Kuantum Mekaniğinin Varsayımları

Kuantum mekaniği 6 temel varsayım üzerine kurulmuştur. Kuantum mekaniksel problemler bu varsayımlar kullanılarak (teorik/kuramsal olarak) çözülmekte ve elde edilen sonuçlar deneysel olarak (spektroskopi ile) kontrol edilmektedir. Eğer sonuçlar birbiri ile uyuşuyorsa ileri sürülen varsayım doğru olduğu kabul edilmektedir.

Varsayım 1: Dalga fonksiyonu

Bir kuantum mekaniksel sistem ile ilgili bütün bilgiler (sistemin hali) ***dalga fonksiyonu,*** Ψ ile ifade edilir. Ψ zamana ve koordinatlara bağlıdır ve reel ya da kompleks olabilir.

$$\Psi(r,t) = \Psi(x,y,z,t)$$

Dalga fonksiyonu, Hilbert uzayının tüm özelliklerini sağlamalıdır. Yani,

- Tek değerli olmalıdır.
- Sonlu olmalıdır.
- Sürekli olmalıdır.
- Kendisi ile skaler çarpımının yapılabilmesi gerekir.

Bağıntı bu koşullardan birini bile sağlamıyorsa dalga fonksiyonu niteliği taşımaz.

Dalga fonksiyonunun karesi, Ψ^2 taneciğin uzayda herhangi bir noktada bulunma olasılığını belirtir. Bir nokta için boyut söz konusu olmadığından o nokta için mümkün olan en küçük hacmin (hacim elementi, $d\tau$) varlığı kabul edilir.

Buna göre, sistemin (taneciğin) herhangi bir t zamanında hacim elementi içerisinde belirli bir noktada bulunma olasılığı

$$\int |\Psi|^2 \, d\tau = 1$$

şeklinde ifade edilir. Belirli iki sınır arasındaki bulunma olasılığı daima 1'den küçük olmasına rağmen tüm uzaydaki bulunma olasılığı 1 dir.

Buradaki $|\Psi|^2$ değere ***olasılık yoğunluğu*** denmektedir.

Varsayım 2: Operatörler

Hilbert uzayının elemanlarını birbirine dönüştüren komutlara ***operatör (işlemci)*** denir.

Bir operatör dalga fonksiyonuna uygulandığı zaman sistemin gözlenebilen bir özelliğini vermektedir. Klasik mekaniğin dinamik değişken adı verilen her niceliğine kuantum mekaniğinde bir hermitik operatör karşılık gelmektedir. Bunlar aşağıda sıralanmıştır.

	Klasik Mekanik	Kuantum Mekaniği
Konum	x y z	$x.$ $y.$ $z.$
Lineer Momentum	P_x P_y P_z	$P_x = -i\,\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial x}$ $P_y = -i\,\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial y}$ $P_z = -i\,\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial z}$
Enerji	E	$E = i\,\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial t}$
Hamiltonien	$H = T + V$	$\mathcal{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$

Her bir operatörün çıkarımı aşağıda ayrıntılı olarak açıklanmıştır.

$$\Psi = Ae^{\left({}^{i}/_{\hbar}\right)(Pr-Et)}$$

Denkleminden yola çıkarak;

x konumuna göre lineer momentumun kuantum operatörü;

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) P_x \ A\, e^{\left(i/\hbar\right)(P_x\, x - Et)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) P_x \ \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi \, \Psi^{-1}}{\partial x} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) P_x \ \Psi \, \Psi^{-1}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) P_x$$

$$\boxed{P_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \quad ya\ da \quad P_x = -i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}}$$

Bundan sonra P_y *ve* P_z değerleri aynı mantık ile hesaplanır.

$$\boxed{P_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \quad ya\ da \quad P_y = -i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial y}}$$

$$\boxed{P_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \quad ya\ da \quad P_z = -i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial z}}$$

Enerjinin kuantum operatörü;

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) (-E) \ A\, e^{\left(i/\hbar\right)(P_r\, r - Et)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) (-E) \ \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi \, \Psi^{-1}}{\partial t} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) (-E) \ \Psi \, \Psi^{-1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) - E$$

$$\boxed{E = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} \quad ya\ da \quad E = i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}}$$

Hamiltonien kuantum operatörü;

$$H = T + V$$

$$= \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + V$$

$$= \frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right) + V$$

Lineer momentum operatörleri denklemde yerine yazılırsa

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left[\left(-i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(-i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(-i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial z}\right)^2\right] + V$$

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V$$

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_x^2 + \nabla_y^2 + \nabla_z^2\right) + V$$

$$\boxed{\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V}$$

Varsayım 3: Zamana bağlı Schrödinger denklemi

Zamana bağlı Schrödinger denklemi aşağıdaki gibidir.

$$\mathcal{H}\,\Psi(r,t) = E\,\Psi(r,t)$$

2. varsayımda türetilen operatörler yukarıdaki denklemde yerine koyulursa;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\,\Psi(r,t) + V\,\Psi(r,t) = i\,\hbar\,\left(\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t}\right)$$

Şeklinde yazılır.

Bir bağıntının göreli olmayan bir partiküle eşlik eden bir dalga fonksiyonu olabilmesi için bu denklemi sağlaması gerekmektedir.

Varsayım 4: Özdeğer eşitliği

Bir kuantum mekaniksel sisteme ilişkin bir A operatörü ile Ψ dalga fonksiyonu arasında geçerli olan

$$A\Psi = \lambda\Psi$$

şeklindeki eşitliğe ***özdeğer eşitliği*** denir.

Ψ dalga fonksiyonuna A operatörü için ***özfonksiyon*** denir.

λ'ya ise bu özfonksiyona karşılık gelen ***özdeğer*** adı verilir.

- Bir tane özfonksiyonu olan λ'ya ***dejenere olmayan özdeğe***r denir.
- Birden fazla özfonksiyonu olan λ'ya ***dejenere özdeğer*** denir.

3. varsayımda verilen zamana bağlı Schrödinger denklemi bir özdeğer eşitliğidir.

$$\mathcal{H}\,\Psi = E\,\Psi$$

Yukarıdaki denklem için *" Hamiltonian operatörünün özdeğeri enerjidir. "* denir.

Varsayım 5: Ortalama değer

Durumu, normalize edilmiş Ψ dalga fonksiyonu ile verilen bir kuantum mekaniksel sisteme ilişkin

$$AAA \ldots = A^n$$

operatörüne karşılık gelen dinamik değişkenin ortalama değeri

$$\langle A^n \rangle = \langle \Psi \,| A^n |\, \Psi \rangle = \int \Psi^* \, A^n \, \Psi \, d\tau$$

bağıntısından bulunur.

Bir A operatörünün özdeğerinin bulunabilmesi için standart sapmanın sıfır olması gerekmektedir.

σ niceliğine ***standart sapma*** denir. Artı ya da eksi işaretli olabildiği gibi sıfır da olabilir.

σ^2 ile gösterilen $(\Delta A)^2$ niceliğine ise ***varyans*** adı verilir. Sıfır ya da daima artı işaretlidir.

Buna göre;

$$(\Delta A)^2 = \langle [A - \langle A \rangle]^2 \rangle$$

$$= \langle \Psi \mid [A - \langle A \rangle]^2 \mid \Psi \rangle$$

$$= \langle \Psi \mid [A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2] \mid \Psi \rangle$$

$$= \underbrace{\langle \Psi \mid A^2 \mid \Psi \rangle}_{\langle A^2 \rangle} - 2\langle A \rangle \underbrace{\langle \Psi \mid A \mid \Psi \rangle}_{\langle A \rangle} + \langle A \rangle^2 \underbrace{\langle \Psi \mid \Psi \rangle}_{1}$$

$$= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2$$

$$= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

$$\equiv \int \Psi^* A^2 \Psi \, d\tau - \left[\int \Psi^* A \ \Psi \, d\tau \right]^2$$

eşitlikleri yazılabilir.

Kuantum mekaniğindeki operatörlerin ortalama değerleri klasik fizik yasalarını sağlamaktadır.

Varsayım 6: Pauli dışarlama ilkesi

Pauli dışarlama ilkesi adı verilen kurala göre bir atomda $n,\ l,\ m_l\ ve\ m_s$ kuantum sayıları aynı olan iki elektron bulunamaz. Bu nedenle, aynı orbitalde bulunan iki elektronun spin kuantum sayıları, m_s birbirinden farklı yani +1/2 ve -1/2 olmak zorundadır. Aynı orbitalde bulunan iki elektronun spin kuantum sayıları zorla aynı yapılmak istenirse bir elektronun $n,$ $l\ ya\ da\ m_l$ kuantum sayılarından biri kendiliğinden değişir.

Birbirinden ayırt edilemeyen taneciklere ***özdeş tanecikler*** denir. Spin açısal momentum kuantum sayısı s = 1/2, 3/2, 5/2, … gibi yarı tamsayı olan özdeş taneciklere ***fermion***, s = 0, 1, 2, … gibi tamsayı olan taneciklere ***bozon*** adı verilir.

Dalga fonksiyonu özdeş tanecikleri yer değiştirmesi sırasında fermionlar için antisimetrik, bosonlar için ise simetriktir. Fermionların yan yana gelme olasılığı 0 iken bosonların yan yana gelme olasılığı 1’dir.