# BÖLÜM 9

## ÜÇ BOYUTTA SCHRÖDINGER DENKLEMİ

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x,y,z)$$

$$V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

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

$$+ \left[V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)\right] u_E(x,y,z) = E u_E(x,y,z)$$

$$u_E(x,y,z) = U_{\epsilon_1}(x)\, V_{\epsilon_2}(y)\, W_{\epsilon_3}(z)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x)\right] u_{\epsilon_1}(x) = \epsilon_1 u_{\epsilon_1}(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_2(y)\right] V_{\epsilon_2}(y) = \epsilon_2 V_{\epsilon_2}(y)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + V_3(z)\right] W_{\epsilon_3}(z) = \epsilon_3 W_{\epsilon_3}(z)$$

$$E = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3$$

## BİR KUTUDAKİ SERBEST PARÇACIKLAR

$$V_1(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ \infty & L < x \end{cases} \qquad V_2(y),\ V_3(z) \text{ aynı}$$

BS K

$$U_E(x,y,z) = ?$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x)\right]U_{\epsilon_1}(x) = \epsilon_1 U_{\epsilon_1}(x)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m\epsilon_1}{\hbar^2}\right)U_{\epsilon_1}(x) = 0 \Rightarrow U_{\epsilon_1}(x) = A\sin k_1 x + B\cos k_1 x$$

$$U_{\epsilon_1}(0) = 0 \Rightarrow B = 0$$

$$U_{\epsilon_1}(L) = 0 \Rightarrow k_1 L = n\pi \Rightarrow k_{1n} = \frac{n\pi}{L}$$

$$A^2 \int_0^L dx \,\sin^2 \frac{n_1\pi}{L}x = 1 \Rightarrow A^2 \frac{L}{n_1\pi}\int_0^{n_1\pi} d\alpha\, \underbrace{\sin^2\alpha}_{\cancel{\frac{1-\cos 2\alpha}{2}}} = 1$$

$$A^2 \frac{L}{n_1\pi}\int_0^{n_1\pi}\frac{1}{2}d\alpha = 1 \Rightarrow A^2\frac{L}{\cancel{n_1\pi}}\frac{1}{2}\cancel{n_1\pi} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$U_E(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\frac{n_1\pi x}{L}\sin\frac{n_2\pi y}{L}\sin\frac{n_3\pi z}{L}$$

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right)$$

$\{n_1, n_2, n_3\}$ dejenerelik !

birbiri ile sıradeğiştiren op.'lerden kaynaklanır.

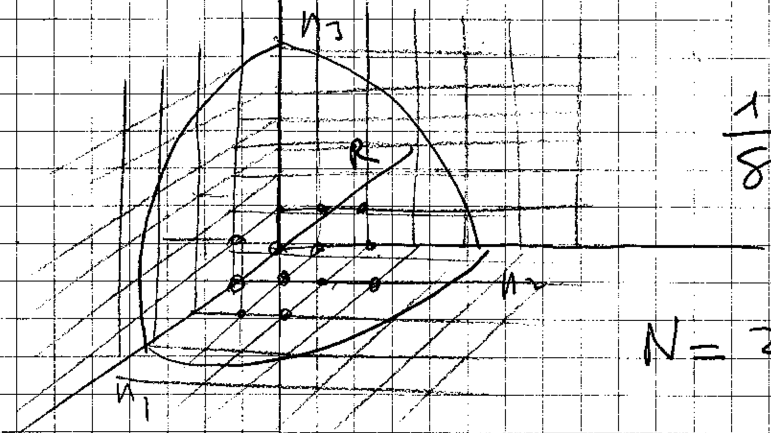
$$(H_x, H_y, H_z \;;\; H)$$

BS K

# Dışarlama İlkesinin Etkileri

Ele aldığımız pot. etkileşmeyen elektronların ve diğer özdeş fermiyonların enerjilerini tartışmak için oldukça basittir. İlk adım olarak, $L^3 = V$ hacminde $N$ adet etkileşmeyen özdeş fermiyonların taban durum enerjisini bulalım. Her bir $(1,1,1)$, $(2,1,1)$, $(1,2,1)$, ... üçlü tamsayıları için iki elektron yerleştirilebilir. Sonra başka şekilde sormak daha kolaydır: $E(n_1,n_2,n_3)$'ün $E_F$'den daha az olduğu kaç tane $\{n_1,n_2,n_3\}$ üçlüsü vardır?

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2\pi^2} L^2$$




$$\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}R^3 = \frac{1}{\cancel{8}_2}\frac{\cancel{4}\pi}{3}\left(\frac{2mE_F L^2}{\hbar^2\pi^2}\right)^{3/2}$$

$$N = 2 \times \frac{\pi}{2\cdot 3}\left(\frac{2mE_F L^2}{\hbar^2\pi^2}\right)^{3/2}$$

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

$n$ yoğunluklu etkileşmeyen bir elektron gazının taban durumdaki en enerjetik elektronun enerjisi, Fermi enerjisi. Toplam enerji

$$\frac{1}{8}\int_{|\vec{n}|\leq R} d^3\vec{n} \qquad \text{örgü noktalarını sayımında}$$

$$E_{tot} = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}\,\frac{1}{8}\int n^2 d^3n = \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^2}\,4\pi\int_0^R n^4\,dn = \frac{\hbar^2\pi^2}{10mL^2}R^5$$

$$N = 2 \times \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3$$

$$E_{tot} = \frac{\hbar^2 \pi^3}{10 m L^2} \left(\frac{3N}{\pi}\right)^{5/3} \qquad n = N/L^3$$

$$= \frac{\hbar^2 \pi^3}{10 m} \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{5/3} L^3$$

(a) Fermi denizinin tepesinde $E = \hbar^2 k^2/2m$ ile belirlenen dalga sayısı

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} , \quad k = 2\pi/\lambda$$

$$\Rightarrow \lambda_F = 2.03\, n^{-1/3}$$

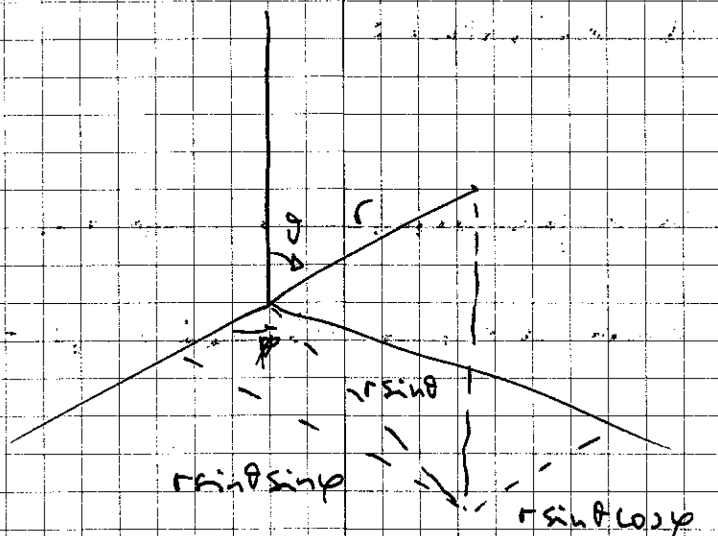
$n^{-1/3} \sim d$ parçacıklar arası uzaklık

$$\Rightarrow d = \frac{\lambda_F}{2}$$

(b) $$E_{tot} = \frac{\hbar^2 \pi^3}{10 m} \left(\frac{3N}{\pi}\right)^{5/3} V^{-2/3}$$

N çok büyükse formül hacmin şeklinden bağımsız. Hesap basit olsun diye küp kullandık.

BS K




$x = r\sin\theta\cos\varphi$ $\qquad \varphi = \tan^{-1}\frac{y}{x}$

$y = r\sin\theta\sin\varphi$ $\qquad \theta = \arccos\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$

$z = r\cos\theta$ $\qquad r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$\frac{\vec{L}^2}{\hbar^2} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right.$$

$$\left. - \frac{1}{r^2}\frac{\vec{L}^2}{\hbar^2}\right.$$

$$\vec{L}^2\psi = \lambda\psi$$

BS K

Açısal Mom. Sıradeğiştirme bağıntısı:

$H$, $L_x$, $L_y$ ve $L_z$'nin eşzamanlı özfonksiyonlarını arayalım. ama bunlar sıradeğiştiren değişkenlerin bir tam kümesini oluşturmaz. Örneğin

$$[L_x, L_y] = [y p_z - z p_y , z p_x - x p_z]$$

$$= \frac{\hbar}{i}(y p_x - x p_y)$$

$$= i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

Bu komütasyon bağıntılarının bir sonucu olarak $\vec{L}$'nin bileşenlerinden yalnızca birini, $H$ ile birlikte sıradeğiştiren gözlenebilirlerin bir tam kümesini oluşturmak için kullanabiliriz.

Bunu göstermek için, $L_y$'nin $l_2$ özdeğerli bir özfonksiyonu ile eşzamanlı olan $L_x$ in $l_1$ $u$ bir özfonksiyonunu alalım.

$$L_x u = l_1 u$$

$$L_y u = l_2 u$$

BS K

$$L_x L_y u = l_1 l_2 u = L_y L_x u = l_2 l_1 u$$

$$\Rightarrow \left(L_x L_y - L_y L_x\right) u = 0 = \frac{1}{i\hbar} L_z u$$

Oysa, bu şunu gösterir:

$$L_y u = \frac{1}{i\hbar}\left(L_z L_x - L_x L_z\right) u$$

$$= \frac{1}{i\hbar} l_1 L_z u = 0$$

$\Rightarrow$ $l_2 = 0$ olmalı. veya $l_1 = 0$

Böylece sadece $\vec{L} = \vec{0}$ için sadece $L_x$, $L_y$, $L_z$'nin eşzamanlı özfonk. ları vardır.

$$[L_z, \vec{L}^2] = [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2]$$

$$= 0$$

BS K

Schrödinger denkleminde değişkenlerin ayrılması:

$$\vec{L}^2 = (\vec{r}\times\vec{p})^2 = (\vec{r}\times\vec{p})\cdot(\vec{r}\times\vec{p})$$

$$= \left[(\vec{r}\times\vec{p})_x\right]^2 + \left[(\vec{r}\times\vec{p})_y\right]^2 + \left[(\vec{r}\times\vec{p})_z\right]^2$$

$$= -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$-\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$-\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$= -\hbar^2\left[x^2\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + y^2\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\right.$$

$$+ z^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$$

$$-2xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - 2yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} - 2zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} - 2x\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\left.- 2y\frac{\partial}{\partial y} - 2z\frac{\partial}{\partial z}\right]$$

BS K

$$L_x L_y u = l_1 l_2 u = L_y L_x u = l_2 l_1 u$$

$$\Rightarrow \left(L_x L_y - L_y L_x\right) u = 0 = \frac{1}{i\hbar} L_z u$$

Oysa, bu şunu gösterir:

$$L_y u = \frac{1}{i\hbar}\left(L_z L_x - L_x L_z\right) u$$

$$= \frac{1}{i\hbar} l_1 L_z u = 0$$

$\Rightarrow$ $l_2 = 0$ olmalı. veya $l_1 = 0$

Böylece sadece $\vec{L} = \vec{0}$ için sadece $L_x$, $L_y$, $L_z$'nin eşzamanlı özfonk. ları vardır.

$$[L_z, \vec{L}^2] = [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2]$$

$$= 0$$

Schrödinger denkleminde değişkenleri ayrılımı:

$$\vec{L}^2 = (\vec{r}\times\vec{p})^2 = (\vec{r}\times\vec{p})\cdot(\vec{r}\times\vec{p})$$

$$= \left[(\vec{r}\times\vec{p})_x\right]^2 + \left[(\vec{r}\times\vec{p})_y\right]^2 + \left[(\vec{r}\times\vec{p})_z\right]^2$$

$$= -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$-\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$-\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$= -\hbar^2\left[x^2\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + y^2\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\right.$$

$$+ z^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$$

$$-2xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - 2yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} - 2zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} - 2x\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\left. -2y\frac{\partial}{\partial y} - 2z\frac{\partial}{\partial z}\right]$$

BS K

$$(\vec{r}\cdot\vec{p})^2 = -\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$= -\hbar^2\Big[x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+y^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+z^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$+2xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+2yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}+2zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}$$

$$+x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\Big]$$

$$\vec{L}^2+(\vec{r}\cdot\vec{p})^2 = -\hbar^2(x^2+y^2+z^2)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

$$+\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$= r^2\vec{p}^2+i\hbar\,\vec{r}\cdot\vec{p}$$

$$\vec{L}^2+(\vec{r}\cdot\vec{p})^2 = r^2\vec{p}^2+i\hbar\,\vec{r}\cdot\vec{p}$$

$$\Rightarrow \quad \vec{p}^2 = \frac{1}{r^2}\left[\vec{L}^2+(\vec{r}\cdot\vec{p})^2-i\hbar\,\vec{r}\cdot\vec{p}\right]$$

$$= \frac{1}{r^2}\vec{L}^2-\hbar^2\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}$$

BS K

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{\hbar^2 r^2}\vec{L}^2\right]u_E(\vec{r})$$

$$+V(r)\,u_E(\vec{r})=E\,u_E(\vec{r})$$

$$u_E(\vec{r})=Y_\lambda(\theta,\phi)\,R_{E\lambda}(r)$$

$$\vec{L}^2\,Y_\lambda(\theta,\phi)=\lambda\,Y_\lambda(\theta,\phi)$$

$\lambda=\ell(\ell+1)\hbar^2 \qquad \ell=0,1,2,3,\dots$ olduğunu göstereceğiz.

$$L_z\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)=m\hbar\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$-\ell\le m\le+\ell$ olduğunu göstereceğiz.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R_{E\ell m}(r)$$

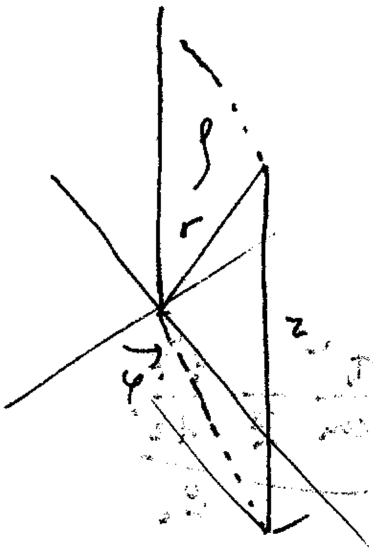
$$+V(r)\,R_{E\ell m}(r)=E\,R_{E\ell m}(r)$$

BS K

BÖLÜM 9 (3D'lu Schrödinger Denk.'i)

prs. 9.1.)

(*) pot. silindiriksel simetrik




(∴) Hamiltonyen z-ekseni etrafındaki dönmeler altında invaryant olduğundan, açısal mom.'un z-bileşeni korunur.

Yani

$$[H, L_z] = 0$$

H ve $L_z$ sıra değiştirlen gözlenebilirlerin tam kümesini oluşturur.

$x = \rho \cos\phi$

$y = \rho \sin\phi$

$z = z$

$$\vec{\nabla} = \hat{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \hat{\phi}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\left.\begin{array}{l}\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{r}\times\vec{\nabla} \\ \vec{r} = \hat{\rho}\rho + \hat{z}z\end{array}\right\} L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$L_\rho = -\frac{\hbar}{i}\frac{z}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$L_\phi = -\frac{\hbar}{i}\left(-z\frac{\partial}{\partial\rho} - \rho\frac{\partial}{\partial z}\right) \ ?$$

$$[H, L_z] = 0$$

$$\vec{p}^{\,2} = \frac{1}{r^2}\left[\vec{L}^2 + (\vec{r}\cdot\vec{p})^2 - i\hbar\,\vec{r}\cdot\vec{p}\right]$$

BS K

prb. 9.2.)

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]+V(\rho)\right\}u(\rho,\varphi,z)$$

$$= E u(\rho,\varphi,z)$$

$$u(\rho,\phi,z) = R(\rho)\,\Phi(\phi)\,Z(z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{dR}{d\rho}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Phi}\frac{1}{\rho^2}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}}_{E_z}$$

$$+V(\rho) = E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z}{dz^2} = E_z Z$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = E_\phi \Phi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{dR}{d\rho}\right)+V(\rho)R+\frac{E_\phi}{\rho^2}R = (E-E_z)R$$

BS K