_z V_y \\ &= J_y (V_y J_x + i\hbar V_z) + i\hbar J_z V_y \\ &= J_y V_y J_x + i\hbar (J_y V_z + J_z V_y) \end{aligned} \qquad \text{(ii)}$$

bulunur. Benzer şekilde,

$$\begin{aligned} J_x J_z V_z &= (J_z J_x - i\hbar J_y) V_z \\ &= J_z J_x V_z - i\hbar J_y V_z \\ &= J_z (V_z J_x - i\hbar V_y) - i\hbar J_y V_z \\ &= J_z V_z J_x - i\hbar (J_z V_y + J_y V_z) \end{aligned} \qquad \text{(iii)}$$

elde edilir. (ii) ve (iii) bağıntıları taraf tarafa toplanırsa

$$J_x J_y V_y + J_x J_z V_z = J_y V_y J_x + J_z V_z J_x$$

veyâ

$$J_x (J_y V_y + J_z V_z) = (J_y V_y + J_z V_z) J_x \qquad \text{(iv)}$$

sonucuna varılır. Böylece

$$J_x (\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}) = (\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}) J_x \qquad \text{(v)}$$

bağıntısı ispatlandı. (i) ve (v) bağıntılarının sonucu olarak (EK.1.4.24a,b) bağıntıları

$$K_y J_z - K_z J_y = (\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}) J_x - V_x (\mathbf{J}^2) \qquad \text{(EK.1.4.24a)}$$

$$J_y K_z - J_z K_y = (\mathbf{J}^2) V_x - (\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}) J_x \qquad \text{(EK.1.4.24b)}$$

şekillerinde de yazılabilir. Kartezyen x bileşenleri için yazılan bu bağıntıların vektörel şekilleri olarak

$$\mathbf{K} \times \mathbf{J} = (\mathbf{J} \cdot \mathbf{V})\mathbf{J} - \mathbf{V}(\mathbf{J}^2) \qquad \text{(EK.1.4.25a)}$$

$$\mathbf{J} \times \mathbf{K} = (\mathbf{J}^2)\,\mathbf{V} - (\mathbf{J} \cdot \mathbf{V})\,\mathbf{J} \qquad \text{(EK.1.4.25b)}$$

sonuçlarına varılır.

(EK.1.4.20) ve (EK.1.4.25a,b) bağıntılarından j ye ait seçim kuralları elde edilebilir. (EK.1.4.20) bağıntısı herhangi bir **V** vektör operatörü için doğru olduğundan, $\mathbf{V} \equiv \mathbf{K}$ olarak seçilebilir ve

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{K}] = i\hbar\,(\mathbf{K} \times \mathbf{J} - \mathbf{J} \times \mathbf{K}) \qquad \text{(EK.1.4.26)}$$

yazılabilir. Öte yandan, gene (EK.1.4.20) bağıntısına göre

$$2\,i\hbar\,\mathbf{K} = [\mathbf{J}^2, \mathbf{V}]$$

olduğu için,

$$2\,i\hbar\,[\mathbf{J}^2, \mathbf{K}] = [\mathbf{J}^2, [\mathbf{J}^2, \mathbf{V}]] = -\,2\hbar^2\,(\mathbf{K} \times \mathbf{J} - \mathbf{J} \times \mathbf{K})$$

veyâ

$$[\mathbf{J}^2, [\mathbf{J}^2, \mathbf{V}]] = 2\hbar^2\,(\mathbf{J} \times \mathbf{K} - \mathbf{K} \times \mathbf{J}) \qquad \text{(EK.1.4.26a)}$$

bulunur. Eğer (EK.1.4.25a,b) bağıntıları (EK.1.4.26a) bağıntısında yerlerine yazılırsa

$$[\mathbf{J}^2, [\mathbf{J}^2, \mathbf{V}]] = 2\hbar^2\,[(\mathbf{J}^2)\,\mathbf{V} - 2\,(\mathbf{J} \cdot \mathbf{V})\,\mathbf{J} + \mathbf{V}\,(\mathbf{J}^2)] \qquad \text{(EK.1.4.27)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntının sağ yanındaki ikinci terimde $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$ bir skaler operatör olduğu için, matris temsili hem m ye hem de j ye göre köşegenseldir. Ayrıca, **J** operatörünün matris temsili de j ye göre köşegenseldir. O hâlde, eğer

$$(\mathbf{V})_{j'j} = (\psi_{j'm'}, \mathbf{V}\,\psi_{jm}) \qquad \text{(EK.1.4.28)}$$

şeklindeki bir matris temsili kullanılırsa,

$$j' \neq j \text{ için}: \quad (\mathbf{J})_{j'j} = (\psi_{j'm'}, \mathbf{J}\,\psi_{jm}) = 0 \qquad \text{(EK.1.4.28a)}$$

olur ve böylece (EK.1.4.27) bağıntısının matris temsilindeki ifâdesinde $j' \neq j$ için ikinci terim ortadan kalkar. O hâlde, $j' \neq j$ için,

$$[\mathbf{J}^2, [\mathbf{J}^2, \mathbf{V}]]_{j'j} = 2\hbar^2\,[(\mathbf{J}^2)\,\mathbf{V} + \mathbf{V}\,(\mathbf{J}^2)]_{j'j} \qquad \text{(EK.1.4.29)}$$

sonucuna varılır. Ayrıca,

$$j' = j \text{ için}: \quad [\mathbf{J}^2, [\mathbf{J}^2, \mathbf{V}]]_{jj} = 0 \qquad \text{(EK.1.4.29a)}$$

olduğu da gösterilebilir. Şimdi kısalık için,

$$\beta = \mathbf{J}^2 \qquad \text{(EK.1.4.30)}$$

skaler operatörünü tanımlayalım. O hâlde, β operatörünün matris elemanları

$$\beta_{j'j} = \hbar^2 j(j+1)\,\delta_{j'j} \qquad \text{(EK.1.4.31a)}$$

şeklindedir. Eğer gene kısalık için,

$$\lambda = j(j+1), \qquad \lambda' = j'(j'+1) \qquad \text{(EK.1.4.31b)}$$

sayıları tanımlanırsa, $\beta_{j'j}$ matris elemanları

$$\beta_{\lambda'\lambda} = \hbar^2 \lambda\, \delta_{\lambda'\lambda} \qquad \text{(EK.1.4.31c)}$$

şeklinde yazılabilir. Şüphesiz buradan, iki matrisin çarpımı kuralını uygulayarak

$$\beta^2_{\lambda'\lambda} = \hbar^4 \lambda^2\, \delta_{\lambda'\lambda} \qquad \text{(EK.1.4.31d)}$$

bağıntısı elde edilir. Öte yandan (EK.1.4.29) bağıntısı, (EK.1.4.30) ve (EK.1.4.31b) bağıntılarını kullanarak

$$\lambda' \neq \lambda \text{ için: } \quad [\beta\,,[\beta\,,V]]_{\lambda'\lambda} = 2\hbar^2(\beta V + V\beta)_{\lambda'\lambda} \qquad \text{(EK.1.4.32)}$$

şeklinde yazılabilir. Ayrıca,

$$\begin{aligned}[\beta\,,[\beta\,,V]] &= \beta(\beta V - V\beta) - (\beta V - V\beta)\beta \\ &= \beta^2 V - \beta V\beta - \beta V\beta + V\beta^2 \\ &= \beta^2 V - 2\beta V\beta + V\beta^2\end{aligned}$$

olduğu için (EK.1.4.32) bağıntısı, $\lambda' \neq \lambda$ için

$$(\beta^2 V)_{\lambda'\lambda} - 2(\beta V\beta)_{\lambda'\lambda} + (V\beta^2)_{\lambda'\lambda} = 2\hbar^2[(\beta V)_{\lambda'\lambda} + (V\beta)_{\lambda'\lambda}] \qquad \text{(EK.1.4.32a)}$$

şeklinde de yazılabilir. Öte yandan, (EK.1.4.31c,d) bağıntılarını kullanarak, aşağıdaki matris çarpımı işlemleri yapılabilir:

$$(\beta^2 V)_{\lambda'\lambda} = \hbar^4 \sum_s \lambda'^2\, \delta_{\lambda's} (V)_{s\lambda} = \hbar^4 \lambda'^2 (V)_{\lambda'\lambda}$$

$$(\beta V\beta)_{\lambda'\lambda} = \hbar^4 \sum_p \sum_q \lambda'\, \delta_{\lambda'p} (V)_{pq}\, \lambda\, \delta_{q\lambda} = \hbar^4 \lambda'\lambda (V)_{\lambda'\lambda}$$

$$(V\beta^2)_{\lambda'\lambda} = \hbar^4 \sum_s (V)_{\lambda's} \lambda^2\, \delta_{s\lambda} = \hbar^4 \lambda^2 (V)_{\lambda'\lambda}$$

$$(\beta V)_{\lambda'\lambda} = \hbar^2 \sum_s \lambda'\, \delta_{\lambda's} (V)_{s\lambda} = \hbar^2 \lambda' (V)_{\lambda'\lambda}$$

$$(V\beta)_{\lambda'\lambda} = \hbar^2 \sum_s (V)_{\lambda's}\, \beta\, \delta_{s\lambda} = \hbar^2 \lambda (V)_{\lambda'\lambda}$$

Bu işlemlerin sonuçları (EK.1.4.32a) bağıntısında yerlerine yazılırsa, $\lambda' \neq \lambda$ için

$$(\lambda'^2 - 2\lambda'\lambda + \lambda^2)(V)_{\lambda'\lambda} = 2(\lambda' + \lambda)(V)_{\lambda'\lambda} \qquad \text{(EK.1.4.33)}$$

bağıntısı bulunur. Bu bağıntıdan gene $\lambda' \neq \lambda$ için,

$$(V)_{\lambda'\lambda} \neq 0 \text{ için: } \quad (\lambda' - \lambda)^2 - 2(\lambda' + \lambda) = 0 \qquad \text{(EK.1.4.34)}$$

bağıntısı elde edilir. (EK.1.4.31b) bağıntısını kullanarak, ve

$$\lambda' - \lambda = (j' - j)(j' + j + 1)$$

olduğu için, (EK.1.4.34) bağıntısı, $j' \neq j$ olmak üzere

$$(\mathbf{V})_{j'j} \neq 0 \text{ için: } \quad (j' - j)^2 (j' + j + 1)^2 - 2(j'^2 + j^2 + j' + j) = 0 \qquad \text{(EK.1.4.35)}$$

şeklini alır. Şimdi bu denklemin sol yanını çarpanlara ayıralım. Bu amaçla kısalık için,

$$x = j' - j = \Delta j, \qquad y = j' + j \qquad \text{(EK.1.4.35a)}$$

yazalım. Bu bağıntılardan hemen

$$x^2 + y^2 = 2(j'^2 + j^2) \qquad \text{(EK.1.4.35b)}$$

elde edilir ve aşağıdaki işlemler yapılabilir :

$$x^2 (y + 1)^2 - (x^2 + y^2 + 2y) = 0$$

$$x^2 (y^2 + 2y + 1) - (x^2 + y^2 + 2y) = 0$$

$$x^2 (y^2 + 2y) - (y^2 + 2y) = 0$$

$$(y^2 + 2y)(x^2 - 1) = 0$$

$$(y + 2)\, y\, (x - 1)(x + 1) = 0$$

bulunur. (EK.1.4.35a) bağıntıları bu bağıntıda yerlerine yazılırsa, $j' \neq j$ olmak üzere,

$$(\mathbf{V})_{j'j} \neq 0 \text{ için: } \quad (j' + j + 2)(j' + j)(j' - j - 1)(j' - j + 1) = 0 \qquad \text{(EK.1.4.36)}$$

sonucuna varılır. Bu bağıntıda,

$$j' \geqq 0, \quad j \geqq 0 \text{ olduğu için: } j' + j + 2 > 0,$$

$$j' \neq j \text{ olduğu için: } j' + j > 0$$

elde edilir. O hâlde

$$j' \neq j \text{ ve } (\mathbf{V})_{j'j} \neq 0 \text{ için: } \quad (j' - j - 1)(j' - j + 1) = 0 \qquad \text{(EK.1.4.37)}$$

sonucuna varılır. Böylece, j kuvantum sayısına ait olan ve

$$j' - j = \Delta j = \pm 1 \text{ için: } \quad (\mathbf{V})_{j'j} \neq 0 \qquad \text{(EK.1.4.38)}$$

şeklindeki seçim kurallarını elde etmiş oluyoruz. O hâlde, (EK.1.4.14a,b,c) bağıntıları ile birlikte, V vektör operatörüne ait seçim kuralları listesi tamamlandı.

YARARLANILAN KAYNAKLAR

METİN KİTAPLARI

AHMED YÜKSEL ÖZEMRE : **Çağdaş Fiziğe Giriş**; İst. Üniv. Fen Fak. Yay. No. 181 (1983).

AHMED YÜKSEL ÖZEMRE : **Klâsik Teorik Mekanik**; İst. Üniv. Fen Fak. Yay. No. 132 (1976).

MAX BORN, EMİL WOLF : **Principles of Optics**; Pergamon Press (1959).

GEORGE ARFKEN : **Mathematical Methods for Physicists**; Academic Press (1968).

AHMED YÜKSEL ÖZEMRE : **Fizikte Matematik Metotlar**; 2. Baskı : İst. Üniv. Fen Fak. Yay. No. 173 (1983).

JOHN DAVİD JACKSON (Çeviren : Ahmed Yüksel ÖZEMRE) : **Kuvantum Mekaniği Matematiğine Giriş**; İTÜ Nükleer Enerji Enstitüsü (1965).

P.A.M. DİRAC : **The Principles of Quantum Mechanics**; Oxford, at the Clarendon Press (1958).

DAVİD BOHM : **Quantum Theory**; Prentice-Hall, Inc. (1956).

LEONARD I. SCHİFF : **Quantum Mechanics**; Mc Graw-Hill Book Company, Inc. (1955).

JOHN L. POWELL, BERND CRASEMANN : **Quantum Mechanics**; Addison-Wesley Publishing Company, Inc. (1961).

M. E. ROSE : **Elementary Theory of Angular Momentum**; John Wiley and Sons, Inc. (1957).

J. Mc CONNELL : **Quantum Particle Dynamics**; North-Holland Publishing Company (1960).

BEHRAM KURŞUNOĞLU : **Modern Quantum Theory**; W.H. Freeman and Company (1962).

EUGEN MERZBACHER : **Quantum Mechanics**; John Wiley and Sons, Inc. (1961).

PROBLEM KİTAPLARI

D. TER HAAR : **Problems in Quantum Mechanics**; Pion Limited (1975).

F. CONSTANTİNESCU
E. MAGYARİ : **Problems in Quantum Mechanics**; Pergamon Press (1976).

EMİNE RIZAOĞLU : **Kuvantum Mekaniği Çözümlü Problem Kitabı**; İst. Üniv. Fen Fak. Yay. No. 171 (1987).

E R R A T A

(* işâretli satırlar sayfanın altından itibaren sayılacaktır).

Sayfa	Satır	Yanlış	Doğru
32	10	*vektörü*	*vektör*
89	3	$\sqrt{2mE/\hbar} = k$	$\sqrt{2mE} / \hbar = k$
120	14	(II.5)	(III.5)
125	14	$\mathbf{r}\, [c_1\, \psi_1(\mathbf{r}) + c_2\, \psi_1(\mathbf{r})] \equiv$	$\mathbf{r}\;\; c_1\, \psi_1(\mathbf{r}) + c_2\, \psi_2(\mathbf{r})] \equiv$
132	2*	Bir lineer ...	Bir A lineer ...
137	10*	$= p_x^2 + p_v^2 + p_z^2$	$= p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$
138	2*	*ati-HERMİTsel*	*anti-HERMİTsel*
141	13*	$C^+ = C - i\,B$	$C^+ = A - i\,B$
143	14	$(\mathbf{P} \,.\, \mathbf{Q}) = \ldots$	$(\mathbf{P} \,.\, \mathbf{Q})^+ = \ldots$
162	13*	operatörünfin	operatörünün
163	7*	*ortonommallik*	*ortonormallik*
173	11	partiye	pariteye
203	5*	$\mathbf{J}^2\, \psi_{jm} = j(j) + 1)\, \hbar^2\, \psi_{jm}$	$\mathbf{J}^2\, \psi_{jm} = j(j + 1)\, \hbar^2\, \psi_{jm}$
224	8	martiste	matriste
239	2	vektör	özvektör
312	12	$F_{11} = \frac{Z^6\, e^2}{\pi\, a_0^6} \int \int \ldots$	$F_{11} = \frac{Z^6\, e^2}{\pi^2\, a_0^6} \int \int \ldots$

İÇİNDEKİLER

I. BÖLÜME EK

LİNEER HARMONİK OSİLÂTÖR

II. BÖLÜM

İKİ PARÇACIĞA AİT SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİ

III. BÖLÜM

DİNAMİK DEĞİŞKENLER VE LİNEER OPERATÖRLER

IV. BÖLÜM

AÇISAL MOMENTUM VE SPİN

V. BÖLÜM

PARÇACIK SİSTEMLERİ

VI. BÖLÜM

MATRİS MEKANİĞİ

VII. BÖLÜM

PERTÜRBASYON TEORİSİ

EK. 1

SEÇİM KURALLARI