



DIRAC RESMİNE PRELÜD VE REZONANS OLGUSU

Takdim: Basit harmonik titreşir, kısa mesafeli salınımları modellemek için kullanılan çok eski bir oyuncaktır. Bu oyuncaktan bir türlü vazgeçil(e)memesinin nedeni gerek cebirsel yapısındaki zenginlik ve kolaylık gerekse sağladığı fiziksel kavrayış ve yorumlardır. Gaz fazındaki moleküllerin titreşiminden katı fazdaki atomların titreşimine kadar, her çeşit titreşim hareketinin ilk akla gelen modellenmesi basit harmonik titreşir ile yapılır. Bu derste ilk olarak dışarıdan bir kuvvetle uyarılan basit sarkacın dinamiğini, Hamilton'ın hareket denklemlerini çözerek irdedeceğiz ve rezonans durumlarının nasıl ortaya çıktığını araştıracağız. Daha sonra da aklımızı kullanarak Ehrenfest teoremini bir miktar suistimal ederek, problemin kuantum versiyonunu “çözmeden çözeceğiz.”

Anahtar Kelimeler: Dirac resmi, rezonans, integral faktörü, Fourier serileri, çok fotonlu geçişler

Birinci basamak: *Sistemin Hamilton fonksiyonu.* Dipol momenti aracılığıyla alternatif bir lazer alanı ile etkileşen bir çiftatomlu molekülün dinamiğinin basit harmonik titreşir ile modellendiğini varsayalım. Sistemin Hamilton fonksiyonu

$$H(x, p, t) := \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - f_0 x g(t) \quad (1)$$

olarak verilmektedir. Burada alışıldık kinetik ve potansiyel enerji terimlerine ek olarak $-f_0 x g(t)$ elektrik-dipol yaklaştırmada çiftatomlu molekülün zamana bağlı elektrik alanıyla etkileşimidir. f_0 sisteme etki eden dış kuvvetin tipik değeri, $g(t)$ ise boyutsuz (ve dolayısıyla birimsiz) bir fonksiyondur. Mesela $g(t)$ bir çan eğrisi atımı (pulse) veya trigonometrik bir fonksiyon olabilir.

İkinci basamak: *Hareket denklemleri.* Başlangıç anındaki hali $\{x(0), p(0)\}$ olarak verilen bu sistemin zaman içinde evrilmesi Hamilton'ın hareket denklemlerinin çözümüyle bulunur:

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{p(t)}{m}, \quad (2)$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = -m\omega^2 x(t) + f_0 g(t). \quad (3)$$

Üçüncü basamak: *Boyutsuz niceliklere geçiş.* Boyutsuz niceliklerle çalışmak bizi hem denklemlerimizdeki değişken kalabalığından kurtaracak, hem de bir dereceye kadar keyfi seçilmiş birim sistemleri arasında bir tercih yapma zorunluluğunu da ortadan kaldıracaktır. *Her mekanik sistemin birimleri tayin edilirken üç tane bağımsız dinamik değişkenin birimlerinin bilinmesi yeterlidir.* Geri kalanlar bunlar cinsinden ifade edilebilirler. Mecbur olmamakla birlikte, çoğunlukla uzunluk, zaman ve kütle birimlerinin tespitinde temel alınır. (Şayet sistemde yüklü tanecikler varsa, o zaman dört dinamik değişkenin birimlerinin tespit edilmesi gerekir.)

Biz, incelediğimiz sistemde, hareket denklemi tarafından önerilen nicelikleri birimleri tespit etmede kullanacağız. Bu bağlamda kütle m , kuvveti f_0 ve frekansı ω ile ölçekliyoruz. Bu durumda boyutsuz uzunluk (veya indirgenmiş uzunluk) $z_1 := x m \omega^2 / f_0$, boyutsuz/indirgenmiş momentum $z_2 := p \omega / f_0$ ve boyutsuz/indirgenmiş zaman $\tau := t \omega$ olarak verilirler. Bu tanımlar yerlerine konulduğunda Hamilton'ın hareket denklemleri (2,3)

$$\frac{dz_1(\tau)}{d\tau} = z_2(\tau), \quad (4)$$

$$\frac{dz_2(\tau)}{d\tau} = -z_1(\tau) + g(\tau) \quad (5)$$

biçimini alırlar. Söz verildiği gibi, boyutsuz niceliklerin bizi değişken kalabalığından kurtardığına ve denklemleri sadeleştirdiğine dikkat ediniz.

Dördüncü basamak: *Hareket denklemlerine cebirsel bir biçim vermek.* Bu diferansiyel denklemleri her ne kadar başka yöntemlerle çözmek mümkünse de, biz, “Dirac veya etkileşim resmine” bir prelüd olması için doğrusal/lineer işlemci yöntemlerini kullanacağız. Bu yöntemin basit harmonik titreşir dışında başka sistemler için de genelleştirilmesi (ve Picard yinelemesiyle olan benzerliğini gözlemek) basit bir meseledir. Sistemin halini gerçel sayılar üzerinde tanımlı iki boyutlu vektör uzayında, $\mathbf{z}(\tau) := z_1(\tau)\mathbf{e}_1 + z_2(\tau)\mathbf{e}_2$ biçiminde ifade edelim. Burada $\mathbf{e}_1 := (1, 0)$ ve $\mathbf{e}_2 := (0, 1)$ birinci sınıf fizik derslerinde gösterilen birim vektörlerdir. \mathbf{e}_1 ve \mathbf{e}_2 vektörlerine etkisi aşağıdaki gibi tanımlanan, zamandan bağımsız bir doğrusal işlemci L

$$L\mathbf{e}_1 := -\mathbf{e}_2 \quad \text{ve} \quad L\mathbf{e}_2 := \mathbf{e}_1 \quad (6)$$

Hamilton'ın (indirgenmiş, boyutsuz) hareket denklemlerini (4,5) yeniden düzenlememizde yardımcı olacaktır:

$$\frac{d\mathbf{z}(\tau)}{d\tau} = L\mathbf{z}(\tau) + g(\tau)\mathbf{e}_2. \quad (7)$$

Alıştırma 1: $L^2 = -I$ olduğunu gösteriniz.

Alıştırma 2: Taylor serilerini ve bir önceki alıştırmayı kullanarak $e^{L\tau} = \cos(\tau)I + \sin(\tau)L$ olduğunu gösteriniz.

Alıştırma 3: Alıştırma 2'yi kullanarak, $e^{-L\tau}e^{L\tau} = I$ ve

$$\frac{d}{d\tau}e^{L\tau} = Le^{L\tau} = e^{L\tau}L$$

olduğunu gösteriniz.

Beşinci basamak: *Dirac resmine geçiş.* Eğer 7. denklemde $g(\tau) = 0$ olsaydı, bu denklemin çözümü, Picard yinelemesiyle $\mathbf{z}(\tau) = e^{L\tau}\mathbf{z}(0)$ rahatlıkla elde edilecekti. Bu çözümü sezgimize bir basamak yaparak 7. denklemi çözmek için fizik literatüründe “Dirac resmi” veya “etkileşim resmi” olarak bilinen resime geçip, ilk defa Leibniz'in icat ettiği “integral alma faktörü” tekniğinin doğrusal işlemcilere genelleştirilmiş halini kullanacağız. Bu amaçla sistemin Dirac resmindeki hal vektörünü

$$\mathbf{z}_D(\tau) := e^{-L\tau}\mathbf{z}(\tau) \quad (8)$$

tanımlayalım. (Üstel fonksiyonundaki $-$ işaretine dikkat!) Dirac resmindeki hareket denklemini bulmak için formal olarak

$$\frac{d\mathbf{z}_D(\tau)}{d\tau} = \frac{de^{-L\tau}}{d\tau}\mathbf{z}(\tau) + e^{-L\tau}\frac{d\mathbf{z}(\tau)}{d\tau} = -Le^{-L\tau}\mathbf{z}(\tau) + e^{-L\tau}(L\mathbf{z}(\tau) + g(\tau)\mathbf{e}_2), \quad (9)$$

$$= g(\tau)e^{-L\tau}\mathbf{e}_2 \quad (10)$$

yazabiliriz. Dirac resmine neden “etkileşim resmi” de dediği ve bu resmin avantajı 10. denklem yardımıyla anlaşılabilir: $g(\tau) = 0$ alındığında $\dot{\mathbf{z}}_D(\tau) = 0$ çıkar. Diğer bir ifadeyle, sisteme dışarıdan etki edilmezken, $\mathbf{z}_D(\tau)$ durmaktadır ve ancak etkileşimin varlığıyla değişmektedir. (Aynı durum $\mathbf{z}(\tau)$ için söz konusu değildir.)

Altıncı basamak: *Problemin Dirac resminde çözümü ve Schrödinger resmine geri dönüş.* 10. denklemin formal çözümü her iki tarafın 0'dan τ 'ya integrali alınarak

$$\mathbf{z}_D(\tau) - \mathbf{z}_D(0) = \int_0^\tau d\sigma g(\sigma) e^{-L\sigma} \mathbf{e}_2 \quad (11)$$

bulunur. Başlangıç anında $\mathbf{z}_D(0) = \mathbf{z}(0)$ olduğu 8. denklem yardımıyla görülür. Etkileşim resminden geri dönecek olursak, problemin çözümünü

$$\mathbf{z}(\tau) = e^{L\tau} \mathbf{z}(0) + \int_0^\tau d\sigma g(\sigma) e^{L(\tau-\sigma)} \mathbf{e}_2 \quad (12)$$

şeklinde verebiliriz. Şimdiye kadar alışık olduğumuz bu resime fizik literatüründe ‘‘Schrödinger resmi’’ denir. **Alıştırma 4:** 12. denklemden başlayarak

$$\mathbf{z}(\tau) = e^{L\tau} \mathbf{z}(0) + \int_0^\tau d\sigma g(\tau - \sigma) e^{L\sigma} \mathbf{e}_2$$

olduğunu gösteriniz.

Alıştırma 2'nin yardımıyla 12. denklemi

$$\mathbf{z}(\tau) = e^{L\tau} \mathbf{z}(0) + \int_0^\tau d\sigma g(\sigma) \sin(\tau - \sigma) \mathbf{e}_1 + \int_0^\tau d\sigma g(\sigma) \cos(\tau - \sigma) \mathbf{e}_2 \quad (13)$$

olarak yeniden düzenleyebiliriz. 13. denklemden birinci terim sistemin $g(\tau) = 0$ halinde izole bir şekilde evrilmesini, ikinci terim $g(\tau)$ alanının konuma katkısını, üçüncü terim ise yine $g(\tau)$ alanının titreşirin momentumuna katkısını vermektedir.

İşaret: Bu noktadan sonra şayet istenilirse tekrar z_1, z_2 ve τ niceliklerinden x, p ve t niceliklerine dönülebilir.

İşaret: Anlatageldiğimiz Dirac resminin (veya genelleştirilmiş Leibniz integral alma faktörü tekniğinin) tamamen sistematik olduğuna ve diferansiyel denklemler kitaplarındaki ‘‘belirlenmemiş katsayılar tekniği’’nde (Boyce & DiPrima, sayfa 171, 7. baskı) olduğu üzere, ‘‘çözümü tahmin etmek’’ gibi yüksek sezgi gücü gerektirmediğine dikkat ediniz.

UYGULAMALAR

13. denklemden birinci terim homojen çözümü ve üçüncü terim dış kuvvetin momentuma katkısını verdiklerinden, biz, sadece ikinci terimle, $x_p(t)$, dış kuvvetin konuma katkısı üzerinde yoğunlaşacağız.

Dikdörtgen atım

Titreşiri uyaran dış kuvvet dikdörtgen bir atım (pulse) olarak verilmişse

$$g(t) := \begin{cases} 1, & 0 < t < T, \\ 0, & t \geq T, \end{cases} \quad (14)$$

böyle bir atımın uzun vadede, $\tau > \omega T$ anında konuma olan katkısı

$$\int_0^\tau d\sigma g(\sigma) \sin(\tau - \sigma) = \int_0^{\omega T} d\sigma \sin(\tau - \sigma) = \cos(\tau - \omega T) - \cos(\tau) \quad (15)$$

olarak verilir. Boyutlu niceliklerde bunu

$$x_p(t) = \frac{f_0}{m\omega^2} \{ \cos(\omega t - \omega T) - \cos(\omega t) \}, \quad t \geq T \quad (16)$$

olarak da ifade edebiliriz.

İşaret: Şayet atım süresi T , $\omega T = 2\pi n$ ve $n \in \mathbf{N}$ biçiminde seçilirse, *bu katkının sıfır olacağını* gözleyiniz.

İşaret: $|\cos(\omega t - \omega T) - \cos(\omega t)| \leq 2$ olduğundan, her halükarda, $x_p(t)$ katkısının üstten ve alttan kısıtlı olduğuna ve sınırsız büyümediğine dikkat ediniz.

Periyodik alan: rezonans

Eğer bir alan

$$g(t + T) = g(t), \quad T > 0 \quad (17)$$

şartını sağlıyorsa periyodiktir ve periyodu T 'dir. Öncelikle çok özel bir durumu, $T = 2\pi/\omega$ 'yı inceleyelim. $\tau > \omega T$ olsun. Bu durumda $n \in \mathbf{N}$ ve $0 < \tau_r < \omega T$ olmak üzere, $\tau = n\omega T + \tau_r = 2\pi n + \tau_r$ olsun. Diğer bir deyişle $\tau = \tau_r \pmod{2\pi}$. n sayısı periyod devir sayısını ölçmektedir. Bu durumda

$$x_p(\tau) = \int_0^\tau d\sigma g(\sigma) \sin(\tau - \sigma) = \int_0^{2\pi n} d\sigma g(\sigma) \sin(\tau - \sigma) + \int_{2\pi n}^{2\pi n + \tau_r} d\sigma g(\sigma) \sin(\tau - \sigma) \quad (18)$$

$$= \sum_{m=0}^{n-1} \int_{2\pi m}^{2\pi(m+1)} d\sigma g(\sigma) \sin(\tau - \sigma) + \int_{2\pi n}^{2\pi n + \tau_r} d\sigma g(\sigma) \sin(\tau - \sigma) \quad (19)$$

olur. İntegrallerde g fonksiyonunun periyodikliğini kullanabilmek için $\eta := \sigma - 2\pi m$ gibi dönüşüm formüllerini kullanırsak, $d\eta = d\sigma$, $g(\eta + 2\pi m) = g(\eta)$ ve $\sin(\tau - \eta - 2\pi m) = \sin(\tau - \eta)$ olduğundan

$$x_p(\tau) = n \int_0^{2\pi} d\eta g(\eta) \sin(\tau - \eta) + \int_0^{\tau_r} d\eta g(\eta) \sin(\tau - \eta) \quad (20)$$

elde edilir. $g(\eta)$ 'yı içeren iki trigonometrik integral fonksiyoneli tanımlarsak

$$C(\theta) := \int_0^\theta d\eta g(\eta) \cos(\eta) \quad \text{ve} \quad S(\theta) := \int_0^\theta d\eta g(\eta) \sin(\eta), \quad (21)$$

bu durumda

$$x_p(\tau) = (nC(2\pi) + C(\tau_r)) \sin(\tau) - (nS(2\pi) + S(\tau_r)) \cos(\tau) \quad (22)$$

yeniden düzenlenebilir.

İşaret: Sayet $C(2\pi) = 0$ ve $S(2\pi) = 0$ durumu geçerli ise o zaman dış alanın konuma katkısı $|x_p(\tau)|$ da sınırlı kalacaktır. Öte yandan $C(2\pi) \neq 0$ veya $S(2\pi) \neq 0$ durumu geçerli ise o zaman $|x_p(\tau)|$, periyod devir sayısını ölçen n sayısı ile doğru orantılı bir biçimde artacak ve sınırsız büyüyecektir. *Buna rezonans denir.*

Alıştırma 5: $g(\eta) = \cos(\eta)$ için $x_p(\tau)$ hesaplayınız ve boyutlu nicelikler cinsinden ifade ediniz.

Periyodik alan: genel çözüm

$g(t)$ fonksiyonunun periyodu $T \neq 2\pi/\omega$ olduğunda artık integraller bir önceki bölümdeki gibi kolaylıkla 22. denkleme indirgenemeyecektir. $g(t)$ fonksiyonunun doğal frekansını $\omega_0 := 2\pi/T$ olarak tanımlayalım. Frekansı ω_0 olan ve bizim fizikte kullandığımız (sürekli ve kısıtlı) fonksiyonlar için Fourier sinus ve cosinus açılımı vardır, yakınsar ve aşağıdaki biçimde verilir¹.

$$g(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos(n\omega_0 t) + b_n \sin(n\omega_0 t)) \quad (23)$$

Boyutsuz niceliklerde bu denklem

$$g(\tau) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos(n\omega_0^r \tau) + b_n \sin(n\omega_0^r \tau)) \quad (24)$$

¹Yakınsama ispatlarını konu ile ilgili yazılmış standard kitaplara (mesela Zygmund veya Hardy) havale ediyoruz. Diferansiyel veya kısmi diferansiyel denklemler ve matematiksel fiziğin metodları kitaplarında da bu konuyla ilgili bilgiler bulunabilir. Fourier serilerinin tek sakıncası, süresiz fonksiyonların Fourier açılımlarında, yakınsama, fonksiyonun süresiz olduğu noktalarda, fonksiyonun kendisine olmamaktadır. *Buna "Gibbs olgusu" da denir.*

biçimini alır. Burada indirgenmiş frekansı $\omega_0^r := \omega_0/\omega$ olarak tanımladık. a_n ve b_n katsayıları trigonometrik fonksiyonların dikliğinden (2. ödev soru 2a) faydalanılarak

$$a_n := \frac{\omega_0^r}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega_0^r} d\tau g(\tau) \cos(n\omega_0^r\tau), \quad n \geq 0, \quad (25)$$

$$b_n := \frac{\omega_0^r}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega_0^r} d\tau g(\tau) \sin(n\omega_0^r\tau), \quad n > 0, \quad (26)$$

integralleri yardımıyla hesaplanabilirler. $x_p(\tau)$ değerini hesaplamak için $g(\tau)$ fonksiyonunun 24. denklemdaki Fourier sinus ve cosinus açılımından faydalanacağız. Bu bağlamda

$$\int_0^\tau d\sigma \sin(\tau - \sigma) \cos(n\omega_0^r\sigma) = \frac{1}{1 - n^2(\omega_0^r)^2} (\cos(n\omega_0^r\tau) - \cos(\tau)) \quad (27)$$

$$\int_0^\tau d\sigma \sin(\tau - \sigma) \sin(n\omega_0^r\sigma) = \frac{1}{1 - n^2(\omega_0^r)^2} (\sin(n\omega_0^r\tau) - n\omega_0^r \sin(\tau)) \quad (28)$$

tipi integralleri kullanmamız gerekiyor.

Alıştırma 6: 27. ve 28. denklemlerdeki integral hesaplarını detaylarıyla gösteriniz.

27. ve 28. denklemlerin yardımıyla dış alanın titreşirin konumuna katkısını

$$x_p(\tau) = \frac{a_0}{2}(1 - \cos(\tau)) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n (\cos(n\omega_0^r\tau) - \cos(\tau)) + b_n (\sin(n\omega_0^r\tau) - n\omega_0^r \sin(\tau))}{1 - n^2(\omega_0^r)^2} \quad (29)$$

bulabiliriz. Dikkat edilirse, bu denklemde a_0 , a_n ve b_n katsayıları ile toplamın içindeki trigonometrik fonksiyonlar alttan ve üstten kısıtlı niceliklerdir. $x_p(\tau)$ 'nin sınırsız olarak buyuyebileceği tek durum paydadaki $1 - n^2(\omega_0^r)^2$ teriminin tam olarak sıfır olması durumundadır. Bunun için $\omega_0 = \omega/n$ olmalıdır.

İşaret: $\omega_0 > \omega$ ise, hiçbir $n \geq 1$ tam sayısı $\omega_0 = \omega/n$ şartını sağlamayacağından, rezonans durumu gerçekleşmez. Diğer bir ifadeyle *yüksek frekanslı alanlarda rezonans yoktur*.

İşaret: Optik spektroskopide ve manyetik rezonansda “iki fotonlu geçiş” durumu, dış alanın frekansı ω_0 ile uyarılan kuantum sisteminin enerji seviyeleri arasındaki farkın $\hbar\omega_0 \approx (E_2 - E_1)/2$ olması halinde gerçekleşir. Üç fotonlu geçişler de benzer bir biçimde tanımlanabilir.

İşaret: Tam rezonansın gerçekleştiği \tilde{n} katsayısı için 29. denklemdaki payda $1 - \tilde{n}^2(\omega_0^r)^2 = 0$ olmaktadır. Lakin, bu durumda denklemin pay kısmı da sıfır olduğundan 0/0 belirsizliği ortaya çıkar. Bu belirsizliği kaldırmak için L'Hospital kuralının yardımıyla genel çözümdeki (29. denklem) rezonans teriminin

$$\frac{1}{2} (a_{\tilde{n}}\tau \sin(\tau) - b_{\tilde{n}}\tau \cos(\tau) + b_{\tilde{n}} \sin(\tau)) \quad (30)$$

olduğu gösterilebilir.

Alıştırma 7: L'Hospital kuralını 29. denklemdaki $1 - \tilde{n}^2(\omega_0^r)^2 = 0$ şartını sağlayan terimde kullanarak 30. denklemdaki rezonans terimini elde ediniz.

İşaret: Rezonans teriminin τ ile birinci dereceden değiştiğine dikkat ediniz. Benzer bir durum bir önceki bölümde de ortaya çıkmıştı.

İşaret: $\omega_0 = \omega/\tilde{n}$ şartını sağlayan bir \tilde{n} değeri olsa bile, rezonans gerçekleşmeyebilir. Çünkü $g(t)$ fonksiyonunun simetrisinden dolayı hem $a_{\tilde{n}} = 0$ hem de $b_{\tilde{n}} = 0$ çıkabilir.

Sayısal örnek: dikdörtgen atım treni

$$g(t) = \begin{cases} 0, & 0 \leq (t \bmod T) < T/4, \\ 1, & T/4 \leq (t \bmod T) \leq 3T/4, \\ 0, & 3T/4 < (t \bmod T) < T, \end{cases} \quad (31)$$

şeklinde tanımlanan bir fonksiyona, son derece açık sebeplerden dolayı, “atım treni” denir. Örnek olarak bu kadar basit tanımlı bir fonksiyon seçmemizin iki sebebi vardır: (1) Rezonans, $g(t)$ 'nin fonksiyonel formundan

çok, frekansına bağlıdır. O yüzden seçtiğimiz $g(t)$ 'nin Fourier integrallerinin kolay hesaplanması için basit seçilmesinde bir sakınca yoktur; ve (2) Süreksiz fonksiyonların Fourier serilerindeki ‘‘Gibbs olgusuna’’ görsel bir örnek vermek istiyoruz.

Alıştırma 8: 31. denklemdeki atım treninin Fourier serisi için $b_n = 0$, $a_0 = 1$, $a_{2n} = 0$ ve $a_{2n+1} = 2(-1)^{n+1}/\pi(2n+1)$ olduğunu gösteriniz.

Bir önceki alıştırmamın ve 29. denklemin yardımıyla $x_p(\tau)$

$$x_p(\tau) = \frac{1 - \cos(\tau)}{2} - \frac{2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos((2n+1)\omega_0^r \tau) - \cos(\tau)}{2n+1 (1 - (2n+1)^2(\omega_0^r)^2)} \quad (32)$$

olarak bulunur. Daha önce de işaret ettiğimiz gibi hernekadar 2, 4, 6 ve genel olarak $2n$ fotonlu geçişler olası ise de, uyarın $g(t)$ alanının simetrisinden dolayı $a_{2n} = b_{2n} = 0$ çıkmıştır. Bu da $\omega_0 = \omega/2n$ olsa bile, rezonansın gerçekleşmeyeceği anlamına gelir. Seçtiğimiz atım treninin çift bir fonksiyon olması veya daha genel bir ifadeyle *paritesi*, bu sonucu doğurmuştur. Biz bu sistemden sadece $2n+1$ fotonlu geçişleri bekleyebiliriz.

İkaz: Bu bölümde yaptığımız çözümleme, rezonans tespitinin çok kolay bir iş olduğu gibi yanıltıcı bir kamu uyandırmasın: Çalıştığımız sistem, dikdörtgen atım treni ile elektrik dipol yaklaştırmasında uyarılan basit harmonik titreşir modeli, düşünülebilecek en kolay matematiksel modeldir ve bu yüzden analitik ifadeler elde edilebilmektedir. Daha genel (ve daha gerçekçi) bir modelde, mesela Lorentz atım treniyle uyarılan Morse titreşirinde, benzer çözümlenmeleri yapmak bu kadar kolay değildir.

Daha genel sistemlerde rezonans durumlarını tespit etmek için daha nitel ve deneye daha uygun bir indikatör fonksiyonuna ihtiyacımız vardır. *Deneyisel gerekçelerden dolayı* rezonans durumlarını tespit etmek için niceliklerin zaman ortalamaları hesaplanır ve alan frekansına karşı zaman ortalaması grafiği bize rezonans tespitinde yardımcı olur. Zamana bağlı bir fonksiyonun zaman ortalaması aşağıdaki gibi (limit varsa) tanımlanır.

$$\langle f \rangle_t := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(t) dt \quad (33)$$

Alıştırma 9: $\forall t > 0$ için $|f(t)| < M < \infty$ ise $|\langle f \rangle_t| < M$ olduğunu gösteriniz.

Bu bölümde çalıştığımız problem için acaba $\langle x_p \rangle_t$ uygun bir indikatör fonksiyonu mudur? Bir sonraki alıştırmada bu sorunun cevabının ‘‘hayır’’ olduğunu söylüyor.

Alıştırma 10: $\alpha \neq 0$ için $\langle \cos(\alpha t) \rangle_t = \langle \sin(\alpha t) \rangle_t = 0$ olduğunu gösteriniz.

Dikkat edilirse $\langle x_p \rangle_t$, sinuslerin ve cosinuslerin bir toplamından ibarettir ve aldığı maksimum değer +1000 de olsa +0.001 de olsa, $\langle x_p \rangle_\tau = 0$ çıkabilir ki, bu da salınımlar hakkında bize herhangi bir fikir vermekten uzaktır. Bu yüzden biz de böyle yanılsamalara sebebiyet vermeyecek bir ortalamayı, $\langle x_p^2 \rangle_\tau$ ortalamasını inceleyeceğiz. Ama önce

Alıştırma 11: $\alpha \neq 0$ için $\langle \cos^2(\alpha t) \rangle_t = \langle \sin^2(\alpha t) \rangle_t = 1/2$ olduğunu gösteriniz.

Alıştırma 12: $\langle \cos(\alpha t) \cos(\beta t) \rangle_t = \langle \sin(\alpha t) \sin(\beta t) \rangle_t = \delta_{\alpha,\beta}/2$ ve $\langle \sin(\alpha t) \cos(\beta t) \rangle_t = 0$ olduğunu gösteriniz. $\langle x_p^2 \rangle_\tau$, bir fonksiyonun karesinin ortalamasını içerdiğinden salınımların pozitif ve negatif değerleri ortalamada birbirlerini nötrale edemeyecektir. Daha önceki alıştırmaların da yardımıyla $\omega_0^r \neq 1/(2\tilde{n}+1)$ için

$$\langle x_p^2 \rangle_\tau = \frac{3}{8} + \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} s_n + \frac{2}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} s_n^2 + \frac{2}{\pi^2} \left(\sum_{n=0}^{\infty} s_n \right)^2 \quad (34)$$

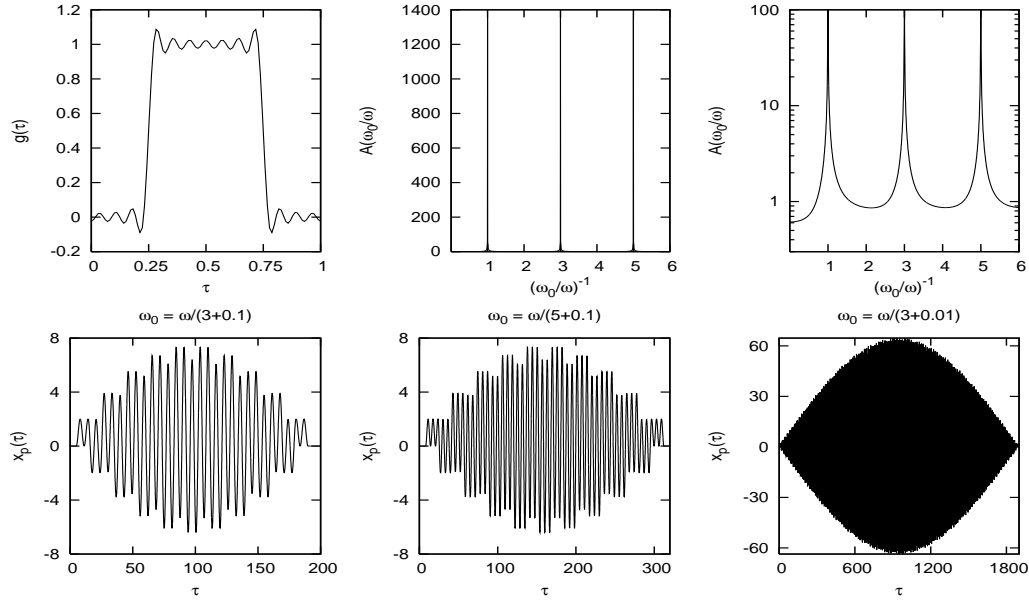
ve

$$s_n := \frac{(-1)^{n+1}}{2n+1} \frac{1}{(1 - (2n+1)^2(\omega_0^r)^2)} \quad (35)$$

Alıştırma 13: 32. denklemden başlayarak 34. denklemi elde ediniz.

Her ne kadar açıkça belirtilmemiş olsa da $\langle x_p^2 \rangle_\tau$ aslında sadece ω_0^r 'ye bağlıdır. Bu yüzden biz $A(\omega_0^r) := \langle x_p^2 \rangle_\tau$ fonksiyonunu (‘‘emilim spektrumu/tayfı’’) tanımlayacağız. Spektroskopi deneylerinde çoğunlukla elde edilen nicelik, nitel olarak $A(\omega_0^r)$ fonksiyonuna benzer. 34. denklemde verilen ifadeyi kapalı bir halde toplamak imkansızdır, lakin, bu ifadenin rezonansa yakın durumlar çok büyük değerler alacağı ve rezonans

durumlarında tanımsız olduğunu gözlemek zor değildir. Yakın rezonans ve rezonans haricindeki durumlarda ise pratik olarak sıfır değerini almaktadır. Spektroskopik ölçümlerde bu davranış çok tipiktir.



Bu sayfadaki şekil şimdiye kadar anlattığımız konuları özetler mahiyettedir. **Üst-sol:** *Gibbs olgusuna örnek.* Atımın Fourier açılımının ilk 6 teriminin toplamı. Atımın süreksiz olduğu noktalarda başlayan dalgalanmalara dikkat ediniz. Şayet seriyi sonsuza kadar da toplasaydık, fonksiyonun süreksiz olduğu noktada Fourier serisi bizim istediğimiz değerden başka bir değere yakınsayacaktı. **Üst-orta:** *Emilim spektrumu/tayfi.* Daha önce $A(\omega_0^r) = \langle x_p^2 \rangle_\tau$ olarak tanımladığımız, atım trenine tekabül eden Emilim spektrumunun, $1/\omega_0^r$ 'ye karşı çizimi. 1, 3 ve 5 fotonlu emilimlerde $A(\omega_0^r)$ 'nin sonsuza gittiğine dikkat ediniz. **Üst-sağ:** Aynı fonksiyonun logaritmik skalada çizimi. **Alt-sol ve Alt-orta:** $\omega_0^r = 1/3.1$ ve $\omega_0^r = 1/5.1$ durumları için $x_p(\tau)$. $\omega_0^r = 1/5.1$ için $x_p(\tau)$ 'nin maksimum değerine ulaşmasının daha geç gerçekleştiğine dikkat ediniz. **Alt-sağ:** $\omega_0^r = 1/3.01$ için $x_p(\tau)$ 'nin grafiği. Bu durumda $x_p(\tau)$ fonksiyonunun maksimum değerine ulaşmasının bir öncekilere kıyasla 6-8 kat daha çok zaman aldığına ama maksimum değerinin de yaklaşık 7 kat daha fazla olduğuna dikkat ediniz.

KUANTUM ÇÖZÜMÜ: EHRENFEST

Bu problemin kuantum versiyonunu çözmek için 1. denklemdaki Hamilton fonksiyonundaki x ve p dinamik değişkenleri yerine Hermitik işlemcileri yazarak Hamilton işlemcisini

$$H(t) := \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 - f_0 g(t) X \quad (36)$$

tanımlar ve verilen bir başlangıç $\psi(x, 0)$ dalga fonksiyonu için Schrödinger denklemini

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H(t) \psi(x, t) \quad (37)$$

çözeriz. Dikkat edilirse burada Hamilton işlemcisi zamana bağlı olduğundan, daha önce yaptığımız çözüm, $\psi(x, t) = \exp(-itH/\hbar)\psi(x, 0)$ artık geçerli değildir. Bu denklem Picard yinelemesi ile çözülebilir, lakin çıkan sonsuz seri toplamını derli toplu bir hale koymak çok zordur². Kuantum mekaniğinde “bir problemin

²Bu sorunun analitik çözümü en verimli *Magnus veya kümülatif yöntem* ile yapılır ki, o yöntemi de çalışmak bize bir haftaya mal olabilir. Daha fazla bilgi için bak.: P. Pechukas ve J. C. Light, “On The Exponential Form of Time-Displacement Operators in Quantum Mechanics”, *Journal of Chemical Physics* **44**, 3897–3912 (1966).

çözümü” denildiğinde kastedilen şey verilen bir $\psi(x, 0)$ için $\psi(x, t)$ değerini bulmaktır. $\psi(x, t)$ bulunursa, geri kalan bütün ortalama değerler $\langle A(t) \rangle := \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$ iç çarpım formülünden integraller alınarak hesaplanabilir.

Şayet biz isteklerimizi azaltıp, $\psi(x, t)$ olmadan $\langle X(t) \rangle$ ve $\langle P(t) \rangle$ ortalama değerleri ile yetinmeye razı olursak, o zaman Ehrenfest’in teoreminden³ faydalanabiliriz. Teorem formal olarak aşağıdaki sonuçları vermektedir.

$$\frac{d\langle X(t) \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle P(t) \rangle, \quad (38)$$

$$\frac{d\langle P(t) \rangle}{dt} = -m\omega^2 \langle X(t) \rangle + f_0 g(t). \quad (39)$$

Dikkat edilirse bu denklemler, problemin klasik versiyonundaki 2. ve 3. denklemlerle aynıdır. O zaman bir önceki bölümdeki klasik çözümlerin sonuçları *sadece ortalama değerlerin gerektiği şartlarda*, kuantum çözümleri ile aynıdır. Hooke kanununun doğrusallığı ($\mathbf{F} = -k\mathbf{x}$) problemin klasik çözümünü mümkün kıldığı gibi kuantum versiyonunu da çözmeden çözmemize yardımcı olmuştur.

SONUÇLAR

Bu noktaya kadar anlattıklarımızı toparlamak gerekirse: (1) Dışarıdan zamana bağlı bir alanın elektrik-dipol etkileşimi ile uyardığı basit harmonik titreşirin klasik çözümü yapılabilir ve bu çözüm en genel haliyle 13. denklemdeki gibidir. (2) Çözümde ilk defa Leibniz’in icat ettiği integral alma faktörü tekniğinin doğrusal işlemcilerle genelleştirilmiş hali kullanılır. Fizik literatüründe bu prosedüre “Dirac resmi” denilir. (3) Doğal frekansı ω olan titreşiri dışarıdan uyaran kuvvet periyodikse ve frekansı ω_0 ise, $\omega_0 = \omega/n$ ($n \in \mathbf{Z}^+$) şartını sağladığı zaman rezonans durumu gözlenir. Bu rezonans durumları n sayısı ile adlandırılırlar. $n = 3$ için “üç foton emilimi” gibi. (4) Sezgisel olarak tanımladığımız emilim spektrumu genellikle ölçülebilen niceliklerin zaman ortalamasıdır ve rezonans durumlarında çok büyük, diğer durumlarda (pratik olarak) sıfır değerini veren ideal pikler şeklindedir.

³Zamandan bağımsız bir işlemci için Ehrenfest’in teoremi

$$i\hbar \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} = \langle [A, H(t)] \rangle$$

denkleminin sağlandığını söyler. İspat için dördüncü haftanın ders notlarına bakınız.