

Schrödinger denklemi

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x) \Psi(x, t)} \quad (10-1)$$

Schrödinger denk. bir $V(x)$ potansiyeli içinde bir boyutta bir parçacığın hareketini inceler.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x, t) \quad (10-2)$$

Köşeli parantez içindeki terim, dalga fonksiyonuna etki eden bir işlemci olup, **Hamilton** işlemcisi olarak bilinir.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\substack{\text{dalga fonk. eğriliği} \\ \text{ile ilgili kinetik enerji}}} + V(x) \quad (10-3)$$

ve bu klasik enerjiye karşılık gelir.

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (10-4)$$

Not. $\hat{\cdot}$ işareti işlemciyi gösterir.

Schrödinger denk. (SD) böylece şöyle yazılabilir

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t)} \quad (10-5)$$

SD'nin özellikleri

Boşlukta EM dalgalarının dalga denk.

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{E} = 0, \quad (10-6)$$

veyahut

$$m\ddot{x} = F(x) \quad (10-7)$$

Newton denk.nin aksine SD zamana göre birinci mertebededir.

- $\Psi(x, t=0)$, daha sonraki zamanlarda $\Psi(x, t)$ 'yi hesaplamak için belirlemek yeterli olacaktır. İkinci mertebe denk.ler için fonksiyonun kendisini ve türevini, daha doğrusu eşdeğer olarak, konumu ve momentumu $t=0$ anında belirlemek zorundayız.

- Parçacığın konumu ve momentumu eş zamanlı olarak dalga fonksiyonu $\Psi(x,t)$ kodlanmıştır. Bu özellik $\Psi(x,t)$ nin karmaşık olması gerçeği ile yakından ilgilidir.

Örnek. Sağa doğru hareketli tek dalga boylu elektrik alanı:

$$\mathbf{E}_{\rightarrow}(x,t) = \mathbf{E}_0 \cos(kx - \omega t), \text{ gerçel} \quad (10-8)$$

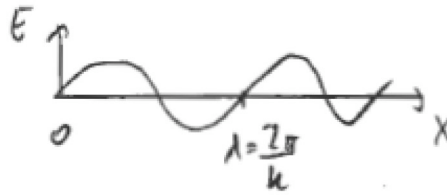
Bazen kompleks yazılımı kullanırız:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{ikx - i\omega t} \quad (10-9)$$

ancak daima elektrik alanını gerçel kısım olarak hesaplarız. Sola doğru hareketli dalga

$$\mathbf{E}_{\leftarrow}(x,t) = \mathbf{E}_0 \cos(kx + \omega t) \quad (10-10)$$

Dalga'nın sağa mı yoksa sola mı hareket ettiğini bilmek için $\vec{E}$ 'yi bilmemiz gerekir.



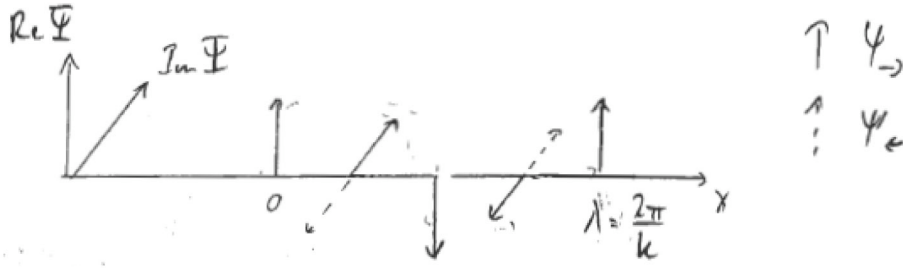
Şekil I: Gerçel elektrik alanının herhangi bir sbt zamanda ($t = 0$) hareket yönünü belirtmesi imkansızdır. Hareket yönü için zamana göre türevini (momentum yönü) belirlememiz gerekir.

KM dalga fonk. Gerçekten komplekstir:

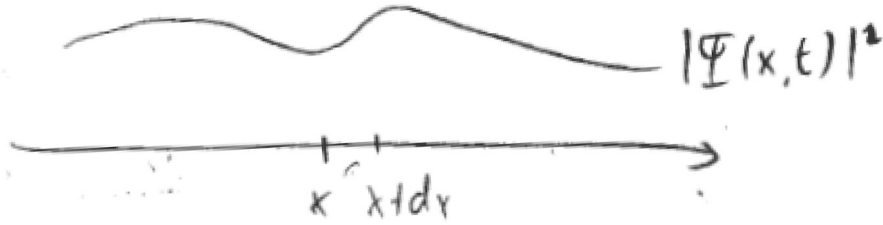
$$\Psi_{\rightarrow}(x,t) = \Psi_0 e^{ikx - i\omega t} \quad \text{sağa hareketli} \quad (10-11)$$

$$\Psi_{\leftarrow}(x,t) = \Psi_0 e^{-ikx - i\omega t} \quad \text{sola hareketli} \quad (10-12)$$

- $\Psi(x,t)$ dalga fonk. kompleks olup, SD kompleks dalga fonk.'nun uzayda ve zamanda nasıl ilerlediğini betimler.
- SD göreceli değildir.
- SD doğrusaldır, yani ψ_1 ve ψ_2 çözümleri ise $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ de çözümüdür ve c_1, c_2 keyfi kompleks sayılardır: dalgalar için **üstüste binme ilkesi**.



Şekil II: Zaman sbt.ken kompleks düzlemde alınan bir foto hem momentum şiddeti $\hbar k (\lambda = \frac{2\pi}{k})$ ve hemde hareket yönü (momentum yönü)nü, kompleks düzlemdeki kiraliteyle, yani sağel veya soalel civata yönüyle belirler.



Şekil III: $|\Psi(x,t)|^2$ olasılık yoğunluğu olup, uzayda parçacığı bir konumda bulmayı belirler.

Dalga fonksiyonunun $\Psi(x,t)$ yorumu

Bir t zamanında parçacığın konumu üzerine bir ölçüm yaparsak, onu x ve $x+dx$ arasında bulma olasılığı $|\Psi(x,t)|^2$ ile verilir. SD kısmi dif. denk. olup (hem $\frac{\partial}{\partial x}$ hemde $\frac{\partial}{\partial t}$) ihtiva eder. $V(x)$ zamandan bağımsız olduğundan, SD iki adet adi dif. denkleme ayrıştırılabilir.

$$\Psi(x,t) = T(t)\psi(x) \quad \text{anzats}$$

Böylece SD şu durumu alır

$$i\hbar\psi(x)\frac{dT}{dt}(t) = T(t)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right\} \quad (10-13)$$

$T(t)\psi(x) \neq 0$ olmak üzere $T(t)\psi(x)$ ile her iki tarafı bölersek

$$i\hbar\frac{1}{T}\frac{dT}{dt}(t) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right\}\frac{1}{\psi(x)} \quad (10-14)$$

Eşitliğin her iki tarafı da farklı değişkenlere bağlı olduğundan, bunlar sbt olmalıdır. Bu sbt'i E olarak, yani sistemin toplam enerjisi olarak ele alırsak:

$$i\hbar \frac{dT}{dt}(t) = ET(t) \implies T(t) = Ce^{-iEt/\hbar} \quad (10-15)$$

Zaman bağımlılığı, $\frac{E}{\hbar}$ açısal hızıyla zamanda evrim yapan bir faz çarpanıdır. $\Psi(x)$ denklemi

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x) = E\psi(x) \implies \text{zamana bağımlı} \quad (10-16)$$

$$\boxed{\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)} \implies \text{zamandan bağımsız Schrödinger denklemi} \quad (10-17)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (10-18)$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x, t)} \quad (10-19)$$

ise **zamana-bağılı Schrödinger denk.dir.** Zamandan bağımsız SD: $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ bir özdeğer denklemidir (dalga fonksiyonuna etki eden işlemci aynı dalga fonk.'nu E ile çarpılmış olarak ortaya çıkarır). **KM'**de bu Heisenberg matris yazılım şekli olup; matrisler, özvektörler ve özdeğerleri hatırlatır. $\psi_n(x)$ çözümü SD'nin zamana bağlı çözümü olup, E_n özdeğerli bir sistem öz durumunu gösterir. Bir $\psi_n(x)$ öz durumunun zamansal evrimi en basitçe

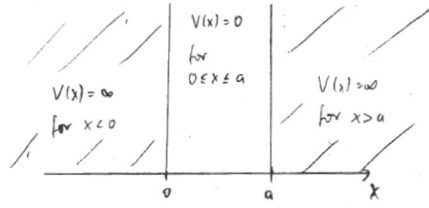
$$\Psi_n(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x) \quad (10-20)$$

olarak verilir.

Görevimiz tüm $\psi_n(x)$ 'ler ve bunlara karşı gelen E_n özdeğerlerini bulmaktır. Daha sonra göstereceğimiz gibi sorun tamamen çözülmüştür: SD denk.ni çözen keyfi bir durum, öz durumların bir üstüste binmesi gibi yazılabilir. E_n özdeğerleri kesikli değerler (Bohr atomundaki gibi) alabilir veyahut bunlar bir süreklilik teşkil ederler (serbest bir parçacığın enerjileri gibi). Daha genel olarak, SD, $\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x)$ 'nin bir çözümü $\psi_E(x)$, E için olup buna **enerji öz durumu** veya **enerji öz fonksiyonu** denir. Bundan başka; momentum, konum, açısal momentum, vs gibi nicelikler içinde özdeğer denk.leriyle karşılaşırız.

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_E(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x)} \quad (10-21)$$

dif. denk.nin çözümü, E enerji parametresi olmak üzere, $\psi_E(x)$ olsun. Şimdi basit bir örnek ele alalım.



Şekil IV: Sonsuz kuyu

Sonsuz duvarlı bir kutudaki parçacık

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (10-22)$$

$V \rightarrow \infty$ iken, $\psi(x) = 0$ olmasını öngörür (aksi takdirde E veyahut eğrilik sonsuz olmalı) $\Rightarrow x < 0$ veya $x > a$ için $\psi(x) = 0$ olmalıdır. $0 \leq x \leq a$ aralığında

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi(x) \quad (10-23)$$

veyahut

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \quad (10-24)$$

olur.

Eğer $E < 0$ ise, çözümler $k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$ olmak üzere $e^{\pm kx}$ şeklindedir. Dalga fonk.

$\psi(x)$ 'in sürekli olması gerekir (kesiksiz), aksi takdirde $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ sonsuz olur. $\psi(x) = 0$ olabilmesi için, $\psi = Ae^{kx} + Be^{-kx}$ de $A = -B$ olmalıdır., ancak $\psi(x) \neq 0$ ve ψ sürekli olamaz. $\Rightarrow$ negatif özdeğerler E için hiçbir çözüm yoktur.

$E > 0$ ise, çözümler $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ (veya $\sin kx$, $\cos kx$) olmak üzere, $e^{\pm ikx}$ şeklindedir.

E 'nin veya k 'nın izin verilen değerleri sınır şartlarıyla belirlenir. $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ yazılırsa, $\psi(0) = A + B = 0$ 'dan $A = -B$ olmalıdır. $\psi = 0$ için,

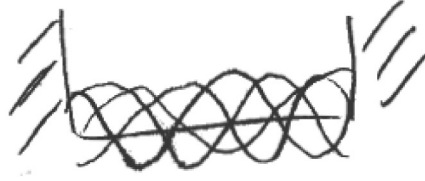
$Ae^{ika} - Ae^{-ika} = \frac{2Ai}{2i} (e^{ika} - e^{-ika}) = 2iA \sin ka = 0$ olmalıdır. Bu durum ancak, $ka = n\pi$ veyahut $k_n = n \frac{\pi}{a}$, $n = 1, 2, 3, \dots$ ($n = 0, \psi = 0$) olması halinde gerçekleşir. Böylece özdeğerler

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \text{ enerji özdeğerleri}$$

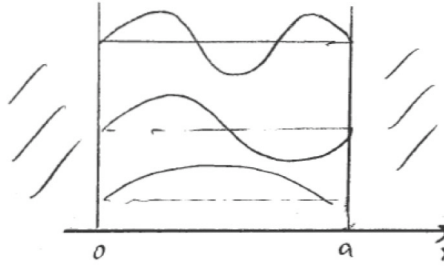
olup, buna karşı gelen özfonksiyonlar,

$$\psi_n(x) = C_n \sin k_n x = C_n \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)$$

olur ki burada C_n kompleks sayılardır. Yukarıdaki durum **KM**'nin genel bir özelliğidir. Dalga fonksiyonu üzerindeki sınır şartları enerji düzeylerinin kuantumlanmasına yani sadece kesikli enerji düzeylerine izin verirler.



Şekil V: deBroglie dalgalıların çoğunluğu yıkıcı girişime yol açar.



Şekil VI: Sonsuz duvarlı bir kutudaki öz durumlar

Sebe. Yapıcı girişim, tam bir yoldan sonraki kararlı faz, diğer ψ enerjileri için dışa doğru girişim yapar. $|\psi_n(x)|^2$ 'yi olasılık olarak yorumlamak için onu normalleştirmemiz gerekir ki parçacığı uzayda herhangi bir yerde bulmayı bir eştirelim.

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1} \quad \text{Dalga fonk. normalleşmesi} \quad (10-25)$$

Burada $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = |C_n|^2 \int_0^a dx \sin^2\left(n\pi \frac{x}{a}\right) = \frac{1}{2} a |C_n|^2 = 1$ dir.

Dalga fonk.'nun toplam global fazının hiçbir fiziksel sonucu yoktur ve C_n 'i gerçel olarak seçeriz, Böylece

$$\boxed{u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ ($0 \leq x \leq a$, $u_n = 0$ başka durumda) olmak üzere kare kuyunun normalleşmiş öz durumlarını buluruz.

Not. Parçacığın kutudaki durumda minimum enerjisi sıfır olmayıp, bir taban durumu

$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ enerjisiyle verilir. Buna bazen **sıfır-nokta enerjisi** de denilir.