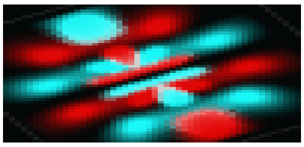
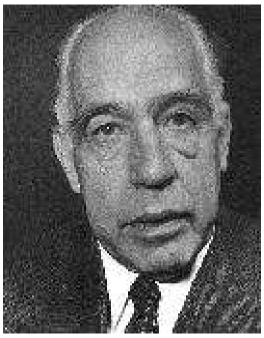
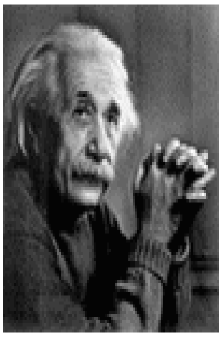
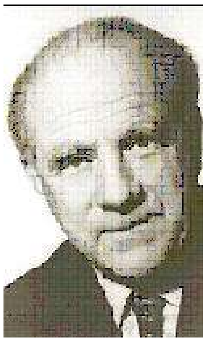
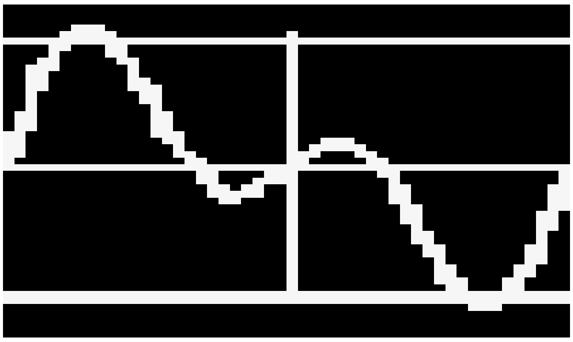


KUANTUM FİZİĞİ


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



KUANTUM FİZİĞİ-1

BÖLÜM-1

KUANTUM FİZİĞİNE GİRİŞ

1)FİZİK TEORİLERİ:a)Klasik Fizik: Klasik fizik maddeyi makroskopik bir yaklaşımla ele alarak inceler. Klasik mekaniğin kanunları **Newton** kanunlarıdır. Klasik elektromanyetizmanın temel denklemleri ise **Maxwell** denklemleridir.

b)Görelilik teorisi: Özel görelilik ve genel görelilik olmak üzere iki çeşittir. Özel görelilik ışık hızına yakın hızlardaki hareketleri inceler. Genel görelilik ise genel kütleçekimi uzayın eğriliğini inceler. Özel görelilik 1905'de, genel görelilik ise 1915'de **Einstein** tarafından geliştirilmiştir.

c)Kuantum teorisi: 1900 yılında **Planck** tarafından ortaya atılmıştır. Molekül, atom, çekirdek, nükleon, temel parçacıklar ve kuarklar gibi küçük parçacıkları inceler. Bu teori olasılıklar üzerine kuruludur. **Dirac, Heisenberg, Schrödinger, Pauli,...**gibi bilim adamları tarafından geliştirilmiştir. Kuantum mekaniğinin temel denklemi **Schrödinger denklemi** olarak kabul edilmektedir. Parçacıkların elektromanyetik etkileşmelerini inceleyen teoriye de **Kuantum elektrodinamik** denmektedir. 1960'lı yıllarda **Tomanaga, Schwinger** ve **Feynman** tarafından geliştirilmiştir. 1980'li yıllarda da kuarklar arasındaki etkileşmeyi belirleyen **Kuantumkromodinamik** (kuantum renk dinamiği) geliştirilmiştir. 2000'li yıllar da ise **sicim teorisi** üzerine çalışılmaktadır.

2)PLANCK'IN KUANTUM HİPOTEZİ: Bir boyutta ν frekansı ile basit harmonik hareket yapan bir titreşici sistemin kuantum enerjisi E_n=nhν ile belirlidir. Burada n=1,2,3... şeklinde kuntum sayıları h ise Planck sabitidir (6,62.10^{-34}J.s). Bu durum enerjinin kesikli yani kuantumlu olduğunu belirtmektedir.

3)SİYAH CİSİM IŞIMASI: Bir siyah cisim gelen fotonları (ışık taneciklerini) yutar, sonra onları farklı frekansta yayınlar. Bu durum klasik fizikte Rayleigh-Jeans teorisi ile açıklanmaya çalışıldı, ancak yüksek sıcaklıklarda başarısız oldu. Planck, bu durumu Maxwell-Boltzman dağılımını da hesaba katarak açıkladı. Buna göre Planck'ın ışıma formülü; $\rho_T(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{d\nu}{e^{h\nu/kT}-1}$ dir. Burada $\rho_T(\nu)$, enerji yoğunluğu, ν frekens, T sıcaklık, c ise ışık hızıdır.

4)FOTOELEKTRİK OLAY: Metallerin üzerine ışık göndererek elektron sökme olayıdır. 1905 yılında **Einstein** tarafından formülüze edilmiştir. hν=hν_0+$\frac{1}{2}mv^2_{\max}$ şeklindedir. Yani gelen fotonun enerjisi, metalin iş fonksiyonu ile sökülen foto-elektronların maksimum kinetik enerjileri toplamına eşittir. Oluşan foto-akımı durdurmak işin gerekli potansiyele kesme potansiyeli denir.

5)COMPTON OLAYI: Bu olay da foto-elektrik olay gibi ışığın tanecikli yapısını doğrulayan olaydır. Olay duran bir elektrona bir fotonun çarpıp saçılması olayıdır. Foton saçıldığında dalga boyu değişir. Bu olay 1922'de **Compton** tarafından keşfedilmiştir. Fotonun dalga boyundaki değişim $\Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c}(1-\cos\theta)$ dır. Burada θ, fotonun saçılma açısı, h/m_0c ise Compton dalga boyudur (0,024 A^0).

6)DE BROGLİE HİPOTEZİ: Hareket eden bütün parçacıklara hareketleri süresince bir dalga eşlik eder, bu dalgalara **de Broglie dalgaları** denir. Bu dalganı dalga boyu λ=h/P dir. Burada P=mV şeklinde momentumdur. Bu dalgalara kuantum mekaniğinde Schrödinger dalgası ya da olasılık dalgası da denir.

7)BOHR TÜMLEME İLKESİ:1928 yılında Niels Bohr; elektromanyetik ışınımın dalga ya da parçacık görünümünün birbirini tümlediğini belirtti. Bu durum kuantum mekaniğinde, dalga+tanecik=Dalga-taneciği şeklinde ifade edilmektedir.

8)HEİSENBERG'İN BELİRSİZLİK İLKESİ: Klasik fizik ile kuantum fiziğinin en önemli ayrım notalarından birisidir. Klasik fizikte herhangi iki fiziksel büyüklük eş-zamanlı olarak istenilen duyarlıkla belirlenebilir anlayışı vardır. Kuantum fiziğinde ise bu durum belirsizlik ilkesiyle verilmektedir. Belirsizlik ilkesi; koordinat-ilgili momentum, enerji-zaman ve açısal yerdeğiştirme-ilgili açısal momentum gibi kavramlar çiftinin eş zamanlı olarak istenen duyarlılıkla belirlenemeyeceğini söyler. Örneğin atom çevresinde hareket eden bir elektronun konumundaki belirsizlik azalırsa, momentumundaki belirsizlik artar. Bunların bağıntıları; $\Delta q.\Delta P \geq \hbar$, $\Delta t.\Delta E \geq \hbar$, $\Delta\theta.\Delta L \geq \hbar$ şeklindedir.

9)KUANTUM MEKANİĞİNİN POSTÜLALARI: Kuantum mekaniğinde hareketli bir parçacığa eşlik eden dalga fonksiyonu $\psi(x,y,z,t)$ ile gösterilir. ψ'nin tek başına anlamı, ya da boyutu yoktur. $|\psi(x,y,z,t)|^2 dV$ ise t anında parçacığın dV=dxdydz hacim elemanında bulunma olasılığını verir. Kuantum mekanik teori üç ana postüla üzerine kuruludur:

a)$0<r<\infty$ iken $\psi(r)$ sürekli olmalı,$0<r<\infty$ aralığında $d\psi(r)/dr$ sürekli olmalı, $r\rightarrow\infty$ iken $\psi(r)=0$

b)Her fiziksel kavram bir operatör O ile temsil edilir. Operatör dalga fonksiyonuna $O\psi=o\psi$ şeklinde uygulanır. Burada o, O operatörünün özdeğeridir.

c)Bir operatörün beklenen değeri $<O> = \dfrac{\int \Psi^* O \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV}$ şeklindedir. ψ normalize edilmiş ise sadece pay kısmı alınır. Bunun Dirac gösterimi ise <n'l'm'|O|nlm> şeklindedir.

10)MOMENTUM VE ENERJİ OPERATÖRLERİ: Bir parçacığa eşlik ederek yayılan düzlem dalganın ifadesi $\Psi(x,t)=e^{i(kx-\omega t)}$ şeklindedir. Burada dalga sayısı $k=p/\hbar$, ω açısal hızı da $E/\hbar$ dır. Buradan momentum operatörü $P=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$, enerji operatörü de $H=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}$ olarak bulunur.

11)OLASILIK AKISI: Bir parçacığın olasılık yoğunluğunun uzayda yer değiştirmesine olasılık akısı denmektedir. Bu durum bir boyutta, $\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t}+\vec{\nabla}.\vec{S}(x,t)=0$ şeklinde belirtilir. Bu olasılık akısının ve yoğunluğunun korunduğunu belirtir.

12)SCHRÖDİNGER DENKLEMİ: Bir parçacığın toplam mekanik enerjisi $E=\frac{p^2}{2m}+U$ şeklindedir. Momentum operatörü denklemde yerine konur ve $H\psi=E\psi$ den Schrödinger denklemi bulunur. $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+U(x,y,z)\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ zamana bağımlı Schrödinger denklemidir. $(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x,y,z))\Psi=E\Psi$ zamandan bağımsız Schrödinger denklemidir. Parçacık ışık hızına yakın hızla hareket ederse toplam enerjisi $E^2=P^2C^2+M_0^2C^4$ şeklindedir. Bu durumda parçacığın rölativistik Schrödinger denklemi $(\nabla^2-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2})\Psi=(\frac{m_0c}{\hbar})^2\Psi$ dir.

13)POTANSİYELLER: Schrödinger denklemi genelde üç potansiyel durumu için çözülür.

a)U=0 serbest parçacık hali: Denklem bir boyutta $\Psi(x)=N_1e^{i\sqrt{2mE}x/\hbar}+N_2e^{-i\sqrt{2mE}x/\hbar}$ çözüme sahiptir. Bu Euler açılımı yardımıyla $\psi(x)=A\cos k_0t+B\sin k_0t$ olarak da yazılabilir.

b)U=U₀ sabit potansiyeli: Eğer $E>U_0$ ise denklem, $\Psi(x)=N_1e^{ik_1x}+N_2e^{-ik_1x}$ şeklindedir. Burada $k_1=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U_0)}$ dır. N_1 ve N_2 sabitleri sınır koşullarından bulunur. Eğer $E<U_0$ ise denklem, $\Psi(x)=Ce^{-k_2x}+De^{k_2x}$ şeklinde çözüme sahiptir. Burada $k_2=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}$ dir. Böyle potansiyellere potansiyel basamağı ve potansiyel engeli denmektedir. Sonlu bir potansiyel basamağında olasılık akıları $S_{i,y,g}=\frac{\hbar k_{i,y,g}}{m}|A_{i,y,g}|^2$ den bulunur. Buna göre basamağın yansıtma katsayısı; $R=S_y/S_i$, geçirgenlik katsayısı $T=S_g/S_i$ ve toplam $R+T=1$ dir.

c)U=U(x) değişen potansiyeller: Değişen potansiyellere örnek; basit harmonik titreştirici ve Coulomb potansiyelleridir. Bunlar bir katıdaki atomların titreşimi ve atomdaki çekirdeğe bağlı elektronların hareketini kapsar.

14)SONSUZ DERİNLİKTE POTANSİYEL KUYUSUNDA PARÇACIK: Bu potansiyel kuyusu için sınır koşulları; $0<x<a$ için $U(x)=0$, $x<0$ ve $x>a$ için $U(x)=\infty$ dur. Parçacık kuyu içerisinde serbesttir ve parçacığın Schrödinger denklemi $\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi=0$ dır. Bu denklemin çözümü $\psi(x)=A\sin k_0x+B\cos k_0x$

şeklindedir. Burada $k_0=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ dir. Sınır şartlarından $k_0a=n\pi$ (n=1,2,3..) ve buradan da enerji $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ olarak bulunur. Normalize edilmiş dalga fonksiyonu ise $\Psi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}$ olarak bulunur. Burada n kuantum sayısıdır.

15)HARMONİK TİTREŞİCİ: Bir boyutta basit harmonik hareket yapan bir sistemin hamiltoniyen operatörü; $H=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$ şeklindedir. Bunun için Schrödinger denkleminde $y=\left(\dfrac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x$ ve $\varepsilon_n=\dfrac{2E_n}{\hbar\omega}$ değişkenleri değiştirilirse, $\left(\dfrac{d^2}{dy^2}-y^2\right)\Psi_n(y)=-\varepsilon_n\Psi_n(y)$ denklemi elde edilir. Enerji için $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$, dalga fonksiyonu için de $\Psi_n(y)=N_n(y)e^{-y^2/2}$ elde edilir. Bu fonksiyonun normalize edilmiş şekli, $\Psi_n(x)=(\dfrac{m\omega}{\hbar\pi})^{1/4}(2^n n!)^{-1/2}H_n(\sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}x)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ dır. Burada $H_n(y)$'lere **Hermite polinomları** denir. Bazıları şöyledir: $H_0(y)=1$, $H_1(y)=2y$, $H_2(y)=4y^2-2$, $H_3(y)=8y^3-12y$,...

BÖLÜM-2

ATOMLARIN KUANTUMLU YAPISI

1)BOHR ATOM MODELİ: Atom modelleri tarihsel sırasına göre; Thomson, Rutherford , Bohr modeli ve modern (kuantum) atom modeli şeklindedir. Bohr modelini 1913'de Neiles Bohr, klasik fizikle kuantum fiziğinin bir bileşimi şeklinde oluşturmuştur. Bohr modeli üç postüla (varsayım) üzerine kuruludur. 1)Elektronlar ışıma yapmadan belirli yörüngelerde hareket edebilirler. 2)Kararlı seviyelerde açısal momentum $L=n\hbar$ şeklinde kuantumludur. 3)Elektronlar, ancak kararlı seviyeler arasında atlamalar (geçişler) yaparken ışıma yaparlar. Yapılan ışımanın frekensı enerji seviyeleri arasındaki farka, $\nu=(E_i-E_s)/h$ şeklinde bağlıdır.

Bohr modeli hidrojen ve tek elektronlu atomlara başarıyla uygulanabilmektedir. Merkezkaç ve Coulomb kuvvetinin etkisindeki elektronun hızı $V_n=V_1/n$ şeklinde kuantumlanır. Burada $V_1=ke^2/\hbar$ ve n kuantum sayısıdır. Elektronun yörünge yarıçapı da $r_n=n^2r_1$ şeklinde kuantumlanır. Burada $r_1=\hbar^2/mke^2=0{,}529$ A^0 şeklinde **Bohr yarıçapı**dır. Elektronun toplam enerjisi ise; $E_n=-\dfrac{k^2e^4m}{2\hbar^2}\dfrac{1}{n^2}$ şeklinde kuantumludur. Buradaki sabit terim $E_1=13{,}6$ eV olup birinci seviyeden (taban durumu) iyonlaşma enerjisidir. Burada m ise $m=m_em_p/(m_e+m_p)$ şeklinde indirgenmiş kütledir. Bu durumda iki seviye arasındaki geçiş frekansı ise

$\upsilon = \frac{E_I}{h}(\frac{1}{n_s^2} - \frac{1}{n_i^2})$ şeklindedir ve hidrojenin spektrumu buradan incelenir. Bu bağıntılara rölativistik düzeltme ve yörünge düzeltmeleri yapılabilmektedir.

2)HİDROJEN ATOMUNUN DALGA MEKANİĞİ: 1925 yılında Schrödinger dalga teorisi ortaya çıkınca atomik yapı da bu yeni teori ile açıklanmak istendi. Bu amaçla yapılan teorik çalışmalar deneysel gözlemlerle çok iyi uyum gösterdi. Böylece ortaya çıkan yeni atom modeline **dalga modeli** ya da **kuantum mekaniksel atom modeli** dendi. Hidrojen atomu en basit atom ve hidrojen atomunun Coulomb potansiyeli küresel simetrik olduğu için dalga modelinin en basit uygulamasını oluşturur. Hidrojen atomunda elektronun zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ;

$$\nabla^2\Psi(r,\theta,\varphi) + \frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{ke^2}{r})\Psi(r,\theta,\varphi) = 0$$

şeklindedir. Dik koordinatlar ile küresel koordinatlar arsında x=rsinθcosφ, y=rsinθsinφ, z=rcosφ ve $dV=r^2dr$ sinθ dθ dφ bağıntıları vardır. Küresel koordinatlarda Schrödinger denkleminin açık şekli

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d\Psi}{dr}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Psi}{d\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2\Psi}{d\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{ke^2}{r})\Psi = 0$$

dır. Bu denklem değişkenlerine ayırma yöntemi ile çözülebilmektedir. ψ dalga fonksiyonunun değişkenleri (çarpanları), ψ (r,θ,φ)=R(r).Θ(θ).Φ(φ) şeklindedir. Burada değişkenler $0 \le r \le \infty$, $0 \le \theta \le \pi$ ve $0 \le r \le 2\pi$ aralıklarındadır. Bu Schrödinger denkleminde yerine konur ve denklem değişkenlere ayrılırsa:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + \frac{ke^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R = 0$$

şeklinde yarıçapa bağlı kısım,

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}) + \left[l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta = 0$$

şeklinde açıya bağlı kısım ve $\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m_l^2\Phi = 0$ şeklinde azimutal açısına bağlı kısım elde edilir. Yarıçapa bağlı kısmın çözümü;

$$R_{nl}(r) = -\left\{(\frac{2Z}{na_0})^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2} e^{-\frac{Zr}{na_0}}(\frac{2Z}{na_0})^l L_{qj}(\frac{2zr}{na_0})$$

şeklindedir. Burada L_{qj} ,kuantum sayısı q=0,1,2... ve j≤q için **Asosiye laguerre polinomu**dur. Açıya bağlı kısmın çözümü ;

$$\Theta(\theta)=(-1)^{[m_l+|m_l|]/2}\left[\frac{2l+1}{2}\cdot\frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!}\right]^{1/2}P_{l,m_l}(\cos\theta)$$

şeklindedir. Buradaki $P_{l,ml}(\cos\theta)$ **Asosiye legendre polinomu**dur. Azimutal açısına bağlı kısmın çözümü ise $\Phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm im_l\varphi}$ şeklindedir. Açılara bağlı çözümlerin bileşimine $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ **küresel harmonikler** denir.

Burada, **n baş kuantum sayısı,** ℓ **yörünge kuantum sayısı, m manyetik kuantum sayısı**dır. n=1,2,3,...,∞, ℓ =0,1,2,...,(n-1), m=-ℓ ,....0,.....+ℓ dir.

Hidrojen atomunun enerjisi Bohr modelindeki ile aynıdır. Fakat yarıçap hem baş kuantum, hem de yörünge kuantum sayılarına $r_n=\frac{a_0}{2Z}\left[3n^2-l(l+1)\right]$ şeklinde bağlıdır. Bu yarıçapın beklenen değeridir ($<r_n>$). Burada a_0 Bohr yarıçapı, Z atom numarasıdır. Schrödinger denkleminden elde edilen çözümler birleştirilerek genel çözüm zamana da bağlı olarak; $\Psi_{n,\ell,m}(r,\theta,\varphi,t)$ şeklinde bulunur. Örneğin; $\Psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}(\frac{Z}{a_0})^{3/2}e^{-Zr/a_0}$ dır.

3)OLASILIK DAĞILIM FONKSİYONU:İstatistik fizikte, olasılık yoğunluğuna bağlı bir olasılık dağılım fonksiyonu Q(r,θ,φ)=∫ρ(r,θ,φ)dV=∫ψ^* ψ dV ile tanımlanır. Burada $dV=r^2dr\sin\theta d\theta\, d\varphi$ dir. Bu durumda oalsılık dağılım fonksiyonu Q(r,θ,φ)= $\int_0^\infty p(r)dr\int_0^\pi P(\theta)d\theta\int_0^{2\pi}P(\varphi)d\varphi$ şeklindedir.

4)AÇISAL MOMENTUM:Açısal momentum ifadeleri Schrödinger denkleminin Coulomb potansiyeli ile çözümünde dalga fonksiyonunun sağlaması gereken sınır koşullarından çıkmaktadır. Bu kuantum mekaniksel teoride **yörünge açısal momentumu**dur. $L=\sqrt{l(l+1)}\hbar$ şeklindedir. Burada l yörünge açısal kuantum sayısıdır. yörünge açısal momentumun z bileşeni de $L_z=m_l\hbar$ dır. Burada m_l yörünge manyetik kuantum sayısıdır. Bir de elektronun kendi etrafında dönmesi ve yönelimiyle ilgili **spin açısal momentumu** vardır. Bu da yörünge açısal momentuma benzer olarak $S=\sqrt{s(s+1)}\hbar$ dir. Burada s spin açısal kuantum sayısıdır. S'nin z bileşeni $S_z=m_s\hbar$ dır. Burada m_s spin manyetik kuantum sayısıdır ve elektronlar için ±1/2 dir. Kuantum mekaniğinde bu açısal momentumların yanısıra; elektronun toplam açısal momentumu J, çekirdeğin spin açısal momentumu I ve atomun toplam açısal momentumu F tanımlanmıştır. Bunların bağıntıları da diğer açısal momentumlara benzerlik gösterir. Atomların spektral serilerinin adlandırması açısal momentum kuantum sayılarına göre yapılır.

5)PAULİ SPİN MATRİSLERİ: Pauli, elektron, proton, nötron...vb spin kuantum sayısı ½ olan parçacıklar için spin matrisleri tanımlamıştır. Bu matrisler; $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ dır. Spin açısal momentumları da $S_x=(1/2)\hbar\sigma_x$, $S_y=(1/2)\hbar\sigma_y$ $S_z=(1/2)\hbar\sigma_z$ dir.

Bu parçacıkların uzayı iki boyutludur ve iki tane spin dalga fonksiyonuna (spinör) sahiptirler. Spin uzayını geren $\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (spin yukarı), $\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (spin aşağı) şeklinde baz vektörleri vardır. Kuantum sisteminin herhangi bir halindeki spin dalga fonksiyonu, $a^2+b^2=1$ olmak üzere, $\chi_{sm_s} = a\alpha + b\beta = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ şeklindedir. Hidrojen atomunun dalga fonksiyonu, konum, zaman ve spine bağlı olarak çok daha geniş şekilde yazılabilir.

6)DİPOL MOMENTLER: Her açısal momentuma bir dipol momenti eşlik eder. Dipol momenti de açısal momentum gibi vektörel bir niceliktir.

a)Elektronun dipol momenti:r yarıçaplı Bohr yörüngesinde dolanan bir elektron bir i akımı oluşturur. Bu akım halkasının dipol momenti $\mu_l=iA=(-ev/2\pi r)r^2$ dir. Bu bağıntı $L=mvr=\sqrt{l(l+1)}\hbar$ ile birleştirildiğinde, $\mu_l = -\frac{e\hbar}{2m}\sqrt{l(l+1)}$ şeklinde yörünge dipol momenti bağıntısı elde edilir. Burada $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ **Bohr manyetonu**dur. Yörünge dipol momenti, yörünge açısal momentum(L) ve **yörünge Lande çarpanı (g_l)** nı içerecek şekilde $\vec{\mu}_l = \frac{g_l\mu_B}{\hbar}\vec{L}$ olarak da yazılabilir. Burada $g_l = (\vec{\mu}_l/\mu_B)/(\vec{L}/\hbar) = -1$ dir. Yörünge dipol momentin yörünge açısal momentuma oranına ise **yörünge jiromanyetik oran** denir ve γ_l ile gösterilir.

Yörünge dipol momentine benzer olarak **spin dipol momenti** $\vec{\mu}_s = \frac{g_s\mu_B}{\hbar}\vec{S}$ şeklindedir. Burada $g_s=-2$ olup, **spin Lande çarpanı** olarak adlandırılır. Elektron için spin kuantum sayısı s=1/2 olduğundan spin dipol momentunun büyüklüğü $\mu_s = -\sqrt{3}\mu_B$ dir. Elektronun **spin jiremanyetik oranı** $g_s\mu_b/\hbar=\gamma_s$ dir.

b)Elektronun toplam dipol momenti: Elektronun toplam açısal momentumu $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ dir. Buna göre toplam dipol moment $\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = \mu_l\cos\theta_{LJ} + \mu_s\cos\theta_{SJ}$ şeklindedir. Burada $\cos\theta_{LJ}=(J^2+L^2-S^2)/2JL$ ve $\cos\theta_{SJ}=(J^2+S^2-L^2)/2SJ$ dir. Buradan toplam dipol moment, $\mu_j = g_j\mu_B\sqrt{j(j+1)}$ olarak bulunur. Burada

$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$ dir. Toplam açısal kuantum sayısı olan j, $(l-s) \le j \le (l+s)$ aralığında değerler alır.

c)Çekirdek dipol momenti: Bir atomun çekirdeği nükleonlardan (proton, nötron) oluşur. çekirdek içerisindeki nötron ve protonlar spin hareketi yaparlar. Bu nedenle çekirdek içinde çok sayıda, proton ve nötron spin dipol momentleri vardır. Bunlar çiftlenirler, çiftlenmemiş olarak kalan dipol momentler çekirdeğin dipol momentini oluşturur. Çekirdeğin **spin açısal momentumu** $I = \sqrt{i(i+1)}\hbar$ şeklindedir. Benzetme yolu ile **çekirdeğin spin dipol momenti** $\vec{\mu}_i = \frac{g_i \mu_N}{\hbar}\vec{I}$ olarak bulunur. Burada $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p}$ **nükleer manyeton**dur.

d)Atomun toplam dipol momenti: Atomun elektronlarından ve çekirdeğinden kaynaklanan dipol momentlerin toplamı $\vec{\mu}_f = \vec{\mu}_j + \vec{\mu}_i$ şeklindedir. Atomun toplam açısal momentumu $F = \sqrt{f(f+1)}\hbar$ şeklinde, f **toplam açısal momentum kuantum sayısı**na bağlıdır. f kuantum sayısı $(j-i) \le f \le (j+i)$ aralığında değerler alır. Atomun toplam dipol momenti vektör modeli çerçevesinde hesaplandığında vektörel olarak $\vec{\mu}_f = \frac{g_f \mu_B}{\hbar}\vec{F}$ şeklinde yazılabilir. Burada $g_f = g_i \frac{f(f+1) + j(j+1) - i(i+1)}{2f(f+1)} - \frac{g_j}{1836}\frac{f(f+1) + i(i+1) - j(j+1)}{2f(f+1)}$ dir

7)LARMOR FREKANSI: Bir topacın hareketi incelendiğinde, topacın kendi simetri ekseni etrafında bir **spin hareketi** yapmakla birlikte, çekim alanı doğrultusu (düşey) etrafında da bir **presesyon hareketi** yaptığı gözlenir. Bu hareketin aynısı bir dış manyetik alan içerisine konan manyetik dipol momentlerinde de gözlenir. Manyetik dipol momentlerinin dış manyetik alan etrafındaki presesyon frekansına **larmor frekansı** denir. Bu temel parçacıkların, atomların, moleküllerin dış manyetik alan içindeki davranışlarını açıklamada önemli yer tutar. Manyetik modelde tork $\vec{\tau} = \vec{\mu}_s \times \vec{B}_0 = d\vec{S}/dt$ dir. Presesyon hareketinin Larmor frekansı **spin dipol momenti için** $\omega_s = \frac{g_s \mu_B B_0}{\hbar} = \gamma_s B_0$, **yörünge dipol momenti için** $\omega_l = \gamma_l B_0$, elektronun toplam dipol momenti için $\omega_j = \gamma_j B_0$ dır.

8)MANYETİK REZONANS: Kuantum sistemlerinin kendilerine özgü özfrekansları vardır. Örneğin bir sistemin larmor frekansı onun öz frekansıdır. Larmor frekansı jiromanyetik orana ve dış manyetik alan şiddetine bağlıdır. Kendi öz frekansı ile titreşmekte olan bir kuantum sistemini uyarmak (rezonansa getirmek) için, B_0 alanına dik doğrultuda bir radyo frekansı alanı (rf) uygulanır. Bunun için gerekli rf alanı

$B(t)=2B_1\cos\omega_1 t$ şeklindedir. Bu durumda dipol moment $\omega_0=\gamma B_0$ frekanslı ve $\omega_1=\gamma B_1$ frekanslı iki torkun etkisinde kalır. Burada ω_1 değiştirilebilen frekanstır. Bu frekans değiştirilerek $\omega_1=\omega_0$ (rezonans şartı) yapıldığında sistem, B_0 etrafında presesyon hareketini sürdürmekle birlikte, B_1 etrafında da aynı frekanslı presesyon yapmaya başlar. Bu durumda sistem yeni bir enerji seviyesine geçişe başlar. Bu geçişlerde sistem dışarıdan (rf alanından) enerji soğurur. Rezonans şartı sağlandığında sistem bir enerji seviyesinden diğerine geçmek üzere bir **"flip-flop"** spin yönünün ters çevrilmesi (↓←→)hareketi yapar. İşte bu geçişlere **rezonans geçişleri** denir. Bu olay manyetik alanla oluşturulduğu için buna **manyetik rezonans** denir.

9)RABİ-REZONANS DENEYİ: Lande spektroskopik yarılma çarpanlarının değerleri, bazı kuantumelektrodinamik etkiler sonucu Dirac değerlerinden, az da olsa farkederler. Bu farklılık kısaca

$$g_l=-(1-\frac{m_e}{M_p})$$

ve g_s=-2,0022.... şeklindedir. Farklılığı yaratan etkileşmelerin başında; çekirdeğin sonlu kütle düzeltmesi, elektronun rölativistik kütle ya da enerji düzeltmesi, virtüel ışıma, boşluk kutuplanması, aynı J değerindeki seviyelerin karışımı (configuration mixing),....dir. Lande spektroskopik yarılma çarpanını ölçmek, atomik spektroskopi araştırmalarında önemli yer tutar. Bu çarpan

$$g=\frac{\nu_0}{(\mu_B/h).B_0}$$

bağıntısından deneylerle bulunur. Burada ν_0 rezonans frekansıdır. Bu da **ADMR spektrometre**siyle belirlenebilmektedir.

10)BREİT-WİGNER REZONANS FORMÜLÜ VE LORENTZ ÇİZGİ ŞEKLİ: Kuantum sistemlerinin enerji kuantum seviyeleri arasında yaptığı geçişlerde salınan fotonların genliği sönümlüdür. Atomlarda uyarılma seviyelerinin ortalama ömrü 10^{-8}s kadardır. Salınan fotonların genliği $A_s(t)=A_{os}e^{-(t/2\tau)}e^{-i\omega t}$ şeklinde zamana bağlıdır. Kuantum sisteminin $F(t)=F_0e^{-i\omega_1 t}$ ile dış kaynak tarafından sürülmesi sonucunda salınımın diferansiyel denklemi;

$$\frac{dA_z(t)}{dt}+(i\omega+\frac{1}{2\tau})A_z(t)=F_0e^{-i\omega_1 t}$$

şeklindedir. Zorlamalı haldeki bu denklemin kararlı hal çözümü

$$A_z(t)=\frac{iF_0}{(\omega_1-\omega_0)+i/2\tau}e^{-i\omega_1 t}$$

dır. $\omega_1=\omega_0$ durumu rezonans soğurmasıdır. Sistemden saçılan ışık şiddeti genliğin karesiyle orantılıdır. Buna göre saçılmaya uğrayan ışık şiddeti;

$$S(\omega_1)=S(\omega_0)\frac{(1/2\tau)^2}{(\omega_1-\omega_0)^2+(1/2\tau)^2}$$

şeklindedir ve buna **Breit-Wigner rezonans formülü** denir. Bu bağıntıda $S(\omega_0)=1$ ve $S(\omega_1)=L(\omega_1)$ alındığında oluşan fonksiyona Lorentz dağılımı, bunun grafiğine de **Lorentz çizgi şekli** denir.

11)DİRAC δ-FONKSİYONU: Kuantum fiziğinde dalga fonksiyonunun iç çarpımı ile ilgili **Kronecker-δ** kavramı vardır. Bu kavram; $\Psi_n^*\Psi_{'n} = <n|n'> = \delta_{nn'} = \begin{cases} 1 & n=n' \\ 0 & n \neq n' \end{cases}$ şeklinde olup, buna ψ fonksiyonlarının **ortonormallik şartı** denir. Dirac-δ ise kesikli değil, **sürekli** bir fonksiyondur. Bu fonksiyon; $x \neq x_0$ da $\delta(x-x_0)=0$, $x=x_0$ da $\delta(x-x_0)=\infty$ ve $\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)dx=1$ dur. Bir çok dağılım fonksiyonunun limit hali Dirac-δ fonksiyonuna dönüşür. Örneğin; Gauss dağılımı $\delta(x)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}e^{-x^2/\varepsilon}$, Lorentz dağılımı $\delta(x)=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}$ şeklindedir. Dirac-δ vektörel gösterimde ise $\int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{r})\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)d^3\vec{r} = f(\vec{r}_0)$ dır.

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.