

Akdeniz Üniversitesi
Fen Fakültesi - Fizik Bölümü
FİZ319 Kuantum Fiziği Ders Notları



Doç. Dr. Mesut Karakoç

November 17, 2018

İçindekiler

3	Schrödinger Denkleminin Ayrıştırılması, Özdeğerleri ve Özfonksiyonları	3
3.1	Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemleri	3
3.1.1	Özdeğer Denklemleri	4
3.2	Sonsuz Kuyudaki Parçacık için Enerji Özdeğer Problemi	5
3.3	Açılım Varsayımı ve Fiziksel Yorumu	9
3.3.1	Açılım Katsayılarının Fiziksel Yorumu	10
3.4	Serbest Parçacık ve Momentum Özfonksiyonu	10
3.4.1	Serbest Parçacık Dalga Fonksiyonunun Normalizasyonu	12
3.4.2	Yozlaşmış (Dejenere) Durumlar	13
3.4.3	Parite	13

List of Figures

1	Sonsuz kuyu	5
2	Sonsuz kuyudaki parçacığın özfonksiyonları. Dikkat edilirse genlikler sabit ve artan n değerinden bağımsızdır.	8
3	Sonsuz kuyudaki parçacığın özfonksiyonlarının türevlerinin kareleri. Dikkat edilirse artan n ile genlikler de büyümektedir.	8

List of Tables

If all this damned quantum jumps were really
to stay, I should be sorry I ever got involved
with quantum theory.
—Erwin Schrödinger [?]

3 Schrödinger Denkleminin Ayrıştırılması, Özdeğerleri ve Özfonksiyonları

Bu bölümde bir parçacığın veya sistemin etkisinde olduğu potansiyelin $V(x)$ zamandan bağımsız olması halinde, Schrödinger denkleminin sadece konum ve sadece zaman değişkenlerini içeren iki çiftlenmiş denklem seti halinde yazılabileceğini göreceğiz. Sadece konum değişkenine bağlı olarak yazılan yeni denklemi zamandan bağımsız Schrödinger denklemi olarak adlandırıyoruz. Devamında zamandan bağımsız denklem için özdeğer, özfonksiyon kavramlarını tartışacağız ve bazı potansiyeller için bu denklemin çözümlerini inceleyeceğiz.

3.1 Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi

Bir önceki bölümde elde ettiğimiz zamana bağlı Schrödinger denklemini *Hamilton* işlemcisini kullanarak,

$$\hat{H}\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \quad (1)$$

şeklinde yazabileceğimizi ve dalga fonksiyonlarıyla açık halini de,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \quad (2)$$

şeklinde yazabileceğimizi görmüştük. Yukarıda tekrar yazdığımız zamana bağlı Schrödinger denklemi bir kısmi diferansiyel denklemdir. Kısmi diferansiyel denklemlerin birden çok bağımsız değişkenleri olur. Bu nedenle genellikle kısmi diferansiyel denklemleri çözmek kolay olmayabilir. Fakat bizim inceleyeceğimiz durumda $V(x)$ potansiyeli zamandan bağımsız olduğundan denklemi sadece zamanı ve sadece konuma bağlı iki adi diferansiyel denkleme dönüştürebiliriz.

$$\psi(x, t) = T(t)u(x) \quad (3)$$

Bu dönüşümü gerçekleştirebilmek için $\psi(x, t)$ 'nin yukarıdaki gibi iki fonksiyonun çarpımı şeklinde yazılabileceğini kabul edeceğiz. Dalga fonksiyonunun bu halin zamana bağlı Schrödinger denkleminde kullanırsak,

$$i\hbar u(x) \frac{dT(t)}{dt} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) \right\} T(t)$$

denklemine ulaşırız. Bu denklemin her iki tarafını $T(t)u(x)$ ifadesine bölersek,

$$i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{u(x)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) \right\} \quad (4)$$

her iki tarafı sadece bir bağımsız değişkene bağlı bir eşitlik elde ederiz. Eşitliğin sağlanabilmesi için her iki tarafında tek bir sabite eşit olması gerekir. Denklemin sol tarafındaki $i\hbar \frac{1}{T(t)}$ ifadesi enerji boyutunda olduğundan eşitliği sağlayacak olan sabitte enerji boyutunda olmalıdır. Böyle bir sabit kapalı sistemlerde E sembolü ile gösterilen ve ilgili sistemin veya parçacığın hareket sabiti olan toplam enerji olabilir. Böylece ayrıştırılmış denklemin sol tarafı,

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t) \quad (5)$$

halini alır. Bu denklemin çözümü,

$$T(t) = T(0)e^{-iEt/\hbar} \quad (6)$$

olur, burada $T(0)$ sistemin $t = 0$ anındaki başlangıç durumunu temsil eder. Denk. 4'in sağ tarafı ise,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (7)$$

halini alır ve *zamandan bağımsız Schrödinger denklemi* olarak adlandırılır. Zamana bağlı Schrödinger denklemi parçacığın zamanla davranışını betimlerken, yeni elde ettiğimiz zamandan bağımsız denklem ilgili parçacığın veya sistemin karakteristik özellikleri olan özdeğerlerini (eigenvalue) ve özfonksiyonlarını (eigenfunction) belirler.

Zamandan bağımsız $V(x)$ potansiyel sayesinde ikiye ayırabildiğimiz zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümü, her iki denklemin çözümlerinin birleştirilmesiyle aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$\psi(x, t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (8)$$

3.1.1 Özdeğer Denklemleri

Özdeğer denklemlerini daha iyi anlayabilmek için işlemci (operatör) kavramını anlamak gerekir. Basitçe bir operatör üzerine etki ettiği bir fonksiyonu bir başka fonksiyona dönüştürür veya bezer.

$$\begin{aligned} \hat{O}f(x) &= f(x) + x^3 \\ \hat{O}f(x) &= [f(x)]^4 \\ \hat{O}f(x) &= f(5x^2 + 4) \\ \hat{O}f(x) &= [d^2 f(x)/dx^2]^2 \\ \hat{O}f(x) &= df(x)/dx - 4f(x) \\ \hat{O}f(x) &= \lambda f(x) \end{aligned}$$

Yukarıda verilen örneklerin hepsinde $f(x)$ gibi bir fonksiyon \hat{O} operatörleri tarafından belirlenen bir kural çerçevesinde eşitliğin sağındaki hallerini alırlar. Bizim çalışacağımız operatörler genellikle \hat{O} gibi genel bir operatör değil \hat{L} ile göstereceğimiz lineer operatörlerdir. Bu operatörler, c karmaşık bir sayı olmak üzere, aşağıdaki iki kurala uymalıdır.

$$\hat{L}[f_1(x) + f_2(x)] = \hat{L}f_1(x) + \hat{L}f_2(x) \quad (9)$$

$$\hat{L}cf(x) = c\hat{L}f(x) \quad (10)$$

Bu kurallara göre yukarıdaki örneklerde (yukarıdan aşağıya doğru) üçüncü, beşinci ve altıncı örneklerdeki operatörler lineerdir.

Örneğin, yukarıdan seçtiğimiz örneklerden,

$$\hat{L}f(x) = \frac{df(x)}{dx} - 4f(x)$$

için \hat{L} işlemcisi lineerdir. Çünkü,

$$\begin{aligned} \hat{L}(f(x) + g(x)) &= \frac{df(x) + g(x)}{dx} - 4(f(x) + g(x)) \\ &= \frac{df(x)}{dx} - 4f(x) + \frac{dg(x)}{dx} - 4g(x) \\ &= \hat{L}(f(x)) + \hat{L}(g(x)) \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned}
 \hat{L}(cf(x)) &= \frac{d(cf(x))}{dx} - 4(cf(x)) \\
 &= c \frac{df(x)}{dx} - c4f(x) \\
 &= c \left(\frac{df(x)}{dx} - 4f(x) \right) \\
 &= c\hat{L}(f(x))
 \end{aligned}$$

ifadeleri ile gösterildiği üzere, her iki şartı da sağlamaktadır.

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dE C(E) u_E(x) e^{-Et/\hbar} \quad (11)$$

3.2 Sonsuz Kuyudaki Parçacık için Enerji Özdeğer Problemi

Sonsuz bir kuyu (Şekil 1) içinde hapsolmuş bir parçacığın davranışı Denk. 7'de verilen zamandan bağımsız Schrödinger denklemiyle tanımlanabilir. Tek boyutlu böyle bir kuyu

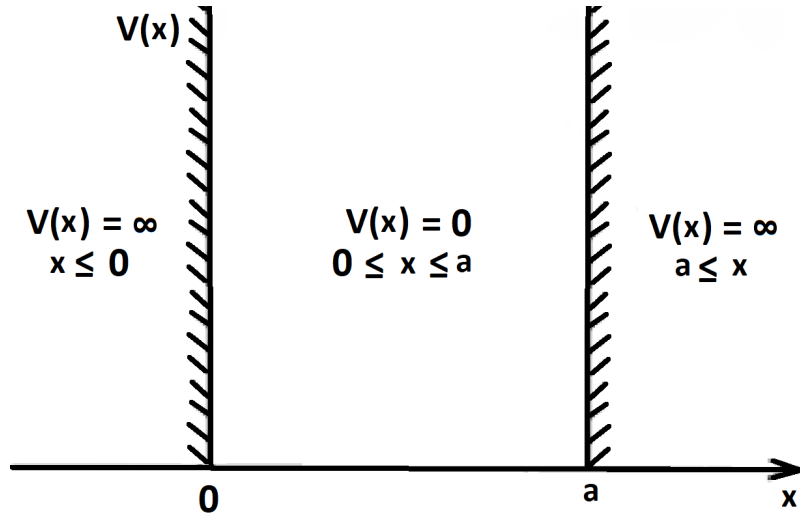


Figure 1: Sonsuz kuyu

Schrödinger denkleminde,

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{if } x \leq 0, x \geq a \\ 0 & \text{if } 0 < x < a \end{cases} \quad (12)$$

potansiyelinin konmasıyla tanımlanabilir. Parçacık $0 < x < a$ aralığında hapsediğinden parçacığın dalga fonksiyonu kuyu sınırlarında ve dışında sıfır olmalıdır,

$$\begin{aligned}
 u(x) &= 0 & x &\leq 0 \\
 u(x) &= 0 & x &\geq a.
 \end{aligned}$$

Problemin doğasından ortaya çıkan bu şartlar *sınır şartları* olarak adlandırılır. Kutu dışındaki her yerde dalga fonksiyonu sıfır olduğundan kutunun dışı için Schrödinger denklemi yazılamaz. Kutunun içindeyse $V(x) = 0$ olduğundan, birazcık matematiksel düzenlemeyle, Schrödinger denklemi,

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u(x) = 0 \quad (13)$$

olarak yazılır. Eğer parçacığın enerjisi ($E < 0$) negatif ise, $\kappa^2 = 2m|E|/\hbar^2$ olmak üzere,

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = 0 \quad (14)$$

denkleminin ulaşılır. Bu denklemin en genel çözümü $e^{-\kappa x}$ ve $e^{\kappa x}$ ifadelerinin lineer bir kombinasyonu olur. Elde edilen çözüm $x = 0$ 'da sınır şartlarını sağlasa da $x = a$ 'da sınır şartlarını sağlamaz. Böylece $E < 0$ seçeneği anlamsızlaşır.

Eğer parçacığın enerjisi ($E > 0$) pozitif ise,

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (15)$$

olmak üzere,

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2 u(x) = 0 \quad (16)$$

denklemini elde edilir. Bu denklemin en genel çözümlerinden birisi aşağıdaki gibidir.

$$u(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (17)$$

$u(0) = 0$ sınır şartı gereğince,

$$u(0) = A \cdot 0 + B = 0$$

olduğundan $B = 0$ olur ve birinci sınır şartını sağlayan genel çözüm,

$$u(x) = A \sin kx \quad (18)$$

olarak bulunur. Diğer sınır şartına göre $u(a) = 0$ olmalıdır, bu şartın sağlanması ancak,

$$ka = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (19)$$

olması ile mümkündür. Böylece, $E = p^2/2m = (\hbar k)^2/2m$ olduğu da hatırlanırsa parçacığın sahip olabileceği izinli enerji değerlerinin veya yeni adıyla enerji özdeğerlerinin,

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (20)$$

olacağı açıktır. Özfonksiyonlar ise normalize edildiklerinde $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ olacağından,

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (21)$$

halinde elde edilirler. Çözümlerin ilginç bir sonucu vardır; farklı enerji özdeğerlerine ortaya çıkaran farklı özfonksiyonlar birbirlerine *diktir*. Ayrıca birbirine dik olan bu özfonksiyonlar normalize edilmişler ise *ortonormal* özfonksiyonlar olarak adlandırılırlar. Çalıştığımız problemdeki özfonksiyonlar ortonormaldir, aşağıdaki matematiksel işlem süreciyle bu gösterilmiştir.

$$\begin{aligned} \int_0^a dx u_n^*(x) u_m(x) &= \int_0^a dx \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi x}{a} \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a dx \left\{ \cos \frac{(n-m)\pi x}{a} - \cos \frac{(n+m)\pi x}{a} \right\} \\ &= \frac{\sin(n-m)\pi}{(n-m)\pi} - \frac{\sin(n+m)\pi}{(n+m)\pi} = 0 \quad \Leftarrow n \neq m \\ &= \frac{1}{a} \left[x - \frac{a}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \right]_0^a = 1 \quad \Leftarrow n = m \end{aligned} \quad (22)$$

İntegrallerin herhangi bir n ve m için cevabı yukarıdaki gibidir, n ve m tam sayılar olduklarından integral sonucu aşağıdaki gibi özetlenebilir.

$$\int_0^a dx u_n^*(x) u_m(x) = \begin{cases} 0 & \Leftarrow n \neq m \\ 1 & \Leftarrow n = m \end{cases} \quad (23)$$

En son olarak aşağıdaki gibi daha güzel bir şekilde Kronecker-Delta fonksiyonu kullanılarak yazılabilir.

$$\int_0^a dx u_n^*(x) u_m(x) = \delta_{mn} \quad (24)$$

Bu son eşitlik *ortonormalite şartı* olarak tanımlanır. Çalıştığımız problemlerde özfonksiyonlar reel olsa da başka problemler için böyle olmak zorunda değildir, bu nedenle yapılan tanımda özfonksiyonun eşleniği ve kendisi bulunmaktadır.

Enerji özdeğer ve özfonksiyon çözümlerinden bazı fiziksel yorumlar çıkarabiliriz.

1. En düşük enerji seviyesi durumu $u_1(x)$ özfonksiyonu ile tanımlanır ve parçacığın sahip olduğu enerji *taban durum enerjisi* olarak adlandırılır,

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (25)$$

Klasik durumda en düşük enerji seviyesi kinetik ve potansiyel enerjinin sıfır, yani toplam enerjinin sıfır olduğu durumdur. Kuantum fiziğinde ise minimumda olsa bir enerjinin varlığı söz konusudur.

2. $\langle p \rangle$ beklenen değerini bu sistem için hesaplarken öncelikle özfonksiyonların reel olduğu hatırlanırsa $u_n^* = u_n$ olur. Böylece,

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_0^a dx u_n(x) \left(-i\hbar \frac{du_n(x)}{dx} \right) = -i\hbar \int_0^a dx \frac{d}{dx} \frac{(u_n(x))^2}{2} \\ &= -\frac{i\hbar}{2} [u_n^2(a) - u_n^2(0)] = 0 \end{aligned} \quad (26)$$

sonucuna ulaşılır. $\langle p \rangle = 0$ olması parçacığın $-x$ ve $+x$ yönlerinde eşit miktarda hareket etmiş olması olarak yorumlanabilir.

3. Diğer taraftan $\langle p^2 \rangle$ sıfır olmaz ve herhangi bir $u_n(x)$ özfonksiyonu için,

$$\langle p^2 \rangle = 2mE_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{a^2} \quad (27)$$

olarak bulunur.

4. Düğüm sayısı ($N_D \equiv n - 1$) olarak tanımlanabilir, çünkü genellikle sınırlardaki sıfırlar sayılmaz. Bu tanıma göre $n = 1$ için $N_D = 0$ düğüm varken, $n = 2$ 'de sadece $N_D = 1$ düğüm vardır ve bu düğüm tam özfonksiyonun $x = a/2$ 'de sıfır olduğu yerdir. Düğüm noktası sayısı (N_D) arttıkça veya daha üst seviyelere (n) çıkıldıkça kinetik enerji artmaktadır. Bunun sebebi aşağıda hesaplanan $\langle K \rangle$ kinetik enerji beklenen değerinden açıkça görülmektedir. Çünkü $\langle K \rangle = E_n$ 'dir. Ayrıca Şekil 3'ten görüleceği üzere integralin iç



Figure 2: Sonsuz kuyudaki parçacığın özfonksiyonları. Dikkat edilirse genlikler sabit ve artan n değerinden bağımsızdır.

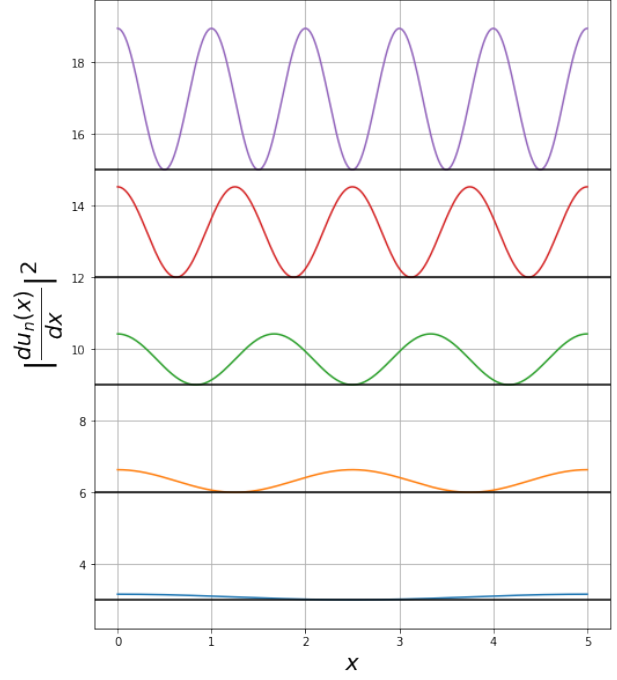


Figure 3: Sonsuz kuyudaki parçacığın özfonksiyonlarının türevlerinin kareleri. Dikkat edilirse artan n ile genlikler de büyümektedir.

kısımının genliği n ve N_D arttıkça artmaktadır.

$$\begin{aligned}
 \langle K \rangle &= \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx u^*(x) \frac{d^2 u(x)}{dx^2} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \frac{d}{dx} \left(u^*(x) \frac{du(x)}{dx} \right) - \frac{du^*(x)}{dx} \frac{du(x)}{dx} \right\} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left| \frac{du(x)}{dx} \right|^2 \\
 &= \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}
 \end{aligned} \tag{28}$$

5. Şekil 2'deki özfonksiyonlar arasında ilginç bir davranış gözlenmektedir. Eğer tam orta noktaya ($x = a/2$) bir ayna yerleştirdiğimizi düşünürsek; tek değerli $n = 1, 3, 5 \dots$ özfonksiyonlar simetrikler, çift değerli $n = 1, 3, 5 \dots$ olanlar ise anti-simetrikler (yani işaret değiştirmektedirler). Bu simetrinin bir benzerini aynayı $x = 0$ 'a taşıyarak ve,

$$x \rightarrow x - \frac{a}{2}$$

yaparak da gözleyebiliriz. Böylece, ortaya çıkardığımız bu simetri kullanılarak, sınırları $x = -a/2$ ve $x = a/2$ olan sonsuz kuyu için de çözümler elde edilebilir. Yukarıda yaptığımız değişken dönüşümünü özfonksiyonda da işletirsek,

$$\sin \frac{n\pi x}{a} \rightarrow \sin \left(\frac{n\pi x}{a} - \frac{n\pi}{2} \right) = \sin \frac{n\pi x}{a} \cos \frac{n\pi}{2} - \cos \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{n\pi}{2} \tag{29}$$

elde ederiz. Bu ifadeden anlaşılacağı üzere $x = \pm a/2$ sınırlarına sahip sonsuz kuyu için çift ve tek değerli durumların özfonksiyonları aşağıdaki gibi olacaktır.

$$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad \text{with } n = 2, 4, 6, \dots \tag{30}$$

$$\sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} \quad \text{with } n = 1, 3, 5, \dots \quad (31)$$

3.3 Açılım Varsayımı ve Fiziksel Yorumu

Fourier teoremine göre $\psi(0) = 0$ ve $\psi(a) = 0$ şartlarını sağlayan herhangi bir sürekli $\psi(x)$ fonksiyonu,

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (32)$$

formunda yazılabilir. Sonsuz kuyu problemindeki $u_n(x)$ özfonksiyonları sadece bir katsayı farkıyla $\sin n\pi x/a$ ifadesi ile aynıdır. Böylece sonsuz kuyudaki parçacığın toplam dalga fonksiyonunu $u_n(x)$ 'ler cinsinden,

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n u_n(x) \quad (33)$$

olarak elde edeceğimizi iddia edebiliriz. A_n katsayıları ortonormalite şartından aşağıdaki gibi hesaplanabilir:

$$\begin{aligned} \int_0^a dx u_m^*(x) \psi(x) &= \int_0^a dx u_m^*(x) \sum_{n=1}^{\infty} A_n u_n(x) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} A_n \int_0^a dx u_m^*(x) u_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \delta_{mn} = A_m \end{aligned} \quad (34)$$

olduğundan,

$$A_m = \int_0^a dx u_m^*(x) \psi(x) \quad (35)$$

yazılabilir.

Daha önce serbest parçacığın dalga paketi için yaptığımız tartışmadaki gibi açılım yöntemiyle parçacığın dalga fonksiyonu $\psi(x, t)$ 'nin zamana bağlı davranışını,

$$\psi(x, t) = \psi(x) T(t) = \sum A_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (36)$$

olarak yazabiliriz. Hatırlanmalıdır ki, Schrödinger denkleminin kısmi değişkenlere (x ve t) ayrıştırılmış halini eşitleyen sabit E_n 'dir, bu sayede yukarıdaki $e^{-iE_n t/\hbar}$ ifadesinin varlığı anlaşılabilir. Bu kısım sadece zaman davranışını izah eden kısmın çözümüdür.

Burada gerçekleştirdiğimiz açılımın vektör analizinde de bir benzeri vardır. n boyutlu bir uzay düşünelim: bu uzayda \hat{i}_k dik birim vektörlerinin kümesi, özfonksiyonların tam kümesiyle benzer davranışı gösterir. Burada tamlık ile ifade edilmek istenen n boyutlu uzaydaki herhangi bir \vec{a} vektörü \hat{i}_k birim vektörlerine açılarak,

$$\vec{a} = \sum_{m=1}^n a_m \hat{i}_m \quad (37)$$

şeklinde yazılabilir. Bu birim vektörler dik bir baz oluşturdıklarından herhangi iki birim vektör arasında,

$$\hat{i}_m \cdot \hat{i}_k = \delta_{mk} \quad (38)$$

bağıntısı vardır. Açılımdaki a_k katsayıları birim vektörler ve \vec{a} vektörünün iç çarpımı ile,

$$a_k = \hat{i}_k \cdot \vec{a} \quad (39)$$

bulunabilirler. Böylece anlıyoruz ki; vektörlerdeki iç çarpımın karşılığı özfonksiyonlar durumunda dx üzerinden bir integraldir, ayrıca $\psi(x)$ ile \vec{a} ve $u_n(x)$ ile \hat{i}_k benzer davranışları üstlenmişlerdir.

3.3.1 Açılım Katsayılarının Fiziksel Yorumu

A_n katsayılarını yorumlayabilmek için enerjinin beklenen değerini keyfi bir $\psi(x)$ durumunda hesaplayalım. Çalıştığımız örnekte, kuyu içinde $H = p^2/2m$, kuyu dışında $\psi(x) = 0$ ve

$$Hu_n(x) = E_n u_n(x) \quad (40)$$

olduğuna göre,

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int_0^a dx \psi^*(x) H \psi(x) = \int_0^a dx \psi^*(x) H \sum_n A_n u_n(x) \\ &= \sum_n A_n \int_0^a dx \psi^*(x) E_n u_n(x) \\ &= \sum_n E_n |A_n|^2 \end{aligned} \quad (41)$$

sonucuna ulaşırız. Ayrıca,

$$\int_0^a dx \psi^*(x) \psi(x) = 1 \quad (42)$$

olduğundan,

$$\int_0^a dx \psi^*(x) \sum_n A_n u_n(x) = \sum_n A_n A_n^* = \sum_n |A_n|^2 = 1 \quad (43)$$

olur. $|A_n|^2$ 'yi anlamak için her bir enerji ölçümünün sadece bir enerji özdeğeri ortaya çıkaracağını kabul etmeliyiz. Bu önerme Bohr'un atom modelinde durağan durumlar için, üstü kapalı da olsa, yapılmıştır. Önermeyi kuantum mekaniğine taşırsak; ölçülen bir enerji enerji operatörünün özdeğerlerinden birine karşılık gelir. Bu durumda ortalama enerji ölçümü,

$$E_{ort} = \langle \hat{H} \rangle = \sum_n E_n P_n \quad (44)$$

olur. Burada P_n elde edilen her bir ölçümde E_n enerji özdeğerini ölçme olasılığıdır. Olasılıkların toplamı,

$$\sum_n P_n = 1 \quad (45)$$

olacaktır. Bu sonuçlardan,

$$P_n = |A_n|^2 \quad (46)$$

olduğu ve “ $|A_n|^2$ yapılan bir enerji ölçümünde $\psi(x)$ durumunun E_n enerji özdeğeri üretme olasılığıdır” yorumlarını yapabiliriz. Daha önce de gösterdiğimiz üzere A_n katsayıları,

$$A_n = \int_0^a dx u_n^*(x) \psi(x) \quad (47)$$

ile elde edilirler.

3.4 Serbest Parçacık ve Momentum Özfonksiyonu

Enerji operatörü \hat{H} dışında da özfonksiyon ve özdeğerleri olan operatörler vardır. Bunlardan birisi \hat{p} momentum operatörüdür: bu operatör dalga fonksiyonuna işletildiğinde,

$$\hat{p}u_p(x) = pu_p(x), \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (48)$$

özfonksiyon ve özdeğerleri ortaya çıkar. Operatörün açık halini yazacak olursak,

$$\frac{du_p(x)}{dx} = \frac{ip}{\hbar} u_p(x) \quad (49)$$

birinci dereceden adi bir diferansiyel denklem ortaya çıkar. Bu denklemin genel çözümü,

$$u_p(x) = C e^{ipx/\hbar} \quad (50)$$

şeklinde. Burada C belirsiz bir sabittir ve normalizasyon ile hesaplanabilir. p özdeğeri reel değerlidir böylece $u_p(x)$ özfonksiyonu $x \rightarrow \pm\infty$ durumunda patlamaz ve sonlu kalır. Serbest bir parçacık için \hat{p} operatörünün davranışını incelediğimizden, p özdeğeri kesikli değerler değil sürekli değerler alır. Diğer bir ifadeyle \hat{p} 'nin sürekli bir spektrumu vardır, denebilir. Enerji özfonksiyonları gibi momentum özfonksiyonları da,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_p^*(x) u_{p'}(x) = \delta(p - p') = \begin{cases} 0 & \Leftarrow p \neq p' \\ 1 & \Leftarrow p = p' \end{cases} \quad (51)$$

yukarıda verilen ortonormalite (dik ve birim olma) şartına uyuyorlarsa,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx u_p^*(x) u_p(x) &= |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(p-p')x/\hbar} \\ &= 2\pi |C|^2 \hbar \delta(p - p') \end{aligned} \quad (52)$$

olacaktır. İntegralin sonucu $p = p'$ için 1 olacağından C 'nin değeri de bulunmuş olur. Böylece momentum özfonksiyonu,

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (53)$$

olarak bulunur. Enerji özfonksiyonlarının tam bir setiyle seriye açtığımız $\psi(x)$ 'i momentum özfonksiyonlarının tam bir setiyle de seriye açabiliriz. Tek fark enerji özdeğerleri kesikli iken, momentum özdeğerleri sürekli. Eğer momentum özdeğerleri kesikli olsaydı, $\psi(x)$

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{p_n} u_{p_n}(x) \quad (54)$$

ifadesine benzer şekilde kesikli özfonksiyonların açılımı şeklinde yazılabilirdi. Fakat \hat{p} sürekli bir spektruma sahip olduğundan,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) u_p(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (55)$$

$\psi(x)$ $u_p(x)$ özfonksiyonlarının tam bir setiyle yukarıdaki gibi yazılmalıdır. Burada,

$$\begin{aligned} \phi(p) &\leftrightarrow A_n \\ u_p(x) &\leftrightarrow u_n(x) \end{aligned}$$

benzerliklerinin varlığına dikkat edilmelidir. A_n 'lerin bulunmasına benzer şekilde $\phi(p)$ 'lerde

$$\phi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_p^*(x) \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^* \psi(x) \quad (56)$$

integraliyle (iç çarpımıyla) hesaplanabilirler. Aslında Denk. 55 ve 56 karşılaştırmalı olarak incelenirse; Denk. 55'te $\psi(x)$ 'in momentum özfonksiyonlarının ve $\phi(p)$ katsayılarının bir açılımı olarak, Denk. 56'da ise $\phi(p)$ 'nin momentum özfonksiyonlarının ve $\psi(x)$ katsayılarının bir açılımı olarak yazıldığı düşünülebilir. Böylece daha önce de bahsettiğimiz gibi $\psi(x)$ konum uzayındaki dalga fonksiyonu iken, $\phi(p)$ momentum uzayındaki dalga fonksiyonudur önermesi daha kuvvetli bir dayanak kazanmış olur.

3.4.1 Serbest Parçacık Dalga Fonksiyonunun Normalizasyonu

Serbest parçacık durumunu incelemeye devam edelim. Serbest parçacık için potansiyel $V(x)$ her yerde sıfır olacaktır, bu nedenle Hamiltonyen işlemcisi sadece kinetik enerji kısmını içerecek şekilde,

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}u(x) = \frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2u(x) = 0 \quad (57)$$

olarak yazılır. Bu diferansiyel denklemin çözümleri e^{ikx} , e^{-ikx} veya $\sin kx$, $\cos kx$ fonksiyonlarının lineer kombinasyonları olacaktır. Örneğin, $+x$ yönünde ilerleyen bir parçacık için

$$\psi(x, t) = u(x)T(t) = Ae^{ikx - \omega t} \quad (58)$$

şeklinde bir serbest dalga fonksiyonu önerilebilir. Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümü ise,

$$u(x) = Ae^{ikx} \quad (59)$$

olacaktır. Fakat bu çözümün problemi karesi integrallenebilir olmamasıdır.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx |u(x)|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |Ae^{ikx}|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx A^2 |e^{ikx}|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx A^2 \\ &= A^2 x \Big|_{-\infty}^{\infty} \end{aligned} \quad (60)$$

Çünkü yukarıdaki işlemlerin sonucundan anlaşılacağı üzere integral ıraksar (patlar).

Bu sonuç, bir örnekle şöyle yorumlanabilir: Bir elektron tabancasından çıkan elektron demetinin momentumu çok iyi bilindiğinden ($\Delta p \rightarrow 0$), Heisenberg'in belirsizlik ilkesine göre, konumu hakkındaki bilgi tamamen kaybolmuştur ($\Delta x \rightarrow \infty$). Diğer bir ifadeyle $|u(x)|^2 dx = A^2 dx$ parçacığın dx ve $x + dx$ aralığında bulunma olasılığı bütün uzayda aynı değere sahiptir. Böyle bir durumu fiziksel olarak kabul etmek pek mümkün değildir. Çünkü elektron tabancasından çıkan elektron demetinin (veya bir başka parçacık hızlandırıcıdan çıkan parçacık demetinin) boyu bilinmektedir. Hızlandırılan parçacık ilk defa tabancadan çıktığında bu demet için de bir yerde olmalıdır. Bu nedenle parçacığın serbest olma özelliğini kaybetmeden parçacığın konumunu yerleştirebilecek normalizasyon yöntemlerine ihtiyaç duyulur. Dolayısıyla bu tür sistemlerin dalga fonksiyonlarını normalize etmenin farklı yolları önerilmiştir.

1. İlk yöntem sonsuz kuyu sınırları $x = \pm a/2$ 'yi çok genişletmek ve çok daha geniş bir kuyu elde etmek. Fakat ne kadar genişletilse de $e^{\pm ikx}$ şeklindeki dalga fonksiyonları sınırlarda yok (sıfır) olmayacaktır. Bu nedenle $\psi(x = \pm a/2) = 0$ sınır şartı değiştirilerek,

$$\psi(x - a/2) = \psi(x + a/2) \quad (61)$$

şeklinde yeniden tanımlanır. Yeni tanımlanan bu şart, dalga fonksiyonunun, parçacık serbest olduğu ve her yerde aynı olasılıkla bulunabileceği için, $x = -a/2$ ve $x = +a/2$ 'de sürekli olmasının gerekliliğinden ortaya çıkar. Böylece,

$$\begin{aligned} e^{ik(x-a/2)} &= e^{ik(x+a/2)} \\ e^{ikx} e^{-ika/2} &= e^{ikx} e^{ika/2} \\ e^{ika} &= 1 \end{aligned}$$

sonucu ortaya çıkar. Genişletilmiş kuyudaki bu yeni sınır şartına uyan dalga için $k = 2n\pi/a$ veya $p = 2\hbar n\pi/a$ olur. Burada a kuyu genişliği ve $n = 1, 2, 3, \dots$ bir tam sayıdır.

Serbest parçacık için momentum herhangi bir değerde olabilir. Bu nedenle a ne kadar genişletilirse parçacığın momentumunu verecek olan n değeri de buna göre büyütülmelidir. Genişletilmiş bu kuyuda artık,

$$A^2 \int_{-a/2}^{a/2} dx |e^{ikx}|^2 = A^2 a = 1 \quad (62)$$

normalizasyonu yapılabilir. Böylece serbest parçacığı temsil eden düzlem dalgalar,

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{\pm ikx} \quad (63)$$

şeklinde normalize edilmiş olarak yazılabilirler.

2. Elektron tabancasından çıkan elektron örneğiyle devam edersek, momentumu çok iyi bilindiğinden momentum uzayında,

$$\phi(p) = \sqrt{2\pi\hbar} \delta(p - p') \quad (64)$$

şeklinde bir dalga paketi fonksiyonu önerebiliriz. Bu dalga fonksiyonu sadece $p = p'$ iken sıfırdan farklı diğer durumlarda sıfırdır, böylece momentumun değeri kesin olarak bilinmiş olmaktadır. Önerdiğimiz bu dalga paketi ile,

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (65)$$

olarak tanımlı serbest parçacık momentum özfonksiyonunu beraber kullanarak, serbest parçacığın $\psi(x)$ dalga fonksiyonunu,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) u_p(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp (\sqrt{2\pi\hbar} \delta(p - p')) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (66)$$

$$= e^{ipx/\hbar} = e^{ikx} \quad (67)$$

şeklinde dalga paketi olarak yazabiliriz. Bu normalizasyon yöntemi *Dirac normalizasyonu* olarak adlandırılır. Bir önceki normalizasyondaki gibi bir sonuç elde etmek için Dirac delta gibi çok keskin bir dalga paketi yerine yine keskin ama her noktada tanımlı bir dalga paketi tercih edilebilir. Böylece gerçek fiziksel demet daha iyi temsil edilmiş olur. Buradaki momentum dalga paketi fonksiyonu çok keskin olduğundan $\Delta p = 0$ 'dir, fakat Heisenberg'in belirsizlik ilkesi gereği, $\Delta x \rightarrow \infty$ olur.

3. Normalizasyonu

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im} \left[\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d\psi^*(x)}{dx} \psi(x) \right] \quad (68)$$

3.4.2 Yozlaşmış (Dejenere) Durumlar

3.4.3 Parite