Ders 37

Metindeki ilgili bölümler §5.7

Elektrik dipol geçişleri

Geçiş olasılığımız (pertürbasyon teorisinde birinci mertebeden)

$$P(i \to f) \approx |\frac{4\pi^2\alpha}{m^2\hbar\omega_{fi}^2} N(\omega_{fi})\langle n_f, l_f, m_f|e^{-i|\omega_{fi}|\frac{1}{c}\hat{n}\cdot\vec{R}}\,\hat{e}\cdot\vec{P}|n_i, l_i, m_i\rangle|^2$$

burada

$$\alpha = \frac{q^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

*ince yapı sabiti*dir ve

$$N(\omega) = \frac{\omega^2}{c}|A(\omega)|^2$$

birim frekans başına birim alana düşen, $A(\omega)$ frekans bileşenleriyle ışıma ayarında vektör potansiyeli tarafından nitelenen EM atması ile taşınan enerjidir.

Biz şimdi ortaya çıkan matris elemanını incelemek istiyoruz. Bu faktör, atomun yapısını yansıtır ve atomun elektromanyetik dalgaya cevabını nitelendirir.

Atomik boyut, Bohr yarıçapı $\sim\ 10^{-8}m$ mertebesinde iken soğurulan/yayımlanan ışımanın dalga boyunun $2\pi c/\omega_{fi}\ \sim\ 10^{-6}m$ mertebesinde olduğunu not ederek başlayalım. Bu nedenle, biri matris elemanındaki üsteli açmayı deneyebilir :

$$\langle n_f, l_f, m_f|e^{-i|\omega_{fi}|\frac{1}{c}\hat{n}\cdot\vec{R}}\,\hat{e}\cdot\vec{P}|n_i, l_i, m_i\rangle = \langle n_f, l_f, m_f|(1 - ip|\omega_{fi}|\frac{1}{c}\hat{n}\cdot\vec{X} + \ldots)\hat{e}\cdot\vec{P}|n_i, l_i, m_i\rangle$$

Bu açılımdaki ilk terim, eğer sıfır değilse, matris elemanına dominant katkıyı verecektir. Bundan dolayı, yaklaşık şekilde

$$\langle n_f, l_f, m_f|e^{-i|\omega_{fi}|\frac{1}{c}\hat{n}\cdot\vec{R}}\,\hat{e}\cdot\vec{P}|n_i, l_i, m_i\rangle \approx \langle n_f, l_f, m_f|\hat{e}\cdot\vec{P}|n_i, l_i, m_i\rangle$$

elde ederiz, ki bu *elektrik dipol yaklaşıklığı* olarak bilinir. Bu matris elemanının sıfır olmadığı geçişler dominant olasılıklıdır; bunlar *elektik dipol geçişleri* olarak adlandırılır. Niçin öyle olduğunu az sonra göreceğiz. Dipol matris elemanlarının yok olduğu geçişler sıklıkla “yasak geçişler” olarak adlandırılır. Bu, bunların gerçekleşmeyeceği anlamına gelmez, fakat yalnızca, olasılığın elektrik dipol tipindekine göre çok daha düşük olduğu manasındadır, dolayısıyla bunlar kullandığımız bu yaklaşıklık seviyesinde ortaya çıkmazlar.

Dikkatimizi elektrik dipol yaklaşıklığı ile sınırlandırırsak, geçiş olasılığı $\langle n_f, l_f, m_f|\vec{P}|n_i, l_i, m_i\rangle$ matris elemanı ile kontrol edilir. Bunu hesaplamak için,

$$[\vec{X}, H_0] = i\hbar\frac{\vec{P}}{m}$$

ve

$$H_0|n,l,m\rangle = E_n|n,l,m\rangle$$

gerçeğini kullanırız. Buradan,

$$\begin{aligned}\langle n_f,l_f,m_f|\vec{P}|n_i,l_i,m_i\rangle &= \frac{m}{i\hbar}\langle n_f,l_f,m_f|\vec{X}H_0 - H_0\vec{X}|n_i,l_i,m_i\rangle \\ &= im\omega_{fi}\langle n_f,l_f,m_f|\vec{X}|n_i,l_i,m_i\rangle\end{aligned}$$

elde ederiz. Şimdi herhalde bunun neden dipol geçişi olarak adlandırıldığını görebilirsiniz : geçiş yalnızca, $q\vec{X}$ dipol moment işlemcisinin ($\hat{e}$ yönündeki bileşenine ait) matris elemanlarının yok olup olmamasına uygun olarak gerçekleşiyor.

Elektrik dipol geçişleri için seçim kuralları

Elektrik dipolü tipindeki geçişlerin baskın olduğunu gördük. Şimdi,

$$\langle n_f,l_f,m_f|q\hat{e}\cdot\vec{X}|n_i,l_i,m_i\rangle$$

dipol matris elemanlarının bazı ayrıntılarını göz önüne alıyoruz. Özellikle, dipol matris elemanının sıfırdan farklı olması ve böylece elektrik dipol geçişlerinin gerçekleşmesi çin l ve m üzerindeki zorunlu koşulları türetiyoruz. Bu koşullar genellikle (birinci mertebeden) elektrik dipol geçişleri için *seçim kuralları* olarak adlandırılır. Bu seçim kurallarına uymayan geçişler genellikle "yasak geçişler" olarak adlandırılır. Tabii ki, bunlar sadece yaklaşıklıklarımızın geçerli olduğu kadarıyla yasaktır. Yasak geçişler pekala da gerçekleşebilir, fakat bunlar, burada göz önüne aldığımız (birinci mertebeden) elektrik dipol geçişlerinden çok daha düşük olasılıklıdır.

Türeteceğimiz seçim kuralları yalnızca pertürbe edilmemiş durağan durumların açısal momentum özellikleri tarafından belirlenir. Bundan dolayı, seçim kuralları durağan durumların orbital açısal momentumun özdurumları olarak seçilebileceği gerçeğine dayanıyor, ki bu, V_0 atomik potansiyelinin merkezcil bir potansiyel olmasını gerekli kılar : $V_0 = V_0(|\vec{X}|)$ (aşağıya bakın). Diğer taraftan, seçim kuralları bu potansiyelin daha başkaca herhangi bir özelliğine bağlı değildir.

Arasöz : Dönme Simetrisi

Burada, açısal momentum korunumunun dönme simetrisine nasıl bağlı olduğunu kısaca açıklayacağız. Üniter dönüş işlemcisini hatırlayın :

$$U(\hat{n},\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{J}}.$$

Spinsiz bir parçacık için (ki elektronu bu şekilde modelliyoruz) elimizde

$$\vec{J} = \vec{L} = \vec{X}\times\vec{P}$$

var. Konum/momentum özvektörleri $|\vec{x}\rangle$, $|\vec{p}\rangle$ üstünde

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{J}}|\vec{x}\rangle = |R(\hat{n},\theta)\vec{x}\rangle, \qquad e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{J}}|\vec{p}\rangle = |R(\hat{n},\theta)\vec{p}\rangle,$$

elde ederiz, burada $R(\hat{n},\theta)$, $\hat{n}$ ekseni etrafında θ açısıyla döndüren 3-d ortogonal dönüşümdür. Buradan

$$e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}}\vec{X}e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}} = R(\hat{n},\theta)\vec{X}, \qquad e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}}\vec{P}e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}} = R(\hat{n},\theta)\vec{P}$$

bulunur (alıştırma). Buradan da

$$e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}}P^2e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}} = P^2$$

ve

$$e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}}V(\vec{X})e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}} = V(R(\hat{n},\theta)\vec{X})$$

bulunur. (Bu son bağıntı $V(\vec{X})$'in tayfsal açılımı kullanılarak veya konum bazında sağlaması yapılarak görülebilir.)

Eğer potansiyel dönmeler altında değişmez ise, yani küresel simetrik ise, yani sadece dönüşün merkezine olan uzaklığa bağlıysa, yani merkezcil bir kuvveti tasvir ediyorsa, o zaman

$$e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}}V(|X|)e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}} = V(|X|).$$

Buna göre, Hamilton işlemcisi dönmeler altında değişmezdir :

$$e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}}(\frac{P^2}{2m} + V(|X|))e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\vec{L}} = \frac{P^2}{2m} + V(|X|)$$

Sonsuz küçük bir dönüşüm düşünerek kolayca

$$[H,\vec{L}] = 0$$

bulunur. Bu sadece sonsuz küçük dönüş değişmezliğidir. Fakat aynı zamanda açısal momentumun korunuması anlamına da gelir − bunun olasılık dağılımı zaman içinde değişmez. Bu, durağan durumların açısal momentumun özdurumları olarak seçilebilmesindendir. Böylelikle, bir simetrinin nasıl bir korunum yasasına karşılık geldiğini görüyoruz. Bununla birlikte, bizim için buradaki anahtar şey, merkezcil bir potansiyel için enerji özvektörlerinin de açısal momentum özvektörleri olarak seçilebileceğidir.

m içeren seçim kuralları

$\vec{X}$'in üç bileşenini sıfırdan farklı matris elemanlarına sahip olacak şekilde m_i ve m_f üstüne konulması gereken sınırlamaları düşünüyoruz. $\vec{X}$ vektör bir işlemci olduğu için ana özelliğimiz ortaya çıkar; elimizde

$$[R_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}R_k$$

var. Özellikle,

$$[X, L_z] = -i\hbar Y, \qquad [Y, L_z] = -i\hbar X, \qquad [Z, L_z] = 0$$

Bu formüller, basitçe, dönüşler altında konum vektörünün sonsuz küçük değişimini verir (alıştırma) ve yukarıda verilen formüllerin sonsuz küçük karşılıklarıdırlar. Bunları kolayca açıktan kontrol edebilirsiniz.

Bu özelliklerden

$$0 = \langle n_f, l_f, m_f|[Z, L_z]|n_i, l_i, m_i\rangle = (m_i - m_f)\hbar\langle n_f, l_f, m_f|Z|n_i, l_i, m_i\rangle$$

buluruz, böylelikle $m_i = m_f$ olmadıkça z matris elemanı yok olur. Bundan sonra,

$$(m_i - m_f)\hbar\langle n_f, l_f, m_f|X|n_i, l_i, m_i\rangle = \langle n_f, l_f, m_f|[X, L_z]|n_i, l_i, m_i\rangle = -i\hbar\langle n_f, l_f, m_f|Y|n_i, l_i, m_i\rangle$$

elde ederiz, ve

$$(m_i - m_f)\hbar\langle n_f, l_f, m_f|Y|n_i, l_i, m_i\rangle = \langle n_f, l_f, m_f|[Y, L_z]|n_i, l_i, m_i\rangle = i\hbar\langle n_f, l_f, m_f|X|n_i, l_i, m_i\rangle$$

buradan, ya

$$(m_i - m_f)^2 = 1$$

ya da

$$\langle n_f, l_f, m_f|Y|n_i, l_i, m_i\rangle = \langle n_f, l_f, m_f|X|n_i, l_i, m_i\rangle = 0$$

buluruz. Bu nedenle, X ve Y'ye ait matris elemanlarının sıfır olmaması için

$$m_f = m_i \pm 1$$

olmalıdır. Kısacası,

$$\Delta m = 0, \pm 1$$

olmadıkça hiç elektrik dipol geçişi olmaz. Eğer $\Delta m = 0$ ise, sadece z yönünde bileşeni olan polarizasyonlu ışıma bir geçiş tetikleyecektir (bu yaklaşıklıkta). Eğer $\Delta m = \pm 1$ ise, $x - y$ düzlemindeki polarizasyon bir geçiş uyararır. Benzer şekilde, bunlar ilgili yayma süreçlerinde rol alan polarizasyonlardır, yani, yayımlanan ışıma bu polarizasyon yapısına sahip olacaktır.

l içeren seçim kuralları

Elektrik dipol geçişlerinin nasıl $\Delta m = 0, \pm 1$ gerektirdiğini gördük. Yukarıdakine benzer bir oyun oynayarak, fakat şimdi,

$$[L^2, [L^2, \vec{X}]] = 2\hbar^2(L^2\vec{X} + \vec{X}L^2)$$

sıradeğişimini kullanarak l içeren seçim kuralları bulabiliriz. Bu denklemin iki tarafından başlangıç–bitiş matris elemanını alın ve matris elemanını tanımlayan vektörlerin L^2'nin özvektörleri olduğu hakikatini kullanın. Bu özelliğin

$$2[l_f(l_f+1)+l_i(l_i+1)] - [l_f(l_f+1)-l_i(l_i+1)]^2 \langle n_f, l_f, m_f|X|n_i, l_i, m_i\rangle = 0$$

eşitliğine işaret ettiğini bulacaksınız (alıştırma). Bu yüzden, eğer

$$\langle n_f, l_f, m_f|\vec{X}|n_i, l_i, m_i\rangle \neq 0$$

ise o zaman,

$$2[l_f(l_f+1)+l_i(l_i+1)] - [l_f(l_f+1)-l_i(l_i+1)]^2 = 0.$$

Bu şart

$$[(l_f+l_i+1)^2-1][(l_f-l_i)^2-1] = 0$$

formunda çarpanlarına ayrılabilir (alıştırma). l'nin negatif olmadığını akılda tutarak, ilk terimin ancak ve ancak $l_i = l_f = 0$ için yok olduğunu görebilirsiniz. İkinci terim ancak ve ancak $l_f = l_i = \pm 1$ olduğunda kaybolur. Geçişin,

$$\Delta l = \pm 1$$

veya

$$l_f = l_i = 0$$

olmadıkça yasak olduğu sonucuna varırız. Aslında, ikinci şart hariç tutulur : eğer başlangıç ve bitiş durumları sıfır açısal momentum durumları ise açık bir hesap kolayca dipol matris elemanının esasen yok olduğunu gösterir. Bunu görmek için, sadece (X,Y,Z)'den herbirinin $l = 1$ küresel harmoniklerinin doğrusal bir kombinasyonu olduğunu hatırlayın. Eğer $l_f = l_i = 0$ ise, o zaman iç çarpımlardaki açısal momentum integralleri, $l = 1$ küresel harmoniklerinin $l = 0$ küresel harmoniklerine ortogonal olmasından dolayı sıfır olur (alıştırma).

Özetlersek, elektrik dipol seçim kuralları

$$\Delta l = \pm 1, \qquad \Delta m = 0, \pm 1.$$

Bu koşullar, bu yaklaşıklığımız çerçevesinde, bir geçişin meydana gelmesi için gereklidir. Bu seçim kuralları, atomun foton yayması ve soğurması yönündeki bir yorum ile uyumludur. Bu bakış açısı kullanıldığında, foton $\omega \approx |\omega_{fi}|$ frekansına sahip olacaktır ("enerji korunumu" olarak yorumlanabilir) ve foton $\sqrt{2}\hbar$'lık açısal momentum taşıyacaktır, veya fotonun 1 spinli olması gerektiği söylenebilir (açısal momentumun korunumdan). Gerçekten de, eğer foton spin-1 taşıyor ise o zaman atom–foton sistemine ait açısal momentumun korunumu kabulu ile bağlantılı olarak daha önceki açısal momentum toplamı tartışmamız, bu geçişten sonra atomun açısal momentumunun l, $l\pm1$ olması gerektiğine işaret eder (alıştırma). Bu ilk olasılık elektrik dipol yaklaşıklığında vuku bulmaz.

Bunların hepsi doğru ancak bu resmin ışıma alanındaki bir atomu ele alış biçimimizle elde edilebileceğini düşünmek hata olur. Mevcut tarifimizin neden yetersiz olduğuna dair iki sebep vardır. İlk olarak, elektromanyetik alanı dinamik olarak ele almadık – formunu basitçe varsaydık. Elektromanyetik alanın kurgulanması baştan tek bir defa belirlendiği için, değişmesine izin verilmeyen elektromanyetik alandan enerji ve açısal momentum yayımı ve/veya soğurulması tasviri mümkün değildir. Bu, kullandığımız Hamilton işlemcisinin, elektron ve elektromanyetik alandan oluşan bileşik sistemin toplam enerjisini vermeyişi, aksine sadece elektronun korunmayan enerjisini vermesi gerçeğinde yansıtılıyor. Benzer şekilde, konuştuğumuz açısal momentum $\vec{L} = \vec{X} \times \vec{P}$, yük ve elektromanyetik alanın toplam, korunan açısal momentumu değil, bilakis sadece yükün tek başına korunmayan açısal momentumudur. Korunum yasalarının muhasebesine elektromanyetik alanı dahil etmek için sisteme elektromanyetik serbestlik derecelerini katmamız, ve bu serbestlik derecelerinin dinamiğini ve yükle kuplajlarını tarif etmek için Hamilton işlemcisine uygun terimleri eklememiz gerekir. Bu bizi, önceki ele alışımızla ilgili ikinci zorluğa götürür. Yük kuantum mekaniksel olarak ele alınmasına rağmen elektromanyetik alan klasik olarak işleme dahil edildiği için modelimiz “yarı-klasik”ti. İlkinin kuantum mekaniği yoluyla tarif edildiği ve ikincisinin ise klasik fizikle ele alındığı, yüklerin ve elektromanyetik alanların tutarlı bir teorisinin bulunması mümkün görünmüyor. Bu, kuantum mekaniğinin tarihinde erken devirde farkedildi. O zaman, gereken şey, elektromanyetik serbestlik derecelerini sisteme kuantum mekaniği kurallarını kullanarak katmak için bir metottur. Elektromenyetik alanı “kuantumlamanın” bir yolunu gösteren ve sonra yüklerin ve alanların bir kuantum dinamik sistemini düşünen ilk kişi (bana kalırsa) Dirac’tı. Böylelikle QED doğdu. Elektrodinamiğin bu kuantum tarifi için iyi bir pay verildi : artık *kendiliğinden yayım* açıklanabilirdi, ki bu hadisede, bir atom (veya başka bir kuantum sistemi) uyarılmış bağlı bir durumdayken kendiliğinden ışıma yayarak daha aşağı bir enerji durumuna düşüyor – bir pertürbasyon olmasa bile.