T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

SÜPERİNTEGRALLENEBİLİR KUANTUM OSİLATÖR VE COULOMB SİSTEMLERİ

HİLAL KARAGÖZ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Danışmanı: Prof.Dr.MİRZA KERİM

EDİRNE-2015

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

Prof. Dr. Mustafa ÖZCAN

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Bu tezin YÜKSEK LİSANS tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

Prof. Dr. Serap ŞENTÜRK DALGIÇ

Anabilim Dalı Başkanı

Bu tez tarafımca okunmuş , kapsamı ve niteliği açısından bir YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Mirza KERİM

Tez Danışmanı

Bu tez, tarafımızca okunmuş ve niteliği açısından FİZİK Anabilim Dalında bir YÜKSEK LİSANS tezi olarak oy birliği ile kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri	İmza
Prof.Dr.Mirza KERİM	
Doç.Dr.Mehmet SEZGİN	
Yrd.Doç.Dr.Ayşe ULUBAY SIDDIKİ	

Tarih: 04/09/2015

T.Ü.FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK YÜKSEK LİSANS PROGRAMI

DOĞRULUK BEYANI

İlgili tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını ve kullanılan tüm literatür bilgilerinin kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını beyan ederim.

04/09/2015

Hilal KARAGÖZ

Yüksek Lisans Tezi

Süperintegrallenebilir Kuantum Osilatör ve Coulomb Sistemleri

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu çalışmada matematiksel fizikte çok iyi bilinen kepler, hidrojen atomu ve harmonik osilatör sistemleri ele alınmaktadır. Maksimal süperintegrallenebilir olan bu sistemler beş bağımsız hareket integrallerine sahiptir. Klasik sistemler için bu hareket integralleri (Newton denklemini çözmeden) yörüngelerin bulunmasında; kuantum sistemler için ise (Schrödinger denklemini çözmeden) enerji spektrumunun bulunmasında kullanılmıştır.

Yıl : 2015

Sayfa Sayısı : 36

Anahtar Kelimeler : Coulomb Kuantum Sistemleri ; Kuantum Osilatör ; Maksimal Süperintegrallenebilir

Thesis Of Master

Superintegrable Quantum Oscillatör And Coulomb Systems

Trakya University Institute Of Natural Sciences

Physics The Name Of Department

ABSTRACT

In this master thesis we deal with the most well-known Hamiltonian systems in mathematical physics : the Kepler system , the hydrogen atom and the harmonic oscillator. These systems are maximally superintegrable and possess five independent integrals of motion for classical systems these integrals of motion are used to obtain the trajectories without solving Newton equation while for quantum ones they are used to obtain the energy spectrum without solving the Schrödinger equation.

Year : 2015

Number Of Pages : 36

Keywords : Coulomb Quantum Systems; Quantum Oscillator ; Maximal Superintegrability

TEŞEKKÜR

Bu çalışmayı hazırlamamda bana yol gösteren ve desteğini hiçbir zaman esirgemeyen danışmanım Prof. Dr. Mirza KERİM'e, çalışma arkadaşlarıma ve her zaman yanımda olan sevgili babam Ahmet Hüseyin Karagöz'e , annem Yurdanur Karagöz'e ve kardeşim Samet Karagöz'e teşekkürü bir borç bilirim.

HİLAL KARAGÖZ

İÇİNDEKİLER

ÖZET……..i

ABSTRACT…….ii

TEŞEKKÜR…….iii

İÇİNDEKİLER TABLOSU……iv

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ…….v

GİRİŞ…….1

BÖLÜM I- KEPLER-COULOMB PROBLEMİ…….2

1.1. Kepler Problemi…..…….2

1.2. Hidrojen Atomu……. ……8

BÖLÜM II. HARMONİK OSİLATÖR……..18

2.1. Klasik Harmonik Osilatör……18

2.2. Bir Boyutta Harmonik Osilatör……... …...…….21

2.3. Üç Boyutta Harmonik Osilatör…….29

SONUÇ……...……34

KAYNAKLAR……...……...35

ÖZGEÇMİŞ……...36

SİMGELER DİZİNİ

Bu çalışmada kullanılan simgeler aşağıda açıklamaları ile birlikte verilmiştir.

Simge	**Açıklamalar**
H	Hamiltonyen
Ψ	Dalga Fonksiyonu
p	Momentum
x	Konum
m	Kütle
ω	Açısal Frekans
$\hat{a}$	Yokedici İşlemci
$\hat{a}^{+}$	Yaratıcı İşlemci
E_n	Enerji Özdeğerleri
r	Radyal uzaklık ($r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$)

GİRİŞ

Bir sistemin hareket sabitlerinin sayısı sistemin serbestlik derecesinden büyük ise bu tür sisteme süperintegrallenebilir sistem denir. Genelde n boyutlu öklit uzayında kapalı bir sistem en fazla $2n$ -1 hareket sabitine sahip olabilir[1]. Buna göre süperintegrallenebilir klasik veya kuantum sistemi $1 \leq k \leq n-1$ olmak üzere $n+k$ tane bağımsız hareket sabitine sahip olabilir. $k=1$ ve $k=n-1$ durumları sırasıyla minimal süperintegrallenebilir ve maksimal süperintegrallenebilir sistemler olarak isimlendirilir. Özel olarak $n=3$ için süperintegrallenebilir sistem 4 veya 5 hareket sabitine sahiptir.

Klasik kepler problemi ve harmonik osilatör iyi bilinen maksimal süperintegrallenebilir sistemlerdir. Kepler-Coulomb sistemi için açısal momentum ve Laplace-Runge-Lenz vetörü [2,3,4] hareket sabiti iken, harmonik osilatör için ise açısal momentum ve kuadrupol tensörü hareket sabitleridir. Ek hareket sabitlerinin varlığı süperintegrallenebilir sistemlerin incelenmesini kolaylaştırır. Örneğin, maksimal süperintegrallenebilir klasik sistemlerin yörüngesi Newton denklemini çözmeden hesaplanabilir. Kuantum sistemleri için ise enerji spektrumu Schrödinger denklemini çözmeden bulunabilir.

Bu çalışmanın birinci bölümünde Kepler-Coulomb sistemi incelenmiştir. Hareket sabitleri kullanılarak klasik kepler problemi için hareket yörüngesi belirlenmiştir. Daha sonra bu hareket sabitlerinin kuantum benzerleri kullanılarak hidrojen atomunun spektrumu bulunmuştur. İkinci bölümde harmonik osilatör için hareket sabitleri kurulmuş ve böylece harmonik osilatör problemi cebirsel olarak çözülmüştür.

BÖLÜM I

KEPLER –COULOMB SİSTEMİ

Merkezcil alanların özel çeşitlerinden biri, $V(\vec{r})$ potansiyel enerjinin r ile kuvvetin ise r^2 ile ters orantılı olduğu Newton'un çekim alanı veya Coulomb elektrostatik alanıdır [1]:

$$V(\vec{r}) = -\frac{\alpha}{r} \tag{1.1}$$

Birincisinin yalnız çekim özelliği vardır. Yani $\alpha > 0$ dır. İkincisi ise hem çekici hem de itici özelliğe sahip olabilir. Yani $\alpha \gtrless 0$ dır.

Bu bölümde (1.1) potansiyelini klasik mekanikte (kepler problemi) ve kuantum mekaniğinde (hidrojen atomu) inceleyeceğiz.

1.1. Kepler Problemi

Denklem (1.1) potansiyeli için

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\vec{\nabla}V(\vec{r}) \tag{1.1.1}$$

Newton denklemi [1],

$$\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\alpha\frac{\vec{r}}{r^3} \tag{1.1.2}$$

olarak bulunur. Bundan sonra $m = 1$ alacağız. Şimdi

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2} - \frac{\alpha}{r} \tag{1.1.3}$$

hamilton ifadesinin hareket sabiti olduğunu gösterelim. Hareket sabiti olması için türevinin sıfıra eşit olması gerekir. Hamiltonun türevi

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\vec{p}^2 - \alpha\frac{d}{dt}\frac{1}{r} \tag{1.1.4}$$

dir. (1.1.4) ifadesindeki birinci terim ,

$$\frac{d\vec{p}^2}{dt} = -2\alpha\dot{\vec{r}}.\frac{\vec{r}}{r^3} \qquad ; \qquad \dot{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{dt} \tag{1.1.5}$$

şeklinde bulunur. (1.1.4) ifadesindeki ikinci terim ise

$$\frac{d}{dt}\frac{1}{r} = -\frac{\vec{r}.\dot{\vec{r}}}{r^3} \tag{1.1.6}$$

şeklinde elde edilir. Böylece (1.1.5) ve (1.1.6) denklemleri (1.1.4) denkleminde göz önüne alınırsa

$$\frac{d}{dt}\hat{H} = -\alpha\frac{\vec{r}.\dot{\vec{r}}}{r^3} + \alpha\frac{\vec{r}.\dot{\vec{r}}}{r^3}$$

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = 0 \tag{1.1.7}$$

hareket sabiti olarak bulunur. Bunun dışında bir noktasal parçacığa ait yörünge açısal momentumu [1];

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{1.1.8}$$

ve

$$\vec{A} = \vec{L} \times \vec{p} + \alpha\frac{\vec{r}}{r} \tag{1.1.9}$$

hareket sabitleri olduğunu gösterelim. Bunun için (1.1.8) eşitliğindeki açısal momentumun türevini alalım:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{p} + \vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} \tag{1.1.10}$$

Denklem (1.1.10) ‘daki birinci terim

$$\frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{p} = \vec{p} \times \vec{p}$$

vektörel çarpım özelliğinden dolayı sıfır olur. Denklem (1.1.10)’da ikinci terimde ise

$$\vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{r} \times \frac{d^2 r}{dt^2}$$

şeklindedir. Burada (1.1.2) eşitliği göz önüne alındığında

$$\vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = -\alpha\vec{r} \times \frac{\vec{r}}{r^3}$$

vektörel çarpım özelliğinden dolayı sıfır olur. Dolayısıyla,

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = 0 \qquad (1.1.11)$$

dir. O halde $\vec{L}$ hareket sabitidir. Şimdi (1.1.9) denkleminin türevini alalım:

$$\frac{d}{dt}\vec{A} = \frac{d}{dt}\left(\vec{L} \times \vec{P} + \alpha\frac{\vec{r}}{r}\right)$$

$$= \frac{d}{dt}\left(\vec{L} \times \vec{p}\right) + \alpha\frac{d}{dt}\frac{\vec{r}}{r} \qquad (1.1.12)$$

Bu denklemdeki birinci terim

$$\frac{d}{dt}\left(\vec{L} \times \vec{p}\right) = \frac{d\vec{L}}{dt} \times \vec{p} + \vec{L} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{L} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = (\vec{r} \times \vec{p}) \times \frac{d\vec{p}}{dt}$$

şeklindedir. Buradaki

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d^2 r}{dt^2} = -\alpha\frac{\vec{r}}{r^3}$$ olduğu için,

$$\frac{d}{dt}\left(\vec{L} \times \vec{p}\right) = -\frac{\alpha}{r^3}(\vec{r} \times \vec{p}) \times \vec{r}$$

bulunur. Burada

$$\left(\vec{a} \times \vec{b}\right) \times \vec{c} = \vec{b}(\vec{a}.\vec{c}) - \vec{a}\left(\vec{b}.\vec{c}\right) \qquad (1.1.13)$$

özelliği göz önüne alınırsa,

$$\frac{d}{dt}\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)=-\frac{\alpha}{r^3}\left[r^2\vec{p}-(\vec{r}.\vec{p})\vec{r}\right]$$

$$\frac{d}{dt}\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)=-\frac{\alpha}{r^3}\left[r^2\frac{d\vec{r}}{dt}-\left(\vec{r}.\frac{d\vec{r}}{dt}\right)\vec{r}\right]$$

$$=-\alpha\frac{r^2\dot{\vec{r}}-\left(\vec{r}.\dot{\vec{r}}\right)\vec{r}}{r^3} \qquad (1.1.14)$$

şeklinde bulunur. Denklem (1.1.12)'deki ikinci terim ise

$$\frac{d}{dt}\frac{\vec{r}}{r}=\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{r}\vec{r}\right)=\left(\frac{d}{dt}\frac{1}{r}\right)\vec{r}+\frac{1}{r}\frac{d}{dt}\vec{r}$$

dir. (1.1.6) bağıntısı göz önüne alındığında

$$\frac{d}{dt}\frac{\vec{r}}{r}=\frac{r^2\dot{\vec{r}}-\left(\vec{r}.\dot{\vec{r}}\right)\vec{r}}{r^3} \qquad (1.1.15)$$

şeklinde elde edilir. (1.1.14) ve (1.1.15) ifadelerini (1.1.12) denkleminde göz önüne aldığımızda

$$\frac{d}{dt}\vec{A}=-\alpha\frac{r^2\dot{\vec{r}}-\left(\vec{r}.\dot{\vec{r}}\right)\vec{r}}{r^3}+\alpha\frac{r^2\dot{\vec{r}}-\left(\vec{r}.\dot{\vec{r}}\right)\vec{r}}{r^3}$$

veya

$$\frac{d\vec{A}}{dt}=0 \qquad (1.1.16)$$

bulunarak $\vec{A}$ 'nın hareket sabiti olduğu görülür. Hareket sabitleri $\vec{L}$ ve $\vec{A}$

$$\vec{L}.\vec{A}=0 \qquad (1.1.17)$$

bağıntısını sağlamaktadır. Gerçekten

$$\vec{L}.\vec{A}=\vec{L}.\left\{\vec{L}\times\vec{p}+\alpha\frac{\vec{r}}{r}\right\}=\vec{L}.\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)+\alpha\frac{\vec{L}.\vec{r}}{r}$$

ifadesinde

$$\vec{a}.(\vec{b}\times\vec{c}) = \vec{c}.(\vec{a}\times\vec{b}) \tag{1.1.18}$$

özelliği göz önüne alındığında

$$\vec{L}.\vec{A} = \vec{p}.(\vec{L}\times\vec{L}) + \alpha\frac{\vec{L}.\vec{r}}{r}$$

olarak bulunur. Birinci terim vektörel çarpım özelliğinden dolayı sıfırdır. İkinci terimde (1.1.8) eşitliğini göz önüne alırsak

$$\vec{L}.\vec{A} = \alpha\frac{(\vec{r}\times\vec{p}).\vec{r}}{r}$$

elde ederiz. Burada tekrar (1.1.18) özelliğini kullanarak

$$\vec{L}.\vec{A} = \alpha\frac{\vec{p}.(\vec{r}\times\vec{r})}{r}$$

şeklinde yazabiliriz. Böylece vektörel çarpım özelliğinden

$$\vec{L}.\vec{A} = 0$$

bulunur.

Hareket sabitleri arasındaki diğer bir bağıntı [1]

$$\vec{A}^2 = 2H\vec{L}^2 + \alpha^2 \tag{1.1.19}$$

şeklindedir. Bu bağıntıyı doğrulamak için (1.1.9) bağıntısından $\vec{A}^2$ 'yi hesaplayalım:

$$\vec{A}^2 = \left(\vec{L}\times\vec{p}\right)^2 + 2\frac{\alpha}{r}\vec{r}.\left(\vec{L}\times\vec{p}\right) + \alpha^2 \tag{1.1.20}$$

vektör çarpımının (1.1.18) ve

$$\vec{a}\times\left(\vec{b}\times\vec{c}\right) = \vec{b}(\vec{a}.\vec{c}) - \vec{c}\left(\vec{a}.\vec{b}\right) \tag{1.1.21}$$

özellikleri göz önüne alınırsa,

$$\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)^2 = \left(\vec{L}\times\vec{p}\right).\left(\vec{L}\times\vec{p}\right) = \vec{L}.\left\{\vec{p}\times\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\right\}$$

$$= \vec{L}.\left\{\vec{L}\vec{p}^2 - \vec{p}\left(\vec{p}.\vec{L}\right)\right\} = \vec{L}^2\vec{p}^2 \tag{1.1.22}$$

ve

$$\vec{r}.\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)=-\vec{L}^2 \qquad (1.1.23)$$

olarak bulunur. Buna göre (1.1.20) bağıntısını

$$\vec{A}^2=\vec{L}^2\vec{p}^2-2\frac{\alpha}{r}\vec{L}^2+\alpha^2$$

şeklinde yazabiliriz. Burada (1.1.3) bağıntısı göz önüne alınırsa

$$\vec{A}^2=2H\vec{L}^2+\alpha^2$$

bulunur.

H , $\vec{L}$ ve $\vec{A}$ hareket sabitleri arasındaki (1.1.17) ve (1.1.19) bağıntılarından dolayı bağımsız hareket sabitlerinin sayısı 5 dir.

Şimdi yörüngenin denklemini elde edelim. Bunun için (1.1.9) bağıntısının her iki yanını $\vec{r}$ ile skaler çarpalım:

$$\vec{r}.\vec{A}=\vec{r}.\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)+\alpha\frac{r^2}{r}$$

Burada (1.1.18) özelliği göz önüne alınırsa,

$$\vec{r}.\vec{A}=\vec{L}.(\vec{p}\times\vec{r})+\alpha r$$

$$=-L^2+\alpha r \qquad (1.1.24)$$

veya

$$rA\cos\theta=-L^2+\alpha r \qquad (1.1.25)$$

olarak bulunur. Buna göre

$$r=\frac{\rho}{1-\varepsilon\cos\theta} \qquad (1.1.26)$$

Burada ρ ve ε büyüklükleri aşağıdaki şekilde tanımlanmıştır:

$$\rho=\frac{L^2}{\alpha}\quad,\quad \varepsilon=\frac{A}{\alpha} \qquad (1.1.27)$$

Denklem (1.1.26) odak noktası koordinat başlangıcında bulunan konik kesitin denklemidir; ρ bir parametre , ε ise dış merkezidir. Denklem (1.1.27) ve (1.1.19) dan ε için

$$\varepsilon=\sqrt{1+\frac{2HL^2}{\alpha^2}} \qquad (1.1.28)$$

formülü bulunur. Bu bağıntıdan görüldüğü gibi $H < 0$ olduğunda $\varepsilon < 1$ değerler alır ve hareketin yörüngesi sonlu harekete karşılık gelen elips olur.

1.2. Hidrojen Atomu

Pauli [5] makalesinde açısal momentum ve Laplace-Runge-Lenz vektörünün kuantum karşılığını kullanarak hidrojen atomunun spektrumunu (Schrödinger denklemi ortaya atılmadan önce) cebirsel olarak bulmuştur. Bu kısımda hidrojen atomunun spektrumu benzer yöntemle elde edilecektir.

Açısal momentum ve Laplace-Runge-Lenz vektörünün kuantum karşılığı sırasıyla [2,3,4] ,

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \tag{1.2.1}$$

$$\hat{\vec{A}} = \frac{1}{2}\left\{\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right\} + \alpha \frac{\hat{\vec{r}}}{r} \tag{1.2.2}$$

şeklinde yazılır. Önce bu operatörlerin hareket sabitleri olduğunu gösterelim. Genelde fiziksel bir B büyüklüğünün $< \hat{B} >$ beklenen değeri zamana bağlı olarak değişmektedir. Eğer $\hat{B}$ operatörü zamandan bağımsız ise B fiziksel büyüklüğün beklenen değerinin zaman içinde değişimi,

$$\frac{d < B >}{dt} = \frac{i}{\hbar} < \left[\hat{H}, \hat{B}\right] >$$

bağıntısıyla verilmektedir[6]. Burada H fiziksel sistemin hamiltoniyenidir. Eğer $\hat{B}$ ve $\hat{H}$ operatörleri sıra değiştiren operatörler ise B büyüklüğünün beklenen değeri zaman içinde değişmez. Kuantum mekaniğinde bu tür büyüklüklere hareket sabitleri veya hareket integralleri denir. Özel olarak, $\left[\hat{H}, \hat{H}\right] = 0$ olduğundan sistemin E enerjisi her zaman bir hareket sabitidir.

$\hat{A}_i$, i=1,2,3 operatörlerinin hareket integrali olduğunu gösterelim. Bunun için $\hat{H}$ ile $\hat{A}_i$ 'nin komutasyon bağıntılarını hesaplayalım. Önce $\hat{A}_i$ operatörünü konum ve momentum operatörleri cinsinden bulalım. $\hat{A}_i$'yi

$$\hat{A}_i = \frac{1}{2}\{\varepsilon_{ijk}\,\hat{L}_j\hat{p}_k - \varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_j\hat{L}_k\} + \alpha\frac{\hat{x}_i}{r} \tag{1.2.3}$$

şeklinde yazabiliriz. Burada ve daha sonralarda tekrarlanan indisler üzerinden toplama yapılacağı anlaşılmaktadır. $\hat{L}_k$ açısal momentum operatörü

$$\hat{L}_k = \varepsilon_{kij}\,\hat{x}_i\hat{p}_j \tag{1.2.4}$$

dir. Burada ε_{kij} anti simetrik tensördür. Bu bağıntı ε_{mnk} ile çarpılır ve

$$\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{kmn} = \delta_{im}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jm} \tag{1.2.5}$$

bağıntısı göz önüne alınırsa

$$\varepsilon_{mnk}\,\hat{L}_k = \left(\delta_{mi}\,\delta_{nj} - \delta_{mj}\,\delta_{ni}\right)\hat{x}_i\hat{p}_j$$

veya

$$\varepsilon_{mnk}\,\hat{L}_k = \hat{x}_m\hat{p}_n - \hat{x}_n\hat{p}_m \tag{1.2.6}$$

olur. Bağıntı (1.2.4)'teki açısal momentum operatörünü göz önüne alırsak (1.2.3) eşitliği

$$\hat{A}_i = \frac{1}{2}\{\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{jmn}\,\hat{x}_m\hat{p}_n\hat{p}_k - \varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{kmn}\,\hat{p}_j\hat{x}_m\hat{p}_n\} + \alpha\frac{\hat{x}_i}{r} \tag{1.2.7}$$

şeklinde yazılır. Burada sıra değiştirme bağıntısından elde edilen

$$\hat{p}_i\hat{x}_j = \hat{x}_j\hat{p}_i - i\hbar\delta_{ij} \tag{1.2.8}$$

eşitliği göz önüne alındığında

$$\hat{A}_i = \frac{1}{2}\{\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{jmn}\,\hat{x}_m\hat{p}_n\hat{p}_k - \varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{kmn}\,\hat{x}_m\hat{p}_j\hat{p}_n + i\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{kmn}\,\delta_{jm}\,\hat{p}_n\} + \alpha\frac{\hat{x}_i}{r} \tag{1.2.9}$$

elde edilir. (1.2.5) ve (1.2.6) bağıntılarına göre

$$\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{jmn}\,\hat{p}_n\hat{p}_k = \hat{p}_i\hat{p}_m - \delta_{im}\hat{p}_k\hat{p}_k$$

$$\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{kmn}\,\hat{p}_j\hat{p}_n = -\hat{p}_m\hat{p}_i + \delta_{im}\hat{p}_n\hat{p}_n$$

$$\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{kmn}\,\delta_{jm} = -2\delta_{in}$$

şeklinde bulunur. Bu sonuçlar (1.2.9) bağıntısında göz önüne alınırsa

$$\hat{A}_i = \frac{1}{2}\{\hat{x}_m\hat{p}_i\hat{p}_m - \delta_{im}\hat{X}_m\hat{p}_k\hat{p}_k + \hat{x}_m\hat{p}_m\hat{p}_i - \delta_{im}\hat{x}_m\hat{p}_n\hat{p}_n - 2i\delta_{in}\hat{p}_n\} + \alpha\frac{\hat{x}_i}{r}$$

elde edilir. $\hat{p}_i\hat{p}_m = \hat{p}_m\hat{p}_i$ olduğu için,

$$\hat{A}_i = \frac{1}{2}\{(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\hat{p}_i - \hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2 + (\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\hat{p}_i - \hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2 - 2i\hat{p}_i\} + \alpha\frac{\hat{x}_i}{r}$$

şeklindedir. Böylece

$$\hat{A}_i = (\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\hat{p}_i - \hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2 - i\hat{p}_i + \alpha\frac{\hat{x}_i}{r} \qquad (1.2.10)$$

şeklinde konum ve momentum cinsinden bulunur. $\hat{H}$ ile $\hat{A}_i$ 'nin komutasyon bağıntısı

$$[\hat{H}, \hat{A}_i\,] = \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2} - \frac{\alpha}{r}\,, (\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\hat{p}_i - \hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2 - i\hat{p}_i + \alpha\frac{\hat{x}_i}{r}\right]$$

$$[\hat{H}, \hat{A}_i\,] = \frac{1}{2}[\hat{\vec{p}}^2, (\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\hat{p}_i] - \frac{1}{2}[\hat{\vec{p}}^2\,,\, \hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2] - \frac{i}{2}[\hat{\vec{p}}^2, \hat{p}_i] + \frac{\alpha}{2}\left[\hat{\vec{p}}^2, \frac{\hat{x}_i}{r}\right] - \alpha\left[\frac{1}{r}\,, (\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\hat{p}_i\right]$$
$$+ \alpha\left[\frac{1}{r}\,, \hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2\right] + i\alpha\left[\frac{1}{r}\,, \hat{p}_i\right] - \alpha^2\left[\frac{1}{r}\,, \frac{\hat{x}_i}{r}\right] \qquad (1.2.11)$$

şeklinde yazılır. Burada

$$[\hat{\vec{p}}^2, (\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\hat{p}_i] = -2i\hat{\vec{p}}^2\hat{p}_i$$

$$[\hat{\vec{p}}^2\,,\, \hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2] = -2i\hat{\vec{p}}^2\hat{p}_i$$

$$[\hat{\vec{p}}^2, \hat{p}_i] = 0$$

$$\left[\hat{\vec{p}}^2, \frac{\hat{x}_i}{r}\right] = -i\hat{p}_i\frac{1}{r} + i(\hat{\vec{p}}.\hat{\vec{x}})\frac{\hat{x}_i}{r^3} - i\frac{1}{r}\hat{p}_i + i\frac{\hat{x}_i}{r^3}(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})$$

$$\left[\frac{1}{r}\,, (\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\hat{p}_i\right] = -i(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\frac{\hat{x}_i}{r^3} - i\frac{1}{r}\hat{p}_i$$

$$\left[\frac{1}{r}\,, \hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2\right] = -i\hat{x}_i\frac{(\hat{\vec{p}}.\hat{\vec{x}})}{r^3} - i\hat{x}_i\frac{(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})}{r^3}$$

$$\left[\frac{1}{r}\,,\hat{p}_i\right] = -i\,\frac{\hat{x}_i}{r^3}$$

$$\left[\frac{1}{r}\,,\frac{\hat{x}_i}{r}\right] = 0$$

bulunur. İşlemlerde

$$\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{C}}\right] = \hat{\mathrm{B}}\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{C}}\right] + \left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]\hat{\mathrm{C}} \qquad (1.2.12)$$

özelliği ,

$$\left[\hat{x}_j,\hat{p}_k\right] = i\delta_{jk} \quad , \quad \left[\hat{x}_j,\hat{x}_k\right] = 0 \quad , \quad \left[\hat{p}_j,\hat{p}_k\right] = 0 \qquad (1.2.13)$$

konum ve momentum sıra değiştirme bağıntıları ve

$$[\hat{p}_i, f(\vec{r})] = -i\,\frac{\partial}{\partial x_i} f(\vec{r}) \qquad (1.2.14)$$

eşitliği kullanılmıştır[6]. Bulduğumuz sonuçları denklem (1.2.11)'de göz önüne alırsak,

$$\left[\hat{H},\hat{A}_i\,\right] = 0 \qquad (1.2.15)$$

sonucunu elde edilir. Şimdi

$$\left[\hat{L}_i,\hat{A}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{A}_k$$

olduğunu gösterelim.

$$\left[\hat{L}_i,\hat{A}_j\right] = \left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\left[\hat{L}_i,\hat{p}_j\right] + \left[\hat{L}_i,\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\right]\hat{p}_j - \hat{x}_j\left[\hat{L}_i,\hat{\vec{p}}^2\right] - \left[\hat{L}_i,\hat{x}_j\right]\hat{\vec{p}}^2 - i\left[\hat{L}_i,\hat{p}_j\right] + \left[\hat{L}_i,\alpha\,\frac{\hat{x}_j}{r}\right] \qquad (1.2.16)$$

$\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)$, $\hat{\vec{p}}^2$, $\frac{1}{r}$ birer skaler operatörler olduğu için,

$$\left[\hat{L}_i,\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\right] = 0 \quad , \quad \left[\hat{L}_i,\hat{\vec{p}}^2\right] = 0 \ , \quad \left[\hat{L}_i,\frac{\hat{x}_j}{r}\right] = 0 \qquad (1.2.17)$$

dir. $\hat{\vec{p}}$ ve $\hat{\vec{r}}$ vektör operatörler olduğu için

$$\left[\hat{L}_i,\hat{p}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_k \qquad (1.2.18)$$

$$\left[\hat{L}_i, \hat{x}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{x}_k \tag{1.2.19}$$

dir. (1.2.17) - (1.2.19) ifadeleri denklem (1.2.16)'de göz önüne alınırsa

$$\left[\hat{L}_i, \hat{A}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{A}_k \tag{1.2.20}$$

bulunur. Şimdi $\left[\hat{A}_i, \hat{A}_j\right]$ $\hat{\vec{A}}$ operatörler arasında komutasyon bağıntılarını hesaplayalım.

$$\begin{aligned}\left[\hat{A}_i, \hat{A}_j\right] = &-\left[\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_i, \hat{x}_j\hat{\vec{p}}^2\right] - i\left[\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] + \alpha\left[\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_i, \frac{\hat{x}_j}{r}\right] - \left[\,\hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2, \left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_j\right] \\ &+ \left[\,\hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2, \hat{x}_j\hat{\vec{p}}^2\right] + i\left[\,\hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2, \hat{p}_j\right] - \alpha\left[\,\hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2, \frac{\hat{x}_j}{r}\right] - i\left[\hat{p}_i, \left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_j\right] \\ &+ i\left[\hat{p}_i, \hat{x}_j\hat{\vec{p}}^2\right] - i\alpha\left[\hat{p}_i, \frac{\hat{x}_j}{r}\right] + \alpha\left[\frac{\hat{x}_i}{r}, \left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_j\right] - \alpha\left[\frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{x}_j\hat{\vec{p}}^2\right] \\ &- i\alpha\left[\frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{p}_j\right]\end{aligned} \tag{1.2.21}$$

elde edilir. Denklem (1.2.21)'deki terimlerin çözümleri

$$\left[\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_i, \hat{x}_j\hat{\vec{p}}^2\right] = -i\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\delta_{ij}\hat{\vec{p}}^2 + i\hat{x}_j\hat{p}_i\hat{\vec{p}}^2$$

$$\left[\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = i\hat{p}_i\hat{p}_j$$

$$\left[\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_i, \frac{\hat{x}_j}{r}\right] = -i\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\frac{\delta_{ij}r^2 - \hat{x}_i\hat{x}_j}{r^3}$$

$$\left[\,\hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2, \left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_j\right] = -i\hat{x}_i\hat{p}_j\hat{\vec{p}}^2 + i\delta_{ij}\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{\vec{p}}^2$$

$$\left[\,\hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2, \hat{x}_j\hat{\vec{p}}^2\right] = -2i\hat{x}_i\hat{p}_j\hat{\vec{p}}^2 + 2i\hat{x}_j\hat{p}_i\hat{\vec{p}}^2$$

$$\left[\,\hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2, \hat{p}_j\right] = i\delta_{ij}\hat{\vec{p}}^2$$

$$\left[\,\hat{x}_i\hat{\vec{p}}^2, \frac{\hat{x}_j}{r}\right] = -2i\frac{1}{r}\hat{x}_i\hat{p}_j + 2i\frac{\hat{x}_i\hat{x}_j}{r^3}\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right) + 2\frac{\hat{x}_i\hat{x}_j}{r^3}$$

$$\left[\hat{p}_i, \left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_j\right] = i\hat{p}_i\hat{p}_j$$

$$\left[\hat{p}_i, \hat{x}_j\hat{\vec{p}}^2\right] = -i\delta_{ij}\hat{\vec{p}}^2$$

$$\left[\hat{p}_i, \frac{\hat{x}_j}{r}\right] = -i\frac{\delta_{ij}r^2 - \hat{x}_i\hat{x}_j}{r^3}$$

$$\left[\frac{\hat{x}_i}{r}, (\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\hat{p}_j\right] = i(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\frac{\delta_{ij}r^2 - \hat{x}_i\hat{x}_j}{r^3}$$

$$\left[\frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{x}_j\hat{\vec{p}}^2\right] = 2i\left\{\frac{1}{r}\hat{x}_j\hat{p}_i - \frac{\hat{x}_i\hat{x}_j}{r^3}(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\right\} - 2\frac{\hat{x}_j}{r^3}$$

$$\left[\frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{p}_j\right] = i\frac{\delta_{ij}r^2 - \hat{x}_i\hat{x}_j}{r^3}$$

şeklindedir. İşlemlerde (1.2.13) , (1.2.14) eşitlikleri ve

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{A}\hat{C}[\hat{B}, \hat{D}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{D}\hat{B} + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\hat{B} \qquad (1.2.22)$$

ile (1.2.12) özellikleri kullanılmıştır. Bulduğumuz sonuçlar (1.2.21) ifadesinde göz önüne alınırsa,

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -i(\hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{x}_j\hat{p}_i)\hat{\vec{p}}^2 + i\frac{2\alpha}{r}(\hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{x}_j\hat{p}_i) + i\alpha(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}})\frac{\delta_{ij}r^2 - \hat{x}_i\hat{x}_j}{r^3}$$

şeklinde bulunur. Birinci ve ikinci terimde (1.2.6) bağıntısı göz önüne alındığında

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{\vec{p}}^2 + i\frac{2\alpha}{r}\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$$

veya

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -2i\varepsilon_{ijk}\hat{H}\hat{L}_k \qquad (1.2.23)$$

olarak bulunur. Böylece $\hat{\vec{A}}$ ve $\hat{\vec{L}}$ operatörleri aşağıdaki bağıntıları sağlamaktadır.

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \qquad (1.2.24)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{A}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{A}_k \qquad (1.2.25)$$

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = 2i\hat{H}\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \qquad (1.2.26)$$

Burada,

$$\hat{\vec{N}} = \frac{1}{\sqrt{-2\hat{H}}}\hat{\vec{A}} \tag{1.2.27}$$

operatörünü tanımladığımızda (1.2.24) - (1.2.26) bağıntıları

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{L}_k \tag{1.2.28}$$

$$\left[\hat{L}_i, \hat{N}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{N}_k \tag{1.2.29}$$

$$\left[\hat{N}_i, \hat{N}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{L}_k \tag{1.2.30}$$

şeklini alır.

Şimdi (1.1.17) bağıntısının kuantum karşılığını bulalım. Bunun için

$$\left[\hat{x}_i, \hat{\vec{p}}^2\right] = 2i\hat{p}_i \tag{1.2.31}$$

bağıtısını göz önüne alarak (1.2.10)'u

$$\hat{A}_i = \left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_i - \hat{\vec{p}}^2\hat{x}_i - 3i\hat{p}_i + \alpha\frac{\hat{x}_i}{r} \tag{1.2.32}$$

şeklinde yazalım. Ayrıca (1.2.4) bağıntısını kullanarak açısal momentumu

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_k\hat{x}_j \tag{1.2.33}$$

şeklinde yazalım. Denklem (1.2.32) göz önüne alınırsa,

$$\hat{\vec{A}}.\hat{\vec{L}} = \hat{A}_i.\hat{L}_i$$

$$= \left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_i\hat{L}_i - \hat{\vec{p}}^2\hat{x}_i\hat{L}_i - 3i\hat{p}_i\hat{L}_i + \frac{\alpha}{r}\hat{x}_i\hat{L}_i$$

olarak bulunur. Birinci ve üçüncü terimlerde (1.2.33) bağıntısı, ikinci ve dördüncü terimlerde ise (1.2.4) bağıntısı kullanılırsa

$$\hat{\vec{A}}.\hat{\vec{L}} = \varepsilon_{ijk}\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)\hat{p}_i\hat{p}_k\hat{x}_j - \varepsilon_{ijk}\,\hat{\vec{p}}^2\hat{x}_i\hat{x}_j\hat{p}_k - 3i\varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_i\hat{p}_k\hat{x}_j + \frac{\alpha}{r}\varepsilon_{ijk}\,\hat{x}_i\hat{x}_j\hat{p}_k \tag{1.2.34}$$

ε_{ijk} anti simetrik bir tensör , $\hat{x}_i\hat{x}_j$ ve $\hat{p}_i\hat{p}_k$ ise simetrik bir tensör olduğu için eşitliğin sağ tarafı sıfır olur. Buna göre,

$$\hat{\vec{A}}.\hat{\vec{L}} = 0 \tag{1.2.35}$$

olarak bulunur. Ayrıca

$$\hat{\vec{A}}^2 = -\hat{\vec{p}}^2\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)^2 + i\hat{\vec{p}}^2\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right) + 2\frac{\alpha}{r}\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right)^2 - 2i\frac{\alpha}{r}\left(\hat{\vec{x}}.\hat{\vec{p}}\right) + \hat{\vec{p}}^2\hat{\vec{x}}^2\hat{\vec{p}}^2 - 2\frac{\alpha}{r}\hat{\vec{x}}^2\hat{\vec{p}}^2 + \hat{\vec{p}}^2 - \frac{\alpha}{r} + \alpha^2 \tag{1.2.36}$$

ve

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{\vec{x}}^2\hat{\vec{p}}^2 - \left(\hat{\vec{x}}\hat{\vec{p}}\right)^2 + i\left(\hat{\vec{x}}\hat{\vec{p}}\right) \tag{1.2.37}$$

göz önüne alınırsa (1.1.19) bağıntısının kuantum karşılığı

$$\hat{\vec{A}}^2 = 2\hat{H}\hat{\vec{L}}^2 + 2\hat{H} + \alpha^2 \tag{1.2.38}$$

olarak bulunur.

Elde edilen bağıntılar kullanılarak $\hat{H}$ hamiltoniyeninin spektrumunu bulabiliriz. Bunun için (1.2.38) bağıntısını N operatörü (bkz (1.2.27)) cinsinden yazalım:

$$-2\hat{H}\hat{N}^2 = 2\hat{H}\hat{L}^2 + 2\hat{H} + \alpha^2 \tag{1.2.39}$$

Buna göre,

$$\hat{H} = -\frac{\alpha^2}{2\left(\hat{\vec{L}}^2 + \hat{\vec{N}}^2 + 1\right)} \tag{1.2.40}$$

olarak bulunur.

Yeni $\hat{\vec{J}}^{(1)}$ ve $\hat{\vec{J}}^{(2)}$operatörleri

$$\hat{\vec{J}}^{(1)} = \frac{\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{N}}}{2} \quad , \quad \hat{\vec{J}}^{(2)} = \frac{\hat{\vec{L}} - \hat{\vec{N}}}{2} \tag{1.2.41}$$

şeklinde tanımlayarak (1.2.28) - (1.2.30) bağıntılarına göre

$$\left[\hat{J}_i^{(1)}, \hat{J}_j^{(1)}\right] = i\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k^{(1)} \tag{1.2.42}$$

$$\left[\hat{J}_i^{(2)}, \hat{J}_j^{(2)}\right] = i\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k^{(2)} \tag{1.2.43}$$

$$\left[\hat{J}_i^{(1)}, \hat{J}_j^{(2)}\right] = 0 \tag{1.2.44}$$

olarak buluruz. Dolayısıyla $\hat{\vec{J}}^{(1)}$ ve $\hat{\vec{J}}^{(2)}$ açısal momentumunun sağladığı bağıntıları sağlamaktadır. Buna göre $\left(\hat{\vec{J}}^{(1)}\right)^2$ ve $\left(\hat{\vec{J}}^{(2)}\right)^2$ operatörlerinin özdeğerleri sırasıyla, $j^{(1)}\left(j^{(1)}+1\right)$ ve $j^{(2)}\left(j^{(2)}+1\right)$, $j^{(i)} = 0$, $\frac{1}{2}$, 1, $\frac{3}{2}$, ... şeklindedir.

$$\left(\hat{\vec{J}}^{(1)}\right)^2 \psi = j^{(1)}\left(j^{(1)}+1\right)\psi$$

$$\left(\hat{\vec{J}}^{(2)}\right)^2 \psi = j^{(2)}\left(j^{(2)}+1\right)\psi$$

Ayrıca (1.2.41) ve (1.2.35) bağıntısından

$$\hat{\vec{L}}^2 + \hat{\vec{N}}^2 = 2\left\{\left(\hat{\vec{J}}^{(1)}\right)^2 + \left(\hat{\vec{J}}^{(2)}\right)^2\right\} \tag{1.2.45}$$

$$\hat{\vec{N}}.\hat{\vec{L}} = \left(\hat{\vec{J}}^{(1)}\right)^2 - \left(\hat{\vec{J}}^{(2)}\right)^2 = 0 \tag{1.2.46}$$

bulunur.

$$\left(\hat{\vec{J}}^{(1)}\right)^2 = \left(\hat{\vec{J}}^{(2)}\right)^2$$

olduğundan bu operatörlerin özdeğeri

$$j^{(1)} = j^{(2)} = j$$

dir. (1.2.45) bağıntısı (1.2.40) bağıntısında göz önüne alınırsa,

$$\hat{H} = -\frac{\alpha^2}{4\left\{\left(\hat{\vec{J}}^{(1)}\right)^2 + \left(\hat{\vec{J}}^{(2)}\right)^2 + \frac{1}{2}\right\}} \tag{1.2.47}$$

bulunur. Buna göre enerji özdeğerlerini

$$E = -\frac{\alpha^2}{4\left\{\mathrm{j(j+1)} + \mathrm{j(j+1)} + \frac{1}{2}\right\}}$$

veya

$$E = -\frac{\alpha^2}{2(2j+1)^2} \qquad ; \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots. \tag{1.2.48}$$

olarak buluruz. $2j+1$ yerine n yazılırsa

$$E = -\frac{\alpha^2}{2n^2} \qquad ; \quad n = 1,2,3 \ldots \tag{1.2.49}$$

olarak buluruz.

BÖLÜM II

HARMONİK OSİLATÖR

Bir denge konumu etrafında harmonik salınımlar yapan bir parçacığın hareketi, fiziğin en temel problemlerinden birini oluşturur. Değişik bir çok sistemin (diatomik, moleküllerin titreşimi, kristal örgülerde atomların veya çekirdek içinde nükleonların salınımları… vs) temel yapısı bir harmonik salınıcı problemidir. Moleküllerde, kristal yapılarda atomların denge konumlarının civarındaki titreşim hareketlerinin ve bir kovuk içerisindeki elektromanyetik alan salınımlarının kuantum mekaniksel incelemelerinde harmonik salınıcı önemli bir rol oynar. Ayrıca harmonik osilatör, özdeğer problemi tam çözülebilen belli başlı problemlerden olduğundan, çözümü zor problemler için sık başvurulan önemli bir modeldir.

2.1. Klasik Harmonik Osilatör

Harmonik osilatör için Newton denklemi

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\omega^2 m\vec{r} \tag{2.1.1}$$

şeklindedir. Burada ω büyüklüğü,

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{2.1.2}$$

olarak tanımlanmıştır. Aşağıdaki niceliklerin hareket sabitleri olduğunu görmek zor değildir:

$$H = \frac{1}{2m}({p_1}^2 + {p_2}^2 + {p_3}^2) + \frac{\omega^2 m}{2}({x_1}^2 + {x_2}^2 + {x_3}^2) \tag{2.1.3}$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{2.1.4}$$

$$A_{ij} = \frac{1}{2m}\left(p_i p_j + m^2\omega^2 x_i x_j\right) \tag{2.1.5}$$

Örneğin A_{ij} simetrik tensörünün hareket sabiti olduğunu gösterelim. A_{ij} 'nin zamana göre türevi alınırsa,

$$\frac{dA_{ij}}{dt} = \frac{1}{2m}\left(\frac{dp_i}{dt}p_j + p_i\frac{dp_j}{dt} + m^2\omega^2\frac{dx_i}{dt}x_j + m^2\omega^2 x_i\frac{dx_j}{dt}\right) \tag{2.1.6}$$

olarak bulunur. Burada (2.1.1) denklemi ve

$$p_i = m\frac{dx_i}{dt} \tag{2.1.7}$$

bağıntısı göz önüne alınırsa

$$\frac{dA_{ij}}{dt} = \frac{1}{2m}\left(-\omega^2 m x_i p_j - \omega^2 m p_i x_j + m\omega^2 p_i x_j + m\omega^2 x_i p_j\right) = 0$$

bulunur.

H , $\vec{L}$ ve A_{ij} hareket sabitleri arasında aşağıdaki bağıntılar mevcuttur:

$$A_{11} + A_{22} + A_{33} = H \tag{2.1.8}$$

$$\sum_{j=1}^{3} A_{ij} L_j = 0 \tag{2.1.9}$$

Bundan dolayı bağımsız hareket sabitlerinin sayısı $9 - 4 = 5$ 'dir.

Şimdi (2.1.9) bağıntısını doğrulayalım. Açısal momentumun

$$L_j = \sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3} \varepsilon_{jmn}\, x_m p_n \tag{2.1.10}$$

ifadesi göz önüne alınırsa,

$$\sum_{j=1}^{3} A_{ij} L_j = \sum_{j=1}^{3}\sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3}\{\varepsilon_{jmn}\, x_m p_i p_j p_n + \omega^2 \varepsilon_{jmn}\, x_i x_j x_m p_n\}$$

yazabiliriz. ε_{jmn} tensörü antisimetrik fakat $p_j p_n$ ve $x_j x_m$ tensörü simetrik olduğu için

$$\sum_{j=1}^{3} A_{ij} L_j = 0$$

olarak buluruz.

Şimdi hareket yörüngesini bulalım. Her merkezcil alanda olduğu gibi hareket bir düzlemdedir ve bu düzlem xy düzlemi olsun. A_{11} ve A_{22} hareket sabitlerinin

$$A_{11} = \frac{1}{2m}({p_x}^2 + m^2\omega^2 x^2) \tag{2.1.11}$$

$$A_{22} = \frac{1}{2m}\left({p_y}^2 + m^2\omega^2 y^2\right) \tag{2.1.12}$$

ifadesinden

$$x = \sqrt{\frac{2A_{11}}{m\omega^2}}\sin(\omega t + \alpha) \tag{2.1.13}$$

$$y = \sqrt{\frac{2A_{22}}{m\omega^2}}\sin(\omega t + \beta) \tag{2.1.14}$$

veya

$$x = a\cos\varphi \tag{2.1.15}$$

$$y = b\cos(\varphi + \delta)$$

$$= b\cos\delta\cos\varphi - b\sin\delta\sin\varphi \tag{2.1.16}$$

olarak buluruz. Burada

$$a = \sqrt{\frac{2A_{11}}{m\omega^2}} \quad , \quad b = \sqrt{\frac{2A_{22}}{m\omega^2}} \quad , \quad \varphi = \omega x + \alpha \quad , \quad \delta = \beta - \alpha \tag{2.1.17}$$

olarak tanımlanmıştır. (2.1.15) ve (2.1.16) bağıntılarını $\sin\varphi$ ve $\cos\varphi$ 'ye göre çözer ve karelerinin toplamını bire eşitlersek hareket yörüngesini

$$\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}-\frac{2xy}{ab}\cos\delta=\sin^2\delta \tag{2.1.18}$$

olarak buluruz. Bu merkezi koordinat başlangıcında bulunan bir elipsin denklemidir. $\delta=0$ veya π olursa yörünge bir doğru parçasına dönüşür. Ayrıca (2.1.13) ve (2.1.14) bağıntıları

$$A_{12}=\frac{1}{2m}\left(p_x p_y+m^2\omega^2 xy\right)$$

ifadesinde göz önüne alınırsa,

$$A_{12}=\sqrt{A_{11}A_{22}}\cos\delta$$

veya

$$\cos\delta=\frac{A_{12}}{\sqrt{A_{11}A_{22}}} \tag{2.1.19}$$

olarak bulunur.

2.2. Bir Boyutta Harmonik Osilatör

Harmonik osilatör kuantum mekaniğinde önemli bir yere sahiptir. Kuantum mekaniksel harmonik osilatörü problemini yaratıcı ve yokedici işlemci yöntemleriyle çözelim ve dalga fonksiyonlarını elde edelim.

Dirac tarafından geliştirilen yaratıcı-yokedici işlemci yöntemi Schrödinger denklemini çözmemize gerek kalmadan enerjinin özdeğerlerini bulmamızı sağlar. $\hat{a}$ (yokedici) ve $\hat{a}^+$ (yaratıcı) işlemcilerini ,

$$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \tag{2.2.1}$$

$$\hat{a}^{+} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \tag{2.2.2}$$

şeklinde tanımlarız. $\hat{x}$ ve $\hat{p}$ işlemcileri

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \quad , \qquad [\hat{x},\hat{x}] = 0 \quad , \qquad [\hat{p},\hat{p}] = 0 \tag{2.2.3}$$

sıra değiştirme bağıntısına uyar. $\hat{a}$ ve $\hat{a}^{+}$ işlemcilerinin komutasyon bağıntısını hesaplayalım:

$$[\hat{a},\hat{a}^{+}] = \frac{m\omega}{2\hbar}\left[\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}, \hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right] \tag{2.2.4}$$

Burada,

$$\left[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C} + \hat{D}\right] = \left[\hat{A},\hat{C}\right] + \left[\hat{A},\hat{D}\right] + \left[\hat{B},\hat{C}\right] + \left[\hat{B},\hat{D}\right] \tag{2.2.5}$$

özelliğini kullanarak (2.2.4) bağıntısını

$$[\hat{a},\hat{a}^{+}] = \frac{m\omega}{2\hbar}\left\{[\hat{x},\hat{x}] - \frac{i}{m\omega}[\hat{x},\hat{p}] + \frac{i}{m\omega}[\hat{p},\hat{x}] + \frac{1}{m\omega}[\hat{p},\hat{p}]\right\} \tag{2.2.6}$$

şeklinde yazabiliriz. (2.2.6) denkleminde (2.2.3) sıra değiştirme bağıntıları yerine yazıldığında

$$[\hat{a},\hat{a}^{+}] = 1 \tag{2.2.7}$$

olarak bulunur. Bir $\hat{a}$ işlemcisi hermitsel eşleniği $\hat{a}^{+}$ işlemcisiyle (2.2.7) sıra değiştirme bağıntısını sağlıyorsa $\hat{a}$ 'ya yokedici işlemci , $\hat{a}^{+}$'ya yaratıcı işlemci denir.

Şimdi hamiltoniyen ifadesini konum ve momentum cinsinden yazalım.

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\omega^{2}\left(\hat{x}^{2} + \frac{1}{m^{2}\omega^{2}}\hat{p}^{2}\right) \tag{2.2.8}$$

(2.2.1) ve (2.2.2) bağıntılarından yararlanarak $\hat{x}$ ve $\hat{p}$ işlemcilerini $\hat{a}$ ve $\hat{a}^{+}$ cinsinden

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a} + \hat{a}^{+}) \tag{2.2.9}$$

$$\hat{p} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^{+}) \tag{2.2.10}$$

şeklinde yazabiliriz. (2.2.9) ve (2.2.10) bağıntılarını (2.2.8) bağıntısında göz önüne alırsak

$$\hat{H} = \frac{\omega\hbar}{2}(\hat{a}\hat{a}^{+} + \hat{a}^{+}\hat{a}) \tag{2.2.11}$$

bulunur. (2.2.7) bağıntısından dolayı

$$\hat{a}\hat{a}^{+} = 1 + \hat{a}^{+}\hat{a} \tag{2.2.12}$$

dir. (2.2.12) denklemini (2.2.11) hamiltoniyen ifadesinde yerine yazarsak,

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{2.2.13}$$

olur. Bu ifade harmonik salınıcı için yaratıcı ve yokedici işlemciler kullanılarak elde edilen hamiltoniyen ifadesinin en basit halidir.

$$\hat{N} = \hat{a}^{+}\hat{a} \tag{2.2.14}$$

şeklinde bir sayı işlemcisi tanımlarsak hamiltoniyen ifadesini

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \tag{2.2.15}$$

şeklinde $\hat{N}$ sayı işlemcisi cinsinden yazabiliriz. $\hat{N}$ sayı işlemcisinin sırasıyla $\hat{a}$ ve $\hat{a}^{+}$ ile sıra değiştirme bağıntılarını bulalım.

$$\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B} \tag{2.2.16}$$

özelliğinden dolayı ,

$$\left[\hat{N}, \hat{a}\right] = \hat{a}^{+}[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^{+}, \hat{a}]\hat{a}$$

olur. Burada (2.2.7) eşitliği göz önüne alınırsa,

$$\left[\hat{N}, \hat{a}\right] = -a \tag{2.2.17}$$

elde edilir. Benzer şekilde

$$\left[\hat{N}, \hat{a}^{+}\right] = \hat{a}^{+} \qquad (2.2.18)$$

bulunur. $\hat{N}$ sayı işlemcisinin eşleniği

$$\hat{N}^{+} = \hat{a}^{+}\hat{a} \qquad (2.2.19)$$

şeklindedir. (2.2.14) ve (2.2.19) eşitliklerinden

$$\hat{N} = \hat{N}^{+} \qquad (2.2.20)$$

olduğundan $\hat{N}$ sayı işlemcisi hermitseldir. Bir hermite operatörlerinin özdeğeri reel olduğundan $\hat{N}$ sayı işlemcisinin özdeğerleri reeldir. Şimdi $\hat{N}$ sayı işlemcisinin artı sayılar olduğunu gösterelim. $\hat{N}$ operatörü için özdeğer denklemi

$$\hat{N}\Psi_k = \lambda_k \Psi_k \quad , \quad \Psi_k \neq 0 \qquad (2.2.21)$$

dir. Bu bağıntıyı skaler çarpalım. Buna göre,

$$(\Psi_k, \hat{N}\Psi_k) = (\Psi_k, \lambda_k \Psi_k)$$

dir. Burada $\hat{N}$ 'nin (2.2.14) eşitliği göz önüne alınarak ve hermitik eşleniği alınırsa

$$((\hat{a}^{+})^{+}\Psi_k, \hat{a}\Psi_k) = \lambda_k (\Psi_k, \Psi_k)$$

olur. Bu ifadeden λ_k ifadesini çekersek,

$$\lambda_k = \frac{(\hat{a}\Psi_k, \hat{a}\Psi_k)}{(\Psi_k, \Psi_k)}$$

bulunur. Burada

$$(\Psi_k, \Psi_k) = \|\Psi_k\|^2 \geq 0$$

ve

$$(\hat{a}\Psi_k, \hat{a}\Psi_k) = \|\hat{a}\Psi_k\|^2 \geq 0$$

olduğu göz önüne alınırsa,

$$\lambda_k \geq 0 \qquad (2.2.22)$$

olarak bulunur. Şimdi $\hat{N}$ 'nin özdeğerlerinin doğal sayılar olduğunu gösterelim. (2.2.18) eşitliğindeki $\hat{N}$ sayı işlemcisi ile $\hat{a}^+$ yükseltici işlemcisinin komutasyon bağıntısını

$$\hat{N}\hat{a}^+ = \hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{N}$$

şeklinde yazalım ve bunun $|\Psi_k\rangle$'ya etkisini hesapladığımızda

$$(\hat{N}\hat{a}^+)|\Psi_k\rangle = \hat{a}^+|\Psi_k\rangle + \hat{a}^+\hat{N}|\Psi_k\rangle$$

veya

$$\hat{N}(\hat{a}^+|\Psi_k\rangle) = (1+\lambda_k)\hat{a}^+|\Psi_k\rangle \qquad (2.2.23)$$

elde edilir. Burada (2.2.21) bağıntısını kullandık. Dolayısıyla $\hat{a}^+|\Psi_k\rangle$, $\hat{N}$'nin $(1+\lambda_k)$ özdeğerine karşılık gelen bir özvektörüdür. Benzer şekilde,

$$[\hat{N},\hat{a}] = -\hat{a}$$

bağıntısından

$$\hat{N}(\hat{a}|\Psi_k\rangle) = (\lambda_k - 1)\hat{a}|\Psi_k\rangle \qquad (2.2.24)$$

elde edilir. Bir başka deyişle $\hat{a}|\Psi_k\rangle$, $\hat{N}$ 'nin $(\lambda_k - 1)$ özdeğerine karşılık gelen bir özvektörüdür. λ_0 $\hat{N}$'nin en küçük özdeğeri olsun. $|\Psi_0\rangle$ bu özdeğere karşılık gelen bir vektör olsun.

$$\hat{N}|\Psi_0\rangle = \lambda_0|\Psi_0\rangle \quad , \quad |\Psi_0\rangle \neq 0 \qquad (2.2.25)$$

Burada $|\Psi_0\rangle$durumuna taban durumu denir. Taban durumunda $\hat{N}$ operatörünün özdeğerinin sıfır olduğunu gösterelim. $|\Psi_0\rangle$taban durumu olduğu için

$$\hat{a}\,|\Psi_0\rangle = 0 \qquad (2.2.26)$$

dır. Buna göre

$$(\hat{a}|\Psi_0\rangle, \hat{a}|\Psi_0\rangle) = 0$$

veya

$$(|\Psi_0\rangle, \hat{a}^+\hat{a}|\Psi_0\rangle) = 0$$

dir. Bu ifade $\hat{N}$ cinsinden yazılırsa

$$(\Psi_0, \hat{N}\Psi_0) = 0$$

olur. Burada (2.2.25) kullanılırsa

$$\lambda_0(\Psi_0, \Psi_0) = 0$$

veya

$$\lambda_0 = 0$$

bulunur. Böylece (2.2.23) bağıntısından dolayı, $\Psi_0, \hat{a}^+\Psi_0, (\hat{a}^+)^2\Psi_0 \ldots$ ifadeleri sırasıyla $\hat{N}$'nin 0,1,2,3… öz değerlerine karşı gelen özvektörlerdir.

Şimdi $\hat{N}$'nin spektrumunun üsten sınırlı olmadığını gösterelim. İlk önce $\hat{N}$'nin spektrumunun üsten sınırı olduğunu farz edelim. λ_m en büyük özdeğer olsun ve Ψ_m de bu özdeğere karşılık gelen özvektör olsun.

$$\hat{N}\Psi_m = \lambda_m\Psi_m \quad , \quad \lambda_m \neq 0 \text{ ve } \Psi_m \neq 0 \quad \hat{a}^+\Psi_m = 0 \qquad (2.2.27)$$

(2.2.27) bağıntıdan dolayı,

$$(\hat{a}^+\Psi_m, \hat{a}^+\Psi_m) = 0$$

dır. Hermitik eşleniğin tanımını kullanırsak,

$$(\Psi_m, \hat{a}\hat{a}^+\Psi_m) = 0$$

olur. (2.2.7) denkleminden,

$$(\Psi_m, \{1 + \hat{a}^+\hat{a}\}\Psi_m) = 0$$

olur. Bu denklemde (2.2.14) eşitliği göz önüne alındığında

$$(\Psi_m, \{1 + \hat{N}\}\Psi_m) = 0$$

veya

$$(1 + \lambda_m)(\Psi_m, \Psi_m) = 0$$

olarak bulunur. Burada $(\Psi_m, \Psi_m) \neq 0$ olacağından,

$$1 + \lambda_m = 0$$

olarak bulunur. $\lambda_m = -1$ olamayacağına göre bu bir çelişkidir. Dolayısıyla özdeğerlerin üst sınırı yoktur. O halde,

$$\hat{a}^+ \Psi_m \neq 0 \quad \forall \Psi_m \neq 0$$

olur. Böylece $\hat{N}$ operatörünün öz değerleri 0,1,2… şeklinde eksi olmayan tam sayılardır.

Bundan sonra $\hat{N}$ operatörünün öz değerlerini n ile bu öz değerlere karşı gelen ve 1'e normlanmış öz vektörleri de$|n>$ ile göstereceğiz. Yani,

$$N|n> = n|n> \quad ; \quad n = 1,2,3 \ldots \qquad (2.2.28)$$

$$< n|n> = 1$$

şeklinde olur. O halde enerji özdeğer denklemini

$$H|n> = E_n|n> \qquad (2.2.29)$$

biçiminde yazarız. (2.2.15) bağıntısı göz önüne alındığında,

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

olur. Ayrıca (2.2.23) , (2.2.24) ve (2.2.26) bağıntılarını

$$\hat{N}\hat{a}^+|n> = (n+1)\hat{a}^+|n> \qquad (2.2.30)$$

$$\hat{N}\hat{a}|n> = (n-1)\hat{a}|n> \qquad (2.2.31)$$

$$\hat{a}|0> = 0 \qquad (2.2.32)$$

şeklinde yazabiliriz. (2.2.30) ve (2.2.31) bağıntılarındaki $\hat{a}^+|n>$ ve $\hat{a}|n>$ ifadeleri $\hat{N}$ operatörünün sırasıyla $n+1$ ve $n-1$ özdeğerlerine karşılık gelen özvektörlerdir. O halde,

$$|n+1> = Ca^+|n> \qquad (2.2.33)$$

$$|n-1> = C'\hat{a}|n> \qquad (2.2.34)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada C ve C' normlama katsayılarıdır. Örneğin bu C katsayısını normlama koşulunuyla bulalım. (2.1.33) bağıntısından dolayı bra için,

$$< n+1| = C^* < n|\hat{a} \tag{2.2.35}$$

dir. (2.2.33) ve (2.2.35) bağıntılarını göz önüne alarak $< n+1|n+1>$ skaler çarpımını

$$< n+1|n+1> = |C|^2(1+n)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada (2.2.28) bağıntılarını kullandık.$|n+1>$ öz vektörleri 1'e normlandığında

$$|C|^2 = \frac{1}{(1+n)}$$

veya

$$C = \frac{1}{\sqrt{(1+n)}}$$

elde edilir. Benzer şekilde C' için

$$C' = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

olarak bulunur. Böylece (2.2.33) ve (2.2.34) bağıntılarını

$$|n+1> = \frac{1}{\sqrt{(1+n)}}\,\hat{a}^+|n> \tag{2.2.36}$$

$$|n-1> = \frac{1}{\sqrt{n}}\,\hat{a}|n>$$

veya

$$\hat{a}^+|n> = \sqrt{n+1}\,|n+1> \tag{2.2.37}$$

$$\hat{a}|n> = \sqrt{n}\,|n-1> \tag{2.2.38}$$

şeklinde yazabiliriz. (2.2.37) bağıntısı $\hat{a}^+$ işlemcisinin $|n-1>$ durumunda sırasıyla

$|1\rangle = \hat{a}^{+}|0\rangle$, $|2\rangle = \frac{(\hat{a}^{+})^{2}}{\sqrt{2!}}|0\rangle$, $|3\rangle = \frac{(\hat{a}^{+})^{3}}{\sqrt{3!}}|0\rangle$ ...

buluruz. (2.2.36) bağıntısını tekrar tekrar kullanarak $|n\rangle$ özdurumunu

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{+})^{n}|0\rangle \tag{2.2.39}$$

şeklinde yazabiliriz. Benzer şekilde (2.2.38) bağıntısıda $\hat{a}$ işlemcisinin $|n+1\rangle$ durumunda

$$(\hat{a})^{n}|n\rangle = \sqrt{n!}|0\rangle \tag{2.2.40}$$

olarak buluruz.

2.3. Üç Boyutta Harmonik Osilatör

Üç boyutlu harmonik salınıcı hamiltoniyeni,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x{}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}_y{}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{y}^2 + \frac{\hat{p}_z{}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{z}^2$$

olarak yazılır. Burada; $\hat{\vec{p}}$ momentum, m kütle ve ω açısal frekanstır. Üç boyutlu harmonik salınıcı hamilton denklemi

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^{3}\left(\frac{\hat{p}_k{}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}_k{}^2\right) \tag{2.3.1}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\hat{x}_i$ ve $\hat{p}_i$ operatörleri yerine

$$\hat{a}_i = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}_i + \frac{i}{m\omega}\hat{p}_i\right) \tag{2.3.2}$$

$$\hat{a}_i{}^{+} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}_i - \frac{i}{m\omega}\hat{p}_i\right) \tag{2.3.3}$$

operatörlerini tanımlayalım ve $\left[\hat{a}_j, \hat{a}_k{}^{+}\right]$ komütasyon bağıntılarını hesaplayalım:

$$\left[\hat{a}_j, \hat{a}_k{}^{+}\right] = \left\{\frac{m\omega}{2\hbar}\left[\hat{x}_j, \hat{x}_k\right] - \frac{i}{2\hbar}\left[\hat{x}_j, \hat{p}_k\right] + \frac{i}{2\hbar}\left[\hat{p}_j, \hat{x}_k\right] + \frac{1}{2m\hbar\omega}\left[\hat{p}_j, \hat{p}_k\right]\right\}$$

Konum ve momentum operatörlerinin

$$\left[\hat{x}_j, \hat{p}_k\right] = i\hbar\delta_{jk} \quad , \quad \left[\hat{x}_j, \hat{x}_k\right] = 0 \quad , \quad \left[\hat{p}_j, \hat{p}_k\right] = 0 \tag{2.3.4}$$

sıra değiştirme bağıntıları göz önüne alınırsa

$$\left[\hat{a}_j, \hat{a}_k{}^{+}\right] = \delta_{jk} \tag{2.3.5}$$

olarak buluruz. Benzer şekilde

$$\left[\hat{a}_j, \hat{a}_k\right] = 0 \tag{2.3.6}$$

$$\left[\hat{a}_j{}^{+}, \hat{a}_k{}^{+}\right] = 0 \tag{2.3.7}$$

olarak bulunur. Bağıntı (2.3.1) 'deki hamilton ifadesini $\hat{a}_k$ ve $\hat{a}_k{}^{+}$ cinsinden bulalım. Denklem (2.3.2) ve (2.3.3)'den

$$\hat{x}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}_k + \hat{a}_{\mathrm{k}}{}^{+}\right) \tag{2.3.8}$$

$$\hat{p}_k = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}_k - \hat{a}_{\mathrm{k}}{}^{+}\right) \tag{2.3.9}$$

olarak buluruz. O halde (2.3.1) 'deki hamilton ifadesi

$$\hat{\mathrm{H}} = \hbar\omega\sum_{k=1}^{3}\left(\hat{a}_k{}^{+}\hat{a}_k + \frac{1}{2}\right)$$

olur. Aşağıda tanımlanan

$$\hat{G}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\hat{a}_i{}^{+}\hat{a}_j + \hat{a}_j\hat{a}_i{}^{+}\right) \tag{2.3.10}$$

büyüklüğünün hareket sabiti olduğunu gösterelim. Bunun için önce G_{ij} ' nin sağladığı komutasyon bağıntılarına bakalım. Denklem (2.3.10) 'te (2.3.5) bağıntısı göz önüne alınırsa

$$\hat{G}_{ij} = \frac{1}{2}\delta_{ij} + \hat{a}_i{}^{+}\hat{a}_j \tag{2.3.11}$$

olarak bulunur. Buna göre,

$$[\hat{G}_{ij}, \hat{G}_{kl}] = \frac{1}{4}[\delta_{ij} + \hat{a}_i{}^{+}\hat{a}_j, \delta_{kl} + \hat{a}_k{}^{+}\hat{a}_l]$$

$$= \frac{1}{4}[\hat{a}_i{}^{+}\hat{a}_j, \hat{a}_k{}^{+}\hat{a}_l] \tag{2.3.12}$$

olarak bulunur. Burada (1.2.22) özelliği kullanılarak

$$[\hat{G}_{ij}, \hat{G}_{kl}] = \frac{1}{4}\{\hat{a}_i{}^{+}[\hat{a}_j, \hat{a}_k{}^{+}]\hat{a}_l + \hat{a}_i{}^{+}\hat{a}_k{}^{+}[\hat{a}_j, \hat{a}_l] + [\hat{a}_i{}^{+}, \hat{a}_k{}^{+}]\hat{a}_l\hat{a}_j + \hat{a}_k{}^{+}[\hat{a}_i{}^{+}, \hat{a}_l]\hat{a}_j\} \tag{2.3.13}$$

şeklinde yazılır. (2.3.6) - (2.3.7) bağıntılarını (2.3.13) açılımında göz önüne alırsak,

$$[\hat{G}_{ij}, \hat{G}_{kl}] = \delta_{jk}\,\hat{a}_i{}^{+}\hat{a}_l - \delta_{il}\hat{a}_k{}^{+}\hat{a}_j \tag{2.3.14}$$

elde edilir. Eşitliğin sağ tarafı (2.3.11) kullanılarak G'ler cinsinden

$$[\hat{G}_{ij}, \hat{G}_{kl}] = \delta_{jk}\,\hat{G}_{il} - \delta_{il}\hat{G}_{kj} \tag{2.3.15}$$

şeklinde bulunur. Hamilton ifadesinin G cinsinden eşiti

$$\hat{\mathrm{H}} = \hbar\omega \sum_k \hat{G}_{kk} \tag{2.3.16}$$

dır. Şimdi G_{ij} ifadesinin hareket sabiti olduğunu gösterelim. Hareket sabiti olması için Hamiltonyen ifadesiyle G_{ij} ifadesinin komütasyon bağıntısının sıfır olması gerekir.

$$[\hat{\mathrm{H}}, \hat{G}_{ij}] = \hbar\omega \sum_k [\hat{G}_{kk}, \hat{G}_{ij}]$$

$$[\hat{\mathrm{H}}, \hat{G}_{ij}] = \hbar\omega \sum_k [\delta_{ki}\hat{G}_{kj} - \delta_{kj}\hat{G}_{ki}]$$

$$[\hat{\mathrm{H}}, \hat{G}_{ij}] = \hbar\omega \sum_k [G_{ij} - G_{ij}]$$

$$\left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{G}_{ij}\right] = 0$$

Şimdi denklem (2.3.11) 'daki G_{ij} ifadesini açısal momentum operatörüne bağlı olarak elde edelim. Buradaki $\hat{a}_{\mathrm{i}}{}^{+}\hat{a}_j$ ifadesini (2.2.1) ve (2.2.2) bağıntılarından yararlanarak

$$\hat{a}_i{}^{+}\,\hat{a}_j = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}_i\hat{x}_j + \frac{i}{2\hbar}\hat{x}_i\hat{p}_j - \frac{i}{2\hbar}\hat{p}_i\hat{x}_j + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}_i\hat{p}_j \tag{2.3.17}$$

şeklinde komute edebiliriz. (2.3.4)'teki konum momentum sıra değiştirme bağıntısı kullanılırsa

$$\hat{a}_i{}^{+}\,\hat{a}_j = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}_i\hat{x}_j + \frac{i}{2\hbar}\hat{x}_i\hat{p}_j - \frac{i}{2\hbar}\hat{x}_j\hat{p}_i - \frac{1}{2}\delta_{ij} + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}_i\hat{p}_j \tag{2.3.18}$$

olur. (2.3.18) eşitliğini (2.3.11) eşitliğinde göz önüne aldığımızda

$$\hat{G}_{ij} = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}_i\hat{x}_j + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}_i\hat{p}_j + \frac{i}{2\hbar}\left(x_i p_j - x_j p_i\right) \tag{2.3.19}$$

bulunur. Burada (1.2.7)'deki ifade kullanılarak

$$\hat{G}_{ij} = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}_i\hat{x}_j + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}_i\hat{p}_j + \frac{i}{2\hbar}\varepsilon_{ijk}\,L_k \tag{2.3.20}$$

olarak buluruz. Burada $\hat{G}_{ij}$ operatörünün (2.1.3) - (2.1.5) hareket sabitlerinin operatör karşılığı olduğu görülmektedir.

Şimdi $\hat{H}$ operatörünün özdeğerlerini bulalım. Bunun için (2.2.13) ve (2.2.29) bağıntıları göz önüne alarak G_{ii} , $i = 1,2,3$ operatörleri için özdeğer denklemlerini aşağıdaki şekilde yazabiliriz.

$$\hat{G}_{11}|n_1> = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right)|\,n_1> \tag{2.3.21}$$

$$\hat{G}_{22}|n_2> = \hbar\omega\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)|\,n_2> \tag{2.3.22}$$

$$\hat{G}_{33}|n_3> = \hbar\omega\left(n_3 + \frac{1}{2}\right)|\,n_3> \tag{2.3.23}$$

Burada $n_1, n_2, n_3 = 0,1,2,3..$ dir. Yukarıdaki bağıntılar ve (2.3.16) bağıntısı göz önüne alınırsa,

$|n>=|n_1>|n_2>|n_3>$

olmak üzere üç boyutlu H hamiltoniyeni için

$$\widehat{H}|n>=E_n|n> \tag{2.3.24}$$

Schrödinger denkleminden E_n özdeğerlerini

$$E_n = \hbar\omega\left(\frac{3}{2}+n\right) \tag{2.3.25}$$

olarak buluruz. Burada $n = n_1 + n_2 + n_3$ dir.

Dolayısıyla üç boyutlu harmonik osilatör için enerji özdeğerleri (2.3.25) bağıntısıyla verilmektedir.

SONUÇ

Bu çalışmada klasik ve kuantum mekaniğinde iyi bilinen Kepler-Coulomb ve harmonik osilatör sistemlerini ele aldık. Bu sistemler maksimal sayıda (5 tane) hareket integraline (sabitlerine) sahiptir. Maksimal süperintegrallenebilir olan bu sistemler aşağıdaki özelliklere sahiptir.

1. Klasik mekaniğinde her iki sistem için yörüngeler Newton denklemini çözmeden elde edilebilir. Ayrıca bağıl hareketin yörüngeleri kapalı ve periyodiktir. Dahası Bertrand teoremine göre [7,8]; küresel simetrik potansiyellerden yalnız $\frac{k}{r}$ ve kr^2 için son yörüngeler periyodiktir.

2. Kuantum mekaniğinde her iki sistem tam çözülebilir olup enerji düzeyleri cebirsel olarak elde edilebilir. Her iki sistem için enerji düzeyleri katlıdır.

3. Hem klasik hem de kuantum fiziğinde bu sistemler fiziksel uygulamalarda büyük önem taşırlar.

Üç boyutlu süperintegrallenebilir sistemler incelenmiş ve sınıflandırılmıştır[9]. Bu sistemlerden 5'i maksimal süperintegrallenebilir olup yukarıdaki özellikleri taşımaktadır.

KAYNAKLAR

[1] L.D.Landau ve E.M.Lifshitz , ***Kuantum Mekaniği*** , Bilim Yayıncılık, Ankara 1999

[2] P.S.Laplace , ***Traite de mecanique celeste*** , Duprat,Paris 1799

[3] C.Runge , ***Vektoranalysis*** Cilt 1 , Sayfa 70 , Leipzig 1919

[4] W.Lenz , Z.Phys. Cilt 24 , Sayfa 197 , 1926

[5] W.Pauli , Z.Physik 36 , 336-363 1926

[6] Bekir Karaoğlu, ***Kuantum Mekaniğine Giriş*** , Güven Yayıncılık, İstanbul 1998

[7] Bertrand J., C.R. Acad. Sci. **77**, 849-853. 1873

[8] Goldstein H. , ***Classical Mechanics*** (Addison-Wesley , Reading , MA , 1990)

[9] N.W. Evans, Phys. Rev. A41 , 5666-5676 (1990)

ÖZGEÇMİŞ

Mayıs 1990 yılında Ankara'da doğmuş, ilköğrenimini Emniyetçiler İlköğretim Okulu ve Atatürt İlköğretim Okulunda tamamladıktan sonra orta öğrenimini Manisa'nın Kula ilçesinde tamamlamıştır. Sarayköy Lisesinden 2008 yılında mezun olmuş, daha sonra Süleyman Demirel Üniversitesinde lisans eğitimini tamamlamıştır. 2012 yılında Trakya Üniversitesinde Yüksek Enerji Ve Plazma Fiziği Anabilim Dalında yüksek lisans eğitimine başlamış ve hala devam etmektedir.