

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



Doç. Dr. Mesut Karakoç

November 11, 2018

İçindekiler

3	Schrödinger Denkleminin Ayrıştırılması, Özdeğerleri ve Özfonksiyonları	3
3.1	Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi	3
3.1.1	Özdeğer Denklemleri	4
3.2	Sonsuz Kuyudaki Parçacık için Enerji Özdeğer Problemi	5

List of Figures

1	Sonsuz kuyu	5
---	-----------------------	---

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 [1]

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

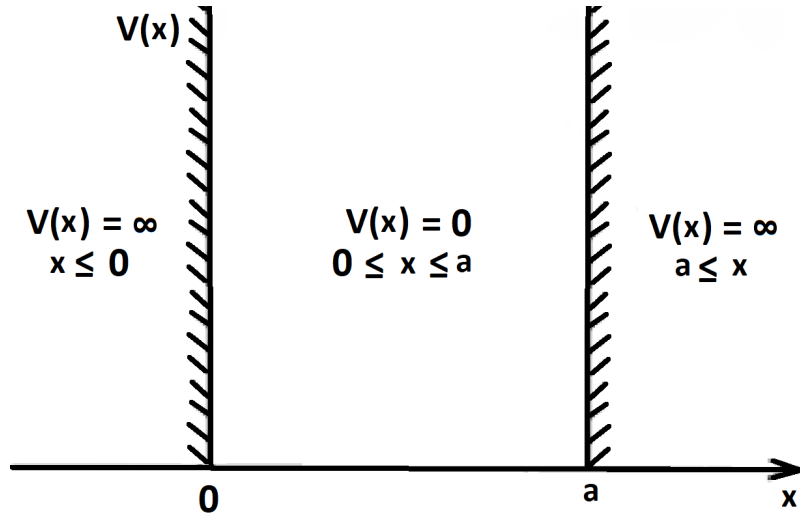


Figure 1: Sonsuz kuyu

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,

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

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,

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

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.

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

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, 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.

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

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

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

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

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

Kaynaklar

- [1] Zbigniew Ficek. *Quantum Physics for Beginners*.
- [2] S. Gasiorowicz. *Quantum Physics, John Wiley & Sons, 2003*.
- [3] Townsend John S. *Quantum Physics: A Fundamental Approach to Modern Physics, 2010*.