FZM 306: Kuantum Mekaniği II

5. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

Kuantum Mekaniği ve Atom Fiziği Ders Notları
Z. Zekeriya AYDIN
Ankara Üniversitesi

HİDROJEN ATOMU

Bu bölümde,

* En temel kuantum mekaniksel sistem olan hidrojen atomu incelenecektir.

* Hidrojen atomu, Coulomb kuvvetiyle etkileşen bir proton ve elektrondan oluşmuş iki parçacıklı bir sistemdir. Bu sistemi tek-parçacık problemine indirgeyerek çözümler aranacaktır.

* Bir merkezcil potansiyel içinde hareket eden tek parçacık Schrödinger denklemini, küresel koordinatlarda **ışınsal** ve **açısal** değişkenlerine ayıracağız.

* Açısal kısım için ayrıntılı bir **açısal momentum analizi** verilecek ve burada diferansiyel denklem çözmek yerine, bir cebirsel yöntem olan işlemci yöntemi kullanılacaktır. Sonuçta, **küresel harmonikler** adını alan açısal dalga fonksiyonları bulunacaktır.

* Son olarak ışınsal Schrödinger denklemini ele alarak hidrojen atomunun kesikli enerji spektrumu ve ışınsal dalga fonksiyonları elde edilecektir.

Kütle Merkezi Koordinatlarında Değişkenlerine Ayırma

Çok parçacıklı bir sisteme hiçbir dış kuvvet uygulanmazsa (yani sadece karşılıklı iç kuvvetler varsa), sistemin kütle merkezi sabit bir hızla (V_{KM}) hareket eder. Bu sabit V_{KM} hızıyla giden bir gözlem çerçevesinden bakıldığında, parçacıklar sisteminin kütle merkezi (KM) durgun görünür. Bu gözlem çerçevesine **KM çerçevesi** denir.

KM çerçevesinde parçacıklar KM etrafında hareket ederler ve birinin herhangi bir andaki konumunun belirtilmesi, diğerininkini tam olarak belirtir.

Dolayısıyla iki-parçacık problemi tek parçacık problemine indirgenmiş olur.

Daha önce tek boyutta yapılan indirgeme şimdi üç boyutta yapılacaktır.

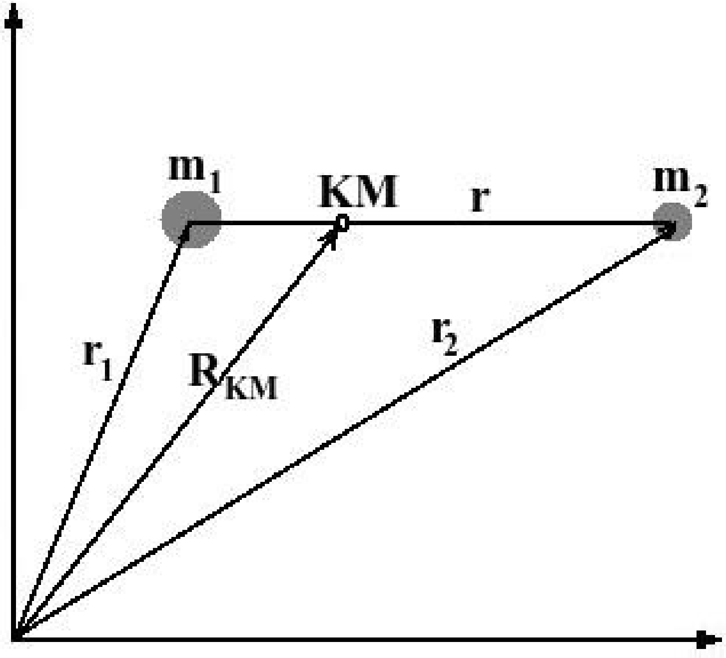
m_1 kütleli parçacığın konumu $\mathbf{r}_1$ ve momentumu $\mathbf{p}_1$, m_2 kütleli parçacığın konumu $\mathbf{r}_2$ ve momentumu $\mathbf{p}_2$ olsun. $\mathbf{r}_2$-$\mathbf{r}_1$ farkına bağlı Coulomb potansiyeline bağlı bu iki parçacıklı sistemin Hamiltoniyeni

$$H=\frac{P_1^2}{2m_1}+\frac{P_2^2}{2m_2}+V\left(r_2-r_1\right)$$

biçimindedir. Schrödinger denklemi de

$$-\hbar^2\left(\frac{1}{2m_1}\nabla_1^2+\frac{1}{2m_2}\nabla_2^2+V\left(r_2-r_1\right)\right)\psi\left(r_1,r_2\right)=E\psi\left(r_1,r_2\right)$$

olarak yazılır. Bu denklem $\mathbf{r}_1$ ve $\mathbf{r}_2$ koordinatlarına göre değişkenlerine ayrılamaz fakat KM korrdinatlarına göre değişkenlerine ayrılabilir.



$$R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}$$

$$r = r_2 - r_1$$

Kütle merkezi koordinatı **R** ve bağıl koordinat **r** cinsinden Schrödinger denklemi

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right) \psi(R,r) = E\psi(R,r)$$

şekline indirgenir.

Kütle merkezi koordinatlarında yazılan Schrödinger denkleminin

$$\psi(R,r)=\Phi(R)U(r)$$

şeklinde çözümü aranırsa

$$\frac{-\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Phi(R)=E_{KM}\Phi(R)$$

ve

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2+V(r)\right]U(r)=\epsilon U(r)$$

gibi iki denklem elde edilir. Burada

$$E=E_{KM}+\epsilon \qquad K^2=\frac{2M}{\hbar^2}E_{KM}$$

Kütle merkezinin (yani tüm sistemin topluca) hareketiyle ilgili olan denklemin çözümü

$$\Phi\left(R\right)=Ce^{iK.R}$$

dir. Bu düzlem dalga çözümü, klasik mekanikte kütle merkezinin V_{KM} sabit hızıyla ötelenmesine karşı gelir. KM çerçevesinde

$$\hbar \boldsymbol{K}=\boldsymbol{P}=M\,\dot{\boldsymbol{R}}$$

toplam momentumu sıfırdır. Dolayısıyla bu çerçevede iki parçacığın sadece KM dolayındaki bağıl hareketi kalır: **V(r) potansiyeli içinde bulunan μ indirgenmiş kütlesinin hareketi.**