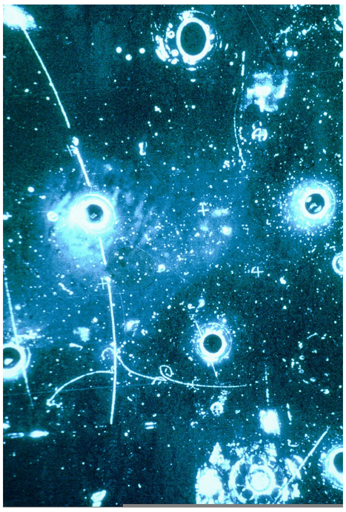
Akdeniz Üniversitesi
Fen Fakültesi - Fizik Bölümü
FİZ319 Kuantum Fiziği Ders Notları



Doç. Dr. Mesut Karakoç

October 26, 2019

İçindekiler

4 Bir Boyutlu Potansiyeller **3**
4.1 Basamak Potansiyeli 3
4.2 Sonlu Potansiyel Kuyusu 8

List of Figures

1 Basamak potansiyeli. 3
2 Yansıma ve geçiş katsayılarının E/V_0'a göre davranışları. 7
3 Dalga fonksiyonu genliklerinin E/V_0'a göre davranışları. 7

List of Tables

If all this damned quantum jumps were really to stay, I should be sorry I ever got involved with quantum theory.
—Erwin Schrödinger [1]

4 Bir Boyutlu Potansiyeller

Üç boyutlu bir evrende yaşıyor olmamıza rağmen, bir çok fiziksel olayı (hareketi) bir boyutlu olarak tanımlamak mümkündür. Bu nedenle bu bölümde klasik fiziğin sınırları dışına çıkan ve kuantum fiziğiyle çalışabildiğimiz bazı bir boyutlu sistemleri inceleyeceğiz.

4.1 Basamak Potansiyeli

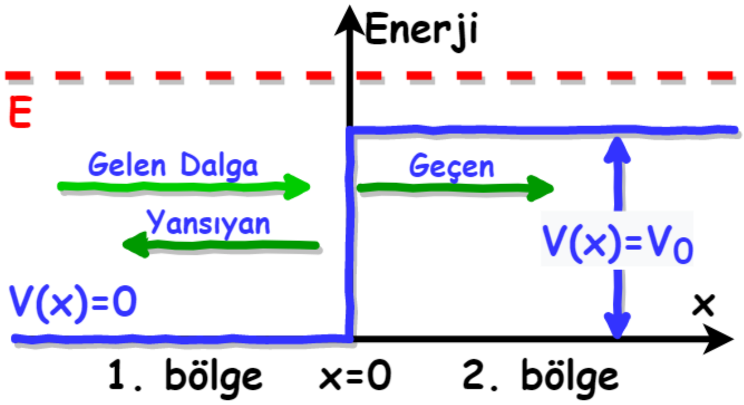


Figure 1: Basamak potansiyeli.

Bir boyutlu basamak potansiyelinin bir örneği yukarıdaki şekilde gösterilmiştir. Şekilden anlaşılacağı üzere basamak potansiyeli; birbirinden farklı sabit potansiyellere sahip iki bölgeden oluşur. Bir boyutlu bu potansiyelin matematiksel ifadesi aşağıdaki gibidir.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \Leftarrow x < 0 \\ V_0 & \Leftarrow x \geqslant 0 \end{cases} \tag{1}$$

Bu potansiyeli zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ile çalışabiliriz. Öncelikle Schrödinger denklemini yazılışı daha kolay olan,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \tag{2}$$

formuna dönüştürebiliriz.

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]u(x) = 0 \tag{3}$$

Basamak potansiyelinin değerinin sıfır olduğu bölge için,

$$\frac{2m}{\hbar^2}E = k^2 \tag{4}$$

tanımını ve sıfırdan farklı olduğu bölge için

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) = q^2 \tag{5}$$

tanımını yapabiliriz. $x < 0$ ve $V(x) = 0$ bölgesi için çözüm

$$u_1(x) \equiv u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{6}$$

olarak yazılabilir. Burada Ae^{ikx}, $x = -\infty$'deki bir kaynaktan gelen serbest düzlem dalga olarak düşünülebilir, Be^{-ikx} ise $x = 0$ noktasında ortam değişikliğinden dolayı yansıyan dalga olarak düşünülebilir. Bu bölgedeki toplam olasılık akısı,

$$\begin{aligned} j_1 &\equiv j = \tfrac{\hbar}{2im}\left(u^*\tfrac{du}{dx} - \tfrac{du^*}{dx}u\right) \\ &= \tfrac{\hbar}{2im}\left[\left(A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx}\right)\left(ikAe^{ikx} - ikBe^{-ik}\right) - \left(-ikA^*e^{-ikx} + ikB^*e^{ik}\right)\left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right)\right] \\ &= \tfrac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right) \end{aligned} \tag{7}$$

olur. $x > 0$ ve $V(x) = V_0$ için ise,

$$u_2(x) \equiv u(x) = Ce^{iqx} \tag{8}$$

çözümü elde edilir. Sadece Ce^{iqx} kısmı vardır, çünkü bu bölge $x = +\infty$'a kadar uzanmaktadır ve potansiyel sabittir bu yüzden, yansıyan dalga söz konusu değildir. Sadece $+x$ yönünde ilerleyen olasılık dalgası vardır. Bu olasılık dalgası için olasılık akısı,

$$j_2 \equiv j = \frac{\hbar q}{m}|C|^2 \tag{9}$$

bulunur. Her iki bölgedeki olasılık akıları ($j_1 = j_2$) birbirine eşit olmalıdır. Eğer,

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0 \tag{10}$$

olduğu hatırlanırsa ve kısmi değişkenlere ayrılabilir dalga fonksiyonu ile çalıştığımızdan $P(x,t) = \psi(x,t)\psi^*(x,t) = u(x)u^*(x)$ olacağına göre,

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}|u(x)|^2 = 0 \tag{11}$$

elde edilir. Buradan,

$$\frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0 \tag{12}$$

sonucuna ulaşırız. $x = 0$ civarında $x = \pm\varepsilon \to 0$ aralığında yukarıdaki ifadenin integrali,

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx\frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = j(\varepsilon,t) - j(-\varepsilon,t) = 0 \tag{13}$$

sonucunu verir. Böylece $j_1 = j_2$ olması gerektiği ortaya çıkar. Her iki bölgedeki olasılık akıları da x'ten bağımsız olduklarından sınırda eşitlerse bütün tanımlı uzay boyunca birbirlerine eşit olmalıdırlar,

$$\frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right) = \frac{\hbar q}{m}|C|^2 \tag{14}$$

yukarıdaki eşitlikle bu sonuç ifade edilmiş olur. Dalga fonksiyonlarının $x = 0$'daki sürekliliğinden ise,

$$u_1(0) = u_2(0) \tag{15}$$

$$A + B = C \tag{16}$$

elde edilir. Basamak potansiyeli $x = 0$'da süreksiz olmasına rağmen, sistemin dalga fonksiyonu $u(x)$ süreklidir, dalga fonksiyonun türevinin de $x = 0$'da sürekli olacağı aşağıda verilen matematik süreçle gösterilmiş olur.

$$\begin{aligned} \left(\tfrac{du}{dx}\right)_{+\varepsilon} - \left(\tfrac{du}{dx}\right)_{-\varepsilon} &= \textstyle\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \tfrac{d}{dx}\tfrac{du}{dx} \\ &= \textstyle\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \tfrac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]u(x) = 0 \end{aligned} \tag{17}$$

Burada ε sonsuz küçük bir pozitif reel sayıdır. $x = 0$'ın $-\varepsilon$ ve $+\varepsilon$ civarında dalga fonksiyonlarının türevlerinin farkı yukarıdaki eşitliğin sol tarafındaki gibidir ve bu farkın integral formuda eşitliğin sağ tarafındaki gibidir. Eşitliğin sol tarafı Schrödinger denkleminden faydalanılarak $V(X)$, E ve $u(x)$'i içerecek şekilde yeniden yazılabilir. Bu problemde $V(x)$ ve E birer sabit sayı olduklarından, $\pm\varepsilon \to 0$ olduğundan ve böylece $u(x)$'in sürekliliği gerçekleştiğinden bu integralin cevabı sıfır olacaktır. Böylece bu tür problemler için dalga fonksiyonlarının türevlerinin de sürekli oldukları kabul edilebilir.

Yeri geldiğinden ve daha sonra kullanılacağı için şimdiden belirtmek gerekir ki, bu süreklilik $\lambda\delta(x-a)$ benzeri Dirac-delta fonksiyonu içeren potansiyeller için geçerli değildir. Böyle potansiyeller için süreklilik aşağıdaki gibi bir süreksizlik halini alır.

$$\begin{aligned} \left(\frac{du}{dx}\right)_{a+\varepsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{a-\varepsilon} &= \frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx\lambda\delta(x-a)u(x) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\lambda u(a) \end{aligned} \tag{18}$$

Bu problemde türevlerinin sürekliliği sağlandığına göre; türevlerinin sürekliliğinden,

$$\left.\frac{d}{dx}u_1(x)\right|_{x=0-} = \left.\frac{d}{dx}u_2(x)\right|_{x=0+} \tag{19}$$

$$ik(A - B) = iqC \tag{20}$$

elde edilir.

Bu tür problemleri çalışılırken, klasik bir dalga sisteminin davranışına benzer olarak yansıma ve geçme olasılıklarından bahsetmek mümkündür. Bu olasılıklarla ilişkili olarak, genellikle yansıma ve geçme katsayıları, sırasıyla,

$$R \equiv \frac{|j_{\text{yansıyan}}|}{|j_{\text{gelen}}|} \quad \text{ve} \quad T \equiv \frac{|j_{\text{geçen}}|}{|j_{\text{gelen}}|} \tag{21}$$

şeklinde tanımlanırlar. R ve T'yi hesaplamadan önce olasılık akısı üzerinde biraz daha bilgilerimizi genişletmeliyiz: olasılık akısını üç boyutlu durum için yazacak olursak,

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^*(\vec{r},t)\vec{\nabla}\Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t)\vec{\nabla}\Psi^*(\vec{r},t)\right] \tag{22}$$

bir vektör davranışına sahip olduğu açıkça görülür. Basamak potansiyeli probleminde, j_1 (1. bölgedeki olasılık akısı) aslında,

$$\vec{j}_1 = \vec{j}_{\text{gelen}} + \vec{j}_{\text{yansıyan}} \tag{23}$$

olarak yazılabilir. j_2 (2. bölgedeki olasılık akısı) ise,

$$\vec{j}_2 = \vec{j}_{\text{geçen}} \tag{24}$$

olarak yazılabilir. Akının korunumu, $\frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0$, ise

$$\vec{j}_1 = \vec{j}_2 \quad \text{veya} \quad \vec{j}_{\text{gelen}} + \vec{j}_{\text{yansıyan}} = \vec{j}_{\text{geçen}} \tag{25}$$

olmasını gerektirir. Tekrar basamak potansiyeli çalıştığımız bir boyutlu duruma döner ve vektör notasyonunu bırakırsak ve yönleri sadece " + " ve " − " işaretleriyle temsil edersek,

$$j_{\text{gelen}} = \frac{\hbar}{2mi}\left[u_g^* \frac{d}{dx}u_g - u_g(\frac{d}{dx}u_g)^*\right] \tag{26}$$

olur. Burada $u_g = Ae^{ikx}$ ile verilir ve $x = -\infty$'den gelen dalga fonksiyonunu temsil eder. Böylece gelen akı,

$$j_{\text{gelen}} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 \tag{27}$$

olur. Benzer şekilde, yansıyan dalga $u_y = Be^{-ikx}$ ve geçen dalga $u_t = Ce^{iqx}$ ifadeleri ile tanımlanırlar. Böylece yansıyan ve geçen olasılık akıları,

$$j_{\text{yansıyan}} = -\frac{\hbar k}{m}|B|^2 \quad \text{ve} \quad j_{\text{geçen}} = \frac{\hbar q}{m}|C|^2 \tag{28}$$

olarak bulunurlar. Yansıma ve geçme katsayıları ise,

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad \text{ve} \quad T = \frac{q}{k}\frac{|C|^2}{|A|^2} \tag{29}$$

olarak bulunurlar. R ve T'yi bilinmeyen A, B ve C kat sayılarından kurtarabiliriz. Bunun için akının korunumundan ve dalga fonksiyonlarının ve türevlerinin sürekliliğinden,

$$\frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right) = \frac{\hbar q}{m}|C|^2 \tag{30}$$

$$A + B = C \tag{31}$$

$$ik(A - B) = iqC \tag{32}$$

elde ettiğimiz yukarıdaki eşitlikleri kullanabiliriz. Olasılık akısının korunumundan elde ettiğimiz denklemin yardımıyla, kolayca,

$$T + R = \frac{q}{k}\frac{|C|^2}{|A|^2} + \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \tag{33}$$

olacağı gösterilebilir. Süreklilikler den elde edilen denklemlerden de,

$$B = \frac{k-q}{k+q}A \quad \text{ve} \quad C = \frac{2k}{k+q}A \tag{34}$$

olacağı gösterilebilir. Böylece R ve T,

$$R = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 \quad \text{ve} \quad T = \frac{4kq}{(k+q)^2} \tag{35}$$

olarak bulunurlar.

$E < V_0$ durumu için dalga fonksiyonu,

$$u(x) = Te^{-\eta x} \tag{36}$$

halini alır. Burada η ($V_0 > E$ olduğundan),

$$\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) = \eta^2 \tag{37}$$

olarak tanımlanır. Benzer bir matematiksel süreçten geçilerek hesaplar yapıldığında dalga fonksiyonu genlikleri arasınada,

$$B = \frac{k - i\eta}{k + i\eta} A \quad \text{ve} \quad C = \frac{2k}{k + i\eta} A \tag{38}$$

ilişkileri bulunur. Olasılık akıları hesaplandında, gelen ve yansıyan akıların aynı kaldığı, fakat geçen akının sıfır olduğu görülecektir. Bu nedenle her ne kadar basamağın içine giren dalga fonksiyonunun genliği C sıfır olmasa da $j_{\text{geçen}} = 0$ olduğundan, geçme olasılığı katsayısı,

$$T = \frac{|j_{\text{geçen}}|}{|j_{\text{gelen}}|} = 0 \tag{39}$$

olur. Yansıma olasılığı katsayısı ise,

$$R = \frac{BB^*}{AA^*} = \left(\frac{k - i\eta}{k + i\eta}\right)\left(\frac{k + i\eta}{k - i\eta}\right) = 1 \tag{40}$$

olur. Aşağıdaki şekillerde R, T ve dalga fonksiyonlarının genliklerinin E/V_0 oranına göre davranışları gösterilmiştir.

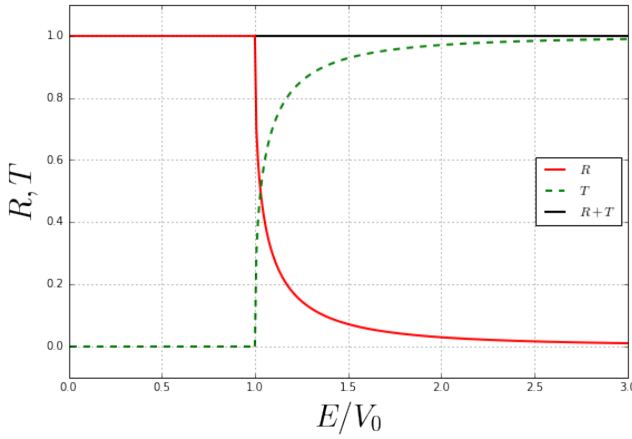


Figure 2: Yansıma ve geçiş katsayılarının E/V_0'a göre davranışları.

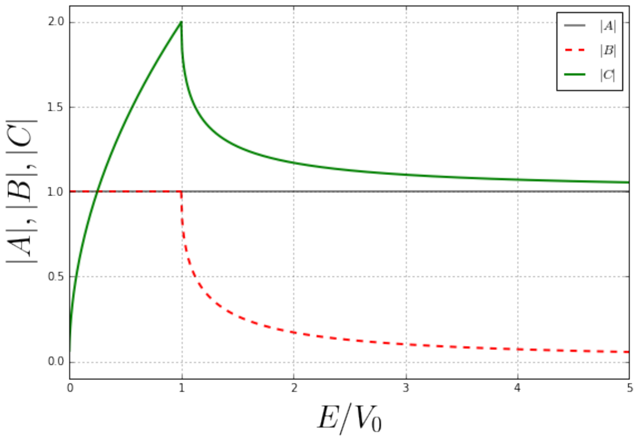


Figure 3: Dalga fonksiyonu genliklerinin E/V_0'a göre davranışları.

Elde edilen sonuçlar hakkında bazı fiziksel yorumlar yapılabilir:

- Klasik mekanik açısından bakıldığında buradaki yansıma olayı ilginçtir. Çünkü, bir potansiyelden geçen bir parçacığın kinetik enerjisini kaybedip, potansiyel enerjiye dönüştürerek, yavaşlaması beklenir. Burada gözlediğimiz yansıma davranışı ancak ilgilendiğimiz sistemdeki parçacıkların dalga davranışı gösterdiklerini ve dalga mekaniği davranışına uygun davrandıklarını göstermektedir.

- $T + R = 1$ olması olasılık akısının korunumunun geçerliliğini onaylamaktadır. Eğer bütün parçacıkların, bütün uzay içerisinde var olma olasılığı 1 ise yansıma ve geçme olasılıklarının toplamının 1 olması, korunumun sağlandığını göstermektedir.

- $E >> V_0$ için $R \to 0$ ve $q \to k$, bunun nedeni kolayca anlaşılabilir. Parçacığın veya sistemin enerjisi arttıkça basamak potansiyelinin etkisi neredeyse yok gibidir.

- $E < V_0$ durumu için dalga fonksiyonun x'in üstel azalan reel bir fonksiyonu olduğuna dikkat ediniz. Böylece $x \to +\infty$ durumunda dalga fonksiyonu ıraksamamış (patlamamış) olur. Klasik mekanikle uyumlu şekilde $R = 1$ ve $T = 0$ (veya ($j_{\text{geçen}} = 0$))olduğuna da dikkat ediniz. Fakat geçen dalganın genliği ($C \neq 0$) sıfır olmamıştır ve bu bir dalganın gösterebileceği davranıştır. Bu davranış kuantum fiziğinde *"tünelleme"* olarak adlandırılır. Sonsuza uzanan basamak potansiyeli yerine sonlu kalan bir bariyer potansiyeli çalışıldığında klasik olarak yasaklı olan bölgeden bir parçacığın geçebileceği (tünelleme yapabileceği) görülecektir.

4.2 Sonlu Potansiyel Kuyusu

Kaynaklar

[1] Zbigniew Ficek. *Quantum Physics for Beginners.*