FZM 306: Kuantum Mekaniği II

11. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken aşağıdaki kaynak kullanılmıştır:

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

Tek Elektronlu Atomlarda İnce Yapı Yarılması

$$H_0 = \frac{P^2}{2\mu} - \frac{Z^2}{r}$$

Hamiltoniyeni relativistik olmadığı ve elektron spinini içermediği için yaklaşık bir ifadedir. Bu Hamiltoniyene relativistik düzeltme ve spin etkileri de eklenebilir. Bu ek terimler enerji düzeylerindeki ℓ' ye olan katmerliliği kaldırarak, bu düzeylerin yarılmalarına yola açarlar. Buna enerji düzeylerinin **ince yapısı** denir.

Coulomb alanında Dirac denklemi çözülürse, ince yapıyı tam olarak yansıtan enerji düzeyleri aşağıdaki gibi elde edilebilirler:

$$E_{nj} = m_0 c^2 \left(\left[1 + \frac{Z\alpha}{n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2\alpha^2}} \right]^{-1/2} - 1 \right)$$

a) Relativistik Düzeltme

Hamiltoniyendeki $\mathbf{P}^2/2m_0$ terimi elektronun relativistik olmayan kinetik enerjisidir. Buna $\mathbf{v}^2/c^2$ basamağındaki düzeltme, relativistik enerji bağıntısından bulunabilir:

$$E=\sqrt{p^2c^2+m_0^2c^4}=m_0c^2\left(1+\frac{p^2}{m_0^2c^2}\right)^{1/2}$$

ifadesine binom açılımı uygulanırsa

$$E=m_0c^2+\frac{p^2}{2m_0}-\frac{p^4}{8m_0^3c^2}+\ldots$$

elde edilir. Burada üçüncü terim relativistik düzeltme olup, Hamiltoniyene

$$-\frac{p^4}{8m_0^3c^2}+\ldots$$

şeklinde eklenebilir.

b) Spin Yörünge Etkileşmesi

Bohr modeline göre, çekirdek etrafında r yarıçaplı dairesel yörüngede ν frekansıyla dolanan elektron kapalı bir akım halkası demektir ve dolayısıyla:

$$|\mu| = -\frac{1}{c} e\nu\pi r^2$$

gibi bir manyetik momente eşdeğerdir. Diğer taraftan, elektronun dolanma açısal momentumu

$$|L| = mVr = 2\pi m\nu r^2$$

Değerinde olup, bunların karşılaştırılmasından

$$\mu = -\frac{e}{2mc} L$$

bağıntısı bulunur.

Elektron ayrıca μ_S ile göstereceğimiz bir **özmanyetik** momente ve **S** ile göstereceğimiz bir **özaçısal** momentuma sahiptir:

$$\mu_S = -g \frac{e}{2mc} S$$

İç ya da öz açısal momentum niteliğindeki **S**' ye **spin** diyoruz. Spektroskopik deneyler g' nin 2 olmasını gerektirmektedir.

μ manyetik momenti, elektronun bulunduğu **r** kadar ötedeki noktada **B**=-**μ**/r^3 manyetik alanını oluşturur. Bu alan içindeki μ_S manyetik momenti ise -**B**.$\boldsymbol{\mu}_S$ kadarlık bir manyetik potansiyel enerjiye sahip olur. Bu manyetik enerji de elektronun Hamiltoniyenine eklenmelidir:

$$H_{spin-yörünge} = B \cdot \mu_S = -\frac{\mu \cdot \mu_S}{r^3} = \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} L \cdot S = \xi(r) L \cdot S$$

Ek Terimlerin Pertürbasyon Hesabı

$$H = H_0 - \frac{p^4}{8 m_0^3 c^2} + \xi(r) L.S$$

Hamiltoniyeninin özdeğer denklemi tam olarak çözülemez. Tam olarak çözülemeyen sistemleri yaklaşık olarak çözmek için çeşitli yaklaşıklık yöntemleri geliştirilmiştir. Bunlardan en önemlisi **pertürbasyon yöntemidir**.

Tam olarak çözülemeyen sistemin Hamilton işlemcisi, tam olarak çözülen bir H_0 kısmı ve buna göre çok küçük olan bir H' ek teriminden oluşsun:

$$H = H_0 - H'$$

H_0 ' ın özdeğer denklemi tam olarak çözülmüş olsun:

$$H_0 \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \Psi_k^{(0)}$$

Bu durumda H' nün birinci ya da ikinci basamaktan katkılarını H_0' ın bilinen özfonksiyonları cinsinden hesaplamak olasıdır. Böylece birinci basamaktan enerjiye gelen katkı:

$$E_k^{(1)} = < \Psi_k^{(0)} | H' | \Psi_k^{(0)} > = \int \Psi_k^{(0)*} H' \Psi_k^{(0)} d^3 r$$

Artık ek terimlerin her birinden gelen küçük katkıları yukarıdaki ifadeye göre hesaplayabiliriz. H_0' ın özfonksiyonları $U_{n\ell m}$ (r,θ, φ) olduğundan bundan sonra bu özfonksiyonlar kullanılacaktır.

b) Spin Yörünge Etkileşmesinin Katkısı

Hamiltonyendeki spin yörünge teriminin enerjiye katkısı

$$E_{SY}^{(1)} = \langle U_{nlm} \chi_{sm_s} | \xi(r) L.S | U_{nlm} \chi_{sm_s} \rangle$$

şeklinde olur. **L**.**S** işlemcisinin $U_{nlm} \chi_{sm_s}$ dalga fonksiyonlarına nasıl etkidiğini bilmiyoruz. Bu yüzden $\mathbf{L}^2$, L_z, $\mathbf{S}^2$ ve S_z işlemcileri yerine bunların bir karışımı olan $\mathbf{L}^2$, $\mathbf{S}^2$, $\mathbf{J}^2$ ve J_z işlemcilerini tam işlemcileri cümlesi olarak almak daha uygundur. Burada

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

toplam açısal momentumdur. $\mathbf{J}^2$ ve J_z işlemcilerinin özdeğerleri sırasıyla $j(j+1)\hbar^2$ ve $m_j\hbar$ olup, $m_j = +\, j, j-1, \ldots , -j$ değerlerini alır. $\mathbf{L}^2$, $\mathbf{S}^2$, $\mathbf{J}^2$ ve J_z işlemcilerinin ortak özfonksiyonları ise artık Ψ_{nljm_j} ya da $|n,l,j,m_j>$ şeklinde gösterebiliriz.

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\,\mathbf{L.S}$$

Olduğundan **L.S**' nin özdeğerleri

$$[\, j(j+1) - \ell(\ell + 1) - s(s+1)]\hbar^2/2$$

şeklinde olur. Dolayısıyla spin yörünge teriminin enerjiye katkısı

$$E_{SY}^{(1)} = \langle U_{nlm}\chi_{sm_s}|\xi(r)\,L.S|U_{nlm}\chi_{sm_s}\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right]\hbar^2 \langle nljm_j|\xi(r)|nljm_j\rangle$$

olarak bulunur. ξ(r)' nin de ortalaması eklenirse

$$E_{SY}^{(1)} = \frac{Z^3 e^2 \hbar^2}{2m^2c^2} \frac{\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]}{n^3 a^3 l(l+1)\left(l + \frac{1}{2}\right)}$$

elde edilmiş olur.

Tüm katkılar toplanırsa

$$E_{Rel}^{(1)} + E_{SY}^{(1)} = E_n^{(0)} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right)$$

sonucu elde edilir. Bunları H_0' ın özdeğerine eklersek

$$E_{nj} = E_n^{(0)} \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

ince yarılmalı enerji spektrumunu buluruz.

Hidrojen atomunun ince-yapı yarılmaları ve bazı geçişler: