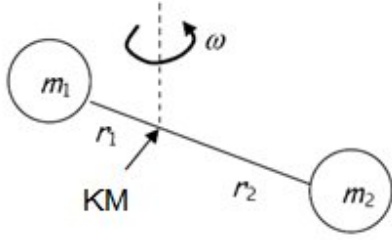


## BÖLÜM 17

### RİJİT ROTOR

Birbirinden  $R$  sabit mesafede bulunan iki parçacığın dönmesini düşünelim.



$$r_1 + r_2 \equiv R$$

$$m_1 r_1 = m_2 r_2 \quad \text{kütle merkezi (KM)}$$

Bu iki parçacık, bir elektron ve proton (bu durumda bir hidrojen atomunu ele alıyoruz) veya iki çekirdek (bu durumda diatomik bir molekülü ele alıyoruz) olabilir. Klasik olarak dönme hareketi yapan bu cisimlerin her biri  $L_i = I_i \omega$  açısal momentuma sahiptir. Burada  $\omega$ , açısal hız ve  $I_i$ , parçacığın  $I_i = m r_i^2$  eşitliği ile verilen eylemsizlik momentidir. Kütle merkezinde (KM) iki parçacığın aynı açısal frekansa sahip olduğu dikkate alınmalıdır. Parçacıklar için klasik Hamiltonyen aşağıdaki gibi verilir:

$$H = \frac{L_1^2}{2I_1} + \frac{L_2^2}{2I_2} = \frac{1}{2} m_1 r_1^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m_2 r_2^2 \omega^2 = \frac{1}{2} (m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) \omega^2$$

Dönmekte olan iki parçacık şeklinde düşünmek yerine parçacıklardan birini bir merkez etrafında dönen **etkin parçacık** şeklinde düşünebilsek ne güzel olurdu! Etkin eylemsizlik momentini aşağıdaki gibi tanımlarsak bunu yapabiliriz:

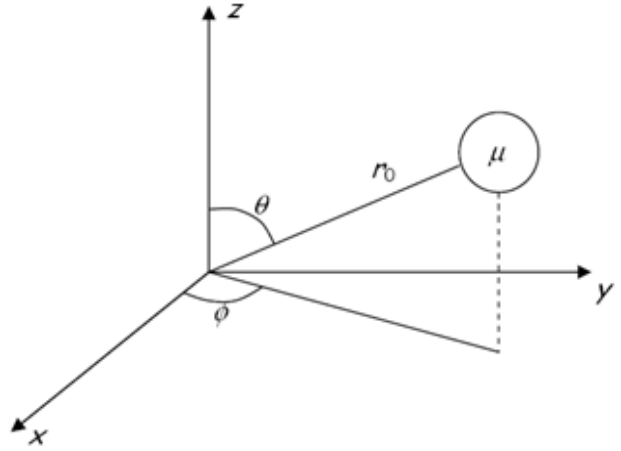
Burada ikinci eşitlikte, iki parçacıklı bu sistemin, merkezden  $R$  mesafesinde dönme hareketi yapan  $\mu$  **indirgenmiş kütle**ye sahip tek bir parçacık olarak davrandığını kabul ediyoruz. Böylece

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu r_0^2 \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

elde edilir.

$$H = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I}$$

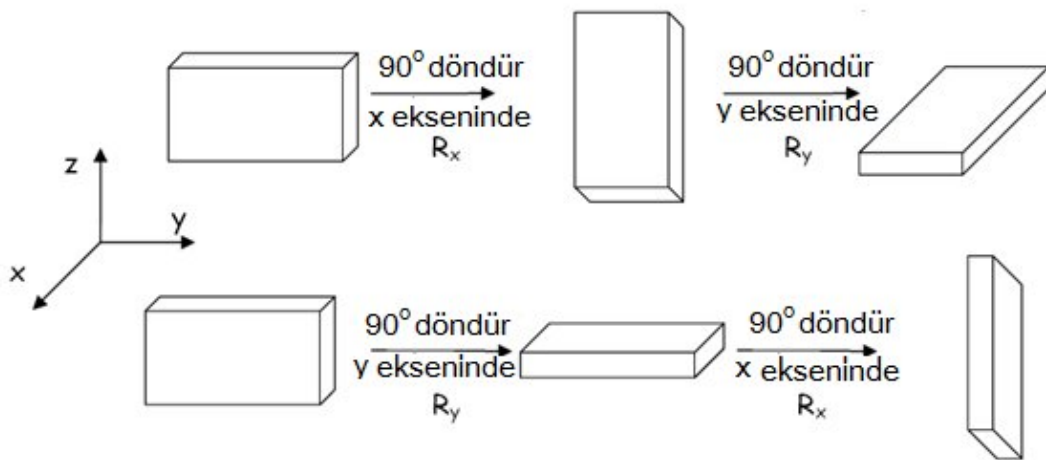
Burada ikinci eşitlikte, bu etkin parçacık için açısal momentum  $L = I\omega$  olarak tanımlanır. Problem şimdi tamamen,  $\mu$  kütleyle sahip tek nesneli probleme indirgenmiş oldu.



Benzer şekilde, birbirine göre sabit konumlarda tutulan bir nesne grubuna

sahipsek – yani atomlar bir kristal içinde bulunuyorsa – ve tüm tertibatı benzer bir metotla verilen bir  $r$  ekseninde,  $\omega$  açısal hızla döndürürsek, nesnelerin tamamının toplam dönmesini,  $I_i$  eylemsizlik momentine sahip tek bir “etkin” nesnenin dönmesine indirgeyebiliriz. Bu şekilde, münferit olarak her bir elektron ve kuramsal zerreciğin hareketini düşünmeye gerek kalmadan bir molekülün (veya bir kitap veya bir kalem) dönme hareketini konuşabiliriz.

Ancak klasik sistemde dahi olsa, farklı eksenlerdeki dönmelerin, birbiriyle komute edilemeyecekleri gerçeğini bilmek önemlidir. Örneğin;



Sonuç olarak, **dönme hareketlerinin hangi sırayla yapıldığına bağlı olarak farklı cevaplar** bulunabilir! Kuantum mekaniğindeki tecrübelerimize göre x (y) etrafında dönen bir operatör  $\hat{R}_x$  ( $\hat{R}_y$ ) tanımlayabiliriz. Sonra yukarıdaki deneyimi özet şeklinde  $\hat{R}_x \hat{R}_y \neq \hat{R}_y \hat{R}_x$  yazabiliriz. Bu oldukça temel görünen sonuçla, kuantum mekaniğinde hiçbir şey yapılamaz. Sonuç olarak, yukarıda belirtilen kutuda kuantum mekaniği ile ilgili hiçbir şey yokken geometri ile yapılabilecek her şey vardır. Böylece, doğrusal momentum operatörleri komute olurken ( $\hat{p}_x \hat{p}_y = \hat{p}_y \hat{p}_x$ ) aynı durum açısal momentumlar için doğru değildir çünkü açısal momentumlarda ( $\hat{L}_x \hat{L}_y \neq \hat{L}_y \hat{L}_x$ ) dönme hareketleri yer alır.

Klasik olarak açısal momentum  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  ile verilir. Bunun anlamı, karşılık gelen kuantum operatörü  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$  olmalıdır. Bu vektör operatörü, her biri x, y ve z şeklinde üç kartezyen eksen etrafında açısal momentum operatörleri şeklinde tanımlanan üç bileşene sahiptir:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \times (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} \\ &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)\mathbf{i} + (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)\mathbf{j} + (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)\mathbf{k} \\ \therefore \quad &\boxed{\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x}\end{aligned}$$

Sonuçta ortaya, açısal momentum operatörlerin komute olmadığı çıkıyor. Örneğin;

$$\begin{aligned}+ \hat{L}_x \hat{L}_y &= +(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) = +\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \cancel{\hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x} - \cancel{\hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z} + \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z \\ - \hat{L}_y \hat{L}_x &= -(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = -\hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \cancel{\hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y} + \cancel{\hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z} - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y \\ \Rightarrow [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{y}\hat{p}_x[\hat{p}_z, \hat{z}] + \hat{x}\hat{p}_y[\hat{z}, \hat{p}_z] \\ &= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y = i\hbar\hat{L}_z \therefore\end{aligned}$$

Şimdi,  $[\hat{L}_y, \hat{L}_z]$  ve  $[\hat{L}_z, \hat{L}_x]$  arasında bir ilişki kurmaya başlayabiliriz. Ancak **cevabımızın, bir döngüsel permütasyon ( $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$ ) için sabit olması gerektiğini** hatırlayalım.

Bu durum, x, y ve z eksenlerini adlandırmak tamamen keyfi olduğunda geçerli durum olmalıdır: Eksenleri  $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$  olacak şekilde tanımlarsak bütün matematik, harfler karışmış olarak aynen olduğu gibi işleyecektir. Dikkatli olmamız gereken tek şey, eksenleri tekrar tanımlamanın sağ tarafı veya koordinatların kirallığını koruduğudur. İki eksenin kendi arasında basit değişimi (örn.  $x \rightarrow y$ ), koordinatların tersine dönmeye ve yanlış cevap bulunmasına (deneyip görebilirsiniz) neden olurken döngüsel permütasyonlar, taraf olunan yönü korur. Bu döngüsel değişmezlik, yapmamız gereken işi 3 kat azalttığından çok önemlidir ancak doğru olarak uygulamak için dikkatli olmalıyız. Bundan sonra böylece z eksenini için bir sonuca ulaşıp döngüsel permütasyonları kullanarak x ve y için bir sonuca varabiliriz. Bu durumda aşağıdaki sonuçları yazabiliriz:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z \\ \xrightarrow[\substack{x \rightarrow y \\ y \rightarrow z \\ z \rightarrow x}]{\quad} [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\ \xrightarrow[\substack{x \rightarrow y \\ y \rightarrow z \\ z \rightarrow x}]{\quad} [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y \end{aligned}$$

Açısal momentum operatörleri komute olmadığında ortak özfonksiyonları paylaşmazlar. Böylece önemli bir sonuca ulaşmış oluyoruz: **Bir sistem, x, y ve z eksenleri etrafında çok iyi tanımlanmış açısal momentum değerlerine aynı anda sahip olamaz.** Bu konudaki en iyimser beklenti, bir eksen etrafında çok iyi tanımlanmış bir açısal momentumdur.

Rijit rotor problemlerine tekrar dönecek olursak Hamiltonyen öz durumlarıyla ilgileniyoruz.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I} = \frac{1}{2I} (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2).$$

x, y ve z açısal momentum operatörleri komute olmadığı halde  $\hat{\mathbf{L}}^2$  ile komute olduklarını göstermek oldukça kolaydır:

$$\begin{aligned} [L_z, \mathbf{L}^2] &= [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] + [L_z, L_z^2] \\ &= [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] = [L_z, L_x] L_x + L_x [L_z, L_x] + [L_z, L_y] L_y + L_y [L_z, L_y] \\ &= (-i\hbar L_y) L_x + L_x (i\hbar L_y) + (i\hbar L_x) L_y + L_y (-i\hbar L_x) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Bu noktada,  $[\hat{L}_y,] = 0$  ve  $[\hat{L}_x,]$  olduğunu göstermek için döngüsel permütasyonları kullanırız.  $\hat{L}_z$  ile komute olduğundan iki operatör ortak bir özfonksiyonu paylaşır dolayısıyla z bileşeni iyi tanımlanmış açısal momentumu ( $m$  olarak adlandırılır) ve iyi tanımlanmış toplam açısal momentumu ( $l$  olarak adlandırılır) olan bir parçacıktan bahsederiz. Rijit rotor Hamiltonyenin özfonksiyonlarını araştırdığımızda  $l$  ve  $m$  olan iki kuantum sayısı ile dizinlenmiş durumları araştırırız. Bu mantıklı çünkü üç kuantum sayısına sahip 3B sistemle başladık ancak, şimdi bir kürenin iki boyutlu yüzeyindeki hareketle sınırlandırıldık. Bu tür bir 2B sistemde iki kuantum sayısı bekleriz. Yukarıdaki analize göre açısal momentum öz durumları  $Y_l^m$  ile gösteririz. Burada  $m, \hat{L}_z$ 'nin özdeğeri ile ve  $l, \hat{L}^2$  ile ilgilidir.

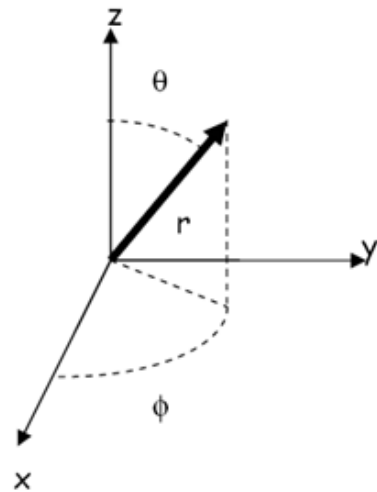
Şimdi rijit rotorun özdeğer ( $E_l$ ) ve öz durumları ( $Y_l^m$ ) için çözümü oldukça zor bir problemle uğraşalım. Hamiltonyen  $\hat{L}^2$  ile orantılı olduğundan, rijit rotor Hamiltonyen özdeğerlerinin, sadece  $l$ 'ye bağlı olduğuna dikkat edelim. Bu diferansiyel denklemi tamamen çözmek için küresel polar koordinatlarla çalışmak en uygun yoldur. Pek çok matematik ders kitabında  $\phi$ , z eksenine ile ilgili bir açıyı tanımlarken kuantum mekaniği ders kitaplarının neredeyse tamamında açıyı tanımlamak üzere  $\theta$  kullanılır. Biz ikinci tanımı kullanacağız ancak diğer kaynaklardan alınan herhangi bir eşitlikte aynı tanımın kullanıldığı konusunda dikkatli olalım. Burada küresel polar koordinatlarla ilgili bazı kullanışlı bağıntılar verilmiştir:

$$x \equiv r \cos \phi \sin \theta$$

$$y \equiv r \sin \phi \sin \theta$$

$$z \equiv r \cos \theta$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$



İlerleme sağlamak için açısal momentum operatörleri, küresel polar koordinatlar olarak ifade etmemiz gerekir. Bu düzenleme, zincir kuralının oldukça sıkıcı bir uygulama olduğunu ortaya çıkarıyor. Sonuçlar sadece aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left( -\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left( \cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \Rightarrow \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]$$

Sonuçta, rijit rotor için Schrödinger denklemi

$$\frac{-\hbar^2}{2I} \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] Y_l^m(\theta, \phi) = E_l Y_l^m(\theta, \phi)$$

haline gelir. Burada bir hususa dikkat etmeliyiz: dönmekte olan parçacık, yarıçapı  $R$  olan bir kürenin yüzeyi ile sınırlandırıldığından ilgili dalga fonksiyonu sadece  $\theta$  ve  $\phi$  nin fonksiyonu olmalıdır.

Sonuçlarına bakılırsa, özdeğerleri ( $E_l$ ) çabucak elde etmemizi sağlayan bazı çok kullanışlı, operatör cebir hileleri vardır. Bu hileler, harmonik osilatörü çözmek için kullandığımız operatör manipülasyonlarını artırmaya ve azaltmaya benzer ve bir sonraki derste bu hileleri, özdeğerleri türetmek için kullanacağız. Rijit rotorun enerjilerini ortaya koyan sonuç:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Açısal momentum ile ilgili karışabilecek bir husus, farklı açısal momentumlar olup bunlar için farklı harfler kullandığımızdır.  $l$ , çekirdek etrafında hareket eden bir elektron için seçilmiş harfken  $J$ , diatomik bir molekülün dönmesi için seçilmiş harftir:

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

Böylece, enerji seviyeleri arasındaki aralık, eşit aralıklarla dizilmiş enerji seviyelerinin olduğu harmonik osilatördekinin tersine  $J$ 'nin artmasıyla artar:

$$E_{J+1} - E_J = \frac{\hbar^2}{2I} [(J+1)(J+2) - J(J+1)] = \frac{\hbar^2}{I} (J+1)$$

Ayrıca her  $J$  için  $m$ 'nin bir çok olası değerine ulaşırız (bazı durumlarda  $K$  olarak ta bilinir):

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm J$$

Böylece her enerji seviyesi,  $(2J+1)$  kat dejenere olmuştur. Fiziksel olarak  $m$ , açısal momentumun  $z$  eksenini boyunca olan bileşenini yansıtır. Sabit  $J$  de farklı  $m$  değerleri,

bir bileşke olan açısal momentumun farklı yönlerini yansıtır – büyük, pozitif  $m$  değeri için açısal momentum çoğunlukla  $+z$  boyuncadır;  $m$  sıfır ise açısal momentum  $z$  eksenini ile ortogonaldır. Fiziksel olarak dönme enerjisinin yöne bağlı olmadığını biliyoruz. Bu sonuç, enerjinin, sadece, vektör yönünü değil vektör uzunluğunu ölçen  $J$ 'ye bağlı olduğu gerçeğinin bir yansımasıdır.

