Kuantum Mekaniğinde Parçacığın Konumunu Bulmada Olasılık Yaklaşımı

Eren Veysel Ersoy

Kuantum mekaniğinde bir parçacığın konumunu bulma olasılığı için neden dalga fonksiyonunun mutlak değer karesinin integralini almaya gerek duyuyoruz?

Fizik öğrencileri bu konuya aşinadır ve hemen integral formunu ezbere yazabilirler, ancak bu integral içeren ifadeye hangi düşünce aşamalarından sonra gelindiği ve bunun fiziksel yorumunun nerelere dayandığı gibi hususlar sınav telaşı ve zamansızlık yüzünden genellikle hep atlanır.

Bazı kısa hatırlatmalar yaparak konuya yavaş yavaş ısınalım.

A) Kısa Hatırlatmalar

Bir parçacığın uzayda belli bir bölgede (hacimde) bulunma olasılığı aşağıdaki gibi verilir.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,y,z,t)|^2 \ dxdydz = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,y,z,t) \, . \, \psi(x,y,z,t) \ dxdydz$$

dV = dxdydz diferansiyel hacim elemanıdır.

Dalga fonksiyonunun tek başına fiziksel bir anlamı yoktur, sadece tüm genliklerin bir setidir diyebiliriz.

Daha sade olması bakımından parçacığın tek boyutlu uzayda çizgisel bir doğrultuda hareket ettiğini varsayalım ve dalga fonksiyonunun uzaysal kısmını tek boyutlu olarak ele alalım, bu durumda denklemimiz aşağıdaki hale gelir.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \ dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \, . \, \psi(x,t) \ dx$$

Kuantum Fiziği (E. Wichmann)/Sayfa 304/İleri Konu/***Dalga Fonksiyonunun Normlanması*** konusu incelendiğinde;

Dalga fonksiyonunun x ve t'nin bir fonksiyonu olduğu, **dalga fonksiyonunun mutlak değer karesinin bir *olasılık yoğunluğu ile orantılı* olduğu** ve bunun anlamının bir t anında parçacığı örneğin (x_1,x_2) aralığında bulma olasılığı olduğu görülecektir.

Yani; olasılık $P(x_1,x_2) = N\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \ dx = N\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \, . \, \psi(x,t) \ dx$

N sabiti x ve t'den bağımsızdır.

İntegrali (-∞,∞) aralığında hesaplarsak parçacığı mutlaka bir yerde bulmamız gerektiğinden, olasılık değeri;

$P(-\infty,\infty) = 1 = N\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \ dx$ olmak zorundadır, ancak $\psi(x,t)$ hali hazırda normalize edilmemiştir. $\psi(x,t)$ dalga fonksiyonunu normalize edildikten sonra $\psi_n(x,t)$ olarak adlandıralım.

$\psi_n(x,t)$ bu durumda normalize edilmiş dalga fonksiyonudur ve $|\psi_n(x,t)|^2$ ifadesi ise şimdi doğrudan olasılık yoğunluğu olarak adlandırılır.

Max Born'un önerdiği gibi **$P(x,t)\, dx = |\psi_n(x,t)|^2\, dx$** yazabiliriz, **bunun anlamı $\psi(x,t)$ dalga fonksiyonu ile betimlenen parçacığın t anında x ile x+dx arasında bulunabilme olasılığını tanımlar.** Burada **P(x,t) olasılık değil, olasılık yoğunluğudur.** (Quantum Physics/S. Gasiorowicz/Bölüm-3)

P(x,t) olasılık yoğunluğu değeri gerçel bir sayıdır.

Fiziksel anlam olarak olasılık yoğunluğunun değeri, parçacığın bulunma olasılığının yüksek olduğu yerlerde büyüktür.

$|\psi(x,t)|$'ye ***genlik veya olasılık genliği*** adı verilir. Dolayısıyla olasılık yoğunluğu gibi bu değer de doğal olarak parçacığın bulunma olasılığının yüksek olduğu yerlerde büyüktür.

Hatırlarsak; kompleks sayılarda z=a+bi ifadesinin mutlak değeri $|z| = \sqrt{z.z^*}$ ile verilir. Dolayısıyla $\psi(x, t)$ fonksiyonu da kompleks bir fonksiyon olduğundan $|\psi(x, t)| = \sqrt{\psi.\psi^*}$ olur.

Örneğin, $\psi(x, t) = \psi_0 e^{ikx}$ ve $\psi^*(x,t) = \psi_0 e^{-ikx}$ olsun. $\psi^*.\ \psi = (\psi_0)^2.\ e^{ikx}.\ e^{-ikx} = (\psi_0)^2.e^0 = (\psi_0)^2$ dir.

$|\psi(x, t)| = \sqrt{\psi.\psi^*} = \psi_0$ haline gelir ki, bu da dalganın genliğidir (amplitude).

Schrödinder'in $\psi(x,t)$ dalga fonksiyonu, x'e göre sürekli ve t'nin tüm değerleri için, x'in karesinin integrallenebilir bir fonksiyonu olmalıdır.

Bunun anlamı, $1 = N\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2\ dx$ ifadesinin yakınsak olması demektir.

Aksi takdirde, $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2\ dx$ ifadesi sonsuza ıraksadığında, $1=N.\infty$ olur ve $N=1/\infty=0$ olur.

Bu ise bizi parçacığın hiçbir yerde olmaması gibi fiziksel anlam taşımayan bir yoruma götürür.

Schrödinger denkleminin zamandan bağımsız olasılık yoğunluğunu veren çözümleri durağan çözümlerdir. Durağan olmayan haller için olasılık yoğunluğu salınımlı bir zaman bağımlılığı verir.

Schrödinger denklemi, kuantum mekaniğinin en deterministik ve klasik fiziğe en yaklaşan denklemidir diyebiliriz, çünkü dalga fonksiyonunun t=0'daki başlangıç $\psi(x,0)$ değeri bir kez verildiğinde, takibeden tüm zamanlar için $\psi(x,t)$'nin değerleri bulunabilir. (Quantum Physics/S. Gasiorowicz/Bölüm-3)

<u>Dalga Fonksiyonunu Normlandırma (1'e Boylandırma-Normalizasyon)</u>

$\psi(x,t)$ yukarıda değindiğimiz gibi karesinin integrali alınabilir bir fonksiyon olsun.

Normalizasyon koşulu olarak, $1 = N\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2\ dx$ verilir, çünkü parçacığı mutlaka bir yerde bulmamız gerekir, dolayısıyla parçacığı bulma olasılığımız tüm uzay üzerinden (burada tek boyutlu uzay) integral aldığımızda 1 olmalıdır. Bu normalizasyon ifadesinden N değerini bulabiliriz.

Normalize edilmemiş $\psi(x,t)$ dalga fonksiyonunu normalize edildikten sonra $\psi_n(x,t)$ olarak adlandıralım.

Örneğin şöyle bir tanım yapalım.

$\psi_n(x,t) = \sqrt{N}\,\psi(x,t)$ olsun. Bu durumda $\psi_n(x,t)$'nin aşağıdaki gibi bir özelliği vardır.

$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi n(x,t)|^2 dx = 1$ ve $P(x_1,x_2) = \int_{x1}^{x2} |\Psi n(x,t)|^2 dx$

Bu demektir ki; $\psi_n(x,t)$ fonksiyonunun mutlak karesi $(-\infty,\infty)$ arasında olasılığı 1 verecek şekilde davrandığına göre, (x_1,x_2) aralığında da gerçel değere sahip $P(x_1,x_2)$ olasılığını da vermelidir. Bu durumda **olasılık yoğunluğu** daha önce söylediğimiz gibi dalga fonksiyonunun mutlak değer karesiyle ***orantılı*** **olmasından ziyade**, normalize edilmiş dalga fonksiyonunun mutlak karesine yani, **doğrudan** $|\boldsymbol{\Psi n(x,t)}|^2$ **ifadesine eşit olur.**

Normalize edilmiş $\Psi n(x,t)$ dalga fonksiyonu ile çalışmak, mutlak karesi doğrudan olasılık yoğunluğuna eşit olduğundan matematiksel işlemlerde kolaylık sağlamaktadır.

Kuantum mekaniğinde bir parçacığın konumunu bulma olasılığı için neden dalga fonksiyonunun mutlak değer karesinin integralini almaya gerek duyuyoruz?

Şimdi fiziğin gelişimi açısından tarihsel olarak biraz geriye gidelim.

Klasik elektromanyetik teoride **birim hacim başına enerji (enerji yoğunluğu)** $|E|^2$ ve $|B|^2$ ile orantılıdır ve E ile B'nin genlikleri uzay ve zamana bağlıdır.

$U_E = (\epsilon_0/2)|\mathbf{E}(x,y,z,t)|^2$, $U_M = 1/2\mu_0|\mathbf{B}(x,y,z,t)|^2$

Toplam Enerji Yoğunluğu = $(\epsilon_0/2)|\mathbf{E}(x,y,z,t)|^2 + 1/2\mu_0\,|\mathbf{B}(x,y,z,t)|^2$

Ayrıca Bkz.

-(Fitzpatrick R./Classical Electromagnetism/Page 242)

-(Crawford/Titreşimler ve Dalgalar/Sayfa 249/Denklem 7.93)

-(Wichmann/Kuantum Fiziği/Sayfa 201-202-203-209)

Kuantum mekaniğinde parçacıklar ayni zamanda madde dalgalarıdır (de Broglie dalgaları), dolayısıyla parçacıklarla uğraşırken ayni zamanda dalga fonksiyonları da işin içindedir.

Bu kavramdan yola çıkan Max Born; Klasik EM Teorideki gibi dalga ve dalga fonksiyonlarıyla QM'de de çalışmakta olduğumuzu, öyleyse Klasik EM Teoriyle bir benzeşim yaparak, yani, Klasik EM Teorideki enerji yoğunluğuna benzeterek QM'de Olasılık Yoğunluğu kavramının (parçacığın t anında x ile x+dx arasında bulunabilme olasılığı) dalga fonksiyonunun mutlak karesiyle orantılı olması gerektiğini ileri sürdü. Schrödinger denkleminde yer alan dalga fonksiyonlarına da zaten bu çağrışımdan dolayı *olasılık dalgaları* da denilmektedir.

***** Uyarı**

- Örneğin EM alanın kuantumu olan fotonu ele alalım. Bir EM alanın E ve B genliklerinin kareleri toplamını uzayda fotona bağlı enerji yoğunluğu olarak yorumlamak doğru değildir, bu klasik düşünce yanlıştır. Bunun yerine, ***dalga genliğinin karesiyle ilişkili her nicelik, bir olayın oluş***

olasılığı ile orantılıdır diye yorumlanmalıdır. Örneğin, uzayda belli bir bölgede E ve B genlikleri karelerinin toplamının integrali, bu bölgede fotonun taşıdığı enerjiye eşit değildir. Ama eğer bu bölgede fotonu yakalamak istiyorsak, söz konusu integral onun bu bölgede bulunma olasılığı ile orantılıdır. Benzerince bir perdedeki delikten geçen ışınımın klasik olarak hesaplanan akısı, deliğin hemen arkasına bir algılayıcı koyduğumuzda fotonun algılanma olasılığı ile orantılıdır diye yorumlanmalıdır.

- Uzayın herhangi bir yerinde bir foton bir fotopille algılanmış ise foton tarafından algılayıcıya aktarılan enerji her zaman E = hf'dir. ***Fotonu algılama olasılığı E ve B genliklerinin kareleri toplamıyla orantılı olduğuna göre,*** bir bölgedeki klasik enerji yoğunluğunun integrali, bir fotonun taşıdığı enerji ile fotonun o bölgede bulunma olasılığının çarpımına eşittir. (Not: Bunun anlamı: dalga fonksiyonunun mutlak karesi ile veya buna eşdeğer olarak dalga fonksiyonunun kendisi ve kompleks eşleniği ile fotonun enerjisini çarpmak demektir, bu ise bizi beklenen değer denklemine götürür). Bu nedenle ışık kaynağı, çok sayıda foton salacak şekilde uzun zaman sabit tutulursa, bir bölgede gözlenebilecek ortalama enerji gerçekten o bölgede hesaplanan klasik enerjiye eşittir. (Wichmann/Kuantum Fiziği/Sayfa 170).

Yukarıda bahsedilen ortalama enerji, Ehrenfest'in teoremine uygun olarak kuantum mekaniksel bir değişkenin (***lineer hermityen operatör***) ortalama değeri (beklenen değer) olarak ortaya çıkar.

Ehrenfest Teoremi der ki; "Kuantum mekaniği dünyasındaki değişkenlerin ortalama değerleri, bunlara karşılık gelen klasik fizikteki değişkenlerle tanımlanan hareket denklemlerini doğrular".

Genel olarak, herhangi bir gözlemlenebilir nicelik için beklenen değer, o gözlemlenebilir niceliğin kuantum mekaniksel işlemcisini, dalga fonksiyonunun tüm uzay üzerinden alınan integraline yerleştirerek bulunur, bunun neden böyle olduğu ileride "beklenen değer" konusunda açıklanacaktır.

$$\langle Q\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* Q_{operator} \psi \underset{\text{integral over all space}}{dV}$$

Bir serbest parçacığın enerjisi aşağıdaki gibi verilir. Şimdi bu parçacığa ait enerjinin beklenen değerini (expectation value) bulmaya çalışalım.

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad then \quad \langle E\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m}$$

$$p_{operator} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\langle E\rangle_{free\ particle} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{(-\hbar^2)}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi dx$$

Ayni şekilde momentum operatörünün beklenen değerini bulmak istersek;

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)dx$$

yazmamız gerekir.

Dolayısıyla, Max Born Klasik EM Teoriden esinlenmiştir ama QM için bambaşka bir olasılık yorumu getirmiştir.

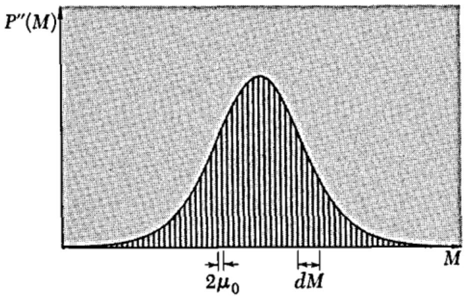
Kuantum mekaniğinde yer alan göresiz Schrödinger ve göreli olarak invaryant Klein-Gordon dalga denklemleri kuantum mekaniğinde çok bilinen denklemlerdir. Tıpkı Maxwell denklemlerine benzer olarak, bu dalga denklemlerinin çözümleri gibi, çözümlerinin süper pozisyonları da birer çözüm olduğundan bu denklemler ikinci dereceden lineer diferansiyel denklemler olarak adlandırılırlar. Bu çözümler ve çözümlerin süper pozisyonları Hilbert Uzayındaki durum vektörlerine (state vector) karşılık gelir. Her bir çözüm (durum vektörü), kuantum mekaniksel sistemin tek bir durumunu anlatır. ***Lineer diferansiyel dalga denklemlerinin çözüm kümesinin elemanları olan fonksiyonlar, tıpkı vektör alanlarının sağladığı lineerlik ve lineer bağımsızlık gibi özellikleri sağlamaktadır.***

B) Sürekli Olasılık Dağılımları

Parçacığı uzayın belli bir bölgesinde bulma olasılığının neden bu şekilde ifade edildiğini anlamak için öncelikle "***Sürekli Olasılık Dağılımları***" konusu anlaşılmalıdır. (F. Reif)/ İstatistik Fizik/Sayfa 86

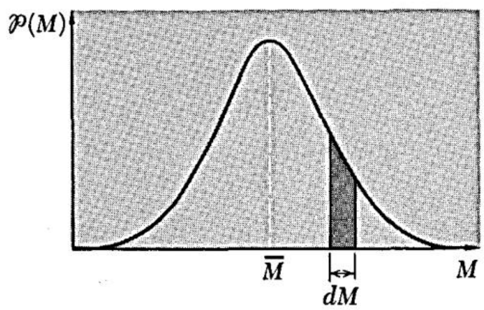
Örnek olarak çok büyük N tane ½ spinden oluşan ideal bir spin sistemini göz önüne alalım. Bu sistemin toplam manyetik momenti herhangi bir anda (N+1) adet mümkün değerden birini alabilir.

Soru şudur: Herhangi bir anda sistemin toplam manyetik momentinin M ile M+dM arasındaki belirli küçük bir aralıkta bulunmasının olasılığı nedir?



Yukarıdaki grafik, spinlerin N sayısının büyük ve bir spinin μ_0 manyetik momentinin nispeten küçük olduğu bir halde spin sisteminin toplam manyetik momentinin bir M değeri almasının P''(M) olasılığını gösterir. Burada M, yalnız $2\mu_0$ ile birbirinden ayrılmış ***kesikli değerler*** alır.

Şimdi μ_0 değerini herhangi bir makroskobik ölçümde geçen en küçük manyetik moment değerinden önemsenmeyecek kadar çok çok küçük varsayarsak, M'yi sürekli bir değişken olarak kabul edebiliriz. Bu durumda aşağıdaki grafikte gösterildiği gibi kesikli değerlerden sürekli değerlere geçtiğimize dikkat ediniz.



Böylece toplam manyetik momentinin M ile M+dM arasındaki belirli küçük bir aralıkta bulunmasının olasılığı P(M, M+dM) = P(M)dM şeklinde verilebilir, burada ***P(M) olasılık yoğunluğudur.***

Yukarıdaki şekilde gösterilen örnekte olasılık yoğunluğu P(M), M'nin yavaş değişen bir fonksiyonudur. Eğrinin altındaki M ile M+dM aralığına düşen P(M)dM taralı alanı, toplam manyetik momentin M ile M+dM aralığında bulunma olasılığıdır.

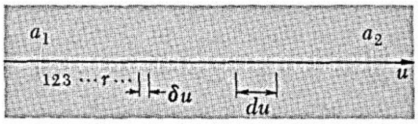
Bunu kinematikte v(t)'nin t'ye göre grafiği çizildiğinde, grafiğin altında kalan dx = v(t)dt diferansiyel yer değiştirme ile benzeştirebiliriz.

Şimdi yukarıda örneğini verdiğimiz toplam manyetik moment örneğini genelleştirelim ve sürekli değişkenin nasıl bir şey olduğuna ilişkin bir örnek verelim. Örneğin u, düzlemde bir vektör ile sabit bir doğrultu arasındaki açıyı göstersin; bu açı, o zaman 0 ve 2π arasında herhangi bir değeri alabilir.

Genel olarak u, $a_1 \leq u \leq a_2$ aralığında ve hatta (-∞,∞) aralığında herhangi bir değeri alabilir. Böylece u ile u+du arasındaki sonsuz küçük aralığa odaklanılabilir ve değişkenin bu aralıkta bulunması olasılığı sorulabilir. du yeter derecede küçük olduğu zaman, bu olasılık, yine P(u) olasılık yoğunluğu du'nun büyüklüğünden bağımsız bir nicelik olmak üzere P(u)du biçiminde du ile orantılı olmalıdır.

Sürekli bir u değişkeni ile ilgili olasılık düşünceleri de değişkenlerin mümkün değerlerinin kesikli ve böylece sayılabilir olduğu daha basit durumlara indirgenebilir. Yalnız u'nun mümkün değerleri bölgesini keyfi küçük ve sabit δu büyüklüğünde eşit bölmelere ayırmamız gerekir. Böylece her bölmeyi r alt indisiyle gösterebiliriz. u' nun bu aralıktaki değerini u_r ile ve u'nun bu aralıkta bulunma olasılığını P_r veya $P(u_r)$ ile gösterelim. Bu işlem u değişkeninin her biri sonsuz küçük r=1,2,3… aralıklarından birine karşılık gelen sayılabilir bir değer kümesi ile çalışmamıza izin verir. Kesikli değişkenlerin olasılıklarını ilgilendiren bağıntıların, sürekli değişkenlerin olasılıkları için de ayni ölçüde geçerli olduğu ortaya çıkar.

Bu anlattıklarımızla ne demek istediğimizin şekli aşağıda verilmektedir.



Şekilde, sürekli bir u değişkeninin değişim bölgesinin δu sonsuz küçük sabit genişliğinde eşit aralıklara bölündüğü ve her aralığın r indisi ile numaralandığı görülmektedir.

Normalizasyon koşulu, olasılıkların mümkün tüm değerleri üzerinden toplamının 1'e eşit olması gerektiğini söyler.

$\sum_r P(Ur)$ = $P(u_1)$ + $P(u_2)$ + $P(u_3)$ …… +$P(u_n)$ = 1 olmalıdır.

Fakat değişken sürekli ise, toplam önce u_r 'nin u ve u+du aralığında bulunan bütün kesikli r aralıkları üzerinden alınabilir, bu toplam değişkenin bu aralıkta bulunmasının P(u)du olasılığını verir. O zaman

$\sum_r P(Ur)$ toplamı, mümkün olan tüm du aralıkları üzerinden toplanarak (integrali alınarak) tamamlanabilir.

Böylece normalizasyon koşulu P(u) olasılık yoğunluğu cinsinden aşağıdaki gibi verilebilir.

$\sum_r P(Ur) = \int_{a1}^{a2} P(u)\, du$ = 1 olur.

Burada P(u)du niceliği olasılıktır, P(u) ise olasılık yoğunluğudur.

Tanım olarak vermek gerekirse;

P(u) olasılık yoğunluğu; P(u)du'nun sürekli u değişkeninin u ve u+du aralığında bulunma olasılığını verir.

Tek boyutlu harekette olasılık yoğunluğu P(x) = Olasılık/Birim uzaklık boyutunda olmalıdır.

İntegralin içi ise P(x) dx = (Olasılık/~~Birim uzaklık~~) . ~~Birim Uzaklık~~ = Olasılık olur.

Yani eğrinin altında kalan diferansiyel alan alan P(x) dx'dir.

C) Sonuç

Şimdi (B) bölümünde bahsettiğimiz sürekli olasılık dağılımları konusunu temel alarak, toplam manyetik momentin M ile M+dM aralığında bulunma olasılığı ile ilgili soruyu ayni paralelde benzeştirerek şöyle soralım:

Soru: ψ(x,t) dalga fonksiyonu ile betimlenen ve çizgisel doğrultuda tek boyutlu uzayda hareket eden bir parçacığın t anında x ile x+dx arasında bulunabilme olasılığı nedir?

Kısacası yazının en başında sorduğumuz soru çerçevesinde aradığımız şey, bir parçacığın belli bir bölgede konumunu bulma olasılığıdır.

Soruların değişkenler dışında birbirinin ayni olduğuna dikkatinizi çekerim. ***Demek ki yola çıkış noktamız sürekli olasılık dağılımları kavramı olacaktır, çünkü hareketli parçacığın alabileceği mümkün değerler sürekli bir değişkenler kümesinin içinde yer alır.***

Bir önceki konuda, genel olarak u'nun, $a_1 \leq u \leq a_2$ aralığında ve hatta (-∞,∞) aralığında herhangi bir değeri alabileceğini belirtmiştik. Burada x'in alabileceği değerler de $a_1 \leq x \leq a_2$ aralığında veya (-∞,∞) aralığında olabilir.

$|\psi_n(x,t)|^2$ ifadesinin neden olasılık yoğunluğu olarak adlandırıldığını daha önce (A) kesiminde ifade etmiştik.

P(u)'nun da sürekli olasılık dağılımları konusunda olasılık yoğunluğu olduğunu da göstermiştik.

Benzeşim yaparsak; P(u) ←→ $|\psi_n(x,t)|^2$, du ←→ dx

Dolayısıyla olasılık ifadeleri de benzeşir;

$P(x_1,x_2) = \int_{x1}^{x2} |\Psi n(x,t)|^2 dx \;\; \leftarrow\!\rightarrow \;\; P(a1,a2) = \int_{a1}^{a2} P(u)\, du$

Normalizasyon koşulları da benzeşecektir;

$1 = N \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \; dx \;\; \leftarrow\!\rightarrow \;\; \int_{-\infty}^{\infty} P(u)\, du = 1$

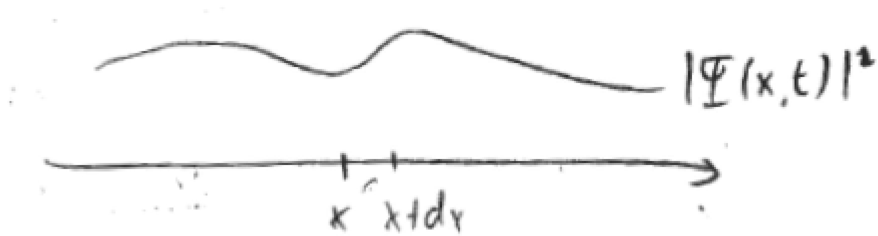
Demek ki (A) kesiminde öngördüğümüz aşağıdaki ifadenin fiziksel anlamının nereden geldiğini ve doğruluğunu göstermiş oluruz.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \; dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \,.\, \psi(x,t)\; dx$$

Grafiksel olarak da (B) kesiminde verdiğimiz P(M)-M grafiğinde ise;

P(M) ←→ $|\psi_n(x,t)|^2$ ve M ←→ x karşılık gelir.

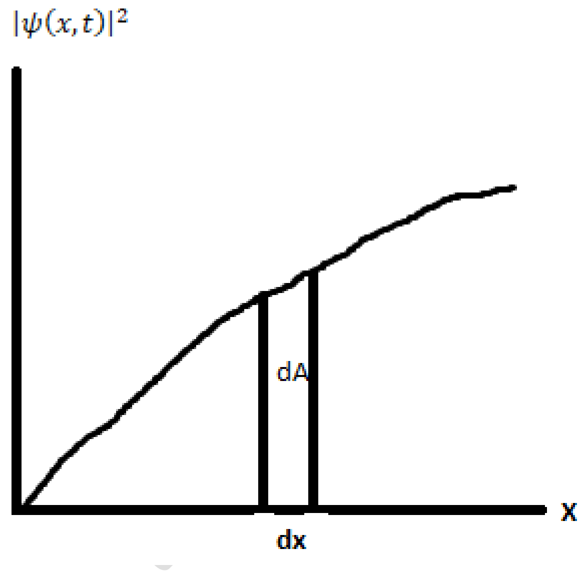
Bu da bize $|\psi_n(x,t)|^2$ fonksiyonu ile bu fonksiyonun altında kalan dx diferansiyel aralığının çarpılması ve $(-\infty,\infty)$ veya (x_1,x_2) aralığında bu çarpımların integrallenmesi sonucu parçacığın bulunma olasılığını verecektir.



$|\Psi(x,t)|^2$ olasılık yoğunluğu olup, uzayda parçacığı bir konumda bulmayı belirler.

https://docplayer.biz.tr/45414508-8-04-kuantum-fizigi-ders-x-schrodinger-denk-bir-v-x-potansiyeli-icinde-bir-boyutta-bir-parcacigin-hareketini-inceler.html

Aşağıdaki grafikte görüldüğü gibi dx = (x+dx) – x aralığında parçacığı bulma olasılığı $|\psi(x,t)|^2$ dx'dir.



D) Ortalama Değer (Beklenen Değer)

Klasik istatistik mekanikte ortalama değer (mean/average value), standart sapma (standard deviation) ve dağılganlık (dispersion) konuları temel olasılık kavramları açısından büyük önem taşır.

Kuantum mekaniğinde de gözlenebilirlerin (*lineer hermityen operatörler*) ortalama ya da beklenen değerlerini (expectation value) hesaplamak için izlenen yöntem de temelini bu klasik kavramlardan alır.

Çeşitli kaynaklarda ortalama değer sembolü olarak örneğin $\bar{x}$, <x> veya Or(x) gibi gösterimler yer almaktadır, biz referans verdiğimiz kitap ve dokümanlarda nasıl kullanıldıysa ona bağlı kalacağız.

Örneğin herhangi bir istatistiksel sistemin bir u değişkeninin mümkün olan u_1, u_2, ….u_a gibi a ayrı değerden her birini P_1, P_2,….P_a olasılıkları ile aldığını varsayalım.

Bu durumda her bir u_r değerinin olageliş olasılığına P_r dersek, u değişkeninin ***ortalama değeri*** aşağıdaki gibi ifade edilir. (F. Reif/ İstatistik Fizik/Sayfa 75-76)

$$\boxed{\bar{u} \equiv \sum_{r=1}^{a} P_r u_r.}$$

Benzer şekilde eğer f(u), u'nun herhangi bir fonksiyonu ise f'nin ***ortalama değeri***

$$\boxed{\bar{f}(u) \equiv \sum_{r=1}^{a} P_r f(u_r).}$$

ifadesi ile tanımlanır.

Bu tanımların mantığının tam olarak kavranabilmesi için kitabın ikinci bölümü olan Temel Olasılık Kavramları bölümünün ilgili kesimlerinin anlaşıldığını varsayarak;

Şimdi asıl konumuz olan kuantum mekaniğinde ortalama değerlerin nasıl hesaplandığına geçelim.

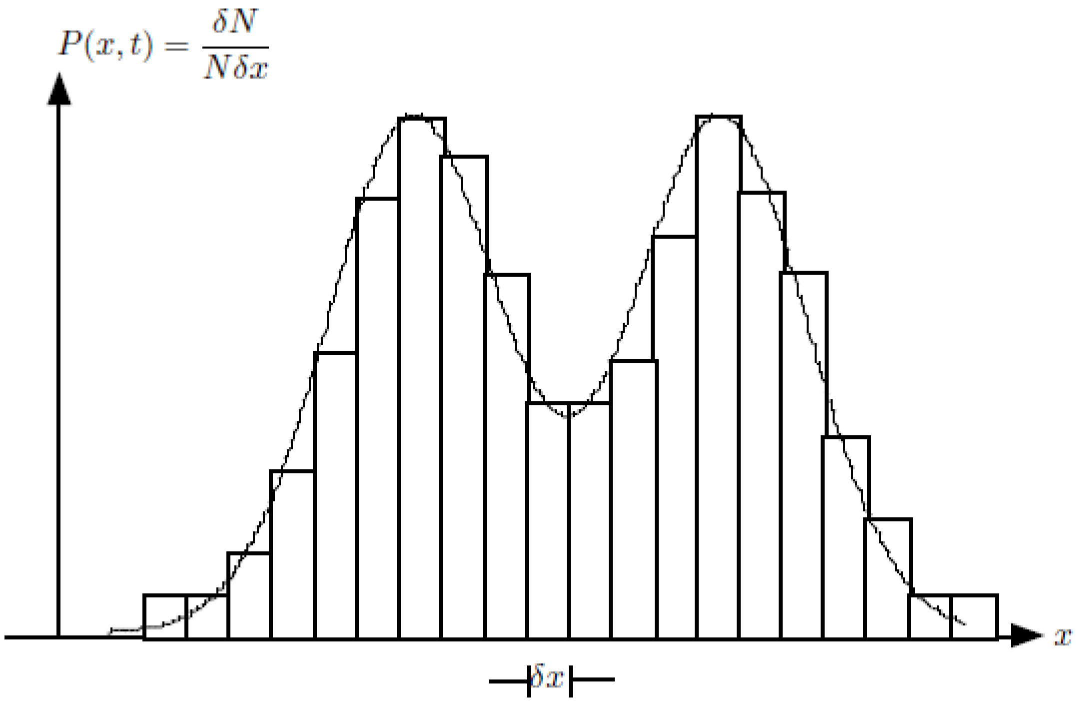
Bir gözlenebilirin beklenen değerini bulmak için neden dalga fonksiyonu ve onun kompleks eşleniği ile gözlenebiliri temsil eden işlemci integral içinde birlikte bulunuyorlar?

Neden aşağıdaki gibi bir ifadeye gerek var? Bunun anlamı nedir?

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* Q_{operator} \psi dV$$

integral over all space

B kesiminde değindiğimiz sürekli olasılık dağılımları kavramı çerçevesinde devam edersek; aşağıdaki grafikteki P(x,t) ifadesi yine olasılık yoğunluğu fonksiyonudur.



https://physics.mq.edu.au/~jcresser/Phys201/LectureNotes/ProbabilitiesExpectationValues.pdf

Dalga fonksiyonu, özdeş şartlar altında tekrarlanan sistemdeki parçacıkların konumunu ölçme deneyi sonucu üretilen rastgele verilerin olasılık dağılımlarını vermiş olsun.

Bu örnekte konum değişkenini (gözlenebilir) örnek alacağız.

Varsayalım ki sistemi oluşturan parçacıkların tümü ayni $\psi(x,t)$ durumunda bulunsunlar ve t anında her bir parçacığın konumunu ölçmüş olalım. Grafiğe göre t anında yapılan ölçüm sonucuna istinaden parçacıklar her δx aralığına gelişigüzel yayılmış olacaktır.

Dolayısı ile aşağıdaki ifade bize yaklaşık olarak parçacıkların δx aralığına düşme olasılığını verecektir.

$$\frac{\delta N(x,t)}{N} \approx P(x,t)\delta x$$

Burada N, toplam parçacık sayısı, δN(x,t) ise (x, x+δx) arasındaki parçacık sayısıdır.

Kesim (B)'den hatırlarsak;

Nasıl ki P(x) dx = (Olasılık/~~Birim uzaklık~~) . ~~Birim Uzaklık~~ = Olasılık idi (grafiğin altında kalan alan), burada da ayni mantık geçerlidir ve P(x,t).δx ifadesi de bize olasılığı verir. Zaten mantıksal olarak da düşünüldüğünde tüm N'ler içinde δN(x,t) değeri eğer (x, x+δx) arasına düştüğü varsayılan parçacık sayısı ise, birbirlerine oranı da doğal olarak olasılığı verecektir.

Yukarıdaki ifadedeki eşitlik bir yaklaşıklık olarak verilmiştir, eğer N -> ∞ yapılarak parçacık sayısı büyütülürse klasik istatistik fizikte de olduğu gibi (deney sayısını artırmakla eş) olasılık değerine de o kadar hassas yaklaşmış oluruz ve artık bu değere eşitlik gözüyle bakabiliriz ve denklem aşağıdaki hale gelir.

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\delta N(x,t)}{N\delta x} = P(x,t).$$

Şimdi bu açıklamaları yaptıktan sonra gelelim beklenen değerin nasıl hesaplandığına;

Şimdi tekrar aşağıdaki denklemlere baktığımızda bir değişkenin veya bir fonksiyonun ortalama değeri ifadeleri daha önce açıkladığımız gibi bu şekilde veriliyordu.

$$\boxed{\bar{u} \equiv \sum_{r=1}^{\alpha} P_r u_r.} \qquad \boxed{\bar{f}(u) \equiv \sum_{r=1}^{\alpha} P_r f(u_r).}$$

Yapacağımız şey, ilgilendiğimiz x değişkeninin ortalama (beklenen) değerini bu denkleme uygun olarak düzenlemektir.

Hatırlarsak olasılık ifademiz yandaki gibiydi. $\frac{\delta N(x,t)}{N} \approx P(x,t)\delta x$

Bu ifadeyi ortalama değer formülüne yerleştirdiğimizde x(t) değişkeni için aşağıdaki ortalama değer ifadesini elde ederiz ve bu durum yukarıda toplam sembolü içinde verilen görüntüye eşdeğer olur. Yani olasılık ile değişkenin veya ilgili fonksiyonun çarpımının kesikli toplamı bize ortalama değeri verir.

$$\langle x(t)\rangle = \sum_{\text{All } \delta x} x \frac{\delta N(x,t)}{N} \approx \sum_{\text{All } \delta x} x\, P(x,t)\delta x.$$

N --> ∞ ve δx --> 0'a götürürsek kesikli toplam ifadelerinden diferansiyel ifadelere geçeriz ve kesikli sigma toplam ifadelerinin yerini aşağıdaki integral formu alır.

$$\langle x(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\, P(x,t)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x\, |\Psi(x,t)|^2 dx$$

$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \ dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (x,t) \,. \psi(x,t)\ dx$ ifadesini hatırlarsak; bu, bir parçacığın yerini bulma olasılığı idi. ***Demek ki bu olasılık ifadesiyle ilgili değişkeni/fonksiyonu/operatörü integralin içine koyunca bunların ortalamasını buluyormuşuz. Şimdi bu bakış açısıyla olasılık ifadesi olan |ψ(x,t)|² 'nin yanına istersek enerji, istersek momentum operatörünü koyup beklenen değerlerini bulabiliriz.***

Denklemin sağ tarafındaki integral, parçacığın herhangi bir özel durumunu tanımlayan dalga fonksiyonu verilince, x kuantum mekaniksel konum değişkeninin sayısal olarak ***ortalama değerini*** bulmamızı sağlar. Kuantum mekaniksel x değişkeninin sayısal değeri yoktur, bu değişkenler öyle tanımlanmışlardır ki, verilen bir dalga fonksiyonu için ancak ortalama değerleri hesaplanabilir.