

Parçacığın bulunabileceği bölgede $V(x) = 0$ olduğundan, sıfır-noktası enerjisi bu durumda tamamen kinetik olmalıdır. Bu enerjiyi Heisenberg belirsizlik ilkesini kullanarak tahmin edebiliriz: Parçacığı $\Delta x = a$ gibi bir bölgeye sıkıştırmak suretiyle, momentumu bir belirsizlik $\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{\hbar}{a}$ ve kinetik enerji olarak $\frac{(\Delta p)^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ buluruz.

$0 \leq x \leq a$ aralığında $V(x) = 0$ ve $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi$ olduğundan ve **KM**'de $E = \frac{p^2}{2m}$, bu durumda momentum, dalga fonk.'nun $\frac{\partial}{\partial x}$ ve kinetik enerjide $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ eğriliği ile ilgilidir.

Özfonksiyonların özelliklerini kullanarak,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^*(x) u_m(x) = \int_0^a dx \frac{2}{a} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right) \sin\left(m\pi \frac{x}{a}\right) \quad (11-1)$$

$$= \frac{1}{a} \int_0^a dx \left\{ \cos\left((n-m)\pi \frac{x}{a}\right) - \cos\left((n+m)\pi \frac{x}{a}\right) \right\} \quad (11-2)$$

$$= \frac{\sin((n-m)\pi)}{(n-m)\pi} - \frac{\sin((n+m)\pi)}{(n+m)\pi} \quad (11-3)$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{for } n \neq m, \\ 1 & \text{for } n = m. \end{cases} \quad (11-4)$$

$$= \delta_{nm} \quad (11-5)$$

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 0 & \text{for } n \neq m, \\ 1 & \text{for } n = m. \end{cases} \rightarrow \text{Kronecker delta} \quad (11-6)$$

Bu genel bir özellik olup, bu örneğe mahsus değildir. Farklı özdeğerlere ait özfonksiyonlar **diktirler**. Özfonksiyonlar normalleştirilirse, bunların **ortonormal** (normalize dik) oldukları söylenebilir.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^*(x) u_m(x) = \delta_{nm} \quad \text{ortonormallik şartı} \quad (11-7)$$

Kutu potansiyel için kompleks eşlenik gerekli olmayıp, ancak genelde özfonksiyonlar gerçel olur, genelde gereklidirler.

$$\int u_n^* u_n dx = \int |u_n|^2 dx = 1 \quad \text{normalleşme} \quad (11-8)$$

Baz olarak özfonksiyonlar

Özfonksiyonların bilinmesi niçin önemlidir? Kutu potansiyelini ele alalım: Fourier teoremine göre, $\psi(0) = 0 = \psi(a)$ sınır şartlarını sağlayan herhangi bir $\psi(x)$ fonk., $\sin(n\pi \frac{x}{a})$ 'nın bir toplamı şeklinde yazılabilir.

Not. $\cos(n\pi \frac{x}{a})$ terimleri gözükmez zira bunlar sınır şartlarını sağlamazlar.

$u_n \propto \sin(n\pi \frac{x}{a})$ olduğundan, aynı zamanda

$$\boxed{\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x)} \quad \psi(x)'in \text{keyfi özfonksiyonlarına açılımı} \quad (11-9)$$

Açılım katsayıları c_n 'leri hesaplamak için, özfonk.ların ortonormallik özelliğini kullanarak

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_m^* \psi(x) = \int_0^a dx u_m^*(x) \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x) \right) \quad (11-10)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \int_0^a dx u_m^* u_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \delta_{mn} \quad (11-11)$$

$$= c_m \quad (11-12)$$

Böylece açılım katsayısı şu integral hesaplanarak elde edilir:

$$\boxed{c_m = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_m^*(x) \psi(x)} \quad \text{açılım katsayıları} \quad (11-13)$$

Burada yine kompleks eşleniğe, u_m gerçel olduğundan, ihtiyaç duymayız, ancak onu genel şeklinde yazmış bulunuyoruz. Şayet $\psi(x)$ keyfi fonk. bu kümenin fonk.larının bir üstüste binişi şeklinde yazılabilirse $\{u_n(x)\}$ fonk.lar kümesini **tam** olarak adlandırıyoruz. Fonk.ların tam ve ortonormal bir kümesi **baz** olarak bilinir. Kutudaki parçacık için türetilmiş olan yukarıdaki özellikler, **KM**'de genelde doğrudur.

1. Bir Hamiltonun enerji özfonk.ları u_n

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (11-14)$$

bir baz teşkil eder ve $\psi(x)$ keyfi dalgaboyu öz durumların bir üstüste binmesi olarak açınabilir ki

$$\boxed{\psi(x) = \sum_n c_n u_n(x)} \quad (11-15)$$

burada c_n 'ler kompleks katsayılardır. Özdeğerlerin spektrumu veya özdeğerlerin spektrumunun bir kısmı sürekli ise, açılım şu integrali içerir:

$$\psi(x) = \sum_n c_n u_n(x) + \int dE_c(E) u_E(x)$$

2. c_n açınım katsayıları şu şekilde verilmiştir:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^*(x) \psi(x), \quad (11-16)$$

yani, u_n özfonksiyonları bilinir bilinmez derhal hesaplanabilir.

Vektör Analizine Benzerlik

n-boyutlu bir vektör uzayı ele alalım. n adet birbirine dik birim vektörler $\{\hat{e}_i\}_{i=1,\dots,n}$ bir baz teşkil ederler. Yani, keyfi bir $\mathbf{v}$ vektörü birim vektörlere açınabilir ki:

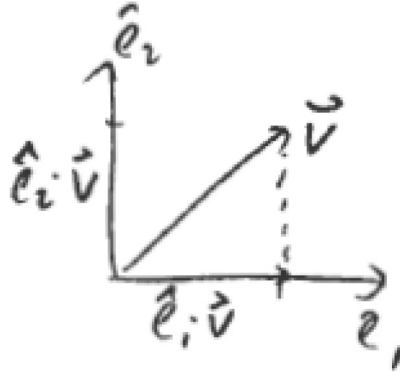
$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n \underbrace{c_i}_{\text{kompleks sayı}} \underbrace{\hat{e}_i}_{\text{baz vektörü}} \quad (11-17)$$

burada c_i 'ler uygun seçilmiş katsayılardır. c_i 'ler tek olarak tayin edilmiş olup

$$c_i = \hat{e}_i \cdot \mathbf{v}. \quad (11-18)$$

olarak yazılır.

Vektör analizi cinsinden, $\psi(x)$ dalga fonk.ları bir vektör uzayı teşkil ederler ki buna Hilbert uzayı denilir, enerji özfonk.ları $u_n(x)$ bir baz teşkil eder.



Şekil I: $\mathbf{v}$ 'nin $\hat{e}_i$ üzerine izdüşümü

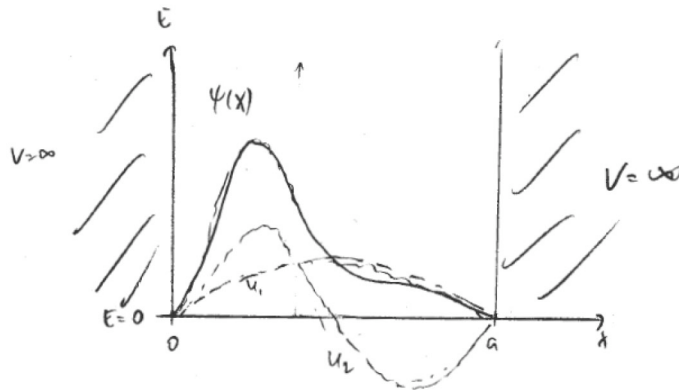
Hilbert uzayının boyutu, bağımsız enerji özfonksiyonlarının sayısıdır. Eğer bu sayı sonsuz ise, Hilbert uzayı sonsuz boyutludur.

Bunla ilgili olarak aşağıdaki bağıntılar vardır:

KM	vektör analizi
dalgafonk.: $\psi(x)$ enerji özfonk.: $u_i(x)$ bağımsız $u_i(x)$ sayısı $\int_{-\infty}^{\infty} dx u_i^*(x) \psi(x)$ $\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*(x) \psi_2^*(x)$ $\int_{-\infty}^{\infty} dx u_i^*(x) u_j^*(x) = \delta_{ij}$ $\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x)$, herhangi $\psi(x)$ Özdeğer denklemi: $\hat{H} \psi_E(x) = E \psi_E(x)$ Hermit-sel işlemcilerin özfonk. kümesi bir baz teşkil eder, Hamilton böyle bir işlemcidir.	vektör: $\mathbf{v}$ baz vektörü: $\hat{e}_i$ vektör uzayının boyutu skaler çarpım: $\hat{e}_i \cdot \mathbf{v}$ skaler çarpım: $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2$ ortonormallik: $\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j = \delta_{ij}$ tamlık: $\mathbf{v} = \sum_i c_i \cdot \hat{e}_i$, herhangi $\mathbf{v}$ Özdeğer denklemi: $\hat{M} \mathbf{v} = m \mathbf{v}$ Belli türdeki matrislerin özfonk.larının kümesi bir baz teşkil eder. (kendine ek matrisler $M^\dagger = M$.)

Açınım Katsayılarının Fiziksel Yorumu

Keyfi bazı $\psi(x)$ fonksiyonunu (sınır şartlarıyla uyumlu) kutu içinde hazırladığımızı kabul edelim.



Şekil II: Kutudaki bir dalga fonk. Özfonksiyonlar cinsinden açılımının gösterilmesi

- Özfonksiyonlara açılım:

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i(x) \quad (11-19)$$

$$= c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x) + \dots \quad (11-20)$$

- c_i 'nin fazı (işareti) önemlidir ve genliğin çoğunun sağda mı yoksa solda mı olduğunu vs. belirler.

- $|c_i|$ 'nin daha büyük olması, $\psi(x)$ 'nin $u_i(x)$ gibi olduğunu gösterir. ($\psi(x)$ 'in u_i 'ye izdüşümünün daha büyük olması şu benzerliği ortaya çıkarır: $c_i = \int dx u_i^*(x) \psi(x)$).

- $\sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2$ yi hesaplayalım:

$$\sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} c_i^* c_i \quad (11-21)$$

$$= \sum_{i=1}^{\infty} c_i^* \int dx u_i^*(x) \psi(x) \quad (11-22)$$

$$= \int dx \psi(x) \sum_{i=1}^{\infty} c_i^* u_i^*(x) \quad (11-23)$$

$$= \int dx \psi(x) \left(\sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i(x) \right)^* \quad (11-24)$$

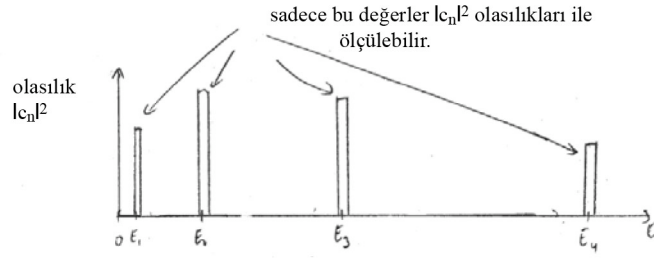
$$= \int dx \psi(x) \psi^*(x) \quad (11-25)$$

$$= \int dx |\psi(x)|^2 \quad (11-26)$$

$$= 1 \quad (11-27)$$

$\sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = 1$ olduğundan, $|c_i|^2$ niceliği, parçacığın bir i durumunda bulunma olasılığını gösterir. Burada parçacık keyfi bir $\psi(x)$ fonk. ile başlangıçta hazırlanmış olup, şayet parçacık enerjisini tayin etmek üzere bir ölçüm yapılmış ise yorum doğru olur. Parçacığın enerji öz durumunun ölçümü ne şekilde yapılır? $\Rightarrow$ Parçacığın enerjisini ölçün.

$$E_n = \epsilon n^2, \quad \epsilon = E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}.$$



Şekil III: Enerji öz durumlarından biri olmayan Ψ enerji durumundaki parçacığın enerjisinin ölçümü, $|c_i|^2$ olasılıklarıyla farklı E_i deęerlerini verebilir.