

FZM 306: Kuantum Mekanikii II

10. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken ařağıdaki kaynak kullanılmıřtır:

Kuantum Mekanii ve Atom Fiziđi Ders Notları

Z. Zekeriya AYDIN

Ankara Üniversitesi

TEK ELEKTRONLU ATOMLARIN ELEKTROMANYETİK IŞINIMLA ETKİLEŞMESİ, İNCE YAPI ve ZEEMAN OLAYI

Tek elektronlu atom ve atomik iyonların Hamiltoniyeni en basit haliyle

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

şeklindedir. Bu Hamiltoniyenle ilgili özdeğer denklemi açısal ve ışınsal kısımlara ayrılarak çözüldüğünde bağlı durumların enerjileri

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

olarak bulunmuştu. Bohr belirli bir enerji durumunda bulunan atomun daha düşük bir enerji durumuna geçmesi halinde $\nu = (E_{n'} - E_n)/h$ frekanslı bir tek renkli bir ışınım yayınlayacağını varsaymıştı. ***Bu bölümde Bohr' un bu varsayımlarını kuantum mekaniksel olarak kanıtlayacağız. Elektrik dipol geçişleriyle ilgili seçim kurallarını çıkaracağız. Daha sonra ince yapı ve manyetik yarılmaları inceleyerek enerjideki katmerliliğin nasıl ortadan kaldırıldığını göreceğiz.***

Spektrum izgileri; Salma ve Soęurma Spektrumları

Klasik elektrodinamięe gore, ivmeli hareket yapan bir yuklu paracık elektromanyetik ışımaya yapar. Kuantum mekaniksel olarak hidrojen atomunun elektronu bir kuantum durumundayken ışımaya yapmaz; fakat bir st durumdan uygun bir foton yayınlayarak bir alt duruma geebilir. Ya da tersine, bir alt durumdayken bir foton soęurarak bir st duruma ıkabilir. Bunlara atomun elektromanyetik alanla etkileşmesi denir.

Bir kovuk ierisinde her frekansta ışınım varsa, atomların eşitli enerji dzeyleri arasında geişler olacaęı iin, kendilięinden ve etkiyle yayınlanan fotonlar kesikli bir **salma spektrumu** oluřtururlar. Benzer şekilde atomlar tarafından soęurulan fotonlar nedeniyle ise bir kesikli **soęurma spektrumu** oluřur.

Bütün enerji düzeyleri arasında geçiş olabilir mi? Hayır! İzinli geçişler için bazı seçim kuralları sözkonusudur:

$$\Delta n \equiv n - n' = \text{keyfi}$$

$$\Delta l \equiv l - l' = \pm 1$$

$$\Delta m \equiv m - m' = 0, \pm 1$$

Geçişlerdeki spektrum çizgilerinin frekansları, Bohr' un frekans varsayımıyla verilecektir:

$$\nu_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{h} = \frac{mc^2 (Z\alpha)^2}{2h} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > n'$$

Işımalı Geçişler; Elektrik Dipol Geçişleri için Seçim Kuralları

Çekirdekten elektrona uzanan vektör \mathbf{r} olmak üzere, hidrojen atomunu

$$\mathbf{d} = e\mathbf{r}$$

Değerinde bir elektrik dipolü olarak görebiliriz. Klasik olarak, böyle bir dipol titreşirse ışıma yapar. Kuantum mekaniğinde ise bu *dipolün beklenen değeri zamanla değişirse, dipol ışıma yapar*; aksi halde ışıma yapmaz.

Hidrojen atomunun $n\ell m$ durumundaki dalga fonksiyonu

$$\psi_{n\ell m}(r, t) = U_{n\ell m}(r) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

Hidrojen atomunun $n'\ell' m'$ durumundaki dalga fonksiyonu

$$\psi_{n'\ell' m'}(r, t) = U_{n'\ell' m'}(r) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n'} t}$$

olsun.

Hidrojen atomu saf $n\ell m$ durumundayken dipolün beklenen değeri

$$\begin{aligned}\langle d \rangle &= e \langle r \rangle = \int \psi_{nlm}(r,t) r \psi_{nlm}(r,t) d^3 r \\ &= e \int U_{nlm}(r) r U_{nlm}(r) d^3 r\end{aligned}$$

olup, zamandan bağımsızdır. Dolayısıyla Hidrojen atomu bir saf durumda (yani belirli bir yörüngesinde) iken ışığa yapmaz.

Şimdi hidrojen atomunun

$$\psi = a \psi_{n\ell m} + b \psi_{n'\ell'm'}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

durumunda bulunduğunu varsayalım ve bu durum üzerinden $\langle \mathbf{r} \rangle$ ortalamasını hesaplayalım:

$$\begin{aligned}\langle r \rangle &= |a|^2 \int U_{nlm} r U_{nlm} d^3 r + |b|^2 \int U_{n'\ell'm'} r U_{n'\ell'm'} d^3 r \\ &\quad + 2 ab \cos\left(\frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} t\right) \int U_{nlm} r U_{n'\ell'm'} d^3 r\end{aligned}$$

olsun.

$\langle r \rangle$ ifadesindeki ilk iki terim zamandan bağımsızdır; zamana bağlı olan sonuncu terimin zamanla değişme frekansı $\nu_{nn'} = (E_n - E_{n'})/h$ 'dir.

Son terimdeki

$$I = \int U_{nlm} r U_{n'l'm'} d^3 r$$

integrali sıfır ise ışınım yoktur. Dolayısıyla $n\ell m$ durumundan $n'\ell' m'$ durumuna geçiş olabilmesi için bu integralin sıfırdan farklı olması gerekir.

$\langle r \rangle$ ifadesinde U_{nlm} dalga fonksiyonları yerine $R_{nl}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ yazılırsa $d\theta$ ve $d\phi$ integrallerinden

$$\Delta\ell \equiv \ell' - \ell = \pm 1$$

$$\Delta m \equiv m' - m = 0, \pm 1$$

sonuçlarını elde ederiz.

Hidrojen atomunun terim çizimi ve dipol geçişleri:

