$|\psi\rangle \equiv$ Enerji özdurumları olsun.

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$\langle x|H|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$

$H = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x})$

$$P^2|x\rangle = \int dp\, P^2 |p\rangle\langle p|x\rangle = \int dp\, p^2 |p\rangle \underbrace{\langle p|x\rangle}_{e^{-ipx/\hbar}}$$

$$= \int dp\, -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(e^{-ipx/\hbar}\right)|p\rangle$$

$$= -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\int dp\, e^{-ipx/\hbar}|p\rangle = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\int dp\, |p\rangle\langle p|x\rangle = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}|x\rangle$$

$V(\hat{x})|x\rangle = V(x)$

$$\langle x|H|\psi\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\langle x|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$$

$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow \text{Zamandan bağımsız Schr. denklemi.}$$

$V(x) \rightarrow$ sabit bir fonksiyon olsun. V_0

Denklemin çözümü için;

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi$$

İki durum için bakalım

$E > V_0 \Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) < 0 \Rightarrow +\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) = -k^2$ dersek ($k^2 > 0$)

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = -k^2\psi \Rightarrow \psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$$
$$= A' e^{ikx} + B' e^{-ikx}$$

$E < V_0 \Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0 \qquad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$ tanımlarsak

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = q^2 \psi \Rightarrow \psi(x) = Ae^{qx} + Be^{-qx}$$

[redacted]

$V_0 = 0 \Rightarrow$ yine $E > V_0$ durumu gibi çözülür. $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ dır.

Olasılık Akım yoğunluğu

$\int_V d^3x\, \psi^*(x)\psi(x) \longrightarrow$ Parçacığın bir V hacminde olma olasılığı

$\Rightarrow \psi^*(x)\psi(x) \longrightarrow$ olasılık yoğunluğu olarak adlandıralım $\equiv \rho$

Olasılık yoğunluğunun zamana göre değişimi:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*(x)\psi(x)) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x)\right)\psi(x) + \psi^*\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi(x)\right)$$

Schr. denkleminden,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x,t)$$

$$= \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,t) = \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x)\right)\psi^*(x,t)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x)\right)\psi(x) + \psi^*\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi(x)\right) = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\psi\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*\right)$$

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

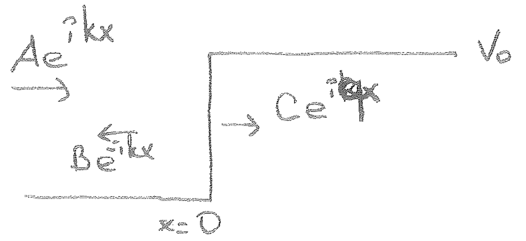
Böylece:

$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x}j = 0 \Rightarrow$ [redacted] korum kanunu.

Potansiyel Basamak

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

i) $E > V_0$



Burada $x<0$ iken parçacık serbest yani dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = \underbrace{Ae^{ikx}}_{\text{Sağa doğru giden dalga}} + \underbrace{Be^{-ikx}}_{\text{Sola doğru giden dalga}}$$

$x>0$ iken potansiyel basamağı var ve $E>V_0$ olduğundan çözümümüz yine $\psi(x) = Ce^{iqx}$. Bozlarpışta soldan gelen bir parçacık demeti göz önüne alırsak B genliği ile yansıma, C genliği ile geçme durumlarından bahsedebiliriz. Bu nedenle $x>0$ da sadece sağa doğru giden dalgayı ele aldık.

$x<0$ da $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $x>0$ da $q^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$.

Yansıma ve geçme olasılıklarını hesaplamak istiyoruz. Bunun için akı yoğunluğu J'ye bakmamız gerekiyor.

$$J_{geçme} = \frac{\hbar}{2mi}\left[C^*(iq)C - C(-iq)C^*\right] = \frac{\hbar q|C|^2}{m}$$

$$J_{gelen} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

$$\Rightarrow T = \frac{J_{geçiş}}{J_{gelen}} = \frac{q}{k}\frac{|C|^2}{|A|^2} \rightarrow \text{geçiş katsayısı}$$

$$J_{yansıyan} = \frac{\hbar k}{m}|B|^2 \Rightarrow R = \frac{J_{yansıma}}{J_{gelen}} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \rightarrow \text{yansıma katsayısı}$$

Şimdi bunları belirleyelim.

Dalga fonksiyonunun uyması gereken sınır şartları ;

i) $\psi_{x<0}(x)\Big|_{x=0} = \psi_{x>0}(x)\Big|_{x=0}$

ii) $\dfrac{\partial}{\partial x}\psi_{x<0}(x)\Big|_{x=0} = \dfrac{\partial}{\partial x}\psi_{x>0}(x)\Big|_{x=0}$

$$\left.\begin{array}{ll} \text{i)} & A+B=C \\ \text{ii)} & ik(A-B)=iqC \end{array}\right\} \quad A = \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k}+1\right)C = \frac{1}{2}\left(\frac{k+q}{k}\right)C$$

$$B = \frac{1}{2}\left(\frac{k-q}{k}\right)C$$

Böylece

$$T = \frac{q}{k}\frac{C^2}{\frac{1}{4}\left(\frac{k+q}{k}\right)^2 C^2} = \frac{q}{k}\frac{4k^2}{(k+q)^2} = \frac{4kq}{(k+q)^2}$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2}$$

$T+R=1$ olduğu görülmektedir. Bu olasılığın korunması anlamına geliyor.

Şimdi $E<V_0$ için bakalım.

$x<0 \Rightarrow$ Serbest parçacık ; $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$; $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$x>0 \Rightarrow$ $V_0 > E$ olduğundan ; $q^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)$; $\psi(x) = Ce^{qx}$ olacak.

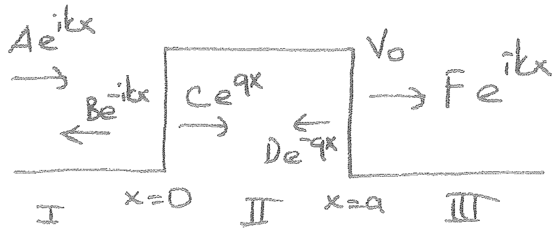
$$J_{geçen} = \frac{\hbar}{2mi}\left(C^* q C - C q C^*\right) = 0$$

$T=0$ dır. Yani parçacıklar potansiyel basamağını geçemez.

$R = \dfrac{|B|^2}{|A|^2} = 1$ olacaktır.

Tünelleme

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ V_0 & 0<x<a \\ 0 & x>a \end{cases}$$



Soldan gelen bir parçacık demeti olsun.

$E < V_0$ durumuna bakalım.

I. ve III. bölgede serbest parçacık: $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$\psi_{III} = Fe^{ikx}$

II. bölgede $V_0 > E$ bir potansiyel bariyeri var: $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$

$\psi_{II} = Ce^{qx} + De^{-qx}$

C'li terim geçen parçacıkları, D'li terim $x=a$'dan yansıyan parçacıkları temsil ediyor.

Sınır şartları;

$$\psi_I\Big|_{x=0} = \psi_{II}\Big|_{x=0} \Rightarrow A+B = C+D$$

$$\frac{\partial \psi_I(x)}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{\partial \psi_{II}(x)}{\partial x}\Big|_{x=0} \Rightarrow ik(A-B) = q(C-D)$$

$$\psi_{II}(x)\Big|_{x=a} = \psi_{III}(x)\Big|_{x=a} \Rightarrow Ce^{qa} + De^{-qa} = Fe^{-ika}$$

$$\frac{\partial \psi_{II}(x)}{\partial x}\Big|_{x=a} = \frac{\partial \psi_{III}(x)}{\partial x}\Big|_{x=a} \Rightarrow q(Ce^{qa} - De^{-qa}) = -ikFe^{-ika}$$

III. bölgeye geçen parçacık akım yoğunluğu

$$J_{x_{s}a} = \frac{\hbar k}{m}|F|^2 \qquad J_{gelen} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

Sınır şartlarından A, F cinsinden çekilirse;

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2+q^2}{2kq}\right)^2 \sinh^2 qa}$$ elde edilir.

Yani parçacık $E < V_0$ olsa dahi III. bölgeye belli bir geçiş olasılığına sahip. Tipik mikroskobik parametreler için, mesela 5eV luk bir e^- 10eV yüksekliğinde ve 0,53 A^0 genişliğinde (Bohr yarıçapı) bir bariyerden %68 olasılıkla geçebilir.

Burada belirleyen parametre qa çarpımı. $q \sim V_0 - E$ ile orantılı ve a bariyerin genişliği. Yani $qa \gg 1 \Rightarrow$ ki bu q'nun yani V_0'ın E den çok büyük olması ve/veya bariyerin çok geniş olması anlamına geliyor –

$$\sinh(qa) = \frac{e^{qa} - e^{-qa}}{2} \sim \frac{e^{qa}}{2}$$

Böylece ;

$$T \xrightarrow[qa \gg 1]{} \left(\frac{4kq}{k^2+q^2}\right)^2 e^{-2qa}$$

ki bu sıfıra yakınsar. Örneğin $V_0 - E = 10^{-7}$ J, $a = 0{,}01$ m için ve $m = 10^{-3}$ kg $= 1$g için $qa \sim 10^{27}$, dolayısıyla geçiş olasılığı $T \sim e^{-10^{27}}$ mertebesinde.

Yine de mikroskobik seviyede de qa'nın büyük olduğu durumlar vardır.

SORU :

$|\psi\rangle = \frac{1}{6}\left[\,|0\rangle + 0|1\rangle + 4|2\rangle\right]$ durumunda bir sistem ele alalım.

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

operatörleri $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle\}$ bazında verilmiş olsun.

a) Önce A nın sonra B nin ölçüldüğü bir deney yapalım. A için 0 ve B için 1 bulma olasılığı nedir?

b) Önce B nin sonra A nın ölçüldüğü bir deney yapalım. B için 1 ve A için yine 0 bulma olasılığı nedir?

c) (a) ve (b) şıklarındaki sonuçları karşılaştırın

d) $\{A\}$ $\{B\}$ $\{A, B\}$ C.S.C.O oluşturur mu?

ÇÖZÜM :

a) A operatörünün matris temsilinde ~~...~~ iki kısma ayrılabilir :

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{array}{c|cc} 2 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{array}\right)$$ [Blok köşegen]

Buradan A'nın bir özdeğerinin $2/\sqrt{2}$ olduğu görülüyor. Bu özdeğere karşılık gelen özvektör $|0\rangle$'dır.

$$A|0\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}}|0\rangle = \sqrt{2}|0\rangle$$

Kalan alt matris 2x2 lik matristir. Bunun özdeğerini bulalım;

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} 1/\sqrt{2}-\lambda & i/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & \frac{1}{\sqrt{2}}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}-\lambda\right)^2 = \frac{1}{2} \Rightarrow \lambda_2 = 0 \text{ ve } \lambda_3 = 2/\sqrt{2} = \sqrt{2} \text{ olur.}$$

Yani A nın spektrumu; $\lambda_1 = \sqrt{2}$, $\lambda_2 = 0$ ve $\lambda_3 = \sqrt{2}$ olarak bulunur. λ_1'e karşılık gelen özvektörü belirlemiştik. λ_2 ve λ_3'e karşılık gelenlere bakalım;

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \left.\begin{aligned} c_1 + ic_2 &= 0 \\ -ic_1 + c_2 &= 0 \end{aligned}\right\} \quad c_2 = +ic_1$$

$$|a=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1\rangle + i|2\rangle\,\right]$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad \begin{aligned} c_1 + ic_2 &= 2c_1 \quad \Rightarrow \quad c_1 = ic_2 \\ -ic_1 + c_2 &= 2c_2 \quad \Rightarrow \quad c_2 = -ic_1 \end{aligned}$$

$$|a=\sqrt{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1\rangle - i|2\rangle\,\right]$$

Görüldüğü gibi özdeğeri $\sqrt{2}$ olan iki durum var. Bunları etiketleyelim;

$$|a^{(1)}=\sqrt{2}\rangle = |0\rangle$$

$$|a^{(2)}=\sqrt{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1\rangle - i|2\rangle\,\right]$$

$$|a=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1\rangle + i|2\rangle\,\right]$$

Şimdi B'nin özdeğer ve özdurumlarını bulalım; Benzer şekilde B de Blok köşegen durumda ve özdeğerlerinden birinin 1 olduğu ve buna karşılık gelen özdurumun $|0\rangle$ olduğu görülüyor. Kalan kısım;

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \; : \; \begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda^2 = 1 \;\Rightarrow\; \lambda = \pm 1$$

Özdurumlar da benzer şekilde bulunur. B'nin de $\lambda = +1$ olan özdeğere karşılık iki durum var:

$$|b^{(1)}=1\rangle = |0\rangle$$

$$|b^{(2)}=1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1\rangle + i|2\rangle\,\right]$$

$$|b=-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1\rangle - i|2\rangle\,\right]$$

A'yı ölçtüğümüzde 0 özdeğerinin gelme olasılığı:

$$P(a=0) = \frac{|\langle a=0|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 1| - i\langle 2|)\left(\frac{1}{6}(|0\rangle + 4|2\rangle)\right)\right|^2}{17/36}$$

$$= \frac{\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{36}\cdot 16}{17/36} = \frac{8}{17} \text{ olur.}$$

Sistem A ölçümü yapıldıktan sonra ve 0 özdeğeri bulunduktan sonra artık $|a=0\rangle$ durumuna çökmüştür. Bunu sistemi $|a=0\rangle$'a izdüşüren operatör ile gösterebiliriz. Sistemin yeni durumuna $|\psi'\rangle$ dersek;

$$|\psi'\rangle = P_{(a=0)}|\psi\rangle = |a=0\rangle\langle a=0|\psi\rangle = \frac{-4i}{6\sqrt{2}}|a=0\rangle \Rightarrow$$

$$|\psi'\rangle = \frac{-2i}{3\sqrt{2}}|a=0\rangle = -\frac{i}{3}\left[|1\rangle + i|2\rangle\right]$$

Şimdi B ölçümü yapalım:

$$P_{(b=1)} = \frac{|\langle b^{(1)}=1|\psi'\rangle|^2}{\langle\psi'|\psi'\rangle} + \frac{|\langle b^{(2)}=1|\psi'\rangle|^2}{\langle\psi'|\psi'\rangle} = 1 \text{ elde edilir.}$$

$|b^{(2)}=1\rangle$ durumu $|\psi'\rangle$ ile orantılı olduğundan ve orantı katsayının fiziksel bir anlamı olmadığından aslında $|\psi'\rangle$ zaten $|b^{(2)}=1\rangle$ durumunda idi ve bu nedenle, yani sistemin zaten B nin bir özdurumunda olması nedeni ile olasılık 1 çıktı.

Toplam olasılık $P(a=0)\cdot P(b=1) = 8/17$ elde edilmiş olur.

b) $$P(b=1) = \frac{|\langle b^{(1)}=1|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} + \frac{|\langle b^{(2)}=1|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{9}{17}$$

Şimdi sistem; $|\psi'\rangle = \left(|b^{(1)}=1\rangle\langle b^{(1)}=1| + |b^{(2)}=1\rangle\langle b^{(2)}=1|\right)|\psi\rangle$

durumuna gelecek; $|\psi'\rangle = \frac{1}{6}|b^{(1)}=1\rangle + \left(-\frac{2i}{3\sqrt{2}}\right)|b^{(2)}=1\rangle$

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{6}|0\rangle - \frac{i}{3}(|1\rangle + i|2\rangle)$$

Şimdi A ölçümü yapalım ve 0 bulalım:

$$P(a=0) = \frac{|\langle a=0|\psi'\rangle|^2}{\langle\psi'|\psi'\rangle} = \frac{8}{9}$$

Tüm olasılık: $P(a=0, b=1) = P(b=1)\,P(a=0) = \frac{9}{17}\cdot\frac{8}{9} = \frac{8}{17}$

c) (a) ve (b) şıkları aynı sonucu verdi. Bu demek oluyor ki önce hangisini ölçtüğümüz önemli değil. Bu da A ve B operatörünün uyumlu gözlenebilirler olduğunu ifade eder. Yani $[A,B]=0$

d) $\{A\}$, $\{B\}$ oluşturmaz.
$\{A,B\}$ oluşturur?

A ve B nin üç ortak özvektörü var.

	A	B
$\|\chi_1\rangle = \|0\rangle$	$\sqrt{2}$	1
$\|\chi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\|1\rangle + i\|2\rangle]$	0	1
$\|\chi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\|1\rangle - i\|2\rangle]$	$\sqrt{2}$	-1