FZM 306: Kuantum Mekaniği II

7. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

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

Açısal Momentumun Analizi

Bu kesimde açısal momentumun kuantum teorisini en temel yanlarıyla inceleyeceğiz. L^2 ve L_z' nin özdeğer denklemini çözmeye çalışacağız.

Küresel koordinatların

$$x = r \sin\theta \cos\varphi , \qquad y = r \sin\theta \sin\varphi , \qquad z = r \cos\theta$$

tanımını kullanarak açısal momentum bileşenleri küresel koordinatlarda

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$L_x = i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_y = i\hbar \left(-\cos\phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

ve

L^2 işlemcisi de

$$L^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

olarak bulunur. Görüldüğü gibi L^2 yalnızca θ ve φ' ye bağlıdır.

Cebirsel yöntemle açısal momentum analizinde çok önemli rol oynayan

$$L_+ = L_x + iL_y \qquad \text{ve} \qquad L_+ = L_x - iL_y$$

işlemcilerini tanımlayalım. L_+ ve L_- işlemcileri Hermitik değillerdir:

$$(L_+)^\dagger = L_- \qquad (L_-)^\dagger = L_+$$

Bu iki işlemci ile ilgili aşağıdaki yerdeğiştirme bağıntıları hemen gösterilebilir:

$$[L_z , L_+] = \hbar L_+$$

$$[L_z , L_-] = -\hbar L_-$$

$$[L_+ , L_-] = 2\hbar L_z$$

$$[L^2 , L_\pm] = 0$$

Son olarak da açısal momentumun karesi

$$\begin{aligned} L^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\ &= L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z \\ &= L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z \end{aligned}$$

şeklinde çeşitli ifadelerle yazılabilir.

L_z ve $\mathbf{L}^{2}$' nin özdeğer denklemlerini çözmeye başlayabiliriz.

$$L_z\, Y(\theta, \varphi) = m\hbar Y(\theta, \varphi)$$

$$L^2\, Y(\theta, \varphi) = \ell\,(\ell+1)\hbar^2 Y(\theta, \varphi)$$

Önce L_z için olan denklemi çözmeye çalışalım.

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y(\theta,\phi) = m\hbar\, Y(\theta,\phi)$$

Bu denklem

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$$

şeklinde θ ve φ değişkenlerine ayrılarak çözülebilir:

$$\frac{d}{d\phi}\Phi(\phi) = im\Phi(\phi)$$

Bu diferensiyel denklemin çözümü

$$\Phi(\phi) = Ce^{im\phi}$$

şeklinde olup C bir boylandırma sabitidir: $C = 1/(2\pi)^{1/2}$. Çözümün φ' deki değeriyle φ+2π' deki değerinin aynı olması gerektiğinden *m* yalnızca

$$m = 0, \pm 1, \ \pm 2, \pm 3, \ldots$$

tamsayı değerlerini alır. Φ(φ) özfonksiyonları birim boylu ve karşılıklı diktirler:

$$\langle \Phi_m | \Phi_{m'} \rangle \equiv \int_0^{2\pi} \Phi_m(\phi) \Phi_{m'}(\phi)\, d\phi = \delta_{mm'}$$

Y(θ, φ) çözümlerini $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ şeklinde ℓ ve *m* indisleriyle yazabiliriz.

$$< Y_{\ell' m'} | \ Y_{\ell m} > = \delta_{\ell \ell'} \delta_{mm'}$$

Şimdi de

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$$

ifadesini

$$L^2\, Y(\theta, \varphi) = \ell\,(\ell + 1)\hbar^2 Y(\theta, \varphi)$$

denkleminde yerine yazarsak

$$-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta_{lm}(\theta) = l(l+1)\hbar^2\,\Theta_{lm}(\theta)$$

Şeklinde ***bağlı Legendre diferensiyel denklemi*** elde edilir. Bu denklem çözülerek $\Theta_{\ell m}(\theta)$ fonksiyonları bulunur ve $\Phi_m(\varphi)$ ile birleştirildiğinde $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ küresel harmonikleri elde edilmiş olur.

Burada **L**^{2}' nin özdeğer denklemi işlemci yöntemiyle çözülecek.

$$<Y_{\ell m}|\mathbf{L}^2 Y_{\ell m}> = <L_x Y_{\ell m}|L_x Y_{\ell m}> + <L_y Y_{\ell m}|L_y Y_{\ell m}> + <L_z Y_{\ell m}|L_z Y_{\ell m}>$$

skaler çarpımından

$$\ell(\ell+1) \geq 0$$

sonucu bulunur. Şimdi de $(L_\pm Y_{\ell m})$ fonksiyonlarına $\mathbf{L}^2$ ve L_z ' yi uygulayalım:

$$\mathbf{L}^2(L_\pm Y_{\ell m}) = \ell(\ell+1)\hbar^2(L_\pm Y_{\ell m})$$

$$\mathbf{L}_Z(L_\pm Y_{\ell m}) = (m \pm 1)\hbar(L_\pm Y_{\ell m})$$

Bu sonuçlardan sonra

$$L_\pm Y_{\ell m} = C_\pm(\ell, m) Y_{\ell, m\pm 1}$$

yazabiliriz.

$L_\pm$ işlemcilerine **arttırma** ve **azaltma** işlemcileri (ya da **yükseltme** ve **alçaltma** işlemcileri) genel olarak da **basamak** işlemcileri adları verilir.

$L_+Y_{\ell m}$ ve $L_-Y_{\ell m}$ fonksiyonlarının

$$<L_+Y_{\ell m}|L_+Y_{\ell m}>=<Y_{\ell m}|L_-L_+Y_{\ell m}> \geq 0$$

$$<L_-Y_{\ell m}|L_-Y_{\ell m}>=<Y_{\ell m}|L_+L_-Y_{\ell m}> \geq 0$$

kendileriyle skaler çarpımlarına bakacak olursak

$$\ell(\ell+1) \geq m(m+1)$$

$$\ell(\ell+1) \geq m(m-1)$$

eşitliklerini buluruz. Bu da

$$\ell \leq m \leq \ell$$

sınırlamasına yol açar.

$C_\pm$ boylandırma katsayılarını bulmak için

$$<L_\pm Y_{\ell\, m} | L_\pm Y_{\ell\, m}> = |C_\pm(\ell, m)|^2 < Y_{\ell\, m\pm1} | Y_{\ell\, m\pm1}> = |C_\pm(\ell, m)|^2$$

ifadesine bakarsak

$$C_+(l,m) = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}$$

$$C_-(l,m) = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}$$

olarak bulunurlar.

$L_\pm$ işlemcilerinin diferensiyel ifadeleri de

$$L_\pm(l,m) = \hbar\, e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

şeklinde verilir.

$L_\pm$ işlemcisini $Y_{\ell\ell}$' ye uygularsak sıfır buluruz: $L_\pm Y_{\ell\ell} = 0$.

$$\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\Theta_{ll}(\theta)e^{il\phi} = 0$$

diferensiyel denkleminin çözümünden

$$\Theta_{ll}(\theta) = C(\sin\theta)^l$$

bulunur. Böylece

$$Y_{ll}(\theta,\phi) = A(\sin\theta)^l e^{il\phi}$$

küresel harmoniği elde edilir. Bu fonksiyona L_- işlemcisini uygulaya uygulaya $Y_{lm}(\theta, \varphi)$' yi elde ederiz. Bu fonksiyonları, bağlı Legendre çok terimlileri cinsinden ifade edebiliriz:

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m\left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}\right)^{1/2} P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}$$