

2.3 Beklenen Değerler

Bir parçacığın dalga fonksiyonunun, parçacığın özellikleri hakkında bilgi taşıdığını söylemiştik. Dalga fonksiyonu kullanılarak hesaplanabilecek niceliklerin başında beklenen değerler gelir. Önce beklenen değer kavramının ne olduğunu, sonra da dalga fonksiyonu kullanılarak beklenen değerlerin nasıl hesaplandığını açıklayalım.

Bir özelliğin beklenen değeri, o özelliği ölçmek için özdeş sistemler üzerinde yapılacak sonsuz sayıda ölçümün vereceği “ortalama değeri” ifade eder. Örneğin çok sayıda özdeş sistem üzerinde yapılan ölçümler %40 olasılıkla a sonucunu, %25 olasılıkla b sonucunu, %35 olasılıkla c sonucunu veriyorsa beklenen değeri $(40a + 25b + 35c)/100$ olarak hesaplarız.

Kuantum mekaniğinde beklenen değerleri hesaplamak için beklenen değeri hesaplanacak özellik ile ilgili “operatör”, normalizasyon integralinde $\Psi^*(x, t)$ ile $\Psi(x, t)$ ’nin arasına yerleştirilir. Örneğin konumun beklenen değerini $(\bar{x})$ hesaplamak için kullanılması gereken eşitlik şudur:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx$$

Momentumun beklenen değerini hesaplamak içinse şu eşitlik kullanılmalıdır:

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

Benzer biçimde enerji operatörünü kullanarak enerjinin beklenen değerini de hesaplayabilirsiniz:

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) dx$$

Genel olarak konumun, momentumun ve zamanın herhangi bir fonksiyonu olarak ifade edilebilen herhangi bir dinamik niceliğin beklenen değeri

$$\overline{f(x, p, t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) f_{op}(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, t) \Psi(x, t) dx$$

biçiminde hesaplanabilir.

Bu hesapların vereceği değerlerin ölçüm sonuçları değil, ölçüm sonuçları için beklenen değer olduğunu bir kez daha belirtelim.

2.4 Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi

Schrödinger denklemi, bir sistemin dinamiklerini ifade eden bir diferansiyel denklem olduğu için, doğal olarak, zaman koordinatını da içerir. Bu denklemin çözümleri de zamana bağlı çözümlerdir.

Zamana bağlı Schrödinger denklemini analitik olarak çözmek genellikle zordur. Sistemdeki potansiyel enerjinin zamandan bağımsız olması durumunda ($V \equiv V(x)$) ise değişkenlerin ayrılması olarak adlandırılan bir teknikten yararlanılarak çözüm süreci biraz kolaylaştırılabilir. İlk olarak zamana bağlı Schrödinger denkleminin “herhangi bir çözümü” sadece zamanın fonksiyonu olan bir $\varphi(t)$ fonksiyonu ile sadece uzay koordinatlarının bir fonksiyonu olan bir $\phi(x)$ olarak yazılır. Öyle ki $\phi(x)$ fonksiyonları zamandan bağımsız Schrödinger denklemlerinin çözümleridir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + V(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

Bu eşitliği sağlayan bir $\phi(x)$ fonksiyonuna karşılık gelen $\varphi(t)$ fonksiyonu ise $\varphi(t) = e^{-iEt}$ olur. Schrödinger denklemleri lineer denklemlerdir. Dolayısıyla farklı çözümlerin lineer kombinasyonları da Schrödinger denklemlerini çözer: Şayet $\phi_1(x), \phi_2(x), \dots$ zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin $E_1, E_2, \dots$ enerji değerlerine karşılık gelen çözümleriyse zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümü bu çözümlerin bir lineer kombinasyonu olarak ifade edilebilir:

$$\Psi(x, t) = c_1 \phi_1(x) e^{-iE_1 t} + c_2 \phi_2(x) e^{-iE_2 t} + \dots$$

Bu açılımdaki c_i karmaşık sayılarının alabileceği değerleri sınırlandıran tek şey normalizasyondur.

Zamandan bağımsız Schrödinger denklemi özdeğer eşitliklerinin bir örneğidir. Genel olarak A , herhangi bir operatör; f , bir fonksiyon; λ , bir sayı olmak üzere özdeğer eşitliklerini $Af = \lambda f$ olarak ifade edebiliriz. Bu eşitliği sağlayan λ değerlerine A operatörünün özdeğerleri, f fonksiyonlarına ise A operatörünün özfonksiyonları denir.

2.5 Schrödinger'in Teorisi ve Kuantizasyon

Planck kara cisim ışımasını, Bohr ise atomun yapısını açıklamak için kuantizasyon postulatları ortaya atmıştı (*bkz.* 1.1 ve 1.5). Schrödinger'in teorisindeyse bu ve benzeri deneysel verileri açıklamak için postulatlara gerek yoktur. Kuantizasyon (enerjinin paketler hâlinde soğurulup yayılması), Schrödinger'in teorisinin doğal bir sonucudur.

Bir sistemde kuantizasyon olup olmadığını kuramsal olarak tahmin etmeniz için yapmanız gereken şey Schrödinger denklemini çözmektir. Örneğin zamandan bağımsız Schrödinger denklemi enerji özdeğerlerinin süresiz olduğunu, başka bir deyişle ancak belirli değerler alabileceği sonucunu veriyorsa enerjinin kuantize olduğunu görürsünüz.

Zamandan bağımsız Schrödinger denklemi kullanılarak yapılan hesaplar genel olarak şu sonucu verir: Bir parçacık klasik fiziğe göre toplam enerjisi potansiyel enerji engellerini aşmaya yetmediği için bir hacmin içine hapsolmek zorundaysa Schrödinger'in teorisi enerjinin kuantize olduğunu söyler. Eğer parçacık klasik fiziğe göre bir hacmin içine hapsolmek zorunda değilse toplam enerjisi herhangi bir değere sahip olabilir. Atomların yapısı da bu genel kurala uyar. Bir elektronun bir atoma bağlı olmasının nedeni, sahip olduğu toplam enerjinin kendisini atom çekirdeğine bağlayan elektromanyetik kuvveti yenmeye yetmemesidir. Schrödinger denklemlerinin çözümleri bu durumda elektronun sahip olabileceği enerjinin kuantize olduğunu gösterir. Bir elektron bir fotondan aldığı enerjiyle kendini atom çekirdeğine bağlayan elektromanyetik kuvveti yenerek atomdan koptuğundaysa artık bir hacmin içine hapsolmüş değildir. Dolayısıyla uzayda serbest dolaşan bir elektronun enerjisi herhangi bir değeri olabilir.

2.6 Ölçümler

Bir sistemin dinamiklerini tanımlayan bir kuramdan beklenen, sistem üzerinde yapılacak ölçümlerin sonuçları hakkında tahminler sunmasıdır. Kuantum mekaniği de dalga fonksiyonunun ne olduğu bilinen bir sistemde yapılacak ölçümlerin sonuçları hakkında bilgi verir. Ancak bu bilgiler klasik fizikte olduğu gibi kesin değil olasılığa dayalıdır.

Kuantum mekaniğinde bir ölçüm sonucu hakkında tahminlerde bulunmak için özetle

şöyle bir prosedür takip edilir: İlk olarak ölçüm yapılacak özellik ile ilgili operatörün özdeğerleri ve özfonksiyonları bulunur. Daha sonra sistemin dalga fonksiyonu, bulunan özfonksiyonların bir lineer kombinasyonu olarak ifade edilir. Şayet λ özdeğerine karşılık gelen özfonksiyonun dalga fonksiyonunun açılımındaki katsayısı (lineer kombinasyondaki katsayı) c ise ölçüm sonucunda λ değerinin bulunma olasılığı $|c|^2$ 'dir. Bu ölçüm hesabı, Born'un olasılık açıklamasının bir uzantısıdır.

Ölçüm hesabını farazi bir sistem üzerinden örneklendirelim. Belirli bir sistem için enerji operatörünün özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını çözdüğümüzü ve iki ayrı çözüm bulunduğumuzu düşünelim. ϕ_1, E_1 enerjisine; ϕ_2, E_2 enerjisine karşılık gelen özfonksiyonlar olsun. Şayet sistemin belirli bir andaki dalga fonksiyonu $\Psi = 0,6\phi_1 + 0,8\phi_2$ ise sistemin enerjisini ölçmek için yapılan bir deney $|0,6|^2 = 0,36$ olasılıkla E_1 sonucunu, $|0,8|^2 = 0,64$ olasılıkla E_2 sonucunu verir. Bu tahmini tek bir deneyle doğrulamanız tabii ki imkânsızdır. Yapılması gereken özdeş sistemler üzerinde tekrar tekrar deneyler yaparak hangi sonucun hangi olasılıkla ortaya çıktığını belirlemektir. Örneğin kuramsal tahminler doğruysa 100 özdeş sistem üzerinde yapılacak enerji ölçümlerinin yaklaşık 36 tanesi E_1 sonucunu, yaklaşık 64 tanesi ise E_2 sonucunu vermelidir. Ölçüm sayısı sonsuza yakınsarken bu olasılıklar da tam olarak 0,36'ya ve 0,64'e yakınsamalıdır. Bu ölçümlerin beklenen değeriye $0,36E_1 + 0,64E_2$ 'ye eşittir.

2.7 Süperpozisyon Durumları ve Dalga Fonksiyonunun Çökmesi

Kuantum mekaniksel sistemler üzerinde yapılan ölçümlerin dalga fonksiyonunun “çökmesine” neden olduğu söylenir. Bir sistemin dalga fonksiyonu ölçümden önce muhtemel ölçüm sonuçlarının bir süperpozisyonu (lineer kombinasyonu) olabilir. Örneğin $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$ ölçüm sonucunda bulunabilecek özdeğerler, $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots$ ise bu özdeğerlere karşılık gelen çözümler olsun. Ölçümden önce sistemin dalga fonksiyonu Ψ , bu özfonksiyonların herhangi bir lineer kombinasyonu olabilir: $\Psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + c_3\phi_3 + \dots$ Açılımındaki $c_1, c_2, c_3, \dots$ katsayılarının alabileceği sonsuz farklı değere karşılık gelen sonsuz farklı lineer kombinasyon vardır. Ancak bir kez sistem üzerinde ölçüm yapıldıktan sonra durum değişir. Örneğin ölçüm sonucunda özelliğin değerinin λ_3 olduğu bulunmuşsa artık sistemin dalga fonksiyonu $\Psi = \phi_3$ 'tür. Süperpozisyon yok olmuş, sistemin dalga fonksiyonu ölçüm sonucuna

karşılık gelen özfonksiyona çökmüştür. Ölçümden sonra çevre ile yaşanacak etkileşimler tabii ki yeniden süperpozisyon durumlarının ortaya çıkmasına yol açabilir. Ancak ölçülen özelliğin değişmesine neden olacak herhangi bir etkileşim yaşanmadığı sürece, aynı özellik ile ilgili tekrar tekrar yapılacak ölçümler hep aynı sonucu verecektir. Çünkü artık $c_3 = 1$, diğer tüm katsayılar sıfırdır. Dolayısıyla tüm ölçümler $|1|^2 = 1$ olasılıkla λ_3 sonucunu verecektir.

2.8 Heisenberg Belirsizlik İlkesi

Kuantum mekaniğinin temel ilkelerinden biri belirsizlik ilkesidir. Bir sistem hakkında edinilebilecek bilgilerin bir sınırı olduğunu söyleyen bu ilke, çeşitli özellik çiftlerinden biri hakkındaki belirsizlik ne kadar azsa diğeri hakkındaki belirsizliğin o kadar fazla olduğunu söyler. Bu özellik çiftlerinin değerinin ne olduğu eş zamanlı ölçümler ve keyfi derecede küçük hata payları ile belirlenemez. Çeşitli ölçümlerle birindeki belirsizlik ne kadar azaltılırsa diğeriindeki belirsizlik o kadar artar.

Heisenberg belirsizlik ilkesinin geçerli olduğu özellik çiftlerinden biri konum ve momentum, bir diğeri ise zaman ve enerjidir. Bu özellik çiftleri için belirsizlik ilkesi matematiksel olarak şu eşitsizliklerle ifade edilir:

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Bu eşitsizliklerde Δp , Δx , ΔE , ve Δt sırasıyla momentumdaki, konumdaki, enerjideki ve zamandaki belirsizliği ifade eder. Bir s özelliğinin belirsizlik değeriye, $\bar{s}$ s 'nin beklenen değeri ve $\overline{s^2}$ s 'nin karesinin beklenen değeri olmak üzere, $\sqrt{\overline{s^2} - \bar{s}^2}$ şeklinde hesaplanır. Örneğin momentum için $\Delta p = \sqrt{\overline{p^2} - \bar{p}^2}$ 'dir. Bu hesabı yapmak için önce momentumun beklenen değeri ($\bar{p}$) ve momentumun karesinin beklenen değeri ($\overline{p^2}$) hesaplanmalıdır.

Konum ile momentum arasındaki belirsizlik ilişkisinin anlamı özetle şudur: Bir parçacığın konumundaki belirsizlik ne kadar azsa (çoksa) momentumundaki belirsizlik o kadar çoktur (azdır). Ölçümler yoluyla bir parçacığın konumundaki belirsizliği ne kadar azaltmaya çalışsanız parçacığın momentumundaki belirsizlik o ölçüde artar.

Heisenberg belirsizlik ilkesiyle ilgili eşitlikleri türetmenin yollarından biri, operatörlerin genel özelliklerine odaklanmaktır. A ve B herhangi iki operatör, $f(x)$ herhangi bir fonksiyon olmak üzere $ABf(x) \neq B Af(x)$ ise A ve B operatörlerinin karşılık geldiği fiziksel özellikler için her zaman yukarıdakilere benzer eşitsizlikler türetilir. Eşitsizliklerin sağ tarafındaki katsayılar ise A ve B operatörlerinin ne olduğuna bağlı olarak değişir. Söz konusu konum ve momentum olduğunda da aynı durum geçerlidir:

$$x(-i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x}) \neq -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(xf(x))$$

Neden bazı özellik çiftleri için belirsizlik ilkeleri olduğunu anlamanın yollarından biriye ölçümlere odaklanmaktır. Kuantum mekaniği, ölçüm sonucunda dalga fonksiyonunun ölçüm sonucuna karşılık gelen özfonksiyona çökeceğini söyler. Dolayısıyla herhangi iki özelliğin eş zamanlı ölçülebilmesi için bir dalga fonksiyonunun iki özelliğe karşılık gelen A ve B operatörlerinin her ikisinin de özfonksiyonu olması gerekir. Bu durum ise ancak $ABf(x) = B Af(x)$ olması hâlinde mümkündür.

Heisenberg belirsizlik ilkesiyle ilgili önemli bir noktayı belirtelim. Belirsizlik ilkesi bir sistem hakkında edinilebilecek bilgilerin bir sınırı olduğunu söyler. Ancak bu durum sistemin aslında belirli özelliklere sahip olduğu, belirsizliklerin ise bilgi eksikliğinden kaynaklandığı anlamına gelmez ya da belirsizliklere neden olan ölçümler değildir. Belirsizlikler kuantum mekaniksel sistemlerin için bir özelliğidir.

2.9 Kuantum Spin ve Pauli Dışarlama İlkesi

Kuantum mekaniğindeki temel kavramlardan biri spindir. Klasik fizikte spin terimi bir cismin kendi kütle merkezi etrafındaki açısız momentumunu ifade eder. Dolayısıyla protonlar, elektronlar gibi noktasal (boyutsuz) olarak ele alınan parçacıkların spininin olması beklenmez. Ancak deneysel çalışmalar temel madde parçacıklarının da için bir açısız momentuma sahip olduğunu gösterir.

Kuantum spin, parçacıkların kuantize olan (sadece belirli değerler alabilen) özelliklerindendir. Örneğin bir elektronun spini ölçüldüğünde bulunabilecek iki muhtemel sonuç vardır: Parçacığın spini ya ölçümün yapıldığı yöndedir ya da bu yönün tam olarak zıttı yöndedir. Spin açısız momentumunun büyüklüğü $\hbar/2$ 'dir. İki ayrı yöne karşılık gelen spin özdeğerleri ise $\pm\hbar/2$ 'dir. İyi ayrı spin durumu söz konusu

olduğu için bir elektronun spini “iki değerlidir”. Eğer $+\hbar/2$ özdeğerine karşılık gelen durumu $+$ sembolüyle, $-\hbar/2$ özdeğerine karşılık gelen durumu $-$ sembolüyle ifade edersek bir elektronun dalga fonksiyonunu ifade etmenin uygun bir yolu iki bileşenli vektörlerdir: $(\phi_+(x, t), \phi_-(x, t))$. Bu vektörün ilk bileşeni elektronun belirli bir anda uzayın belirli bir noktasında ve spininin $+\hbar/2$ olma ihtimalini, ikinci bileşeniye elektronun belirli bir anda uzayın belirli bir noktasında ve spininin $-\hbar/2$ olma ihtimalini ifade eder.

Kuantum spin, kuantum istatistikle yakından ilişkilidir. Wolfgang Pauli tarafından ispatlanan spin-istatistik teoremi; spini $1/2$ 'nin tek katları olan özdeş parçacıkların Fermi-Dirac istatistiğine, spini tam sayı olan özdeş parçacıkların Bose-Einstein istatistiğine uyacağını söyler. Spini $1/2$ 'nin tek katları olan parçacıklar fermiyon, spini tam sayı olan parçacıklarsa bozon olarak adlandırılır. Fermi-Dirac istatistiğine uyan fermiyon türü parçacıklar için Pauli dışarlama ilkesi geçerlidir: İki özdeş fermiyon aynı kuantum durumunda bulunamaz. Bose-Einstein istatistiğine uyan bozon türü parçacıklar içinse Pauli dışarlama ilkesi geçerli değildir: İki özdeş bozon aynı kuantum durumunda bulunabilir.

Pauli dışarlama ilkesinin uygulama alanlarından biri de atomlardır. Bir atomdaki elektronların tamamının aynı enerji seviyesine yığılamamasının nedeni, elektronların spininin $1/2$ olması ve dolayısıyla fermiyon türü parçacıklar olmalarıdır.

2.10 Dolanıklık

Kuantum fiziğinin klasik fizikte örneği olmayan sıra dışı özelliklerinden biri dolanıklıktır. Birden fazla parçacık içeren sistemlerle ilgili bu olguyu açıklamak için iki elektronun spin durumlarını ele alalım.

Spin ölçümlerinin sonuçlarına karşılık gelen iki durumu $|\uparrow\rangle$ ve $|\downarrow\rangle$ olarak ifade edelim. Söz konusu tek bir elektron olsaydı bu elektronun spin durumu, bu iki durumun herhangi bir lineer kombinasyonu olarak ifade edilebilirdi: $c_1|\uparrow\rangle + c_2|\downarrow\rangle$. Söz konusu iki elektronun spin durumu olduğundaysa dört ayrı muhtemel ölçüm sonucu vardır: $|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle$, $|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$, $|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$ ve $|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle$. Dolayısıyla iki elektronun herhangi bir andaki spin durumu da bu dört kuantum durumunun bir lineer kombinasyonu olarak ifade edilebilir: $c_1|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle + c_2|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + c_3|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle + c_4|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle$. Bu açılımdaki c_i katsayıları genel olarak karmaşık sayılardır ve sağlamaları gereken tek

koşul normalizasyondur. Açılımdaki sembollerden ilki her zaman birinci parçacığın spinine, ikincisi her zaman ikinci parçacığın spinine karşılık gelir.

İki elektronun spininin sahip olabileceği sonsuz sayıda kuantum durumlarından bazıları şunlardır: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$, $\frac{1}{\sqrt{6}}(|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle + 2|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle)$, $\frac{1}{\sqrt{5}}(2|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$. Bu kuantum durumlarından bazıları dolanık durumlar olarak adlandırılır. Bu durumun nedeni, elektronların spin durumlarının birbirine dolanmış gibi olmasıdır. Örneğin $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$, dolanık durumların bir örneğidir. Bu süperpozisyon durumunda ne birinci elektronun spini $|\uparrow\rangle$, ikinci elektronun spini $|\downarrow\rangle$ ne de birinci elektronun spini $|\downarrow\rangle$, ikinci elektronun spini $|\uparrow\rangle$ ’dır. Bu dolanık durumlarla ilgili ilginç özelliklerden biri, herhangi bir parçacık üzerinde yapılacak spin ölçümünün diğer parçacığın spini hakkında da bilgi vermesidir. Örneğin spinleri $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$ durumunda olan iki elektrondan birincisinin spinini ölçerseniz $(\frac{1}{\sqrt{2}})^2 = 0,5$ olasılıkla $|\uparrow\rangle$ sonucunu, $(\frac{-1}{\sqrt{2}})^2 = 0,5$ olasılıkla da $|\downarrow\rangle$ sonucunu bulursunuz. Ancak elde ettiğiniz sonuç ne olursa olsun ikinci elektronun spini hakkında da çıkarım yapabilirsiniz. Örneğin sonucu $|\downarrow\rangle$ olarak bulmuşsanız iki elektronun spin durumunun $|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$ ’ye çöktüğünü bilirsiniz. Dolayısıyla ölçümden sonra ikinci elektronun spin durumunun da artık $|\uparrow\rangle$ olduğu kesindir.

Birbirine dolanık hâldeki parçacıklardan biri üzerinde ölçüm yaparak diğeri hakkında da bilgi edinmek, kuantum fiziğine özgü bir durumdur. Klasik fizikte bir analoğu yoktur.

2.11 Basit Sistemler, İlginç Sonuçlar

Kuantum mekaniğinin gerçek sistemlere uygulanması ileri seviyede matematik bilgisi gerektiriyor. Ancak basit, farazi, bir boyutlu sistemlere odaklanarak da kuantum fiziğinin sıra dışı özellikleri hakkında fikir edinmek mümkün. Aşağıdaki kısımlarda zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümlerini birkaç basit sistem için ele alıp matematiksel detaylara fazla girmeden sadece sonuçları belirteceğiz. Bu durumun tek istisnası en sondaki sonsuz potansiyel enerji çukuru sistemi olacak. Bu problemi çözerken “detayları açıklanan” matematiksel işlemleri takip etmek için lise seviyesinde matematik bilmek yeterli.

2.11.1 Serbest parçacık

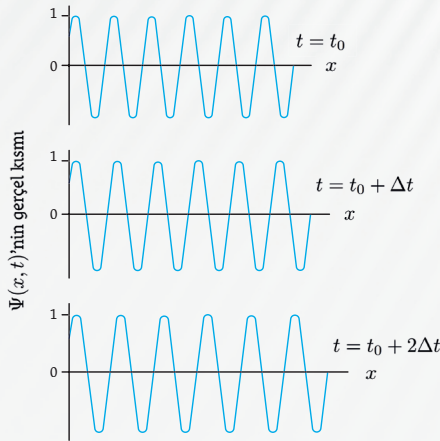
Ele alınabilecek en basit durum, uzayda serbestçe dolaşan bir parçacıktır. Potansiyel enerji yerine $V(x) = 0$ koyduğumuzda zamandan bağımsız Schrödinger denklemi şu hâle gelir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} = E\phi(x)$$

Şayet parçacık pozitif x yönünde hareket ediyorsa bu denklemin çözümleri, A bir karmaşık sayı olmak üzere, şu şekilde ifade edilebilir:

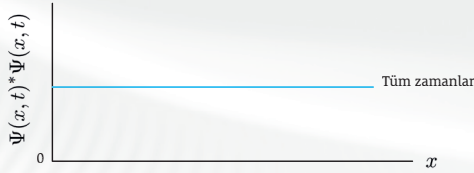
$$\phi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x}$$

Bu çözümlerde enerji yani E herhangi bir değer alabilir. Dolayısıyla serbest parçacık durumunda bir kuantizasyonla karşılaşmayız. Momentum operatörünü bu çözüme uyguladığımızda ise $-i\hbar \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} = \sqrt{2mE}\phi(x)$ sonucunu buluruz. Başka bir deyişle Schrödinger denkleminin çözümleri, momentum operatörünün özdeğeri $\sqrt{2mE}$ olan özfonksiyonlarıdır. Bu sonuç klasik fizikten beklediğimiz $E = \frac{p^2}{2m}$ eşitliğiyle uyumludur.



Şekil 2.1: Serbest parçacığın dalga fonksiyonunun reel kısmının zamanla değişimi

Zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümlerini (bkz. Şekil 2.1) zamandan bağımsız çözümlerden elde edebiliriz: $\Psi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}$. Serbest parçacık çözümlerini olasılık yoğunluğunu hesaplamak için kullandığımızdaysa ilginç bir sonuçla karşılaşırız: $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = |\phi(x)e^{-iEt/\hbar}|^2 = |A|^2$. Bu sonuç, A sıfırdan farklı bir karmaşık sayı olduğu için, parçacığın uzayın herhangi bir noktasında bulunma olasılığının konumdan bağımsız olarak aynı olduğu anlamına gelir (bkz. Şekil 2.2). Bu durum ise dalga fonksiyonlarının normalize edilemeyeceği anlamına gelir. Çünkü sabit bir sayının tüm uzay üzerinden integralini aldığınızda bulacağınız sonuç sonsuz olur.

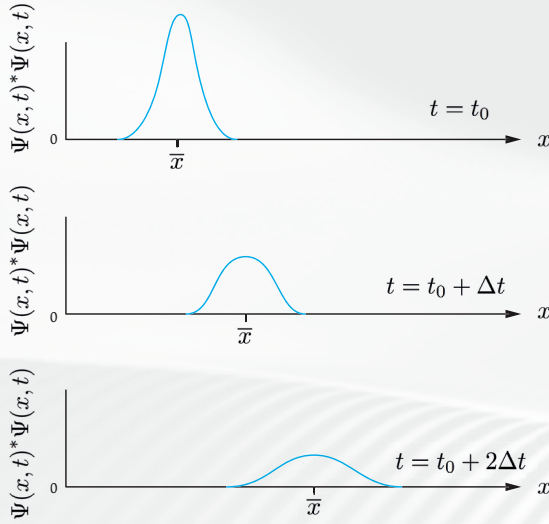


Şekil 2.2: Serbest parçacık için olasılık yoğunluğu uzayın her noktasında aynıdır.

Serbest parçacıkların davranışlarını tanımlayan dalga fonksiyonlarının normalize edilememesinin nedeni, gerçek dünyada serbest parçacık diye bir şey olmamasıdır. Hiçbir parçacık tüm uzayı serbestçe dolaşamaz, eninde sonunda uzayın bir yerlerinde hareketlerini etkileyen başka parçacıklarla karşılaşır. Serbest parçacık çözümlerinin fiziksel gerçekliğinin olmaması, bu fonksiyonlar aynı zamanda momentum operatörünün de özfonksiyonları olduğu için, herhangi bir parçacığı momentumunun “kesin olarak” belirlenemeyeceği anlamına da gelir. Çünkü hiçbir ölçüm bir parçacığın dalga fonksiyonunun fiziksel gerçekliği olmayan bir duruma çökmesine sebep olamaz. Momentumu belirlemek için yapılacak herhangi bir ölçümde her zaman az da olsa bir hata payı vardır. Aynı durum konum ölçümleri için de geçerlidir. Hiçbir ölçüm bir parçacığın konumunu sıfır hata payıyla belirleyemez.

Her ne kadar fiziksel bir gerçekliğe karşılık gelmeseler de serbest parçacıkları tanımlayan Schrödinger denkleminin çözümleri daha karmaşık sistemlerde çözümleri ifade etmek için baz seti olarak kullanılır.

Tüm uzayı serbestçe dolaşan bir parçacık gerçekçi olmasa da bir parçacık uzayın sınırlı



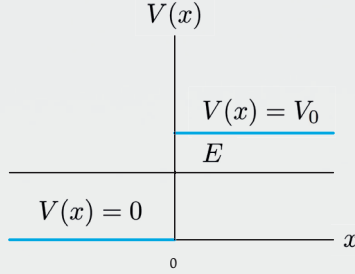
Elberg, Resnick

Şekil 2.3: Uzayın belirli bir kısmında serbestçe hareket eden bir parçacık için olasılık yoğunluğunun zamanla değişimi. Parçacık pozitif x yönünde yol alırken olasılık yoğunluğu zamanla uzaya yayılıyor.

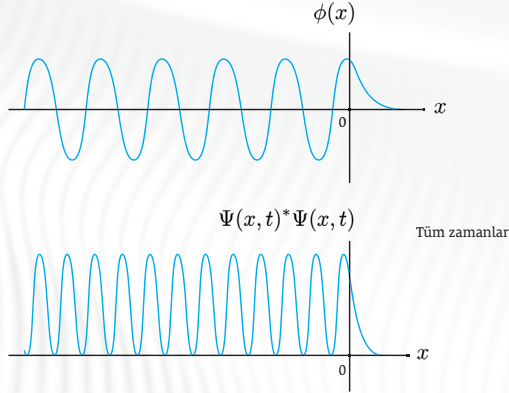
bir bölgesinde serbestçe hareket edebilir. Böyle bir parçacığın davranışlarını tanımlayan dalga fonksiyonu ve dolayısıyla olasılık yoğunluğu, uzayın her yerinde değil sadece sınırlı bir bölgesinde sıfırdan farklı olmalıdır (bkz. Şekil 2.3). Böyle bir dalga fonksiyonu, yukarıdaki serbest parçacık çözümlerinden bir dalga grubu oluşturularak elde edilebilir. Hesaplar çok sayıda serbest parçacık çözümünün bir lineer kombinasyonu olarak ifade edilebilen böyle bir dalga fonksiyonunun zamanla uzaya yayılacağını gösterir.

2.11.2 Potansiyel enerji duvarı

Enerjisi E olan bir parçacığı ele alalım. Potansiyel enerjinin $x < 0$ için $V(x) = 0$ olduğunu, $x \geq 0$ içinse V_0 pozitif sabit bir sayı olmak üzere $V(x) = V_0$ olduğunu düşünelim. Parçacığın toplam enerjisi potansiyel enerji duvarının yüksekliğinden küçük olsun (bkz. Şekil 2.4).



Şekil 2.4: Bir potansiyel enerji duvarına doğru yol alan parçacığın toplam enerjisi ve potansiyel enerji. Toplam enerji potansiyel enerji duvarının yüksekliğinden düşüktür.



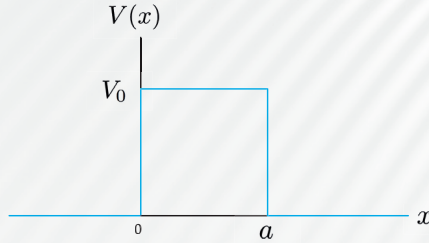
Şekil 2.5: Orijinde konumlanmış bir potansiyel enerji duvarına doğru yol alan ve toplam enerjisi potansiyel enerji duvarının yüksekliğinden düşük olan bir parçacık için zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümü (üstte) ve herhangi bir andaki olasılık yoğunluğu (altta)

Böyle bir sisteme klasik fizik açısından bakarsak parçacığın herhangi bir $x \geq 0$ konumunda bulunma olasılığı sıfır olmalıdır. Çünkü parçacığın potansiyel enerji engelini yenmeye yetecek kadar enerjisi yoktur. Dolayısıyla $-\infty$ 'dan orijine doğru yol alan bir parçacık $x = 0$ noktasında potansiyel enerji duvarına çarparak geri yansımalıdır. Böyle bir sistemi kuantum mekaniği açısından ele aldığımızdaysa

şaşırtıcı bir sonuçla karşılaşırız. Schrödinger denklemi kullanılarak yapılan hesaplar, yine $-\infty$ 'dan gelen bir parçacığın potansiyel enerji duvarından yansıyacağını gösterir. Ancak kuantum mekaniksel hesaplara göre parçacığın $x > 0$ koordinatlarında bulunması olasılığı da sıfır değildir (bkz. Şekil 2.5). Bu durumun anlamı şudur: Her ne kadar potansiyel enerji duvarına çarparak kesin olarak geri yansıyacak olsa da parçacığın potansiyel enerji duvarının içine “batması” da mümkündür.

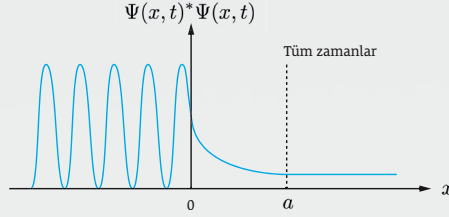
2.11.3 Potansiyel enerji bariyeri, tünelleme

Bir parçacığın $-\infty$ 'dan bir potansiyel enerji bariyerinin üzerine doğru geldiğini düşünelim (bkz. Şekil 2.6). Parçacığın toplam enerjisi potansiyel enerji bariyerinin yüksekliğinden küçük olsun.



Şekil 2.6: Bariyer potansiyeli

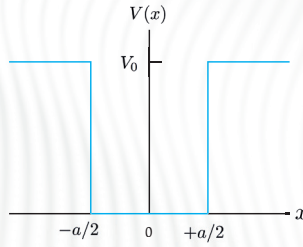
Bu sisteme klasik fizik açısından bakarsak parçacığın potansiyel enerji bariyerini aşması imkânsızdır. Potansiyel enerji engeliyle karşılaştığında yansımali ve $-\infty$ 'a doğru yol almaya başlamalıdır. Schrödinger denklemi kullanılarak yapılan hesaplar, toplam enerjisi potansiyel enerji bariyerinin yüksekliğinden düşük olsa bile, parçacığın bariyeri aşarak $+\infty$ 'a doğru yol almaya devam etmesinin olasılıkları dâhilinde olduğunu gösterir (bkz. Şekil 2.7). Potansiyel enerji bariyerinin olduğu bölgede olasılık yoğunluğu, artan x yönünde hızla azalır ancak sıfıra düşmez. Dolayısıyla kuantum mekaniğine göre bir parçacığın potansiyel enerji engellerini aşması mümkündür. Klasik fizikle açıklanamayan bu olgu tünelleme olarak adlandırılır. Atom çekirdeklerinden alfa parçacıklarının atılması, tünelleme ile gerçekleşen doğal süreçlerin örneklerindendir.



Şekil 2.7: Potansiyel enerji bariyeri sistemi için olasılık yoğunluğu. Parçacığın toplam enerjisinin bariyer yüksekliğinden düşük olmasına rağmen olasılık yoğunluğunun bariyerin ötesinde sıfıra düşmemesi, parçacığın bariyeri aşmasının mümkün olduğunu gösterir. Klasik fizikle açıklanamayan bu olgu tünelleme olarak adlandırılır.

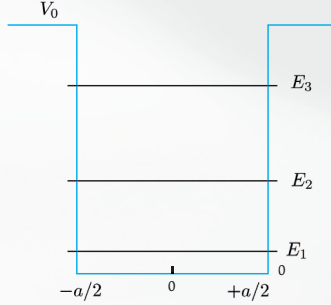
2.11.4 Potansiyel enerji çukuru

Bir parçacığın bir potansiyel enerji çukurunun içinde olduğunu ve toplam enerjisinin çukurun derinliğinden daha düşük olduğunu düşünelim (*bkz.* Şekil 2.8). Klasik fiziğe



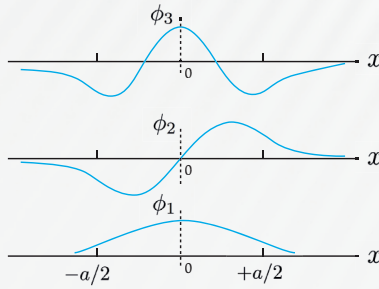
Şekil 2.8: Potansiyel enerji çukuru

göre parçacık bir hacmin içine hapsolmuştur. Kuantizasyonla ilgili daha önce ifade ettiğimiz genel kurala uygun biçimde, Schrödinger denklemi kullanılarak yapılan hesaplar parçacığın enerjisinin ancak belirli değerler alabileceğini gösterir (*bkz.* Şekil 2.9). Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümleri olan özfonksiyonlar incelendiğinde, bu durumda da yine parçacığın potansiyel enerji çukurunun



Şekil 2.9: Kuantum mekaniksel hesaplar bir potansiyel enerji çukurunun içindeki parçacığın enerji spektrumunun kuantize olduğunu gösterir.

duvarlarına batmasının olasılıklar dâhilinde olduğunu görürüz (bkz. Şekil 2.10). Bu olasılık ancak potansiyel enerji çukurunun derinliğinin sonsuz olduğu farazi durumda (bkz. 2.11.5) sıfıra düşer. Parçacığın enerjisinin potansiyel enerji çukurunun derinliğinden büyük olduğu durumdaysa enerji spektrumu süreklidir.



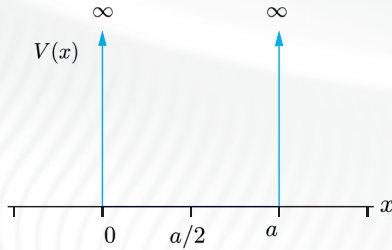
Şekil 2.10: Potansiyel enerji çukuru sisteminin zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümleri olan özfonksiyonların en düşük enerjili üç tanesi

2.11.5 Sonsuz potansiyel enerji çukuru

Schrödinger denklemi kullanılarak yapılan hesapların kuantizasyonu tahmin etmesini basit bir örnekle ele alalım. Bir parçacığın sonsuz büyüklükte potansiyel enerji bariyerleriyle a genişliğinde bir bölgenin içine hapsediği bir boyutlu bir sistemi inceleyelim (bkz. Şekil 2.11). Potansiyel enerji şöyledir:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & a < x \end{cases}$$

Bir parçacığın sonsuz büyüklükte bir potansiyel enerji bariyerini aşması mümkün



Şekil 2.11: Sonsuz potansiyel enerji çukuru

olmadığı için parçacığın potansiyel enerjinin sonsuz olduğu $x < 0$ ve $x > a$ bölgelerinde bulunma olasılığı ve dolayısıyla dalga fonksiyonu sıfır olmalıdır:

$$x < 0 \text{ veya } x > a \rightarrow \phi(x) = 0$$

Potansiyel enerjinin sıfır olduğu $0 \leq x \leq a$ aralığı içinse Schrödinger denklemi şudur:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} = E\phi(x)$$

Bu denklemin genel bir çözümünü A ve B karmaşık sayılar ve $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ olmak üzere

$$\phi(x) = A \cos kx + B \sin kx$$

şeklinde ifade edebiliriz. Dolayısıyla tüm uzay için en genel çözüm şu şekildedir:

$$\phi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ A \cos kx + B \sin kx, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & a < x \end{cases}$$

Çözümün tam olarak ne olduğunu bulmak için A ve B sayılarını da bulmamız gerekiyor.

Schrödinger denkleminin çözümü olacak bir dalga fonksiyonu tüm uzayda “sürekli” olmalıdır. Dolayısıyla $x < 0$ için dalga fonksiyonu 0 olduğuna göre $x = 0$ noktasında da dalga fonksiyonu 0 olmalıdır. Öyleyse

$$A \cos 0 + B \sin 0 = 0$$

eşitliği doğru olmalıdır. Trigonometri $\cos 0 = 1$, $\sin 0 = 0$ olduğunu söyler. Dolayısıyla bu denklemi çözdüğümüzde A sabitinin değerinin 0 olduğunu buluruz. Benzer biçimde $x = a$ noktasında da dalga fonksiyonu sürekli olmalıdır. Öyleyse

$$B \sin ka = 0$$

eşitliği doğru olmalıdır. Bu eşitliğin bir çözümü $B = 0$ olabilirdi. Ancak böyle bir çözüm matematiksel olarak anlamlı olsa da fiziksel olarak anlamsızdır. B 'nin sıfır olması durumunda dalga fonksiyonun tüm uzaydaki değeri sıfır olacaktır. Böyle bir çözümse uzayda hiçbir parçacık olmadığı anlamına gelir. Bizse bölgenin içine hapsolmuş bir parçacığın dalga fonksiyonunu bulmaya çalışıyoruz. Dolayısıyla B sabitinin değeri ne olursa olsun

$$\sin ka = 0$$

her durumda doğru olmalıdır. Trigonometri n bir tam sayı olmak kaydıyla $\sin n\pi = 0$ olduğunu söyler. Dolayısıyla aradığımız çözümde

$$ka = n\pi$$

yani

$$(\sqrt{2mE}/\hbar)a = n\pi$$

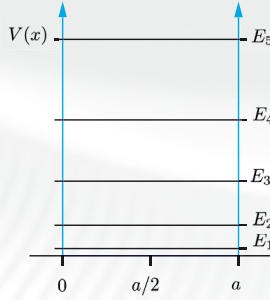
olmalıdır. Bu eşitlik, n bir tam sayı olduğu için, sistemde kuantizasyon olduğunu gösterir. Potansiyel enerji çukurunun içindeki parçacığın enerjisi herhangi bir değeri alamaz (*bkz.* Şekil 2.12). Yukarıdaki eşitliği E değerleri için çözdüğümüzde mümkün olan enerji değerlerinin

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

olduğunu ($n = 0$ dalga fonksiyonu sıfır yaptığı için çözüme dâhil değil), bu enerji özdeğerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarınunsa

$$\phi_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ B_n \sin(n\pi x/a), & 0 \leq x \leq a \\ 0, & a < x \end{cases}$$

olduğunu buluruz.



Şekil 2.12: Sonsuz potansiyel enerji çukurundaki bir parçacığın enerji spektrumu

Son olarak B_n sabitlerinin değerini hesaplamak için yapılması gerekense bu enerji özfonksiyonlarını normalize etmektir. Normalizasyon integrali hesaplanarak değeri 1'e eşitlendiğinde katsayıların n 'den bağımsız olduğu ve değerinin $\sqrt{2/a}$ olduğu görülür¹: $B_n = \sqrt{2/a}$. Katsayı değerleri de yerine konulduğunda nihai çözüm şu şekilde olur:

$$\phi_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a), & 0 \leq x \leq a \\ 0, & a < x \end{cases}$$

Bulduğumuz çözümde bir noktaya dikkat edelim. Hesaplar enerjinin alabileceği

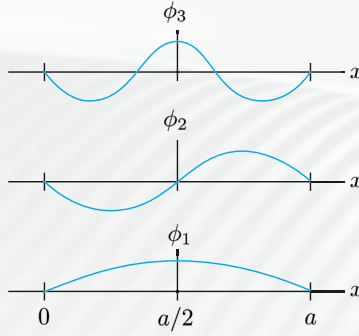
¹Bu hesabı analitik olarak yapmak isterseniz şu belirsiz integral ifadesi işinize yarayabilir:

$$\int \sin^2 mx \, dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4m} \sin 2mx + C$$

değerlerin bir alt sınırı olduğunu da gösteriyor. Parçacığın enerjisinin

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

değerinden daha küçük olması mümkün değil. Klasik fizik kullanılarak yapılan hesaplar enerji için herhangi bir alt sınır koymaz. Klasik fizik açısından en düşük enerjili durum, parçacığın potansiyel enerji çukurunun dibinde hareketsiz kalmasıdır.



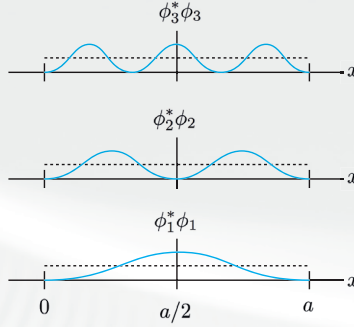
Şekil 2.13: Sonsuz potansiyel enerji çukuru sistemi için, zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümü olan özfonksiyonların en düşük enerjili üç tanesi

Temel enerji seviyesindeki bir parçacığı ele alalım. Bu parçacığın dalga fonksiyonu, sıfırdan farklı olduğu $0 \leq x \leq a$ aralığında $\phi_1(x) = \sqrt{2/a} \sin(\pi x/a)$ 'ya eşittir. Bu dalga fonksiyonunu kullanarak parçacık üzerinde yapılacak konum ve momentum ölçümleri hakkında bilgi edinebiliriz. Konumun beklenen değerini hesaplamak için kullanmamız gereken eşitlik şudur:

$$\bar{x} = \int_0^a \phi_1^*(x) x \phi_1(x) dx$$

Bu integralin sonucunu tahmin etmenin basit bir yolu var. Olasılık yoğunluğunun (bkz. Şekil 2.14) $x = a/2$ etrafında simetrik olmasından yararlanılarak kolaylıkla sonucun $\bar{x} = a/2$ olduğu çıkarımı yapılabilir. Bu sonucu, dalga fonksiyonunu integral

ifadesinde yerine koyarak analitik hesaplarla da doğrulayabilirsiniz ². Genişliği a olan bir potansiyel enerji çukurunun içinde, $x = 0$ ve $x = a$ koordinatları arasında dolanan bir parçacığın konumunu ölçmek için yapılacak çok sayıda ölçümün ortalama değerinin $a/2$ olmasının pek de şaşırtıcı olduğu söylenemez.



Şekil 2.14: Sonsuz potansiyel enerji çukuru sisteminin en düşük enerjili üç özfonksiyonu için olasılık yoğunlukları

Parçacığın momentumunun beklenen değerini hesaplamak için kullanmamız gereken eşitlikse şudur:

$$\bar{p} = \int_0^a \phi_1^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi_1(x) \right) dx = -i\hbar \int_0^a \phi_1^*(x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \phi_1(x) \right) dx$$

Bu hesap, dalga fonksiyonu eşitlikte yerine konulup önce türevi daha sonra da integrali hesaplanarak yapılabilir. Ancak sonucu tahmin etmenin kolay, “sezgisel” bir yolu var. İntegralin başındaki katsayının sanal, integralin içindeki tüm ifadelerinse reel olduğuna dikkat edin. Bir parçacığın momentumunun beklenen değeri sanal olamayacağına göre integralin değeri ve dolayısıyla momentumun beklenen değeri

²Bu hesabı analitik olarak yapmak isterseniz, şu belirsiz integral eşitliği işinize yarayabilir:

$$\int x \sin^2 mx \, dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x}{4m} \sin 2mx - \frac{1}{8m^2} \cos 2mx + C$$

sıfır olmalıdır³: $\bar{p} = 0$. Bu sonuç size ilk bakışta şaşırtıcı gelmiş olabilir: Enerjisi olan, hareket eden bir parçacığın momentumunun beklenen değeri nasıl sıfır olabilir? Ancak momentumun bir vektör olduğunu ve beklenen değerın çok sayıda ölçümün vereceği ortalama bir sonuca karşılık geldiğini unutmayın. Ele aldığımız parçacığın enerjisi ve dolayısıyla momentumunun “büyüklüğü” sabittir: $p = |\sqrt{2mE}|$. Parçacık üzerinde yapılacak momentum ölçümleri, parçacığın hareket yönüne bağlı olarak 0, 5 olasılıkla $+p$ sonucunu, 0, 5 olasılıkla da $-p$ sonucunu verecektir. Dolayısıyla momentumun beklenen değerinin 0, 5 $p + 0, 5(-p) = 0$ olması zaten beklenen bir durumdur.

Peki parçacığın kuantum durumu Heisenberg belirsizlik ilkesine uyar mı? İlk olarak momentum ve konumdaki belirsizliklerin ne olduğuna bakalım. Momentumdaki belirsizliği hesaplamak daha kolaydır. Dalga fonksiyonu enerji operatörünün bir özfonksiyonu ve sistemde enerji ile momentum arasında $E = p^2/2m$ ilişkisi olduğu için dalga fonksiyonu aynı zamanda p^2 operatörünün de bir özfonksiyonudur. Dalga fonksiyonuna $p_{op}^2 = (p_{op})^2 = (-i\hbar\partial/\partial x)^2 = -\hbar^2\partial^2/\partial x^2$ operatörünü uygulayarak $p_{op}^2\phi_1 = (\hbar^2\pi^2/a^2)\phi_1$ olduğunu kolaylıkla doğrulayabilirsiniz. Bu durum momentumun karesinin beklenen değerini hesaplamayı kolaylaştırır:

$$\begin{aligned}\overline{p^2} &= \int_0^a \phi_1^*(x)(p_{op}^2\phi_1(x))dx \\ &= \frac{\hbar^2\pi^2}{a^2} \int_0^a \phi_1^*(x)\phi_1(x)dx \\ &= \frac{\hbar^2\pi^2}{a^2}\end{aligned}$$

Son basamakta dalga fonksiyonunun normalize olmasından (normalizasyon integralinin değerinin yani tüm olasılıkların toplamının 1 olmasından) yararlandık. Şimdi bulduğumuz $\bar{p}$ ve $\overline{p^2}$ değerlerini kullanarak parçacığın momentumundaki belirsizliği hesaplayabiliriz:

$$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2} - \bar{p}^2} = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{a^2}\right) - 0} = \frac{\hbar\pi}{a}$$

³Bu hesabı analitik olarak yapmak isterseniz şu belirsiz integral ifadesi işinize yarayabilir:

$$\int \sin mx \cos mx dx = \frac{1}{2m} \sin^2 mx + C$$

Konumdaki belirsizlik de benzer bir biçimde hesaplanabilir ancak $\overline{x^2}$ hesapları biraz daha karmaşık⁴. Hesaplar yapıp, bulunan $\overline{x}$ ve $\overline{x^2}$ değerleri belirsizlik ifadesinde yerine konulduğunda parçacığın konumundaki belirsizliğin yaklaşık olarak $\Delta x \approx \frac{a}{2}$ civarında olduğu görülür. Bu durumda $\Delta p \Delta x$ çarpımını yaklaşık $(\frac{\hbar\pi}{a})(\frac{a}{2}) = \hbar\pi/2$ olarak hesaplarız. Bu değer $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ olması gerektiğini söyleyen Heisenberg belirsizlik ilkesi ile uyumludur.

2.12 Atomun Yapısı

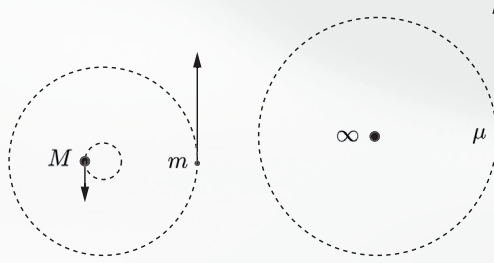
Kuantum teorisinin ilk başarılarından biri atomun yapısını açıklamaktır. En basit atom olması sebebiyle hidrojen atomunu ele alalım. Bu sistem yine de bir önceki bölümde ele aldığımız bir boyutlu farazi sistemlere kıyasla çok daha karmaşıktır. İlk olarak sistemde bir değil iki parçacık vardır: bir proton ve bir elektron. Diğer yandan atomlar üç boyutlu uzayda bulundukları için doğal olarak problemin de üç boyutta formüle edilmesi gerekir. İlk zorluğu aşmak görece kolaydır. Koordinat sistemini parçacıkların kütle merkezinde konumlandırarak matematiksel denklemler sistem sanki tek bir parçacıktan oluşuyormuş gibi yeniden formüle edilebilir (bkz. Şekil 2.15). Bu durumda denklemlerde indirgenmiş kütle μ alır. İndirgenmiş kütle, M protonun (hidrojen atomu çekirdeğinin) ve m elektronun durgun kütleleri olmak üzere, $\mu = Mm/(M + m)$ eşitliğiyle hesaplanabilir. Protonlar elektronlara kıyasla çok daha büyük kütleli olduğu için elektron kütlesi ile indirgenmiş kütle arasındaki fark azdır. Bohr atom modelini tartışırken atom çekirdeğinin hareketlerini dikkate almamış, başka bir deyişle atom çekirdeğinin kütesinin sonsuz büyüklükte olduğunu varsaymıştık (bkz. 1.5). Karşılaştırmaları kolay yapabilmek amacıyla burada da aynı yaklaşımı takip edelim. Sonuçta protonun hareketlerinin sebep olduğu farkları hesaba katmanız için yapmanız gereken tek şey, eşitliklerde elektronun kütesini indirgenmiş kütleyle değiştirmektir.

Hidrojen atomundaki elektronun klasik enerjisini

$$\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z) = E$$

⁴Bu hesabı analitik olarak yapmak isterseniz şu belirsiz integral ifadesi işinize yarayabilir:

$$\int x^2 \sin^2 mx \, dx = \frac{x^3}{6} - \left(\frac{x^2}{4m} - \frac{1}{8m^3} \right) \sin 2mx - \frac{x}{4m^2} \cos 2mx + C$$



Şekil 2.15: Gerçek tek elektronlu bir atomda çekirdek ve elektron ortak kütle merkezlerinin etrafında döner (solda). İki parçacığın üç boyutlu uzayda hareket ettiği bu problemi çözmek görece zordur. Matematiksel eşitlikler, koordinat merkezi sistemin kütle merkezinde konumlandırılarak formüle edildiğindeyse çözümü bulmak kolaylaşır. Model sistemde μ indirgenmiş kütleli bir parçacık sonsuz kütleli, hareketsiz bir nesnenin etrafında döner.

eşitliğiyle ifade edebiliriz. Bu eşitlikte p_x, p_y ve p_z elektronun momentum vektörünün sırasıyla x, y ve z yönlerindeki bileşenlerini ifade eder. $V(x, y, z)$ ise elektron ile proton arasındaki elektromanyetik kuvvetten kaynaklanan potansiyel enerjidir. Bu eşitliği kuantize etmek (bu eşitlikten bir Schrödinger denklemi türetmek) için momentum ve enerji terimlerini kendilerine karşılık gelen operatörlerle değiştirip eşitliğin her iki tarafına dalga fonksiyonunu ekleriz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y, z, t)}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

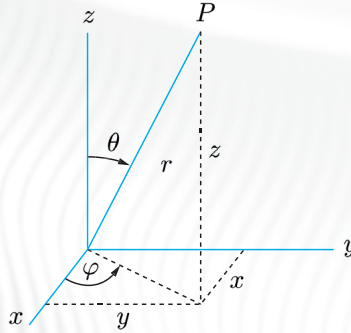
Bu eşitlikteki dalga fonksiyonu doğal olarak her üç uzay boyutunun da bir fonksiyonudur. Potansiyel enerji yüzeyi zamandan bağımsız olduğu için, bir boyutlu Schrödinger denkleminde olduğu gibi, bu denklemden de zaman boyutunu ayırmak kolaydır. Böylece hidrojen atomunun zamandan bağımsız Schrödinger denklemini elde ederiz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y, z)}{\partial z^2} \right)$$

$$+V(x, y, z)\phi(x, y, z) = i\hbar\phi(x, y, z)$$

Bu denklemi analitik olarak çözmek mümkündür. Potansiyel enerji sadece proton ve elektron arasındaki mesafeye bağlı olduğu için Kartezyen koordinatlardan küresel polar koordinatlara geçmek çözümü kolaylaştırır. Küresel polar koordinatlarda bir parçacığın konumu, koordinat merkezine uzaklığı belirten bir $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ koordinatı ve iki açıyla (θ ve φ) ifade edilir (bkz. Şekil 2.16). Kartezyen koordinatlar ile küresel polar koordinatlar arasındaki ilişki şudur:

$(x, y, z) = (r \sin \theta \cos \varphi, r \sin \theta \sin \varphi, r \cos \theta)$. Küresel polar koordinatlarda potansiyel enerji sadece r 'nin bir fonksiyonudur: $V \equiv V(r) = -e^2/r$. Potansiyel enerji fonksiyonu $V(r) = -Ze^2/r$ alınarak, çekirdeğinde Z tane proton bulunan tek elektronlu herhangi bir sistem için daha genel bir çözüm de yapılabilir.



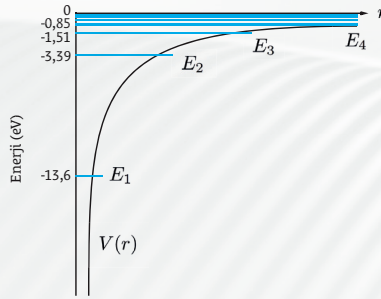
Şekil 2.16: Küresel polar koordinatlar

Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümü olan özfonksiyonlar (dalga fonksiyonları) ve özdeğerler (enerji değerleri) bulunduğunda şu sonuçlarla karşılaşılır: Farklı özfonksiyonlar n, l, m_l sembolleriyle ifade edilen üç kuantum sayısıyla etiketlenebilir. Bu kuantum sayıları sırasıyla baş kuantum sayısı, açısal momentum kuantum sayısı ve manyetik kuantum sayısı olarak adlandırılır. Baş kuantum sayısı $n = 1, 2, 3, \dots$; açısal momentum kuantum sayısı $l = 0, 1, \dots, n - 1$; manyetik kuantum sayısı ise $m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ değerlerini alabilir. Orbital olarak adlandırılan ϕ_{n,l,m_l} özfonksiyonlarına karşılık gelen enerji özdeğerleri (bkz. Şekil 2.17)

sadece baş kuantum sayısına bağlıdır:

$$E_n = -\frac{2\pi^2 z^2 e^4 m}{h^2 n^2}$$

Aynı baş kuantum sayısına fakat farklı açılal momentum ve manyetik kuantum sayılarına sahip orbitallerin enerji kabukları oluşturduğu söylenir. Her bir enerji kabuğunda n^2 tane orbital vardır. Her bir orbitalde spinleri birbirinden farklı olmak kaydıyla en fazla iki elektron bulunabilir. Dolayısıyla bir enerji kabuğunda en fazla $2n^2$ tane elektron olabilir.



Şekil 2.17: Hidrojen atomunun ($Z = 1$) potansiyel enerji yüzeyi ve enerji spektrumu

Kuantum teorisinin tahmin ettiği enerji değerleri daha önce Bohr atom modeliyle elde edilenlerin aynısıdır. Ancak kuantum teorisi, Bohr atom modelinden çok daha farklı bir atom yapısı betimler. Bohr'un modelinde elektronların belirli konumları ve momentumları vardır. Çembersel yörüngelerde dolanırlar. Kuantum mekaniğindeki elektronlara belirsizlik ilkesine uyar. Belirli konumları ya da momentumları yoktur. Bu yüzden modern atom teorisinde atom çekirdeklerini çevreleyen elektron “bulutundan” bahsedilir.

Bohr atom modelinde kuantizasyon ve atomların kararlılığı postulatlarla ifade edilerek doğru oldukları varsayılır. Schrödinger'in teorisindeyse postulatlarla gerek yoktur. Kuantizasyon, Schrödinger denklemlerinin çözümünün bir sonucudur. Hesaplar elektronların enerjisinin ancak belirli değerler alabileceğini gösterir. Ayrıca bu enerji değerlerinin bir alt sınırı vardır. Bu durum atomların neden kararlı olduğuna bir

açıklama getirir. Elektronlar atom çekirdeğine düşmez, çünkü sahip olmaları gereken bir minimum enerji vardır ve bu enerji atom çekirdeğinden uzak kalmalarını sağlar.

Dalga fonksiyonlarından yararlanılarak hidrojen atomundaki elektronun çekirdekten belirli bir uzaklıkta bulma ihtimallerini ifade eden radyal olasılık yoğunlukları hesaplanabilir. En düşük enerjili birkaç orbital için bu yoğunlukları ifade eden grafikleri Şekil 2.18'de görebilirsiniz.

Radyal olasılık yoğunlukları kullanılarak elektronların atom çekirdeğine uzaklığının beklenen değerleri hesaplanabilir. Baş kuantum sayısı n , açısal momentum kuantum sayısı l olan bir orbital için genel formül şudur:

$$\overline{r_{nl}} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left(1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right)$$

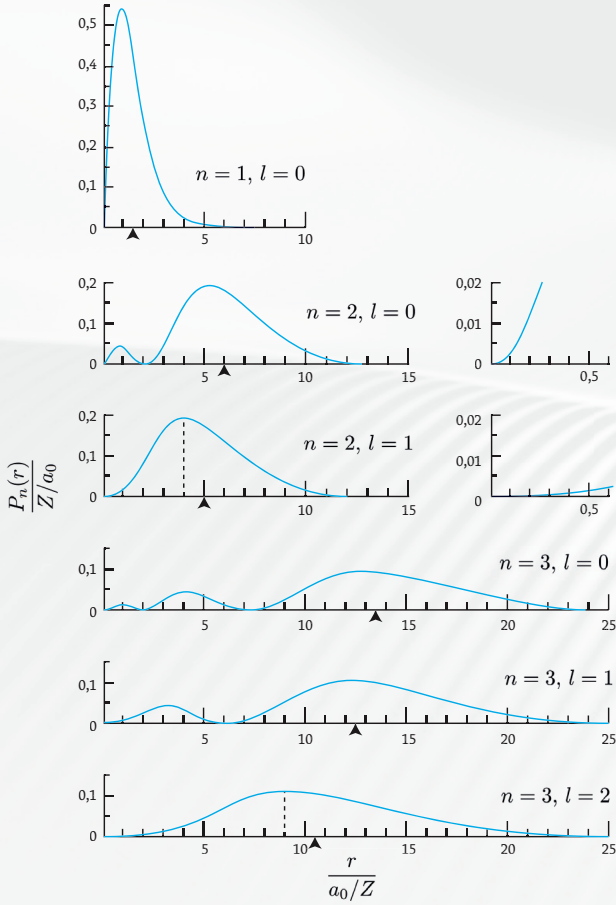
Bu eşitlikteki $a_0 = \hbar^2 / me^2$ terimi Bohr yarıçapını yani Bohr atom modeline göre hidrojen atomunun ($Z = 1$) en düşük enerji seviyesinde bulunan bir elektronun çekirdeğe uzaklığını ifade eder. Bohr atom modeline göre n baş kuantum sayısı ile etiketlenmiş bir orbitaldeki elektronun çekirdeğe mesafesini hesaplamak için kullanılabilecek genel formüle şudur:

$$r_{\text{Bohr}} = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

Kuantum teorisile hesaplanan beklenen değerler, Bohr atom modelindeki yörünge yarıçaplarıyla hemen hemen aynı büyüklüktedir. Ayrıca baş kuantum sayısı arttıkça $\overline{r}$ değeri hızla artar. Bu durumun nedeni, enerjinin de baş kuantum sayısı ile birlikte artmasıdır. Daha fazla enerji, elektron bulutunun yoğunluğunun çekirdeğe daha uzak bölgede daha yüksek olmasına izin verir.

Gerçek hidrojen atomunun yapısı burada anlatılandan biraz daha karmaşıktır. Daha gerçekçi bir kuramsal analiz yapmak için spinin dikkate alınması, atom çekirdeği ve elektron arasındaki manyetik etkileşimlerin göz önünde bulundurulması, rölativistik etkilerin de hesaba katılması gerekir. Ancak bu daha karmaşık analizlerin verdiği sonuçlar da buradaki basit model ile ana hatlarıyla aynıdır. Enerji seviyelerinin yine kuantize olduğu görülür. Ancak enerji değerlerinde ufak kaymalar meydana gelir. Basit modelde aynı enerjiye sahip orbitallerin enerjileri birbirinden farklılaşır.

Birden fazla elektron içeren atomlar için Schrödinger denklemini çözmekse kolay değildir. Sadece elektronlarla atom çekirdeği arasındaki etkileşimler değil elektronların



Şekil 2.18: Tek elektronlu bir atomun orbitallerinin radyal olasılık yoğunlukları. X ekseninde üçgenle işaretlenen noktalar, o orbitaldeki bir elektronun çekirdeğe uzaklığının beklenen değerini $\langle \overline{r}_{nl} \rangle$ gösteriyor. Açıl momentum kuantum sayısının $l = n - 1$ olduğu durumlarda olasılık yoğunluğunun en yüksek olduğu noktalar (kesikli çizgiyle işaretli), Bohr atom modelindeki yörünge yarıçapına denk geliyor.

kendi aralarındaki etkileşimler de sistemin potansiyel enerjisine katkıda bulunur. Çok elektronlu atomların Schrödinger denklemleri analitik olarak çözülemez. Kuramsal tahminler yapmak için nümerik yöntemlere başvurulur. Hidrojen atomunun orbitalleri bu hesaplarda sıklıkla baz kümesi olarak kullanılır. Böylece çok elektronlu atomların dalga fonksiyonları, hidrojenin orbitallerinin bir lineer kombinasyonu olarak elde edilir. Aynı durum moleküllerin kuantum mekaniksel analizi için de geçerlidir. Moleküllerin yapısı hakkında kuramsal tahminler yapmak için kullanılan yöntemlerin başında “atomik orbitallerin lineer kombinasyonu” tekniği gelir.

Kaynaklar

- Eisberg, R. ve Resnick, R., *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles*, John Wiley & Sons, 2. Basım, 1985.
- Gasiorowicz, S., *Quantum Physics*, John Wiley & Sons, 2. Basım, 1995.
- Landau, L. ve Lifschitz, E., *Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory*, Butterworth & Heinemann, 3. Basım, 1976.
- Penrose, R., *The Road to Reality*, Knopf, 2005.
- Schroeder, D. V. ve Peskin, M. E., *An Introduction to Quantum Field Theory*, Westview Press, 1995.
- Shankar, R., *Principles of Quantum Mechanics*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2. Basım, 1994.

Kuantum mekaniği özel kitap ekinin *Bilim ve Teknik*'in Nisan 2025 sayısıyla beraber verilecek ikinci bölümünde...

- Rölativistik Kuantum Mekaniği
 - Özel Görelilik Kuramı
 - Schrödinger Denklemi ve Özel Görelilik
 - Dirac Denklemi
 - Antimadde
 - Kuantum Alan Teorileri
 - Kuantum Elektrodinamiği
 - Kuantum Kromodinamiği ve Elektrozayıf Teori
 - Parçacık Fiziğinin Standart Modeli
- Kuantum Teorisi ve Gerçeklik
 - Dalga Fonksiyonunun Bütüncül Doğası
 - Gizemli Kuantum Sıçramaları
 - U ve R prosedürleri, Ölçüm Paradoksu
 - EPR Paradoksu
 - Bell Teoremi
 - Schrödinger'in Kedisi
 - Kuantum Mekaniğinin Ontolojileri
- Kuantum Teknolojileri
 - Kuantum Bilgisayarlar
 - Kuantum Kriptografi



Avusturyalı fizikçi Erwin Schrödinger (1887-1961), 1925'te kuantum mekaniğinin temelini atan ve bugün kendi adıyla anılan denklemi türetti. 1926'da ise kendisini uluslararası üne kavuşturan, atomaltı parçacıkların mekaniğiyle ilgili makalelerini yayınladı.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

Schrödinger'in denklemi, maddenin mikro ölçekteki davranışlarına açıklama getirdi. Kuantum mekaniği bilgileri, lazer, mikroçip yarı iletkenler ve manyetik rezonans görüntüleme (MRI) gibi pek çok modern teknolojinin geliştirilmesine katkıda bulundu.

Evrene dair anlayışımızı şekillendiren kuantum bilimi, modern fiziğin merkezinde yer alır ve teknolojinin her alanına dokunur. Kuantum fiziği araştırmaları, madde ve enerjiyi en temel düzeyde inceleyerek doğanın ve evrenin yapı taşlarının özelliklerini ve davranışlarını daha iyi anlamamızı sağlar. Bu araştırmaların ortaya çıkardığı büyük bilgi birikimi, insanlık için faydalı teknolojik gelişmelere yön verir.

Kuantum fiziği ile ilgili birçok kavramı zihninizde canlandırmak gerçekten zor olabilir. Matematik tam da bu sırada devreye girer. Kullanılan denklemler, hayal gücümüzün sınırlarını aşan fiziksel süreçler hakkında tahminler yapmaya yardımcı olur. Schrödinger denklemi de bu denklemlerin en önemlilerinden birisi.

Doğayı kavrayışımızda çok büyük değişikliklere yol açan Schrödinger Denklemi'nin yayınlanmasının 100. yılı dolayısıyla Birleşmiş Milletler 2025'i "Uluslararası Kuantum Bilimi ve Teknolojileri Yılı" olarak ilan etti.

Nesiller büyüten dergimizin Mart ve Nisan sayılarında iki bölüm halinde vereceğimiz Kuantum Mekaniği özel kitap ekinin bu anlamlı yıla değer katacağını umuyor, tüm okurlarımıza yepyeni ufuklar açmasını diliyoruz.

Dr. Özlem Kılıç Ekici
Bilim ve Teknik Dergisi
Yayın Yönetmeni