

FZM 306: Kuantum Mekanikii II

4. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken ařağıdaki kaynak kullanılmıřtır:

Kuantum Mekaniiđi ve Atom Fiziđi Ders Notları

Z. Zekeriya AYDIN

Ankara Üniversitesi

Üç Boyutlu Potansiyel Kuyusu

Tek boyutta sonsuz derinlikli karesel potansiyel kuyusunun üç boyutta genellemesi kolayca yapılabilir. Bir köşesi koordinat başlangıcında olan L kenarlı küpün içinde her yerde $V(x,y,z)=0$, küpün kenarları üzerinde ve dışında her yerde $V(x,y,z)=\infty$ olsun.

Tek parçacık Schrödinger denklemi

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

şeklindedir. Çözüm fonksiyonu $\psi(x,y,z)$ küpün duvarlarında sıfır olmalıdır:

$$\psi(0,y,z)=\psi(L,y,z)=0, \psi(x,0,z)=\psi(x,L,z)=0, \psi(x,y,0)=\psi(x,y,L)=0$$

Dolayısıyla küp içindeki çözümler

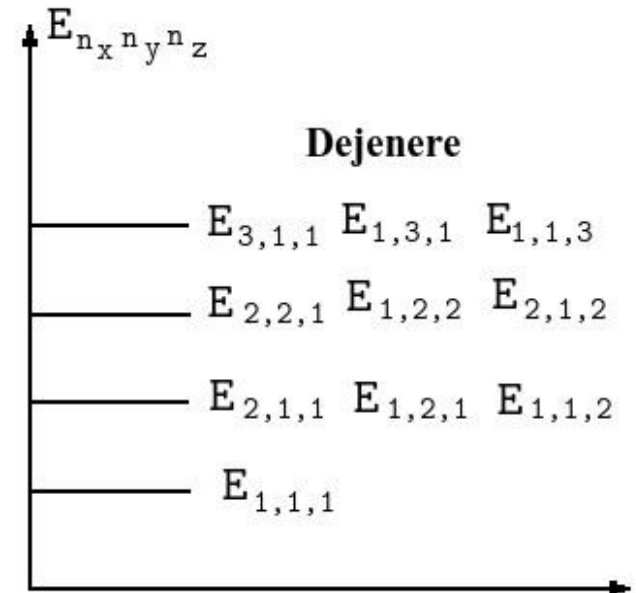
$$\psi_E(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L} z\right)$$

ve enerji özdeğerleri

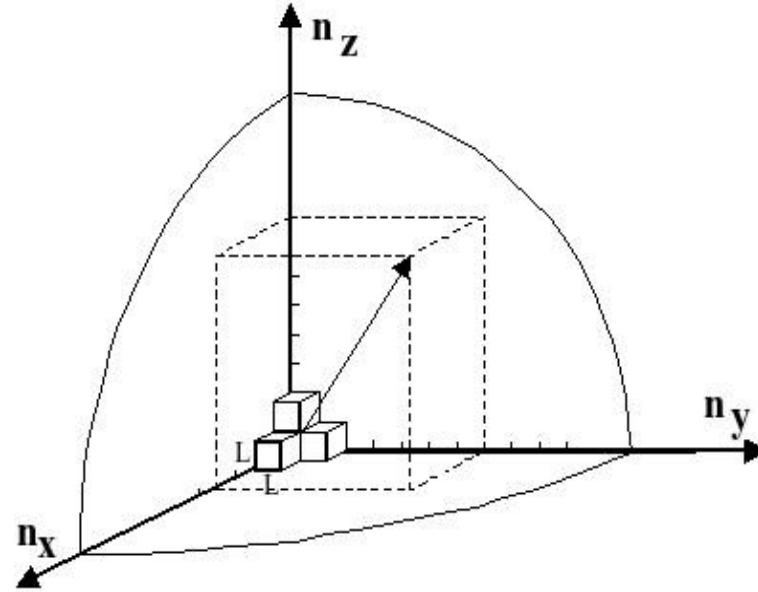
$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

olarak bulunur.

3-boyutlu kübik potansiyel kutusu içindeki parçacığın enerjileri yandaki gibidir.



Olası her (n_x, n_y, n_z) pozitif tamsayı üçlüsüne bir enerji durumu karşı gelir. Şekildeki her küpün köşesi bu durumlardan birini gösterir.



N elektronun en düşük enerjili $(1,1,1)$ durumundan başlanıp ikişer ikişer sırayla yerleştirildiğini kabul edelim. Sonunda bütün elektronların enerji seviyelerine yerleştirildiği E_F FERMİ ENERJİSİ'ne kadar gelinir.

N çok büyük olmak koşuluyla, enerjisi E_F ' ye eşit ya da daha küçük olan durumların sayısı

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \equiv R^2 = \frac{2mL^2 E_F}{\hbar^2 \pi^2}$$

yarıçaplı kürenin hacminin sekizde birine eşittir. Dolayısıyla

$$\frac{N}{2} = \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2mL^2 E_F}{\hbar^2 \pi^2} \right)^{3/2}$$

eşitliğinden, E_F Fermi enerjisi

$$E_F = \hbar^2 \pi^2 \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3}$$

olarak bulunur.

Sistemin taban durum enerjisi, N tane elektronun enerjileri toplamıdır:

$$E_{tab.} \approx \frac{1}{8} \int E_{n_x n_y n_z} d^3 n = \frac{1}{8} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \int (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) dn_x dn_y dn_z$$

ifadesi düzenlenirse, N elektrondan oluşmuş bir sistemin taban durum enerjisi

$$E_{tab.} = \frac{\hbar^2 \pi^3}{20m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{5/3} L^3$$

olarak bulunur.

PROBLEMLER

1) Bir proton ve elektrondan oluşan hidrojen atomunun indirgenmiş kütlelerini hesaplayınız. Bu sistemin kütle merkezi protona ne kadar yakındır? İndirgenmiş kütle yerine elektron kütlelerini alırsanız ne kadar hata yapmış olursunuz? Kütle merkezi ile protonu üstüste varsayarsanız ne kadar hata yapmış olursunuz? Elektron-pozitron sisteminin kütle merkezini ve indirgenmiş kütlelerini bulunuz.

2) P_{12} değiş-tokuş işlemcisinin hermitik olduğunu kanıtlayınız.

3) Üç özdeş parçacıklı sistem için P_{12} , P_{13} ve P_2 değiş-tokuş işlemcilerinin yer değiştirmediklerini kanıtlayınız.

PROBLEMLER

4) Sonsuz derin karesel potansiyel kuyusuna etkileşmeyen iki elektron konuyor.

a) İki elektron farklı spin durumlarındaiken, ve

b) İki elektron aynı spin durumundayken, taban durum yer dalga fonksiyonlarını bulunuz.

5) $\frac{1}{2}(mw^2x^2)$ harmonik potansiyel kuyusu içine etkileşmeyen N tane elektron konuyor.

a) Fermi enerjisi E_F ' yi bulunuz. Bu N elektronlu sistemin en düşük toplam enerjisini (yani taban durumu enerjisini) hesaplayınız.

b) $N=2$ için, iki elektronun da aynı spin durumunda olması halinde, taban durumunun yer dalga fonksiyonu nedir? Bu soruyu, farklı spin durumunda da yanıtlayınız.