BÖLÜM 7

SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMLERİ

Serbest parçacık ve bir kutu içinde parçacık

Schrödinger denklemi ikinci dereceden bir diferansiyel denklemdir.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

ϕ_1 (x) ve ϕ_2 (x) gibi iki bağımsız çözüme ulaşabiliriz.

Genel çözüm, doğrusal bir birleşimdir.

$$\psi(x)=A\phi_1(x)+B\phi_2(x)$$

A ve B, ψ (x) ve ψ' (x) sınır şartları ile tayin edilir.

Ayrıca fiziksel olarak makul çözümler için ψ (x) ve ψ' (x)'in sürekli fonksiyonlar olması gerekir.

(I) Serbest parçacık $\quad V(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}=E\psi(x)$$

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{or} \quad E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \quad \text{belirlenir.}$$

$$V(x)=0, \; E=\frac{p^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad p^2=\hbar^2k^2 \quad \Rightarrow \quad \boxed{p=\hbar k}$$

de Broglie $\quad p=\frac{h}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \boxed{k=\frac{2\pi}{\lambda}}$

Dalga denklemi, çözümleri

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \quad \text{olan}$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -k^2 \psi(x)$$

haline gelir.

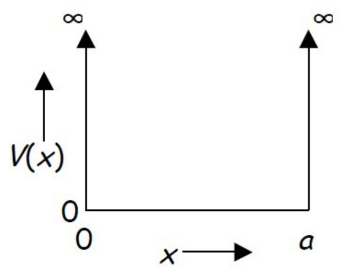
Serbest parçacık $\Rightarrow$ sınır şartlar yok

$\Rightarrow$ herhangi bir A ve B değeri mümkündür, herhangi bir $E = \hbar^2 k^2/2m$ mümkündür.

Sonuç olarak herhangi bir dalga boyu, dalga vektörü, momentum ve enerjide herhangi bir dalgasal çözüm (hareketli veya durgun dalga) mümkündür.

(II) Bir kutu içinde parçacık

$$V(x) = \infty \qquad (x < 0,\ x > a)$$
$$V(x) = 0 \qquad (0 \le x \le a)$$



Herhangi bir yerde $V(x) = \infty$ olan bir parçacık olamaz.

$$\Rightarrow \qquad \psi(x < 0,\ x > a) = 0$$

$0 \le x \le a$ için, serbest parçacığa ait Schrödinger denklemi aşağıdaki gibidir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x)$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{veya} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{tanımları kullanılarak}$$

$$\text{ve} \quad \psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \quad \text{çözümü ile}$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -k^2 \psi(x) \quad \text{olur.}$$

Ancak bu kez sınır şartları vardır!

$\psi(x)$' in sürekliliği $\Rightarrow$ $\psi(0)=\psi(a)=0$

(i) $\psi(0)=A\cos(0)+B\sin(0)=0 \Rightarrow A=0$

(ii) $\psi(a)=B\sin(ka)=0$

B = 0 alınamaz (hiç bir yerde parçacık yok!)

sin *(ka)* = 0 olmalıdır. $\Rightarrow$ $ka = n\pi$ $n = 1, 2, 3,...$

$\Rightarrow$ *k*, sürekli değildir ancak k = $n\pi / a$ şeklinde farklı değerler alır.

Böylece tamsayı doğal olarak ortaya çıkar.

Sonuçta Schrödinger denkleminin çözümleri

$$\boxed{\psi(0 \le x \le a) = B\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \qquad n=1,2,3,\ldots}$$ olur.

Bu çözümler;

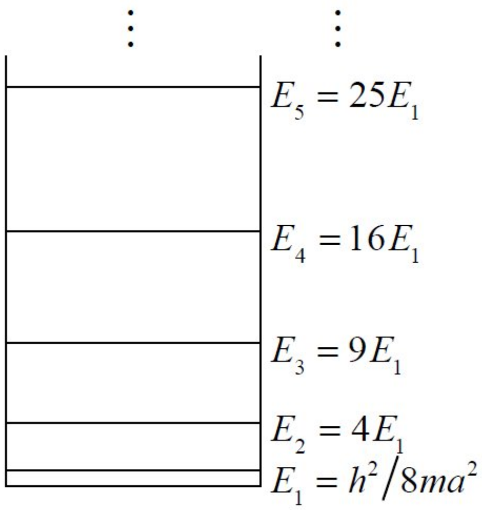
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \boxed{E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}}$$

enerjisine sahip farklı kararlı durumları (zamandan bağımsız veya "durağan") ifade eder.

Burada enerji, sayısal olarak ifade edilmektedir !! Ve hâller, bir tamsayı olan *n* kuantum sayısı ile gösterilir.

<u>Durağan hâl özellikleri</u>

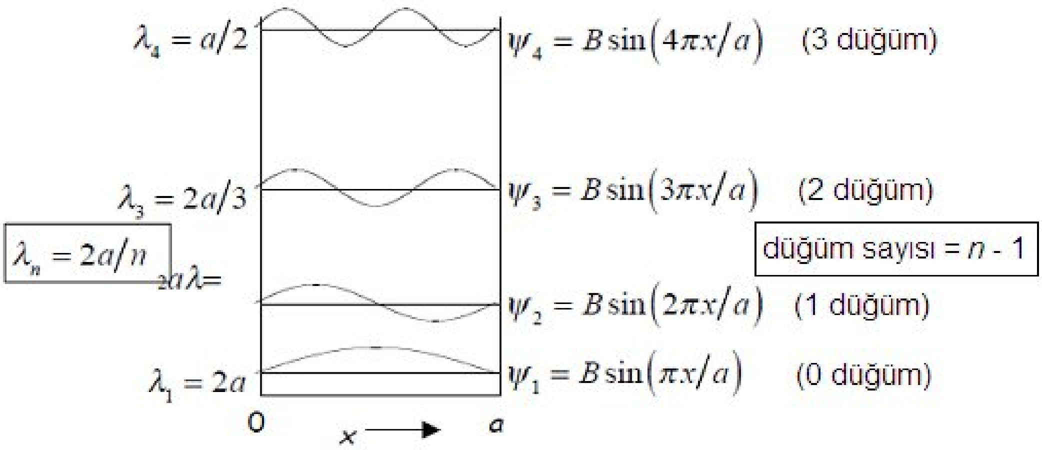
(a) Birbirini izleyen hâller arasındaki enerji aralığı, *n* arttıkça giderek büyür.



$$E_{n+1} - E_n = \left[(n+1)^2 - n^2 \right] \frac{h^2}{8ma^2}$$

$$\boxed{E_{n+1} - E_n = (2n+1)\, E_1}$$

(b) ψ (*x*) dalga fonksiyonu, birbirini izleyen her hâl için bir artan sayıda düğüme sahip sinüzoidal dir.



(c) Kutu boyutu azaldıkça enerji aralıkları artar.

$$E \propto \frac{1}{a^2}$$

Biz, basit bazı kuantum mekaniği problemleri çözmekteyiz! Bir kutu içinde parçacık modeli, aromatik halkalardaki pi bağı elektronları gibi bazı önemli durumlar için iyi bir yaklaşımdır.

Elektronik geçişler, molekül büyüklüğü arttıkça daha düşük enerjilere kayar.