

Enerji ölçümünden sonra

Sonucu E_i olan enerji ölçümünden sonra parçacık enerji öz durumunu u_i 'de olacak ve daha sonraki ardışık tüm enerji ölçümleri E_i enerjisini verecektir.

Ölçüm yapılmadan önce enerji nedir?

Eğer $\psi(x)$ bir öz durum değilse, enerji “belirsiz”dir. Bir ölçüm farklı enerji değerlerini ortaya çıkarabilir ancak sadece olasılıklar öngörülebilir. Ancak, enerjinin bir ortalama değeri hesaplanabilir:

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n \quad \rightarrow \quad \text{genel olarak geçerli} \quad (12-1)$$

c_n açılım katsayılarının tanımını kullanarak, bunu şöyle de yazabiliriz

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \left(\int dx u_n^*(x) \psi(x) \right)^* E_n \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int dx \psi^*(x) E_n u_n(x) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int dx \psi^*(x) \hat{H} u_n(x) \\ &= \int dx \psi^*(x) \hat{H} \left(\sum_n c_n u_n(x) \right) \\ &= \int dx \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) \end{aligned}$$

$\psi(x)$ durumundaki enerjinin beklenti değeri:

$$\langle E \rangle = \int dx \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) \quad \rightarrow \quad \text{sadece kutu potansiyeli değil herhangi bir potansiyel için geçerlidir.} \quad (12-2)$$

Hamilton işlemcisi ve enerji

Bir parçacığın p momentumuna $\lambda_{dB} = \frac{h}{p}$ deBroglie dalga boyu ile ilgilendirirsek, bu takdirde onu $k = \frac{2\pi}{\lambda_{dB}} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}$ veya $p = \hbar k$ dalga vektörlü bir düzlem dalga e^{ikx} ile temsil edebiliriz. Bundan sonra, $\psi(x)$ 'in $\phi(k)$ dönüşümü k dalga boyu bir düzlem dalganın genlik olasılığını vereceğinden $k \rightarrow$

$$\left(\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \phi(k) e^{ikx} \right), \quad (12-3)$$

momentum beklenti değeri

$$\langle p \rangle = \int dk \hbar k |\phi(k)|^2 \quad (12-4)$$

$$\langle p^2 \rangle = \int dk (\hbar k)^2 |\phi(k)|^2 \quad (12-5)$$

ile verilir.

Not. 5inci derste Fourier dönüşümlerinin özelliklerini kullanarak bu beklenti değerlerinin şöylece de ifade edilebileceğini görmüştünüz.

$$\langle p \rangle = \int dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \quad (12-6)$$

$$\langle p^2 \rangle = \int dx \psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x) \quad (12-7)$$

Buradan KE'nin beklenti değerinin değeri:

$$\langle T \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \int dx \psi^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi(x) \quad (12-8)$$

Potansiyel enerjinin beklenti değeri hangi büyüklüktedir?

$V(x)$ potansiyeli parçacığın x ve $x+dx$ arasında bulunma olasılığı ile ağırlıklandırılmalıdır, böylece

$$\langle V \rangle = \int dx V(x) |\psi(x)|^2 = \int dx \psi^*(x) V(x) \psi(x) \quad (12-9)$$

$\langle E \rangle = \langle V \rangle + \langle T \rangle$ olduğundan, buradan

$$\langle E \rangle = \int dx \psi^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x) \quad (12-10)$$

$$= \int dx \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) \quad (12-11)$$

Bu sözüm ona “sandviç şekli” olup enerjinin (beklenti değeri) ortalama değerini bulmaya yarar.

$\psi(x)$, E_0 özdeğerli bir enerji özfonksiyon ise, yani eğer $\hat{H}\psi_{E_0}(x) = E_0\psi_{E_0}(x)$, ise böylece

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \int dx \psi_{E_0}^*(x) \hat{H} \psi_{E_0}(x) \\ &= \int dx \psi_{E_0}^*(x) E_0 \psi_{E_0}(x) \\ &= E_0 \int dx |\psi_{E_0}(x)|^2 \\ &= E_0,\end{aligned}\tag{12-12}$$

burada dalga fonk.'nın normalleştirildiğini unutmamalıyız. $\Psi(x, t) = T(t)\psi(x)$ kabulü, Schrödinger denk. çözerken yapıldığında, E_0 sabitinin gerçekten sistemin enerjisi olduğunu gösterir. Bir $\hat{O}$ işlemcisi $\psi(x)$ dalga fonk.'na etki ederse beklenti değeri $\langle \hat{O} \rangle$ sandviç şeklinde

$$\langle \hat{O} \rangle = \int dx \psi^*(x) \hat{O} \psi(x)\tag{12-13}$$

yazılabilir. Bu takdirde

$$\langle E \rangle = \langle \hat{H} \rangle = \int dx \psi^*(x) \hat{H} \psi(x)\tag{12-14}$$

olur. $\psi(x)$ ile betimlenen durumun ortalama enerjisi, Hamilton işlemcisi $\hat{H}$ 'nın beklenti değeridir. Böylece $\hat{H}$ Hamilton işlemcisinin ölçülebilir nicelik enerji ile ilgili olduğunu söyleyebiliriz. $\hat{T}$ işlemcisi kinetik enerjiyle ilgili olup,

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\tag{12-15}$$

$\langle T \rangle = \langle \hat{T} \rangle = \int dx \psi^*(x) \hat{T} \psi(x)$ olup, öte yandan potansiyel enerji işlemcisi $\hat{V}$ sadece bir çarpan faktörüdür

$$\hat{V} = V(x)\tag{12-16}$$

ve $\langle V \rangle = \langle \hat{V} \rangle = \int dx \psi^*(x) \hat{V} \psi(x)$ dir.

Niçin potansiyel enerji basit bir çarpan faktörü ile ilgili iken kinetik enerji bir ikinci türev ile ilgilidir?

Çünkü biz gerçel uzay $\psi(x)$ 'deki dalga fonk.ları ile çalışıyoruz. Yani, biz konum uzayı veyahut konum temsiliyle tanımlanmış dalga fonk.larıyla uğraşıyoruz demektir.

Başka bir olasılık ise momentum uzayında (momentum temsili) çalışmaktır. Bu takdirde dalga fonk. momentum uzayındaki olasılık genliği demektir ki bu da $\psi(x)$ 'in $\phi(p)$ Fourier dönüşümü olur. Böylece KE'yi hesaplamak için her bir p için parçacığın momentumunun p ve $p+dp$ arasında olasılığını $\frac{p^2}{2m}$ ile ağırlıklandırmalıyız:

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \int dp \frac{p^2}{2m} |\phi(p)|^2 \quad (12-17)$$

$$= \int dp \phi^*(p) \frac{p^2}{2m} \phi(p) \quad (12-18)$$

Momentum uzayında KE işlemcisi basit bir çarpandır.

$$\boxed{\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}} \rightarrow \text{momentum uzayında} \quad (12-19)$$

$\phi(p)$ momentum uzayındaki dalga fonksiyonları cinsinden $V(x)$ potansiyel enerjisi nasıl hesap edilir?

Not. Ders 5'te göstermiştik ki

$$\langle x \rangle = \int dp \phi^*(p) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \phi(p) \quad (12-20)$$

$$\langle x^n \rangle = \int dp \phi^*(p) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \phi(p) \quad (12-21)$$

Sonuç olarak, herhangi bir potansiyel fonk. için

$$V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad (12-22)$$

$\langle V \rangle$ beklenti değerini hesaplayabiliriz:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \int dp \phi^*(p) V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \phi(p) \\ &= \int dp \phi^*(p) \hat{V} \phi(p) \end{aligned} \quad (12-23)$$

Sonuç olarak, momentum uzayında PE'nin işlemcisinin temsili:

$$\boxed{\hat{V} = V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right)}, \quad (12-24)$$

burada işlemcinin bir V fonk. Taylor açılımını cinsinden ifade edilmiştir Denk. (12-22).
Burada Hamiltonun

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (12-25)$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + V(x) \quad \text{konum uzayında} \quad (12-26)$$

$$= \frac{p^2}{2m} + V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \quad \text{momentum uzayında} \quad (12-27)$$

SD denk. daima aynıdır:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t) \quad \text{zamana bağımlı SD} \quad (12-28)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p, t) = \hat{H} \Phi(p, t) \quad \text{zamana bağımlı SD} \quad (12-29)$$

$$\hat{H} \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{zamandan bağımsız SD} \quad (12-30)$$

$$\hat{H} \phi(p) = E \phi(p) \quad \text{zamandan bağımsız SD} \quad (12-31)$$

Örnek. Harmonik salıncı için, SD (uygun seçilmiş birimlerde) konum ve momentum uzayında aynı görünümündedir.

1. lineer potansiyel $V(x) = Ax$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + Ax\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{konum uzayında} \quad (12-32)$$

$$\frac{p^2}{2m} \phi(p) + i\hbar A \phi'(p) = E\phi(p) \quad \text{momentum uzayında daha basit denk.} \quad (12-33)$$

2. harmonik salıncı: $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x) \quad (12-34)$$

$$\frac{p^2}{2m} \phi(p) - \frac{1}{2} \hbar^2 m \omega^2 \phi''(p) = E\phi(p) \quad (12-35)$$

Uzayın birinde çözümleri biliyorsak, diğerinde çözümleri biliyoruz demektir. Harmonik salıncı konum ve momentumda simetriktir.

Dalga fonksiyonunun zaman evrimi

$t = 0$ 'da sonsuz bir kutudaki parçacığı ele alalım, $\psi(x, t=0)$. Bunu $\psi(x, t=0) = c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x) + \dots = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x)$ öz durumlarına açalım. Herbir öz durum $u_n(x, t)$ kendi özenerjisi E_n ile verilen bir hızda evrime uğradığından,

$$u_n(x, t) = u_n(x, t=0) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (12-36)$$

$$= u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (12-37)$$

daha sonraki t zamanında $\psi(x, t)$ dalga fonk. lineer üstüste binme ile verilir ki

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (12-38)$$

burada c_n açılım katsayıları $t=0$ 'da hesaplanmıştır:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^*(x) \Psi(x, t=0) \quad (12-39)$$

Böylece enerji öz durumlarının ve özdeğerlerin önemi: Özdeğerler sadece bireysel enerji ölçümlerinin olası sonuçlarını temsil etmeyip, aynı zamanda keyfî bir başlangıç zamanında öz durumlar ve özdeğerlerin bileşiminin zamansal evrimini yazmak mümkün olur.

Bir parçacık nasıl hareket eder?

Örnek. $\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(x) + u_2(x))$. Parçacık, temel ve ilk uyarılmış durumun üstüste binmesinde eşit dağılımdadır.

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + u_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}] \quad (12-40)$$

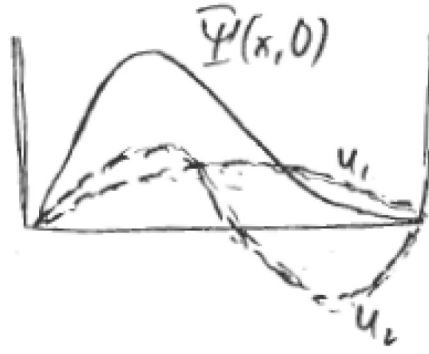
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} [u_1(x) + u_2(x) e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar}] \quad (12-41)$$

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} |u_1(x) + u_2(x) e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar}|^2 \quad (12-42)$$

Herhangi bir sabit konumda, u_1 ve u_2 arasındaki girişim teriminin açısal hızı

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad (12-43)$$

olacak şekilde yapıcı ve yıkıcı girişimler arasında salınır. Enerji farkı parçacığın kutunun bir yarısı ile diğeri arasındaki titreşimi belirler.



Şekil I: Taban durumu ve birinci uyarılmış durumların bir üstüste binmesindeki parçacık iki durumun enerjisi farkına karşı gelen bir frekansla titreşim yapar.

Not. $\Psi(x,t=0)$ bir öz durum olup, $\Psi(x,t=0) = u_n(x)$ ise bu takdirde $|\Psi(x,t)|^2 = |\Psi(x,0)|^2$ olur, yani olasılık yoğunluğu zamanla değişmez: Bohr **kararlı durumları** enerji **öz durumlarıdır**.

Tireşen bir elektron (parçacık) en azından iki enerji öz durumunun bir üstüste binmesidir. Bir Lyman α fotonu neşreden Bohr atomundaki bir elektron (E_1) temel durumu ve (E_2) birinci uyarılmış durumun bir üstüste binmesidir. Bu elektron uzayda $\frac{E_2 - E_1}{h}$ frekansı ile yani tamı tamamına neşredilen Lyman α fotonunun frekansı ile titreşim yapar.

Kutu örneğimiz aynı zamanda şunu ortaya koyar: Ne kadar çok yerleşik başlangıç konumsal dağılımı $\psi(x,0)$ varsa o kadar çok özdeğerler işe karışacak ve zaman evrimi çok daha karmaşık hale gelecektir. $((E_2 - E_1)/h, (E_3 - E_1)/h, (E_3 - E_2)/h, \dots)$ da titreşen girişim terimleri olacaktır. Parçacıkların tüm hareketi titreşen girişimi içerir.

SD ve Klasik Mekanik arasındaki bağıntı nedir?

KM, Klasik Mekanik limit durumunda tekrar meydana getirmelidir

- Klasik Mekanik $p = mv = m \frac{dx}{dt}$
- Bu ve (diğer) klasik denklem(ler), KM beklenti değerleri (ortalama konum, momentum) ni en azından limit durumunda sağlar.
- $m \left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle$ yi hesaplayalım: sadece dalga fonk.'nun zamanla değişiminden dolayı bir değişme ortaya çıkar, x koordinatı, SD denk.de parçacığın konumu değildir.

$$m \left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle \quad (12-44)$$

$$= m \frac{d}{dt} \int dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) \quad (12-45)$$

$$= m \int dx \left\{ \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi + \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\} \quad (12-46)$$

$$= m \int dx \left[\frac{1}{-i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V(x) \Psi^* \right\} x \Psi + \Psi^* x \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi \right\} \right] \quad (12-47)$$

$$= \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} x \Psi - \Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right] - \frac{1}{i\hbar} \int dx [\Psi^* V(x) x \Psi - \Psi^* x V(x) \Psi] \quad (12-48)$$

İkinci terim sıfırdır, ilk terim ise kısmi integrasyon ile alınabilir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi \right) - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (x \Psi) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi \right) - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \end{aligned} \quad (12-49)$$

Benzer şekilde,

$$\Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi \right)^* \quad (12-50)$$

$$A = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi - \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (12-51)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi - \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial x} (\Psi^* \Psi) + 2 \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (12-52)$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi} \rightarrow \text{SD} \quad (12-53)$$

Dalga fonk.'nun normalleştirebilmesi için, onun $\pm\infty$ 'da $\frac{1}{\sqrt{x}}$ den daha hızlı bir şekilde yok olması gerekir. Sonuç olarak, A 'daki ilk iki terim üzerine alınan integral sıfır olur ve geriye kalan ise,

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} dx 2\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (12-54)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) \quad (12-55)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \hat{p} \Psi(x, t) = \langle p \rangle \quad (12-56)$$

olur.

SD'den ortaya çıkan şey, momentumun beklenti değerinin parçacığın kütlesiyle konumunun beklenti değerinin zamanla değişiminin çarpımına eşittir:

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle \quad (12-57)$$

Bu denklem SD denk.den, momentum işlemcisi $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ 'nin konum temsiliyle birleşiminden ortaya çıkmaktadır. $\frac{1}{i}$ 'nin gözükmesi momentumun kompleks (imajiner) mi olduğu anlamına gelmektedir? $\langle p \rangle$ beklenti değerinin kompleks eşleniği $\langle p \rangle^*$ 'yi $\Psi(x, t)$ gibi keyfî bir durum için hesaplayalım...