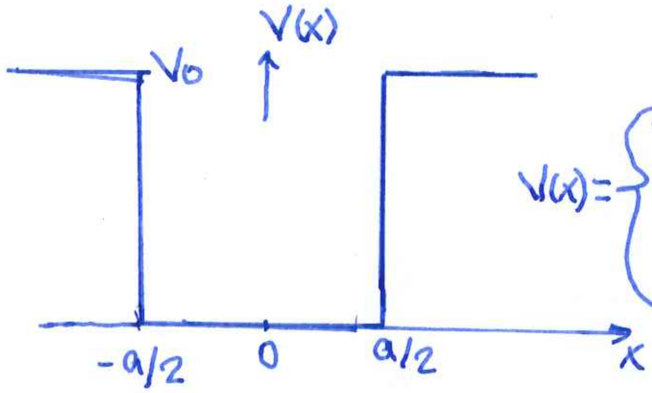
SORULAR

1. $V = \begin{cases} 0 & x<0 \\ V_0 & x>0 \end{cases}$ ile verilen potansiyel basamağının soldan bir parçacık demeti gönderilsin. Bu demet için $E>V_0$ ve $E<V_0$ durumları için R, yansıma olasılığı ve T, basamağı geçme olasılığını bulunuz.

2. $V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ V_0 & 0\leq x\leq a \\ 0 & x>a \end{cases}$ şeklinde verilen potansiyel bariyerine soldan bir parçacık demeti gönderilsin. Gelen demetteki parçacıklar aynı E enerjisine sahiptirler. $E<V_0$ için parçacıkların potansiyel bariyerini geçme olasılığını bulun. 5eV enerjili bir elektronun 0.53Å genişliğinde 10 eV'luk bir bariyeri geçme olasılığını hesaplayın. Klasik limitte kütlesi 1g olan bir parçacığın 1cm genişliğinde bir bariyeri geçme olasılığını $V_0-E=1\text{erg}$ alarak yaklaşık olarak hesaplayın.

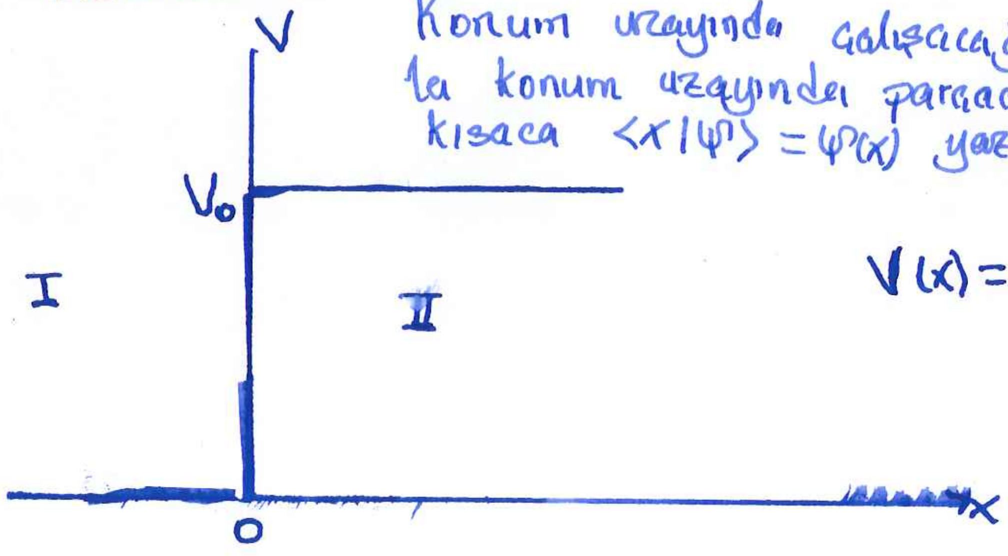
3.



$V(x) = \begin{cases} V_0 & x<-a/2 \\ 0 & -a/2\leq x\leq a/2 \\ V_0 & x>a/2 \end{cases}$

Şekilde verilen simetrik sonlu potansiyel kuyusundaki bir parçacığın bağlı enerji durumlarını bulunuz.

YANITLAR



Konum uzayında çalışacağız. Dolayısıyla konum uzayında parçacık durumlarını kısaca $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$ yazacağız.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ V_0 & x>0 \end{cases}$$

Parçacık birinci bölgede serbesttir:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

Schrödinger denklemi (zamandan bağımsız)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad ; x<0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$$

Çözümü: $\psi_I(x) = \underbrace{Ae^{ikx}}_{\text{gelen}} + \underbrace{Be^{-ikx}}_{\text{geri yansıyan}}$ ..... (1)

Olasılık akısı : $J_x = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$ .... (2)

(1) eşitliğini (2)'de yazarsanız

$$J_x = \frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right)$$

bulunursunuz. Gelen akı

$$J_{gelen} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

Yansıyan akı

$$J_{yan} = \frac{\hbar k}{m} |B|^2$$

Bariyerden yansıyan akı olasılığı (yansıma katsayısı)

$$R = \frac{J_{yan}}{J_{gel}} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

Bariyerden geçme olasılığı (geçme katsayısı)

$$T = \frac{J_{geç}}{J_{gel}}$$

Şimdi ikinci bölge için Schrödinger denklemini çözelim

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad , V_x = V_0 \quad ; x > 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V_0\varphi(x) = E\varphi(x)$$

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\varphi(x) = 0 \; ; \; x > 0$$

Burada iki durum ele alacağız: $V_0 < E$ ve $V_0 > E$

(i) $V_0 < E$

$$\Rightarrow \quad \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) < 0$$

$$Q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0$$

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + Q^2\varphi(x) = 0$$

Çözümler : $\varphi(x)_{II} = Ce^{iQx} + De^{-iQx} \quad ; x > 0$

D terimi sola doğru giden bir akı yoğunluğu meydana getirir. Bu bariyerin sağından gelen parçacıkları temsil eder. Burada ele-alınan bariyerde sağdan gelen parçacık bulunmadığında $D=0$ alınır ve çözüm

$$\psi_{II}^{f}(x) = C e^{iQx} \qquad x>0$$

Geçen olasılık akısı : $J_{geç} = \dfrac{\hbar Q}{m} |C|^2$

Geçme katsayısı : $T = \dfrac{Q}{k} \dfrac{|C|^2}{|A|^2}$

A, B ve C katsayılarını bulalım. Sınır koşullarından bu katsayılar bulunabilir: Dalga fonksiyonu sürekli olmalı ve türevi sürekli olmalı

$x=0$'da

$$\psi_{I}^{f}(0) = \psi_{II}^{f}(0) \qquad \left.\frac{d\psi_{I}^{f}(x)}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}^{f}(x)}{dx}\right|_{x=0}$$

$$A+B=C \quad \ldots (3a) \qquad ik(A-B)=iQC \quad \ldots (3b)$$

$$\begin{aligned} k(A+B) &= kC \\ + \quad k(A-B) &= QC \\ \hline \end{aligned}$$

$$\boxed{C = \frac{2k}{k+Q} A} \quad \ldots (4a)$$

$$\begin{aligned} -Q(A+B) &= -QC \\ + \quad k(A-B) &= QC \\ \hline \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{B = \frac{k-Q}{k+Q} A} \quad \ldots (4b)$$

Yansıma olasılığı (yansıma katsayısı)

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k-Q)^2}{(k+Q)^2} \quad \dots (5a)$$

Geçme olasılığı (geçme katsayısı)

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2}\frac{Q}{k} = \frac{4kQ}{(k+Q)^2} \quad \dots (5b)$$

Toplam olasılık korunmalıdır:

$$\underline{R + Q = (5a) + (5b) = 1}$$

(ii) $\underrightarrow{V_0 > E}$

$$-q^2 = Q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) < 0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - q^2\psi(x) = 0$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{-qx} + De^{qx}; \quad x > 0$$

$\psi(x) \xrightarrow[x \to \infty]{} 0$ koşulundan (yani dalga fonksiyonu sonlu olmalıdır)

$D = 0$ olmalıdır

$$\Rightarrow \psi_{II}(x) = Ce^{-qx}; \quad x > 0$$

Bu ifade gösteriyor ki $V_0 > E$ durumu çözüm, $V_0 < E$ için bulunan çözümde $iQ \to -q$ yazılması ile elde edilebilir. Dolayısıyla tekrar sınır koşullarını yazıp A, B, C katsayılarını ~~yeniden~~ bulmak yerine yansıma olasılığı ve geçme olasılığı ifadelerinde Q yerine iq yazmak yeterlidir. (aynı sonucu verir)

$$R = \frac{|k-iq|^2}{|k+iq|^2} = \frac{k^2+q^2}{k^2+q^2} = 1$$

$R=1$ bulduğumuzdan olasılığın korunumu $R+T=1$, geçme olasılığının sıfır olmasını yani $T=0$ olmasını gerektirir. Fakat

$$C = \frac{2k}{k+iq} A \neq 0$$

olduğundan dalga fonksiyonu potansiyel bariyerinin içine nüfuz eder. Geçme olasılığı için $iQ \to -q$ reçetesini vermek doğru değildir. Çünkü yansıma katsayısından farklı olarak q ve Q parametrelerinde bulunan enerji değerleri farklıdır ($E<V_0$ veya $E>V_0$). Dolayısıyla geçme olasılığını ~~$T = \frac{4kq}{(k+q)^2}$~~ $T = \frac{Q}{k}\frac{|C|^2}{|A|^2}$ ifadesinden değil,

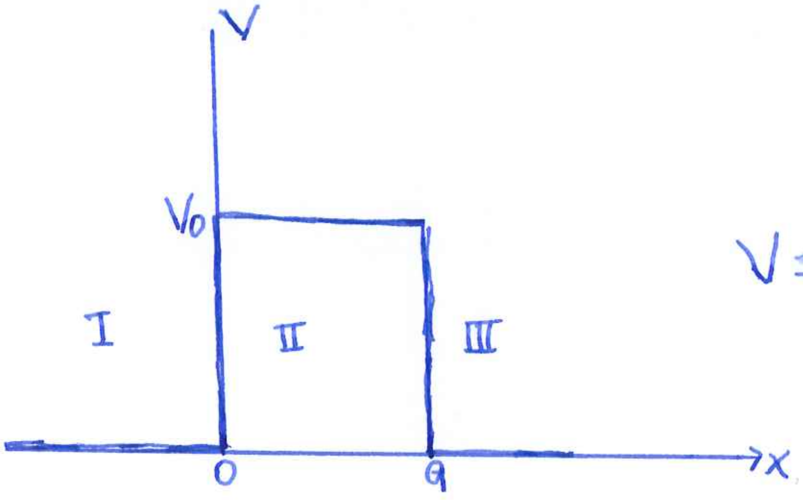
$T = \frac{J_{geçme}}{J_{gelen}}$ ifadesinden bulmak gerekir.

$$J_{geç} = \frac{\hbar}{2mi}\left(C e^{-qx}(-q)Ce^{-qx} - Ce^{-qx}(-q)Ce^{-qx}\right) = 0$$

$\Rightarrow T=0$ olur ve $R=1$, $T=0$ olasılık korunur.

Oysa $T = \frac{Q}{k}\frac{|C|^2}{|A|^2} \Rightarrow T = \frac{iq}{k}\frac{|2k|^2}{|k+iq|^2} = \frac{4iqk}{k^2+q^2}$

bulunur. Bu sonuç real olmadığından, herhangi bir ölçülebilire karşılık gelmez.



$$V = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

$E < V_0$ enerjili paracıklar soldan potansiyel enerji bariyerine gelsinler.

I. ve III bölgelerde paracık serbesttir. Çözümler serbest paracık çözümleridir:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

$$\psi_I(x) = \underbrace{Ae^{ikx}}_{\text{gelen}} + \underbrace{Be^{-ikx}}_{\text{yansıyan}}$$

$$\psi_{III}(x) = Ce^{ikx}$$

$\psi_{III}(x)$ 'de De^{-ikx} terimi sağdan gelen paracıkları gösterdiğinden ve potansiyele sağdan gelen parçacık olmadığından ~~D=0~~ sıfıra eşittir: $D = 0$

II. Bölgedeki çözümler ilk soruda çözülen potansiyel basamağı probleminde $V > E$ (ii) durumu ile aynıdır:

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - q^2\psi = 0$$

$$\psi_{II}(x) = Fe^{qx} + Ge^{-qx}$$

Burada potansiyel sonlu genişlikte olduğundan Fe^{qx} terimi ıraksamaz (yani sonsuza gitmez): $\lim_{x\to a} Fe^{qx} \rightarrow$ sonlu

$$\Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x<a \\ Fe^{qx} + Ge^{-qx} & 0<x<a \\ Ce^{ikx} & x>a \end{cases} \quad \ldots\ (2.1)$$

Sınır koşullarını $\psi(x)$'e uygulayarak ~~$\psi(x)$'in~~ geçme katsayısı bulunabilir <yansıma katsayısı da>

$$\psi_I(x)\Big|_{x=0} = \psi_{II}(x)\Big|_{x=0} \longrightarrow A+B = F+G \quad \ldots\ (2.2)$$

$$\frac{d\psi_I(x)}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{d\psi_{II}(x)}{dx}\Big|_{x=0} \rightarrow ik(A-B) = q(F-G) \quad \ldots\ (2.3)$$

$$\psi_{II}(x)\Big|_{x=a} = \psi_{III}(x)\Big|_{x=a} \rightarrow Fe^{aq} + G^{-aq} = Ce^{ika} \quad \ldots\ (2.4)$$

$$\frac{d\psi_{II}(x)}{dx}\Big|_{x=a} = \frac{d\psi_{III}(x)}{dx}\Big|_{x=a} \rightarrow q(Fe^{qa} - Ge^{-qa}) = ik\,Ce^{ika} \quad \ldots\ (2.5)$$

Geçme olasılığı (geçme katsayısı)

$$T = \frac{J_{geçen}\ (x>a)}{J_{gelen}\ (x<a)} \quad \frac{\frac{\hbar k}{m}|C|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2}$$

(2.4) denklemini q ile çarpıp (2.3) ile taraf tarafa toplayalım:

$$F = \frac{C}{2}\left(1 + i\frac{k}{q}\right) e^{a(ik-q)} \quad \ldots . (2.6)$$

(2.4) denklemini q ile çarpıp (2.5) ile taraf tarafa çıkaralım:

$$G = \frac{C}{2}\left(1 - i\frac{k}{q}\right) e^{a(ik+q)} \quad \ldots . (2.7)$$

(2.6) ve (2.7) ifadelerini (2.2) ve (2.3)'de yerlerine yazalım

$$A+B = \frac{C}{2} e^{ika}\left(e^{qa}+e^{-qa} - \frac{ik}{q}\left(e^{qa}-e^{-qa}\right)\right)$$

$$= Ce^{ika}\left(\cosh qa - \frac{ik}{q}\sinh qa\right)$$

$$1+\frac{B}{A} = \frac{C}{A} e^{ika}\left(\cosh qa - \frac{ik}{q}\sinh qa\right) \quad \ldots .. (2.8)$$

$$ik(A-B) = \frac{C}{2} e^{ika} q\left(e^{qa}+e^{-qa} + \frac{ik}{q}\left(e^{qa}-e^{-qa}\right)\right)$$

$$\Rightarrow \quad 1-\frac{B}{A} = \frac{C}{A}\left(\frac{e^{qa}+e^{-qa}}{2} + \frac{iq}{k}\left(\frac{e^{qa}-e^{-qa}}{2}\right)\right)$$

$$1-\frac{B}{A} = \frac{C}{A}\left(\cosh qa + \frac{iq}{k}\sinh qa\right)e^{ika} \ldots (2.9)$$

(2.8) ile (2.9)'u toplayalım:

$$(2.8)+(2.9) \Rightarrow 2 = \frac{C}{A} e^{ika}\left(2\cosh qa + \left(\frac{iq}{k} - \frac{ik}{q}\right)\sinh qa\right)$$

$$\Rightarrow \frac{C}{A} = 2e^{-ika}\left(2\cosh qa + i\,\frac{q^2+k^2}{qk}\sinh qa\right)^{-1}$$

$$T = \frac{\frac{\hbar k}{m}|C|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \left|\frac{C}{A}\right|^2$$

$$= 4\left(4\cosh^2 qa + \left(\frac{q^2+k^2}{qk}\right)^2 \sinh^2 qa\right)^{-1}$$

Ödev: (yansıma olasılığı) R'yi bulunuz

Şimdi T'yi biraz daha açık yazalım:

$\cosh^2 qa = 1 + \sinh^2 qa$ özdeşliğini yukarıda yerine yazalım

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{q^2+k^2}{qk}\right)^2 \sinh^2 qa} \quad \ldots\ldots (2.10)$$

elde edilir. Burada geçme olasılığının sıfırdan farklı olduğu görülüyor. Bu $0<x<a$ bölgesinden $E<V_0$ olmasına rağmen parçacıkların geçtiğini göstermektedir. Bu tamamen kuantum mekaniksel bir etkidir ve tünelleme etkisi olarak bilinir.

Şimdi T'yi parçacığın ve bariyerin parametreleri cinsinden yazalım

$$\left(\frac{q^2+k^2}{kq}\right)^2 = \left(\frac{V_0}{\sqrt{E(V_0-E)}}\right)^2$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\sinh^2\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\right)} \quad \ldots\ldots (2.11)$$

Burada bir elektron için $E=5eV$, $V_0=10eV$ $a=0.53\mathring{A}$ (Bohr yarıçapı) alınırsa $T\simeq 0.68$ bulunur. ($m_e=0.51 MeV/c^2$ $\hbar=6.58\times10^{-16}eVs$)

Makroskopik limiti test edelim:

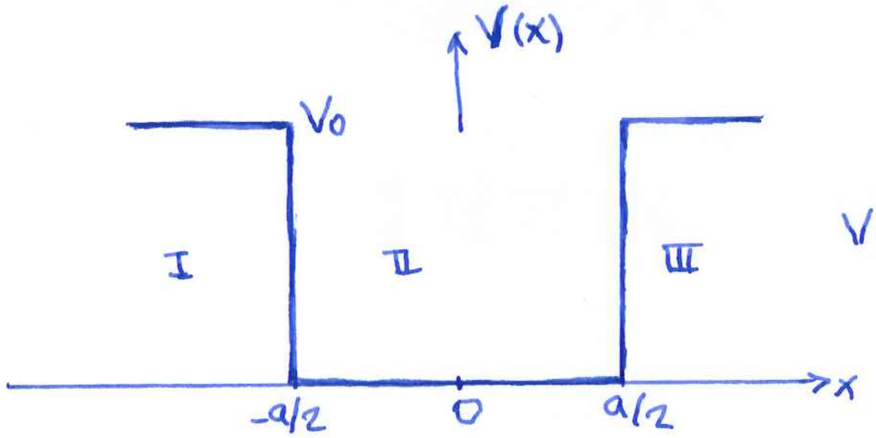
$qa \gg 1$

$$\sinh qa = \frac{e^{qa}-e^{-qa}}{2} \xrightarrow[qa\gg1]{} \frac{e^{qa}}{2}$$

$$T \xrightarrow[qa\gg1]{} \left(\frac{4kq}{q^2+k^2}\right)^2 e^{-2qa} = 16\,\frac{E(V_0-E)}{V_0^2}\,e^{-2\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$$

Eğer $V_0-E=1erg$, $a=1cm$, $m=1g$ alırsak,

$T\sim e^{-10^{27}}$ olur. Bu çok küçük bir sayıdır. Bu makroskopik düzeyde ~~tünel~~ tünelleme etkisinin görülmesinin imkansız olduğunu gösterir; fakat yukarıda elektron için verilen örnekte mikroskopik düzeyde tünelleme etkisinin görülme olasılığının yüksek olduğu gösterildi.



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2 \\ 0 & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ V_0 & x > a/2 \end{cases}$$

(i) Saçılma Çözümleri : $E > V_0$

Bu çözümler ödev olarak bırakılmıştır.

(ii) Bağlı Durum Çözümleri: $E < V_0$

Klasik olarak $E < V_0$ enerjisine sahip bir parçacık $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$ bölgesine hapsedilirse, $p = \sqrt{2mE}$ → sabit momentumu ile $-\frac{a}{2}$ ve $\frac{a}{2}$ arasında ileri-geri hareket eder. Şimdi problemi kuantum mekaniksel ele alıp Schrödinger denklemini çözerek sonlu potansiyel kuyusundaki parçacığın enerji özdeğerlerini bulalım.

II. Bölgede parçacık serbesttir:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad ; \; -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$$

$$\psi_{II}(x) = C \sin kx + D \cos kx$$

I. ve III. bölgelerde

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - q^2\psi = 0$$

$$\varphi_I(x) = Ae^{qx} \quad ; \; x < -\frac{a}{2}$$

$$\varphi_{III}(x) = Fe^{-qx} \quad ; \; x > \frac{a}{2}$$

$\varphi_I(x)$'in $x \to -\infty$ için sonlu kalması için e^{-qx} teriminin katsayısı sıfır alındı, aynı şekilde $\varphi_{III}(x)$'in $x \to \infty$ için sonlu olması için e^{qx} teriminin katsayısı sıfır seçildi.

Bir boyutlu sonlu ve simetrik bir potansiyelde hareket eden bir parçacığın bağlı durumları belirli paritelidir: Çift veya tek pariteli. Bu problemdeki (bir boyutlu sonlu simetrik potansiyel içindeki parçacık) çözümler aşağıdaki gibi tek ve çift (anti-simetrik ve simetrik) yazılabilir:

Tek çözümler: $\varphi_a(x) = \begin{cases} Ae^{qx} & x < a/2 \\ C\sin kx & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ Fe^{-qx} & x > a/2 \end{cases}$

Çift çözümler: $\varphi_s(x) = \begin{cases} Ae^{qx} & x < -a/2 \\ D\cos kx & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ Fe^{-qx} & x > a/2 \end{cases}$

Özdeğerleri bulabilmek için $x = \pm \frac{a}{2}$ 'de sınır koşullarını çözümlere uygulamak gerekir:

$$\varphi_I(-\tfrac{a}{2}) = \varphi_{II}(-\tfrac{a}{2}) \Longrightarrow Ae^{-qa/2} = -C\sin\left(\tfrac{ka}{2}\right) + D\cos\left(\tfrac{ka}{2}\right) \quad \ldots(1)$$

$$\left.\frac{d\varphi_I}{dx}\right|_{x=-\frac{a}{2}} = \left.\frac{d\varphi_{II}}{dx}\right|_{x=-\frac{a}{2}} \Rightarrow qAe^{-qa/2} = k\left(C\cos\left(\tfrac{ka}{2}\right) + D\sin\left(\tfrac{ka}{2}\right)\right) \ldots(2)$$

$$\varphi_{II}(\tfrac{a}{2}) = \varphi_{III}(\tfrac{a}{2}) \Rightarrow$$

$$C\sin\left(\tfrac{ka}{2}\right) + D\cos\left(\tfrac{ka}{2}\right) = Fe^{-qa/2} \quad \ldots(3)$$

$$\left.\frac{d\varphi_{II}}{dx}\right|_{x=a/2} = \left.\frac{d\varphi_{III}}{dx}\right|_{x=a/2} \Longrightarrow k\left(C\cos\left(\tfrac{ka}{2}\right) - D\sin\left(\tfrac{ka}{2}\right)\right) = -qFe^{-qa/2} \quad \ldots(4)$$

simetrik durum için $C=0$

$(1) \Rightarrow Ae^{-qa/2} = D\cos\left(\tfrac{ka}{2}\right)$

$(2) \rightarrow kD\sin\left(\tfrac{ka}{2}\right) = qAe^{-qa/2}$

Bu iki ifadeyi taraf tarafa oranlarsak

$$\boxed{q = k\tan\left(\tfrac{ka}{2}\right)} \quad \ldots\ldots(5)$$

buluruz. Aynı şekilde anti simetrik durum için $D=0$

$(1) \rightarrow Ae^{-qa/2} = -C\sin\left(\tfrac{ka}{2}\right)$

$(2) \rightarrow qAe^{-qa/2} = kC\cos\left(\tfrac{ka}{2}\right)$

iki ifadeyi oranla:

$$\boxed{q = -k\cot\left(\tfrac{ka}{2}\right)} \quad \ldots\ldots(6)$$

bulunur.

(5) ve (6) denklemleri direkt olarak (analitik olarak) çözülemezler. Bunları grafiksel veya nümerik olarak çözebiliriz.

$u = qa/2$ ve $v = ka/2$

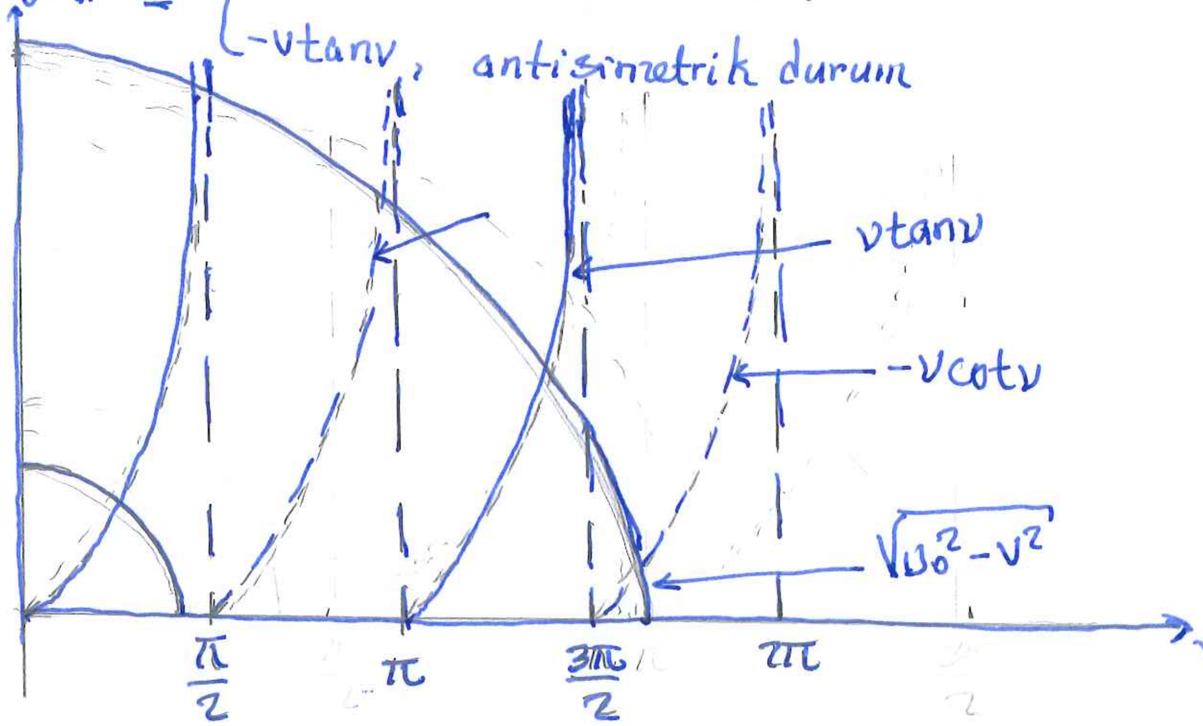
tanımlayalım. $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$, $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$

$$\Rightarrow \quad u^2 = \frac{1}{4}q^2a^2 = \frac{1}{4}a^2\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

$$= \overbrace{\frac{1}{4}a^2\frac{2m}{\hbar^2}V_0}^{u_0^2} - \overbrace{\frac{1}{4}a^2\frac{2m}{\hbar^2}E}^{v^2}$$

$$= u_0^2 - v^2$$

$$u = \sqrt{u_0^2 - v^2} = \begin{cases} v\tan v, & \text{simetrik durum} \\ -v\tan v, & \text{antisimetrik durum} \end{cases}$$



Çözümler $\sqrt{u_0^2 - v^2}$ çemberinin vtanv ve -vcotv eğrilerini kestiği noktalardır. Çözümler kesikli bir küme oluştururlar.

$V \to \infty$ iken çemberin yarıçapı $v_0 = \sqrt{\frac{L^2 m}{2\hbar^2} V_0} \to \infty$ olur. Bu durumda u çemberi $-v\cot v$ ve $v\tan v$ eğrilerini $\frac{n\pi}{2}$ asimptotlarında keser. $(n = 0, 1, 2, 3, \ldots)$

$\tan v \to \infty \quad v = \frac{2n+1}{2}\pi \quad n = 0, 1, 2, \ldots$

$\cot v \to \infty \quad v = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

Bu iki ifade birleştirilirse

$$v = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

$$v^2 = \frac{ma^2 E_n}{2\hbar^2} = n^2\pi^2$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2$$