Ders 36

Metindeki ilgili bölümler §5.7

Bir atomun üzerine ışık tutarsanız ne olur?

Zamandan bağımsız pertürbasyon teorisi tartışmamızda bu noktaya kadar, sonuçlarımızın daha çok somut, özel uygulamalarına girmekten gayretli bir biçimde sakındığımı fark edeceksinizdir. Bu, kısmen ödevlerinizde nispeten kolay uygulamaları yapacak olduğunuzdan ve o sırada daha girift uygulamaların da pertürbatif yaklaşıklığın genel özelliklerinden başka tarafa çok fazla çekeceğindendi. Ayrıca, ben pertürbatif bakış açısını sadece şu veya bu örnek hali çözmek için kullanmayı istemedim, daha ziyade pertürbatif yaklaşıklığın geçerli olduğu her zaman varolan kuantum dinamiği üzerinde genel bir bakış açısı vermek istedim. Fakat şimdi, bu teknolojinin yararlı olduğu güzel bir örneğe göz atsak iyi olur.

Bir atomik elektronun, (zayıf) düzlem elektromanyetik bir dalgaya maruz bırakıldığındaki pertürbatif dinamiğini çalışacağız. Bu, bu bölümün başlığında sorulan soruya (en azından kısmen) cevap vermek için kullanılabilecek basit bir modeldir. Hikaye biraz uzun, ama faydalı ve öğretici olduğunu düşünüyorum.

Esas olarak elektronun, pertürbasyonun yokluğunda belli bir potansiyelin bir "bağlı durağan durum"unda olduğu ve elektromanyetik alanın bağlı ve iyonize durumlar arasındaki uyarılmış geçişlere hizmet ettiği bir vaziyet ile ilgileniyoruz. Atomu bir V_0 potansiyeli ile bağlı spinsiz bir parçacık olarak modelliyoruz. Elbette, atomun daha safistike modelleri mevcuttur. V_0'ın, bir merkezcil potansiyel veya hatta Coulomb potansiyeli olacak şekilde üzerine eğilebilirdik, fakat bir süre için bu tip seçimler yapmak zorunda değiliz. Bu nedenle, pertürbe edilmemiş Hamiltonyen

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + V_0(\vec{R})$$

formundadır. Pertürbe edilmemiş durumlar tam olarak H_0'ın enerji özdurumlarıdır – bunlar atomun "enerji düzeyleri"dir.

Şimdi, elektromanyetik ışımayı tanıtmak istiyoruz. Parçacığın etkileşeceği toplam elektromanyetik alan bu halde, V_0 ile temsil edilen alan (örneğin bir elektrostatik alan) ile gelen ışıma alanının üstüste gelmesi olacaktır. Işımayı $(\phi(\vec{r},t), \vec{A}(\vec{r},t))$ vektör potansiyellerini kullanarak tarif edelim. Elektromanyetik kaynakların bulunmadığı uzay bölgelerinde elektromanyetik potansiyelleri "ışıma ayarı"nda :

$$\phi = 0, \qquad \nabla \cdot \vec{A} = 0.$$

olacak şekilde seçmenin her zaman mümkün olduğu elektromanyetik teorinin standart bir sonucudur. Bu ayarda elektrik ve manyetik alanlar bu potansiyeler tarafından

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

ifadelerine uygun şekilde belirlenirler. Bu tarifi sadece elektromanyetik pertürbasyonu dahil etmek istediğimiz için kullanıyoruz. Eger istenseydi, bu tarifi, toplam elektromanyetik alana V_0'ın katkısını da içerecek şekilde kullanabilirdik. Ancak bu vaziyette, pertürbe edilmemiş sistem ile pertürbasyon arasında ayrım yapabilmek kolay değildir.

Sistemimizde bütün elektromanyetik kaynakları ihmal ederek EM alanın baştan bir defa tanımlandığı, fiziksel bir model kullanıyor olduğumuzu dikkate alın. Tabii ki, atomik elektronun kendisi de bir EM alan kaynağı olarak vazife yapar. Bundan dolayı, bu etkinin gözardı edilebileceği bir yaklaşıklık içindeyiz. Bununla birlikte, en sonunda dinamiği, elektron tarafından ışıma yayımı veya soğurulması ile eşlik edilen enerji düzeyi geçişleri olarak yorumlayacağız! Bu, içerisinde uygun yaklaşıklıklar yaptığımız fakat, yorumumuz matematiksel modelin geçerliliğinin ötesine gitse bile, sonuçları yorumlamak için fiziksel davranış hakkındaki bilgimizi kullandığımız tipik bir "fiziksel" analizdir. Fizikte, bu şekilde akıl yürütme bir sanat formuna akraba bir şeydir.

Bundan sonra, size, *belirli* bir elektromanyetik alanda hareket eden, yükü q ve kütlesi m olan bir parçacığın Hamiltonyen'in formunu hatırlatırım. Elimizde,

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{P} - \frac{q}{c}\vec{A})^2 + q\phi$$

var, burada $(\phi, \vec{A})$, muhtemelen zamana bağlı, skaler ve vektör potansiyeleri alıp bunları

$$\phi = \phi(\vec{R}, t), \qquad \vec{A} = \vec{A}(\vec{R}, t)$$

vasıtasıyla operatör şeklinde görmek suretiyle elde edilmiş operatörlerdir. Bu ışıma alanında $\phi = 0$'dır. İsterseniz, V_0'ın, H'a eklenen $q\phi$ katkısından elde edilmiş olduğunu düşünebilirsiniz. Her halükarda, pertürbasyon $\vec{A}$ içeren terimlerden gelir. Elbette, vektör potansiyelin bileşenlerinin uygun biçimde küçük olduğunu kabul ediyoruz, öyle ki, bunların H'ın matris elemanlarına katkıları H_0'ın matris elemanlarına kıyasla küçüktür. Vektör potansiyel "küçük" olacağı için bir ilk yaklaşıklık olarak yukarıdaki Hamiltonyen'de $\vec{A}$'da ikinci derece olan terimi ihmal edebiliriz. Elimizde aşağıdaki (yaklaşık) Hamiltonyen kalır :

$$H = H_0 + V$$

burada

$$V = -\frac{q}{mc}\vec{A} \cdot \vec{P}.$$

Bu Hamiltonyen'i pertürbasyon teorisi bağlamında bir atomik elektronun bir elekromanyetik dalganın varlığında davranışını incelemek için kullanacağız.

Işıma alanı

Işıma alanını bir vektör potansiyel ile tarif edebileceğimizi gördük. Vektör potansiyeli, Maxwell denklemleri, ışıma ayarında

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0, \qquad \nabla \cdot \vec{A} = 0$$

ifadelerine göre belirler. Bu denklemin genel çözümünü yazmak kolaydır. Biz, $\hat{n}$ birim vektörü yönünde ilerleyen bir düzlem elektromanyetik dalgayı temsil eden bir çözümünün üzerinde yoğunlaşacağız :

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \hat{e}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\omega) e^{-i\omega(t - \frac{1}{c}\hat{n}\cdot\vec{r})}$$

burada $A(\omega) = A^*(-\omega)$ dalganın frekans kompozisyonunu belirler. Vektör potansiyel "enine" olduğu, $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, için

$$\hat{e} \cdot \hat{n} = 0$$

buluruz. Belli ki, $\hat{e}$ düzlem polarizasyonunu belirliyor.

Genel bir ışıma alanı yukarıda gösterilen tipteki düzlem dalgaların bir üstüste gelmesi olarak görülebilir. Üstüste binme, yayılma yönleri ve polarizasyonlar üzerinden olur. Eğer zamanımız olursa, daha sonra bu hali düşüneceğiz. Şimdilik, sabit bir polarizasyonu ve yayılım yönü olan düzlem dalgalarla beraber kalacağız.

Geçişler

Şimdi, t_0 anında pertürbe edilmemiş bir durağan durum olduğu kabul edilen bir başlangıç durumundan, t anında (pertürbe edilmemiş) bir bitiş durumuna geçiş için $P(i \to f)$ olasılığını hesaplayalım. Bunları biraz daha somutlaştırmak için atomik elektronun merkezcil bir kuvvet tarafından bağlı olduğunu varsayabiliriz, böylece pertürbe edilmemiş durağan durumlar enerjileri etiketleyen "asal kuantum sayısı" n ile beraber herzamanki açısal momentum kuantum sayıları l ve m tarafından tarif edilebilir. Başlangıç ve bitiş durumları $t = 0$'da $|n_i, l_i, m_i\rangle$ ve t anında $|n_f, l_f, m_f\rangle$'dır. Bitiş durumu sanki bir bağlı durummuş gibi etiketleniyor, fakat sonuçlarımızı bağlı olmayan, enerjileri bir süreklilik içinde yer alan, bitiş durumlarına uyacak şekilde doğrudan ayarlayabiliriz. Ayrıca, yaptığımız şeylerin pek çoğunun atomik model için kullandığımız bu özel modelin detaylarından etkilenmediğini kolayca göreceksiniz. Elimizde

$$P(i \to f) \approx \left| \left\{ \frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, e^{i\omega_{fi}t'} [V_{fi}(\omega)e^{i\omega t'} + V_{if}^*(\omega)e^{-i\omega t'}] \right\} \right|^2$$

var, burada

$$V_{fi}(\omega) = \frac{q}{mc} A(\omega) \langle n_f, l_f, m_f | e^{-i\omega\frac{1}{c}\hat{n}\cdot\vec{R}}\, \hat{e} \cdot \vec{P} | n_i, l_i, m_i \rangle.$$

ω_{fi} frekansı seçtiğimiz atom modelimize, yani V_0 seçimimize, bağlıdır. Eğer Coulomb potansiyelini seçersek (böylece hidrojenik bir atomumuz olur), o zaman

$$\omega_{fi} = \frac{1}{\hbar}(E_f - E_i) = \frac{Z^2 q^2}{2a}(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2})$$

burada Z çekirdek yük sayısı, a Bohr yarıçapı ve $n = 1, 2, \ldots$ enerji düzeylerini etiketleyen asal kuantum sayısıdır. (Fakat, yine, w_{fi}'nin bu formülü bir hidrojen atomunun en basit modeline bağlıdır.)

Elektromanyetik ışımanın sonlu süreli bir atma olduğunu farz edelim, öyle ki, t_0 atma varmadan öncesi ve t atma geçtikten sonrasıdır. Buna göre, geçiş olasılığını, zaman integrasyonu aralığının $-\infty$'den ∞'a alınmasına izin vererek kolayca hesaplayabiliriz. Bu limitte zaman integrali frekans uzayında bir delta fonksiyonu ortaya çıkarır. Bu frekans integralini gerçekleştirmemize meydan verir.

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

elde ederiz. Bu formül hem uyarılmış yayıma hem de soğurmaya uygulanabilir.

Geçişe katkı sağlayan ışıma alanının tek Fourier bileşeninin, geçişin ω_{fi} frekansında olduğunu not edin. Eğer dalganın ω_{fi} frekansında bileşeni yoksa o zaman geçiş olasılığı (bu yaklaşıklıkta) kaybolur. Bu, $\hbar\omega_{fi}$ büyüklüğünde kesikli "kuanta"nın yayımı veya soğurulması ile eşlik edilmiş olarak, geçişlerin bu resmiyle uyuşuyor. Gerçekten de, geçiş olasılığını atma tarafından dağıtılan net enerji cinsinden ifade edelim. Dalganın, dalga yayılımına dik birim alan başına, içerdiği enerjinin (Poynting akısı)

$$\varepsilon = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{c}{4\pi}(\vec{E} \times \vec{B}) \cdot \vec{n} = \frac{1}{c}\int_0^{\infty} d\omega\, \omega^2 |A(\omega)|^2$$

tarafından verildiğini görmek zor değildir. $N(\omega)$'yı dalga tarafından birim frekans başına birim alan boyunca taşınan enerji (tüm zamanlar için) olarak tanımlayalım :

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

$N(\omega)$ cinsinden

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

elde ederiz, burada,

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

*ince yapı sabiti*dir.

Bu olasılık 3 faktörün çarpımı olarak ortaya çıkıyor : (1) geçişleri tetikleyen ayarlanabilir dışarıdan gelen etkinin rolünü yansıtan, elektromanyetik ışımanın şiddeti ($N(\omega)$ içinde yer alan); (2) elektromanyetik etkileşimin (doğa tarafından sabitlenmiş) gücünü niteleyen ince yapı sabiti; (3) atomik yapının kendisi tarafından oynanan rolü yansıtan, başlangıç ve bitiş durumları arasındaki matris elemanı. Bundan sonra, bu matris elemanını analiz etmek için biraz zaman harcayacağız.