

T. C.
PAMUKKALE ÜNİVERSİTESİ
FEN FAKÜLTESİ
FİZİK ANABİLİM DALI
2023-2024 BAHAR DÖNEMİ
DOKTORA YETERLİLİK SINAV SORU ve CEVAPLARI

ELEKTROMANYETİK TEORİ:

SORU 1)

(a) R yarıçaplı bir küre yüzeyinde yük yoğunluğu $\sigma = 5a(3\cos^2\theta - 1)$ ile belirtilmiştir. Burada a sabittir. Küre içinde ve dışında potansiyeli bulunuz.

Not: Küresel koordinatlarda Laplace denkleminin ϕ açısından bağımsız çözümü

$V(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (A_l r^l + \frac{B_l}{r^{l+1}}) P_l(\cos \theta)$ 'dır. Burada $P_l(\cos \theta)$ l. dereceden Legendre

polinomudur. $P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$.

(b) Birim uzunlukta N sarımdan oluşan R yarıçaplı ve I akımı taşıyan sonsuz solenoidin içinde ve dışında vektör potansiyelini bulunuz.

(a) ve dışında vektör potansiyelini bulunuz.

* $r \leq R$ küre içinde;

$$V_{i4}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos \theta)$$
 * $r \geq R$ küre dışında;

$$V_{d12}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta)$$
 Sınır şartları;
 ① $r=R$ sınırında potansiyel sürekli olmalıdır:

$$V_{i4}(r, \theta) \Big|_{r=R} = V_{d12}(r, \theta) \Big|_{r=R}$$

$$② \left(\frac{\partial V_{d12}}{\partial r} - \frac{\partial V_{i4}}{\partial r} \right) \Big|_{r=R} = -\frac{\sigma}{\epsilon_0}$$

$$① \Rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} A_l R^l P_l(\cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l}{R^{l+1}} P_l(\cos \theta) \Rightarrow B_l = A_l R^{2l+1}$$

$$② \Rightarrow -\sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \frac{B_l}{R^{l+2}} P_l(\cos \theta) = -\sum_{l=0}^{\infty} l A_l R^{l-1} P_l(\cos \theta) =$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l R^{l-1} P_l(\cos \theta) = 10a P_2(\cos \theta) / \epsilon_0$$

$$\frac{A_0}{R} P_0(\cos\theta) + 3A_1 P_1(\cos\theta) + 5A_2 R P_2(\cos\theta) + \sum_{l=3}^{\infty} (2l+1) A_l R^{l+1} P_l(\cos\theta) = 100 P_2(\cos\theta)/\epsilon_0$$

$$\Rightarrow A_0 = A_1 = 0$$

$$5A_2 R = 100/\epsilon_0 \Rightarrow A_2 = \frac{20}{R \epsilon_0}$$

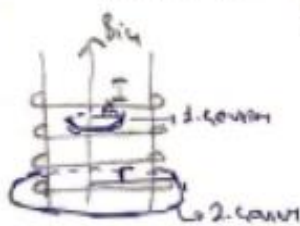
$$l > 3 \Rightarrow A_l = 0$$

$$\left. \begin{aligned} B_l &= A_l R^{2l+1} \\ B_0 &= B_1 = 0 \\ B_2 &= A_2 R^5 \\ &= 20 \frac{R^4}{\epsilon_0} \\ l > 3 &\Rightarrow B_l = 0 \end{aligned} \right\}$$

$$r \leq R \Rightarrow V_{14}(r, \theta) = A_2 r^2 P_2(\cos\theta) \Rightarrow \boxed{V_{14}(r, \theta) = \frac{20}{\epsilon_0 R} r^2 (3\cos^2\theta - 1)}$$

$$r > R \Rightarrow V_{14}(r, \theta) = \frac{B_2}{r^3} P_2(\cos\theta) \Rightarrow \boxed{V_{14}(r, \theta) = \frac{20 R^4}{\epsilon_0 r^3} (3\cos^2\theta - 1)}$$

(b)



$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int \vec{\nabla} \times \vec{A} \cdot d\vec{\sigma} = \int \vec{B} \cdot d\vec{\sigma} = \Phi_B$$

Stokes' Theorem

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 I_{enc} \quad (\text{Ampere Yasası})$$

Barnett teoremi

$$\vec{B} = \mu_0 N I \hat{z} \Rightarrow \vec{B} = \mu_0 N I$$

* $r < R$ (1. çevrim için)

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int \vec{B} \cdot d\vec{\sigma} \Rightarrow A \int_0^{2\pi} r d\phi = \mu_0 N I \int_0^r r dr d\phi$$

$$A 2\pi r = \mu_0 N I \pi r^2 \Rightarrow \boxed{\vec{A}_{14} = \frac{\mu_0 N I}{2} r \hat{\phi}}$$

* $r > R$ (2. çevrim için)

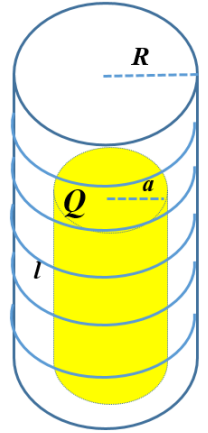
$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int \vec{B} \cdot d\vec{\sigma} \Rightarrow A 2\pi r = \mu_0 N I \pi R^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{A}_{14} = \frac{\mu_0 N I R^2}{2r} \hat{\phi}}$$

SORU 2)

(a) Boş uzayda Maxwell denklemlerini yazınız ve bu denklemlerin elektromanyetik dalga denklemlerini sağladığını gösteriniz.

(b) Üzerinden I akımı geçen ve birim uzunlukta N sarımdan oluşan R yarıçaplı sonsuz bir solenoid yandaki şekilde verilmektedir. l uzunlukta, a yarıçaplı ve yüzeyinde düzgün dağılmış toplam Q yükü bulunan silindir, solenoidle eş eksenli ve solenoidin içinde yer almaktadır ($l > a$).



i) R yarıçaplı solenoidde depolanan elektromagnetik enerjiyi bulunuz.

ii) Solenoidin yanıl yüzeyinden geçen birim zamandaki enerji akısını bulunuz.

(a) Boş uzayda $\rho = 0$ ve $\vec{J} = 0$

$\Rightarrow$ i) $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$
 ii) $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$
 iii) $\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$
 iv) $\vec{\nabla} \times \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$

Bu denklemler, $\vec{E}$ ve $\vec{B}$ 'e göre, birinci mertebeden zamanla değişenler için dalgalar denklemleri sistemi olur;

Çiftlenmeleri kaldırmak için; iiii) ve iv) denklemlerin rotasyonelini alalım;

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} \Rightarrow \vec{\nabla} \times \left(-\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = -\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{B})$$

$$= -\frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right)$$

$$\Rightarrow \nabla^2 \vec{E} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) - \nabla^2 \vec{B} \Rightarrow \vec{\nabla} \times \left(\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = -\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}$$

$$\Rightarrow \nabla^2 \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}$$

burada $\epsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2}$

$$\Rightarrow \begin{cases} \nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \\ \nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} \end{cases} \quad \text{EM dalga denklemleri}$$

Silindirin:

$$(b) \oint \vec{E} \cdot d\vec{a} = Q/\epsilon_0$$

$$E \int r d\theta dz = Q/\epsilon_0 \Rightarrow E 2\pi r l = Q/\epsilon_0$$

$$\Rightarrow \vec{E} = \frac{Q}{\epsilon_0 2\pi r l} \hat{r}, \quad r > a$$

Silindirin diuinda olusan
statik elektrik alan.

Solenoidin iunda statik $\vec{B}$ vardi:

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 I_{\text{enc}} \Rightarrow B 2\pi r = \mu_0 N l I$$

$$\Rightarrow \vec{B} = \mu_0 N I \hat{z}$$

$$i) U = \int U_{\text{EB}} d\tau = \int \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0} B^2 \right) d\tau = U_E + U_B$$

↓
enerji yoqunluğu

$$U_E = \frac{1}{2} \epsilon_0 \int \frac{Q^2}{\epsilon_0^2 r^2 4\pi r^2} d\tau = \frac{1}{2\epsilon_0 4\pi} \int_a^R \frac{dr}{r} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 l} \ln \frac{R}{a}$$

$$U_B = \frac{1}{2\mu_0} \int (\mu_0 N I)^2 r dr d\theta dz = \frac{\pi l \mu_0 N^2 I^2 R^2}{4}$$

$$\Rightarrow \boxed{U = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 l} \ln \frac{R}{a} + \frac{\pi l \mu_0 N^2 I^2 R^2}{4}}$$

$$ii) \vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B} = \frac{1}{\mu_0} \frac{Q}{\epsilon_0 2\pi r} \hat{r} \times \mu_0 N I \hat{z}$$

$$= \frac{Q N I}{\epsilon_0 2\pi r} (-\hat{\phi})$$

$$\int \vec{S} \cdot d\vec{a} = - \int \frac{Q N I}{\epsilon_0 2\pi r} \hat{\phi} \cdot r d\theta dz \hat{r} = 0$$

İSTATİSTİK MEKANİĞİ:

SORU 1)

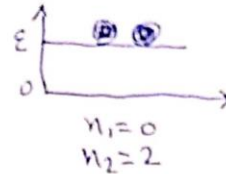
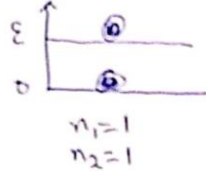
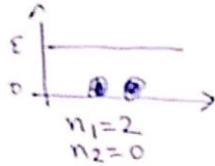
Bir parçacığın kuantumlu durumları $0, \epsilon$ enerjilerine sahiptir. Böyle özdeş iki parçacıktan oluşan bir sistem T sıcaklığında bir ısı deposu ile temasta ve toplam parçacık sayısı sabit kalacak şekilde dengededir. (kimyasal dengede bir sistem düşünün)

(a) Bose-Einstein İstatistiğinde, parçacıkların enerji düzeylerine kaç türlü dağılabileceğini gösteriniz. (ipucu: n_1, n_2 kuantum durumları sorudaki enerji düzeylerine karşı gelsin. Bu durumlara 0 =boş, 1 =tek parçacık, 2= iki parçacık sayıları nasıl dağılırlar? Tablo ile dağılımın kaç değişik şekilde olacağını göstermeniz yeterlidir.) Bu dağılıma göre sistemin Z Grand Bölüşüm fonksiyonunu bulunuz. (10p)

(b) Aynı soruyu Fermi-Dirac İstatistiği için yapınız. (10p)

1a) Bose-Einstein istatistiğine göre bozonlar her quantum durumuna girerler ve birden fazla orada bulunabilirler. Buna göre 2 parçacık (özdeş) 2 quantum durumuna 3 değişik şekilde yerleşebilir.

n_1	n_2
2	0
1	1
0	2



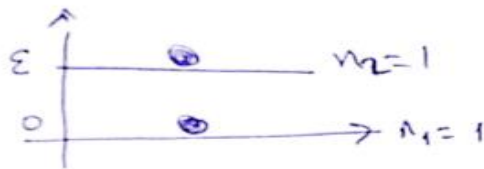
$$Z_{BE} = \sum_{n_1, n_2} e^{-\beta(n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2)}$$

$$= e^{-\beta(2 \cdot 0 + 0 \cdot \epsilon)} + e^{-\beta(1 \cdot 0 + 1 \cdot \epsilon)} + e^{-\beta(0 \cdot 0 + 2 \cdot \epsilon)}$$

$$= e^{-\beta \cdot 0} + e^{-\beta \epsilon} + e^{-\beta 2 \epsilon} = (1 + e^{-\beta \epsilon} + e^{-2\beta \epsilon})$$

$\mu=0$ alınır
parçacık sayısı sabit.
(kimyasal denge)

- 1b) Fermi-Dirac istatistikine göre her durumda ancak tek Fermiyon bulunabilir. Pauli dışarlama ilkesine göre aynı kuantum durumuna 2 Fermiyon girmez. Bir durumda özdeş iki parçacık ancak 1 durumda 0, 1 enerji durumlarına girebilir. Parçacık saymı sbt $\mu=0$



$$Z_{F.D.} = \sum_{n_1, n_2} e^{-\beta(n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2)}$$

$$= e^{-\beta(1 \cdot 0 + 1 \cdot \epsilon)}$$

Grand Bol. Funk. $Z_{F.D.} = 1 + e^{-\beta \epsilon}$

SORU 2)

Bir metalde elektron yoğunluğu $4 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ olarak veriliyor.

(a) Fermi Enerjisini (eV) cinsinden bulunuz. (10p)

(b) Fermi Sıcaklığını (Kelvin) cinsinden bulunuz. (10p)

($k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$) ($1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$) ($h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$) ($m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$)

a) $n = 4 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$ yada $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ kullanılırsa

$$E_F = \frac{h}{8m} \left(\frac{3}{\pi} n \right)^{2/3} = \frac{(6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s})^2}{8 (9,11 \times 10^{-31} \text{ kg})} \left(\frac{3}{\pi} 4 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \right)^{2/3} \text{ den}$$

$$E_F \approx 6,83 \cdot 10^{-19} \text{ J} \text{ yada } \frac{6,83 \cdot 10^{-19}}{1,6 \cdot 10^{-19}} \approx 4,27 \text{ eV} \text{ bulunur.}$$

yada ilk formülde $\hbar = 1,055 \times 10^{-34}$ kullanılırsada aynı sonuç bulunur.

b) $E_F = k_B T_F$ fermi sıcaklığı $T_F = \frac{E_F}{k_B}$

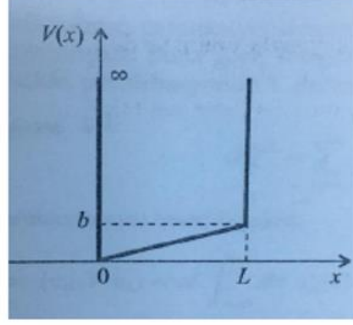
$$T_F = \frac{6,83 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}} \approx 49,492 \text{ K} \text{ yada yaklaşık } 49500 \text{ K}$$

KUANTUM MEKANİĞİ:

SORU 1

(a) Bir boyutlu potansiyel kuyusu probleminde $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$ aralığında $V(x) = 0$ ve bunun dışında $V(x = \infty)$ alınız. Taban durumu dalga fonksiyonunun ($n = 1$ 'e karşılık gelen durum) $\Psi(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \cos \frac{\pi x}{L}$ olduğunu gösteriniz. Taban durumu için $\Delta x \Delta p$ çarpımını bulunuz.

(b) $[0, L]$ aralığındaki sonsuz kuyu potansiyelinin tabanında ufak bir eğim $V(x) = \left(\frac{b}{L}\right) x$ olarak veriliyor (burada $b \ll L$). Enerji özdeğerindeki değişmeyi pertürbasyon yöntemiyle bulunuz.



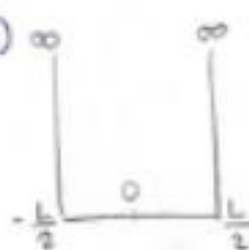
Şekil 1: Sonsuz kuyu potansiyeli tabanındaki $V(x)$ değişimi.

Yol gösterme: Sonsuz kuyu potansiyelinde enerji özdeğeri $\epsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$ ve özfonksiyonu $u_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ olarak bulunur.

Kuantum Mekaniği Cevaplar

1)

a)



$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \infty & -\frac{L}{2} > x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

$-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$ de çözüm $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ veya $\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$

Burada $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ dir. $x = -\frac{L}{2}$ için $\psi(-\frac{L}{2}) = 0$ olmalıdır.

$\psi(-\frac{L}{2}) = A\cos\frac{kL}{2} - B\sin\frac{kL}{2} = 0$ olur. Burada ya $A=0$ olmalı ya da $B=0$ olmalıdır.

$A=0$ için: $\psi(-\frac{L}{2}) = -B\sin\frac{kL}{2}$, $\sin\frac{kL}{2} = 0$ olması için $\frac{kL}{2} = n\frac{\pi}{2}$

(n çift sayı olmalı), $\psi(x) = B\sin(\frac{n\pi}{L}x)$ olur.

$B=0$ ise: $\psi(-\frac{L}{2}) = A\cos\frac{kL}{2} = 0 \Rightarrow \frac{kL}{2} = \frac{n\pi}{2}$ (n tek olmalı).

n 'in çift ve tek olması hallerinin ilisinde de $\frac{kL}{2} = n\frac{\pi}{2}$ dir yani enerji eşittir.

$$\frac{k^2 L^2}{4} = n^2 \frac{\pi^2}{4} \Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} L^2 = n^2 \pi^2 \Rightarrow E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \text{ dir.}$$

Buna göre:
$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos\frac{n\pi}{L}x & n, \text{ tek sayı} \\ B\sin\frac{n\pi}{L}x & n, \text{ çift sayı} \end{cases}$$

Normalleştirme koşulundan:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |\psi(x)|^2 dx = |A|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2\frac{n\pi}{L}x dx = |A|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{1 + \cos\frac{2n\pi}{L}x}{2} dx$$

$$= \frac{|A|^2}{2} \left[\left(x + \frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{L} \right) \right]_{-L/2}^{L/2} = \frac{|A|^2 L}{2} = 1 \Rightarrow A = \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \text{ olur.}$$

Aynı şekilde B de $B = \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2}$ olur.

Taban durumu $n=1$ 'e karşılık gelen dalgafonksiyonu

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \cos \frac{\pi x}{L} \text{ dir.}$$

$$\langle x \rangle = \langle \Psi_{\text{cos}} | x | \Psi_{\text{cos}} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi_{\text{cos}}^* \Psi_{\text{cos}} dx$$

$$\langle x \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2}{L} x \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} x \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx = 0$$

Tek fonksiyon olduğu için integrali sıfır

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} x^2 \left(\frac{1 + \cos \frac{2\pi x}{L}}{2} \right) dx$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{L} \left\{ \frac{x^3}{3} \right\}_{-L/2}^{L/2} + \left(\int_{-L/2}^{L/2} x^2 \cos \frac{2\pi x}{L} dx \right)$$

bu integral için

$$x^2 = u \Rightarrow 2x dx = du, \quad dv = \cos \frac{2\pi x}{L} dx \Rightarrow v = \frac{L}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{L} \text{ yazarsak}$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{L^2}{4\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{3} - 2 \right) \text{ buluruz.}$$

$$\Delta x = \left(\langle x^2 \rangle - \underbrace{\langle x \rangle^2}_0 \right)^{1/2} = \frac{L}{2\pi} \left(\frac{\pi^2}{3} - 2 \right)^{1/2} \text{ olur.}$$

$$\Delta p = (\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2)^{1/2} = -\hbar^2 \int_0^L \frac{2}{L} \cos \frac{\pi x}{L} \frac{d^2}{dx^2} \cos \frac{\pi x}{L} dx$$

$$= -\frac{2\hbar^2}{L} \int \cos \frac{\pi x}{L} \left(-\frac{x^2}{L^2} \right) \cos \frac{\pi x}{L} dx$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2\pi^2\hbar^2}{L^3} \int \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx = \frac{\pi^2\hbar^2}{L^2} \Rightarrow \Delta p = \frac{\pi\hbar}{L}$$

$$\Delta x \Delta p = \frac{L}{2\pi} \left(\frac{\pi^2 - 6}{3} \right)^{1/2} \cdot \frac{\pi\hbar}{L} = \frac{\pi\hbar}{2\pi} \left(\frac{\pi^2 - 6}{3} \right)^{1/2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Böylece $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ olduğu sağlanmış olur.

Cevap 1

b) Sonsuz kuyu potansiyetini V_0 ile gösterirsek
 $H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0$ hamiltonyeninin çözümleri $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$

ve $\Psi_n = \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{L}$ dir.

$V(x)$ pertürbasyon teriminin enerji özdeğerlerine 1. dereceden katkısı

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= (\Psi_n, V\Psi_n) = \int_0^L dx \Psi_n^*(x) V(x) \Psi_n(x) = \frac{b}{L} \int_0^L dx x |\Psi_n(x)|^2 \\ &= \frac{b}{L} \frac{2}{L} \int_0^L dx x \sin^2 \frac{n\pi x}{L} = 2b \underbrace{\int_0^1 du u \sin^2 n\pi u}_{1/4} = \frac{b}{2} \end{aligned}$$

Enerji özdeğerlerinin 1. dereceden yaklaşık çözümü

$$E_n = E_n + V_{nn} = \frac{\hbar^2 n^2}{2mL^2} + \frac{b}{2} \text{ olur.}$$

SORU 2

(a) Kinetik enerji işlemcisi $\hat{E} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ nin Hermitien olduğunu gösteriniz.

(b) Aşağıdaki bir boyutlu harmonik salıncının taban durum enerjisini varyasyon ilkesini kullanarak hesaplayınız.

Yol gösterme: $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ ve deneme dalga fonksiyonunu Gauss eğrisi olarak alınız, $\Psi(x) = Ae^{-bx^2}$.

Cevap 2

a)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{d^2}{dx^2} \Psi dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} \Psi dx \quad \text{ise hermitiktir.}$$

Birinci tarafın integralini alalım. $\Psi^* = u \Rightarrow du = \frac{d\Psi^*}{dx} dx$

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} dx = dv \Rightarrow v = \frac{d\Psi}{dx} \quad \text{olur.}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u dv = uv \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} v du \quad \text{kısımlı integrasyon ile}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{d^2 \Psi}{dx^2} dx = \underbrace{\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{\substack{\text{dalga fonksiyonu} \\ -\infty, +\infty \text{ da} \\ \text{sıfır olur}}} - \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Psi}{dx} \frac{d\Psi^*}{dx} dx}_{\substack{\text{burada tekrar} \\ \text{kısımlı integrasyon}}}$$

$$\frac{d\Psi^*}{dx} = u \Rightarrow du = \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} dx \quad v = \Psi \Rightarrow dv = \frac{d\Psi}{dx} dx \quad \text{olur.}$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Psi}{dx} \frac{d\Psi^*}{dx} dx = - \left[\underbrace{\Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty}}_0 - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} dx \right]$$

integral başına $-\frac{\hbar^2}{2m}$ yi tekrar koyalım

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} \Psi dx \quad \text{olur.}$$

Buna göre $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ işlemcisi hermitiktir.

Cevap 2

b) Normlama koşulundan A yı belirleyelim.

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \Rightarrow A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$$

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \text{ olduğu için}$$

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2} (e^{-bx^2}) dx = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} x^2 dx = \frac{m \omega^2}{8b} \text{ elde edilir.}$$

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m \omega^2}{8b} \text{ olur.}$$

Varyasyon ilkesi gereği E_0 (taban durum enerjisi) bulmak için $\langle H \rangle$ nin b 'ye göre en düşük değerini bulmalıyız.

$$\frac{d}{db} \langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m \omega^2}{8b^2} = 0 \Rightarrow b = \frac{m \omega}{2\hbar} \text{ olur.}$$

Bu değeri $\langle H \rangle$ de yerine koyarsak

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega \text{ olur.}$$

KLASİK MEKANİK:



SORU 1)

Birbirine yay ile bağlanmış iki özdeş basit sarkaçtan oluşan sistemin küçük genlikli salınımları için sarkaç yer değiştirmelerini elde ederek salınım frekansını bulunuz.

Solution The initial conditions are

$$x_1(0) = 0, \quad x_2(0) = A, \quad \dot{x}_1(0) = \dot{x}_2(0) = 0.$$

We start from the vibrational equation of the simple pendulum:

$$ml\ddot{\alpha} = -mg \sin \alpha.$$

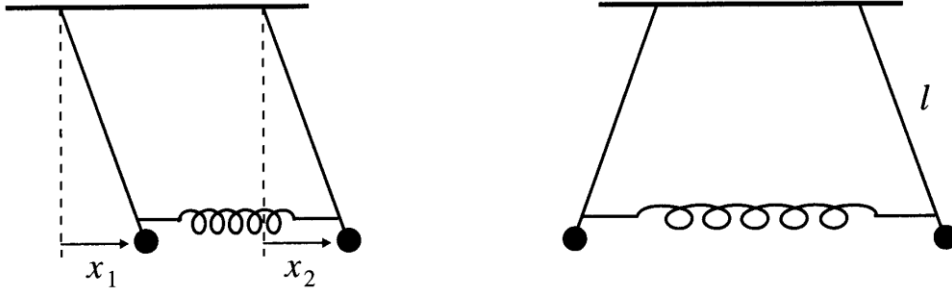


Figure 7.4.

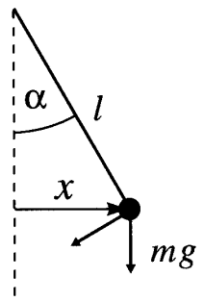


Figure 7.5.

For small amplitudes, we set $\sin \alpha = \alpha = x/l$ and obtain

$$m\ddot{x} = -m\frac{g}{l}x.$$

For the coupled pendulums, the force $\mp k(x_1 - x_2)$ caused by the spring still enters, which leads to the equations

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 &= -\frac{g}{l}x_1 - \frac{k}{m}(x_1 - x_2), \\ \ddot{x}_2 &= -\frac{g}{l}x_2 + \frac{k}{m}(x_1 - x_2).\end{aligned}\tag{7.12}$$

This coupled set of differential equations can be decoupled by introducing the coordinates

$$u_1 = x_1 - x_2 \quad \text{and} \quad u_2 = x_1 + x_2.$$

Subtraction and addition of the equations (7.12) yield

$$\begin{aligned}\ddot{u}_1 &= -\frac{g}{l}u_1 - 2\frac{k}{m}u_1 = -\left(\frac{g}{l} + 2\frac{k}{m}\right)u_1, \\ \ddot{u}_2 &= -\frac{g}{l}u_2.\end{aligned}$$

These two equations can be solved immediately:

$$\begin{aligned}u_1 &= A_1 \cos \omega_1 t + B_1 \sin \omega_1 t, \\ u_2 &= A_2 \cos \omega_2 t + B_2 \sin \omega_2 t,\end{aligned}\tag{7.13}$$

where $\omega_1 = \sqrt{g/l + 2(k/m)}$, $\omega_2 = \sqrt{g/l}$ are the eigenfrequencies of the two vibrations. The coordinates u_1 , u_2 are called *normal coordinates*. Normal coordinates are often introduced to decouple a coupled system of differential equations. The coordinate $u_1 = x_1 - x_2$ describes the opposite-phase and $u_2 = x_1 + x_2$ the equal-phase normal vibration. The equal-phase normal mode proceeds as if the coupling were absent.

For sake of simplicity, we incorporate the initial conditions in the system (7.13). For the normal coordinates we then have

$$u_1(0) = -A, \quad u_2(0) = A, \quad \dot{u}_1(0) = \dot{u}_2(0) = 0.$$

Insertion into (7.13) yields

$$A_1 = -A, \quad A_2 = A, \quad B_1 = B_2 = 0,$$

and thus,

$$u_1 = -A \cos \omega_1 t, \quad u_2 = A \cos \omega_2 t.$$

Returning to the coordinates x_1 and x_2 :

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{2}(u_1 + u_2) = \frac{A}{2}(-\cos \omega_1 t + \cos \omega_2 t), \\ x_2 &= \frac{1}{2}(u_2 - u_1) = \frac{A}{2}(\cos \omega_1 t + \cos \omega_2 t). \end{aligned}$$

After transforming the angular functions, one has

$$\begin{aligned} x_1 &= A \sin\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2}t\right) \sin\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t\right), \\ x_2 &= A \cos\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2}t\right) \cos\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t\right). \end{aligned}$$

We have presupposed the coupling of the two pendulums to be weak, i.e.,

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{g}{l}} \approx \omega_1 = \sqrt{\frac{g}{l} + 2\frac{k}{m}},$$

hence, the frequency $\omega_1 - \omega_2$ is small. The vibrations $x_1(t)$ and $x_2(t)$ can then be interpreted as follows: The amplitude factor of the pendulum vibrating with the frequency $\omega_1 + \omega_2$ is slowly modulated by the frequency $\omega_1 - \omega_2$. This process is called *beat vibration*. Figure 7.6 illustrates the process. The two pendulums exchange their energy with the amplitude modulation frequency $\omega_1 - \omega_2$. If one pendulum reaches its maximum amplitude (energy), the other pendulum comes to rest. This complete energy transfer occurs only for identical pendulums. If the pendulums differ in mass or length, the energy transfer becomes incomplete; the pendulums vary in amplitudes but without coming to rest.

SORU 2

Merkezi potansiyel (sadece merkeze olan uzaklığa bağlı olan potansiyel) etkisindeki parçacığın Hamilton denklemlerini elde ediniz.

Let a particle perform a planar motion under the action of a potential that depends only on the distance from the origin. It is obvious that we should use plane polar coordinates (r, φ) as generalized coordinates.

$$L = T - V = \frac{1}{2}mv^2 - V = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) - V(r).$$

With $p_\alpha = \partial L / \partial \dot{q}_\alpha$, we get the momenta

$$\begin{aligned} p_r &= \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \quad \text{or} \quad \dot{r} = \frac{p_r}{m}, \\ p_\varphi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi} \quad \text{or} \quad \dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2}. \end{aligned}$$

Thus, the Hamiltonian reads

$$H = p_r\dot{r} + p_\varphi\dot{\varphi} - L = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} + V(r).$$

The Hamilton equations then yield

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m}, \quad \dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2},$$

and

$$\dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\varphi^2}{mr^3} - \frac{\partial V}{\partial r}, \quad \dot{p}_\varphi = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0.$$

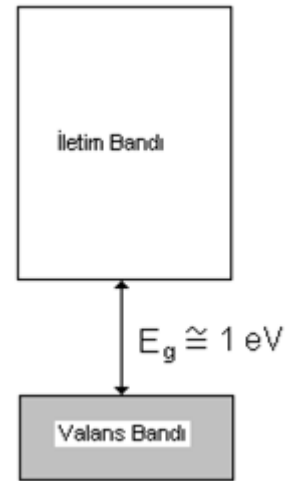
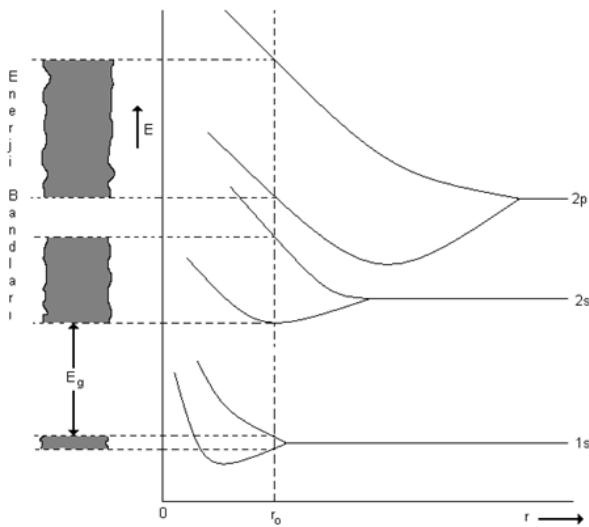
φ is a cyclic coordinate. From this follows the conservation of the angular momentum in the central potential.

SEÇMELİ-1

SORU 1)

Katılardaki enerji bandlarının oluşumu hakkında bilgi veriniz.

Yarıiletkeni oluşturan atomlar birbirlerini etkilemeyecek kadar uzak mesafelerde ise bağımsız atomik enerji seviyelerine sahiptirler. Atomlar birbirlerine yaklaştırıldıklarında ise, elektronlar ve çekirdeklerin etkisiyle elektronlar kendi enerji düzeylerini değiştireceklerdir. Bu yer değiştirmeler, Pauli Dışarlama İlkesine göre olacaktır. Bu ilkeye göre; nasıl bir atomda aynı kuantum sayılarına sahip iki elektron bulunamaz ise, katı içindeki elektronlardan da aynı kuantum sayılarına sahip iki elektron bulunamaz. Dolayısıyla atomun enerji seviyeleri arasında belli yarılmalar meydana gelecektir. Yani; izole edilmiş atomların bulunduğu tek enerji seviyeleri, katı molekülü için birbirine çok yakın aralıklı çok sayıda enerji düzeyine genişleyecektir. Bu sürekli enerji seviyelerine enerji bantları denir. Yani, atomlardaki enerji düzeylerine karşılık katılarda da enerji bantları oluşmaktadır. Enerji bantları birbirlerinden yasak enerji aralığı (E_g) ile ayrılır ve bu yasak aralığında elektron bulunamaz. Atomların dış kabuk elektronlarının bulunduğu en üst dolu bant, valans bandı olarak adlandırılır. Valans bandından sonraki boş bant ise, iletim bandı olarak adlandırılır ve elektronların geldiklerinde yerleşebilecekleri enerji seviyelerini içerir.



Bir kristalde ayrıntı atomik enerji seviyelerinden Enerji Bandı oluşumu ve şematik band yapısı.

SORU 2)

Yarı iletkenlerde optik soğurma hakkında bilgi vererek temel soğurmayı açıklayınız.

CEVAP 2)

Yarıiletkenlerin bant yapılarını araştırmak için en yaygın ve basit yöntem, soğurma spektrumlarını ölçmektir. Soğurma işleminde, enerjisi bilinen bir foton numune üzerine gönderilir. Enerjisi, kristalin enerji aralığından büyük olan fotonlar soğurulurken küçük olanlar iletilir. Bu foton kristal tarafından soğurulduğunda, düşük enerji seviyesindeki bir elektronu daha yüksek bir enerji seviyesine uyarır. Bu sayede gönderilen foton ile iletilen fotonların enerjileri arasındaki farklar bize yarıiletkenin bant aralıkları hakkında bilgi verir.

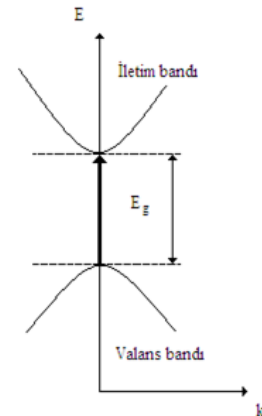
Kalınlığı l olan numuneye I_0 şiddetli ışın gönderilirse, bu ışın I şiddeti ile numuneyi geçecektir. I ve I_0 arasındaki ilişki yasasıyla,

$$I = I_0 e^{-\alpha l} \quad (2.2)$$

ile verilir. Burada α soğurma katsayısıdır. Soğurmanın maksimum olduğu durumda, numuneyi geçen ışının şiddeti sıfır olur.

Yarıiletken maddenin yapısı gereği gelen ışının soğurulması farklı şekillerde, bazen de farklı soğurma olayları aynı anda gerçekleşmektedir.

Temel soğurma olayı; banttan banda geçişi temsil eder, soğurmada hızlı bir artışla kendisini gösterir, valans bandındaki bir elektronun kristale gelen ışıandan bir foton soğurarak iletim bandına geçmesi olarak adlandırılabilir ve yarıiletkenin yasak enerji aralığını belirlemede kullanılabilir. Bunun için, fotonun enerjisinin yasak enerji aralığına eşit veya ondan daha büyük olması gerekir. Ayrıca; fotonun momentumu kristal momentumuna göre kıyaslanamayacak derecede küçük olacağından, foton soğurma işleminde elektronun momentumu korunmalıdır. Gelen fotonun frekansı ν ise; $h\nu \geq E_g$ soğurma gerçekleşecektir.



SEÇMELİ-2

SORU 1)

Kuantum Kimyasal Hesaplama ve Yöntemleri nelerdir? Kısaca açıklayınız.

Hesaplamalı Kimya son yıllarda kimya alanında güçlü bir araç haline gelmiştir. Sayısal hesaplamaların ve simülasyonların doğruluğunda ve verimliliğinde önemli bir artışa yol açan bilgisayar bilimindeki muazzam gelişme, kuantum teorisinin kimyadaki problemlere uygulanmasını artırmıştır. Bu bağlamda hesaplamalı kimya yöntemleri, kimyasal olayları anlamak ve tahmin etmek amacıyla günümüzde çoğunlukla senteze yönelik olanlar da dahil olmak üzere birçok kimyagerin araç setine girmiştir. Teorik kimya terimi kimyanın matematiksel açıklaması olarak tanımlanırken hesaplamalı kimya terimi ise genellikle bir matematiksel yöntemin bilgisayarda uygulanmak üzere otomatikleştirilebilecek kadar iyi geliştirildiği durumlarda kullanılmaktadır.

Kuantum mekaniği, elektronların davranışının matematiksel bir tanımını vermektedir. Ancak kuantum mekaniği denklemleri (Schrödinger'in Dalga Fonksiyonu), Hidrojen atomu dışındaki çok elektronlu kimyasal sistemler için tam olarak çözülememiştir. Bu nedenle, hesaplamalı kimya alanı yaklaşık çözümler etrafında inşa edilmiştir. Bu çözümlerden bazıları çok kaba ve diğerlerinin ise şimdiye kadar yapılmış herhangi bir deneyden daha doğru olması bekleniyor. Bu durumun çeşitli sonuçları bulunmaktadır. İlk olarak hesaplamalı kimyagerler, kullanılan her bir yaklaşım ve sonuçların ne kadar doğru olmasının beklendiği hakkında bilgiye ihtiyaç duyar. İkincisi, çok doğru sonuçlar elde etmek son derece güçlü bilgisayarlar gerektirir. Üçüncüsü ise, eğer denklemler analitik olarak çözülebilirse süper bilgisayarlarda yapılan işlerin çoğu, bir kişisel bilgisayarda daha hızlı ve daha doğru bir şekilde gerçekleştirilebilir (1).

Kuantum kimyasal hesaplamalar, moleküller arası etkileşim bileşenlerini ve kimyasal reaksiyonları ölçmek için kullanılabilir. Son yıllarda, mikroskobik moleküler verilerden makroskobik sistemlerin özelliklerini tahmin etmek için veriye dayalı araştırmalar da yapılmıştır (2–5). Bunların yanı sıra hesaplamalı olarak araştırılan diğer konular şunlardır:

Moleküler Geometri: Molekül şekillerinin, bağ uzunluklarının, açılarının ve dihedrallerinin belirlenmesini sağlar.

Moleküllerin Enerjileri ve Geçiş Durumları (Transition States): Bu bize kimyasal dengede hangi izomerin tercih edildiğini ve (geçiş durumu ve reaktan enerjilerinden) bir reaksiyonun ne kadar hızlı ilerlemesi gerektiğini söylemektedir.

Kimyasal Reaktivite: Örneğin, elektronların nerede yoğunlaştığını (nükleofilik bölgeler) ve nereye gitmek istediklerini (elektrofilik bölgeler) bilmek, çeşitli reaktif türlerinin bir moleküle nereye saldıracağını tahmin edilmesine yardımcı olur. Bunun özellikle yararlı bir uygulaması, katalizörlerin olası etki modunun aydınlatılmasıdır.

IR, UV ve NMR Spektrumları: Bunlar da hesaplamalı kimya yöntemleriyle hesaplanabilir ve eğer molekül bilinmiyorsa, bu sayede onu oluşturmaya çalışan biri ne arayacağını bilir.

Substrat — Enzim Etkileşimi: Bir molekülün, bir enzimin aktif bölgesine nasıl uyduğunu görmek, daha iyi ilaçlar tasarlamak için bir yaklaşımdır.

Maddelerin Fiziksel Özellikleri: Bunlar, moleküllerin özelliklerine ve moleküllerin yığın halindeki malzemede nasıl etkileşime girdiğine bağlıdır. Örneğin bir polimerin mukavemeti ve erime noktası, moleküllerin birbirine ne kadar iyi uyduğuna ve aralarındaki kuvvetlerin ne kadar güçlü olduğuna bağlıdır (6).

Kuantum mekaniğinin varsayımları ve teoremleri, ilk prensiplerden (first principles) gözlemlenebilir kimyasal özelliklerin tahmini için sağlam bir temel oluşturur. Diğer bir ifadeyle kuantum mekaniğinin temel varsayımları, mikroskobik sistemlerin ve sistemin tüm fiziksel özelliklerini tamamen karakterize eden ‘dalga fonksiyonları’ ile tanımlandığını ileri sürmektedir. Özellikle sisteme dalga fonksiyonuna uygulandığında, belirli bir değer veya değer aralığı (skaler, vektör vb.) sergileyen sistemin bulunma

olasılığının tahmin edilmesine olanak tanıyan, gözlemlenebilir her bir fiziksel şeye karşılık gelen kuantum mekaniksel 'operatörler' bulunmaktadır.

SORU 2)

Kristallerde bağlanma türlerini yazınız ve bunları kısaca açıklayınız.

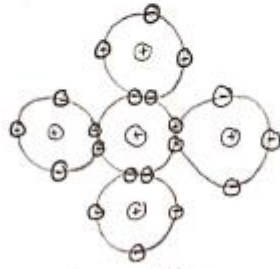
En kuvvetli bağlanmadan zayıf bağlanmaya doğru aşağıdaki gibidir.

- 1) İyonik bağlanma
- 2) Kovalent (değerlik) bağlanma
- 3) Metalik bağlanma
- 4) Hidrojen bağlanması
- 5) Van der Waals bağlanması

1) İyonik bağlanma: İyonik bağ, zıt yüklü iyonların elektrostatik etkileşmesinden kaynaklanır. NaCl ve CsCl en yaygın iyonik kristal yapı türleridir. Bir iyon, en yakın komşu asal gaz atomu gibi benzer dış elektron kabuğuna sahip pozitif veya negatif yüklü bir atom veya molekül olarak düşünülebilir. Atom elektron kaybederek veya elektron alarak iyonik hale gelir. NaCl kristalini ele alırsak, Na iyonik olmak için bir elektronu komşu klor atomuna vererek ve klor da bir elektron alarak iyonik bağlanma oluşturur. İyonik kristallerin kohesif enerjisi 10 eV/atom mertebesinde olup, diğer kristal bağlanma türlerine göre oldukça kuvvetlidir.

2) Kovalent bağlanma: Kovalent bağ, bir veya daha fazla elektron çifti iki atom tarafından paylaşılmasında oluşur. Elmas yapıda bu bağlanma

tipi olmaktadır. Her C atomu 4 son yörünge elektronunu en yakın 4 atomla ortaklaşa kullanır. Böylece ikiser atomlu 4 kovalent bağ oluşur, son kabuk dalar ve $10e^-$ kararlı asal gaz yapısı oluşur.



Elmas Yapısı

Kovalent bağ çok güçlü olup, yđnelme aşırı derecede güçlüdür. Kuuetü bir bağ olup, $10e^-$ /atom mertebesinde dir.

③ Metalik Başlanma; Metal atomlardaki valans elektronları katılarda iletim elektronu olurlar. Bu valans elektronları serbest kalarak kristal içinde elektron gazı veya bulutu oluşturun. Genge, bu elektron gazı içine gömülmüş kapalı kapalı kabuklara sahip $+$ (artı) yüklü iyon kolları kalır. Eksi yüklü elektron bulutu ile artı yüklü iyon kolları arasındaki elektrostatik etkileşme sonunda metalik başlanma gerçekleşir. Metalik bağ, iyonik ve kovalent bağdan oldukça zayıftır. $1-5 eV$ /atom mertebesinde dir.

④ Hidrojen Başlanması; Hidrojen sadece bir tane elektrona sahiptir ve bu yüzden kovalent olarak bir atom değeri başlayabilir. Ancak ikinci atomun elektronegatifliği yüksek ise, (F, O, N, Cl, Br, I) o zaman hidrojenin elektronu zamanının