

BÖLÜM 10

KUANTUM MEKANİĞİNİN VARSAYIMLARI

(zamandan bağımsız)

1. **Postülat** : Bir sistemin hâli, bir dalga fonksiyonuyla ($\psi(\mathbf{r}, t)$) tamamen açıklanır.
2. **Postülat** : Ölçülebilen (gözlemlenebilen) bütün nicelikler, Hermit doğrusal operatörü ile tarif edilir.
3. **Postülat** : Gözlemlenebilen bir “A” ölçümünde elde edilen tek değer, “ $\hat{A}$ ” operatörüne karşılık gelen a_n özfonksiyonudur. Ölçüm, sistemin hâlini, a_n özdeğerine sahip $\hat{A}$ ’nın özfonksiyonuna değiştirir.
4. **Postülat** : Bir sistem, normalize edilmiş bir dalga fonksiyonu (ψ) ile tarif edilirse $\hat{A}$ ya karşılık gelen gözlemlenebilen ortalama değer

$$\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau$$

olur.

Postülatların etkileri ve ayrıntıları

1] (a) Fiziksel olarak uygun nicelik, $|\psi|^2$ ’dir.

$$\psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \equiv \begin{array}{l} t \text{ zamanında ve } \mathbf{r} \text{ konumunda} \\ \text{olasılık yoğunluğu} \end{array}$$

(b) $\psi(\mathbf{r}, t)$, normalize edilmelidir.

$$\int \psi^* \psi d\tau = 1$$

(c) $\psi(\mathbf{r}, t)$, uygun sonuç vermelidir:

- (i) Tek değerli
- (ii) ψ ve ψ' sürekli
- (iii) Sonlu

2] (a) Örnek: $\hat{H}$ özfonksiyonlu bir kutudaki parçacık

$$\hat{H}(x)\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad \psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Ancak ψ , bir operatörün özfonksiyonu değilse ifade doğru olmaz.

Örneğin; momentum operatörüyle birlikte yukarıda verilen $\psi_n(x)$

$$\begin{aligned} \hat{p}_n\psi_n(x) &= -i\hbar \frac{d}{dx}\psi_n(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \left[\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right] \\ &\neq p_n \left[\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right] \end{aligned}$$

(b) Klasik ölçümlerden, bir kuantum mekanik operatörü oluşturmak için

$$\hat{x} = x \quad \text{ve} \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

ifadeleri klasik gösterimde değiştirilerek kullanılır.

Örneğin;

$$\begin{aligned} \text{K.E.} &= \frac{1}{2m} \hat{p}^2 = \frac{1}{2m} (\hat{p})(\hat{p}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (1D) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (3D) \end{aligned}$$

Başka bir 3-boyutlu örnek: Açısal momentum $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$

$$\begin{aligned} l_x &= yp_z - zp_y = -i\hbar \left(y \frac{d}{dz} - z \frac{d}{dy} \right) \\ l_y &= zp_x - xp_z = -i\hbar \left(z \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dz} \right) \\ l_z &= xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{d}{dy} - y \frac{d}{dx} \right) \end{aligned}$$

(c) Doğrusal'ın anlamı

$$\begin{aligned}\hat{A}[f(x) + g(x)] &= \hat{A}f(x) + \hat{A}g(x) \quad \text{ve} \\ \hat{A}[cf(x)] &= c\hat{A}[f(x)]\end{aligned}$$

(d) Hermit' in anlamı

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 d\tau = \int \psi_2 (\hat{A} \psi_1)^* d\tau$$

ve $\hat{A}$ 'nın özdeğerinin gerçek olduğunu ifade eder. Bu önemlidir ! Ölçülebilen değerler, gerçek değerler olarak belirtilmelidir.

İspat: $\hat{A}\psi = a\psi$ alındığında

$$\begin{aligned}\int \psi^* (\hat{A}\psi) d\tau &= \int \psi (\hat{A}\psi)^* d\tau \\ \int \psi^* a\psi d\tau &= \int \psi (a\psi)^* d\tau \\ \Rightarrow a &= a^*\end{aligned}$$

ifadesi sadece a gerçek ise doğrudur.

(e) Hermit operatörlerin özfonksiyonları, ortogonaldır.

Bir başka deyişle, $\hat{A}\psi_m = a_m\psi_m$ ve $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$ ise ($m \neq n$ 'den farklıysa)

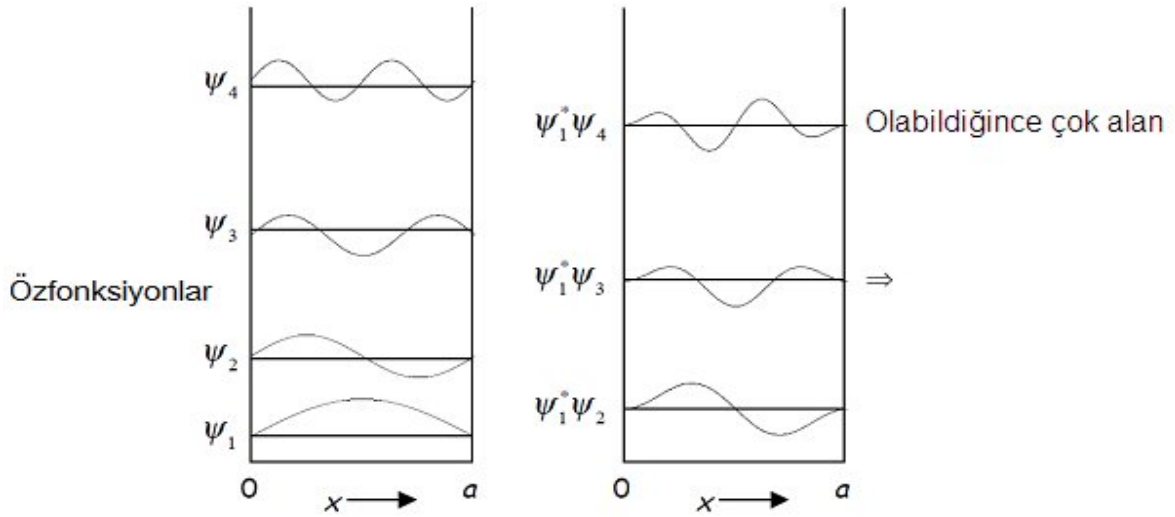
$$\boxed{\int \psi_m^* \psi_n d\tau = 0 \quad m \neq n}$$

olur.

İspat:

$$\begin{aligned}
 \int \psi_m^* \hat{A} \psi_n d\tau &= \int \psi_n (\hat{A} \psi_m)^* d\tau \\
 a_n \int \psi_m^* \psi_n d\tau &= a_m^* \int \psi_n \psi_m^* d\tau \\
 \Rightarrow (a_n - a_m^*) \int \psi_m^* \psi_n d\tau &= 0 \\
 \underbrace{(a_n - a_m^*)}_{=0 \text{ } n=m \text{ ise}} \underbrace{\int \psi_m^* \psi_n d\tau}_{=0 \text{ } n \neq m \text{ ise}} &= 0
 \end{aligned}$$

Örnek : Bir kutudaki parçacık



Ayrıca, $\hat{A}$ 'nın özfonksiyonları normalize edilirse ortonormal olurlar.

$$\int \psi_m^* \psi_n d\tau = \delta_{mn}$$

↑
Krönecker delta

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \text{ ise (normalizasyon)} \\ 0 & m \neq n \text{ ise (ortogonallik)} \end{cases}$$

3] ψ , bir operatörün özfonksiyonu ise herşey daha kolaydır, örneğin;

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad \text{bağıntısında enerjinin ölçülmesi ile bir değer bulunur.}$$

Ancak ψ , bir operatörün özfonksiyonu değilse ne olur?

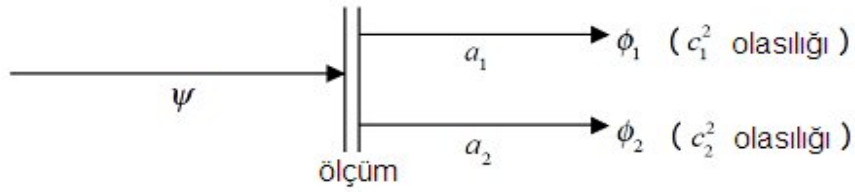
Örneğin; ψ , özfonksiyonu ile çakışan bir fonksiyon olabilir.

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$$

Burada,

$$\hat{A}\phi_1 = a_1\phi_1 \quad \text{ve} \quad \hat{A}\phi_2 = a_2\phi_2 \quad \text{dir.}$$

A 'nın ölçümü, bizi sırasıyla olasılıkları c_1^2 veya c_2^2 olan a_1 veya a_2 'ye getirir ve ölçümün, ϕ_1 veya ϕ_2 konumlarından birine değişmesine yol açar.



4] Bu madde, tahminî değerle ilgilidir.

(i) ψ_n , $\hat{A}$ 'nın bir özfonksiyonu ise $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$ olur.

$$\langle a \rangle = \int \psi_n^* \hat{A} \psi_n d\tau = a_n \int \psi_n^* \psi_n d\tau = a_n$$

$\langle a \rangle = a_n$ mümkün olan tek değer

(ii) Yukarıdaki gibi

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 \quad \text{ise}$$

$$\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau = \int (c_1\phi_1 + c_2\phi_2)^* \hat{A} (c_1\phi_1 + c_2\phi_2) d\tau = c_1^2 a_1 + c_2^2 a_2$$

c_1^2, c_2^2 ölçümünün olasılığıdır.

$\langle a \rangle$ = muhtemel değerlerin olasılıklarıyla birlikte ağırlıklı ortalaması.