

Uyumlu Titreşicinin Kuantum Mekaniksel

Çözümü

Moleküllerdeki atomların titreşim hareketlerinin incelenmesinde model olarak alınan harmonik osilatör kimyacılar için büyük önem taşımaktadır.

Denge konumuna göre, genlikleri aynı büyüklükte olan titreşim sistemlerine *harmonik osilatör* ya da *uyumlu titreşici* adı verilir.

Üç boyutlu harmonik osilatör için klasik hamiltonien fonksiyonu, Hamiltonien operatörü, özdeğer eşitliği ve Schrödinger denklemi ile bu denklemin çözümüyle bulunan enerji dalga fonksiyonu ve normalizasyon katsayısı aşağıdaki gibi bulunur.

Varsayım 1:

$$H = T + V$$

$$H = \left(\frac{1}{2m}\right)(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \left(\frac{1}{2}\right)(k_x x^2 + k_y y^2 + k_z z^2)$$

Varsayım 2:

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

Varsayım 3-4:

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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + 2\pi^2 m(\nu_x^2 x^2 + \nu_y^2 y^2 + \nu_z^2 z^2)\right]\Psi = E\Psi$$

$$\nabla^2\Psi + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)[E - 2\pi^2 m(\nu_x^2 x^2 + \nu_y^2 y^2 + \nu_z^2 z^2)]\Psi = 0$$

$$E = E_x + E_y + E_z$$

$$E = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)h\nu_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)h\nu_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)h\nu_z$$

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

$$\Psi(x, y, z) = N_{n_x n_y n_z} H_{n_x n_y n_z} e^{-\left(\frac{1}{2}\right)(\alpha_x x^2 + \alpha_y y^2 + \alpha_z z^2)}$$

$$N_{n_x n_y n_z} = N_{n_x} N_{n_y} N_{n_z} = \left[\frac{(\alpha_x \alpha_y \alpha_z)^{1/2}}{\pi^{3/2} (2^{n_x + n_y + n_z}) n_x! n_y! n_z!} \right]^{1/2}$$

Burada, n **titreşim kuantum sayısını**, N_n normalizasyon katsayısını, $H_n(\alpha x^2)$ ise Hermite polinomlarını göstermektedir.

$$\alpha_x = \left(\frac{2\pi m}{\hbar} \right) v_x = \sqrt{\frac{k_x m}{\hbar^2}}$$

$$\alpha_y = \left(\frac{2\pi m}{\hbar} \right) v_y = \sqrt{\frac{k_y m}{\hbar^2}}$$

$$\alpha_z = \left(\frac{2\pi m}{\hbar} \right) v_z = \sqrt{\frac{k_z m}{\hbar^2}}$$

olarak tanımlanmıştır.

Titreşim kuantum sayısı yükseldikçe olasılık yoğunluğundaki değişme klasik mekanikten bulunan olasılık yoğunluğundaki değişmeye yaklaşmaktadır. Böylece, Bohr'un karşılabilirlik ilkesi de sağlanmış olmaktadır.

Hesaplamaların dayandığı temeller ders kitabının 9.13 numaralı başlığı altında detaylı olarak ele alınmıştır.