Kutudaki Taneciğin Kuantum Mekaniksel Çözümü

Bir kutu içine konularak hareketi kısıtlanan bir taneciğin enerjisi kesikli yani kuantumludur. Kutunun içinde taneciğe etkiyen potansiyel enerji sıfırdır.

V1. Kutunun içindeki dalga fonksiyonu, toplam enerji ve potansiyel enerji bileşenleri ile hamiltonien fonksiyonunu sırayla aşağıdaki gibi gösterelim.

$$\Psi = \Psi(x,y,z) = \Psi(x)\Psi(y)\Psi(z) = XYZ$$

$$E = E_x + E_y + E_z$$

$$V = V_x + V_y + V_z = 0 + 0 + 0 = 0$$

$$H = T + V = T$$

$$T = T_x + T_y + T_z = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\dot{y}^2}{2} + \frac{m\dot{z}^2}{2} = \left(\frac{1}{2m}\right)\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)$$

V2. Kuantum mekaniğinin ikinci varsayımına göre lineer momentumun dinamik değişkenleri yerine operatörler yazılarak bulunan Hamiltonien operatörü

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)^2\right]$$

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

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

V3 – V4. Bu operatör kullanılarak kuantum mekaniğinin dördüncü varsayımına göre yazılan özdeğer eşitliğinden türetilen zamandan bağımsız Shrödinger denklemi sırayla aşağıdaki gibidir.

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = E\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi - (E_x + E_y + E_z)\Psi = 0$$

İkinci merteden üç boyutlu bir diferansiyel denklem olan Schrödinger denklemi değişkenlerine ayrılarak bir boyutlu denklemler aşağıdaki gibi bulunur.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 XYZ}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 XYZ}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 XYZ}{\partial z^2}\right) - (E_x + E_y + E_z)XYZ = 0$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + E_x\right) + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + E_y\right) + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + E_z\right) = 0$$

Burada

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + E_x = 0$$

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \left(\frac{2m}{\hbar^2}E_x\right)X = 0$$

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + {k_x}^2 X = 0$$

yazılırsa benzer şekilde diğer ikisinin içinde

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + {k_y}^2 Y = 0$$

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + {k_z}^2 Z = 0$$

denklemleri doğrudan yazılabilir.

Ele geçen ikinci mertebeden bir boyutlu diferansiyel denklemler çözülerek E_x, E_y, E_z ve E enerjilerine geçilir. Bir boyutlu, örneğin x yönündeki diferansiyel denklemin çözümü aşağıdaki gibi yapılır.

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + {k_x}^2 X = 0$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + {k_x}^2\right)X = 0$$

$X \neq 0$ olmak üzere

$$D^2 + k_x^2 = 0$$

$$D = \pm k_x$$

$$X = Ae^{ik_x x} + Be^{-ik_x x}$$

$x = 0$ iken $X = 0$ ise

$$X = A + B = 0$$

$$B = -A$$

Denklemde yerine yazılırsa

$$X = A\left(e^{ik_x x} - e^{-ik_x x}\right)$$

$$X = 2Ai \sin k_x x$$

$$X = \sqrt{X^* X}$$

$$X = 2A \sin k_x x$$

$$X = N_x \sin k_x x$$

$x = a$ iken $X = 0$ ise $N_x \neq 0$ olur

$$\sin k_x a = 0$$

k_x değeri denklemde yerine yazılırsa

$$\sin\left(\left[\frac{\sqrt{2m\,E_x}}{\hbar}\right] a\right) = 0$$

$$\left[\frac{\sqrt{2m\,E_x}}{\hbar}\right] a = n_x \pi$$

Son olarak

$$E_x = n_x^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad veya \quad E_x = n_x^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

Burada, ötelenme kuantum sayısı adı verilen $n_x = 1, 2, 3, \ldots$ gibi tam sayıları aldığından enerji kuantumludur.

Dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi normalize edilir.

$$\langle X \mid X \rangle = 1$$

$$\langle X \mid X \rangle = \int_0^a X^* X \; dx = 1$$

$$\langle X \mid X \rangle = \int_0^a {N_x}^2 \sin^2\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \; dx = 1$$

$$\langle X \mid X \rangle = {N_x}^2 \int_0^a \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2n_x \pi}{a} x\right) \; dx = 1$$

$$\langle X \mid X \rangle = {N_x}^2 \; \left(\frac{a}{2}\right) = 1$$

$$N_x = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}$$

$$X = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin k_x x$$

Buna göre x yönündeki özdeğer eşitliği ve bunun çözümü aşağıdaki gibidir. Aynı eşitlikler benzer şekilde diğer iki yön içinde yazılabilir.

$$\mathcal{H}_x X = E_x X$$

$$E_x = n_x^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

$$X = N_x \sin k_x x = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a}\right) x$$

Üç boyutlu özdeğer eşitliği ve çözümü de aşağıdaki gibi yazılır.

$$\Psi \equiv \Psi(x, y, z) = XYZ$$

$$\Psi(x, y, z) = \left(\frac{8}{abc}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a}\right) x \; . \sin\left(\frac{n_y \pi}{a}\right) y \; . \sin\left(\frac{n_z \pi}{a}\right) z$$

Bir boyutlu kutuda taneciğe eşlik eden dalganın fonksiyonu aşağıdaki gibidir.

$$X = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a}\right) x$$

İlk üç enerji için grafikleri çizdirildiğinde enerji düzeyleri bunlar arasındaki farkların ma^2 ile ters orantılı olarak değişmektedir. Kütle veya kutunun genişliği ya da ikisi birden çok arttığında enerji düzeyleri birbirine çok yaklaşarak kuantumlu durum ortadan kalkmaktadır. Enerjinin sürekli olarak değiştiği bu durumlarda klasik mekaniğin verdiği sonuca ulaşıldığından ***Bohr'un karşılanırlık ilkesi*** sağlanmaktadır.

V5. Kutunun genişliği azaldıkça taneciğin konumu daha belirli hale gelirken momentumu daha belirsiz hale gelecektir.

Ortalama değerler ve belirsizlik ilkesi için yapılan hesaplamalar. Daha detaylı olarak ders kitabının 880. sayfasında anlatılmaktadır.