FZM 305: Kuantum Mekaniği I

5. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

Kuantum Mekaniği ve Atom Fiziği Ders Notları
Z. Zekeriya AYDIN
Ankara Üniversitesi

DALGA MEKANİĞİNİN TEMELLERİ

Atom ve atom-altı dünyasında klasik fiziğin işlemediğini; makroskopik fizikte edindiğimiz deneyimlerin tersine, atomik nesnelerin hem parçacık hem de dalga gibi davrandığını gördük.

Bir parçacığı dalga paketi kavramı ile anlattık.

Bu dalga paketi, atom ve atom-altı dünyada geçerli olan mekaniğin bir dalga mekaniği şeklinde kurulabileceğini göstermiştir.

Bu bölümde kuantum mekaniğinin en somut şekli olan dalga formülasyonu geliştirilecektir.

Schrödinger Dalga Denklemi

Tek boyutta bir parçacığı betimleyen *ψ(x,t)* dalga paketi

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

gibi bir diferensiyel denklem sağlar. Serbest parçacık için Schrödinger denklemi adını alan bu denklemin 3-boyuta genellemesi şöyledir:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,y,z,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x,y,z,t)$$

Bu denklemin bir çözümünün

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t) = A\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}.\boldsymbol{r} - Et)}$$

harmonik düzlem dalgası olduğu hemen görülebilir.

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)=A\,e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}.\boldsymbol{r}-Et)}$$

harmonik düzlem dalgasına $i\hbar(\partial/\partial t)$ ve $-i\hbar\nabla$ işlemcilerini uygularsak

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=E\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)$$

$$-i\hbar\nabla\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{p}\,\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)$$

bağıntılarını buluruz. Böylece Schrödinger denklemini elde etmek için parçacığın klasik enerji momentum bağıntısında, E ve $\boldsymbol{p}$ yerine

$$E\rightarrow i\hbar(\partial/\partial t) \qquad \text{ve} \qquad \boldsymbol{p}\rightarrow -i\hbar\nabla$$

diferensiyel işlemcileri konularak, ortaya çıkan işlemci bağıntısının her iki tarafı ψ dalga fonksiyonuna etki ettirilir:

$$E=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r}) \quad \rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t)$$

Dalga Fonksiyonu Yorumu ve Taşıyacağı Fiziksel Özellikler

Schrödinger denkleminin her çözümü bizim fiziksel sistemimizi betimlemez. Ancak bazı genel koşulları sağlayan çözümler fiziksel açıdan kabul edilebilir çözümler olacaktır. Bu koşulları daha çok $\psi(\mathbf{r},t)$ dalga fonksiyonunun yorumu belirleyecektir.

Bulunma olasılığı yorumu:

Kesinsizlik ilkesindeki Δx, parçacığın x-uzayında bulunabileceği bölgeyi gösterimlediğine göre, dalga özelliği nedeniyle parçacığın yeri tam bir kesinlikle bilinemez. Ancak "*parçacık, bu noktada bu kadarlık bir olasılıkla bulunabilir*" gibi hükümler verilebilir.

$|\psi(\mathbf{r},t)|^{2}$'ye parçacığın t anında $\mathbf{r}$ noktası dolayındaki birim hacimde bulunma olasılığı denir; yani $|\psi(\mathbf{r},t)|^2$ **bulunma olasılığı yoğunluğudur**.

Bulunma olasılığı

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

şeklinde gerçel olarak tanımlanır. Parçacığın t anında $\boldsymbol{r}$ noktası dolayındaki $d^3\boldsymbol{r}$ hacim elemanında bulunma olasılığı

$$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r}$$

ile verilir. Parçacık uzayda mutlaka bir yerde bulunacağından, olasılıkların tüm uzay üzerinden toplamı 1 olmalıdır:

$$\int_{\text{tüm uzay}} |\psi(\boldsymbol{r},t)| d^3\boldsymbol{r} = 1$$

Dalga paketinin zamanla şişmesi, olasılık yorumunda bir sorun yaratmaz. Çünkü bu yorumda parçacık hep noktasal kalır; paketin şişmesiyle bulunma olasılığı değerce azalarak daha geniş bir uzay bölgesine yayılır.

Dalga fonksiyonunun boylandırılması:

Dalga fonksiyonunun

$$\int_{\text{tüm uzay}} |\psi(\boldsymbol{r},t)| d^3\boldsymbol{r} = 1$$

bağıntısını sağlaması için, Schrödinger denkleminin fiziksel çözümlerinin kareleri integre edilebilir olmalıdır:

$$\int |\psi(\boldsymbol{r},t)| d^3\boldsymbol{r} = N = sonlu$$

Bu durumda dalga fonksiyonunu $(1/N)^{1/2}\,\psi(\boldsymbol{r},t)$ şeklinde tanımlayarak yukarıdaki 1' e boylandırmayı yapabiliriz.

Karesi integre edilebilen $\psi(\boldsymbol{r},t)$ çözümleri sonsuzda mutlaka sıfıra düşmelidir:

$$|\boldsymbol{r}| \to \infty \qquad için \qquad \psi(\boldsymbol{r},t) \to 0$$

Bu, tüm boylandırılabilen dalga fonksiyonlarının sağlaması gereken sınır koşuludur.

Boylandırılamayan dalga fonksiyonları:

$$\int_{tüm\ uzay} |\psi(\boldsymbol{r},t)| d^3\boldsymbol{r} = 1$$

şeklinde boylandırılamayan, yani karesinin integrali sonsuz çıkan dalga fonksiyonlarına en iyi örnek serbest parçacığı betimleyen düzlem dalgadır:

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = N\, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$$

Burada N bir sabittir. $|e^{ik.r}|^2=1$ olduğundan bu fonksiyonun mutlak değerinin karesi $|N|^2$' ye eşittir; yani sabittir. O halde parçacığı bulma olasılığı uzayın her yerinde aynıdır. Dolayısıyla parçacığı herhangi bir birim hacimde bulma olasılığı, uzayın geri kalan sonsuz kısmında bulma şansına göre sıfır denecek kadar küçüktür.

Bu tür boylandırılamayan dalga fonksiyonları ile işlem yapmanın bir yolu, bunları fiziksel olarak boylandırılabilen dalga fonksiyonlarının bir tür limiti olarak düşünmektir. Bu amaçla, parçacığı L kenarlı çok geniş bir kubik kutunun içine hapseder, $|\psi|^2$' nin integralini bu kübün hacmi üzerinden alıp dalga fonksiyonunu boylandırırız, sonra da $L\rightarrow\infty$ limitini alırız.