FZM 306: Kuantum Mekaniği II

6. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

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

Küresel Simetrik Potansiyellerde Schrödinger Denklemi

+Ze yüklü çekirdek ve -e yüklü elektrondan oluşan sistemin potansiyeli küresel simetrik Coulomb potansiyelidir:

$$V\left(\left|r\right|\right)=\frac{-Ze^{2}}{\left|r\right|}$$

Z=1 H atomu,

Z=2 He^{+} iyonu,

Z=3 Li^{+2} iyonu

için kütle merkezi neredeyse çekirdekle çakışır ve indirgenmiş kütle ise neredeyse elektronun kütlesine eşittir. Dolayısıyla çekirdeği durgun sayabiliriz ve bir önceki bölümde elimizde kalan denklemi çekirdeğin Coulomb alanı içinde hareket eden elektronun Schrödinger denklemi olarak alabiliriz.

$$H = \frac{P^2}{2\mu} + V(r)$$

Hamiltoniyeni, uzaysal dönmeler altında değişmezdir. Hamiltoniyenin dönmeler altındaki değişmezliği, bir korunum yasası verir: ***Açısal momentumun korunumu***.

Bunu göstermek için z ekseni etrafında θ açılı sonlu bir dönme düşünelim:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Bunun sonsuz küçük dθ dönmesi halindeki ifadesi

$$x' = x - y\,d\theta$$

$$y' = y + x\,d\theta$$

$$z' = z$$

dir.

Schrödinger denklemini x', y', z' sisteminde yazalım:

$$HU\,(x', y', z') = \epsilon U(x', y', z')$$

$$HU(x - yd\theta, y + xd\theta, z) = \epsilon U(x - yd\theta, y + xd\theta, z)$$

$U(x - yd\theta, y + xd\theta, z)$ fonksiyonunu x, y, z noktası civarında seriye açıp ikinci ve daha yüksek terimleri ihmal edersek

$$H\left[U(x,y,z) - d\theta y\frac{\partial U}{\partial x} + d\theta x\frac{\partial U}{\partial y}\right] = \epsilon\left[U(x,y,z) - d\theta y\frac{\partial U}{\partial x} + d\theta x\frac{\partial U}{\partial y}\right]$$

elde ederiz. İlk terimler birbirini götürür ve geriye

$$H\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)U(x,y,z) = \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\epsilon U(x,y,z)$$

eşitliği kalır. Burada

$$L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Burada

$$L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

olmak üzere

$$\left[H, L_z\right] = 0$$

yerdeğiştirme bağıntısı bulunur. Açısal momentum bileşenleri

$$\vec{L} = \hat{i}\left(yP_z - zP_y\right) + \hat{j}\left(zP_x - xP_z\right) + \hat{k}\left(xP_y - yP_x\right)$$

açılımından elde edilir. z ekseni yerine x veya y ekseni etrafında sonsuz küçük dönmeler alınırsa, benzer şekilde

$$\left[H, L_x\right] = 0 \qquad \text{ve} \qquad \left[H, L_y\right] = 0$$

bağıntıları bulunur. Bu bağıntılar açısal momentumun üç bileşenininve dolayısıyla açısal momentum vektörünün hareket sabiti olduğunu söyler.

Buradan L^{2}' nin de hareket sabiti olduğu anlaşılır:

$$\left[H,L^{2}\right]=0$$

Diğer taraftan, açısal momentum bileşenlerinin aşağıdaki yer değiştirme bağıntılarını sağladıkları gösterilebilir:

$$\left[L_x,L_y\right]=i\hbar L_z \qquad \left[L_y,L_z\right]=i\hbar L_x \qquad \left[L_z,L_x\right]=i\hbar L_y$$

Bu bağıntılardan, L' nin üç bileşeninin de L^{2} ile yerdeğiştirdiği ortaya çıkar

$$\left[H,L^{2}\right]=0$$

Türetilen bu bağıntılardan, kendi aralarında yerdeğiştiren tam işlemciler kümesi, H, L^2, L_z olarak seçilebilir. Dolayısıyla bu üç işlemci ortak özfonksiyonlara sahiptir. Hidrojen atomuyla ilgili tüm bilgiler, bu ortak özfonksiyonlar aracılığıyla elde edilirler.

Bu özfonksiyonları bulmak için aşağıdaki özdeşliği yazalım:

$$L^2 + (r\,.\,p)^2 = r^2\,p^2 + i\,\hbar\,r\,.\,p$$

Bu özdeşlikten $\mathbf{p}^2$ çekilirse

$$p^2 = \frac{-1}{r^2}\left[\hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r} - L^2\right]$$

$$\frac{p^2}{2\mu} = \frac{-\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - L^2\right]$$

ifadesi bulunur ve

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(r)\right]U(r) = EU(r)$$

Schrödinger denkleminde yerine yazılır.

Böylece

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{L^2}{\hbar^2 r^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]U(r)=EU(r)$$

denklemi elde edilir. $\mathbf{L}^2$ küresel koordinatlarda yalnızca θ ve φ' ye bağlı olduğundan

$$U(r,\theta,\phi)=R(r)\,Y(\theta,\phi)$$

çözümü yukarıdaki denklemde yerine konulursa

$$\frac{r^2}{R(r)}\left[\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)+\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right]R(r)=\frac{1}{\hbar^2 Y(\theta,\phi)}L^2 Y(\theta,\phi)$$

denklemine ulaşılır.

Bu ifadede sol taraf sadece r değişkenine sağ taraf ise θ ve φ' ye bağlı olduğundan bu denklemin sağlanması için eşitliğin her iki tarafının da bir sabite eşit olmasıyla mümkündür: λ.

$$L^2 Y(\theta,\phi) = \lambda \hbar^2 Y(\theta,\phi)$$

ve

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right]R(r)+\left[V(r)+\frac{\lambda\hbar^2}{2\mu r^2}\right]R(r)=ER(r)$$

denklemleri elde edilir.