VI. HİDROJEN ATOMU

KUANTUM MEKANİKSEL KEPLER PROBLEMİ

VI.2. Klasik Kepler Proplemi:

x_i, p_i : elektron koordinatları ve mom.

proton $(+e)$ koordinat sisteminin başlangıcında bulunsun. Elektron ve proton arasındaki Coulomb kuvveti

$$\vec{F} = -\frac{e^2}{r^2}\vec{n}$$

$$\vec{n} = \frac{\vec{x}}{r}, \quad r = |\vec{x}| = \left(\sum_i x_i x_i\right)^{1/2}$$

potansiyel enerji : $V(r) = -e^2/r$

Elektronun enerjisi : $E = \dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2m_e} - \dfrac{e^2}{r}$

m_p'yi sonsuz değil de, sonlu $m_p = 1836\, m_e$ alınacak olursa,

$m_e \to m = \dfrac{m_e m_p}{m_e + m_p}$ indirgenmiş kütlesi alınır ve

$\vec{p} = \dfrac{-m_e \vec{p}_e + m_p \vec{p}_e}{m_e + m_p}$ elektronun indirgenmiş mom.'u alınır.

BS K

F008 . Kuantum Mekaniği II .

1 VI. Hidrojen atomu 205-222

2 VII. Tek elektronlu atomların Schrödinger denk. 222-241

3 VIII. Pertürbasyon teorisi 242-252

4 IX. Elektron spini 253-273

5 X. Ayırt edilemeyen parçacıklar 274-281

6 XI. Helyum atomu 281-309

7 XII. Zaman gelişimi 310-327

8 XIII. Q.M.'nin son temel ilkeleri. 328-355
S-G. Deneyi

9 XIV. Q. fiziksel sistemlerin simetrileri - Tensör teorisi 356-386

10 XV. Formel saçılma teorisi. 387-408.

11 XVI. Küresel simetrik etkileşmeler ile elastik ve elastik olmayan saçılma 409-424

12 XVII. Serbest - tam dalga fonksiyonları. 425-451

13 XIX. Zaman tersinmesi 505-516.

23 Mart '99 I. Vize

18 Mayıs '99 II. Vize

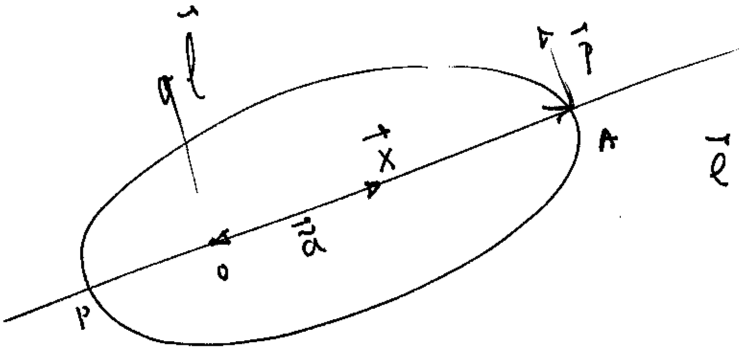
Final. Rehber.

E 'nin yanısıra, iki hareket sbt.'i daha vardır:

$$\vec{\ell} = \vec{x} \times \vec{p}$$

$$\vec{\tilde{a}} \equiv -\frac{\vec{p} \times \vec{\ell}}{m_e} + \frac{e^2}{r}\vec{x}$$ Runge-Lenz vekt.

1/r pot.'nin özelliği.

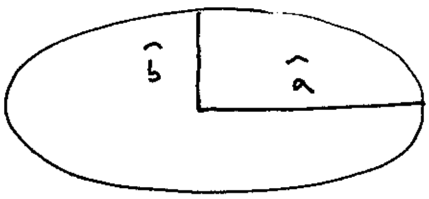


$\vec{\ell}$ 'nin hareket sbt.'i olması

$V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|)$ den

dolayıdır.

1/r 'den sapma PA eksenin presesyonuna neden olur ve bu durumda yörünge kapalı değildir.



dış merkezlilik $\epsilon = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}$

$$E = -\frac{e^2}{2\hat{a}} \quad , \quad \ell^2 = m_e e^2 \hat{a}(1-\epsilon^2)$$

$$\vec{\tilde{a}}^2 = \frac{2E}{m}\ell^2 + e^4 = (e^2\epsilon)^2$$

Tanım: $\vec{a} = \vec{\tilde{a}} \dfrac{m_e}{\sqrt{-2m_eE}}$

$$\vec{\ell}\cdot\vec{a} = \vec{\ell}\cdot\vec{\tilde{a}} = 0$$

$$\vec{a}^2 + \vec{\ell}^2 = \frac{m_e^2 e^4}{-2m_eE}$$

BS K

BS K

$$\delta_{il}\,\delta_{lk}$$
$$+\ \delta_{ij}\,\delta_{jj}\,\delta_{ll}$$
$$+\ \delta_{ik}$$

$$[P_j, L_k] = P_j L_k - L_k P_j$$

$$[L_k, P_j] = L_k P_j - P_j L_k$$

VI.3. QM sel Kepler Problemi:

$p_i \to P_i \quad , \quad x_i \to Q_i$

$L_i = \epsilon_{ijk} Q_j P_k$

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m_e} - e^2 Q^{-1} \qquad Q = \left(Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2 \right)^{-1/2}$$

⟦ Q^{-1}'in Matematiksel Anlamı: Q_i Hermitsel, $A = \sum_i Q_i^2$. pozitif tanımlı op. A → pozitif definite ⟺ $(f, Af) \geq 0$ ise ve bütün $f \in \mathcal{H}$ için $(f, Af) = 0$ dan $f = 0$ çıkar. Özellikle, A'nın spektrumu $\{a\}$ negatif değildir. Her Hermitsel p-d A op.'ü için, tek olarak p-d Hermitsel bir B op.'ü $B^2 = A$ olacak şekilde tanımlanır. $B = \sqrt{A}$ olarak yazılır ve özdeğerleri $\{\sqrt{a}\}$'dır. Bazen özdeğerlere $\{-\sqrt{a}\}$'lar eklenmelidir. Mevcutsa bir B op.'unun tersi B^{-1}, $B^{-1}B = BB^{-1} = \mathbb{1}$. olacak şekilde tanımlanır. B, Hermitsel ve spektrumu $\{b\}$ ise B^{-1}'in spektrumu $\{1/b\}$ dir ve özvektörler B'nin'kiler ile aynıdır. ⟧.

Q.M sel Lenz vektörü;

$$(\vec{p} \times \vec{\ell})_i = \epsilon_{ijk} p_j \ell_k$$

$[P_j, L_k] \neq 0$ olduğundan $\epsilon_{ijk} P_j L_k$ Hermitsel değildir. ancak bunun yerine

$$\left(\epsilon_{ijk} P_j L_k \right)^\dagger = \epsilon_{ijk} L_k P_j = \epsilon_{ijk} P_j L_k - 2i\hbar P_i \; .$$

1.) $[H, \tilde{A}_i] = [\underbrace{\frac{\vec{P}^2}{2} - \frac{a}{Q}}_{H}, \frac{1}{2}\epsilon_{ikl}\{P_l, L_k\} + \frac{a Q_i}{Q}]$

$$= \frac{1}{2}\epsilon_{ikl}\,\underbrace{[H, \{P_l, L_k\}]}_{\#1} + \frac{a}{2}[\vec{P}^2, \frac{Q_i}{Q}] - a^2 \cancel{[\frac{1}{Q}, \frac{Q_i}{Q}]}^{\,0}$$

$$\underbrace{\sum_j P_j^2 = -\hbar \sum_j \frac{\partial^2}{\partial Q_j^2}}_{\#2}$$

#1.

$$[H, \{P_l, L_k\}] = [H, P_l L_k + L_k P_l]$$

$$= [H, P_l L_k] + [H, L_k P_l]$$

$$= P_l \cancel{[H, L_k]}^{\,0} + \underbrace{[H, P_l] L_k + L_k [H, P_l]}_{\#3}$$

$$+ \cancel{[H, L_k]}^{\,0} P_l$$

#3. $[H, P_l] = [-\frac{a}{Q}, P_l] = [P_l, \frac{a}{Q}]$

$$= \frac{a\hbar}{i}[\frac{\partial}{\partial Q_l}, \frac{1}{Q}] = -i a \hbar \frac{Q_l}{Q^3}$$

$$[\frac{\partial}{\partial Q_l}, \frac{1}{\sqrt{\sum_i Q_i^2}}]\psi = \frac{\partial}{\partial Q_l}(\frac{1}{r}\psi) - \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial Q_l} = (\frac{\partial}{\partial Q_l}\frac{1}{r})\psi$$

$$= \frac{1}{(\sum_i Q_i^2)^{3/2}} \frac{\partial}{\partial Q_l} \sum_i Q_i^2 = \frac{1}{Q^3} 2 Q_i \delta_{il}$$

$$\Rightarrow [H, P_l] L_k + L_k [H, P_l] = -2 i a \hbar \left(\frac{Q_l}{Q^3} L_k + L_k \frac{Q_l}{Q^3} \right) \ \ldots$$

BS K

VI. 3. Q.M.'sel Kepler Problemi:

$$p_i \to P_i \quad , \quad x_i \to Q_i$$

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

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m_e} - e^2 Q^{-1} \qquad Q = (Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2)^{1/2}$$

<u>Q.M.'sel Lenz vektörü:</u>

$$\left\{ \begin{array}{l} [L_i, Q_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} Q_k \\ [L_i, P_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} P_k \end{array} \right.$$

$(\vec{p} \times \vec{l})_i = \epsilon_{ijk} p_j l_k$, $[P_j, L_k] \neq 0$ olduğundan

$\epsilon_{ijk} P_j L_k$ Hermitsel değildir. Ancak, bunun yerine,

$$(\epsilon_{ijk} P_j L_k)^\dagger = \epsilon_{ijk} L_k P_j$$

$$= \epsilon_{ijk} \left(P_j L_k + \underbrace{[L_k, P_j]}_{= i\hbar \epsilon_{kjl} P_l} \right)$$

$$= \epsilon_{ijk} P_j L_k - 2i\hbar P_i \qquad \underbrace{\epsilon_{ijk}\epsilon_{kjl}}_{-2\delta_{il}}$$

$$\epsilon_{ijk} L_k P_j = \epsilon_{ijk} P_j L_k - 2i\hbar P_i$$

$$\epsilon_{ijk} P_j L_k = \epsilon_{ijk} P_j L_k$$

$$\epsilon_{ijk}\{P_j, L_k\} = 2\epsilon_{ijk}P_jL_k - 2i\hbar P_i$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\{P_j, L_k\} = \epsilon_{ijk}P_jL_k - i\hbar P_i$$

$$\frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\{P_j, L_k\}^\dagger = \overbrace{\epsilon_{ijk}L_kP_j}^{(\epsilon_{ijk}P_jL_k)^\dagger} + i\hbar P_i ,$$

$$= \underbrace{\epsilon_{ijk}P_jL_k} - \overset{1}{\cancel{2i\hbar P_i}} \cancel{+ i\hbar P_i}$$

$$= \epsilon_{ijk}P_jL_k - i\hbar P_i$$

$$= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\{P_j, L_k\} .$$

$$\therefore \boxed{\tilde{A}_i \equiv \frac{1}{2m}\epsilon_{ik\ell}\{P_\ell, L_k\} + \frac{e^2 Q_i}{Q}}$$

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2} - \frac{a}{Q} , \quad a = \frac{m_e e^2}{\hbar} = m_e c \alpha$$

$$\tilde{A}_i = \frac{1}{2}\epsilon_{ik\ell}\{P_\ell, L_k\} + a Q_i Q^{-1}$$

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}L_k$$

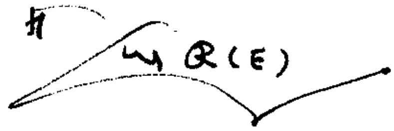
BS K

Hidrojen atomu P_i ve Q_i'nin yaklaşık özdurumlarında hazırlanamaz: böyle bir hazırlık, hidrojen atomunu ayırır. Hidrojen atomu, enerji op.'nün (saf ya da karışık) özdurumlarında görülür. Fiziksel durumlar izotropik H. Salınıcıdan farklıdır.

H ile sıradeğiştiren op.'leri, yeni gözlenebilirler olarak alacağız: L_i ve $\tilde{A}_i$ hareket sbt.'leri olacaktır.

$$[H, L_i] = 0 \qquad [H, \tilde{A}_i] = 0$$

H, L_i ve $\tilde{A}_i$ den doğan bütün cebir ile sıradeğiştirir. Bu cebirde E özdeğerli H'nin verilen bir özvektöründen yine aynı E özdeğerli H'nin bir özvektörü olmayan bir vektöre dönüştüren op. yoktur. H'nin E özdeğerli özvektörler uzayını $\mathcal{R}(E)$ ile gösterelim. O zaman bütün L_i, $\tilde{A}_i$ ve bunların iyi tanımlı bütün fonksiyonları, $A = A(\vec{L}, \vec{A}) : f \in \mathcal{R}(E) \to g \in \mathcal{R}(E)$ aynı özdeğerli bir özvektör gibi dönüşür. $Af = g$.



L_i, $\tilde{A}_i$'nin cebri, $\mathcal{R}(E)$ özuzayları değişmez bırakır.

Cebir: $[\tilde{A}_i, \tilde{A}_j] = -2i \dfrac{H}{m_e} \epsilon_{ijk} L_k$

Yeni op.'ler kümesini tanımlayalım.

$$A_i = \left(\sqrt{-2H}\right)^{-1} \tilde{A}_i = \tilde{A}_i \left(\sqrt{-2H}\right)^{-1} \qquad (*)$$

bunun anlamı var mı?

Lenz vektörünün bileşenlerine karşı gelen QM'sel $\tilde{A}_i$ gözlene_bilirlerinin Hermitsel olmasını istiyoruz, bu nedenle

$$\epsilon_{ijk}\, p_j l_k \to \epsilon_{ijk} \frac{1}{2} \{ P_j , L_k \}$$

alırız. $\{ A , B \} \equiv AB + BA$ antikomutatör.

$\therefore$ QM'sel Lenz vektörü,

$$\tilde{A}_i \equiv \frac{1}{2m} \epsilon_{ikl} \{ P_l , L_k \} + \frac{e^2 Q_i}{Q}$$

buraya kadar $[P] \to eV/c$, $Q \to cm$ $[P_i , Q_j] = \frac{\hbar}{i} I \delta_{ij}$

bundan sonra $Q \to \frac{Q}{\hbar} : (eV/c)^{-1}$: $[P_i , Q_j] = -i I \delta_{ij}$

$H \to m_e H$: $eV m_e$

$$\left\{ \begin{array}{l} H = \dfrac{\vec{P}^2}{2} - \dfrac{a}{Q} \qquad a = \dfrac{m_e e^2}{\hbar} = m_e c\, \alpha \quad \alpha \equiv e^2/\hbar c \\[2ex] \tilde{A}_i = \dfrac{1}{2} \epsilon_{ikl} \{ P_l , L_k \} + a Q_i Q^{-1} \\[2ex] [L_i , L_j] = i \epsilon_{ijk} L_k \end{array} \right.$$

Sommerfeld ince yapı sbt.:

BS K

2.

$$\tilde{A}_i = \frac{1}{2}\epsilon_{ikl}\{P_l, L_k\} + a\frac{Q_i}{Q}$$

$$= \frac{1}{2}\epsilon_{ikl}(P_l L_k + L_k P_l) + a\frac{Q_i}{Q}$$

$$= \frac{1}{2}\underbrace{\underbrace{\epsilon_{ikl} P_l L_k}_{-\epsilon_{ilk} P_l L_k}}_{-(\vec{P}\times\vec{L})_i} + \frac{1}{2}\underbrace{\epsilon_{ikl} L_k P_l}_{(\vec{L}\times\vec{P})_i} + a\frac{Q_i}{Q}$$

$$= \frac{1}{2}\left[-(\vec{P}\times\vec{L})_i + (\vec{L}\times\vec{P})_i\right] + a\frac{Q_i}{Q}$$

$$[L_i, P_j] = i\epsilon_{ijk}P_k$$

$$\tilde{A}_1 = \frac{1}{2}\left[(\vec{L}\times\vec{P})_1 - (\vec{P}\times\vec{L})_1\right] + a\frac{Q_1}{Q}$$

$$(\vec{L}\times\vec{P})_1 = L_2 P_3 - L_3 P_2$$

$$[L_2, P_3] = iP_1$$

$$[L_3, P_2] = -iP_1$$

$$(L_2 P_3 - L_3 P_2) + (P_2 L_3 - P_3 L_2) = 2iP_1$$

BS K

$$\Rightarrow \tilde{A}_1 = \frac{1}{2}\left\{2iP_1 + P_3L_2 - P_2L_3 - P_2L_3 + P_3L_2\right\} + a\,\frac{Q_1}{Q}$$

$$= P_2L_3 - P_3L_2 - iP_1 + a\,\frac{Q_1}{Q}$$

$$\tilde{A}_2 = P_3L_1 - P_1L_3 - iP_2 + a\,\frac{Q_2}{Q}$$

$$\tilde{A}_1\tilde{A}_2 - \tilde{A}_2\tilde{A}_1 = [\tilde{A}_1, \tilde{A}_2] = \dots$$

$$= -2i\left(\frac{\bar{P}^2}{2} - \frac{a}{Q}\right)L_3$$

$$[\tilde{A}_i, \tilde{A}_j] = \frac{2i\hbar}{m_e} H \epsilon_{ijk} L_k .$$

$\mathcal{R}(E)$ uzayında kalındığında problem yok!. çünkü $\mathcal{R}(E)$ de $\sqrt{-2H} = \sqrt{-2E}$ yani bir sayıdır. Böylece $\mathcal{R}(E)$ de A_i ve $\tilde{A}_i$ bir çarpan kadar farkeder. A_i'nin $\mathcal{R}(E)$ ye sınırlanması iyi tanımlıdır. $\sqrt{2H}$ iyi tanımlandığında A_i'de iyi tanımlıdır. Bu $(f, (-2H)f) > 0$ olan f vektörler uzayı için böyledir. Bu uzay negatif enerji uzayı ya da bağlı durumlar uzayı olarak adlandırılır. Bu uzaya kendimizi sınırlandıracağız.

Negatif-enerji uzayını $\mathcal{R}$ ile göstereceğiz. $\mathcal{R}$ üzerinde (*) ile verilen A_i iyi tanımlıdır. Kolayca görülür ki,

$$[H, A_i] = 0$$

$$[L_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} A_k \qquad \text{Pr. 1.}$$

$$[A_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} L_k \quad , \quad A_i^\dagger = A_i$$

L_i ve A_i ile yeni op.'ler tanımlayalım.

$$\begin{cases} C_1 \equiv \vec{A}^2 + \vec{L}^2 = A_1^2 + A_2^2 + A_3^2 + L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \\ C_2 \equiv \vec{A} \cdot \vec{L} = A_1 L_1 + A_2 L_2 + A_3 L_3 \end{cases}$$

Bunlar A_i ve L_j ile sıradeğiştirirler:

$$[C_1, L_i] = 0 \qquad [C_1, A_i] = 0$$

$$[C_2, L_i] = 0 \qquad [C_2, A_i] = 0$$

$$A_i = \left(\sqrt{-2H}\right)^{-1} \tilde{A}_i$$

$$\tilde{A}_i = \frac{1}{2}\epsilon_{ikl}\{P_l, L_k\} + a\frac{Q_i}{Q}$$

$$\tilde{A}_i^2 = 2H\,(\vec{L}^2+1)+a^2$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\tilde{A}_i^2}{-2H} = -\vec{L}^2 - 1 - \frac{a^2}{2H} = A_i^2 \equiv \vec{A}^2$$

$$C_1^2 = \vec{A}^2 + \vec{L}^2 = \frac{a^2}{-2H} - 1 = \frac{a^2}{-2E} \cancel{-1}$$

$$= n^2 \cancel{-1}$$

$$\Rightarrow \quad E = -\frac{a^2}{2n^2}$$

$C_2 = 0$

BS K

A_i ve L_j ($[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk} L_k$, $[L_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} A_k$ ve $[A_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} L_k$ komütatör bağıntılarını sağlayan) tarafından doğurulan cebir $\mathcal{E}(SO(4))$ olarak adlandırılır. [[L_i ve $A_i' = \sqrt{2H}\,\tilde{A}_i$ ($2H$ pozitif-definite) tarafından doğurulan cebir $SO(3,1)$ grubunun $\mathcal{E}(SO(3,1))$ cebiridir.]].

C_1 ve C_2 op.'leri $\mathcal{E}(SO(4))$'ün Casimir op.'leridir. $\mathcal{E}(SO(4))$'ün indirgenemez temsil uzayında C_1 ve C_2 op.'leri özdeşlik op.'ü I'nın katlarıdır. Yani, her biri yalnızca bir özdeğer c_1 ve c_2'ye sahiptir ve bu değerler temsil uzayını karakterize ederler. Yukarıdaki L_i ve A_i'ler için

$$C_1 = a^2 (-2H)^{-1} - I \quad . \qquad \underline{\text{prob. 1}}$$

$$C_2 = 0$$

C_1, E'ye sağlar. Bunlar a_i ve l_i arasındaki klasik bağıntıların Q.M.'sel benzeridir. Böylece $\mathcal{R}(E)$ uzayı $\mathcal{E}(SO(4))$'ün özel bir temsil uzayıdır, yani

$$c_2 = 0 \quad \text{ve} \quad c_1 = a^2 (-2E)^{-1} - 1$$

olan uzaydır.. $C_1 = 0$ sağlayan $\mathcal{E}(SO(4))$'ün bütün münferit temsil uzaylarını bilirsek, bütün münferit E değerleri ($E<0$) için $\mathcal{R}(E)$ uzaylarındaki L_i ve A_i op.'lerinin özelliklerini biliriz.

c_1 keyfi reel bir değer alamaz, daha ziyade c_1'in spektrumu kesiklidir. [$\mathcal{E}(SO(3))$ ün $\vec{J}^2$ Casimir op.'ü için, aynı sonucu bulduk, yani $j(j+1)$ kesikli değerleri mümkündür] H'nin spektrumu c_1'den elde edilir.

~~VI.4~~ Açısal Mom. ve Lenz vektörü Cebri

$\mathcal{R}(F)$ de baz vektörleri olarak $|lm\rangle$'yi seçeriz. Çünkü, $H, \vec{L}^2, L_3$ sıradeğiştiren op. kümesidir. Bunun H atomu için CSCO olup olmadığı deneyle karşılaştırılarak kararlaştırılır. Bu nedenle, bunun CSCO olduğu varsayımını yapalım: l, m ve enerji, H atomu için kuantum sayıları olsun. $\vec{A}$ bir has vektör op.'ü ve $U_p A_i U_p = -A_i$ olduğundan, W−E teoremine göre,

$$A_q|lm\rangle = |l-1\; m+q\rangle\langle lm\,1q|l-1\; m+q\rangle\langle l-1\|A\|l\rangle$$

$$+\,|l\; m+q\rangle\langle lm\,1q|l\; m+q\rangle\langle l\|A\|l\rangle$$

$$+\,|l+1\; m+q\rangle\langle lm\,1q|l+1\; m+q\rangle\langle l+1\|A\|l\rangle$$

$|lm\rangle$ tam baz sist.'i, parite ikilenmesi yok, ve A_i bir has vektör op. olduğundan

$$\langle l\|A\|l\rangle = 0 \quad \text{olur.}$$

BS K

C_G katsayıları kullanılarak,

$$A_0 |lm\rangle = [l^2 - m^2]^{1/2} C_l |l-1\, m\rangle - [(l+1)^2 - m^2]^{1/2} C_{l+1} |l+1\, m\rangle$$

$$A_{+1} |lm\rangle = -[(l-m)(l-m-1)/2]^{1/2} C_l \, |l-1\, m+1\rangle$$
$$- [(l+m+1)(l+m+2)/2]^{1/2} C_{l+1} |l+1\, m+1\rangle$$

$$A_{-1} |lm\rangle = -[(l+m)(l+m-1)/2]^{1/2} C_l \, |l-1\, m-1\rangle$$
$$- [(l-m+1)(l-m+2)/2]^{1/2} C_{l+1} |l+1\, m-1\rangle$$

C_l : henüz belirlenmemiş fonk.'lar $\propto \langle l-1 \| A \| l \rangle$.

Ve $[A_i, A_j] = i \epsilon_{ijk} L_k$ $A_i^{+} = A_i$ ile belirlenirler.

Her doğal $n = 1, 2, 3, \ldots$ sayısı için, bu bağıntıları sağlayacak şekilde bir $C_l^{(n)}$ fonk.'u vardır. Bu fonk.

$$C_l^{(n)} = i \sqrt{\frac{n^2 - l^2}{4l^2 - 1}} \;, \quad C_0^{(n)} = 0 \quad \text{'dır.}$$

Aşağıdaki özellikler bulunabilir.

(*) Her $n = 1, 2, 3, \ldots$ sayısı için, bir indirgenemez $\mathcal{R}(n)$ temsil uzayı vardır. $\mathcal{R}(n)$ de en düşük açısal mom. $l = 0$ 'dır. Çünkü A_k 'nın uygulanması ile verilen bir l değerinden başlayarak daima $l-1$ değerine varılır; $C_0^{(n)} = 0$ 'dır $l = 0$ için.

BS K

(*) En yüksek açısal mom. $n-1$ 'dir, çünkü A_4 'ün uygulanarak verilen bir l değerinden $l+1$ değerine daima erişilebilir; $C^{(n)}_{l+1}=0$ 'dır. $l=n-1$ için.

l'nin farklı değerleri için $|lm\rangle$'ler dik olduğundan $\mathcal{R}(n)$ uzayı, açısal mom. indirgenemez temsil uzayları $\mathcal{R}^l$ 'lerin ortogonal direkt toplamıdır.

$$\mathcal{R}(n) \xrightarrow[\Sigma(SO(3))]{} \sum_{l=0}^{n-1} \oplus\, \mathcal{R}^l$$

bu iki uzay sadece $\Sigma(SO(3))$ cebri sınırlar ettiğinde aynı'dır.

$\mathcal{R}^l$ uzaylarının neticesinde $L_3, L_\pm$ 'nın etkisi ve böylece $\mathcal{R}(n)$ deki etkisi

$$L_3|lm\rangle = m|lm\rangle \qquad L^2|lm\rangle = l(l+1)|lm\rangle$$

oluyor. Böylece L_i ve A_i (ve sonuç olarak tüm $\Sigma(SO(4))$ cebri) her $\mathcal{R}(n)$ de $(n=1,2,\ldots)$ etkili. $|lm\rangle$ 'nin $\mathcal{R}(n)$'nin elemanı olduğunu belirtmek için $|nlm\rangle$ yazarız.

<u>$\mathcal{R}(n)$ de C_1 op.'nin özdeğeri $C_1=n^2-1$ dir</u> :

$$C_1|nlm\rangle = (n^2-1)|nlm\rangle$$

bu C_1 için mümkün olan sınırlı sayılar kümesini verir.

$\mathcal{R}(n)$ uzayı, sadece $\Sigma(SO(4))$ ün indirgenemez temsil uzayı değil aynı zamanda U_p paritesi ile genişletilmiş $\Sigma(SO(4))$ ünde indirgenemez temsil uzayı'dır.

$$U_p L_i U_p = +L_i$$

$$U_p A_i U_p = -A_i$$

$$U_p |nlm\rangle = (-1)^l \eta_n |nlm\rangle$$

$\eta_n = +1$ ve ya $\eta_n = -1$ 'dir mesela farklı $\mathcal{R}(n)$ uzayları için farklı olabilir.

VI.5. Hidrojen Spektrumu:

Açısal Mom. ve Lenz vektörü cebrinin bütün indirgenemez temsil uzaylarını tasvir ettik : $\mathcal{R}(n)$.

$$C_1 = a^2 (-2H)^{-1} - 1$$

bağıntısı $\mathcal{R}(n)$ ile, $E<0$ enerjili enerji özuzayları $R(E)$ olan uzayları bağlar :

$$C_1 = (n^2-1) = a^2 (-2E)^{-1} - 1$$

Böylece herbir $\mathcal{R}(n)$ denk enerji $E = E_n = -\dfrac{a^2}{2n^2}$ ile verilir ve $\mathcal{R}(n)$ ler H atomunun bütün mümkün enerji özuzaylarıdır.

BS K

H atomunun fiziksel durumlarının uzayı $\mathcal{H}$, bütün bu $\mathcal{H}(n)$'lerin direkt toplamıdır.

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^{\infty} \oplus\, \mathcal{H}(n)$$

ve $\mathcal{H}$ deki enerji op.'nün spektrumu

$$E_n = -\underbrace{\alpha^2/2n^2}_{\text{asal kuantum sayısı.}} \qquad n = 1, \dots$$

Farklı enerji düzeyleri arasındaki dipol geçişleri Q_i
multipol " Q_i^n 'lerin
matris elemanları ile incelenir. Böylece Q_i farklı $\mathcal{H}(n)$ uzayları arasındaki dönüştüren gösterebilirlerdir.

Q_q $(q = 0, \pm 1)$ has vektör op. bileşenleri.

$$Q_q|nlm\rangle = \sum_{n'} |n'\, l-1\, m+q\rangle \langle lm\,1q|l-1\, m+q\rangle (2l+1)^{1/2}\, q_l^{n'n}$$

$$+ \sum_{n'} |n'\, l+1\, m+q\rangle \langle lm\,1q|l+1\, m+q\rangle (2l+1)^{1/2}\, \tilde{q}_l^{n'n}$$

$$q_l^{n'n} = (2l+1)^{-1/2} \langle n'\, l-1 \| Q \| nl \rangle$$

$$\tilde{q}_l^{n'n} = (2l+1)^{-1/2} \langle n'\, l+1 \| Q \| nl \rangle$$

bunların hepsi sıfırdan farklıdır yani H atomunun bütün enerji düzeyleri arasındaki dipol geçişleri mevcuttur.

Q_k'nın U_p dönüşüm özelliğini kullanarak iç paritenin n-bağımsızlığını belirleyebiliriz:

$$U_p\,|nlm\rangle = (-1)^l \eta_n\,|nlm\rangle$$

$$U_p Q_k\,|nlm\rangle = \sum_{n'} (-1)^{l-1}\eta_{n'}\,|n'\,l-1\,m+k\rangle\langle lm\,1k\,|\,l-1\,m+k\rangle \times (2l+1)^{1/2}\, q_l^{n'n}$$

$$+ \sum_{n'} (-1)^{l+1}\eta_{n'}\,|n'\,l+1\,m+k\rangle\langle lm\,1k\,|\,l+1\,m+k\rangle \times (2l+1)^{1/2}\, \tilde{q}_l^{n'n}$$

$U_p Q_i U_p^{-1} = -Q_i$ kullanılırsa

$$U_p Q_k\,|nlm\rangle = -Q_k U_p\,|nlm\rangle = -(-1)^l \eta_n\, Q_k\,|nlm\rangle$$

$$= -(-1)^l \eta_n \Big\{ \sum_{n'} |n'\,l-1\,m+k\rangle\langle lm\,1k\,|\,l-1\,m+k\rangle (2l+1)^{1/2} q_l^{n'n}$$

$$+ \sum_{n'} |n'\,l+1\,m+k\rangle\langle lm\,1k\,|\,l+1\,m+k\rangle (2l+1)^{1/2} \tilde{q}_l^{n'n} \Big\}$$

kıyaslarsak,

$$\eta_{n'}\, q_l^{n'n} = \eta_n\, q_l^{n'n} \qquad \eta_{n'}\, \tilde{q}_l^{n'n} = \eta_n\, \tilde{q}_l^{n'n}$$

$\ne 0$ olduklarından

$$\eta_{n'} = \eta_n = \eta$$

$$U_p\,|nlm\rangle = (-1)^l \eta\,|nlm\rangle \qquad \eta = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases}$$

Belirli bir ℓ açısal mom. değeri olan bir durumun paritesi bütün $\mathcal{R}(n)$ enerji uzaylarında aynıdır. Anlaşma olarak $\eta = +1$ seçilir.

H atomunun herbir $\mathcal{R}(n)$ enerji uzayı, $\mathcal{R}^{\ell}$ açısal mom. özuzaylarının direkt toplamıdır.; böylece herbir E_n enerji düzeyi n açısal mom. içerir.

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$\mathcal{R}(n)$ deki herbir $\mathcal{R}^{\ell}$ açısal mom. özuzayı, $2\ell+1$ tane tek boyutlu $\mathcal{R}_m^{\ell}$ uzayın direkt toplamıdır.

$$\mathcal{R}^{\ell} \xrightarrow[\Sigma(SO(2))]{} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \oplus \mathcal{R}_m^{\ell}$$

$\Sigma(SO(2))$, $\Sigma(SO(3))$'ün alt cebirini gösterir ki, L_3 tarafından doğurulur. $\mathcal{R}(n)$'nin boyutu,

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2$$

E_n enerji özdeğeri n^2-katlı dejeneredir.

BS K

V.3. Tensör Operatörler ve Wigner-Eckart Teoremi

$\underbrace{\text{Tensör Operatörler}}$ (açısal mom. op.'leri ile olan ilişkileri ile tanımlanırlar.)

$$[J_i \, , S] = 0 \qquad \underline{\text{skaler op.}}$$

$$[J_i \, , V_j] = i\hbar \, \epsilon_{ijk} V_k \quad (i,j,k = 1,2,3,) \quad \underline{\text{vektör op.}}$$

ya da <u>regüler tensör op.</u> adını alır. (örn.) Açısal mom. op.'nün kendisi söylenir. V_i kartezyen bileşenlerini kullanmanın yerine, V_0, $V_{\pm 1}$ küresel bileşenlerini kullanmak uygundur:

$$V_0 = V_3 \qquad V_{\pm 1} = \frac{\mp 1}{\sqrt{2}} \left(V_1 \pm i V_2 \right)$$

Önceki $H_{\pm}$ (ya da $J_{\pm}$) bir vektör op.'nün küresel bileşenleri değildir; $\mp 1/\sqrt{2}$ çarpanı kadar farkeder. Buna göre tanım bağıntıları,

$$[J_k \, , V_k] = 0 \qquad (k = 0, \pm 1)$$

$$[J_{\pm} \, , V_{\mp 1}] = \sqrt{2}\, \hbar V_0 \; ; \; [J_{\pm} \, , V_0] = \sqrt{2}\, \hbar V_{\pm 1}$$

$$[J_0 \, , V_k] = k \hbar V_k$$

(Def.=) Genel olarak, <u>rankı j olan bir tensör op.'ü</u> aşağıdaki bağıntıları sağlayan $2j+1$ tane $T_k^{(j)}$ $(k = -j, \ldots +j)$ op. kümesi olarak tanımlanır:

bağıntısını $[J_0 \, , T_k^{(j)}] = k \hbar T_k^{(j)}$ sağlayan ve aşağıdaki bağıntıyı,

BS K

$$[J_\pm, T_q^{(j)}] = \sqrt{j(j+1) - q(q\pm 1)}\;\hbar\; T_{q\pm 1}^{(j)}$$

C-G katsayıları kullanarak bu daha kompakt bir şekilde yazılabilir:

$$[J_\mu, T_q^{(j)}] = \sqrt{j(j+1)}\;\langle j q 1 \mu | j q+\mu \rangle\, T_{q+\mu}^{(j)}$$

Wigner-Eckart teoremi:

$T_q^{(J)}$ bir tensör op. olsun. $T_q^{(J)}$'nin açısal mom. özdurumları arasında matris elemanı

$$\langle j' m' | T_q^{(J)} | j m \rangle = \underbrace{\langle j m J q | j' m' \rangle}_{\text{C-G katsayısı}} \underbrace{\langle j' \| T^{(J)} \| j \rangle}_{} \quad (*)$$

j', j, J ve $T_q^{(J)}$ tensör op.'nün doğasına bağlı ancak m, m' ya da q ya bağlı olmayan nicelik olup tensör op.'nün indirgenmiş matris elemanı adını alır.

j ve m'ye ek olarak, $\eta = (a_1, \ldots, a_N)$ gibi diğer kuantum sayıları varsa, o zaman indirgenmiş matris elemanı bu kuantum sayılarına bağlıdır.

$$\langle \eta' j' m' | T_q^{(J)} | \eta j m \rangle = \langle j m J q | j' m' \rangle \langle \eta' j' \| T^{(J)} \| \eta j \rangle$$

Özdeğerleri $\eta = (a_1, \ldots, a_N)$ olan $\eta^{op} \equiv (A_1, \ldots A_N)$ ek gözlenebilirleri şu özelliğe sahip olmalıdır.

BS K

$[\eta^{op}, J_i]=0$ ya da $[\eta_i^{op}, SO(3)_{J_i}]=0$

W-E

$(*)$ bağıntısı indirgenmiş matris elemanı açısından bir tanım, diğer kısmı ise bir teoremdir. İndirgenmiş matris elemanları, değerleri deneysel verilerden elde edilmesi gereken fiziksel parametrelerdir. C-G katsayıları ise grup teori kullanarak hesaplanır. W-E teoreminin bir sonucu;

$$\langle j'm'|T_q^{(J)}|jm\rangle = 0 \left\{ \text{Eğer } m' \neq q+m \text{ ya da } j' \neq J+j, J+j-1, \dots |J-j| \text{ ise} \right\}$$ $(*)$'dan

olur; bu C-G katsayılarının özelliklerinden hemen çıkar.

Örnek

Skaler bir S op. olsun.

$$\langle j'm'|S|jm\rangle = \delta_{mm'}\delta_{jj'}\langle j\|S\|j\rangle$$

S açısal mom. kuantum sayısını değiştirmez. Açısal mom. op.'nın kendisi için,

$J_3, J_\pm$

III. Bl.

$$\langle j'm'|J_q|jm\rangle = \langle jm1q|j'm'\rangle\langle j'\|J\|j\rangle$$

Tas. 2.2. C-G katsayıları.

$$\delta_{jj'}\hbar\sqrt{j(j+1)}$$

BS K

$|jm\rangle$, V_k'nın genel bir vektör op. olduğu uzayda bir baz ise, $V_k|jm\rangle$'yi bu bazda açabiliriz:

$$V_k|jm\rangle = \sum_{j'm'} |j'm'\rangle \underbrace{\langle j'm'|V_k|jm\rangle}_{\langle jm1k|j'm'\rangle\langle j'\|V\|j\rangle}$$

W-E teoremine göre, (*)

$$V_k|jm\rangle = \sum_{j'm'} |j'm'\rangle\langle jm1k|j'm'\rangle\langle j'\|V\|j\rangle$$

Eğer, CSCO, $\vec{J}^2$ ve J_3'e ek olarak N tane spektrumu $\gamma=(a_1,\dots,a_N)$ olan $A_1,\dots,A_N$ op.'ü içeriyor ise, o zaman baz $|\gamma jm\rangle$ olur ve yukarki ifade yazılır

$$V_k|\gamma jm\rangle = \sum_{\gamma' j' m'} |\gamma' j' m'\rangle\langle jm1k|j'm'\rangle\langle \bar{\bar{\gamma}}' j'\|V\|\bar{\bar{\gamma}} j\rangle$$

yazılır. Biz bundan sonra γ'yı yazmayacağız ama ne zaman ek kuantum sayılarına ihtiyaç duyulur ise indirgenmiş matris elemanının bunlara bağlı olduğunu unutmamalıyız.

(*)'a göre, (yukarı.) bu son iki ifadedeki sıfırdan farklı terimler, $j'=j+1, j, j-1$ ve $m'=m+k$ olanlardır; ($\vec{J}=1$ V_k genel bir vektör op.)

$$V_k|jm\rangle = |j-1\; m+k\rangle\langle jm1k|j-1\; m+k\rangle\langle j-1\|V\|j\rangle$$

$$+ |j\; m+k\rangle\langle jm1k|j\; m+k\rangle\langle j\|V\|j\rangle$$

$$+ |j+1\; m+k\rangle\langle jm1k|j+1\; m+k\rangle\langle j+1\|V\|j\rangle$$

BS K

Demek ki...

Bu bir vektör op. için mümkün en genel biçimdir. Buna göre, herhangi bir vektör op. üç indirgenmiş matris elemanı ile verilebilir (genelde γ, γ' ye bağlı olabilir). Gerçekte, sadece iki nicelik bir vektör op.'ü belirlemede yeterlidir. (göreceğiz!!)

Tab. 2.2 deki C–G katsayıları kullanılarak, bu son ifade açıkça yazılabilir. 0_bileşeni için;

Tab. 2.2 $m_2=0$, $j\to j-1$, $j_1\to j$ olduğu

$\langle j\, m\, 1\, 0 \mid j-1\, m\rangle$

$$V_0|jm\rangle = |j-1\, m\rangle\left(-\sqrt{\frac{(j-m)(j+m)}{j(2j+1)}}\right)\langle j-1\|V\|j\rangle$$

$$+\,|jm\rangle\left(\frac{m}{\sqrt{j(j+1)}}\right)\langle j\|V\|j\rangle$$

$$+\,|j+1\, m\rangle\left(\sqrt{\frac{(j-m+1)(j+m+1)}{(2j+1)(j+1)}}\right)\langle j+1\|V\|j\rangle$$

$$= \sqrt{(j^2-m^2)}\; c_j\, |j-1\, m\rangle - m a_j\, |jm\rangle$$

$$- \sqrt{(j+1)^2-m^2}\;\; d_j\, |j+1\, m\rangle$$

$$c_j = -\frac{\langle j-1\|V\|j\rangle}{\sqrt{j(2j+1)}} \qquad a_j = -\frac{\langle j\|V\|j\rangle}{\sqrt{j(j+1)}}$$

$$d_j = -\frac{\langle j+1\|V\|j\rangle}{\sqrt{(2j+1)(j+1)}}$$

BS K

Benzer şekilde,

$$V_{+1}\,|jm\rangle = -|j-1\;m+1\rangle\sqrt{(j-m-1)(j-m)/2}\;c_j$$
$$+\,|j\;m+1\rangle\sqrt{(j+m+1)(j-m)/2}\;a_j$$
$$-\,|j+1\;m+1\rangle\sqrt{(j+m+1)(j+m+2)/2}\;d_j$$

$$V_{-1}\,|jm\rangle = -|j-1\;m-1\rangle\sqrt{(j+m)(j+m-1)/2}\;c_j$$
$$-\,|j\;m-1\rangle\sqrt{(j-m+1)(j+m-1)/2}\;a_j$$
$$-\,|j+1\;m-1\rangle\sqrt{(j-m+1)(j-m+2)/2}\;d_j$$

Bu ifadeler, bir vektör operatör, herhangi j parametresinin üç tane c_j, a_j, d_j fonk. u ile tamamen belirlendiğini söyler. Gerçekte şöyle iki fonk. gereklidir: $|jm\rangle$ bazını öyle seçmek mümkündür ki,

$$\frac{\langle j+1\|V\|j\rangle}{\sqrt{(2j+1)\cancel{(j+1)}}} = \frac{\langle j\|V\|j+1\rangle}{\sqrt{\cancel{(j+1)}(2j+3)}}$$

$$d_j = c_{j+1}$$

olur, yani; $\sqrt{2j+3}\,\langle j+1\|V\|j\rangle = \sqrt{2j+1}\,\langle j\|V\|j+1\rangle$'dir.

I. $|h_m^j\rangle = \omega(j)\,|jm\rangle$ yeni bir baz tanımlayalım.
komplex.

Açısal mom. op.'leri bu bazda, $|jm\rangle$ de olduğu gibi aynı biçime sahiptir. Genelde $|\omega(j)|=1$ olmadıkça $|h_m^j\rangle$ normalize değildir. Bu bazda:

$$V_0 |h_m^j\rangle = \sqrt{j^2-m^2}\, c_j \frac{\omega(j)}{\omega(j-1)} |h_m^{j-1}\rangle - m a_j |h_m^j\rangle$$
$$- \sqrt{(j+1)^2-m^2}\, d_j \frac{\omega(j)}{\omega(j+1)} |h_m^{j+1}\rangle$$

$A_j = a_j$ tanımlayalım ve $\omega(j)$'yi öyle seçmek isteyelim ki

$$c_j \frac{\omega(j)}{\omega(j-1)} = C_j \quad \text{ve} \quad d_j \frac{\omega(j)}{\omega(j+1)} = D_j = C_{j+1}$$

olsun. Ancak, $\left(\Rightarrow\right)$

$$d_{j-1} \frac{\omega(j-1)}{\omega(j)} = c_j \frac{\omega(j)}{\omega(j-1)}$$

$$c_j \frac{\omega(j)}{\omega(j-1)} = \frac{\omega(j-1)}{\omega(j)}\, d_{j-1}$$

ise bu mümkün olacaktır. yani

$$\omega^2(j) = \omega^2(j-1)\, \frac{d_{j-1}}{c_j} \quad (*)$$

Varsayalım ki, j_0 uzaydaki j'nin en küçük değeri olsun, yani $\langle j_0-1 \| V \| j_0 \rangle = 0$. O zaman, eğer (*)

$$\omega(j) = \sqrt{\omega^2(j_0)\, \frac{d_{j_0}}{c_{j_0+1}}\, \frac{d_{j_0+1}}{c_{j_0+2}} \cdots \frac{d_{j-1}}{c_j}}$$

seçerek,

$$V_0 |h_m^j\rangle = \sqrt{j^2-m^2}\, C_j |h_m^{j-1}\rangle - m A_j |h_m^j\rangle$$
$$- \sqrt{(j+1)^2-m^2}\, C_{j+1} |h_m^{j+1}\rangle \text{ dır.} \quad].$$

BS K

V. 4. PARİTE

P parite işlemi (ki bu uzay terslenmesi olarak da adlandırılır) ayna görüntüsü alma işlemidir. Bir fiziksel sist.'in konumu X_i, mom.'u p_i ise ayna görüntüsü,

$$x_i^R = -x_i$$

$$p_i^R = -p_i$$

Bu P dönüşümünü fiziksel durumlar uzayında bir lineer operatör ile temsil edebiliriz: U_p : parite op.'ü şu bağıntıları sağlaması gerekir.

(1) $$U_p Q_i U_p^{-1} = -Q_i \qquad i = 1, 2, 3.$$

(2) $$U_p P_i U_p^{-1} = -P_i$$

(3) $$U_p J_i U_p^{-1} = +J_i \qquad (\text{pseudovektör})$$

$$\left.\begin{array}{l} U_p U_p^{+} = I \\ U_p^{2} = I \end{array}\right\} \Rightarrow \left.\begin{array}{l} U_p^{+} = U_p^{-1} \\ U_p^{-1} = U_p \end{array}\right\} U_p^{+} = U_p$$

$\therefore$ U_p üniter ve hermitsel bir lineer op.'dür. $\vec{J} = \vec{r} \times \vec{p}$

(3) bağıntısı (1) ve (2) nin bir doğal sonucudur. Dolayısı ile U_p'yi kullanarak tensör op.'leri sınıflarız.

$$U_p T_q^{(k)} U_p^{-1} = (-1)^k T_q^{(k)} \Rightarrow \text{has tensör. op.}$$

$$U_p T_q^{(k)} U_p^{-1} = -(-1)^k T_q^{(k)} \Rightarrow \text{psödotensör op.}$$

Q_i, P_i has vektör op.'ler

J_i psödovektör op.

$U_p H U_p^{-1} = H$ has skaler op. (paritenin korunmaması ... durumunda sağlanmayabilir)

Yukarıki varsayımların gerekçeleri:

Durumlar uzayı $\mathcal{H}$'de bir vektör ψ olsun ve

$$\psi^R = U_p \psi$$

olacak şekilde bir vektör tanımlayalım. Temsilci vektörün ψ olduğu saf fiziksel durumu yani Λ_ψ'yi gözönüne alalım: bu ψ tarafından gerilen tek boyutlu uzayda projektördür. ψ^R tarafından gerilen uzaydaki projektörü Λ_ψ^R ile gösterelim. ve varsayım olarak da bu da saf bir durum olsun; ψ^R, uzay yansıması ile Λ_ψ den elde edilen durumu gösteren vektörlerden biridir. Böylece Λ_ψ^R, Λ_ψ'nin uzay yansımış durumu'dur. ve bu ikisi

$$\Lambda_\psi^R = |\psi^R\rangle\langle\psi^R| = U_p \underbrace{|\psi\rangle\langle\psi|}_{\Lambda_\psi} U_p^+$$
$$= U_p \Lambda_\psi U_p^+$$

ile bağlıdır. Bunun genellemesi olarak, herhangi bir W için

$$W^R = U_p W U_p^+$$

yazılır; burada W^R, W'nin uzay yansıması ile elde edilmiş durumu temsil edecektir.

W normalize ise $(\mathrm{Tr}\, W = 1)$, W^R de normalize'dir $(\mathrm{Tr}\, W^R = 1)$;

Ya da daha genel olarak,

$$\mathrm{Tr}\, W^R = \mathrm{Tr}\, W \qquad U_p^+ U_p = \mathbb{I}$$

yazılır; yani, uzay yansıması olasılığı değiştirilmeyecektir.
Böylece,

$$\mathrm{Tr}\, W = \mathrm{Tr}\left(U_p W U_p^+\right) = \mathrm{Tr}\left(W \underbrace{U_p^+ U_p}_{I}\right) = \mathrm{Tr}\left(W^R\right)$$

Bir cismin ayna yansıması iki kere alınırsa, aynı cisim tekrar elde edilir. Bu nedenle,

$$W = (W^R)^R = U_p W^R U_p^+ = \underbrace{U_p U_p}_{1} W \underbrace{U_p^+ U_p}_{1} = W$$

Bir Q.M.'sel sist.'in konum op.'nün W durumundaki beklenen değeri $\bar{x}_i$ olsun,

$$\bar{x}_i = \mathrm{Tr}\,(Q_i W)$$

uzay yansıması ile W den elde edilmiş $W^R = U_p W U_p^+$ durumundaki beklenen değeri $\bar{x}_i^R$ olsun:

$$\bar{x}_i^R = \mathrm{Tr}\,(Q_i W^R)$$

O zaman, uzay terslenmesinin fiziksel anlamı nedeni ile

$$\boxed{\bar{x}_i^R = -\bar{x}_i}$$

olur, yani uzay yansıması $\bar{x}_i$'nin değerini $-\bar{x}_i$'ye değiştirir.
Böylece,

$$\mathrm{Tr}\,(Q_i W) = -\mathrm{Tr}\,(Q_i W^R) = -\mathrm{Tr}\,(Q_i U_p W U_p^+)$$

$$= -\mathrm{Tr}\,(U_p^+ Q_i U_p W)$$

$U_p^+ Q_i U_p = -Q_i$ ile bu sağlanır.

$\mathcal{U}_p$'nin özelliklerini açısal mom. özdurumlarında inceleyeceğiz.

Rotatör uzayı : $\mathcal{R} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \oplus \mathcal{R}^{\ell}$

(i) $\vec{J}^2$, J_3 sıradeğiştiren gözlenebilir sist. i $\mathcal{U}_p$ ile de sıra değiştirir, böylece, CSCO,

(ii) $\vec{J}^2$, J_3 ve $\mathcal{U}_p$ CSCO, sıradeğiştiren gözlenebilirler sistemidir. Bu iki durumu ayırt etmek zorundayız:

(a) (i) bir CSCO'dur, **(b)** (ii) bir CSCO'dur. ve bu durum parite ikilenmesi (parity doubling) olarak adlandırılır.

(a) (i), CSCO ise $|j j_3\rangle$ bir baz sistemidir ve

$$\mathcal{U}_p \, |j j_3\rangle = \pi \, |j j_3\rangle$$

$\mathcal{U}_p$'nin özvektörüdür. $\pi = \pi(j, j_3)$ özdeğeri ($|j j_3\rangle$ durumunun paritesi denir) genelde j, j_3'lere bağlıdır. Şimdi

$$\pi(j, j_3) = (-1)^j \, \eta$$

olduğunu göstereceğiz; burada η "iç parite" 'dir. ve j ile j_3 den bağımsızdır ve $|\eta| = 1$ 'dir.

2.

$$\mathcal{U}_p J_\pm |j j_3\rangle = \mathcal{U}_p \sqrt{j(j+1) - j_3(j_3 \pm 1)} \, |j, j_3 \pm 1\rangle$$

$$= \pi(j, j_3 \pm 1) \left[j(j+1) - j_3(j_3 \pm 1) \right]^{1/2} |j, j_3 \pm 1\rangle$$

BS K

Bu son ifadenin sol yanı,

$$J_\pm U_p |j j_3\rangle = \Pi(j, j_3)\, J_\pm |j j_3\rangle$$

$$= \Pi(j, j_3)\left[j(j+1) - j_3(j_3 \pm 1)\right]^{1/2} |j, j_3 \pm 1\rangle \text{ olur.}$$

$$\Rightarrow \quad \Pi(j, j_3) = \Pi(j, j_3 \pm 1)$$

yani Π, j_3'den bağımsızdır. Π'nin j'ye bağımlılığını bulmak için, Q_i'nin vektör op. özelliğini ve

$$\underbrace{U_p Q_i U_p^{-1} = -Q_i}$$

yi kullanırız.

$$Q_{k=\pm 1} = \frac{Q_1 \pm i Q_2}{\mp \sqrt{2}}, \quad Q_{k=0} = Q_3$$

$$Q_k |j j_3\rangle = |j-1\, j_3+k\rangle\langle j j_3 1 k | j-1\, j_3+k\rangle\langle j-1 \| Q \| j\rangle$$

$$+ |j j_3+k\rangle\langle j j_3 1 k | j j_3+k\rangle\langle j \| Q \| j\rangle$$

$$+ |j+1\, j_3+k\rangle\langle j j_3 1 k | j+1\, j_3+k\rangle\langle j+1 \| Q \| j\rangle \quad (*)$$

U_p'yi her iki yana uygular isek

$$Q_k U_p |j j_3\rangle = \Pi(j)\, Q_k |j j_3\rangle = -U_p Q_k |j j_3\rangle$$

$$= -|j-1\, j_3+q\rangle \pi(j-1) \langle j j_3 1 q | j-1\, j_3+q\rangle \langle j-1 \| Q \| j\rangle$$

$$- |j\, j_3+q\rangle \pi(j) \langle j j_3 1 q | j\, j_3+q\rangle \langle j \| Q \| j\rangle$$

$$- |j+1\, j_3+q\rangle \pi(j+1) \langle j j_3 1 q | j+1\, j_3+q\rangle \langle j+1 \| Q \| j\rangle$$

$$= \pi(j)\, Q_q |j j_3\rangle$$

$\langle j \| Q \| j\rangle = 0$ ⊛ ⊛ kıyasla!

$$\langle j-1 \| Q \| j\rangle \neq 0 \Rightarrow \pi(j-1) = -\pi(j)$$

$$\langle j+1 \| Q \| j\rangle \neq 0 \Rightarrow \pi(j+1) = -\pi(j)$$

$d_j = c_{j+1}$ 'den (2.17')

$$(2j+3)\langle j+1 \| Q \| j\rangle = \sqrt{2j+1}\, \langle j \| Q \| j+1\rangle$$

Böylece her j için $\langle j \| Q \| j+1\rangle = 0$ ise, bu ve ⊛ demektir ki Q_q sıfır operatördür. Böylece j'nin bazı değerleri için $\langle j \| Q \| j+1\rangle \neq 0$; bütün böyle değerler için

$$\pi(j) = -\pi(j+1)$$

elde ederiz. Buradan,

$$\pi(j) = (-1)^j\, \eta \qquad \eta = \text{sbt.}$$

bulunur.

<u>η'nın belirlenmesi:</u>

$$U_P U_P |j j_3\rangle = \pi(j)\pi(j) |j j_3\rangle = I\, |j j_3\rangle$$

BS K

ve $U_p U_p^{\dagger} = I$ 'dır,

$$\langle j j_3 | I | j j_3 \rangle = \langle j j_3 | U_p^{\dagger} U_p | j j_3 \rangle$$

$$= \bar{\pi}(j) \pi(j) \langle j j_3 | j j_3 \rangle$$

böylece, $\pi(j)\pi(j) = 1$ $\bar{\pi}(j)\pi(j) = 1$ bulunur. sonuç olarak

reel! $\pi(j) = \bar{\pi}(j)$, ve böylece $\pi(j)^2 = 1$, yani $\underline{\pi(j)}$ $+1$ veya -1 'dir. ∃ reel.

Böylece, $\eta = +1$ veya -1 'dir. Seçim kuralı $\Delta j = \pm 1$.
Bu sonuç Q_η 'nın has bir vektör op. olmasının sonucudur.

$$[J_k, Q_\ell] = i\,\epsilon_{k\ell m} Q_m \quad (k\ell m = 1,2,3)$$

den $\Delta j = \pm 1, 0$ çıkar. $\langle j \| Q \| j \rangle = 0$ dan yani $U_p Q_i U_p^{-1} = -Q_i$ özelliği ve parite ihlalemesi olmadığı varsayımından, $\Delta j \neq 0$ çıkar ve $\Delta j = \pm 1$.

(b) (ii) CSCO ise, π paritesi baz vektörleri için ek bir indistir:

$$U_p | j j_3 \pi \rangle = \pi \, | j j_3 \pi \rangle$$

? Soru: U_p 'nin spektrumu nedir? yani π 'nin mümkün değerleri nedir?

$$\pi(j)\pi(j) = 1 \quad \bar{\pi}(j)\pi(j) = 1 \Rightarrow \pi = +1 \text{ veya } \pi = -1$$

Buna göre,

BS K

$$Q_q\,|j j_3 \pi\rangle = |j-1\; j_3+q, -\pi\rangle \langle j j_3 1 q\,|\,j-1\; j_3+q\rangle \langle j-1, -\pi \| Q \| j\pi\rangle$$

$$+\, |j\; j_3+q, -\pi\rangle \langle j j_3 1 q\,|\,j\; j_3+q\rangle \langle j, -\pi \| Q \| j\pi\rangle$$

$$+\, |j+1\; j_3+q, -\pi\rangle \langle j j_3 1 q\,|\,j+1\; j_3+q\rangle \langle j+1, -\pi \| Q \| j\pi\rangle$$

burada Q_q'nın vektör op. özelliği ve $\pi = \pm 1$ gözönüne alındı.

(a) durumunun tersine, $\pi = \pm 1$ ile $U_p Q_i U_p^{-1} = -Q_i$ ifadesi $\langle j'\pi' \| Q \| j\pi\rangle$ indirgenmiş matris elemanları ve pariteler üzerinde koşullara yol açmaz. Sonuç olarak j, j_3'ün her seçimi için

$$|j j_3\, \pi = +1\rangle \quad \text{ve} \quad |j j_3, \pi = -1\rangle$$

gibi iki vektör vardır. Bu nedenle (b) durumu parite-ikilemesi olarak adlandırılır. (a) durumunun benzerini elde etmek için durumlar π'den çok "intrinsic parite η" ile indislenmektedir.

$$U_p\,|j j_3 \eta\rangle = \eta\,(-1)^j\,|j j_3 \eta\rangle \qquad \eta = \pm 1$$

j açısal mom. ve η IP'li bir durumdan $\pi(j)$ paritesi

$$\pi(j) = (-1)^j\,\eta$$

ile verilir. Şimdi seçim kuralı;

hareket gözcütler

$$j \to j+1,\; j,\; j-1$$

$$\pi \to -\pi$$

BS K

Eğer parite bağımsız bir gözlenebilir olsa idi [(b) durumu], $|j\, j_3\, \pi=+1\rangle$ ve $|j\, j_3\, \pi=-1\rangle$ e göre, j'nin her değeri için iki açısal mom. uzayımız vardır.

$$\mathcal{R}^{j+} \quad \text{ve} \quad \mathcal{R}^{j-}$$

Q_κ, j^{π}'nin verilen bir değerinden $(j+1)^{-\pi}$, $j^{-\pi}$ ve $(j-1)^{-\pi}$ ye dönüştürür iken bütün açısal mom. uzayları elde edilir ki şu koşullar dışında:

$\langle j_0-1\,\eta \| Q \| j_0\,\eta \rangle = 0$ olacak şekilde bir j_0 yok ise

$\langle j_1+1\,\eta \| Q \| j_1\,\eta \rangle = 0$ " " j_1 " .

Yani, j_0, Q_κ'nın tekrarlı uygulaması ile varılan j'nin en küçük ve j_1'in en büyük değeridir. O zaman bütün durumların uzayı aşağıdaki gibi yazılabilir:

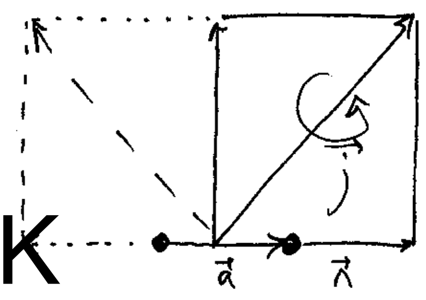
$$\mathcal{R} = \sum_{j=j_0}^{j_1} \oplus \mathcal{R}^{j}_{\eta=+1} \oplus \sum_{j=j_0}^{j_1} \mathcal{R}^{j}_{\eta=-1}$$

$$= \mathcal{R}_{\eta=+1} \oplus \mathcal{R}_{\eta=-1}$$

Fiziksel durumlar uzayı böyle olan fiziksel sistemler doğada var mıdır?

Genelde, $\longrightarrow$ Q.M.'sel bir rotatör'den ziyade

İki atomlu molekül $\longrightarrow$ Q.M. sel simetrik topaç'dır.



$\vec{j}$ artık $\perp$ $\vec{a}$ değil $\longrightarrow$ $\vec{j}\cdot\vec{a} = \text{sbt}$ de var.

$$\vec{a} = \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}$$

Klasik relativistik olmayan simetrik topaç :

I_A : $\vec{a}$ doğrultusundaki simetri. ekseni etrafındaki eylemsizlik mom.'i.

I_B : $\vec{a}$ 'ya dik eksen etrafındaki eylemsizlik mom.'i.

$\vec{a}$, $\vec{\omega}$ açısal hızı ile dönerken $\dot{\vec{a}} = \vec{\omega} \times \vec{a}$ 'dır, buradan

$$\vec{a} \times \dot{\vec{a}} = \vec{a} \times (\vec{\omega} \times \vec{a}) = \vec{a}^2 \vec{\omega} - (\vec{a} \cdot \vec{\omega}) \vec{a}$$

$$\vec{a}^2 = 1 \, , \quad \vec{\omega} = (\vec{\omega} \cdot \vec{a}) \vec{a} + \vec{a} \times \dot{\vec{a}} \quad \text{olur.}$$

$\vec{\omega}$, $\vec{a}$ doğrultusunda ve $\vec{a}$ 'ya dik doğrultuda bileşene sahiptir.

Açısal mom.

$$\vec{J} = \underset{\sim}{I} \vec{\omega}$$ eylemsizlik tansörü (artık !)

$$= I_A (\vec{\omega} \cdot \vec{a}) \vec{a} + I_B \underbrace{\vec{a} \times \dot{\vec{a}}}_{\vec{\omega} - (\vec{a} \cdot \vec{\omega}) \vec{a}}$$ yazılabilir. $\vec{\omega} - (\vec{a} \cdot \vec{\omega}) \vec{a}$ tekrar.

$$= I_B \vec{\omega} + (I_A - I_B)(\vec{\omega} \cdot \vec{a}) \vec{a}$$ bulunur

$$\vec{a} \cdot \vec{J} = \vec{a} \cdot \underset{\sim}{I} \cdot \vec{\omega} = I_A \, \vec{a} \cdot \vec{\omega} \quad \text{ve} \quad \vec{a} = \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}$$

$$\vec{\omega} = \frac{1}{I_B} \vec{J} - \frac{I_A - I_B}{I_B I_A} \frac{1}{\vec{x}^2} (\vec{x} \cdot \vec{J}) \vec{x}$$

açısal hızı $\vec{\omega}$, açısal mom.'u $\vec{J}$ olan topaç'ın enerjisi:

$$E = \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \vec{J} = \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \underset{\sim}{I} \cdot \vec{\omega}$$

$$= \frac{1}{2 I_B} \left(\vec{J}^2 - \frac{I_A - I_B}{I_A} \frac{1}{x^2} (\vec{x} \cdot \vec{J})^2 \right)$$

BS K

Q.M. sel sistem için,

$$\partial_i \to J_i$$
$$x_i \to Q_i$$

Enerji operatörü,

$$H = \frac{1}{2I_B}\left(\vec{J}^2 - \frac{I_A - I_B}{I_A}\frac{1}{Q^2}(\vec{Q}\cdot\vec{J})^2\right)$$

Q_i ve J_i'lerin sağladığı komütasyon bağıntıları;

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k \quad , [J_i, Q_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}Q_k$$
$$[Q_i, Q_j] = 0$$

$\vec{Q}^2$ ve $\vec{Q}\cdot\vec{J}$ Casimir operatörlerinin özdeğerleri

$$\vec{Q}^2 = Q_iQ_i = x^2$$
$$\vec{Q}\cdot\vec{J} = Q_iJ_i = j_0 x$$

ile verilirler. Yukarıdaki komütasyon bağıntılarını sağlayan J_i, Q_i ve U_ρ'nun operatörler olarak etkidiği indirgenemez temsil uzayları simetrik topacın fiziksel durumlar uzayları olmaya adaydır. Bu uzaylarda x^2 ve $j_0 x$'ler sbt.'tirler. ve $\vec{j}\cdot\vec{a}$ = sbt olduğu simetrik topaçları tasvir etmelidirler.

BS K

Q_j'nin matris elemanları,

$$\langle j\eta' \| Q \| j\eta \rangle = - \frac{j_0 x}{[j(j+1)]^{1/2}} \delta_{\eta\eta'}$$

$$\langle j-1\,\eta' \| Q \| j\eta \rangle = -i \left[\frac{(j^2 - j_0^2)}{j(2j-1)} \right]^{1/2} \delta_{\eta\eta'}$$

$$\langle j+1\,\eta' \| Q \| j\eta \rangle = -i \left[\frac{((j+1)^2 - j_0^2) x^2}{(j+1)(2j+3)} \right]^{1/2} \delta_{\eta\eta'}$$

Bu indirgenmiş matris elemanları ve J_4'nın matris elemanları, parite ile genişletilmiş üç boyutlu Euclidean grubun $\mathcal{E}(E_3)$ cebrinin $\mathcal{R}$'deki bir temsilini oluşturur. $j_0 = 0$ olduğu zaman $\langle j \| Q \| j \rangle = 0$ ve uzay $\mathcal{R} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \oplus \mathcal{R}^{\ell}$ ile verilir. Son denklem j'nin keyfi büyük olabileceğini gösterir, yani $j_1 = \infty$.

$\mathcal{R}$'nin $|j j_3 \eta\rangle$ bazında H operatörünün matris elemanları, yani, simetrik topacın enerji spektrumu

$$\text{Spektrum } H = \left\{ \frac{1}{2I_B} \left(j(j+1) - \frac{I_A - I_B}{I_A} \Lambda^2 \right) \right\}$$

$$j = \Lambda, \Lambda+1, \Lambda+2, \ldots$$

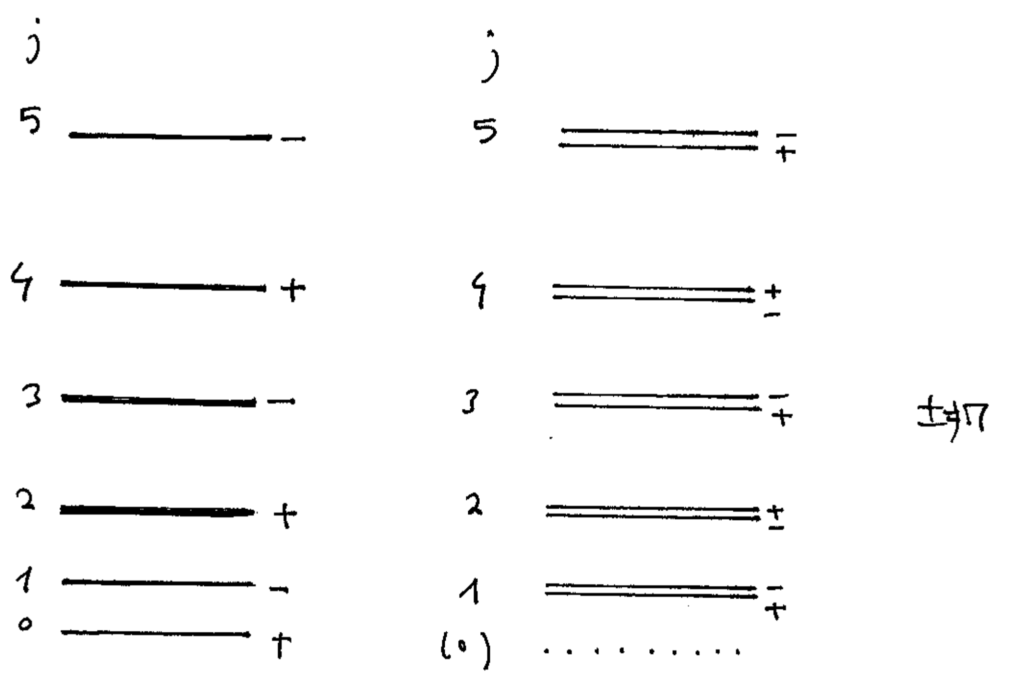
burada $\Lambda = j_0$ molekül spektroskopide kullanılır.

Klasik olarak açıktır ki, toplam açısal mom.'un j değeri daima $\vec{Q}$ doğrultusundaki Λ bileşeninden daha büyük olmalıdır. $\vec{Q}$ doğrultusu boyunca bileşen, $\pm\Lambda = j_0 x / |x|$ iki değerini alabilir.

$$Q_i J_i u_p = -u_p Q_i J_i$$

olanğundan, parite durumları $Q_i J_i$ operatörünün özdurumları değildir. Böylece parite özdurumlarından, molekülün molekül ekseni boyunca açısal mom. bileşeni için kesin değerleri yoktur.

Yukarki sonuçtan, simetrik topacın enerji düzeyleri ile basit rotatörün enerji düzeyleri aynıdır, ancak $j < \Lambda$ düzeyleri yoktur. Her enerji düzeyi $(2j+1)$ katlı dejenereliğe ek olarak $\eta = \pm 1$ den dolayı iki katlı dejenerelik vardır.



(rotatör) simetrik topaç $\Lambda = 1$

Seçim kuralı $\Delta j = \pm\ , 0$.

Bu tür moleküller için R ve P dallanma ek olarak $\Delta j = 0$ olan geçişlerde yer alır. Bu çizgiler serisi,

$$\nu_Q = \nu_0 + (B_{n'} - B_{n''}) j + (B_{n'} - B_{n''}) j^2 .$$

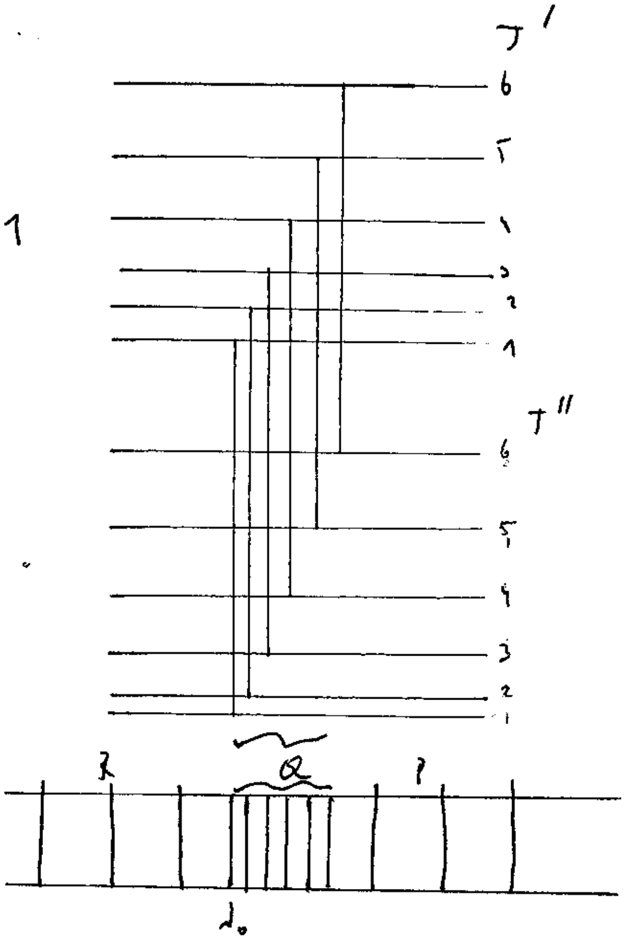
BS K

hurada ν_0

$$\nu_0 = \nu_0^{osc.} - \frac{I_A - I_B}{I_A} \left(B_{n'} \Lambda_{(n')}^2 - B_{n''} \Lambda_{(n'')}^2 \right)$$

Szt.

$\Lambda = 1$



spektrogram

BS K