FZM 305: Kuantum Mekaniği I

7. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

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

BEKLENEN DEĞERLER

Kesinsizlik ilkesi parçacıkların dalga özelliğinin bir sonucu olarak ortaya çıkmıştı. Bir parçacığın yerini ve momentumunu hatasız ölçmek olası değildir. Dolayısıyla fiziksel niceliklerin kesin değerlerini değil de ancak **ortalama** (ya da **beklenen**) **değerlerini** bulabiliriz.

Parçacık ψ dalga fonksiyonu ile betimlensin. Konum vektörünün gözlenen değerlerinin ortalaması, ortalama hesap kurallarına göre,

$$\langle \boldsymbol{r} \rangle = \int \boldsymbol{r} |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r} = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\, \boldsymbol{r}\, \psi(\boldsymbol{r},t)\, d^3\boldsymbol{r}$$

olarak verilir. Aynı şekilde, ***r*'** nin herhangi bir *f(**r**)* fonksiyonunun ortalaması da

$$\langle f(\boldsymbol{r}) \rangle = \int f(\boldsymbol{r}) |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r}$$

biçiminde hesaplanır.

Çizgisel momentumun beklenen değerini hesaplamaya çalışalım. Klasik mekanikte $p_x = m(dx/dt)$ idi; bu kuantum mekaniğinde ortalama anlamında geçerlidir:

$$\langle p_x \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle$$

Bu ifadeyi hesaplamaya çalışalım:

$$\langle p_x \rangle = m \frac{d}{dt} \int \psi^* x \psi \, d^3 r$$

$$= m \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi + \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] d^3 r$$

$\partial\psi/\partial t$ ve $\partial\psi^*/\partial t$ yerine Schrödinger denkleminden eşiti yazılırsa yukarıdaki ifade aşağıdaki şekle indirgenir:

$$\langle p_x \rangle = -\frac{\hbar}{2i} \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] dx \, dy \, dz$$

Son integralin içine $\psi^*(\partial\psi/\partial x)$ terimi eklenip çıkarılırsa

$$\langle p_x \rangle = -\frac{\hbar}{2i}\int \left[\frac{\partial}{\partial x}(\psi^* \psi) - 2\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right] dx\, dy\, dz$$

elde edilir. İlk terim dx üzerinden integre edilirse sıfır verir ve sonuç olarak

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(\boldsymbol{r},t)\, d^3 r$$

bulunur. Görülüyor ki momentumun beklenen değerini konum uzayında hesaplamak için, ψ^* ile ψ arasına momentumun konum uzayındaki gösterimi diyebileceğimiz $-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ işlemcisini koyup integre etmeliyiz:

$$\langle \boldsymbol{p} \rangle = -i\hbar \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\, \boldsymbol{\nabla}\, \psi(\boldsymbol{r},t)\, d^3 r$$

Buradan genel olarak

$$\langle f(\boldsymbol{p}) \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\, f(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\, \psi(\boldsymbol{r},t)\, d^3 r$$

yazabiliriz.

<**p**>' nin zamana göre değişimini arayalım:

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -i\hbar\frac{d}{dt}\int \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}d^3r = -i\hbar\int\frac{\partial}{\partial t}[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}]d^3r$$

$$= -i\hbar\int[\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi^*\frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial\psi}{\partial t})]d^3r$$

$\partial\psi/\partial t$ ve $\partial\psi^*/\partial t$ yerine Schrödinger denkleminden eşiti yazılırsa yukarıdaki integral aşağıdaki şekle getirilir:

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -\int[\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\psi) - \psi^* V\frac{\partial\psi}{\partial x}]d^3r - \frac{\hbar^2}{2m}\int[(\nabla^2\psi^*)\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}(\nabla^2\psi)]$$

İkinci satırdaki integralin içi S_∞ üzerinden yüzey integraline çevrilir ve sıfır verir. Böylece

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -\int \psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi d^3r = -\langle\frac{\partial V}{\partial x}\rangle$$

ve genel olarak da **Ehrenfest teoremi** olarak bilinen bağıntı bulunur:

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{p}\rangle = -\langle\nabla V(\boldsymbol{r})\rangle = \langle \boldsymbol{F}\rangle$$

Momentum Dalga Fonksiyonu: Parseval Teoremi

de Broglie teorisinde, *ψ(**r**,t)* dalga fonksiyonunun Forier dönüşümü

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\int \Phi(\boldsymbol{p},t)\,\mathrm{e}^{i\boldsymbol{p}.\boldsymbol{r}/\hbar}\,d^3p$$

şeklindeydi. Buradaki *Φ (**p**,t)* fonksiyonu, bu dalga paketinde ***p**=ħ**k*** momentumlu dalgaların hangi önemde rol oynadığını belirten bir olasılık ölçüsü gibi düşünülebilir. Gerçekten de böyle olduğunu görelim:

$$1=\int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)\,d^3r=\int\left[\int \Phi^*(\boldsymbol{p},t)\,\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{p}.\boldsymbol{r}/\hbar}\,d^3p\right]\psi(\boldsymbol{r},t)\,d^3r$$

$$=\int d^3p\,\Phi^*(\boldsymbol{p},t)\left[\int \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{p}.\boldsymbol{r}/\hbar}\,\psi(\boldsymbol{r},t)\,d^{3r}\right]=\int d^3p\,\Phi^*(\boldsymbol{p},t)\Phi(\boldsymbol{p},t)$$

böylece

$$1=\int |\psi(\boldsymbol{r},t)|\,d^3r=\int |\Phi(\boldsymbol{p},t)|\,d^3p$$

eşitliği bulunur. Bu bağıntı **Parseval teoremi** olarak bilinir. *ψ(**r**,t)* fonksiyonu 1' e boylandırılmışsa, *Φ (**p**,t)* fonksiyonu da otomatik olarak 1' e boylu demektir.

Konum uzayı ile momentum uzayı arasındaki bağlantı

Konum Uzayı:

Parçacığı ya da sistemi konum uzayında $\psi(\mathbf{r},t)$ dalga fonksiyonu ile gösterimleriz ve ona ait tüm bilgileri bu fonksiyondan çıkarırız.

Schrödinger denklemi çözülerek $\psi(\mathbf{r},t)$ bulunur ve sonra sistemin dinamik değişkenlerine karşı gelen işlemcilerin bu dalga fonksiyonu üzerinden beklenen değerleri hesaplanır.

Bu uzayda $\boldsymbol{p}$ ve $\boldsymbol{r}$ dinamik değişkenlerine

$$\boldsymbol{p} \rightarrow \boldsymbol{p}_{op} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

$$\boldsymbol{r} \rightarrow \boldsymbol{r}_{op} = \boldsymbol{r}$$

İşlemcileri karşı gelir. Genel olarak bir $A(\mathbf{r}, \boldsymbol{p})$ dinamik değişkenine karşı gelen işlemci ise şöyle bulunur:

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \rightarrow A_{op} = A(\mathbf{r}, -i\hbar\boldsymbol{\nabla})$$

Momentum Uzayı:

Parçacığı ya da sistemi momentum uzayında $\Phi(\boldsymbol{p},t)$ dalga fonksiyonu ile gösterimleriz ve ona ait tüm bilgileri bu fonksiyondan çıkarırız.

$\Phi(\boldsymbol{p},t)$' nin sağladığı Schrödinger denklemi çözülerek $\Phi(\boldsymbol{p},t)$ bulunur ve sonra sistemin dinamik değişkenlerine karşı gelen işlemcilerin bu dalga fonksiyonu üzerinden beklenen değerleri hesaplanır.

Bu uzayda $\boldsymbol{p}$ ve $\boldsymbol{r}$ dinamik değişkenlerine

$$\boldsymbol{p} \rightarrow \boldsymbol{p}_{op} = \boldsymbol{p}$$

$$\boldsymbol{r} \rightarrow \boldsymbol{r}_{op} = i\hbar \boldsymbol{\nabla}_{p} \qquad (\boldsymbol{\nabla}_{p} = \partial/\partial p_x + \partial/\partial p_y + \partial/\partial p_z)$$

İşlemcileri karşı gelir. Genel olarak bir $A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ dinamik değişkenine karşı gelen işlemci ise şöyle bulunur:

$$A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) \rightarrow A_{op} = A(i\hbar \boldsymbol{\nabla}_{p}, \boldsymbol{p})$$