FZM 306: Kuantum Mekaniği II

8. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

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

Işınsal Denklemin Çözümü

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

Bu özdeğer denkleminin, hangi E değerleri için fiziksel olarak kabul edilebilir çözümleri bulunduğunu saptamaya çalışacağız. $V(r)=-Ze^2/r$ alacağız ve bağlı durumları, $E<0$, inceleyeceğiz: $E=-|E|$.

$$k=\sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}} \qquad \lambda=\frac{Ze^2}{\hbar}\sqrt{\frac{\mu}{2|E|}}=\frac{2\mu Ze^2}{k\hbar^2} \qquad \rho=kr$$

tanımlamalarını yaparsak ışınsal denklem

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)R(\rho)+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R(\rho)=0$$

halini alır.

Bu denklemi çözmek için $R(\rho)$' nun büyük ve küçük ρ' lardaki davranışlarına bakılır.

Büyük ρ' larda ($\rho \to \infty$)

$$R(\rho) \to e^{-\rho/2}$$

ve küçük ρ' larda ($\rho \to 0$)

$$R(\rho) \to \rho^{\ell}$$

asimtotik davranışlarını buluruz.

Bu davranışları gözönünde tutarak artık ışınsal denklem için

$$R(\rho) = \rho^{\ell}\ e^{-\rho/2}\ H(\rho)$$

biçiminde çözüm arayabiliriz.

H(ρ)' nun sağlayacağı diferensiyel denklem

$$\rho \frac{d^2 H}{d\rho^2} + [2l + 2 - \rho] \frac{dH}{d\rho} + [\lambda - l - 1] H = 0$$

olarak bulunur. Bu denklemi çözmek için H(ρ)' yu

$$H(\rho) = a_0 + a_1 \rho + a_2 \rho^2 + \ldots = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \rho^s$$

şeklinde ρ' nun bir kuvvet serisi olarak alıp a_s açılım katsayılarını bulmaya çalışırsak,

$$a_{s+1} = \frac{s + l + 1 - \lambda}{(s+1)(s+2l+2)} a_s$$

yineleme bağıntısını elde ederiz. a_{s+1}/a_s' nin ∞' daki davranışı e^{ρ}' nun açılımında çok yüksek kuvvetli ardarda gelen iki terimin katsayılarının oranıyla aynıdır.

Dolayısıyla H(ρ)' nun $\rho \to \infty$' daki davranışı e^{ρ} şeklinde olacağından R(ρ) ifadesi $\rho \to \infty$ için

$$R(\rho) \to \infty$$

olur. Oysa ki fiziksel çözüm halinde $\rho \to \infty$ için $R(\rho) \to 0$ olmalıdır. Bunun için de H(ρ) kuvvet serisinin sonlu terim içermesi, yani belirli kuvvette serinin kesilmesi gerekir: $s = n'$ için $a_{n'+1}=0$ olmalıdır. Yani

$$\lambda = n' + \ell + 1 \equiv n$$

olmalıdır. Verilen bir n değeri için ℓ, n-1 değerini aşamaz:

$$\ell = 0, 1, 2, \ldots, n-1$$

Bu bağıntı aynı zamanda bize enerji özdeğerlerini verir:

$$E_n = -|E_n| = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad , \quad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

Enerji özdeğerlerini, α ince yapı sabiti ve durgun kütle enerjisi cinsinden

$$E_n = -\frac{1}{2}\left(\mu c^2\right)\frac{\left(Z\alpha\right)^2}{n^2}$$

ve $a = \hbar^2/\mu e^2$ cinsinden

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{\left(a/Z\right)^2 n^2}$$

şeklinde yazabiliriz.

Dikkat edilirse enerji sadece n' ye bağlı olup ℓ ve m kuantum sayılarına bağlı değildir. Verilen n değeri için, aynı n' li fakat farklı ℓ ve m' li tüm durumlar aynı enerjilidir; yani enerji düzeyleri çok katmerlidir. **Verilen bi *n* değeri için enerjideki katmerlilik sayısı n^2' dir.**

Bağlı Laguerre çokterimlilerinin sağladığı

$$\rho \frac{d^2}{d\rho^2} L_q^p(\rho) + [p+1-\rho] \frac{d}{d\rho} L_q^p(\rho) + [q-p] L_q^p(\rho) = 0$$

sağladığı diferensiyel denklemin $p=2\ell+1$ ve $q=n+l$ değerleri için

$$\rho \frac{d^2 H}{d\rho^2} + [2l+2-\rho] \frac{dH}{d\rho} + [\lambda-l-1] H = 0$$

ifadesiyle aynı olduğu görülür. Bu nedenle H(ρ) L_{n+l}^{2l+1} çok terimlilerinden başka bir şey değildir. Dolayısıyla ışınsal dalga fonksiyonları hidrojen ve hidrojen benzeri atomlar için

$$R_{nl}(r) = -\sqrt{\left(\frac{2Z}{an}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\, e^{-Zr/an} \left(\frac{2Z}{an} r\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Z}{an} r\right)$$

olarak yazılabilir.

Hidrojen Atomunun Dalga Fonksiyonları

Hidrojen atomunun elektronunun tam dalga fonksiyonları

$$U_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\phi)$$

olup, buradaki n, ℓ, m kuantum sayıları

$n=1, 2, 3, \dots, \infty$ baş kuantum sayısı

$\ell= 0, 1, 2, \dots, n\text{-}1$ açısal momentum kuantum sayısı

$m= -\ell, -\ell+1, \dots, +\ell$ manyetik kuantum sayısı

değerlerini ve adlarını alırlar. $U_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$ fonksiyonları H, $\mathbf{L}^2$, ve L_z işlemcilerinin ortak özfonksiyonlarıdır:

$$HU_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)=E_n U_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$$
$$\mathbf{L}^2 U_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)=\ell(\ell+1)\hbar^2 U_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$$
$$\mathbf{L}_z U_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)=m\hbar\, U_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$$

Bu özfonksiyonlar 1' e boylandırılmıştır:

$$\langle U_{n'l'm'} | U_{nlm} \rangle \equiv \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} U_{n'l'm'}(r,\theta,\phi)\, U_{nlm}(r,\theta,\phi)\, r^2 dr d\Omega = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

Küresel harmoniklerin 1' e boylandırılması düşünülürse

$$\int_0^{\infty} r^2 R_{n'l}(r)\, R_{nl}(r)\, dr d\Omega = \delta_{nn'}$$

şeklinde boylandırıldıkları bulunur. Herhangi bir durumda bulunan bir atomun ortalama yarıçapı, ortalama Coulomb enerjisi gibi büyüklükleri hesaplamak için

$$\langle r^k \rangle_{nl} = \int_0^{\infty} r^{k+2} (R_{nl})^2 dr$$

integralini bilmemiz gerekir.

Hidrojen Benzeri Başka Sistemler

a) Müyonik Hidrojen Atomu

Müyon doğada kısa ömrü ($\tau \approx 2.2 \times 10^{-6}$ s) ve ağırca kütlesi (207 elektron kütlesi) dışında tüm özellikleri elektronla aynı olan bir parçacıktır. Hidrojen atomunda elektron yerine -e yüklü müyonun konmasıyla oluşan bağlı sisteme müyonik hidrojen atomu diyebiliriz: ($p\mu^-$).

b) Müyonyum ve Pozitronyum Atomları

Çekirdek olarak + yüklü müyon ile elektronun oluşturduğu bağlı duruma müyonyum atomu denir: (μ^+e^-).Bu atomun ömrü 2.2x 10^{-6} s kadardır.

Pozitronyum ise + yüklü pozitron ile elektronun oluşturduğu atomdur: (e^+e^-)

c) Rydberg Atomları

Yüksek derecede uyarılmış bir hidrojen atomu ya da hidrojen türü iyona “yüksek Rydberg durumunda”dır denir. Bu atomlarda n baş kuantum sayısı n=100' lere varır. Bu durumdaki atoma “Rydberg atomu” denir.

PROBLEMLER

1) a) Hidrojen atomunda, **b)** döteryum atomunda ve **c)** pozitronyum atomunda 2p → 1s geçişlerinin dalga boylarını bulup karşılaştırınız.

2) Hidrojenin radyoaktif izotopu olan trityum atomunun çekirdeği bir proton ve iki nötrondan oluşmaktadır. Taban durumundaki bir tirityum atomu, birden bire $H^3 \rightarrow H^3 + e^- + \bar{\nu}_e$ çekirdek tepkimesi sonucunda Helyum-3 iyonuna dönüşüyor. He^3 iyonunun taban durumunda kalma olasılığını hesaplayınız.

3) Hidrojen atomu

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{6}\left[4\,U_{100} + 3\,U_{211} - U_{200} + \sqrt{10}\,U_{21,-1}\right]$$

dalga fonksiyonu ile verilen bir durumdadır. **a)** Enerjinin **b)** $\mathbf{L}^2$' nin **c)** L_z' nin beklenen değerlerini hesaplayınız.