

BÖLÜM 4

ÖZ FONKSİYONLAR VE ÖZ DEĞERLER

Zaman-bağımlı Schrödinger denk.:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) \quad (*)$$

$$\psi(x,t) = T(t)u(x)$$

$$i\hbar u \frac{dT}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + V(x)u \right] T(t)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{dT/dt}{T} = \frac{1}{u} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + Vu \right] = E$$

$$\rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = E \\ \frac{1}{u} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + Vu \right] = E \end{cases}$$

$$T(t) = C e^{-iEt/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + Vu = Eu$$

Zamanla-bağımsız Schrödinger denk.:

(özdeğer denk.)

$O: f(x) \rightarrow g(x)$ mapping.

örnekler,

$$\begin{cases} Of(x) = f(x) + x^2 \\ Of(x) = [f(x)]^2 \\ Of(x) = f(3x^2 + 1) \\ Of(x) = [df(x)/dx]^3 \\ Of(x) = \frac{df(x)}{dx} - 2f(x) \\ Of(x) = \lambda f(x) \end{cases}$$

Linear operatörler: (Diğer op.'lerden ayrılır).

$$L[f_1(x) + f_2(x)] = Lf_1(x) + Lf_2(x)$$

$$L[cf(x)] = cLf(x) \quad c \in \mathbb{C}.$$

Öm:

$$Lf(x) = \frac{df}{dx} - 2f$$

Örnek: $L f(x) = \frac{1}{i} \frac{df(x)}{dx} - \beta x f(x) \stackrel{J}{=} \lambda f(x)$ özdeğer denkl.'ni

$f(a) = f(-a)$ olan sınır koşulu altında $-a \leq x \leq +a$ bölgesinde görürüz.

$$\frac{df}{dx} = \frac{i}{\hbar} (\beta x + \lambda) f, \quad \frac{df}{f} = \frac{i}{\hbar} (\beta x + \lambda) dx$$

$$\ln f(x) = \frac{i}{\hbar} (\beta x^2 + \lambda x) + \text{sbt.}$$

$$f(x) = A e^{i\beta x^2/\hbar + i\lambda x/\hbar} \quad (\text{özfunk.'ler})$$

$$f(a) = f(-a) \Rightarrow e^{i\lambda a/\hbar} = e^{-i\lambda a/\hbar}$$

$$e^{2i\lambda a/\hbar} = 1 \Leftrightarrow \frac{\lambda a}{\hbar} = \pm n\pi \quad (n=0, 1, 2, \dots)$$

$$\lambda = \pm \frac{n\pi}{a} \hbar \quad (\text{özdeğerler})$$

4.

$$\psi(x,t) = T(t)U(x)$$

$$= U_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (*) \text{ denklemin çözümü}$$

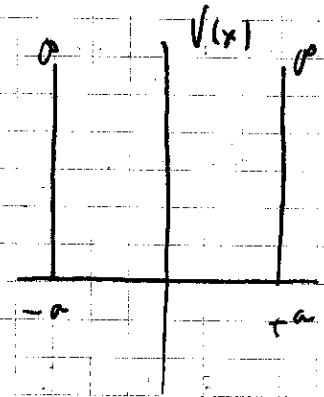
(*) lineer bir denklemin olduğu için dolayı

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n U_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dE C(E) U_E(x) e^{-iEt/\hbar}$$

bu genel çözümdür.

Bir kutudaki bir parçacığın özdeğer problemi

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & \text{diğer yerlerde} \end{cases}$$



bu dalga fonksiyonunun $U(a) = U(-a) = 0$ durum geçti

şekli eşitler.

$$\frac{d^2 U(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} U(x) = 0 \quad -a < x < +a$$

$E < 0$ olduğun durum düşünelim.

$$\frac{d^2 U}{dx^2} - \frac{2m|E|}{\hbar^2} U = 0 \Rightarrow \frac{d^2 U}{dx^2} - \kappa^2 U = 0$$

En genel çözüm e^{kx} ile e^{-kx} in lineer kombinasyonu-
dur ama bu her sun kosullara uygunlar. Dolayısı ile $E > 0$
olduğu.

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + k^2 u = 0 \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$\sin kx$, $\cos kx$

$ka = n\pi$ olmak ; $n = 1, 2, 3, \dots$

$$u_n^{(-)}(x) = C_n^{(-)} \sin k_n x$$

$$u_n^{(+)} = C_n^{(+)} \cos k_n x$$

$ka = (n - \frac{1}{2})\pi$ olmak.

$$E_n^{(-)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$E_n^{(+)} = \frac{[n - \frac{1}{2}]^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$\int_{-a}^{+a} dx u_m^{(+)*}(x) u_n^{(+)}(x) = \int_{-a}^{+a} dx u_m^{(-)*}(x) u_n^{(-)}(x) = \delta_{mn}$$

$$\int dx u_m^{(+)*}(x) u_n^{(-)}(x) = 0$$

$$u_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$u_n^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{(n - \frac{1}{2})\pi x}{a}$$

taban durum: $E_1^{(+)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$

6.

ACILIM POSTÜLASI ve FİZİKSEL YORUMU:

$\psi(0) = \psi(-a) = 0$ sınır koşullarını sağlayan herhangi $\psi(x)$ fonk.'ın bizim çözümlerimizden kurulabilir.

$$\psi(x) = \sum_n (A_n^+ u_n^+ + A_n^- u_n^-)$$

A_n^+ ve A_n^- ortogonalite şartından belirlenir:

$$\begin{aligned} \int dx u_m^{(+)*} \psi &= \sum_n A_n^+ \int dx u_m^{(+)*} u_n^{(+)} + \sum_n A_n^- \int dx u_m^{(+)*} u_n^{(-)} \\ &= \sum_n A_n^+ \delta_{mn} = A_m^{(+)} \end{aligned}$$

$$A_n^{(-)} = \int dx u_n^{(-)*}(x) \psi(x)$$

$u_n^{(\mp)}$ lerini her biri $e^{-iE_n^{\mp} t/\hbar}$ zaman bağımlılığına sokup

$$\therefore \psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[A_n^{(+)} u_n^{(+)}(x) e^{-iE_n^{(+)} t/\hbar} + A_n^{(-)} u_n^{(-)}(x) e^{-iE_n^{(-)} t/\hbar} \right]$$

final anlamı:

4. BÖLÜM (Problemler)

prb. 4.1.) a) $x^3(\psi_1 + \psi_2) = x^3\psi_1 + x^3\psi_2$, $x^3(c\psi) = cx^3\psi$; O_1 linear

b) $x \frac{d}{dx}(\psi_1 + \psi_2) = x \frac{d}{dx}\psi_1 + x \frac{d}{dx}\psi_2$, $x \frac{d}{dx}(c\psi) = cx \frac{d}{dx}\psi$; O_2 linear

c) $O_3(\psi_1 + \psi_2) = \lambda \psi_1^* + \lambda \psi_2^*$, $O_3(c\psi) = \lambda c^* \psi^*$; O_3 linear değil

d) $O_4(\psi_1 + \psi_2) = e^{\psi_1 + \psi_2} = e^{\psi_1} e^{\psi_2} \neq O_4\psi_1 + O_4\psi_2$, $O_4(c\psi) = e^{c\psi} \neq ce^{\psi}$ //

e) $O_5(\psi_1 + \psi_2) = \frac{d}{dx}(\psi_1 + \psi_2) + a \neq O_5\psi_1 + O_5\psi_2$, $O_5(c\psi) = c \frac{d\psi}{dx} + a$ //

f) $O_6(\psi_1 + \psi_2) = \int_{-\infty}^x dx' \psi_1(x') dx' + \int_{-\infty}^x dx' \psi_2(x') dx'$; $O_6 c\psi = c O_6 \psi$ linear.

prb. 4.2.) $O_6 \psi(x) = \lambda \psi(x)$

$$\int_{-\infty}^x dx' \psi(x'); x' = \lambda \psi(x) \Rightarrow \psi(x) x = \lambda \frac{d\psi(x)}{dx}, \frac{d\psi}{\psi} = \frac{1}{\lambda} x dx$$

$$\ln \psi = \frac{x^2}{2\lambda} + \ln C \Rightarrow \psi(x) = C e^{x^2/2\lambda}$$

normin integrallemesi ile olasılığı 1 < 0 olarak

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/|\lambda|} = |C|^2 \sqrt{\pi |\lambda|}$$

$$C = (\pi |\lambda|)^{-1/4}$$

2
prb. 4.3.)

$$a) [O_2, O_6] \psi = O_2 O_6 \psi - O_6 O_2 \psi$$

$$O_2(O_6 \psi) = O_2 \int_{-\infty}^x dx' \psi(x') x' = x \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^x dx' \psi(x') x' = x \psi x = x^2 \psi$$

$$O_6(O_2 \psi) = O_6 \left(x \frac{d\psi}{dx} \right) = \int_{-\infty}^x dx' \underbrace{x'}^x \underbrace{x'}^x \underbrace{\frac{d\psi(x')}{dx'}}_{\frac{d\psi}{dx}}$$

$$= x^2 \psi(x') \Big|_{-\infty}^x - 2 \int_{-\infty}^x dx' x' \psi(x')$$

$$= x^2 \psi - 2 O_6 \psi$$

$$\Rightarrow [O_2, O_6] = -2 O_6$$

$$b) [O_1, O_2] = O_1 O_2 - O_2 O_1$$

$$O_1 \psi = x^3 \psi$$

$$O_2 \psi = x \frac{d}{dx} \psi$$

$$O_1 O_2 \psi = x^4 \frac{d\psi}{dx}$$

$$O_2 O_1 \psi = 3x^3 \psi + x^4 \frac{d\psi}{dx}$$

$$[O_1, O_2] = -3x^3 \psi \quad [O_1, O_2] = -3 O_1$$

prb. 4. (a.) $U_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$ 4.21

$U_n^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{[n - (1/2)]\pi x}{a}$ 4.24

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_- &= \frac{1}{a} \int_{-a}^{+a} dx x^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{a} = \frac{1}{a} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^3 \int_{-n\pi}^{+n\pi} dy y^2 \sin^2 y \\ &= \frac{1}{a} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^3 \left[\frac{y^3}{6} - \frac{y^2}{4} \sin 2y - \frac{y}{4} \cos 2y + \frac{1}{8} \sin 2y \right]_{-n\pi}^{+n\pi} \\ &= \frac{1}{a} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^3 \left[\frac{(n\pi)^3}{3} - \frac{n\pi}{2} \right] = a^2 \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2(n\pi)^2} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_+ &= \frac{1}{a} \int_{-a}^{+a} dx x^2 \cos^2 \frac{n'\pi x}{a} = \frac{1}{a} \left(\frac{a}{n'\pi} \right)^3 \int_{-n'\pi}^{+n'\pi} dy y^2 \cos^2 y \\ &= \frac{1}{a} \left(\frac{a}{n'\pi} \right)^3 \left[\frac{y^3}{6} + \frac{y^2}{4} \sin 2y + \frac{y}{4} \cos 2y - \frac{1}{8} \sin 2y \right]_{-n'\pi}^{+n'\pi} \\ &= a^2 \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2n'^2(n - \frac{1}{2})^2} \right] \end{aligned}$$

$(\Delta x)_- = a \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{1}{2(n\pi)^2}} \quad (\Delta p)_- = \sqrt{\langle p^2 \rangle_-} = \frac{n\pi\hbar}{a}$ 4.28

$(\Delta x)_-(\Delta p)_- = n\pi\hbar \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{1}{2(n\pi)^2}} > n\hbar \quad (\Delta p)_+ = \frac{n'\pi\hbar}{a}$

$(\Delta x)_+(\Delta p)_+ = (n - \frac{1}{2})\pi\hbar \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{1}{2(n'\pi)^2}} > (n - \frac{1}{2})\hbar$

prb. 4.5.)



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi \quad \psi(0) = \psi(L) = 0$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0 \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$\psi_+(x) = \cos kx$ ve $\psi_-(x) = \sin kx$; $\psi_+(x)$ sınır koşullarını sağlamaz

$$\psi_-(0) = 0 \quad \psi_-(L) = \sin kL = 0 \Rightarrow kL = n\pi$$

$$\psi_n^{(-)} = C \sin \frac{n\pi}{L} x ; |C|^2 \int_0^L dx \sin^2 \frac{n\pi}{L} x = 1$$

$$C = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\psi_n^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$

prb. 4.6.) 2a genişliğindeki kuyudaki parçacığın taban durumu,

$$\psi_1^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi x}{2a}$$

2b genişliğindeki kuyudaki parçacığın özfonksiyonları ile cinsinden geliştirilebilir

$$\psi_1^{(+)}(x) = \sum_n [A_n^{(+)} \psi_n^{(+)}(x, b) + A_n^{(-)} \psi_n^{(-)}(x, b)]$$

parçacığın $\psi_1^{(+)}(x, b)$ durumunda bulunma olasılığı $|A_1^{(+)}|^2$:

$$A_1^{(+)} = \int_{-b}^{+b} dx \psi_1^{(+)}(x, b) \psi_1^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{ab}} \int_{-a}^{+a} dx \cos \frac{\pi x}{2b} \cos \frac{\pi x}{2a}$$

$$= \frac{4b \sqrt{ab}}{\pi (b^2 - a^2)} \cos \frac{\pi a}{2b}$$

$$\cos A \cos B = \frac{1}{2} [\cos(A-B) + \cos(A+B)]$$

$$\sin(A \pm B) = \sin A \cos B \pm \cos A \sin B$$

5.

prb. 4.6. 'ya devam!

1. uyandırılmış durum : $u_1^{(-)}(x,b)$ Bu durumda bulunma olasılığı

$$|A_1^{(-)}|^2$$

$$A_1^{(-)} = \int_{-b}^{+b} dx u_1^{(-)}(x,b) u_1^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{ab}} \int_{-a}^{+a} dx \sin \frac{\pi x}{b} \cos \frac{\pi x}{2a} = 0$$

(*) Parite konumunu nedeni ile bu sonuç doğrudur. çünkü başlangıçta (+) pariteli bir durumda idi (-) pariteli bir $u_1^{(-)}(x,b)$ ile geçemez.)

prb. 4.7.)

$$|A|^2 a = 1$$

$t=0$ anından a genişliği bir potansiyel zaman



$$\phi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

$$= 0$$

$$-a < x < 0$$

$$0 < x < a$$

ile
renklerle
fikir.

$$\phi(x,0) = \sum [A_n^{(+)} u_n^{(+)}(x) + A_n^{(-)} u_n^{(-)}(x)]$$

$$\rightarrow A_n^{(\pm)} = \int_{-a}^{+a} dx \phi(x,0) u_n^{(\pm)}(x)$$

$$A_1^{(+)} = \int_{-a}^{+a} dx \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi x}{2a} = \frac{1}{a} \int_{-a}^0 dx \cos \frac{\pi x}{2a} = \frac{2}{\pi}$$

$$|A_1^{(+)}|^2 = \frac{4}{\pi^2}$$

$$A_1^{(-)} = \frac{1}{a} \int_{-a}^0 dx \sin \frac{\pi x}{a} = -\frac{2}{\pi}$$

$$|A_1^{(-)}|^2 = \frac{4}{\pi^2}$$

prb. 4.8.) $u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$

Taban durumu : $u_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$

$$u_1(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \phi_p u_p(x) \quad \phi_p = \int_0^L dx u_1(x) u_p^*(x)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^L dx e^{-ipx/\hbar} \sin \frac{\pi x}{L}$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\hbar} L^2} \frac{1 + e^{-i\pi L/\hbar}}{\frac{\pi^2}{L^2} - \frac{p^2}{\hbar^2}}$$

$$|\phi(p)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar L^3} \frac{1 + \cos \frac{\pi L}{\hbar}}{\left[\frac{\pi^2}{L^2} - \frac{p^2}{\hbar^2}\right]^2}$$

$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$ taban durumu enerjisi $E = \frac{p^2}{2m}$ serbest enerjisi

erişilmez. Çünkü duvarlar sonuna qədər mükəmməl yığılan iş görürsə alınmıyır.

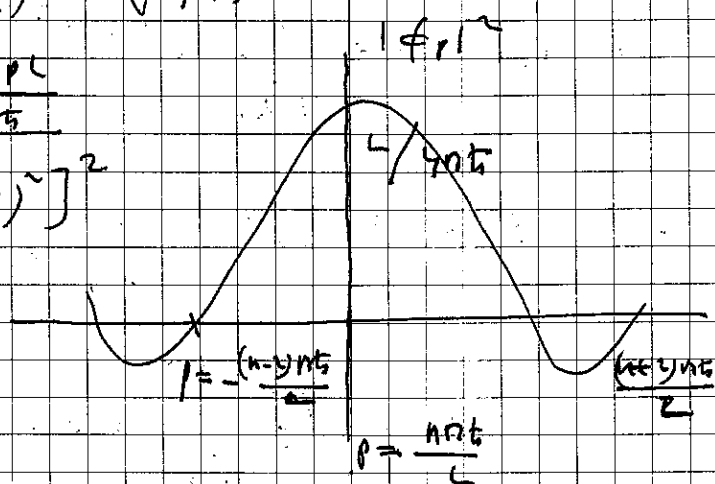
prb. 4.9) $\phi(p) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^L dx e^{-ipx/\hbar} \sin \frac{n\pi}{L} x$

$$= \sqrt{\frac{1}{\pi^3 \hbar L}} \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} dy \sin y e^{-ay} \quad a = \frac{ipL}{\hbar n\pi}$$

$$= \sqrt{\frac{L}{\pi^3 \hbar n^2}} \frac{1}{1+a^2} [1 - (-1)^n e^{-an\pi}]$$

$$= \sqrt{\frac{\pi n^2}{\hbar L^3}} \frac{[1 - (-1)^n e^{-ipL/\hbar}]}{[(\frac{n\pi}{L})^2 - (p/\hbar)^2]}$$

$$|\phi(p)|^2 = \frac{2n^2\pi}{\hbar L^3} \frac{1 - (-1)^n \cos \frac{pL}{\hbar}}{[(\frac{n\pi}{L})^2 - (p/\hbar)^2]^2}$$



$$\Delta p = \frac{4n\pi\hbar}{L}, \quad \Delta x \geq L$$

$$\Delta p \Delta x > \hbar$$

n çok büyükse $p \gg \Delta p$ $\Delta p \rightarrow 0$ (p yarımları)

$$8 \quad \text{prb. 4.10.)} \quad \psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

$$a) \quad \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \phi(p) \psi_p(x) \quad \phi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x) \psi_p^*(x)$$

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar}$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{\alpha}{2}(x - \frac{ip}{\alpha\hbar})^2} e^{-p^2/2\alpha\hbar^2} = \frac{1}{(\alpha\pi\hbar^2)^{1/4}} e^{-p^2/2\alpha\hbar^2}$$

$$|\phi(p)|^2 dp = \frac{1}{\hbar\sqrt{\alpha}} e^{-p^2/\alpha\hbar^2} dp$$

$$b) \quad \langle E \rangle = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle = \frac{1}{2m} \int dp p^2 \frac{1}{\hbar\sqrt{\alpha}} e^{-p^2/\alpha\hbar^2}$$

$$= \frac{\alpha\hbar^2}{2m\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 e^{-z^2} \quad \Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$$

$$= \frac{\alpha\hbar^2}{4m}$$

$$\psi(x) \text{ 'in genişliği } \Delta x \sim \sqrt{\frac{2}{\alpha}}$$

$$\Delta p \sim \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \hbar$$

$$\bar{E} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\alpha\hbar^2}{4m}$$

prb. 4.11.)

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\hat{j}(x) = \frac{\hbar}{2im} \left[\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} - \psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} \right]$$

$$= \frac{\hbar}{2im} \left[(A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}) (ikA e^{ikx} - ikB e^{-ikx}) - (A e^{ikx} + B e^{-ikx}) (-ikA^* e^{-ikx} + ikB^* e^{ikx}) \right]$$

$$= \frac{\hbar}{m} [|A|^2 - |B|^2]$$

prb. 4.12.) $\psi(x) = u(x) e^{ikx}$

$$u(x) = u^*(x)$$

$$\hat{j}(x) = \frac{\hbar}{m} u^2(x)$$

prb. 4.13.)

$$u_n(x) \left[x^2 \frac{d^3}{dx^3} + 3x \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d}{dx} x^2 \right] u_n(x)$$

$\int$ teknika x'in teknika $\rightarrow 0$

$x = (-a, +a)$ aralığında

prb. 4.14.)

$$\begin{aligned} \langle T \rangle - \langle P \rangle^* &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \psi(-x) - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x) \psi^*(-x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \psi(-x) + \int_{+\infty}^{-\infty} dx \psi(-x) \psi^*(x) \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \int dx \psi^{(+)*} \psi^{(-)} &= \frac{1}{4} \int dx [\psi(x) + \psi(-x)]^* [\psi(x) - \psi(-x)] \\
 &= \frac{1}{4} \int dx \{ |\psi|^2 - |\psi(-x)|^2 \\
 &\quad - \psi^*(x)\psi(-x) + \psi^*(-x)\psi(x) \}
 \end{aligned}$$

$$= 0$$