

Boşlukta Dalga Fonksiyonlarının Normalleştirilmesi

Konum temsilinde momentum öz durumları, $u_p(x)$

$$\hat{p}u_p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} u_p(x) = pu_p(x), \quad (14-1)$$

ile belirlenir ve

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (14-2)$$

ile verilir. Ancak, boşlukta normalleştirilecek bir olasılık yoğunluğu gibi yorumlanamaz

zira $|u_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ ve $\int_{-\infty}^{\infty} dx |u_p(x)|^2$ ıraksar. Bununla beraber, bunlar **süreklilik ortonormallik şartını** sağlarlar.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_p^*(x) u_{p'}(x) = \delta(p - p'). \quad (14-3)$$

Bu normalleştirme $|u_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ ile verilen düzgün bir parçacık yoğunluğuna karşı gelir.

Şimdi olasılık akım yoğunluğunu aşağıda belirlendiği üzere hesaplamaya çalışalım

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im} \left[\psi^*(x) \frac{\partial \psi}{\partial x}(x) - \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}(x) \right) \psi(x) \right] \rightarrow \text{bkz Ders Notları} \quad (14-4)$$

$\psi(x) = u_p(x)$ için

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im} \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\frac{ip}{\hbar} - \left(-\frac{ip}{\hbar} \right) \right] \quad (14-5)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{p}{m}, \quad (14-6)$$

buluruz ki bu $v = \frac{p}{m}$ hızıyla hareket eden düzgün bir parçacık yoğunluğu

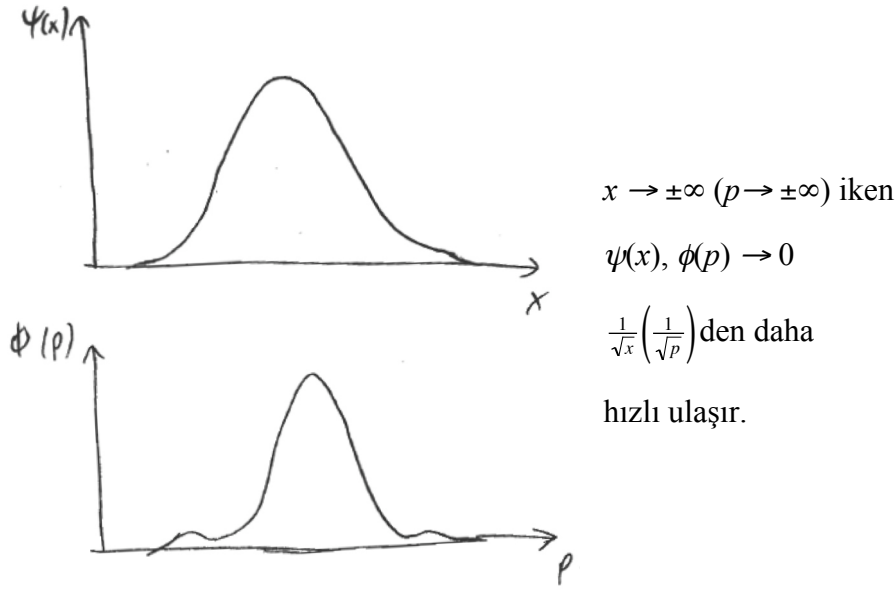
$|u_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ beklediğimiz gibi bulmuş oluruz.

Genel olarak, $\psi(x) = Ce^{ipx}$ bir dalga fonksiyonu seçilirse bu hızı $\frac{p}{m}$, bir parçacık yoğunluğu

$|\psi(x)|^2 = |C|^2$ ve bir parçacık akımı $j(x) = |C|^2 \frac{p}{m}$ 'ye karşı gelir. Normalleştirme sorunu ile uğraşırken değişik momentum durumları şunlardır:

1. Dalga paketleri

Sonlu sayıda momentum öz durumların bir üstüste binmesi normalleştirilemez, ancak sonsuz sayıdaki momentum öz durumlarından kurulu olan bir dalga paketi ise üstüste bindirilebilir (Fourier bileşenleri).



Şekil I: Konum uzayındaki $\psi(x)$ dalga paketi veya momentum uzayındaki $\phi(k)$, büyük x (veya k) değeri için $x^{-1/2}$ ($k^{-1/2}$) den daha hızlı olarak düşüş gösterir.

2. Peryodik sınır şartları

Sonlu L uzunluktaki bir kutu kabul edelim, bunun gerektirdiği sınır şartları

$$\psi(0) = \psi(L) \quad (14-7)$$

$e^{ipx/\hbar}$ düzlem dalgaları için bu $e^{ipx/\hbar} = 1$ veya $\frac{pL}{\hbar} = kl = n2\pi$, n tamsayı gerektirir ve momentum kuantumlaşmıştır ki $p_n = n\hbar k_0$ olup $k_0 = \frac{2\pi}{L}$ ile verilir.

Buna karşı gelen momentum durumları $[0, L]$ aralığında normalleştirilebilir

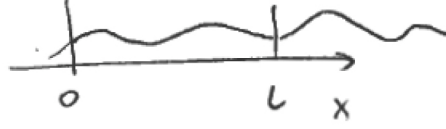
$$\int_0^L dx |C e^{ipx/\hbar}|^2 = L|C|^2 = 1 \quad (14-8)$$

$$u_{p_n}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ip_n x/\hbar} \quad (14-9)$$

$\rightarrow L$ kutusunda $p_n = n\hbar k_0$ 'lı **normalleşmiş momentum öz durumlarıdır.**

$$\int_0^L dx u_{p_n}^*(x) u_{p_m}(x) = \delta_{nm} \rightarrow \text{kutudaki ortonormallik şartı} \quad (14-10)$$

Sabit boyutlu bir kutudaki tüm hesaplar yapılmış olup, $L \rightarrow \infty$ (yani $k_0 \rightarrow 0$, momentum spektrumu sürekli olur) limiti sonradan alınır. Tüm fiziksel anlamlı sonuçlar, ilgili aralıklara göre yeterince büyük bir L alındığında, kutu boyu L den bağımsız olacaktır.



Şekil II: L boyunda peryodik sınır şartlarına sahip bir kutudaki dalga fonksiyonu

Serbest-parçacık dalga paketlerinin zaman evrimi

Boşlukta genelde **normalleştirilmiş Gauss dalga paketleri**yle uğraşırız

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} w_0^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{4w_0^2}} \quad (14-11)$$

bu şekilde yazılırsa şunlar vardır:

- $|\Psi(x, 0)|^2 = \frac{1}{(2\pi)^{1/2} w_0} e^{-\frac{x^2}{2w_0^2}}$
- $\int dx |\Psi(x, 0)|^2 = 1$
- $\langle x \rangle = 0$
- $\langle x^2 \rangle = w_0^2$
- $(\delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = w_0^2$

$\Delta x = w_0$ dalga paketinin belirsizliği veya rms genişliğidir. Niçin bu Gauss dalga paketi şeklini tercih ediyoruz?

1. Özellikle basit ve simetrik olup, **Fourier dönüşümü de aynı zamanda bir Gauss dalga paketidir.**

$$\phi(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} k_0^{1/2}} e^{-\frac{k^2}{4k_0^2}} \quad (14-12)$$

$$\text{burada } k_0 = \frac{1}{2w_0}. \quad (\Delta k)^2 = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2 = k_0^2$$

2. **KM** ile izinli minimum belirsizlik $\Delta x \Delta k = \frac{1}{2} (\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2})$ dalga paketidir.
3. Fiziksel sistem bundan sonra momentum veya konumda Gauss genişlemesine yol açar, yani atom momentumlarının bir gazdaki ısı dağılımı bir Gauss dağılımıdır.

Bir dalga paketinin v_1 hızıyla hareketini nasıl sağlayabiliriz?

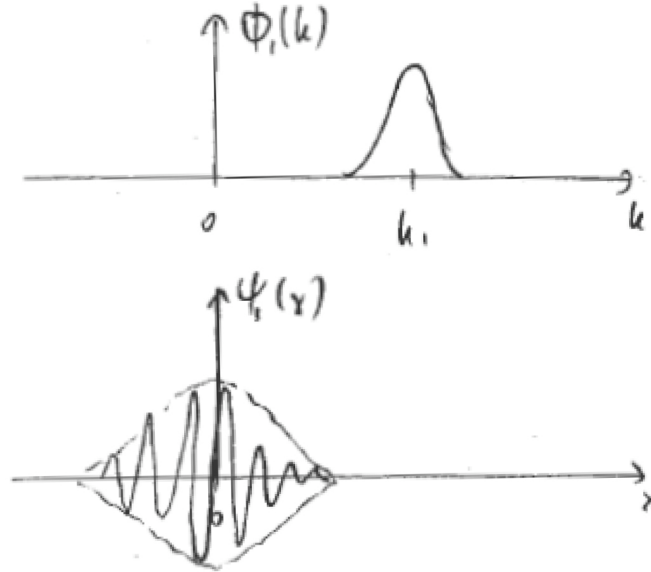
$\langle p \rangle = \langle \hbar k \rangle = 0$ dan $\langle p \rangle = \langle \hbar k \rangle = \hbar k_1 = m v_1$ momentum uzayında dağılımı yer değiştirelim (bkz Şek. III).

$$\phi(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} k_0^{1/2}} e^{-\frac{(k-k_1)^2}{4k_0^2}}. \quad (14-13)$$

Ters Fourier dönüşümü, yani, konumsal dalga fonksiyonu

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} w_0^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{4w_0^2}} e^{ik_1 x} \quad (14-14)$$

hala Gauss tipinde olup, ancak bir faz değişimi $e^{ik_1 x}$ e sahiptir. Önceden dalga paketi üzerinde sbt bir faza sahipti (Denk. 14-11'le kıyaslayınız). Bu faz değişimi $e^{ik_1 x}$, konum uzayında dalga parçacığının hızını $v_1 = \frac{\hbar k_1}{m}$ olacak şekilde “kodlar”: Dalga paketindeki hakim de Broglie dalgaboyu bir k_1 dalga vektörüne veya bir momentum $\hbar k_1$ ’e karşı gelir.



Şekil III: Ortalama hız $v_1 = \frac{\hbar k_1}{m}$ ve konumsal dalga fonk. $\psi_1(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} w_0^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{4w_0^2}} e^{ik_1 x}$ ile hareketli Gauss dalga paketi

Bir boşluk Gauss dalga paketi zamanla nasıl evrime uğrar?

Genelde, bir dalga fonk. $\Psi(x,0)$, $u_E(x)$ enerji özfonksiyonlarına açarız ve bundan sonra enerji özfonksiyonları $e^{-iEt/\hbar}$ olarak evrim yapar.

Boşlukta sadece KE vardır. Bu takdirde $u_p(x)$ momentum öz durumları boşlukta **enerjinin eşzamanlı öz durumları** olurlar.

$$\hat{H}u_p(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m}u_p(x) \quad (14-15)$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\hbar i \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (14-16)$$

$$= \frac{p^2}{2m}u_p(x) \quad (14-17)$$

veyahut

$$\hat{H}u_p(x) = \frac{p^2}{2m}u_p(x) \quad (14-18)$$

$$= E_p u_p(x) \quad (14-19)$$

Enerji öz durumlarının **çift dejenere** olduğu söylenebilir: $E > 0$ olmak üzere enerji özdeğerinin herbiri için iki farklı momentum durumlarının aynı (yani $u_{\pm p}(x)$, $p = \sqrt{2m\hbar}$) enerjiye sahip oldukları söylenebilir. Buradan p özdeğerlikli bir momentum öz durumu zamansal olarak $e^{-iE_p t/\hbar}$ olarak evrime uğrarki böylece momentum uzayındaki konumsal evrim ise zamanla

$$\Phi(p, t) = \Phi(p, 0) e^{-i\frac{p^2}{2m}t/\hbar} \quad (14-20)$$

→ boşlukta momentum özfonksiyonlarının zaman evrimini gösterir. Dalga fonk. gerçel uzayda ters Fourier dönüşümü $\Psi(x,t)$ ile verilir veya eşdeğer olarak, kendine karşı gelen faz evrim çarpanları $e^{-iE_p t/\hbar}$ ile verilen enerji özfonksiyonlarının üstüste binmesiyle aynıdır.

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \Phi(p, t) e^{ipx/\hbar} \quad (14-21)$$

$$= \int dp \Phi(p, t) u_p(x) \quad (14-22)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \Phi(p, 0) e^{ipx/\hbar} e^{-\frac{p^2}{2m}t/\hbar} \quad (14-23)$$

$$= \int dp \Phi(p, 0) U_p(x, t) \quad (14-24)$$

$$= \int dp \Phi(p, t) u_p(x) \quad (14-25)$$

burada $U_p(x, t) = u_p(x) e^{-\frac{p^2}{2m}t/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} e^{-i\frac{p^2}{2m}t/\hbar}$ boşlukta zamana bağımlı momentum özfonksiyonlarıdır. Yukarıdaki denklem farklı Fourier bileşenlerinin $u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$, fazlarının zamanla farklı hızlarda evrime uğradıklarını gösterir. Farklı Fourier bileşenlerinin “faz dışına koşma”sı, dalga paketinin konum uzayında yayılmasına yol açar. Ödev problemlerinde dalga paketinin rms genişliği $\Delta x(t) = \omega(t)$ ’nin zamanla şu şekilde büyüyeceğini göstereceksiniz.

$$w(t) = w_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 k^2}{m^2 w_0^2}} \quad (14-26)$$

Bir dalga paketi farklı momentum bileşenlerine haiz olacağından, etkili hiçbir dış kuvvet olmasa bile serbest uzayda zamanla değişir. $t \gg t_0 = \frac{m w_0^2}{\hbar}$ gibi uzun sürelerde dalga paketi $\omega(t) \approx \frac{\hbar}{m w_0} t$ gibi yayılır ki $v_0 = \frac{\hbar}{m w_0}$ hızında kendi büyüklüğü ile ters orantılı bir durum oluşur. Bu hız makroskopik dalga paketi büyüklüğü için ihmal edilebilir, ancak başlangıçta iyi-yerleşik mikroskopik nesneler için boşlukta akla uygundur. Boşlukta bir dalga paketinin yayılması, onun büyüklüğünde bir parçacığına ile belirlenemeyeceğinin ilk işaretiydi. Yayılma enerjiye kuadratik bir bağımlılık (lineer olmayan)tan ileri gelmekte olup, böylece faz evrim hızı momentuma bağlı olmaktadır. Kütsüz bir parçacık olan fotonun $E = pc$ olmak üzere dalga paketinin yayılmasını gösterir (SD denk. göreceli olmayıp, fotonlara uygulanamaz).

Dalga paketlerinin hareketi, grup hızı ve kararlı faz

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} w_0^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{4w_0^2}} e^{ik_1 x} \quad (14-27)$$

dalga fonksiyonunun niçin $v_1 = \frac{\hbar k_1}{m}$ hızında hareket eden bir parçacığı temsil ettiğini merak edebiliriz? Tek bir momentum bileşeni $u_{k_1}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-k_1 x} e^{-i\frac{\hbar k_1^2}{2m}t}$ nin tepe noktası ileri doğru $\lambda = \frac{2\pi}{k_1}$ yolunu, $T = \frac{2\pi}{\omega_1}$ zamanında alacağından, bunun hızı

$$v_{ph} = \frac{\omega_1}{k_1} = \frac{\hbar k_1}{2m} = \frac{p_1}{2m} \quad (14-28)$$

Bu bir **momentum bileşeninin faz hızıdır**.

Parçacık $v_{ph} = \frac{\omega_1}{k_1}$ faz hızıyla hareket etmez ki burada tek momentumlu parçacığın düzlem dalgası ileri doğru hareket eder. O halde bu hız nedir?

- üsse bakıp şunu yazalım:

$$E_1 = E_1(k_1) = \hbar\omega_1 = \hbar\omega(k_1) = \frac{\hbar k_1^2}{2m}$$

$$\bullet e^{\left(-\frac{x^2}{4\omega_0^2} + ik_1x - i\omega(k_1)t\right)}$$

Kararlı fazla ilgili Fermat ilkesini hatırlayalım: yol uzayın bölgesiyle tanımlanmış olup, burada fazörler çoğunlukla bir yönde olurlar, yani, $\phi(k) = -\frac{x^2}{4\omega_0^2} + ikx + i\omega(k_1)t$ fazı, en düşük mertebeli farklı momentum bileşenleri arasında değişme göstermez ki

$$0 = \frac{\partial\phi}{\partial k} = ix - i\left(\frac{\partial\omega}{\partial k}\right)t = i\left(x - \left(\frac{\partial\omega}{\partial k}t\right)\right), \quad (14-29)$$

veya

$$x(t) = \left(\frac{\partial\omega}{\partial k}\right)t. \quad (14-30)$$

Fermat ilkesi grup hızı kavramına yol açar

$$\boxed{v_{\text{gr}} = \frac{\partial\omega}{\partial k}(k_1) = \frac{\hbar k_1}{m} = \frac{p_1}{m}} \quad (14-31)$$

Dalga paketinin sahip olduğu grup hızı, yani yapıcı girişim bölgesi, ilerleme yapar. Grup hızıyla faz hızı arasındaki fark şundan ileri gelir ki $\frac{\partial\omega}{\partial k} \neq \frac{\omega}{k}$, veyahut $\frac{\partial E}{\partial p} = \frac{\partial(\hbar\omega)}{\partial(\hbar k)} \neq \frac{E}{p}$, den yani serbest uzayda KE'nin momentuma kuadratik bağımlılığındandır. Bu durum, boşlukta $\frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\omega}{k} = c$ lineer bir dağılıma sahip olan fotonların aksine olup, grup ve faz hızı aynıdırlar.