BÖLÜM - 3

SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Foton için dalga denklemi (sıfır kütle

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

$\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t}$

veya

$\Psi(x,t) = A e^{i(px-Et)/}$

Dağınım bağıntısı

$\omega^2 = c^2 k^2$

veya

$E^2 = p^2 c^2$

Düzlem dalga çözümü

Kütleli Parçacıklar için enerji

$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ tüm hızlarda geçerli

$p = \gamma m v \qquad \gamma = \dfrac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$

$\Psi(x,t) = A e^{i(px-Et)/\hbar}$ $\longrightarrow$ Dağınım bağıntısına uyan fonksiyonunu çözüm kabul eden dalga denklemini bulalım:

serbest parçacık için çözüm

Dağınım bağıntısı

$$\boxed{E^2 = p^2c^2 + m^2c^4}$$

$$\left.\begin{array}{l} \dfrac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\dfrac{E^2}{\hbar^2}\,\psi(x,t) \\[2ex] \dfrac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\dfrac{p^2}{\hbar^2}\,\psi(x,t) \\[2ex] m^2c^4\,\psi(x,t) \end{array}\right\}$$

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{m^2c^4}{\hbar^2}\psi}$$

Klein – Gordon denklemi (1926)

$\psi(x,t) = A e^{i(px - Et)/\hbar}$ serbest parçacık için yazılan düzlem dalgayı çözüm kabul eden $E = \dfrac{p^2}{2m}$ dağınım bağıntısına uyan dalga denklemini bulalım:

$\boxed{v \ll c}$

$$\left.\begin{array}{l} \dfrac{\partial \psi}{\partial t} = -\dfrac{iE}{\hbar}\psi \\[2ex] \dfrac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\dfrac{p^2}{\hbar^2} \end{array}\right\}$$

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}}$$

$$\boxed{\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}}$$

$\boxed{v \ll c}$

Schrödinger Denklemi
Nobel 1933

Foton dalga denklemi	$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=c^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$	$E^2=p^2c^2$
Schrödinger Denklemi	$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$	$E=\frac{p^2}{2m}$
Klein-Gordon Denklemi	$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=c^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{m^2c^4}{\hbar^2}\psi$	$E^2=p^2c^2+m^2c^4$

Serbest parçacık için

$$\psi(x,t)=A\,e^{i(px-Et)/\hbar}$$

fonksiyonunu (düzlem dalga) çözüm kabul eden denklemler

Kuvvet etkisi altındaki parçacık için Schrödinger denklemi

Dağınım bağıntısı (Enerji-momentum)

$E=\frac{p^2}{2m}+V$ ise buna uyan denklem

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi}$$

Momentum olasılık fonksiyonu için Schrödinger denklemi :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \, e^{ipx/\hbar} \varphi(p,t)$$

ifadesini schrödinger denkleminde kullanalım

$$i\hbar \frac{d\varphi(p,t)}{dt} = \frac{p^2}{2m} \varphi(p,t)$$

çözüm :

$$\int_{\varphi_0}^{\varphi} \frac{d\varphi(p,t)}{\varphi(p,t)} = \frac{-ip^2}{2m\hbar} \int_0^t dt$$

$$\ln \varphi(p,t) - \ln \varphi(p,0) = \frac{-ip^2 t}{2m\hbar}$$

$$\boxed{\varphi(p,t) = \varphi(p,0) \, e^{-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}}}$$

buradan $\psi(x,t)$ çözümüne geçelim

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \, \varphi(p,0) \, e^{-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}} \, e^{ipx/\hbar}$$

Konum, Momentum ve Enerji işlemcileri (operatorler)

$$\langle p\rangle = \int dp\, p\, |\varphi(p)|^2$$

$$\frac{d\psi}{dx} \xrightarrow{FD} \frac{ip}{\hbar}\varphi(p) \quad \text{idi}$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\, e^{ipx/\hbar}\left[\frac{ip}{\hbar}\varphi(p)\right]$$

veya

$$p\,\varphi(p) = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\, e^{-ipx}\frac{d\psi(x)}{dx}$$

$\varphi^*(p)\left[p\,\varphi(p)\right]$ ifadesinin Fourier dönüşümlerini kullanalım

$$\langle p\rangle = \int dp\left[\int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx'/\hbar *}\psi(x')\right]\left[\frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\, e^{-ipx/\hbar}\frac{d\psi}{dx}\right]$$

$$= \int dx\,dx'\left(\psi^*(x')\frac{d\psi(x)}{dx}\right)\int dp\, e^{ip(x'-x)/\hbar}\frac{1}{(2\pi\hbar)}$$

$$\langle p\rangle = \int dx\,dx' \left(\psi^*(x') \frac{d\psi(x)}{dx}\right) \delta(x-x') \quad (-i\hbar)$$

$$\langle p\rangle = \int dx \left[\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx}\right] (-i\hbar)$$

$$\boxed{p \rightarrow \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)}$$ Momentum işlemcisi

---

$$\langle x\rangle = \int dx \; x\,|\psi(x)|^2$$

$$x\,\psi(x) = \frac{i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{ipx} \frac{d\varphi(p)}{dp}$$

$$\psi^*(x)\,[x\,\psi(x)] = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp'\, e^{-ip'x}\, \varphi^*(p')\right]\left[\frac{i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{ipx} \frac{d\varphi}{dp}\right]$$

$$\langle x\rangle = \int dp'\,dp \left[\varphi^*(p')\, i\hbar \frac{d\varphi(p)}{dp}\right] \int dx\, e^{ix(p-p')} \frac{1}{2\pi\hbar}$$

$$= \int dp\,dp' \left[\varphi^*(p')\, i\hbar \frac{d\varphi}{dp}\right] \delta(p-p')$$

$$\langle x\rangle = \int dp \left[\varphi^*(p)\, i\hbar \frac{d\varphi(p)}{dp}\right]$$

$$\boxed{x \longrightarrow i\hbar \frac{d}{dp}}$$ Konum işlemcisi

$$-\frac{p^2}{\hbar^2}\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\, e^{-ipx}\,\frac{d^2\psi}{dx^2}$$

$$\varphi^*(p)\;p^2\varphi(p)=\frac{-\hbar^2}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx'\,e^{ipx'}\,\psi^*(x')\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-ipx}\,\frac{d^2\psi}{dx^2}$$

$$\langle p^2\rangle=\int dx'dx\left(\psi^*(x')\;-\hbar^2\,\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\right)\;\delta(x-x')$$

$$\langle p^2\rangle=\int dx\left[\psi^*(x)\;-\hbar^2\,\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\right]$$

$$E=\frac{p^2}{2m}\qquad \boxed{\frac{p^2}{2m}\longrightarrow-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}}$$

Hamiltonian
(Enerji işlemcisi)

$$\boxed{H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V}$$

Schrödinger denklemi

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi}$$

EK:

Açısal momentum

$$\vec{L} = (\vec{r} \times \vec{p}) = \hat{x}\left[y p_z - z p_y\right] + \hat{y}\left[z p_x - x p_y\right]$$
$$+ \hat{z}\left[x p_y - y p_x\right]$$

$$\vec{L} = L_x \hat{x} + L_y \hat{y} + L_z \hat{z}$$

$$\boxed{\langle L_z \rangle = \int dx\, \psi^*(x) \left[x(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial y} - y(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\right] \psi(x)}$$

ÖZET	Konum Uzayı	Momentum Uzayı
Konum	$\langle x\rangle = \int dx\, x\lvert\psi(x)\rvert^2$	$\langle x\rangle = \int dp\, \varphi^*(p)\left[i\hbar\frac{d}{dp}\right]\varphi(p)$
Momentum	$\langle p\rangle = \int dx\, \psi^*(x)\left[-i\hbar\frac{d}{dx}\right]\psi(x)$	$\langle p\rangle = \int dp\, p\,\lvert\varphi(p)\rvert^2$
Enerji H: Hamiltonian	$\langle H\rangle = \int dx\, \psi^*(x)\, H\,\psi(x)$ $H = -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2} + V$	$\langle H\rangle = \int dp\, \varphi^*(p)\, H\,\varphi(p)$ $H = \frac{p^2}{2m} + V$

Özdeğer Denklemi

[işlemci](özfonksiyon) = [özdeğer](özfonksiyon)

örnek:

Momentum özfonksiyonları

$$\boxed{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_q(x) = q\,\psi_q(x)}$$ özdeğer denklemi q: özdeğer

$$\frac{d\psi_q}{\psi_q} = \frac{i}{\hbar}q\,dx \qquad \ln\psi_q/\psi_0 = \frac{i}{\hbar}qx$$

$$\boxed{\psi_q(x) = \psi_0\, e^{iqx/\hbar}}$$ Momentum özfonksiyonu

Schrödinger denkleminin durağan durum çözümleri: (Enerji) özdeğer denklemi

Enerji : sabit (uzay-zamana bağlı değil)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H\psi(x,t) \qquad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

V: zamandan bağıms

$$\psi(x,t) = \phi(x)\, e^{-i\omega t}$$
$$= \phi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$$

çözümünü önerelim.

$$E\phi(x)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = H\phi(x)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\boxed{H\phi(x) = E\phi(x)}$$

(Zamandan bağımsız) enerji-özdeğer denklemi

Kuantum Fiziğinin En Popüler Model Problemleri:

Kuantum Kuyu Mühendisliği [Sandviç Mühendisliği]

Tek boyutlu sonsuz kuyu: kutu içinde parçacık

$V = 0 \qquad 0 < x < L$

$\;\;\, = \infty \qquad 0 \geqslant x \geqslant L$

$H\phi(x) = E\phi(x)$

$\dfrac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\dfrac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) \leftarrow \quad x = (0 - L)$ için

$\dfrac{2mE}{\hbar^2} = k^2$ olsun $\qquad \phi(x) = A \sin kx + B \cos kx$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$

$0 \geqslant x \geqslant L$ için $\phi(x) = 0$

Sınır koşulları:

$x=0 \qquad \phi = 0 = A \sin k(0) + B \cos k(0)$

$= B \quad \rightarrow \quad B=0$

$x=L \qquad \phi(L) = A \sin kL = 0 \qquad kL = n\pi$

$n = 1, 2, 3 \ldots$

$$\boxed{\phi(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x}$$

A boylandırma (Normalization) ile bulunur

$\int_0^L dx \, |\phi(x)|^2 = 1$ olmalı

$$A^2 \int_0^L dx \, \sin^2 \frac{n\pi}{L} x = A^2 \frac{L}{n\pi} \int du \, \frac{1}{2}(1 - \cos u)$$

$u = \frac{n\pi}{L} x$

$$\frac{A^2}{2} \frac{L}{n\pi} \left[\frac{n\pi x}{L} \right]_0^L = 1$$

$$\frac{1}{2} A^2 L = 1 \qquad A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\boxed{\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x} \qquad n = 1, 2, 3 \ldots$$

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}}$$

EK:

"Kuantumlanma sistemi (parçacığı) çeşitli biçimlerde kısıtlayarak ortaya çıkar."

Örnekte parçacık kutu içine hapsedilmişti

$\hbar = c = 1$

$$1\ m = \frac{1}{2\,10^{-7}\ eV}$$

$$1\ A^{\circ} = \frac{1}{2000\ eV} = \frac{1}{2\times10^{-3}\ MeV}$$

$$1\ nm = \frac{1}{200\ eV} = \frac{1}{2\times10^{-4}\ MeV}$$

$$\frac{1}{1\ eV} = 200\ nm$$

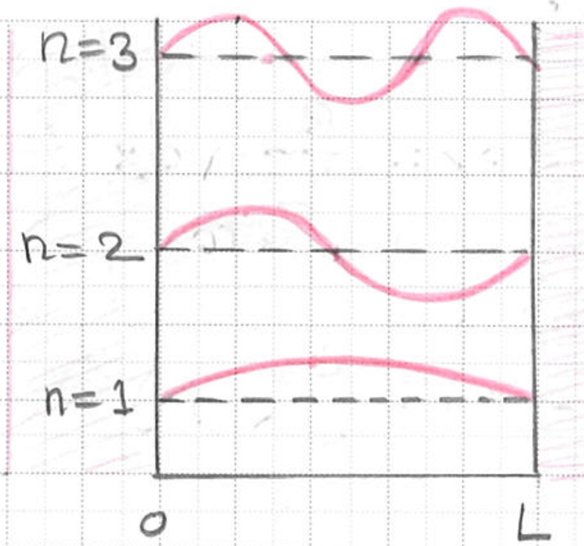
$$\frac{1}{1\ eV} = 2000\ A^{\circ}$$

Kuantumlu Enerji

$$E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 9E_1$$

$$E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 4E_1$$

$$E_1 = E_{min} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

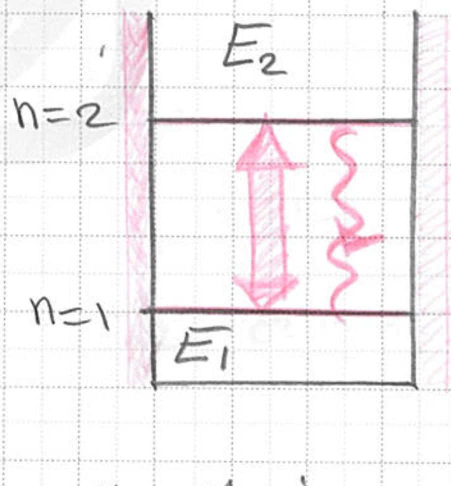


$L = 1\ nm = 10^{-9}\ m = 10^{-7}\ cm$ $\qquad$ $L = 1\ A^\circ = 10^{-8}\ cm$

$E_1 \cong 0{,}4\ eV$ $\qquad$ $E_1 \simeq 40\ eV$

$L = 6\ A^\circ$ $\qquad E_1 = \frac{40}{L^2} = \frac{40}{36}\ eV$

$L = 8\ A^\circ$ $\qquad E_1 = \frac{40}{L^2} = \frac{40}{64}\ eV$



$\Delta E = E_2 - E_1 = 3E_1$

$\hbar\omega = \Delta E = \frac{hc}{\lambda}$ Foton

$\lambda = \frac{hc}{\Delta E}$ $\qquad \lambda(A^\circ) = \frac{1{,}24\ 10^4}{\Delta E(eV)}$

$L = 6 A^\circ$	$\lambda(A^\circ) \simeq 3000\ A^\circ$	Mor-Mavi
$L = 8 A^\circ$	$\lambda(A^\circ) \simeq 6400\ A^\circ$	Kırmızı

EK :

$$\langle p \rangle = \frac{2}{L}\int_0^L dx \left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\sin\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$= \frac{2}{L}(\quad)\int_0^L dx \ \sin\frac{n\pi}{L}x \ \cos\frac{n\pi}{L}x$$

$$= \frac{2}{L}(\quad)\int_0^L dx \ \sin\frac{2n\pi}{L}x \ = 0$$

—o—

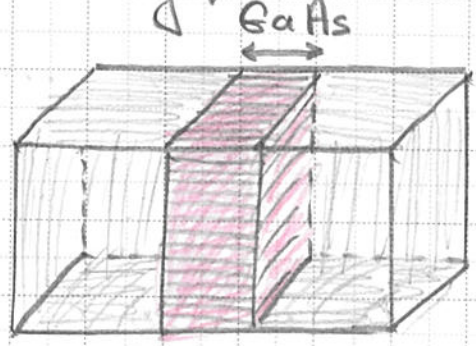
$$\langle p^2 \rangle = \frac{2\hbar^2}{L}\int_0^L dx \ \sin\frac{n\pi}{L}x\left(-\frac{d^2}{dx^2}\sin\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$= \frac{2\hbar^2}{L}(\quad)\int_0^L dx \ \sin^2\frac{n\pi}{L}x$$

Sandviç Mühendisliği

($GaAs \rightarrow 60\,nm$)

AlGaAs



AlGaA

LED: Light Emitting Diode

Mavi-LED Nobel 2014

I. Akasaki, H. Amano, S. Nakam

Mavi + Yeşil + Kırmızı ⟶ Beyaz (Ekonomik beyaz ışık

— o —

Ortalama Konum:

$$\langle x \rangle = \frac{2}{L}\int_0^L dx\, x \left(\sin^2 \frac{n\pi}{L} x\right) = \frac{L}{2}$$

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)\, e^{-ipx}\, dx = \sqrt{\frac{\pi L}{\hbar}}\, \frac{n\left[1-(-1)^n e^{-\frac{ipL}{\hbar}}\right]}{\left[\pi^2 n^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}L^2\right]}$$

$$\langle p \rangle = 0$$

$$\sigma_x^2 = \left(\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\right) = \frac{L^2}{12}\left(1 - \frac{6}{n^2\pi^2}\right)$$

$$\sigma_p^2 = \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$$

$$\sigma_x \sigma_p = \Delta x \, \Delta p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{n^2\pi^2}{3} - 2} > \frac{\hbar}{2}$$

—— o ——

Dik Fonksiyonlar

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \, \mathrm{Sin} \frac{n\pi}{L} x \quad \text{(Boylandırılmış)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \; \phi_n(x) \, \phi_m(x) = \delta_{nm} \begin{cases} = 0 & n \neq m \\ = 1 & n = m \end{cases}$$

İspat:

$$\frac{2}{L}\int_0^L \left(\mathrm{Sin}\frac{n\pi}{L}x \;\; \mathrm{Sin}\frac{m\pi}{L}x\right) dx$$

$$= \frac{1}{L}\int_0^L dx \left[\mathrm{Cos}\left(\frac{n-m}{L}\right)\pi x - \mathrm{Cos}\left(\frac{n+m}{L}\right)\pi x\right]$$

$$= \frac{1}{(n-m)\pi}\,\mathrm{Sin}(n-m)\pi - \frac{1}{(n+m)\pi}\,\mathrm{Sin}(n+m)\pi = \delta_{nm}$$

EK:

Kutu içindeki parçacık herhangi t anında hangi durumda ve hangi enerji düzeyinde bulunur?

Cevap:

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}$$

Kutu içindeki parçacığın olasılık fonksiyonu ve enerjisi genellikle özfonksiyonlara karşı gelmez, ancak dik öz fonksiyonlar cinsinden yazılabilir.

$$\boxed{\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}}$$

$$\int \phi_m(x)\psi(x,0)\,dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int dx\, \phi_m(x)\phi_n(x)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \delta_{mn} c_n$$

$$\boxed{c_m = \int dx\, \phi_m(x)\psi(x,0)}$$

$$\langle E\rangle = \int \Psi^*(x,t)\, H\, \Psi(x,t)\, dx$$

$$= \int \left(\sum_m c_m^* \phi_m^*(x)\, e^{+iE_m t} \right) H \left(\sum_n c_n \phi_n(x)\, e^{-iE_n t} \right) dx$$

$$= \sum_{m,n} c_m^* c_n\, e^{i(E_m-E_n)t} \int dx\, \phi_m^*(x)\, E_n\, \phi_n(x)$$

$$= \sum_{m,n} c_m^* c_n E_n\, e^{i(E_m-E_n)t}\, \delta_{mn}$$

$$\langle E\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \qquad \sum_n |c_n|^2 = 1$$

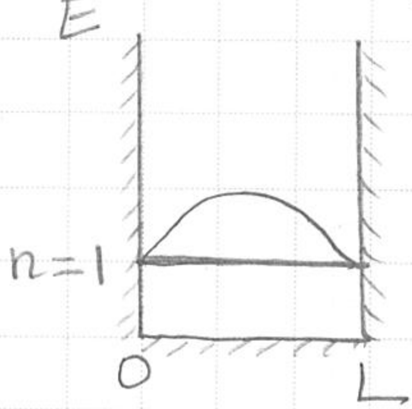
$|c_n|^2$: Parçacığın enerjisini E_n olarak ölçme olasılığı

Problem: Genişleyen (Daralan) Kuyu:

$t=0$ anında L genişliğinde kuyu içindeki elektron temel durumda bulunmaktadır.

Kuyunun genişliği aniden 3 katına çıkarılıyor.
Herhangi bir t anında elektronun olasılık fonksiyonu ve enerjisi ne olur?

— o —



$t=0$ anında (genişlemeden önc

$$\phi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi}{L} x \qquad 0 \leq x \leq$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

— o —

Genişlemeden sonra Hamiltonianın özfonksiyonları değişir

$$0 \leq x \leq 3L$$

$$H \phi_n'(x) = E_n' \phi'(x) \qquad \phi_n'(x) = \sqrt{\frac{2}{3L}} \sin \frac{n\pi x}{3L}$$

$$E_n' = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m(3L)^2}$$

Elektronun başlangıçtaki dalga fonksiyonu yeni öz fonksiyonlar cinsinden yazılır:

$$\phi_1(x) = \sum_n C_n \phi'_n(x) = \sum_n C_n \sqrt{\frac{2}{3L}} \sin\frac{n\pi x}{3L}$$

$$\phi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{\pi x}{L}$$

$t=0$ anında (genişlemeden sonra)

$$C_n = \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{\pi x}{L} \sqrt{\frac{2}{3L}} \sin\frac{n\pi x}{3L}\, dx$$

$$C_n = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{3}} & n=3 \text{ için} \\ -\frac{6\sqrt{3}}{\pi} \frac{\sin\left(\frac{n\pi}{3}\right)}{n^2-9} & n \neq 3 \text{ için} \end{cases}$$

$t>0$

$$\psi_1(x,t) = \sum_n C_n \phi'_n(x)\, e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(3L)^2}$$