BÖLÜM 3

BAZI MOLEKÜLLERİN ENERJİ SPEKTRUMU

III.1 Titreşen moleküllerin enerji düzeyleri arasındaki geçişler:- Osilatör modelinin sınırları.

Kararlı durumdaki bir kuantum sistemi (Λ_n) dış kuvvetler etkimedikçe bu durumda kalacaktır. [iç ve dış elektromagnetik alanlar]

Kesikli enerji durumlar için sist. bir durumdan diğerine geçer.

$E_n \to E_m$: $E_n - E_m$: soğurulan ya da yayılan enerji farkı.

$$\nu_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h}$$: elekt. magnetik alanın frekansı.

İki durum arasındaki geçişler $\vec{D}$ (top. elektrik yerdeğiştirme op.) iki durum arasında sıfırsa elektromagnetik ışınımın etkisi altında meydana gelemez.

$$D_{mn} = \langle m | D | n \rangle = 0 \Rightarrow$$ geçiş yok.

Bu gibi bir geçiş için olasılık ve böylece yayınlanan (ya da soğurulan) elekt. magnetik ışınımın şiddeti matris elemanının modülünün karesi ile orantılıdır.

CO.: Elektrik dip. mom. vardır. (Çünkü negatif ve pozitif yüklerin merkezleri çakışmaz)

Dip. mom.: negatif yüklerin merkezinden pozitif yüklerin merkezine bir vekt.

BS K

$$\vec{D} = q\vec{d}$$

$\vec{D}_0$: daimi dip. mom. (molekülün çekirdekler arası eksenleri boyunca uzanır.)

Çekirdekler arası mesafe değişir ise $\vec{D}$ de değişir.

$$\vec{D} = \vec{D}_0 + q\vec{x}$$

(Not: O_2, N_2, ... gibi aynı atomlu moleküllerde $\vec{D} = 0$)

○ Q.M. de

$$\vec{D} = \vec{D}_0 + q\vec{a} \quad Q.$$

$E_n \to E_m$ geçişinde kendiliğinden dipol yayınımı için birim zamandaki geçiş olasılığı (şiddeti) A_{nm}

$$A_{nm} = \frac{4}{3\hbar c^3}\,\omega_{nm}^3\,|D_{nm}|^2$$

○ ile verilir. $\omega_{nm} = \dfrac{E_n - E_m}{\hbar}$.

$$|\vec{D}_{nm}|^2 = \frac{1}{\dim(\Lambda_n \mathcal{H})}\,\mathrm{Tr}\left(\Lambda_n \vec{D} \cdot \Lambda_m \vec{D}\right)$$

$$= \frac{1}{\dim(\Lambda_n \mathcal{H})} \sum_{i=1}^{3} \sum_{\mu,\nu} |\langle \mu, m | D_i | n, \nu \rangle|^2$$

$(\mu,\nu) \equiv \eta$ ile aynı $\left\{ \begin{array}{l} \text{farklı } \Lambda_n \mathcal{H} \\ \text{ve} \\ \Lambda_m \mathcal{H} \text{ 'yi etiketler.} \end{array} \right.$

BS K

Tek boyutlu durumla ilgilenirsek $|\langle m|D|n\rangle|^2$.

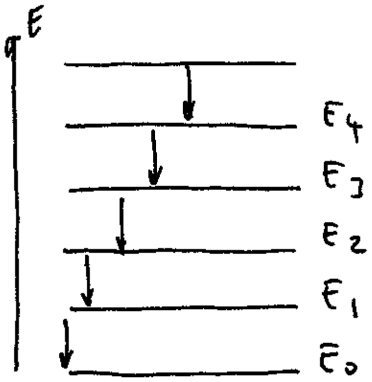
Q.M. sel sist. için D'nin matris elemanlarının çoğu sıfırdır
(seçim kuralı)

$$\langle m|D|n\rangle = q\,\langle m|Q|n\rangle$$
$$= q\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\left\{\sqrt{n}\,\langle m|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,\langle m|n+1\rangle\right\}$$

Harmonik salınıcı için seçim kuralı: $n-m=\pm 1$.

Yayılan ($E_n > E_m$), soğurulan ($E_n < E_m$) ışığın frekansı,

$$\nu_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h} = \frac{\hbar\omega}{h}\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)-\left(m+\frac{1}{2}\right)\right] = \frac{\omega}{2\pi}$$



Deneysel sonuçlar: CO.

$\Delta E = 0.265\ eV$

$\nu = \frac{\Delta E}{h} = 6.4\times10^{13}\ s^{-1}$, $\lambda = \frac{c}{\nu} = 4.66\ \mu$

($1\mu = 10^{-4}\ cm$ $\quad 1\mathring{A} = 10^{-8}\ cm = 10^{-4}\mu$)

$\nu = 2140\ cm^{-1}$ (infrared) kızıl ötesi bölge soğ. spekt.

III. 2. Rijid Rotatör.

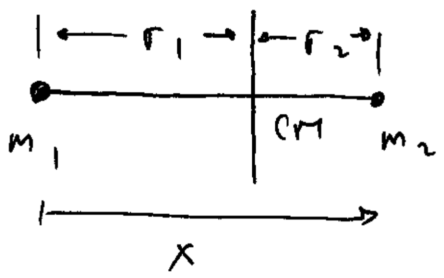
klasik rotatör : $(p_i, x_i) \rightarrow (P_i, Q_i)$

$$[P_i, Q_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} I$$

$$E = \frac{1}{2} I \omega^2$$

$$[Q_i, Q_j] = [P_i, P_j] = 0$$

$\omega = 2\pi \nu_{rot.}$ $\left.\begin{array}{l} \vec{\ell} = I \vec{\omega} \end{array}\right\}$ $E = \dfrac{\ell^2}{2I}$



$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$$

$$r_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} x \ , \ r_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} x$$

$$\Rightarrow I = \underbrace{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}}_{\mu} x^2 = \mu x^2$$

$\left.\begin{array}{l} \vec{X} \equiv (x_1, x_2, x_3) \\ \vec{p} \equiv (p_1, p_2, p_3) \end{array}\right\}$ μ 'nün koord. ve mom.'u.

$\vec{\ell} = \vec{X} \times \vec{p}$ c.M etrafındaki açısal mom.

$$\Rightarrow \ell_i = \epsilon_{ijk} x_j P_k$$

BS K

Q.M.

$$\vec{L} = \vec{Q} \times \vec{P} \Rightarrow L_i = \epsilon_{ijk} Q_j P_k \qquad [P_k, Q_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{kj} I$$

$$H = \frac{1}{2I} L^2 = \frac{1}{2I} L_i L_i$$ (L ve H Hermitsel)

$$\begin{cases} L_i^+ = \epsilon_{ijk} P_k^+ Q_j^+ = \epsilon_{ijk} P_k Q_j \\ \quad = \epsilon_{ijk} Q_j P_k = L_i \end{cases}$$

$$[L_i, L_\ell] = \epsilon_{ijk}\epsilon_{\ell mn}[Q_j P_k, Q_m P_n]$$

$$= \epsilon_{ijk}\epsilon_{\ell mn}\left(Q_j[P_k, Q_m P_n] + [Q_j, Q_m P_n]P_k\right)$$

$$= \epsilon_{ijk}\epsilon_{\ell mn}\Big\{Q_j\left([P_k, Q_m]P_n + Q_m\cancel{[P_k, P_n]}\right)$$

$$+ \left(Q_m[Q_j, P_n] + \cancel{[Q_j, Q_m]}P_n\right)P_k\Big\}$$

$$= \epsilon_{ijk}\epsilon_{\ell mn}\left\{Q_j P_n \frac{\hbar}{i}\delta_{km} - Q_m P_k \frac{\hbar}{i}\delta_{jn}\right\}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left\{\epsilon_{ijk}\epsilon_{\ell mn} Q_j P_n - \epsilon_{ijk}\epsilon_{\ell mn} Q_m P_k\right\}$$

$$\delta_{km} \quad \delta_{jn}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left\{\epsilon_{ijk}\epsilon_{\ell kn} Q_j P_n - \epsilon_{ijk}\epsilon_{\ell mj} Q_m P_k\right\}$$

$$j \to m \qquad\qquad k \to n$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left\{\epsilon_{imk}\epsilon_{\ell kn} Q_m P_n - \epsilon_{ijn}\epsilon_{\ell mj} Q_m P_n\right\}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\epsilon_{imk}\epsilon_{\ell kn} - \epsilon_{ijn}\epsilon_{\ell mj}\right) Q_m P_n$$

BS K

çift $\quad$ $j \leftrightarrow k$ $\quad$ $\epsilon_{ikn}\epsilon_{\ell mk}$

$$[L_i, L_\ell] = \frac{\hbar}{i}\left(\epsilon_{imk}\epsilon_{\ell kn} - \epsilon_{ijn}\epsilon_{\ell mj}\right) Q_m P_n$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\epsilon_{imk}\epsilon_{kn\ell} + \epsilon_{ink}\epsilon_{k\ell m}\right) Q_m P_n$$

Özellik: $\epsilon_{imk}\epsilon_{kn\ell} = \delta_{in}\delta_{m\ell} - \cancel{\delta_{mn}\delta_{i\ell}}$

$\cancel{\epsilon_{ink}\epsilon_{k\ell m} = \delta_{i\ell}\delta_{m\ell}} - \delta_{im}\delta_{n\ell}$

$$\epsilon_{imk}\epsilon_{kn\ell} + \epsilon_{ink}\epsilon_{k\ell m} = \delta_{in}\delta_{m\ell} - \delta_{im}\delta_{n\ell}$$

$$= -\epsilon_{i\ell k}\epsilon_{kmn} \qquad \delta_{im}\delta_{\ell n} - \delta_{in}\delta_{\ell m}$$

$$[L_i, L_\ell] = i\hbar\, \epsilon_{i\ell k}\underbrace{\epsilon_{kmn}\, Q_m P_n}_{L_k}$$

$$= i\hbar\, \epsilon_{i\ell k} L_k$$

3-boyutlu fiziksel uzayda klasik extended bir parçacık $\left\{\begin{array}{ll} P_i & \text{mom} \\ S_i & \text{açısal mom (spin)} \end{array}\right.$

(x_i, α_i) eşlenikler

Q.M. extended parçacık; P_i, S_i

$$[S_i, S_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk} S_k$$

$$[J_i, J_k] = i\hbar\, \epsilon_{ik\ell} J_\ell$$

BS K

III.3. Açısal Mom. Cebri:

$J_i^\dagger = J_i$ 'yi sağlayan $[J_i, J_k] = i\hbar \epsilon_{ikl} J_l$ denklemi-nin bütün mümkün çözümlerini bulacağız. Yani içinde bu koşulu sağlayan bütün lineer uzayları kuracağız. Bu uzaylarda en azından J_3'ün bir özvektörü olduğunu varsayacağız.

J_i $(i=1,2,3)$ ile çalışmak yerine,

$$H_3 = \frac{1}{\hbar} J_3 \;;\; H_+ = \frac{1}{\hbar}(J_1 + iJ_2) \;;\; H_- = \frac{1}{\hbar}(J_1 - iJ_2)$$

lineer birleştirimleri alırız. $J_i^\dagger = J_i$ Hermitsellik koşulu:

$$H_3^\dagger = H_3 \;;\; H_+^\dagger = H_- \;;\; H_-^\dagger = H_+$$ olur.

$$[J_i, J_k] = i\hbar \epsilon_{ikl} J_l \Rightarrow \begin{cases} [H_3, H_\pm] = \pm H_\pm \\ [H_+, H_-] = 2H_3 \end{cases}$$

$$J^2 = \hbar^2 H^2 = \hbar^2 \left(H_+H_- + H_3^2 - H_3 \right) = \hbar^2 \left(H_-H_+ + H_3^2 + H_3 \right)$$

$$\Rightarrow [H^2, H_3] = 0 \qquad [H^2, H_\pm] = 0$$

Genel olarak $[H^2, A] = 0$

$$A = aI + a^i J_i + a^{ij} J_i J_j + a^{ijk} J_i J_j J_k + \cdots$$

BS K

$[H^2, A] = 0$ özelliğinden dolayı, H^2 ve J^2 $\mathcal{E}(SU(2))$ cebrinin invaryant operatörleri (Casimir op.leri) adını alır.

Şimdi $\mathcal{E}(SU(2))$'nin tüm merdiven temsillerini bulacağız.

Özdeğeri c olan H^2'nin bir özvektörü $f = f^c$ vektörü olsun:

$$H^2 f = c f$$

H^2, yukarıdaki formda her A ile sıra değiştirdiğinden, Af de H^2'nin c özdeğerli bir özvektörüdür.

İsp: $H^2 A f = A H^2 f = c A f$

Şimdi de f'yi H_3'ünde bir özvektörü olacak şekilde seçeriz. ve özdeğerine m deriz. Normalize edilmiş özvektörü $f_m = f_m^c$ ile gösterelim.

$$H_3 f_m = m f_m \qquad (f_m, f_m) = 1.$$

[f_m: ağırlık vektörleri, m: ağırlık)

İki operatörün aynı anda bir özvektörü olan bir vektörü seçmek ancak bu iki operatör sıra değiştirir ise mümkündür:

$$H^2 H_3 f_m = H_3 H^2 f_m$$

Şimdi $f_{m\pm} = H_\pm f_m$ tanımlayalım.

BS K

Ve şunu hesaplayalım: $[H_3, H_\pm] = \pm H_\pm$ idi.

$$H_3 f_{m\pm} = H_3 H_\pm f_m = (H_\pm H_3 \pm H_\pm) f_m$$

$$= (H_\pm m \pm H_\pm) f_m = (m \pm 1) H_\pm f_m$$

$$= (m \pm 1) f_{m\pm}$$

Böylece $f_{m\pm}$, H_3'ün bir özvektörüdür ve özdeğerleri de $(m \pm 1)$ dir.

f'ün bazı özellikleri:

1. c sayısı negatif değildir.

<u>ispt:</u> $c = (f_m, H^2 f_m) = \frac{1}{\hbar^2} \left(f_m, (J_1^2 + J_2^2 + J_3^2) f_m \right)$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left(\| J_1^2 f_m \|^2 + \| J_2^2 f_m \|^2 + \| J_3^2 f_m \|^2 \right) \geq 0$$

2. H_3'ün herhangi bir m özdeğeri $m^2 \leq c$ 'dir.

<u>ispt:</u> $0 \leq \hbar^{-2} \left\{ (J_1 f_m, J_1 f_m) + (J_2 f_m, J_2 f_m) \right\}$

$$= \hbar^{-2} \left\{ (f_m, J^2 f_m) - (f_m, J_3^2 f_m) \right\}$$

$$= \cancel{\hbar^{-2} \hbar^2} (c^2 - m^2) \underbrace{\| f_m \|^2}_{1}$$

$$c^2 - m^2 \geq 0$$

BS K

H_3 ve H^2 'nin keyfi bir $f_{m_0}^c$ özvektörü ile başlar ve H_+'yı ardışık olarak uygularsak H_3'ün yeni özvektörlerini elde ederiz. (2) özelliği nedeni ile, sonlu bir adımdan sonra, H_3'ün en büyük ℓ özdeğerli f_ℓ^c özvektörüne varmalıyız.

$$f_{\ell+}^c = H_+ f_\ell^c = 0$$

$$H^2 f_\ell^c = (H_3^2 + H_3) f_\ell^c = \ell(\ell+1) f_\ell^c$$

○ sonuç olarak, H^2 'nin c özdeğeri ve H_3 'ün en büyük ℓ özdeğeri $c = \ell(\ell+1)$ ile sağlanır.

$(H^2$ ve $H_3) \rightarrow (c, m)$ yerine (ℓ, m) alacağız.

Benzer olarak $\quad f_{\mu-}^c = H_- f_\mu^c = 0$

○ $H^2 f_\mu^\ell = (H_3^2 - H_3) f_\mu^\ell = \mu(\mu-1) f_\mu^\ell$

$\ell(\ell+1) = \mu(\mu-1)$ denkleminin $\ell(\ell+1) \geq m^2$ koşulunu sağlayan tek çözümü $\mu = -\ell$ 'dir.

Böylece, f_ℓ^ℓ vektörü ile başlarsak ve ona ardışık olarak H_-'yi uygular ve normalize edersek şu vektörler dizisini elde ederiz.

BS K

$$f_{\ell-1}^{\ell} = (\alpha_\ell)^{-1} \mathcal{H}_- f_\ell^{\ell}$$

$$f_{\ell-2}^{\ell} = (\alpha_{\ell-1})^{-1} \mathcal{H}_- f_{\ell-1}$$

$$\vdots$$

$$f_{\ell-(\ell-m+1)} = (\alpha_{\ell-(\ell-m)})^{-1} \mathcal{H}_- f_{\ell-(\ell-m)}^{\ell}$$

$$f_{m-1} = (\alpha_m)^{-1} \mathcal{H}_- f_m^{\ell}$$

$$\alpha_m = \sqrt{(\mathcal{H}_- f_m^{\ell}, \mathcal{H}_- f_m^{\ell})}$$

sonuçta en küçük μ ağırlığı olan vektöre ulaşırız:

$$f_\mu^{\ell} = (\alpha_{\mu+1})^{-1} \mathcal{H}_- f_{\mu+1}$$

$\mu = -\ell$ iken yukarıdaki dizide $2\ell+1$ vektörümüz vardır:

f_m^{ℓ}: $m = \ell, \ell-1, \ell-2, \dots -\ell+1, -\ell$.

bu $(f_m^{\ell}, f_{m'}^{\ell}) = \delta_{mm'}$ 'yi sağlar.

$2\ell+1$ vektörlerin sayısı olduğundan tam olmalıdır. Dolayısı ile

$$\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Verilen bir ℓ için birbirine dik olan $2\ell+1$ tane f_m^{ℓ} vardır. bunlar bir uzayı gerer ve bu uzayı $\mathcal{H}^{\ell}$ ile adlandırırız.

BS K

$$\mathcal{R}^{\ell} = \left\{ f : f = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} a^m f_m^{\ell} \right\}$$

α_m normalizasyon sbt'.i :

$$\alpha_m \bar{\alpha}_m = (H_- f_m , H_- f_m) = (f_m , H_+ H_- f_m)$$

$$= (f_m , (H^2 - H_3^2 + H_3) f_m) = \ell(\ell+1) - m^2 + m$$

$$\Rightarrow \quad \alpha_m = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}$$

$$= \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}$$

$$\Rightarrow \quad H_- f_m^{\ell} = \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}\, f_{m-1}^{\ell} = \alpha_m f_{m-1}^{\ell}$$

$$H_+ f_m^{\ell} \propto f_{m+1}^{\ell}$$

$$H_+ f_m^{\ell} = \beta_m f_{m+1}^{\ell}$$

$$\bar{\beta}_m (f_{m+1}^{\ell} , f_{m+1}^{\ell}) = (H_+ f_m^{\ell} , f_{m+1}^{\ell}) = (f_m^{\ell} , H_- f_{m+1}^{\ell})$$

$$= \alpha_{m+1} (f_m^{\ell} , f_m^{\ell})$$

$$\bar{\beta}_m = \alpha_{m+1} = \sqrt{(\ell+m+1)(\ell-m)} = \beta_m$$

BS K

$$H_+ f_m^\ell = \sqrt{(\ell-m)\,(\ell+m+1)}\; f_{m+1}^\ell = \alpha_{m+1} f_{m+1}^\ell$$

Özet :

ℓ'nin herdeğeri için, f_m^ℓ $(m=-\ell,\dots,+\ell)$ ait vektörler tarafından gerilen bir $\mathcal{H}^\ell$ uzayı vardır. Bu uzayda H_+, H_- ve H_3 op. evvelki bağıntılarile verilmişlerdir. Böylece $A \in \mathcal{E}(SU(2))$ nin $f \in \mathcal{H}^\ell$'ye uygulanışı belirlenir. Her ℓ için farklı bir operatör vardır: $H_+^{(\ell)}$, $H_-^{(\ell)}$, $H_3^{(\ell)}$:

$\mathcal{H}^\ell$: <u>$\mathcal{E}(SU(2))$'nin indirgenemez temsil uzayı.</u>

<u>Bu uzayda</u>; H_+, H_3 ve H_- op.'leri,

$$\boxed{\begin{aligned} H_3 f_m &= m f_m \\ H_- f_m^\ell &= \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}\; f_{m-1}^\ell = \alpha_m f_{m-1}^\ell \\ H_+ f_m^\ell &= \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}\; f_{m+1}^\ell = \alpha_{m+1} f_{m+1}^\ell \end{aligned}}$$

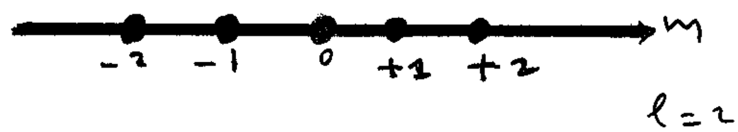
ile temsil edilirler. Bunlar, H_+, H_- ve H_3'lerin $(2\ell+1)$ boyutlu indirgenemez temsilleridir. Bunlar, ℓ'ye bağlıdır.

$\ell = 0, 1/2, 1, \dots$ için farklı operatörler kümesi vardır.

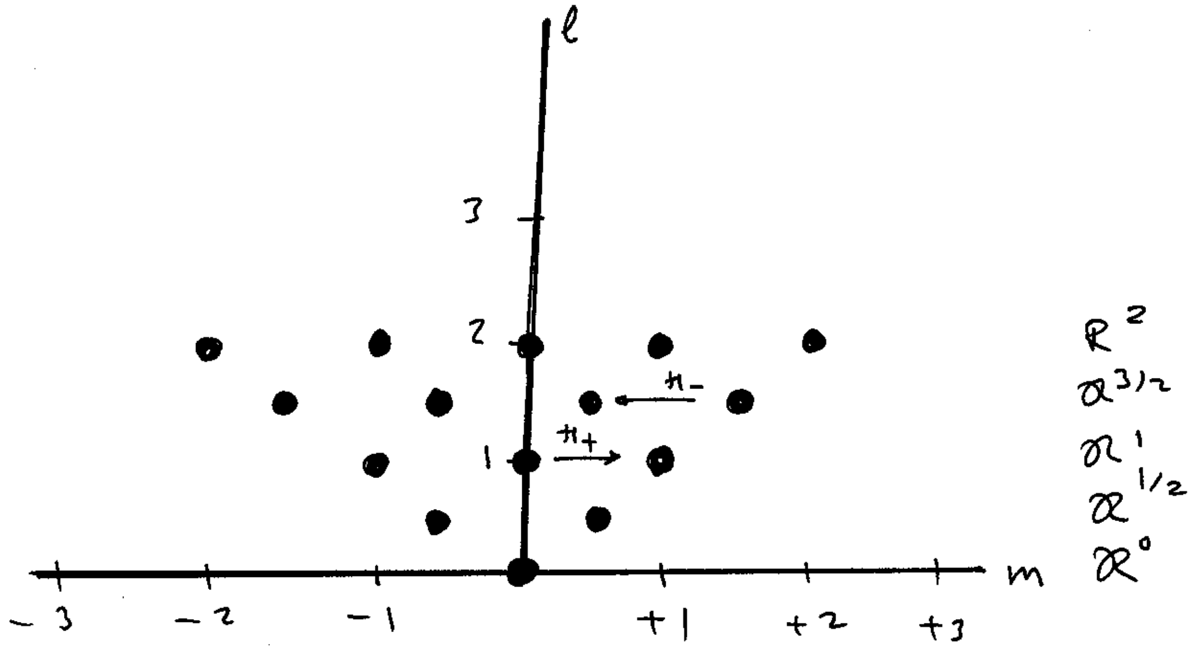
$\mathcal{H}^{\ell} \longrightarrow \mathcal{H}^{\ell'}$ Yok!!!

$\ell \neq \ell'$ için $f^{\ell} \in \mathcal{H}^{\ell}$ vektöründen $f^{\ell'} \in \mathcal{H}^{\ell'}$ vektörüne dönüşebilen hiçbir $A \in \mathcal{E}(su(2))$ elemanı yoktur. Bunun anlamı: $\mathcal{H}^{\ell}$, bütün $A \in \mathcal{E}(su(2))$ altında invaryanttır. Özellikle $\mathcal{H}^{\ell}$: J_i $(i=1,2,3)$'lerin ve $H_{\pm}, H_3$'lerin etkisi altında invaryant kalır.

$su(2)$'nin ağırlık diyagramı.



Her noktaya $\mathcal{H}^{\ell}$ temsil uzayında bir f_m^{ℓ} baz vektörü karşı gelir, ya da özdeş olarak f_m^{ℓ} tarafından gerilen tek boyutlu alt uzay karşı gelir. Böyle herbir alt uzay (ya da baz vektörü) bir saf fiziksel durumu temsil eder.



ℓ : açısal mom. kuantum sayısı. $(\ell^2 \Rightarrow \vec{L}^2$ olduğundan$)$

$$L^2 f^{\ell} = \hbar^2 \ell(\ell+1) f^{\ell}$$

BS K

$\mathcal{H}^\ell$ uzayına karşı gelen fiziksel durum (bu

$$W = \frac{1}{\dim \mathcal{H}^\ell} \Lambda^\ell = \frac{1}{2\ell+1} \Lambda^\ell$$

istatiksel operatörü ile taşınır edilir ve Λ^ℓ : $\mathcal{H}^\ell$ üzerinde projek.) kesin bir ℓ açısal mom.'una sahiptir. Bunlar $\ell=0$ hariç saf değil karışımdır. Saf bir durumun hazırlanışı sadece L^2 nin bir ölçümü değil L_3'ün (veya $\vec{L}$'nin diğer bileşenleri) bir ölçümünü de gerektirir. Eğer L_3'ün değerinin daima m olduğu ölçülürse o zaman durum tek boyutlu $\mathcal{H}_m^\ell$ altuzayında $\Lambda_m^\ell = |f_m^\ell\rangle\langle f_m^\ell|$ izdüşüm operatörü ile temsil edilir.

$$\mathcal{H}^\ell = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \oplus \, \mathcal{H}_m^\ell$$

$L_i = \epsilon_{ijk} Q_j P_k$ ile tanımlanan L_i'ler $\ell = 0,1,2,\ldots$ değerlerini alır.

$\mathcal{H}^\ell$ uzayları Q_j ve P_j op.lerinin etkisi altında invaryant değildirler. $[L_i, Q_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk} Q_k$ $[L_i, P_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk} P_k$! bul.

BSK

L ile bu bağıntıları sağlayan $\vec{P}$ ve $\vec{Q}$ gibi operatörler, vektör operatörler olarak adlandırılır.

$$[L^2, Q_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk} [L_i Q_k + Q_k L_i] \neq 0$$

Q_j : L^2 'nin $\ell(\ell+1)$ özdeğerini değiştirecektir. Bu demektir ki, Q_j bir $\mathcal{H}^\ell$ 'den $\ell' \neq \ell$ olan $\mathcal{H}^{\ell'}$ 'ne dönüştürebilir. yapabilir.

$$\mathcal{H}^\ell \xrightarrow{Q_j} \mathcal{H}^{\ell'}$$

- $\ell = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$ olan $\mathcal{H}^\ell$ deki L_i operatörleri ya da bunların direkt toplamı,

$$\sum_{\ell=-1/2} \oplus \mathcal{H}^\ell$$

Q_i ve P_i op.lerinin fonksiyonları olarak ifade edilemezler.

- $\ell = 1/2$ için, $L_i^{(\ell=1/2)} \rightarrow$ Spin op.

$$\sigma_i \equiv \frac{2}{\hbar} \left(f_{m'}^{j=1/2}, J_i f_m^{j=1/2} \right)$$

BS K

III.4. Dönme Spektrumu:

Q.M. sel rotatörün gözlenebilirinin cebri, $\mathcal{E}(SU(2))$den daha büyüktür: ek elemanlar oluşturulabilir; J_i ve P_i ya da J_i ve Q_i'nin cebirsel fonksiyonları. Örneğin, Q_i gözlenebilirleri, verilen bir $\mathcal{H}^{\ell}$'den komşu $\mathcal{H}^{\ell+1}$ ve $\mathcal{H}^{\ell-1}$'e dönüştürür (fakat $\mathcal{H}^{\ell\pm n}$, $n>1$ değil!)

$$Q_i : \mathcal{H}^{\ell} \longrightarrow \mathcal{H}^{\ell-1} \oplus \mathcal{H}^{\ell+1}$$ parite kısmında ispatlanacak.

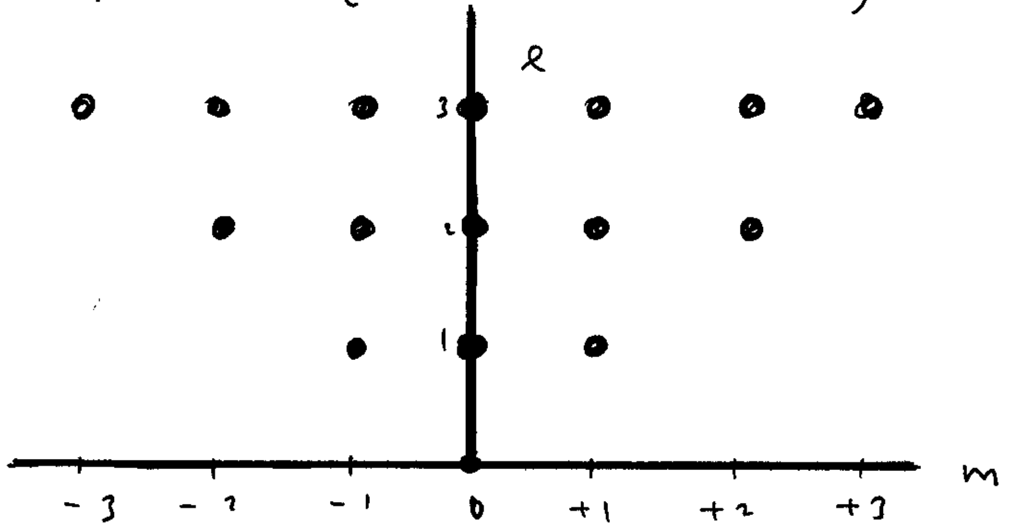
Q.M. sel rotatörün fiziksel durumlarının uzayı $\mathcal{H}$, $\mathcal{E}(SO(3))$ ün indirgenemez temsil uzayı değildir. Bu bir indirgenebilir temsil uzayıdır, ve

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \oplus \, \mathcal{H}^{\ell} \qquad \ell = 0, 1, 2, \ldots$$

$H_{\pm}$, H_3'ler $\mathcal{H}$ büyük uzayında (operatör) ele alınır ve verilen bir $\mathcal{H}^{\ell}$ uzayının her elemanını aynı uzaydaki bir elemana dönüştürür. Böylece $\mathcal{H}$'nın $\mathcal{H}^{\ell}$ altuzayları H_+, H_- ve H_3 tarafından değişmez bırakılır ve sonuç olarak herhangi $A \in \mathcal{E}(SU(2))$ tarafından da değişmez bırakılır.

$\mathcal{H}^2$ op.'ü, $\mathcal{R}$'de bir önemsiz olmayan spektruma sahiptir:

$$\text{spekt}\, \mathcal{H}^2 = \{\, \ell(\ell+1)\,,\ \ell = 0,1,2,\ldots \}$$



$J_i \longrightarrow L_i = \epsilon_{ijk} Q_j P_k$ olsun. Sadece ℓ'nin tam değerleri izinlidir, yani $\mathcal{R}$, $\ell = 0,1,\ldots$ olan $\mathcal{R}^\ell$'leri içerir. Bunu şu olgudan çıkartırız. Verilen bir $\mathcal{R}^\ell$'den komşu $\mathcal{R}^{\ell-1}$ ve $\mathcal{R}^{\ell+1}$'e dönüştüren rotatör için gözlenebilirler (Q_i) vardır. Her bir $\mathcal{R}^\ell$ sadece bir defa toplamda görülür; çünkü rotatör için ek kuantum sayıma gerek yoktur. Eğer bir $\mathcal{R}^{\ell_0}$ iki ya da daha fazla görülecekse, aynı ℓ_0, m kuantum sayıları olan $f_m^{\ell_0}(1)$, $f_m^{\ell_0}(2)$ ... vektörleri de iki veya daha fazla olacaktır ve bu durumda bunları ayırt etmek için yeni bir kuantum sayısına gerek duyulacaktır.

Ancak rotatör öyledir ki, L^2 ve L_3 yanında diğer köşegen gözlenebilirler yoktur.

[. Matematiksel olarak "rotatörün spektrumunu doğuran cebir $\mathcal{E}(E_3)$'dür." $\mathcal{E}(E_3)$, L_i ve Q_i tarafından doğurulur ve komütasyon bağıntıları

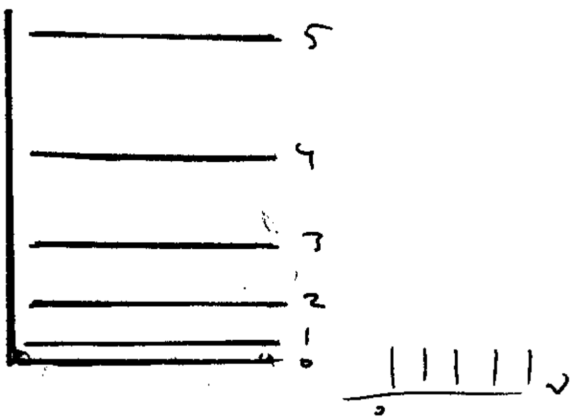
$$[L_i, L_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk} L_k \qquad [L_i, Q_j] = i\hbar\, \epsilon_{ijk} Q_k$$

$$[Q_i, Q_j] = 0$$

dır ve $\mathcal{R}$, $\mathcal{E}(E_3)$'ün özel bir indirgenemez temsil uzayıdır.].

$\mathcal{R}$ nin ağırlık diyagramında her nokta saf durumun temsil eder; bu, f_m^l tarafından gerilen tek boyutlu $\mathcal{R}_m^l$ (l, m sbt) alt uzayı ile tasvir edilir. Bu saf durum için (normalize edilmiş) istatiksel op. $W = \Lambda_m^l$, açısal momentumun kesin l değeri, açısal mom.'un 3. bileşeni (J_3) kesin bir m değerini aldığı kuantum mekaniksel bir durumu temsil eder.

$J_3 \to$ Helicity.



infrared.

$\mathcal{R}$ deki enerji op.'nin değerleri

$$E_l = \frac{1}{2I}\hbar^2 l(l+1)$$

BS K

Salınıcının aksine, rotatör için enerji özuzayları (aynı enerji özdeğerli vektörlerin uzayları), $l=0$ hariç tek boyutlu değildir. Bu nedenle, kesin bir E_{l_0} $(l_0 \neq 0)$ enerji değerli bir rotatörün durumunun saf olması gerekmez. Enerji ölçümleri E_{l_0} ile yapılırsa idi ist. op.,

$$W = \Lambda^{l_0} \qquad \text{(normalize değil)}$$

ya da

$$W = (\mathrm{Tr}\,\Lambda^{l_0})^{-1}\Lambda^{l_0} = \frac{1}{2l_0+1}\Lambda^{l_0} \qquad \text{normalize}$$

ile verilirdi., burada Λ^{l_0}, $2l_0+1$ boyutlu $\mathcal{R}^{l_0}$ uzayında projektör. Sadece enerji ölçümü ile rotatörün saf bir durumunu hazırlamak mümkün değildir. Sadece belli ek koşullar altında, eğer uzayda ki bir doğrultu ayırt edilmiş ise, belli helisiteli bir durum hazırlanabilir, yani $\Lambda^{l_0}_{m_0}$ saf durum. Sadece rotatörün enerjisi, (helisitesi değil) ölçülse idi, o zaman farklı helisiteli durumların eşit ağırlıkla görüleceği varsayılırdı. Bu nedenle, normalize edilmemiş ist. op. için

$$W = \Lambda^{l_0} = \Lambda^{l_0}_{-l_0} + \Lambda^{l_0}_{-l_0+1} + \dots + \Lambda^{l_0}_{m} + \Lambda^{l_0}_{l_0}$$

seçilir.

Bir rotatör tarafından yayılan ve soğurulan frekansları hesaplamak için seçim kurallarını bilmek zorundayız. Rotatörün klasik resminde bunu dönen bir D dipol mom.i olarak alabiliriz:

$\vec{D} = \text{sbt}\; Q$ + ve − yüklerin merkezleri arasındaki vektör.

klasik olarak ışıma elektriksel dipol mom. in dönmesinin bir sonucudur.

Q.M.'sel olarak soğurulan veya yayınlanan ışınımın şiddeti

$$\left|\langle f_{m'}^{l'} \,|\, Q \,|\, f_m^{l} \rangle\right|^2$$

ile orantılıdır ve dipol ışıması bunun sıfırdan farklı olduğu

$f_{m'}^{l'} \to f_m^{l}$ ye geçişlerde elde edilecektir. Göreceğiz ki

$l = l' \pm 1$ olmadıkça $\langle f_{m'}^{l'} \,|\, Q \,|\, f_m^{l} \rangle = 0$

Yani rotatörün dipol ışıması için seçim kuralı $\Delta l = l - l' = \pm 1$

Deneysel sonuçla iyi uyuşur. Aynı $n=0$ durumuna ait (salınım) iki atomlu molekülün farklı rotatör durumları arasındaki geçişlerden de ışıma bekleriz. Bu ışımanın frekansı,

$$\nu_{l'l} = \frac{E_{l'} - E_l}{2\pi\hbar c}$$

$$\nu_{l+1,l} = \frac{\hbar^2}{2I} \, \frac{(l+1)(l+2) - l(l+1)}{2\pi\hbar c}$$

$$= \frac{\hbar}{4\pi c I} \, 2\,(l+1) = B\,2(l+1) \qquad B = \frac{\hbar}{4\pi c I}$$

<u>Böylece basit rijit bir rotatörün spektrumu eşit aralıklı çizgilerin bir serisinden oluşur.</u>

$\nu_{rot} \ll \nu_{vib}$ olmasını bekleriz.

Saf dönme spektrumu uzak kızıl ötesinde bulunur.

HCl için deneyle uyumlu.

Tablo 4.1 de HCl için gözlenen ve hesaplanan değerler verilmiştir. İlk 11 frekans iyi uyuşur iken (yani eşit aralıklı iken) diğerleri değildir. Verilerin fit edilmesinden,

$$\nu_{\ell+1,\ell} = 2b(\ell+1) - 4d(\ell+1)^3$$

HCl rijit rotatör değil!!! bu durumda,

$\frac{\vec{\ell}^2}{\mu x^3}$ merkezkaç kuvvet

$k(x-x_e)$ merkezcil k.

$$k(x-x_e) = \frac{\ell^2}{\mu x^3} \quad : \quad E = \frac{\ell^2}{2\mu x^2} + \frac{1}{2}k(x-x_e)^2$$

$$x^2 \simeq x_e^2\left(1 + 2\,\frac{x-x_e}{x_e} + \dots\right)$$

$$E = \frac{1}{2\mu x_e^2}\vec{\ell}^2 - \frac{1}{2\mu^2 k x_e^6}(\vec{\ell}^2)^2 + \mathcal{O}\left((\ell^2)^3\right) + \dots$$

rijid rot. merkezkaç kuv.

$$\ell^2 \to L^2$$

BS K

II.5. Kuantum Fiziksel Sistemlerin Birleşimi – Titreşen rotatör.

Kuantum mekaniksel titreşen rotatör (ya da dönen osilatör) modelini kurmak için Q.M. osilatör ile Q.M. rotatör modelini birleştireceğiz.

[redacted] (Tensör çarpımı)

R_1 ve R_2 iki lineer uzay olsun ; $u_i \in R_1$ ve $V_j \in R_2$; ve $a_{ij} \in \mathbb{C}$ olsun.

$$f = \sum_{i,j} a_{ij}\, u_i V_j$$

toplamlarının kümesi bir lineer uzay oluşturur. Buna direkt çarpım uzayı denir ve $R_1 \otimes R_2$ ile gösterilir. $u_i V_j$ formel çarpımdır , $u_i V_j = u_i \otimes V_j$. Eğer $(u, u')_1$ ve $(V, V')_2$ ler sırası ile R_1 ve R_2 deki skaler çarpım iseler,

$$\left(\sum_{ij} a_{ij} u_i V_j \,,\, \sum_{\ell m} b_{\ell m} u'_\ell V'_m \right) = \sum_{ij\ell m} \bar{a}_{ij}\, b_{\ell m}\, (u_i, u'_\ell)_1 (V_j, V'_m)_2$$

ile tanımlanır. (Not: R_1 ve R_2 Hilbert uzayları iseler, $R_1 \otimes R_2$ nin bu skaler çarpıma göre "completion"ı, direkt Hilbert uzay çarpımıdır.)

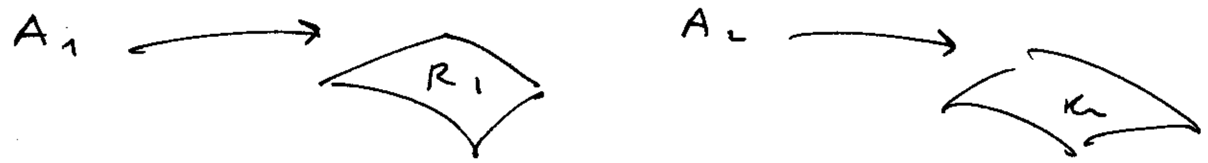
tamamlanması

ϕ_ν , R_1'deki ;

ψ_μ , R_2'deki ; bazlar ile,

$$f_{\mu\nu} = \phi_\nu \otimes \psi_\mu = \phi_\nu \psi_\mu \quad R_1 \otimes R_2 \text{ deki bir bazdır.}$$

BS K



A_1 ve A_2 sırası ile R_1 ve R_2 deki operatörler olsun. $R_1 \otimes R_2$ deki

$$C = A_1 \otimes I \quad , \quad B = I \otimes A_2$$

operatörleri aşağıdaki gibi tanımlarız:

$$Cf = \sum_{ij} a_{ij} \, (A_1 u_i) \otimes v_j \qquad f = \sum_{ij} a_{ij} u_i v_j \text{ idi!.}$$

$$Bf = \sum_{ij} a_{ij} \, u_i \otimes (A_2 v_j)$$

$R_1 \otimes R_2$ deki $A = A_1 \otimes A_2$ lineer operatörü

$$A \, (u_j \otimes v_k) = (A_1 \otimes A_2)\,(u_j \otimes v_k) \equiv (A_1 u_j) \otimes (A_2 v_k)$$

ile tanımlanır. Kolayca görülür ki; A_1, B_1 R_1'deki A_2, B_2 R_2'deki lineer operatörler ise, o zaman

$$A_1 B_1 \otimes A_2 B_2 = (A_1 \otimes A_2)\,(B_1 \otimes B_2)$$ dır. •

Direkt çarpım uzayında, her A operatörü, operatörlerin direkt çarpımlarının bir lineer birleşimidir, yani

$$A = \sum_i A_1^{(i)} \otimes A_2^{(i)}$$

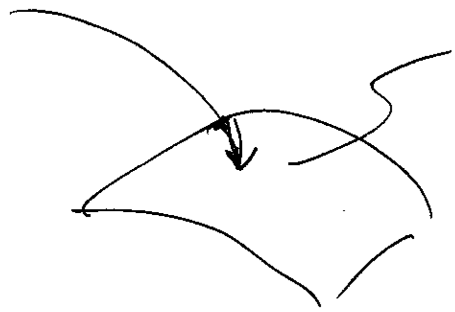
R_1 deki R_2'deki lineer operatörler.

BS K

IV a. Bir fiziksel sist. R_1 uzayında operatörlerinin $\mathcal{A}_1$ cebri ile, diğer fiz. sist. R_2 deki $\mathcal{A}_2$ cebri ile tasvir edilsin. O zaman $R_1 \otimes R_2$ direkt çarpım uzayı, bu iki sistemin fiziksel bileşiminin fiziksel durumlarının uzayıdır. ve bunun gözlenebilirleri direkt çarpım uzayında operatörlerdir. Sadece ilk sist.in özel gözlenebilirleri $A_1 \otimes I$ ve sadece ikincininkiler $I \otimes A_2$ ile verilir.

Bu varsayımı titreşen ve dönen moleküllere uygulayacağız.

○ $\mathcal{H}$: salınıcının fiziksel durumlarının uzayı

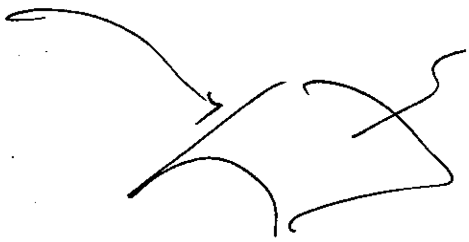


$\underset{\sim}{H}_{osc}$ ya da $\underset{\sim}{N}$ 'nin özvektörler bazı :

$\phi_n = |n\rangle \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$

$\mathcal{R}$: rotatörün fiziksel durumlarının uzayı

○



$\underset{\sim}{L}_3$ ve $\underset{\sim}{\vec{L}}^2$ ya da $\underset{\sim}{H}_{rot}$ 'nin özvektörler bazı : $f_m^l = |lm\rangle \qquad l = 0, 1, 2, \ldots$

$-l \le m \le +l$

Titreşen - rotatörün fiziksel durumlarının uzayı

$$\mathcal{G} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{R}$$

direkt çarpım uzayıdır ve gözlenebilirler

$$\sum_i A^{(i)}_{osc} \otimes A^{(i)}_{rot}$$ operatörleridir.

BS K

$$|n\ell m\rangle = |n\rangle \otimes |\ell m\rangle = \phi_n \otimes f_m^{\ell}$$

bu sist.'i birbirinden bağımsız değildir; ikisi arasında etkileşme vardır. Titreşim sırasında çekirdekler arası uzaklık değişir ($x = \sqrt{x_i x_i}$) ve buna bağlı olarak eylemsizlik mom.'i de değişir.

$$\underset{\sim}{H} = \underset{\sim}{H}_{osc} \otimes I + I \otimes \underset{\sim}{H}_{rot}$$

$$H_{osc} = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2}\right) = \frac{P^2}{2\mu} + \frac{\mu\nu^2}{2} Q^2$$

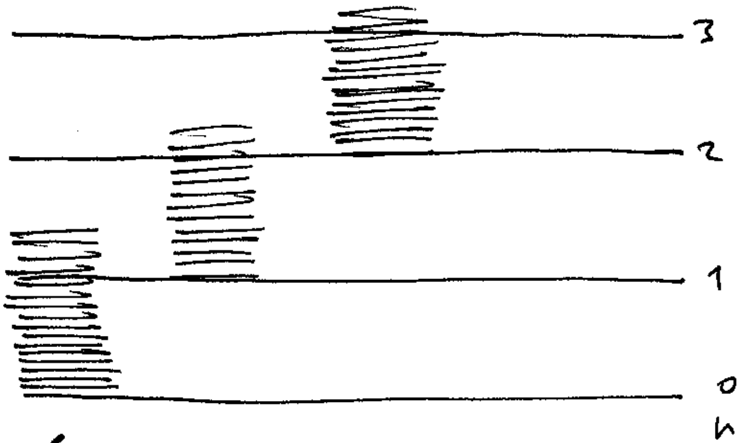
$$H_{rot} = \frac{\vec{L}^2}{2I}$$

Eğer bu iki sist. arasında etk. ihmal edilirse,

$$A = A_{osc} \otimes I + I \otimes A_{rot}$$

Spekt. $H = E_{n\ell} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2I}\hbar^2 \ell(\ell+1)$

$\hbar\omega > \hbar^2/2I$ (deneyler)



$\Delta n = \pm 1$, $\Delta \ell = \pm 1$ seçim kuralları.

BS K

$n \to n+1$ (soğurma) $n+1 \to n$ (yayım) geçişlerini ele alırsak,

$$\nu_R = \frac{E_{n+1,\ell+1} - E_{n,\ell}}{2\pi\hbar c} = \nu_0 + 2B + 2B\ell \qquad \Delta\ell = +1$$

$$\nu_P = \frac{E_{n+1,\ell-1} - E_{n,\ell}}{2\pi\hbar c} = \nu_0 - 2B\ell \qquad \Delta\ell = -1$$

$$B = \frac{\hbar}{4\pi c I} \quad \text{ve} \quad \nu_0 = \omega/2\pi c .$$

Böylece iki seri eşit aralıklı çizgi vardır: R ve P olarak adlandırılır (ve ν_0 da bir aralıklı boşluklar).

Eylemsizlik momentinin, farklı titreşim durumlarında farklı olduğu varsayılırsa,

$$E_{n\ell} = \hbar\omega\,(n + 1/2) + \frac{1}{2I_n}\hbar^2 \ell(\ell+1)$$

Deneyle uyuşan sonuçlar. HCl için iyi CO iyi değil.

bunun için hesaba katılır.

$$H_{int} = g\, H_{osc} \otimes H_{rot}$$

g bağlanma sbt. (eV^{-1})

$$H = H_{osc} \otimes I + I \otimes H_{rot} + g\, H_{osc} \otimes H_{rot}$$

$$E_{n\ell} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2I_e}\hbar^2 \ell(\ell+1) + g\hbar\omega \frac{\hbar^2}{2I_e}\left(n + \frac{1}{2}\right)\ell(\ell+1)$$

~~burada~~ elde edilecek ν_P ve ν_R ampirik formülle uyuşur.

prb.3.1.) P_i ve Q_j, $[P_i, Q_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ij} I$ kanonik komütasyon bağıntısını sağlasınlar. Yörünge açısal mom. unu $L_i \equiv \epsilon_{ijk} Q_j P_k$ ($\underline{L} = \underline{Q} \times \underline{P}$) ile tanımlayınız. Bileşen operatörler Hermitsel'dir (Eq. 2.11a) ve 2.14 komütasyon bağıntısını sağlarlar. H_3, H_+ ve H_- yi aşağıdaki gibi tanımlayınız.

$$H_3 \equiv \hbar^{-1} L_3 \qquad H_\pm \equiv \hbar^{-1}(L_1 \pm i L_2)$$

a) $[H_3, H_\pm] = \pm H_\pm$ olduğunu gösteriniz ve $[H_+, H_-] = 2H_3$. (Derste yapıldı!..)

b) $H^2 \equiv \hbar^{-2} L^2$ 'nin $\mathcal{E}(SU(2))$'nin invaryant bir op.'ü olduğunu, yani $[H^2, H_3] = 0$ ve $[H^2, H_\mp] = 0$ olduğunu gösteriniz. (Derste yapıldı)

c) $\vec{L}^2$'nin spektrumunun $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ ($\ell = 0, 1, 2, \ldots$) olduğunu gösteriniz.

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(Q_i + iP_i) \qquad \mu\omega = 1$$

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(Q_i - iP_i)$$

$$2Q_i = \sqrt{2\hbar}\,(a_i + a_i^\dagger)$$

$$, \quad L_i = \epsilon_{ijk} Q_j P_k$$

$$2iP_i = \sqrt{2\hbar}\,(a_i - a_i^\dagger)$$

$$L_3 = Q_1 P_2 - Q_2 P_1$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a_1 + a_1^\dagger)\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\frac{1}{i}(a_2 - a_2^\dagger) - \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a_2 + a_2^\dagger)\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\frac{1}{i}(a_1 - a_1^\dagger)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{i}\Big[\cancel{a_1 a_2} - a_1 a_2^\dagger + a_1^\dagger a_2 - \cancel{a_1^\dagger a_2^\dagger} - \cancel{a_2 a_1} + a_2 a_1^\dagger - a_2^\dagger a_1 + \cancel{a_2^\dagger a_1^\dagger}$$

BS K

$$L_3 = \frac{\hbar}{\cancel{2}}\frac{1}{i}\left(\cancel{2}\, a_2 a_1^{+} - \cancel{2}\, a_1 a_2^{+}\right)$$

$$= i\hbar\left(a_1 a_2^{+} - a_2 a_1^{+}\right)$$

$$L_3^2 = -\hbar^2\left(a_1 a_2^{+} - a_2 a_1^{+}\right)\left(a_1 a_2^{+} - a_2 a_1^{+}\right)$$

$$= -\hbar^2\left(a_1^2 a_2^{+2} - \underbrace{a_1 a_1^{+}}_{1+a_1^{+}a_1} a_2^{+} a_2 - \underbrace{a_2 a_2^{+}}_{1+a_2^{+}a_2} a_1^{+} a_1 + a_2^2 a_1^{+2}\right)$$

$$= -\hbar^2\left(a_1^2 a_2^{+2} + a_2^2 a_1^{+2} - a_2^{+} a_2 - a_1^{+} a_1 - \underbrace{a_1^{+} a_1 a_2^{+} a_2 - a_2^{+} a_2 a_1^{+} a_1}\right)$$

$$= -\hbar^2\left(a_1^2 a_2^{+2} + a_2^2 a_1^{+2} - 2a_1^{+} a_1 a_2^{+} a_2 - a_2^{+} a_2 - a_1^{+} a_1\right)$$

$$\langle n_1 n_2 | L_3^2 | n_1 n_2\rangle = -\hbar^2\left(-2n_1 n_2 - n_2 - n_1\right)$$

$$= \hbar^2\left(\underbrace{n_2 + n_1 + 2n_1 n_2}\right)_{m^2}$$

$$= \hbar^2\left(\sqrt{n_1}+\sqrt{n_2}\right)^2 = \hbar^2 m^2 \qquad \cancel{m = n_1 + n_2.}$$

$$\langle L^2\rangle = \langle L_1^2 + L_2^2 + L_3^2\rangle = 3\langle L_3^2\rangle$$

$$\langle L_3^2\rangle = \hbar^2\langle m^2\rangle = \hbar^2\,\frac{\sum_{m=-l}^{+l} m^2}{2l+1}$$

BS K

$$\langle L_3^2 \rangle = \hbar^2 \frac{2 \sum_{m=1}^{\ell} m^2}{2\ell+1}$$

$$= 2\hbar^2 \frac{1}{2\ell+1} \cdot \frac{\ell(\ell+1)(2\ell+1)}{6} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{3}$$

$$\Rightarrow \langle L^2 \rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1)$$

prb.3.5.) $\{ f^{j=1/2}_{-1/2}, f^{j=1/2}_{1/2} \}$ III.3 kesiminde tanımlanmış $\mathcal{R}^{1/2}$ uzayı için ortonormal baz olsun. (a) $\sigma_i = (2/\hbar)(f_{m'}^{j=1/2}, J_i f_m^{j=1/2})$ matris elemanları ile verilen σ_i matrislerinin

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

($\{ f^{1/2}_{-1/2}, f^{1/2}_{1/2} \}$ bazına göre) ile verildiğini gösteriniz.

$$\sigma_3 = \frac{2}{\hbar}\left(f_{m'}^{1/2}, J_3 f_m^{1/2} \right) \qquad J_3 f_m^{1/2} = \hbar m f_m^{1/2}$$

$$= \frac{2}{\hbar} \cdot \hbar m \left(f_{m'}^{1/2}, f_m^{1/2} \right)$$

$$= 2m\,\delta_{mm'} = \begin{pmatrix} (m=m'=1/2)\ 2\cdot\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & (m=m'=-\frac{1}{2})\ 2\cdot(-\frac{1}{2}) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$H_- f_m^{\ell} = \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}\ f_{m-1}^{\ell}$$

$$H_+ f_m^{\ell} = \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}\ f_{m+1}^{\ell}$$

$$2iJ_2 = \hbar\,(H_+ - H_-)$$

$$\Rightarrow J_2 = \frac{\hbar}{2}\,i\,(H_- - H_+)$$

$$J_2 f_m^{\ell} = \frac{\hbar}{2} i \left\{ \sqrt{\left(\tfrac{1}{2}+m\right)\left(\tfrac{1}{2}-m+1\right)}\ f_{m-1}^{1/2} - \sqrt{\left(\tfrac{1}{2}-m\right)\left(\tfrac{1}{2}+m+1\right)}\ f_{m+1}^{1/2} \right\}$$

$$\left(f_{m'}^{1/2}, J_2 f_m^{1/2} \right) = \frac{\hbar}{2} i \left\{ \sqrt{\left(\tfrac{1}{2}+m\right)\left(\tfrac{3}{2}-m\right)}\ \delta_{m'm-1} - \sqrt{\left(\tfrac{1}{2}-m\right)\left(\tfrac{3}{2}+m\right)}\ \delta_{m'm+1} \right\}$$

$$\sigma_z = \cancel{\frac{2}{\hbar}}\,\cancel{\frac{\hbar}{2}}\, i \left[\sqrt{\left(\frac{1}{2}+m\right)\left(\frac{3}{2}-m\right)}\, \delta_{m'm-1} - \sqrt{\left(\frac{1}{2}-m\right)\left(\frac{3}{2}+m\right)}\, \delta_{m'm+1} \right]$$

$$= i \begin{bmatrix} \overset{(m=m'=1/2)}{0} & \overset{(m'=\frac{1}{2},\, m=\frac{-1}{2})}{-1} \\ \overset{(m'=\frac{-1}{2}\;\, m=1/2)}{1} & \overset{m=m'=-1/2}{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

BS K

prb. 3.6.) $\mathcal{R}_1$ ve $\mathcal{R}_2$ iki sonlu-boyutlu lineer skaler-çarpım uzayı ve $\mathcal{R}_1 \oplus \mathcal{R}_2$ bunların direkt toplamları olsun. A_1, $\mathcal{R}_1$ de ve A_2 $\mathcal{R}_2$'de lineer op.'ler olsun. $A_1 \oplus A_2$ direkt toplamı,

$$(A_1 \oplus A_2) f = (A_1 \oplus A_2)(f_1 \oplus f_2) = (A_1 f_1 \oplus A_2 f_2)$$

gönderim olarak tarif edilir. $f_i \in \mathcal{R}_i$ ve $f \in \mathcal{R}$. $\mathcal{R} = R_1 \otimes \mathcal{R}_2$ olsun ve $A_1 \otimes A_2$ direkt çarpımı

$$(A_1 \otimes A_2) h = (A_1 \otimes A_2)(h_1 \otimes h_2) = (A_1 h_1 \otimes A_2 h_2)$$

olsun, $h_i \in \mathcal{R}_i$, $h \in \mathcal{R}$. **(a)** $A_1 \oplus A_2$ op.'nün uygun bir baz() a matrisinin

$$\begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix}$$

olduğunu gösteriniz. a_1 : A_1'in a_2 : A_2'nin matrisi.

$$(A_1 \oplus A_2)(\phi_i \oplus \phi_j) = A_1 \phi_i \oplus A_2 \phi_j \qquad i = 1, 2, \ldots, m$$
$$j = m+1, \ldots, n$$

()

$$A_1 \phi_i = \sum_{k=1}^{m} a_{ik} \phi_k$$

$$\oplus$$

$$A_2 \phi_j = \sum_{l=m+1}^{n} a_{jl} \phi_l$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \phi_i & 0 \\ 0 & A_2 \phi_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_i \\ \phi_j \end{pmatrix}$$

BS K

(b) Uygun bir bazda yazıldığı zaman $A_1 \otimes A_2$ op.'nin matris elemanının

$$a_{jk,il} = a^{(1)}_{ji}\, a^{(2)}_{kl}$$

(yani, bir blok matris olarak yazıldığında)

$$\begin{bmatrix} a^{(1)}_{11} a^{(2)} & \cdots & a^{(1)}_{1n} a^{(2)} \\ a^{(1)}_{21} a^{(2)} & & \\ \vdots & & \\ a^{(1)}_{n1} a^{(2)} & & a^{(1)}_{nn} a^{(2)} \end{bmatrix}$$

özelliğine sahip olduğunu gösteriniz.

$$(a \otimes b).(a' \otimes b') = (a.a') \otimes (b.b')$$

$$\left.\begin{matrix} a : m \times m \\ b : n \times n \end{matrix}\right\} \Rightarrow \quad a \otimes b : mn \otimes mn \text{ boyutlu bir matris.}$$

$$(a \otimes b)_{jk,il} = a_{ji}\, b_{kl}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} \underset{\sim}{B} & \cdots & a_{1m} \underset{\sim}{B} \\ \vdots & & \\ a_{m1} \underset{\sim}{B} & \cdots & a_{mm} \underset{\sim}{B} \end{pmatrix}$$

BS K

prb. 3.7.) A, B ve C, $[A,B]=C$ şartını sağlayan üç lineer op. olsunlar. Hangi koşul altında f hem A ve hem de B op.'nün eşzamanlı bir özvektörüdür?

$$\left.\begin{aligned} Af &= af \\ Bf &= bf \end{aligned}\right\} \text{ olsun.}$$

$$ABf = Abf = bAf = abf$$

$$BAf = Baf = aBf = abf$$

$$(AB - BA)f = 0$$

f, A ve B'nin eşzamanlı özfonk.udur ancak ve ancak

$[A,B]=0$ ise.