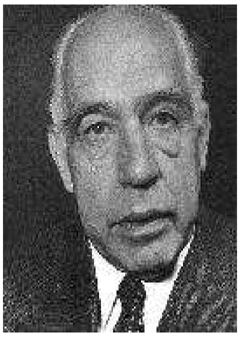
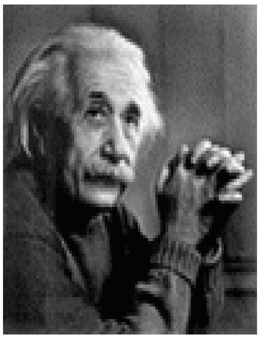
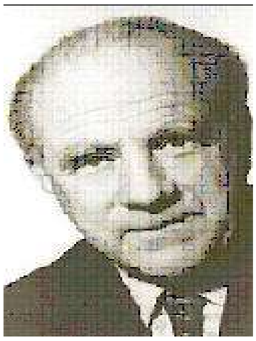
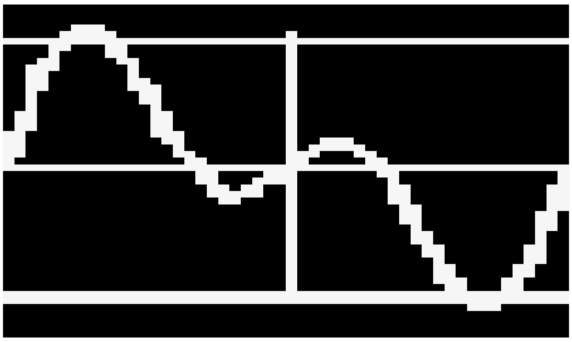





N.Bohr **A.Einstein** **W.Heisenberg** **E.Schrödinger**



KUANTUM FİZİĞİ-2

BÖLÜM-3

OPERATÖRLER VE MATRİSLER

1)MOMENTUM KOMÜTASYON BAĞINTILARI:

a)Çizgisel momentum:Çizgisel momentum operatörünün dik koordinatlatdaki bileşenleri; $P_x=-i\hbar\, d/dx$, $P_y=-i\hbar\, d/dy$, $P_z=-i\hbar\, d/dz$ dir. Bir P_x operatörünün x ile komütasyon bağıntısı $[P_x,x]=P_x.x-x.P_x$ ile tanımlı olup bu işlemin sonucu sıfır çıkarsa P_x ve x birbirinden tamamen bağımsızdır ve eşzamanlı olarak istenen duyarlıkla ölçülebilir demektir. Sıfırdan farklı olması Heisenberg'in belirsizlik ilkesine götürür. Buna göre; $[P_x,x]=[P_y,y]=[P_z,z]=-i\hbar$ ve $[P_x,y]=[P_y,z]$...gibi komütasyonlar sıfırdır.

b)Yörünge açısal momentum:Yörünge açısal momentum operatörü $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{P}$ dir. Bunun dik koordinat sistemindeki bileşenleri; $L_x=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$, $L_y=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)$, $L_z=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ şeklindedir. Bunlar küresel koordinatlarda ise; $L_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$, $L_y=-i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$, $L_x=i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}+\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$ dir. Buna göre L^2 operatörü $L^2=-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$ şeklindedir.

L'nin komütasyonları; $[L_z,y]=i\hbar z$, $[L_y,z]=i\hbar x$, $[L_z,z]=i\hbar y$ olup, bunların zıt yönlüleri negatif, aynı tür bileşenler sıfır değerindedir. Açısal momentum bileşenlerinin birbirleriyle komütasyonu da; $[L_x,L_y]=[L_x,z]P_x+x[P_z,L_x]=i\hbar(xP_y-yP_x)=i\hbar L_z$, diğer bileşenler de $[L_y,L_z]=i\hbar L_x$, $[L_z,L_x]=i\hbar L_y$ şeklindedir. L'nin bütün bileşenlerinin L^2 ile komütasyonu ise sıfırdır.

c)Yükseltme ve alçaltma operatörleri:Küresel harmonik $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ler açısal momentum operatörlerinin öz fonksiyonlarıdır. Yükseltme operatörü $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ye uygulandığında kuantum sistemi $Y_{lm+1}(\theta,\varphi)$ olan seviyeye geçer, alçalma operatörü uygulandığında $Y_{lm-1}(\theta,\varphi)$ seviyesine geçer. Açısal momentumun yükseltme operatörü $L_+=L_x+iL_y$, alçaltma operatörü de $L_-=L_x-iL_y$ şeklindedir. Bu operatörlerin komütasyonları; $[L_z,L_+]=\hbar L_+$, $[L_z,L_-]=-\hbar L_-$ ve $[L_+,L_-]=2\hbar L_z$ şeklindedir. Bir operatörün **anti-komütatörü** ise $[A,B]_+=A.B-B.A$ şeklinde tanımlanır.

d)L^2 ve L_z nin özdeğer denklemleri:L^2nin özdeğer denklemi $L^2Y_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}(\theta,\varphi)$, beklenen değeri ise $<Y_{lm}(\theta,\varphi|L^2|Y_{lm}(\theta,\varphi)>=l(l+1)\hbar^2$ dir. Buradan L'nin beklenen değeri $<Y_{lm}|L|Y_{lm}>=\sqrt{l(l+1)}\hbar$ şeklinde olmaktadır. L_z'nin özdeğer denklemi $L_zY_{lm}(\theta,\varphi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)$, beklenen değeri ise $<Y_{lm}|L_z|Y_{lm}>=m\hbar$ şeklindedir.

2)HEİSENBERG MATRİS MEKANİĞİ: Heisenberg fiziksel büyüklükleri gösteren operatörleri matrislerle ifade etmiştir. Matris mekaniğinde özfonksiyonlar birer **kolon matrisleri** ile gösterilir. Matris elemanları da operatörün beklenen değerlerinden ibaret olan birer matrisle temsil edilirler. Matrisin elemanları ilgili operatörün o uzaydaki spektrumunu oluşturur. Operatörü temsil eden matrisin mertebesi (rankı) **bağımsız özfonksiyon-uzayının** boyutu ile belirlidir. Bir operatörün uzayını geren baz-vektörlerinin skaler çarpımı; $<\psi_m|\psi_n>=(\psi^*_1\ \psi^*_2\ \psi^*_3.........)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\\ \Psi_3\\ .\end{pmatrix}=\Psi_1^*\Psi_1+\Psi_2^*\Psi_2+....=\delta_{mn}=\begin{cases}1 & m=n\\ 0 & m\neq n\end{cases}$ şeklindedir.

3)AÇISAL MOMENTUM OPERATÖRLERİNİN MATRİS ELEMANLARI: Her fiziksel kavram, gözlenebilir bir gerçek sayı ile ifade edildiğinden, bunların operatörleri **hermitiktir** ve ilgili matris köşegendir. Köşegen matrislerin matris elemanları, yani ilgigi operatörün beklenen değeri, kuantum sayıları ve Kronecker-δ ile ifade edilirler. Her matrisin rankı ilgili manyetik kuantum sayısının alabileceği farklı değerler sayısı ile belirlidir. $< sm'_s |S| sm_s >= \sqrt{s(s+1)}\hbar\delta_{m'_s m_s}$

$$< sm'_s |S_z| sm_s >= m_s\hbar\delta_{m'_s m_s}$$

$$< lm'_l |L| lm_l >= \sqrt{l(l+1)}\hbar\delta_{m'_l m_l}$$

$$< lm'_l |L_z| lm_l >= m_l\hbar\delta_{m'_l m_l}$$

$$< lm' |L_\pm| lm >= \sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\hbar\delta_{m',m\pm1}$$

$$< jm' |J| jm >= \sqrt{j(j+1)}\hbar\delta_{m'm}$$

$$< jm' |J_+| jm >= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\hbar\delta_{m',m+1}$$

$$< jm' |J_x| jm >= \tfrac{\hbar}{2}\left\{[j(j+1)-m(m+1)]^{1/2}\delta_{m',m+1} + [j(j+1)-m(m-1)]^{1/2}\delta_{m',m-1}\right\} \quad < jm' |J_z| jm >= m\hbar\delta_{m'm}$$

4)ORTOGONAL DÖNÜŞÜM: Yalnız özdeğerleri birbirinden farklı olan matrisler köşegen matris yapılabilirler. Yani öz-vektörleri lineer bağımsız olan matrisler köşegen yapılabilir. Hermitik matrisler, $H_{mn}=H^+_{mn}$ (simetrik) olduklarından köşegen yapılabilen matrislerdir. Matrisi köşegen yapmak; verilen matrisin baz vektörlerini döndürerek onun tüm köşegen-dışı elemanlarının sıfır olduğu yeni bir baz-vektörleri uzayı bulmak demektir. Koordinat sisteminin bu şekilde döndürülmesine **ortogonal dönüşüm** denir.

H hamiltoniyen matrisini köşegen yapmak için normalize edilmiş ψ_k özfonksiyonlar **cümlesi**nden yararlanılır. $H\psi_k=E\psi_k$ ve $|H-E|\psi_k=0$ dır. $\psi_k \neq 0$ olacağından, katsayılar determinantı $|H-E|=0$ olacaktır. Bu da $\begin{vmatrix} H_{11}-E & H_{12} & \ldots\ldots \\ H_{21} & H_{21}-E & \ldots\ldots \\ \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots \end{vmatrix} = 0$ şeklindedir. Buradaki $\psi_k=\sum_{n=1}^{N} a_{kn}u_n$ şeklinde olup, $|a_{k1}|^2+|a_{k2}|^2+\ldots\ldots+|a_{kn}|^2=1$ dir. Verilen köşegen olmayan bir matrisi köşegen biçimine çevirecek bir

$$R = \left((\Psi_1).(\Psi_2)........(\Psi_n) \right) = \begin{pmatrix} a_{11} & ... & a_{1N} \\ .... & a_{22} & ... \\ a_{1N} & .... & a_{NN} \end{pmatrix}$$

rotasyon matrisi tanımlanır. Bu ψ_k vektörünün u_n bazına;
şeklinde bağlıdır. Rotasyon matrisi kullanılarak Hamiltoniyenin beklenen değeri, $E=R^{\bullet}.H.R$ matris çarpımı olarak bulunur.

BÖLÜM-4

PERTÜRBASYON TEORİSİ

1)PERTÜRBASYON TEORİSİ:Küçük değişimler teorisidir. Bir çeşit **yaklaşık hesap yöntemi**dir. En geniş uygulama alanı atom fiziği ve parçacık fiziğinde bulur. Atomların enerji seviyeleri kuantumlu bölge ve sürekli bölge olmak üzere iki biçimde ele alınır. Bu nedenle pertürbasyon da: 1)**Bağımlı durumların** pertürbasyonu, 2)Sürekli bölge pertürbasyonu (**saçılma teorisi**) olarak iki bölümde ele alınır. Bağımlı durumların pertürbasyonu da zamandan bağımsız ve zamana bağımlı olmak üzere iki ana başlık altında toplanır. Pertürbasyon teorisinde; pertürbe olmamış hamiltoniyen $H^{(0)}$ ile pertürbasyon hamiltoniyeni $H^{(1)}$ arasında $H^{(1)} << H^{(0)}$ ilişkisi vardır.

2)ZAMANDAN BAĞIMSIZ PERTÜRBASYON:

a)Dejenere olmayan ve durağan bir seviyenin zamandan bağımsız pertürbasyonu:

Bu konu literatürde **Rayleigh-Schrödinger pertürbasyonu** olarak bilinir. Bir sistemin toplam hamiltoniyeni $H=H^{(0)}+H^{(1)}=H^{(0)}+\lambda H'$ olup bunun çözümleri; $E_n=E_n^{(0)}+\Delta E_n$ ve $\psi_n=\psi_n^{(0)}+\Delta\psi_n$ şeklindedir. Burada $1\geq\lambda\geq0$ aralığında düzeltme parametresidir. ψ_n fonksiyonu ve E_n pertürbe olmuş enerji $\lambda=0$ civarında **Taylor serisine** açılmakta ve $H\psi_n = E_n\psi_n$ den λ'ya göre pertürbasyonun mertebesi belirlenmektedir. $\lambda^0\to$0.mertebe, $\lambda^1\to$1.mertebe, $\lambda^2\to$2.mertebe....

i)Birinci mertebeden yaklaşım: Bu durumda $a_{nk}^{(1)}E_k^{(0)}+<\psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}>=E_n^{(0)}a_{nk}^{(1)}+A_n^{(1)}\delta_{kn}$ şeklindedir. Buradan **k=n** dan; pertürbe edilmiş enerji $E_n \cong E_n^{(0)} + <\Psi_n^{(0)}|H^{(1)}|\Psi_n^{(0)}>$ şeklinde bulunur. **k≠n** için de k.pertürbe olmamış fonksiyonun pertürbe olmuş dalga fonksiyonuna katkısı $a_{nk}^{(1)} = \dfrac{\langle \Psi_k^{(0)}|H'|\Psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^0 - E_k^{(0)}}$

şeklindedir. bu durumda birinci mertebeden pertürbe olmuş n. dalga fonksiyonu $\Psi_n \cong \Psi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n}^{\infty} \frac{<\Psi_k^{(0)}|H^{(1)}|\Psi_n^{(0)}>}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)}$ dır.

ii)İkinci mertebeden yaklaşım: Bu durumda enerji ve dalga fonnksiyonlarına ikinci mertebeden yaklaşım ek terimleri gelir. Enerji için bu $E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n}^{\infty} \frac{\left\langle \Psi_k^{(0)}|H^{(1)}|\Psi_n^{(0)} \right\rangle^2}{E_n^0 - E_k^{(0)}}$ dur.

b)Durağan ve dejenere bir seviyenin pertürbasyonu: Herhangi bir seviyenin kaç katlı dejenere olduğu, yani dejenereliğin mertebesi $D_n = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$ olarak verilir. Atomlarda taban durumu hariç diğer seviyeler dejeneredir. Dejenere seviyeleri ayırmak için atoma dışardan elektrik ve manyetik alan uygulanır. Dejenere pertürbasyonun matematiği bir matrisi köşegen yapmaktan ibarettir. Herhangi bir n seviyesi n^2-katlı dejenere olmakla birlikte, matematiksel işlemleri kısa tutmak için n seviyesi 2-katlı dejenere olarak kabul edilebilmektedir. Bu durumda $E_n^{(0)}$seviyesine karşılık $\psi_{n1}^{(0)}$ ve $\psi_{n2}^{(0)}$ gibi iki tane öz fonksiyon vardır. Yarılmadan ortaya çıkan enerjiler ve bu özfonksiyonlar seriye açılarak, gerekli matematiksel işlemler sonunda $H_{11}^{(1)}C_{11}+H_{12}^{(1)}=E_{n1}^{(1)}C_{11}$ ve $H_{21}^{(1)}C_{11}+H_{22}^{(1)}=E_{n1}^{(1)}C_{12}$ bulunur. Bu iki denklem matris çarpımı şeklinde yazıldığında, çözüme sahip olması için, katsayılar determinantları $\begin{vmatrix} H_{11}^{(1)} - E_{n1}^{(1)} & H_{12}^{(1)} \\ H_{21}^{(1)} & H_{22}^{(1)} - E_{n1}^{(1)} \end{vmatrix} = 0$, $\begin{vmatrix} H_{11}^{(1)} - E_{n2}^{(1)} & H_{12}^{(1)} \\ H_{21}^{(1)} & H_{22}^{(1)} - E_{n2}^{(1)} \end{vmatrix} = 0$ olmalıdır. Bu determinatlara **seküler determinantlar** denir ve birinci mertebeden enerji düzeltmeleri buradan bulunabilir. Bu durumda yeni baz vektörleri $\psi_{n1}=C_{11}\psi_{n1}^{(0)}+C_{12}\psi_{n2}^{(0)}$ ve $\psi_{n1}=C_{21}\psi_{n1}^{(0)}+C_{22}\psi_{n2}^{(0)}$ dır. Burada $|C_{11}|^2+|C_{12}|^2=|C_{21}|^2+|C_{22}|^2=1$ dir. Bu pertürbasyon durumu için **Stark Olayı** önemli bir örnek oluşturur.

c)Varyasyon metodu: Bu metotta pertürbasyonun beklenen değerini hesaplamak yerine, Hamiltonifenin kendisinin beklenen değerini hesaplamak isteriz, E=<H>. Hamiltoniyenin beklenen değeri o kuantum sisteminin uygun bir parametresinin <H>=f(Z) fonksiyonu olarak ifade edilir. Bu fonksiyonun minumum değeri $\frac{\partial < H(Z) >}{\partial Z} = 0$ dan bulunur. İşte bu denkleme **varyasyon ilke denklemi** denir. Parametreye (Z) göre türev alınarak bulunan ifadenin çözümünden elde edilen parametre değeri enerjinin minumumuna (taban enerji seviyesine) karşılık gelen Z_{et} (etkin) değerdir. Buna He atomu iyi bir örnektir.

3)ZAMANA BAĞLI PERTÜRBASYON: Zamana bağlı pertürbasyonda bir kuantum sisteminin içinde bulunduğu kuantum seviyesinden, zaman içinde diğer bir kuantum seviyesine geçişin kuralları incelenir ve belirlenir. Bu tür değişimlere, foton soğurulma ya da α,β,γ ....parçalanmaları ve her türlü uyarılmalar örnek oluşturur. Bu tür değişimler kendiliğinden oluşabileceği gibi, kuantum sistemi bir dış etken (pertürbasyon) tarafından uyarılarak da oluşturabilir. Zamana bağlı pertürbasyonda bu **geçişlerin hızının** bulunması ve sistemin **ilk seviyede** bulunma **olasılığının** azalışının ve **son seviyede** bulunma olasılığının artışının hesabı yapılır.

a)Olasılık genliği ve geçiş hızı: Bu durumda olasılık genliği $a_n(t)$'ye de bağlı olarak dalga fonksiyonu $\Psi(r,t)=\sum a_n(t)\Psi_n(r)e^{-\frac{E_n}{\hbar}t}$ dır. Hamiltoniyen operatörü $H(t)=H^{(0)}+H^{(1)}(t)$ olup, Schrödinger denklemi de $H\psi(r,t)=i\hbar\,[\partial\psi(r,t)/\partial t]$ şeklindedir. H ve ψ yerlerine konup denklem çözüldüğünde geçiş hızı $\frac{da_k(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\sum_n H_{kn}^{(1)}a_n(t)e^{i\omega_{kn}t}$ olur. Sistemin her hangi bir t anında k seviyesinde bulunma olasılığı ise, $\left|a_k^{(1)}(t)\right|^2=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{t}H_{km}^{(1)}e^{i\omega_{km}t}\right|^2$ dır. Bu birinci mertebeden yaklaşımdır.

b)Sabit pertürbasyon: $H_{km}^{(1)}$'nin zamandan bağımsız olması durumundaki pertürbasyona **sabit pertürbasyon** denmektedir. Bu durumda geçiş olasılığı $\left|a_k^{(1)}(t)\right|^2=\frac{\left|H_{km}^{(1)}\right|^2}{\hbar^2}\cdot\frac{\sin^2\frac{\omega_{km}t_0}{2}}{\left(\frac{\omega_{km}}{2}\right)^2}$ dir. Bir m seviyesinden k seviyelerine (k enerji bandı) toplam geçiş olasılığı, m seviyesindeki enerji yoğunluğuna bağlı olarak, $P=\frac{\left|H_{km}^{(1)}\right|^2}{\hbar}\rho(E_m)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2(\frac{\omega t_0)}{2}}{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2}d\omega$ şeklindedir.

c)Harmonik pertürbasyon: Pertürbasyon operatörünün zamana göre $H^{(1)}(t)=H^{(1)}(0)Cos\omega t$ şeklinde değişimi **harmonik pertürbasyonu** ifade eder. Bu durumda m→k geçişinde pertürbasyon genliği; $a^{(1)}{}_k(t)=\frac{H_{km}^{(1)}(0)}{2i\hbar}\left\{\frac{1}{i(\omega_{km}+\omega)}\left(e^{i(\omega_{km}+\omega)t}-1\right)+\frac{1}{i(\omega_{km}-\omega)}\left(e^{i(\omega_{km}-\omega)t}-1\right)\right\}$ şeklinde olur. Burada kuantum sisteminin kendi öztitreşim frekansı ω_{km}, zorlayıcı dış etkenin frekensı da ω dır. Bu durumda enerji farkı $\Delta E=\pm\hbar\omega$ şeklinde olup, + uyarmalı salınım, - uyarmalı soğurma geçişini belirtir. $\omega=\omega_{km}$ rezonans şartında sistem pertürbasyon alanından maksimum enerji soğurur.

d)Elektrik dipol seçim kuralları: Dış uyarıcı (pertürbasyon) ile oluşan geçişler için belirli kurallar vardır. Elektrik dipol geçişler için pertürbasyon operatörü (yani rf alanı), elektrik dipol moment $\vec{D}=-e\vec{r}$ olmak üzere, $H^{(1)}(t)=e.r.\varepsilon_1 Cos\omega t$ dir. Bir m seviyesinden k seviyesine geçiş olasılığı $P_{m\to k}$ 'da <k|D|m>=0 (**yasaklı geçiş**), <k|D|m>≠0 (**izinli geçiş**) söz konusudur. Dalga fonksiyonlarının paritesi $(-1)^l$ ile belirlidir. $\Delta l=\pm1$ şeklinde açısal momentum kuantum sayısındaki değişime **elektrik dipol seçim kuralı** denir. Buna göre; elektrik dipol geçişler ancak **farklı pariteli seviyeler arasında** olabilmektedir. Bunun dışında manyetik kuantum sayısındaki değişimlere bağlı olarak, Δm=0 (π-**polarizasyonu**), Δm=±1 (σ-**polarizasyonu**) dır. Dış elektromanyetik alanların kuantum sistemlerini uyarması ile de geçişler olabilir. Bu durum atomik sistemlerde çok-kutuplu ışımalara yol açabilmektedir...

Mehmet TAŞKAN

KAYNAKLAR:

1)”Kuantum Fiziği” –Prf.Dr.Erol AYGÜN-Doç.Dr.D.Mehmet Zengin, Ankara Üniversitesi Yayınları-2.Baskı-1992

2)”Atom ve Molekül Fiziği”- Prf.Dr.Erol Aygün-Doç.Dr.D.Mehmet Zengin-Ankara Üniversitesi yayınları-1992

3)”Çağdaş Fiziğin Kavramları”-Arthur Beiser-Çev:Doç.Dr.M.Çetin-Doç.Dr.H.yıldırım-Prf.Dr.Z.Gülsün. Dicle Ünv.yayınları-2,baskı-1989......

4)Atom ve Molekül Fiziği, Prf Dr B:H:Bransden, Prf Dr C.J.Joachain, **Çevirenler:**Prf Dr F.Köksal, Prf Dr H.Gümüş, On dokuz Mayıs Ünv.

5)Fizikte matematik metotlar ,Prf Dr C.Önem, Erciyes Ünv, 3.baskı, Birsen Yay.

6)Physics-part 2, Prf Dr D.Halliday, Prf Dr R.Resnick, Wiley International Edition.

7)Katıhal fiziğine giriş, Prf Dr T.Nuri Durlu, Ankara Ünv, 1992 2.Baskı.