FZM 305: Kuantum Mekaniği I

10. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

Kuantum Mekaniği ve Atom Fiziği Ders Notları
Z. Zekeriya AYDIN
Ankara Üniversitesi

DURAĞAN DURUMLAR ve ENERJİ ÖZDEĞER SPEKTRUMLARI

Bir sistem zamandan bağımsızsa (yani parçacık zamanla değişmeyen bir potansiyel içinde hareket ediyorsa), dalga denkleminin durağan durumlar denen özel bir çözüm sınfı vardır; öyle ki bu durumlarda $|\psi(x,t)|^2$ zamandan bağımsızdır.

Dolayısıyla tüm dinamik değişkenlerin de beklenen değerleri zamanla değişmez.

Bu bölümde tüm bu sonuçların, Schrödinger denkleminden nasıl çıktığını örnekler üzerinden göreceğiz.

Durağan Durumlar: Zamandan Bağımsız Schrödinger Dalga Denklemi

Bir parçacığın zamana bağlı olmayan bir *V(r)* potansiyeli içinde hareket ettiğini düşünelim. Bu durumda Schrödinger denklemi *r* ve *t* değişkenlerine ayrılabilir.

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

dalga fonksiyonunu Scrödinger dalga denkleminde yerine yazdıktan sonra her terimi *U(r)T(t)*' ye bölersek

$$\frac{1}{T(t)} i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 U(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})$$

eşitliğini buluruz. Bu eşitliğin sol tarafı yalnızca *t*' ye sağ tarafı ise *r*' ye bağlı olduğu için, bu denklemin sağlanması için iki tarafın bir sabite eşit olması gerekir. Bu sabite *E* diyebiliriz.

Böylece Schrödinger dalga denklemi iki ayrı denkleme ayrılır:

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t)$$

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 U(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})]U(\boldsymbol{r}) = EU(\boldsymbol{r})$$

Burada birinci denklem için

$$T(t) = T(0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

çözümü bulunur. Böylece en genel çözüm

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = U_E(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

biçiminde yazılır.

Bu çözümün mutlak değerinin karesi zamandan bağımsızdır:

$$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=|U_E(\boldsymbol{r})|^2$$

Dalga fonksiyonu üzerinden alınan ortalama (beklenen) değerler de zamandan bağımsız olacaktır. Bu biçimdeki çözüme **durağan durum** denir.

Zamandan bağımsız Schrödinger denklemindeki

$$H_{op}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})$$

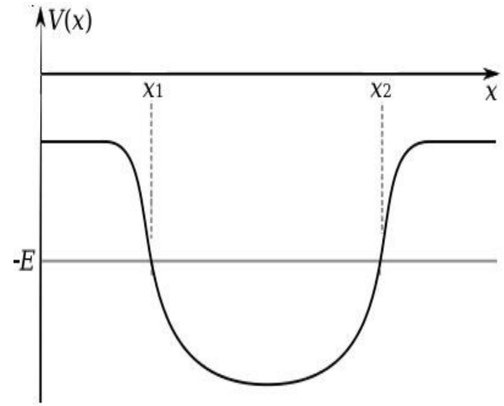
ifadesi **Hamilton işlemcisi** (H_{op}) olarak bilinir. Dolayısıyla

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 U(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})]U(\boldsymbol{r})=EU(\boldsymbol{r})$$

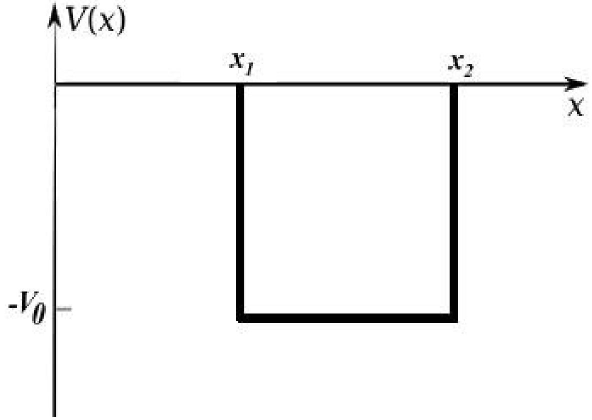
denklemi H_{op} işlemcisi için özdeğer denklemidir: $H_{op}U(r)=EU(r)$

Bağlı Durum Örnekleri

Genel bir potansiyel kuyusu

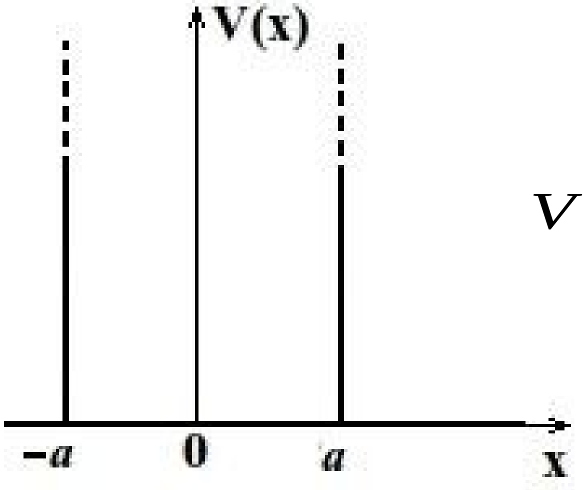


gibidir. Bu kuyu içindeki bir parçacığın bağlı-durumlarını incelerken, parçacığın toplam enerjisi E negatif olarak alınır.



Böyle bir kuyu yandaki gibi karesel bir biçime idealize edilirse, çözümleri bulmak basitleşecektir.

Sonsuz derin karesel potansiyel kuyusu



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

-a<x<a ara-bölgesindeki serbest parçacığın Schrödinger denklemini çözümünden elde edilen dalga fonksiyonu

$$U(-a) = U(a) = 0$$

sınır koşulunu sağlamalıdır. Ara bölgedeki Schrödinger denklemi

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

şeklindedir.

$E>0$ olacağından, k gerçel olmak üzere

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

yazarsak, Schrödinger denkleminin iki çözümü,

i) **Çift çözümler:**

$$U_n^+(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{(2n-1)\pi x}{2a} \qquad E_n^+ = \frac{(2n-1)^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

ii) **Tek çözümler:**

$$U_n^-(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad E_n^- = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

olarak bulunur.

$$\psi(-a) = \psi(a) = 0$$

sınır koşulunu sağlayan en genel çözüm, tek ve çift fonksiyonların herhangi bir çizgisel karışımıdır:

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} [C_n^+ U_n^+(x) + C_n^- U_n^-(x)]$$

Buradan

$$1 = \sum_{n=1}^{\infty} [|C_n^+|^2 + |C_n^-|^2]$$

ve

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} [E_n^+ |C_n^+|^2 + E_n^- |C_n^-|^2]$$

sonuçları kolaylıkla bulunur.