FZM 305: Kuantum Mekaniği I

11. HAFTA

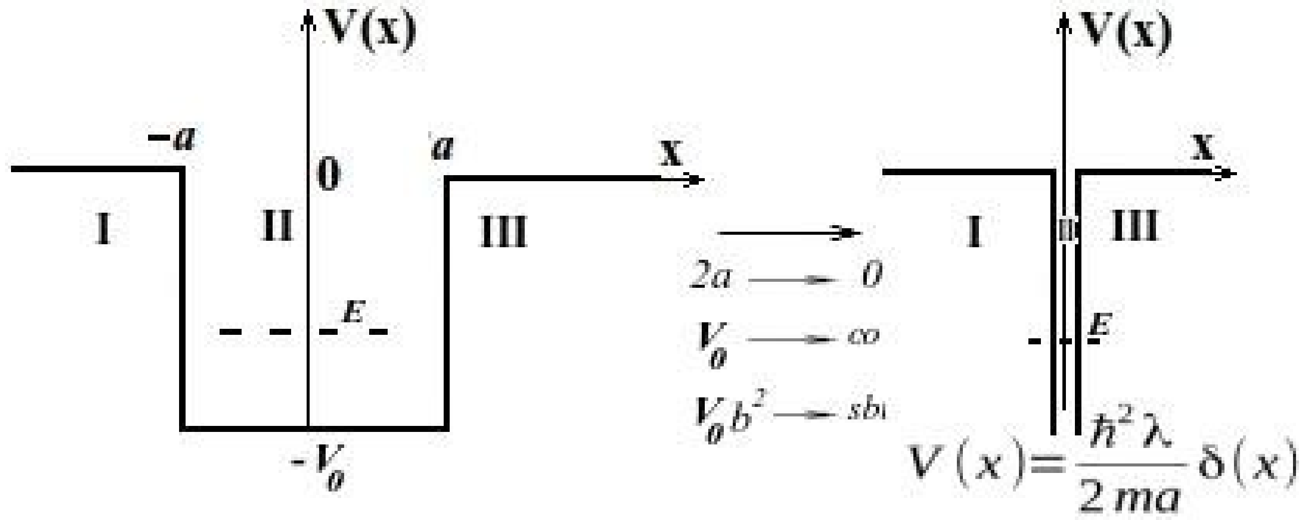
Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

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

Dirac-delta kuyusu



Sonlu derin potansiyel kuyusunun genişliğini uygun bir şekilde sıfıra yaklaştırarak bir delta fonksiyonu kuyusu elde ederiz.

x=0' da yerleşmiş olan böyle bir potansiyeli aşağıdaki gibi parametrize edebiliriz:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 \lambda}{2ma}\delta(x)$$

Schrödinger denklemini I. ve III. bölgede

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

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2 U(x)}{dx^2} - \kappa^2 U(x) = 0 \qquad \kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

şeklindedir. En genel çözümler ise aşağıdaki gibidir:

$$U(x) = \left\{ \begin{matrix} U_I(x) = A_1 e^{\kappa x} + B_1 e^{-\kappa x} & x < 0 \\ U_{III}(x) = A_3 e^{\kappa x} + B_3 e^{-\kappa x} & x > 0 \end{matrix} \right\}$$

$x \rightarrow \pm\, \infty$ limitlerinde dalga fonksiyonu üstel olarak artmamalı; tam tersine sıfıra düşmelidir. Bu nedenle I. ve III. bölgelerdeki çözüm

$$U(x) = \left\{ \begin{matrix} U_I(x) = A_1 e^{\kappa x} = C e^{\kappa x} & x < 0 \\ U_{III}(x) = B_3 e^{-\kappa x} = C e^{-\kappa x} & x > 0 \end{matrix} \right\}$$

şeklinde fiziksel anlamlı fonksiyonlar olmalıdırlar.

Ara bölgede çözeceğimiz Schrödinger denklemi ise

$$\frac{d^2 U(x)}{dx^2} - \kappa^2 U(x) + \lambda \delta(x) U(x) = 0$$

şeklindedir. Bu denklemi $x=0$ civarında Dirac-delta kuyusunun genişliğini temsil eden $-\varepsilon$' dan $+\varepsilon$' a kadar integre edelim:

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{d}{dx}\left(\frac{dU(x)}{dx}\right) dx - \kappa^2 \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} U(x)\, dx = -\lambda \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} U(x)\, \delta(x)\, dx$$

U(x) sürekli olduğu için eşitliğin solundaki ikinci integral $\varepsilon \to 0$ limitinde sıfır verir. Dolayısıyla sonuç

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left(\frac{dU(x)}{dx}\Big|_{x=+\varepsilon} - \frac{dU(x)}{dx}\Big|_{x=-\varepsilon} \right) = -\lambda U(0)$$

halini alır.

Bunu problemimize uygularsak

$$\frac{dU_{III}(x)}{dx}\Big|_{x=0} - \frac{dU_{I}(x)}{dx}\Big|_{x=0} = -\lambda U(0)$$

olur; bu da bize

$$2\kappa = \lambda$$

bağıntısını verir. Dolayısıyla Dirac-delta kuyusunda

$$\kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \quad E = -|E| = -\frac{\lambda^2 \hbar^2}{8m}$$

enerjili bir bağlı-durumun varolduğu anlaşılır.

Harmonik salınıcı

Tek boyutta harmonik salınım yapan m kütleli bir parçacığın klasik Hamiltoniyeni

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m w^2 x^2$$

olup, bununla ilgili enerji özdeğer denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 U(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m w^2 x^2 U(x) = E\, U(x)$$

$$\frac{d^2 U(x)}{dx^2} + \frac{m w^2}{\hbar^2} x^2 U(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E\, U(x)$$

şeklindedir. Bu denklemde

$$\alpha = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}} \quad , \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar w} \quad \text{ve} \quad \rho = \alpha x$$

kısaltmalarını ve değişken değiştirmesini yaparsak, denklem

$$\frac{d^2U(\rho)}{d\rho^2}+(\epsilon-\rho^2)U(\rho)=0$$

şeklinde basit bir görünüme gelir.

Böyle bir diferensiyel denklemin çözümleri bazı özel fonksiyonlar (Hermite polinomları), cinsinden ifade edilmiştir. $\rho^2 U(\rho)$' lu son terim Gausyen tipi bir çözüm aramamızı söyler:

$$U(\rho)=H(\rho)\,e^{-\rho^2/2}$$

Bu ifadeyi Schrödinger denkleminde yerine koyarsak

$$H''(\rho)-2\rho H'(\rho)+(\epsilon-1)H(\rho)=0$$

diferensiyel denklemini elde ederiz. Bu denklem için kuvvet serisi şeklinde bir çözüm arayabiliriz:

$$H(\rho)=\sum_{j=0}^{\infty} a_j\rho^j \qquad j=0,1,2,\ldots.$$

Bu seri açılımı diferensiyel denkleme yerleştirildiğinde tekrarlama bağıntısına yol açar. *U(ρ)*' nun her yerde sonlu olması gerektiği için (özellikle $x\to\pm\infty$ için) *H(ρ)*' nun kuvvet serilerini sonlu bir n değerinde keseriz. Böylece tekrarlama bağıntısı, kesikli veya kuantumlu olan enerji özdeğerleri için bir ifade verir:

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar w$$

Bazı hesaplamalardan sonra, Schrödinger denklemini sağlayan ve fiziksel olan dalga fonksiyonları

$$U_n(x)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{1/2} H_n(\alpha x)\,e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

olarak bulunur. Burada $H_n(\alpha x)$, n. dereceden Hermite polinomlarıdır:

$$H(y)=(-1)^n e^{y^2}\frac{d^n}{dy^n}e^{-y^2}$$