

Geçen Derste

- Verilen l kuantum sayılı açısal momentum $Y_{lm}(\theta, \phi)$ öz durumunun radyal denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{nl}(r) = E_{nl} R(r) \quad (23-1)$$

1B'lu SD şeklinde etkin potansiyeli

$$V_{\text{etk}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (23-2)$$

olacak şekilde yazılabilir, $u(r) = rR(r)$ olarak tanımlayarak

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + V_{\text{etk}}(r)u(r) = Eu(r). \quad (23-3)$$

elde edilir.

- Hidrojen atomuna özelleştirme:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (23-4)$$

- Şu boyutsuz değişkenleri tanımlayalım:

$$\rho = \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}} r, \quad \lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}} \quad (23-5)$$

$$u''(\rho) + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0 \quad (23-6)$$

- Asimtotik çözümler:

$$u(\rho) = s(\rho)\rho^{l+1}e^{-\frac{\rho}{2}}, \text{ for } \rho \rightarrow \infty, \rho \rightarrow 0 \quad (23-7)$$

ve Taylor açılımı

$$s(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (23-8)$$

yineleme bağıntısını verir

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{k+l+1-\lambda}{(k+1)(k+2(l+1))}. \quad (23-9)$$

- $\rho \rightarrow \infty$ için sınır şartları serinin bir yerde sona ermesini gerektirir.

$$k = n_r \quad (23-10)$$

$$n_r + 1 + 1 = \lambda \rightarrow (n_r \text{ radyal kuantum sayısı}) \quad (23-11)$$

- Tanım yapalım ve

$$\lambda = n = n_r + l + 1 = \rightarrow (\text{asal kuantum sayısı}) \quad (23-12)$$

olsun

$$E_n = -\frac{1}{2}mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \quad (23-13)$$

ise rölativistik formül olmayıp, basit olarak

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \rightarrow (\text{ince yapı sbt}) \quad (23-14)$$

kullanılarak yazılmıştır.

Genel olarak, (normalleşmemiş) polinom $s(\rho)$, yardımcı Laguerre polinomudur

$$s(\rho) = L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho), \quad (23-15)$$

ki bu şöyle tanımlanmıştır

$$L_n^\alpha(\rho) = \sum_{m=0}^n \binom{n+\alpha}{n-m} \frac{(-\rho)^m}{m!}. \quad (23-16)$$

3B'lu dalga fonksiyonu şöyle verilir:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (23-17)$$

$$= \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (23-18)$$

burada

$$u(\rho) = s(\rho)\rho^{l+1}e^{-\frac{1}{2}\rho}, \quad (23-19)$$

o şekilde normalleştirilmiş olup,

$$1 = \int d^3\mathbf{r} |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 = \int d\Omega |Y_{nl}(\theta, \phi)|^2 \int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 \quad (23-20)$$

Parçacığı $[r, r + dr]$ kabuğu içinde bulma olasılığı şöyle verilir

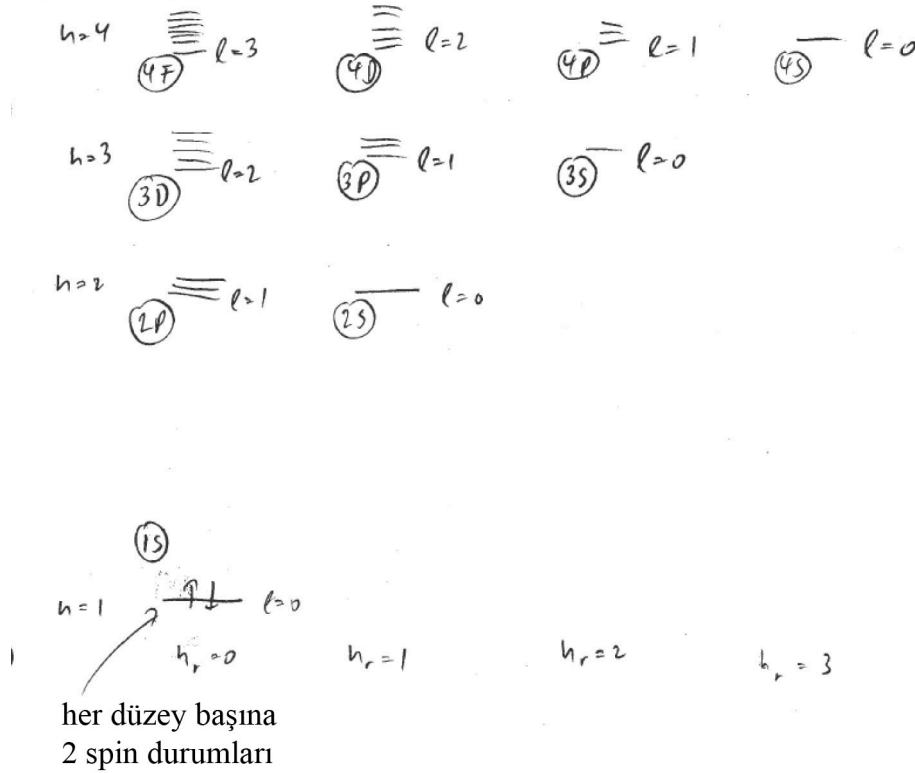
$$\int d\Omega |Y_{nl}|^2 r^2 |R(r)|^2 dr = |u(r)|^2 \int d\Omega |Y_{nl}| \quad (23-21)$$

Hidrojen spektrumunun dejenereliği

Verilen bir l_1 için tüm manyetik kuantum sayıları m 'ler aynı enerjiye sahiptir, böylece her bir l , $(2l+1)$ kat dejeneredir. Aynı zamanda, her bir $n = n_r + l + 1$ için n_r radial kuantum sayısı, $n_r = 0, 1, \dots, n-1$ değerlerini alabilir ve bunlara karşı gelen l kuantum sayıları $l = 0, 1, \dots, n-1$ değerlerini alabilir. Böylece verilen bir n için, dejenere durumların toplam sayısı

$$\underbrace{1}_{(l=0)} + \underbrace{3}_{(l=1)} + \dots + \underbrace{2(n-1)+1}_{(l=n-1)} = (n+1)^2 \quad (23-22)$$

olur. Gerçekten, herbir elektron iki tane spin durumuna sahip olduğundan, iki kat daha fazla durumlar vardır.



Şekil I: Hidrojen atomunun enerji düzeyi yapısı

Hidrojenin zamana bağlı normalleştirilmiş öz durumları

$$\psi_{100} = \frac{2}{(a_0)^{3/2}} e^{-r/a_0} Y_{00}(\theta, \phi) \quad 1s \quad (23-23)$$

$$\psi_{200} = \frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} Y_{00}(\theta, \phi) \quad 2s \quad (23-24)$$

$$\left(\begin{array}{c} \psi_{211} \\ \psi_{210} \\ \psi_{21-1} \end{array} \right) = \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \left(\begin{array}{c} Y_{11}(\theta, \phi) \\ Y_{10}(\theta, \phi) \\ Y_{1-1}(\theta, \phi) \end{array} \right) \quad 2p \quad (23-25)$$

Spektroskopik Yazılım

$l = 0$	'a	s
$l = 1$	'e	p
$l = 2$	'e	d
$l = 3$	'e	f

denilir.

Hidrojen atomunun bazı kullanışlı beklenti değerleri

$R(r)$ dalga fonksiyonları verilirse, beklenti değerlerini hesaplayabiliriz.

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr r^{2+k} |R_{nl}(r)|^2 \quad (23-26)$$

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l+1)] \quad (23-27)$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \quad (23-28)$$

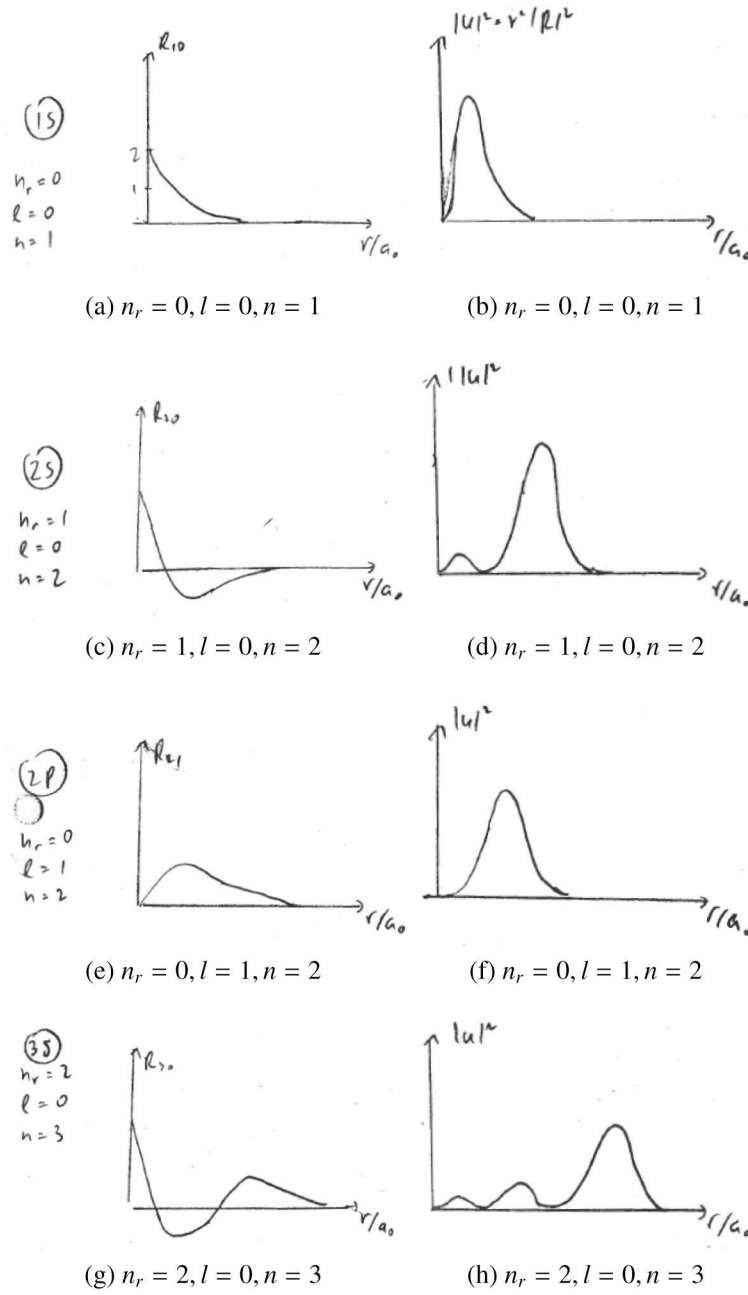
$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a_0 n^2} \quad (23-29)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)} \quad (23-30)$$

Hidrojen atomunda dejenereliğin kaldırılması

Şimdiye kadar ihmal edilen daha ileri düzeydeki etkileşmeler; s,p,d düzeyleri arasındaki dejenereliği kaldırır. Örneğin, elektronun görüş açısından bakıldığında, proton bir akıma karşı gelir. İlgili manyetik alan elektronun spiniyle alakalı olan manyetik momentle bir bağlanma yapar: buna **spin-yörünge etkileşmesi** denir. Bundan başka, görelilikli etkiler enerji kaymalarına yol açar ve bu elektronun toplam açısal momentumu $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ 'ye bağlıdır. (8:05 açısal momentumların toplamı). Aynı zamanda, protonunda kendisiyle ilgili olan küçük bir manyetik momente sahip spini vardır. Proton ve elektronun manyetik momentleri arasındaki etkileşmeye ince yapı etkileşimi denilir ve bu atomun toplam açısal momentumu $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I} = \mathbf{L} + \mathbf{S} + \mathbf{I}$ 'ye bağlı kaymalara sebep olur ki burada $\mathbf{I}$ proton (çekirdek)'un spinidir. Temel parçacıkların has açısal momentumu (spin) daima $\hbar/2$ iken, çekirdekler gibi bileşik parçacıklar, bunları teşkil edenler çiftse, tam spine sahip olabilirler. Böylelikle, tek parçacıklar gibi görüldüğünde atomlar bozon (tam sayılı spin) veya fermiyon (yarım tam sayılı spin) olabilir ki kuantum istatistiği ve alçak sıcaklıklar davranışında dramatik sonuçlar ortaya çıkabilir.

İki özdeş fermiyon parçacık değiş tokuşuna göre antisimetrik olan bir dalga fonksiyonu



Şekil II: Birkaç radyal dalga fonksiyonu. Soldaki gösterimler R_{nl} dalga fonksiyonu, sağdakiler ise olasılık yoğunluğu $|u_{nl}|^2 = r^2 = |R_{nl}|^2$ olup, burada n_r ise radyal dalga fonksiyonundaki karın noktalarıdır.

$$\psi_r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi_q(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (23-31)$$

ile temsil edilir.

$\Rightarrow$ dalga fonksiyonu $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ de yok olur $\rightarrow$ fermiyonlar birbirlerinden kaçınırlar.
Bozonlar ise parçacık değiş tokuşuna göre simetrik bir dalga fonksiyonu ile betimleniştir.

$$\psi_B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = +\psi_B(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (23-32)$$

$\Rightarrow$ Bozonlar aynı konumda bulunmaya yatkındırlar $\rightarrow$ lazerler, Bose-Einstein yoğunlaşması, üstün iletkenlik, genliklerin toplanabildiği klasik alanlar kavramı.

Işığın Kutuplaşması

z ekseni boyunca hareketli klasik bir ışık, x ekseni boyunca doğrusal kutuplanabilir,

$$\epsilon(z, t) = \epsilon_0 \hat{e}_x e^{ikz - i\omega t}, \quad (23-33)$$

y ekseni boyunca doğrusal kutuplanabilir,

$$\epsilon(z, t) = \epsilon_0 \hat{e}_y e^{ikz - i\omega t}, \quad (23-34)$$

xy düzleminde bir $\hat{e} = \cos\theta \hat{e}_x + \sin\theta \hat{e}_y$ yönünde doğrusal kutuplanabilir,

$$\epsilon(z, t) = \epsilon_0 \hat{e} e^{ikz - i\omega t}, \quad (23-35)$$

veya çembersel kutuplanır

$$\hat{e}_R = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x + i\hat{e}_y) \quad (23-36)$$

$$\hat{e}_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x - i\hat{e}_y) \quad (23-37)$$

$$\epsilon_{L,R}(z, t) = \epsilon_0 \hat{e}_{L,R} e^{ikz - i\omega t} \quad (23-38)$$

veya, genel olarak, eliptik kutuplanır

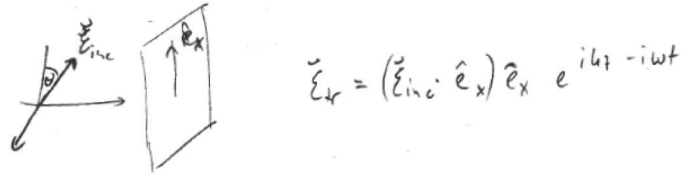
$$\hat{e} = \cos\theta \hat{e}_x + e^{i\phi} \sin\theta \hat{e}_y, \epsilon(z, t) = \epsilon_0 \hat{e} e^{ikz - i\omega t} \quad (23-39)$$

Herhangi iki dik kutuplanma (yani, $\hat{e}_x, \hat{e}_y$), $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x + \hat{e}_y), \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x - \hat{e}_y)\right), (\hat{e}_L + \hat{e}_R), \dots$) bir baz teşkil eder. Keyfi bir kutuplanma iki baz kutuplanmasının bir üst üste binmesi gibi ifade edilir.

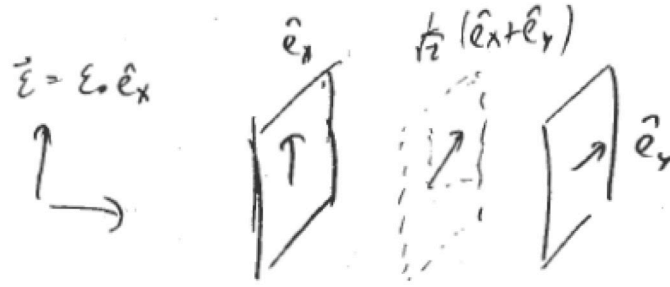
Doğrusal bir kutuplayıcı kuvvetli bir soğurucu kutuplaşma yönüne sahiptir (ideal olarak, kutuplayıcıdan sonra kutuplaşma yönü boyunca $\epsilon \cdot \hat{e} = 0$ olur), ve birde zayıfça soğuran yön (ideal olarak: soğurma yok). İkinci durumu kutuplayıcının ekseni olarak adlandırırsak, kutuplayıcı arkasındaki ışık bu eksen boyunca doğrusal kutuplanmış olur. İki çapraz kutuplayıcı arasına bir ara açıyla üçüncü bir kutuplayıcı konulmazsa hiçbir ışık geçirilmez. Bu durumda geçirilen alan

$$\epsilon_0 \cdot (\hat{e}_x \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x + \hat{e}_y)) \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x + \hat{e}_y) \cdot \hat{e}_y = \frac{1}{2} \epsilon_0 \quad (23-40)$$

olur.



Şekil III: Geçirilen ışığın kutuplanması $\vec{E}_{tr} = (\vec{E}_{inc} \cdot \hat{e}_x) \hat{e}_x e^{ikz - i\omega t}$ dir.



Şekil IV: Işık iki çapraz kutuplayıcı arasından şayet üçüncü bir kutuplayıcı aralarına belli bir açıyla sokulursa geçebilir.

ve geçirilen ışığın şiddeti $[\frac{1}{2} \epsilon_0]^2$ ile orantılıdır. Kutuplayıcı açısı $\hat{e} = \cos\theta \hat{e}_x + \sin\theta \hat{e}_y$ olmak üzere, geçirilen elektrik alanının $\hat{x}$ boyunca gelen bir alandaki değişimi, $\epsilon_0 = \epsilon_0 \hat{e}_x$ ve $\hat{e}_x \hat{e} = \cos \theta$ olup, geçirilen ışığın şiddeti $\cos^2 \theta$ olarak değişir.

Kuantum mekaniksel betimleme

Bir ışık demeti fotonlardan oluşmuştur, verilen bir zamanda sadece fotonun kutuplayıcıdan geçebileceği şekilde ışık demetini zayıflatarak bir düzeye getirebilirsek, bu takdirde fotonlar sadece üniteler olarak gözüktüğünden, foton ya soğurulur veya soğurulmaz: kutuplayıcıdan foton geçme olasılığı şimdi $\cos^2 \theta$ (olasılık genliği θ dir) olur. Kutuplayıcı fotonun kutuplaşma durumunu “ölçer”: eğer foton kutuplayıcı eksenine boyunca kutuplaşırsa, geçirilmiş olur. Eğer kutuplayıcı eksene dik olarak kutuplanırsa, foton soğurulmuş olur.