Ders 31

Metindeki ilgili bölümler §5.1, 5.2

Örnek : Atom çekirdeğinin sonlu büyüklüğü

Bir atomun, basit bir potansiyel içindeki bir parçacık modelinde bir ilerleme, atomun çekirdeğinin gerçekte noktasal değil aksine hem kütle hem de yük dağılımlarında sonlu boyutlu yapı gösterdiği gerçeğini hesaba katar. Bu özelliğin atomik spektrumlar üzerindeki etkisine hızlı bir bakış için pertürbasyon teorisi kullanılabilir. Tabii ki, bu etki atomik modele eklenmesi gereken pek çok küçük düzeltmelerden biridir.

Çekirdeği toplam yükü Ze olan, r_0 yarıçaplı homojen (ağır kütleli) bir top olarak modelleyelim. Elementer elektrostatikte güzel bir alıştırma olarak

$$V(\mathbf{r}) = -e\phi$$

potansiyel enerjisinin böyle bir yük dağılımı için

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & r \geq r_0 \text{ için} \\ \frac{Ze^2}{2r_0}\left[\left(\frac{r}{r_0}\right)^2 - 3\right] & r \leq r_0 \text{ için} \end{cases}$$

formunu aldığını kontrol edebilirsiniz. Bu,

$$H = \frac{P^2}{2m} + V$$

Hamilton işlemcisinin özdeğer problemine kapalı formda bir çözümün bilindiğine dair bir bilgim yok, fakat böyle bir çözümün varlığından şüpheliyim. Çekirdeğin r_0 sonlu büyüklüğünden kaynaklanan potansiyel enerjiyi olağan Coulomb potansiyelinin bir pertürbasyonu olarak güzel bir şekilde ele alabiliriz. Bu amaçla,

$$V(r) = V_0(r) + B(r)$$

yazarız, burada

$$V_0(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \qquad \text{for } r > 0$$

ve

$$B(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{2r_0}\left[\left(\frac{r}{r_0}\right)^2 - 3 + \frac{2r_0}{r}\right] & 0 \leq r \leq r_0 \text{ için} \\ 0 & r \geq r_0 \text{ için.} \end{cases}$$

Şimdi, fikir, pertürbe edilmemiş enerji özfonksiyonları Bohr yarıçapı a'ya (verilen bir Z için) karşılık gelen aralıkta, $r_0 << a$ olduğu müddetçe, aşikar olmadığından, B pertürbasyonunun etkisinin küçük olmasının beklenmesidir. Bunu biraz sonra daha açık yapacağız.

Enerji özdurumları, $|n, l, m\rangle$'nin

$$\langle \mathbf{r}|n, l, m\rangle \equiv \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

ile verilen konum dalga fonksiyonlarına sahip olduğunu hatırlayın, burada Y_{lm} her zamanki küresel harmoniklerdir ve

$$R_{nl}(r) = -\left[\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+l)!\}^3}\right]^{1/2} e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L^{2l+1}_{n-l-1}(\frac{2r}{na})$$

burada

$$a = \frac{\hbar^2}{Zm_e e^2}, \qquad m = \text{elektronun kütlesi},$$

ve L^p_q asosiye Laguerre polinomlarıdır. Ayrıntılar için ders kitabınıza bakın. Belirli bir Z değerli hidrojensi atom için, a'nın, Bohr yarıçapı olduğuna dikkat edin; bu, atomik boyutun ölçeğini belirler.

Bu atomun taban durumuna bu pertürbasyondan dolayı gelen birinci mertebeden düzeltmeleri düşünelim. Temel durumu sadelik adına ve dejenere olmadığı için seçiyoruz. Temel durum enerjisindeki kayma

$$\Delta E = \langle 1, 0, 0|B|1, 0, 0\rangle$$

ile verilir. Dalga fonksiyonu,

$$\psi_{100} = \frac{2}{\sqrt{4\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$$

kullanarak

$$\Delta E = \int_0^{r_0} dr r^2 \frac{2Ze^2}{r_0 a^3} \left[\left(\frac{r}{r_0}\right)^2 - 3 + \frac{2r_0}{r}\right] e^{-\frac{2r}{a}}$$

buluruz (alıştırma). Bu integral açıkça hesaplanabilir. Deneyin! (Ben *Maple* kullanarak yaptım.) Yaklaşıklık şemamızı geçerli kılacak şekilde pertürbasyonun yeterince küçük olmasının her halükarda garanti edilmesi için gereken, $r_0 << a$ kabulü ile basitleştirildikten sonra size bunun cevabını vereceğim. Bu şartlarda

$$\Delta E \approx \frac{2Ze^2 r_0^2}{5a^3} = \frac{4}{5}|E_{temel}| \left(\frac{r_0}{a}\right)^2, \qquad \frac{r_0}{a} << 1$$

buluruz. (Bu ifadeyi *Maple*'a Taylor serisi açılımı yaptırarak elde ettim.) Buradan hareketle, sonlu büyüklüğün etkisi enerjiyi yukarı kaydırmaktır ve bu kaymanın ölçeği $\left(\frac{r_0}{a}\right)^2$ tarafından belirlenir.

Düzeltmenin büyüklüğü hakkında bir fikir edinmek için, bir kaç örnek göz önüne alalım. Hidrojen için, bir protonun yük yarıçapının 10^{-15} m mertebesinde ve Bohr yarıçapının da 10^{-10} m mertebesinde ve böylelikle pertürbatif düzeltmenin 10^{10}'da 1 mertebesinde olduğuna dikkat ediyoruz. Bu çok küçük! Çekirdeğin sonlu büyüklüğünün etkisinin daha belirgin olduğu fiziksel sistemler mevcuttur. Örneğin, bir proton ve bir μ^- müyondan oluşan "müyonik hidrojen" düşünülebilir. Müyonlar elektronlar gibidir sadece çok daha ağırdırlar. Müyonik hidrojen için Bohr yarıçapı 10^{-2} faktörü kadar daha küçüktür ki bu 10^6'da 1'lik bir enerji kaymasına sebep olur. Diğer en uç noktada, müyonik kurşun atomunu düşünün (negatif yüklü bir müyon bir kurşun çekirdeğine bağlı). Bunda, hem r_0'ın ve hem de a'nın 10^{-15} m mertebesinde olduğunu görürüz. Bu nedenle, sonlu boyut etkisi Coulomb etkisi ile aynı derecede önemlidir. Bununla birlikte, pertürbasyon etkisinin "küçük" olmaması nedeniyle pertürbatif yaklaşıklılığımızın artık geçerli olmadığını ve dolayısyla bunun en iyi ihtimalle nitel bir ifade olduğunu dikkate alın.

Bu örneği, taban durumu için pertübatif yaklaşıklık hakkında birkaç yorumla bitireyim. Bunu hesaplamak için $\langle n, l, m|B|1, 0, 0\rangle$ matris elemanını $n \neq 1$ için hesaplamamız gerekir. Pertürbasyon, açısal momentum ile sıradeğişmeli olduğu için matris elemanının sadece $l = m = 0$ iken sıfırdan farklı olacağı açıktır. O zaman,

$$\langle n, l, m|B|1, 0, 0\rangle = \delta_{l0}\delta_{m0} \int_0^{r_0} drr^2 R_{n0}(r)R_{10}(r)B(r)$$

buluruz (alıştırma). $r_0 << a$ olduğunu kabul ederek, $R_{nl}(r) \approx R_{nl}(0)$ yaklaşıklığını yapabiliriz. Böylece,

$$\langle n, l, m|B|1, 0, 0\rangle \approx \frac{Ze^2}{10} r_0^2 R_{n0}(0)R_{10}(0)\delta_{l0}\delta_{m0}$$

elde ederiz (alıştırma), ki bu, yaklaşık taban durumu dalga fonksiyonunu, pertürbe edilmemiş $l = 0 = m$ hidrojenin durağan durumlarının bir üstüste gelmesi olarak hesaplanabilir. Bu üstüste gelmenin, $r < r_0$'da yok olmayan, küresel simetrik taban durumu dalga fonksiyonuna gideceğini not edin. Dolayısıyla, elektronun (veya müyonun) çekirdek *içinde* bulunma olasılığı sıfırdan farklıdır!

Dejenere Pertürbasyon Teorisi

Şimdi, pertürbe edilmemiş özdeğerin dejenere olduğu, yani $E_n^{(0)}$ pertürbe edilmemiş özdeğeri için d tane doğrusal bağımsız özvektörün $|E_n\rangle_i^{(0)}$, $i = 1, 2, \ldots, d$ olduğu hali düşünüyoruz. Bu özvektörler D "dejenere altuzayını" tarar ki bu durum vektörlerinin komple Hilbert uzayının içinde oturan sonlu boyutlu bir vektör uzayıdır. Dejenerelik (bu halde, pertürbe edilmemiş) Hamilton işlemcisinin simetrisi ile ilişkilidir. Bütün Hamilton işlemcisi (pertürbasyon eklenmiş olarak) tipik olarak, pertürbe edilmemiş Hamilton işlemcisiin tüm simetrilerine sahip olmayacaktır. Böylece, pertürbe edilmemiş özdeğerlerle yaklaşık olarak bulunan *gerçek* özdeğerlerin hepsi genellikle dejenere değildir. Başka bir deyişle, matematiksel olarak λ, 0'dan 1'e değiştirilerek pertürbasyon "açıldığında", pertürbe edilmemiş aynı özdeğere sahip olan pertürbe edilmemiş özvektörlerin bazıları farklı özdeğerli özvektörler haline dönüşürler, dolayısyla dejenerelik pertürbasyon sayesinde kaldırılabilir. Pertürbasyon "açıldığında" enerji düzeyleri "ayrışır", denilir.

Örneğin, merkezcil bir potansiyelde hareket eden bir parçacık olarak modellenen bir atom düşünün. Bunun uyarılmış durumları, (pertürbe edilmemiş) Hamilton işlemcisi H_0 dönmeler altında değişmez olduğundan dolayı dejeneredir. Özellikle, H_0, $\vec{L}$ ile sıradeğişmeli olduğundan, yalnızca m değerleri birbirinden farklı olan tüm urumlar aynı enerjiye sahiptir. Ayrıntılı olarak, eğer $|n, l, m\rangle$, H_0'ın bir özvektörü ise $L_\pm|n, l, m\rangle$ de öyledir. Bu nedenle, böyle tüm durumlar aynı enerjiye sahip olacaktır. Bu atomun, düzgün bir elektrik alana konulduğunu (Stark etkisi) varsayın, böylece pertürbasyon

$$V = e\vec{E} \cdot \vec{X}$$

olur. Bu potansiyel dönme simetrisini (sadece $\vec{E}$'nin etrafına) kırdığından dolayı dejenerelik kalkar. Yukarıda ana hatları ile belirtilen şekilde kurulan durumlar farklı enerjilere sahip olacaktır.

Fakat, şimdi bu olayın pertürbatif tarafında bir incelik var. Pertürbe edilmemiş sistemde, dejenere altuzaydaki herhangi bir baz, pertürbe edilmemiş durumları tanımlamak için kullanılabilir. Fakat, pertürbe edilmiş teoride artık dejenere olmayan enerji özvektörleri, özvektörler elde etmek için üstüste bindirilemez. Bu aslında, pertürbasyon teorisinin, pertürbe edilmemiş özvektörler arasından bir bazı tercih ederek seçmesi gerektiği, anlamına gelir, yani $\lambda \to 0$'a giderken doğru özvektörlere çökenleri. Bundan sonraki kısımda bunun gerçekleştiğini göreceğiz. Pertürbasyon teorisinde şimdiki problem, pertürbe edilmemiş durumlarla *başlanması*dır. Ancak hangi durumları seçeceğiz? Göreceğiniz gibi, dejenere pertürbasyon teorisinin sonuçları bunun üstesinden geliyor.