

**T.C.  
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI  
2020-YL-045**

**ÇEŞİTLİ SİSTEMLERİN  
ZAMANA BAĞLI SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİNİN  
ÇÖZÜMLERİ**

**Metin ASLAN**

**Tez Danışmanı:  
Doç. Dr. Haydar UNCU**

**AYDIN**



**T.C.**  
**ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜNE**  
**AYDIN**

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Programı öğrencisi Metin ASLAN tarafından hazırlanan "Çeşitli Sistemlerin Zamana Bağlı Schrödinger Dalga Denkleminin Çözümleri" başlıklı tez, 29.07.2020 tarihinde yapılan savunma sonucunda aşağıda isimleri bulunan jüri üyelerince kabul edilmiştir.

	Ünvanı, Adı Soyadı	Kurumu	İmzası
Başkan	: Dr. Öğr. Üyesi. Nuray HORASAN	Aydın Adnan Menderes Üniv.	
Üye	: Doç. Dr. Fatih ERMAN	İzmir Yüksek Teknoloji Enst.	
Üye	: Doç. Dr. Haydar UNCU	Aydın Adnan Menderes Üniv.	

Jüri üyeleri tarafından kabul edilen bu Yüksek Lisans tezi, Enstitü Yönetim Kurulunun ..... sayılı kararıyla ..... tarihinde onaylanmıştır.

Prof. Dr. Gönül AYDIN  
Enstitü Müdürü



**T.C.**  
**ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜNE**  
**AYDIN**

Bu tezde sunulan tüm bilgi ve sonuçların, bilimsel yöntemlerle yürütülen gerçek deney ve gözlemler çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, çalışmada bana ait olmayan tüm veri, düşünce, sonuç ve bilgilere bilimsel etik kuralların gereği olarak eksiksiz şekilde uygun atıf yaptığımı ve kaynak göstererek belirttiğimi beyan ederim.

29.07.2020

Metin ASLAN



**ÖZET**  
**ÇEŞİTLİ SİSTEMLERİN**  
**ZAMANA BAĞLI SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİNİN**  
**ÇÖZÜMLERİ**

Metin ASLAN

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı  
Tez Danışmanı: Doç. Dr. Haydar UNCU  
2020, 75 sayfa

Bu çalışmanın amacı, açıkça zamana bağlı olan çeşitli Hamiltoniyenler için Schrödinger dalga denkleminin yaklaşık ve tam çözüm yöntemlerinin tanıtılmasıdır. Hamiltoniyeni zamana açıkça bağlı olmayan sistemler için Schrödinger dalga denkleminin çözümlerinin genel bir teorisi vardır. Bu teori sayesinde bu tür tüm sistemler için Schrödinger denkleminin çözümleri bulunabilmekte yani bir an için durum fonksiyonu bilinen bir sistemin daha sonraki bütün zamanlar için durum fonksiyonu belirlenebilmektedir. Fakat Hamiltoniyeni zamana açıkça bağlı olan Hamiltoniyenlerin Schrödinger denkleminin çözümleri için genel bir teori yoktur. Sadece bazı Hamiltoniyen sınıfları için tam çözüm elde edilebilirken diğer bazı Hamiltoniyenler içinse yaklaşık çözüm yöntemleri geliştirilmiştir. Bu tezde, ilk olarak yaklaşık yöntemlerini tanıtip ardından tam çözümü olan birkaç durumu ele alınmıştır: Kısa erimli zamana bağlı Hamiltoniyen grupları için integral dönüşümlerini, sabit hızla hareket eden sistemler için Galilei koordinat dönüşümlerini, zamana bağlı manyetik alanlar altında evrilen spin (1/2) sistemi için ise invaryant işlemci yöntemini kullanarak tam çözümler elde edilmiştir.

**Anahtar Sözcükler:** Zamana Açıkça Bağlı Hamiltoniyenler, Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi, İntegral Dönüşümleri, İnvaryant Matrix Yöntemi





## ABSTRACT

### Solutions of Time-Dependent Schrödinger Equations for Various Systems

Metin ASLAN

M.Sc. Thesis, Department of Physics  
Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Haydar UNCU  
2020, 75 pages

The aim of this study is to introduce approximate and exact solution methods of the Schrödinger wave equation for several explicitly time explicitly dependent Hamiltonians. There is a general theory for the solutions of the Schrödinger wave equation for systems that has time independent Hamiltonians. Thanks to this theory, solutions of the Schrödinger equation can be found for all such systems, that is the state function can be determined for all the times for the systems whose state function is known for an instant. However, there is no general theory for the solutions of the Schrödinger equation for the explicitly time dependent Hamiltonians. While an exact solution can be obtained for some Hamiltonian classes, approximate solutions have been developed for several other Hamiltonians. In this thesis, first of all, approximate solution methods are introduced and then several exact solution methods will be considered: The exact solutions are obtained by using the integral transform methods for short-ranged time dependent Hamiltonians, Galilei coordinate transformation for systems moving with a constant velocity and the invariant matrix method for spin (1/2) systems evolving under time dependent magnetic fields.

**Key Words:** Explicitly Time-Dependent Hamiltonians, Time Dependent Schrödinger Equation, Integral Transforms, Invariant Matrix Method



## ÖNSÖZ

Yüksek lisans eğitim hayatımın her aşamasında bana yol gösteren, destek ve anlayışını esirgemeyen danışman hocam Sayın Doç. Dr. Haydar UNCU'ya sonsuz saygı ve teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca yüksek lisans eğitim hayatım da desteklerini esirgemeyen Sayın Dr. Öğr. Üyesi Cenk AKYÜZ'e ve Sayın Dr. Öğr. Üyesi Nuray HORASAN'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım. Eğitim hayatımın her aşamasında yanımda olan aileme ve arkadaşlarıma teşekkür ve sevgilerimi sunarım.

Metin ASLAN



## İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY SAYFASI . . . . .	iii
BİLİMSEL ETİK BİLDİRİM SAYFASI . . . . .	v
ÖZET . . . . .	vii
ABSTRACT . . . . .	ix
ÖNSÖZ . . . . .	xi
SİMGELER DİZİNİ . . . . .	xv
ŞEKİLLER DİZİNİ . . . . .	xvii
1. Giriş . . . . .	1
2. Zamana Bağlı Pertürbasyon (Tedirgenme) Teorisi . . . . .	5
2.1. Hidrojen Atomunun Enerji Düzeyleri Arasında Geçiş Olasılıklarının Hesabı . . . . .	10
3. İntegral Dönüşümleri Kullanılarak Zamana Bağlı Hamiltoniyenler İçin Schrödinger Dalga Denkleminin çözümü . . . . .	16
3.1. $\delta$ Potansiyelinin Katsayısı Zamanla Ters Orantılı . . . . .	20
4. Galilei Dönüşümü Kullanılarak Sabit Hızla Giden Dirac $\delta$ Potansiyelinin Bağlı Durum Çözümü . . . . .	23
5. Spin $\frac{1}{2}$ Sistemlerin Zamana Bağlı Manyetik Alanlar İçinde Evrimi . . . . .	26
5.1. Zamana Açıkça Bağlı İnvaryant İşlemciler ve Bu İşlemcilerin Schrödinger Denkleminin Çözümü İle İlişkileri . . . . .	26
5.2. İnvaryant İşlemcinin Spin $\frac{1}{2}$ Sistemlere Uygulanması . . . . .	31
5.3. İnvaryant İşlemci ile Zaman Evriminin Hesaplanması: . . . . .	38
5.4. Bir Spin (1/2) Sisteminin Zamana Bağlı Manyetik Alanlar Altında Zaman Evrimi . . . . .	42
5.4.1. Bir Spin (1/2) Sistemin $B(t) = at^n \hat{e}_x + bt^n \hat{e}_y$ Alanı Altındaki Evrimi . . . . .	42
5.4.2. İnvaryant İşlemci ile Çözülebilir Bir Sistem . . . . .	51
6. SONUÇ . . . . .	63
KAYNAKLAR . . . . .	64
EKLER . . . . .	68
A. Ekler . . . . .	68

1.1. Bazı İntegrallerin Hesaplanması . . . . .	68
1.2. Bromwich İntegrali . . . . .	70
ÖZGEÇMİŞ . . . . .	75



## SİMGELER DİZİNİ

$I$  : İnvaryant İşlemci

$\delta$  : Delta Fonksiyonu







## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 4.1.	Koordinat Sistemi . . . . .	23
Şekil 5.1.	$\gamma B_0 = 0$ , a) $\gamma B_{\perp} = 1/2 \omega$ , b) $\gamma B_{\perp} = \omega$ , c) $\gamma B_{\perp} = 2 \omega$ , d) $\gamma B_{\perp} = 10 \omega$ . . . . .	56
Şekil 5.2.	$\gamma B_{\perp} = \omega$ , a) $\gamma B_0 = 1/10 \omega$ , b) $\gamma B_0 = 9/10 \omega$ , c) $\gamma B_0 = 11/10 \omega$ , d) $\gamma B_0 = 10 \omega$ . . . . .	57
Şekil 5.3.	a) $\gamma B_{\perp} = \omega, \gamma B_0 = 9/10 \omega$ , b) $\gamma B_{\perp} = 2 \omega, \gamma B_0 = 9/10 \omega$ . . . . .	58
Şekil 5.4.	$\gamma B_0 = 0$ , a) $\gamma B_{\perp} = 1/2 \omega$ , b) $\gamma B_{\perp} = 2 \omega$ , c) $\gamma B_{\perp} = 5 \omega$ , . . . . .	60
Şekil 5.5.	$\gamma B_{\perp} = \omega$ , a) $\gamma B_0 = 1/2 \omega$ , b) $\gamma B_0 = 2 \omega$ , c) $\gamma B_0 = 5 \omega$ , d) $\gamma B_0 = 10 \omega$ . . . . .	61
Şekil 5.6.	$\gamma B_{\perp} = \omega$ , a) $\gamma B_0 = 9/10 \omega$ , b) $\gamma B_0 = 11/10 \omega$ . . . . .	62
Şekil A.1.	(1.1.1) integralinin hesabı için seçilen çevrit . . . . .	68
Şekil A.2.	Bromwich integralinin hesabı için kullanılan çevrit. . . . .	71



## 1. Giriş

Yakın bir süre önce yapılan bir çalışmada, Dünyanın önde gelen üniversitelerinin üçüncü ve dördüncü sınıf öğrencilerinin kuantum mekaniğindeki temel kavramları ne kadar iyi anladıkları araştırılmış ve dalga fonksiyonunun zamana bağımlılığı ve zamana bağlı Schrödinger denkleminin konularının öğrencilerin birçoğu tarafından doğru kavranmayan konuları arasında olduğu görülmüştür [1]. Bu yüzden tezimde hem eğitimsel olarak yararlı olabilecek hem de halen aktif olarak çalışılan zamana açıkça bağlı bir grup Hamiltoniyenin Schrödinger denkleminin çözümlerini incelemeye çalıştım.

Doğadaki temel etkileşimlerin tamamının zamandan bağımsız olmasının diğer bir deyişle zamanla değişmemesinin sonucu olarak, birçok kuantum mekaniğine giriş kitabında zamana açıkça bağlı Hamiltoniyenlerin betimlediği etkileşimler yalnızca zamana bağlı tedirgenme (pertürbasyon) teorisi ünitesi ve birkaç alıştırma ele alınmaktadır [2–8]. Buna ek olarak, zamana açıkça bağlı olmayan etkileşimleri betimleyen Hamiltoniyenlerin evrim işlemcisi  $\hat{U}(t)$ nin,  $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ , şeklinde genel bir ifadesinin olması ve bu tarz Hamiltoniyenlerin kuantum mekaniğinin temel birçok özelliğini açıklamada yeterli olması lisans kuantum mekaniği kitaplarını daha çok zamandan bağımsız etkileşimleri incelemeye yöneltmiştir.

Yukarıda belirtildiği gibi doğanın temel etkileşimleri zamanla değişmemektedir. Ancak bunun anlamı tüm etkileşimlerin zamandan bağımsız olduğu ve zamana açıkça bağlı Hamiltoniyenlerin gereksiz olduğu değildir. Zamana bağlı Hamiltoniyenler, Kruskal'ın Hamiltoniyenlerin asimptotik teorisini tanıttığı çalışmasında belirttiği gibi özellikle laboratuvar ortamında oluşturulan birçok süreci betimlemektedirler [9]. Gelişen laboratuvar teknolojileri, Bose-Einstein yoğunluğu, süperiletkenlik, süper akışkanlık gibi maddenin yeni hallerinin gözlemlenmesini sağlamıştır [10]. Maddenin bu yeni hallerinin tümü düşük

sıcaklıklar yani 0 K ne yakın sıcaklıklarda ortaya çıkmaktadır. Bu yüzden çağdaş deneysel fizikte soğutma mekanizmaları önemli bir yer tutmaktadır ve hemen hemen tüm soğutma mekanizmaları zamana açıkça bağlı Hamiltoniyenlerce betimlenen zamanla değişen manyetik alanlar içermektedir [11]. Zamana bağlı Hamiltoniyenlerin bu önemli uygulamasının dışında başka birçok etkileşme de zamana bağlı potansiyeller ile betimlenmektedir. Metal yüzeylerden fotoelektronların yayılımını [12, 13], hızlandırıcılardan yayılan yüklü parçacık demetlerini [14] ve zamana bağlı alanların etkisi altındaki atomların elektronik yapısını [15] betimleyen modeller bunlara örnek olarak verilebilir. Zamana bağlı Hamiltoniyenlerden yararlanan diğer bir model topolojik yalıtkanları betimlemek için kullanılan Floquet sistemleridir [16, 17]. Ayrıca, zamana bağlı manyetik alanların etkisi altındaki iki spin 1/2 sistemin dolaşıklıklarının zamanla değişiminin incelenmesi kuantum hesaplama ve bilgi teorisinde uygulamaları olabilecek ilginç özellikler göstermektedir [18]. Bu uygulamalar zamana bağlı Hamiltoniyenlerin birçok fiziksel süreci betimlemede kullanışlı olduğunu kanıtlamaktadır. Bu nedenle bu tarz Hamiltoniyenlerin Schrödinger denklemi çözümlerini matematiksel olarak incelemek de önemlidir ve literatürde bu konuda birçok çalışma yapılmıştır. Literatürdeki matematiksel çalışmalar genellikle zamana açıkça bağlı Hamiltoniyenlerin belli bazı sınıfları için Schrödinger denkleminin analitik çözümlerinin bulunmasına odaklanmıştır ve bu konuda verilmiş tezleri de içeren büyük bir literatür vardır [19–21]. Bu literatür içinde diğer birçok çalışmaya ilham kaynağı olanlarını vurgulamak yararlı olacaktır. Kruskal'ın "Hamiltoniyenler ve tüm çözümleri neredeyse periyodik olan diğer sistemlerin asimptotik teorisi (asymptotic theory of Hamiltonians and other systems with all solutions nearly periodic)" adlı makalesi birçok başka araştırmaya da yol açmış öncü bir çalışmadır [9]. Lewis ile Riesenfeld' in geliştirdiği zamana açıkça bağlı Hamiltoniyenlerin belli bir kısmı için Schrödinger denkleminin analitik çözümünü elde etmeye yarayan invaryant işlemci yöntemi de birçok

çalışmaya motivasyon oluşturmuştur [22, 23]. Malkin-Manko-Trifonov yaklaşımı [24–26] ve Wei-Norman cebirsel yöntemi de [27] zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümlerinin karmaşık değerli klasik denklemlerin çözümü cinsinden elde edilmesini sağlamaktadır. Bunlara ek olarak vurgulanmaya değer bir başka çalışma da zamana bağlı Hamiltoniyenleri ortalama etkin (effective) zamandan bağımsız bir Hamiltoniyenle temsil ederek zamana bağlı alanların etkisi altındaki spin bağıllığını betimleyen ortalama Hamilton teorisidir [28]. Bu teori elektron paramanyetik rezonans (EPR), nükleer manyetik rezonans (NMR), nükleer kuadratik rezonans (NQR) spektroskopisi, magnetik rezonans görüntüleme alanlarında birçok fenomeni modelleme de kullanılmaktadır [28].

İki boyutlu spin 1/2 sistemleri kuantum mekaniğindeki en temel ve kolaylıkla çözülebilen sistemleri oluştursa da, kuantum mekaniğinin hem zamana bağlı, hem de zamandan bağımsız birçok temel özelliğini açıklamada kullanılabilir. Literatüre Ramsey' in salınan alan yöntemi olarak geçen, zamana bağlı manyetik alanların etkisi altında evrilen spin 1/2 sistemleri kullanarak kuantum durumları arasında geçiş olasılıklarının deneysel olarak test edilmesini olanaklı kılan deney bunun en bilinen örneğini teşkil eder [29–31]. Ayrıca spin 1/2 sistemlerin zamana bağlı manyetik alanlar etkisi altındaki evrimi incelenerek Berry fazı ve Aharanov-Anandan fazı gibi geometrik fazlar kolaylıkla anlaşılabilir [31]. Bu yüzden, ilk olarak Lewis tarafından zamana bağlı harmonik salıncı Hamiltoniyenlerinin etkisi altındaki sistemlerin hem klasik hem de kuantum mekaniksel çözümlerini elde etmek için geliştirilen invaryant işlemci yönteminin [22, 23] temel özelliklerinin anlaşılmasında da spin 1/2 sistemlerinin iyi bir araç olacağını düşünüyorum. Tezin en özgün kısmının invaryant işlemci yönteminin zamana bağlı spin 1/2 sistemlere uygulandığı bölüm olduğu söylenebilir.

Tezin ikinci kısmında pertürbasyon teorisinden bahsedilmiştir. Ve daha sonra *Hidrojen Atomu Enerji Düzeyleri Arasında Işımalı Geçiş Hızlarının*

*Hesabı* zamana baęlı pertürbasyon teorisi ile çözülmüştür. Tezin üçüncü kısmında Hamiltoniyeni zamana baęlı olan verili durumlar çözümleri için integral dönüşümleri yönteminden bahsedilmiştir. Daha sonra kısa erimli  $\delta$  potansiyelinin çözümleri yapılmıştır. Tezin dördüncü kısmında Galilei dönüşümleri metodundan bahsedilmiştir. Daha sonra sabir hızla giden  $\delta$  potansiyelinin çözümleri yapılmıştır. Tezin beşinci kısmında İnvaryant işlemci metodundan bahsedilmiştir. Daha sonra *Zamana Baęlı Manyetik Alan Altında Spin (1/2) Sisteminin Zaman Evrimi* nin İnvaryant işlemci ile analitik çözümleri yapılmıştır. Bu tezde yapılan bütün hesaplamalar kuantum mekaniğinin Schrödinger çerçevesinde yapılmıştır.

## 2. Zamana Bağlı Pertürbasyon (Tedirgenme) Teorisi

Bu çalışmada ilk olarak zamana açıkça bağlı Hamiltoniyenlerin Schrödinger denkleminin yaklaşık çözümü için geliştirilen pertürbasyon teorisinden bahsedilecektir. Bu konu birçok kitapta anlatılmaktadır [2, 3], ancak tezin bütünlüğü açısından bu tezde de kısaca tanıtılacaktır.

Zamana açıkça bağlı

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (2.0.1)$$

şeklinde verili bir Hamiltoniyenin çözümünü aradığımızı varsayalım. Bu denklemde  $\hat{H}_0$ ' ın zamandan bağımsız, çözülebilir bir Hamiltoniyen olduğunu yani  $\hat{H}_0$ ' ın özdeğer ve özvektörlerinin (özfonksiyon) bilindiğini varsayıyoruz. Yani  $\hat{H}_0$  Hamiltoniyeni için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi;

$$\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (2.0.2)$$

aracılığıyla,  $\hat{H}_0$ ' ın  $E_n$  özdeğerlerinin ve  $|n\rangle$  özvektörlerinin bulunabildiğini kabul ediyoruz. Bu vektörlerin herbirinin zamanla değişiminin

$$|\Psi_0(t)\rangle = \sum a_n^{(0)} e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle \quad (2.0.3)$$

olduğu zamana açıkça bağlı olmayan Hamiltoniyenlerin genel teorisinden bilinmektedir [2]. (2.0.1) denklemindeki  $\hat{H}_0$  Hamiltoniyenin çözümleri bilindiğinden, bu denklemdeki  $\hat{V}(t)$  terimi sistemin tedirgenme terimi olarak adlandırılır. Pertürbasyon teorisinde amaç  $\hat{H}_0$  Hamiltoniyenin özdeğer ve özvektörleri aracılığıyla

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (2.0.4)$$

denklemine yaklaşık bir çözüm bulmaktır. Bu yöntemin geçerli olabilmesi için (2.0.1) denklemindeki  $\hat{V}(t)$  teriminin durumların zaman evrimine etkisi  $\hat{H}_0$  teriminin etkisine göre çok küçük olmalıdır. Bu koşulun sağlanması için gerekli

eşitsizlik, yöntemle ilgili teori tanıtılıp bazı nicel eşitlikler elde edildikten sonra verilecektir.

Pertürbasyon teorisinde (2.0.3) denkleminin yaklaşık çözümü aranırken daha genel bir Hamiltoniyenin  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t)$  etkisi altında evrimleşen durumlar incelenir. Buradan elde edilen sonuçlarda  $\lambda = 1$  alınarak (2.0.3) denklemi için aranan yaklaşık çözümler elde edilir. Zamana bağlı etkileşmenin başlatıldığı ana genellikten hiç birşey kaybetmeden  $t_0 = 0$  anı diyebiliriz. O halde etkileşme terimini  $t < 0$  için 0,  $t > 0$  için  $\hat{V}(t)$  şeklinde yazabiliriz.

Zamana açıkça bağlı bir Hamiltoniyenin betimlediği bir sistem incelendiğinden, amacımız verili bir başlangıç durumunun  $|\Psi(0)\rangle$  in zamanla nasıl evrileceğini bulmak yani  $t > 0$  için  $|\Psi(t)\rangle$  yi bulmaktır. Kuantum mekaniğinin temel kabullerinden birine göre, bir sistemin durumları matematiksel olarak Hilbert uzayındaki vektörlerle temsil edilirler. Bu yüzden  $|\Psi(t)\rangle$  vektörü de zamanla Hilbert uzayı içinde evrimleşir.  $\hat{H}_0$ , Hilbert uzayına etki eden kendine eşlenik bir işlemci; Hilbert uzayı da tam bir vektör uzayı olduğundan,  $|\Psi(t)\rangle$  her  $t$  anı için,  $\hat{H}_0$  Hamiltoniyeninin özvektörleri cinsinden açılabilir.  $|\Psi(t)\rangle$  zamana bağlı olduğundan açılım katsayıları zamana bağlı olmak zorundadır. Bunu dikkate alarak  $|\Psi(t)\rangle$  yi

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \tilde{a}_n(t) |n\rangle \quad (2.0.5)$$

şeklinde yazabiliriz. Bu denklemde  $\tilde{a}_n(t)$  pertürbasyon teorisi aracılığıyla bulmaya çalıştığımız açılım katsayılarını göstermektedir.  $\hat{H}_0$  in özvektörlerinin  $|n\rangle = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$  şeklinde evrimleşmesinden esinlenerek, hesaplarda kolaylık sağlamak amacıyla  $\tilde{a}_n(t) = a_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$  şeklinde seçebiliriz. Bu seçim aracılığıyla;

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle \quad (2.0.6)$$

şeklinde yazılabilir.  $t > 0$  için sistemin evrimini belirleyen Hamiltoniyen,  $\hat{H}(t)$  olduğundan yukarıda belirtilen açılımı (2.0.4) ile verilen zamana bağlı Schrödinger



denklemine koyarak  $a_n(t)$  katsayıları için

$$\sum_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \left( i\hbar \dot{a}_n - \lambda a_n \hat{V} \right) |n\rangle = 0 \quad (2.0.7)$$

eşitliği elde edilir. Bu denklemde  $\dot{a}_n = \frac{da_n}{dt}$  olarak tanımlanmıştır . Bu eşitliğin her iki tarafının da  $H_0$  Hamiltoniyeninin  $k$  özvektörü  $\langle k|$  ile iç çarpımı alınarak;

$$\dot{a}_k = \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n \langle k|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{kn}t} a_n \quad (2.0.8)$$

denklemini elde edilir. Burada  $\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$  şeklindedir. Bu ifadeye gelene dek hiç bir yaklaşıklık yapılmamış yalnızca bazı tanımlamalar yapılarak Schrödinger denklemini aracılığıyla tanımlanan değişkenler için yeni eşitlikler elde edilmiştir.

Etkileşimleri zamana bağlı sistemler için Schrödinger denkleminin tam çözümünü bulmak her zaman mümkün olmayabilir. Bu durumlarda yaklaşık bir çözüm aranır. Tedirgenme terimi  $V(\hat{t})$  nin küçük olduğu durumlarda kullanılan yaklaşım yöntemi; pertürbasyon açılımı da olarak adlandırılan  $a_n(t)$  katsayılarının yardımcı değişken  $\lambda$  cinsinden bir seri açılımını yaklaşık olarak bulmaya çalışmaktır.

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots \quad (2.0.9)$$

Tedirgenmenin  $t = 0$  anında başladığını kabul etmiştik. Bunun sonucunda  $\lambda = 0$  için

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) \Rightarrow a_n(0) = a_n^{(0)}(0) \quad (2.0.10)$$

olur. Tam  $t = 0$  anında,  $\hat{H}(t)$  Hamiltoniyeni,  $\hat{H}_0$  Hamiltoniyenine eşit olduğundan, bu an için (2.0.6) denklemde verilen açılım, başlangıç durum fonksiyonunun ( $|\Psi(0)\rangle$ ),  $\hat{H}_0$  Hamiltoniyeninin öz durumları cinsinden açılımına indirgenir:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n a_n(0) |n\rangle = \sum_n a_n^{(0)} |n\rangle. \quad (2.0.11)$$

Diğer bir deyişle  $\lambda = 0$  için, (2.0.9) denklemi  $a_n(t) = a_n^{(0)}(0)$  verdiğinden, (2.0.6) açılımı bir başlangıç durumunun  $\hat{H}_0$  Hamiltoniyeni altındaki zamanla evrimini verecektir.

Pertürbasyon teorisine göre  $t = 0$  anından sonra  $\hat{H}(t)$  Hamiltoniyeni altında evrilen bir başlangıç durumunun ifadesini yaklaşıkça bulabilmek için (2.0.9) denkleminde  $\lambda$  nın artan üslerinin katsayılarının hesaplanması gerekir [2]. Birinci derece düzeltmeleri bulmak amacıyla (2.0.9) kabulünü (2.0.8) denkleminde yerine koyup tedirgenme açılımında  $\lambda$  nın eşit üslerini birbirine eşitleyelim:

$$\begin{aligned} & \dot{a}_k^{(0)}(t) + \lambda \dot{a}_k^{(1)}(t) + \lambda^2 \dot{a}_k^{(2)} \\ &= \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n \langle k|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{kn}t} \left( a_n^{(0)}(t) + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots \right). \end{aligned} \quad (2.0.12)$$

Böylece, denklemin her iki tarafın  $\lambda^0$ lı terimlerinin eşitlenmesinden

$$\dot{a}_k^{(0)}(t) = 0 \quad a_k(t) = a_k^{(0)} \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.0.13)$$

$\lambda^1$ li terimlerinin eşitlenmesinden

$$\dot{a}_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \langle k|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{kn}t} a_n^{(0)} \quad (2.0.14)$$

bulunur. Buradan ilk "düzeltme" terimi

$$a_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n^{(0)} \int_0^t \langle k|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{kn}t'} dt' \quad (2.0.15)$$

şeklinde bulunur. Bu sonuç (2.0.9) denkleminde yerine konarak birinci dereceye kadar yaklaşık çözüm elde edilmiş olur:

$$a_k(t) = a_k(0) + \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n a_n^{(0)} \int_0^t \langle k|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{kn}t'} dt'. \quad (2.0.16)$$

Benzer şekilde  $\lambda^2$  için

$$\dot{a}_k^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \langle k|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{kn}t} a_n^{(1)}(t) \quad (2.0.17)$$

elde edilir. Bu ifadede  $a_n^{(1)}(t)$  katsayıları (2.0.16) denklemi aracılığıyla bulunduğu için  $a_k^{(2)}(t)$  katsayıları da hesaplanabilir:

$$\begin{aligned} \dot{a}_k^{(2)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \sum_n \langle k|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{kn}t} \left( \sum_m \int_0^t \langle m|\hat{V}(t)|n\rangle e^{i\omega_{mn}t'} \right) \Rightarrow \\ a_k^{(2)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \sum_n \sum_m \int_0^t \int_0^{t'} \langle k|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{kn}t'} \langle m|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{mn}t''} dt'' dt' \end{aligned} \quad (2.0.18)$$

Bu şekilde devam edilerek daha üst düzey pertürbasyon terimleri de bulunabilir.

Hamiltoniyenin, çözülebilir bir Hamiltoniyene belli bir andan sonra "küçük" bir tedirgenmenin eklendiği bu tarz problemlerde, başlangıç durumu genellikle  $H_0$  Hamiltoniyenin öz durumlarından biridir (ya da biri alınır) çünkü  $t < 0$  için sistemi betimleyen Hamiltoniyen  $H_0$  Hamiltoniyendir. O halde başlangıç durumunun  $\hat{H}_0$  Hamiltoniyenin öz durumlarından biri  $|l\rangle$  olduğunda zaman evrimini nasıl olduğunu inceleyelim. Bu seçim için;

$$a_n(0) = \delta_{ln} \quad (2.0.19)$$

olacaktır. O halde ilk düzeltme terimi

$$a_k^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} a_l^{(0)} \int_0^t \langle k|\hat{V}|l\rangle e^{i\omega_{kl}t'} dt' \quad (2.0.20)$$

şeklinde bulunur. Buradan birinci dereceye kadar düzeltme

$$a_k^{(1)} = \delta_{kl} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle k|\hat{V}|l\rangle e^{i\omega_{kl}t'} dt' \quad (2.0.21)$$

biçiminde elde edilir. O halde sistemin ilk durumu  $\hat{H}_0$  ın bir öz durumu olan  $|l\rangle$  ise bir  $t$  anında sistemin gene  $\hat{H}_0$  ın öz durumu olan bir  $|s\rangle$  durumunda bulunmasının genliği  $|l\rangle \neq |s\rangle$  için birinci derece pertürbasyona kadar

$$\langle l|s\rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle l|\hat{V}(t')|s\rangle e^{i\omega_{ls}t'} dt' \quad (2.0.22)$$

bulunur. Buradan bir  $|l\rangle$  durumunda başlayan sistemin bir  $t$  anında  $|s\rangle$  durumunda bulunma olasılığı

$$\begin{aligned} |\langle l|s\rangle|^2 &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \langle l|\hat{V}(t')|s\rangle e^{i\omega_{ls}t'} dt' \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \int_0^t \langle l|\hat{V}(t')|s\rangle \langle s|\hat{V}(t'')|l\rangle e^{i[\omega_{ls}(t'-t'')]} dt' dt'' \end{aligned} \quad (2.0.23)$$

denklemleri aracılığıyla bulunur.

Bu bölümü bitirmeden önce daha önce bahsettiğimiz tedirgenme teorisinin Hangi koşulda geçerli olacağı sorusunu inceleyelim. Tedirgenme teorisinin geçerli

olabilmesi için (2.0.9) açılımındaki terimler gitgide küçülmelidir. Örneğin  $a_k^{(1)} \ll a_k^{(0)}$  olmalıdır. (2.0.16) teriminde  $a_k^{(1)}$  açık ifadesi,  $a_n^{(0)}$  açılım katsayıları cinsinde verilmiştir. Buradan  $a_k^{(1)} \ll a_k^{(0)}$  olma şartının

$$\frac{1}{\hbar} |\langle k | \hat{V} | n \rangle| \ll 1 \quad (2.0.24)$$

olduğunu görmek kolaydır. Yani tedarik teorinin geçerli olabilmesi için (2.0.24) şartı sağlanmalıdır.

## 2.1. Hidrojen Atomunun Enerji Düzeyleri Arasında Geçiş Olasılıklarının Hesabı

Bir hidrojen atomu, bir elektromanyetik alanla etkileştiğinde ışımalı geçişler yapar. Burada sistemin Hamiltoniyeni

$$\hat{H} = \hat{H}_{kin} + \hat{V} \quad (2.1.25)$$

şekindedir. Elektromanyetik alanlar ışın içine girdiği zaman momentum işlemcisi terimi ( $\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$  işlemcisi)

$$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \left( \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A} \right)$$

biçiminde dönüşümüne uğradığından [2],

$$p \rightarrow \left( p - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \rightarrow \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) = \frac{\hbar}{i} \left( \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A} \right)$$

Hamiltoniyenin kinetik enerji terimi  $\hat{H}_{kin}$ ;

$$\frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar}{i} \left( \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A} \right) \right]^2 = \hat{H}_{kin} \quad (2.1.26)$$

şeklini alır. Bu durumda (2.1.25) denkleminde verilen Hamiltoniyeni  $|\Psi(t)\rangle$  dalga fonksiyonunu uyguladığımızda;

$$\begin{aligned} \hat{H} |\Psi(t)\rangle &= \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \left[ \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A} \right] \cdot \frac{\hbar}{i} \left[ \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A} \right] |\Psi(t)\rangle \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left[ \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A} \right] \cdot \left[ \vec{\nabla} |\Psi(t)\rangle - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A} |\Psi(t)\rangle \right] \end{aligned} \quad (2.1.27)$$

elde edilir. Bu ifade düzenlenerek;

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Psi(t)\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \nabla^2 |\Psi(t)\rangle - \frac{iq}{\hbar c} |\Psi(t)\rangle \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2iq}{\hbar c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} |\Psi(t)\rangle - \frac{q^2}{\hbar^2 c^2} A^2 |\Psi(t)\rangle \right] \end{aligned} \quad (2.1.28)$$

şeklinde yazılabilir. Bu noktada Coulomb ayarı

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{k} \perp \vec{e}$$

kullanılarak;

$$\hat{H}|\Psi(t)\rangle = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{i\hbar q}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + \frac{q^2}{2mc^2} A^2 \right] |\Psi(t)\rangle \quad (2.1.29)$$

ifadesi elde edilir [2].. Kullanılan elektromanyetik alan zayıf ise  $\frac{q^2}{2mc^2} A^2$  terimi ihmal edilebilir. Bu durumda  $\hat{H}$  Hamiltoniyeni

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{i\hbar q}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \quad (2.1.30)$$

şeklinindedir. Yani  $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = \hat{H}_0$  olarak seçilirse, diğer terim;

$$\hat{V}(t) = \frac{i\hbar q}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \quad (2.1.31)$$

tedirgenme terimi olarak alınabilir. Hidrojen atomuna kutuplanmış (polarize), zayıf ve tek renkli bir ışık (düzlem elektromanyetik dalga) uyguladığımızı varsayalım. Bu durumda vektör potansiyel

$$\vec{A} = \hat{e} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (2.1.32)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada  $\omega$  dalganın açısal frekansını,  $\vec{k}$  dalganın yayılma yönünü ve  $\vec{e}$  dalganın yayılma yönüne dikey düzlem içindeki kutuplanma vektörünü göstermektedir. Bu noktada dikkat edilmesi gereken nokta (2.1.30) denklemindeki Hamiltoniyen elde edilirken Coulomb ayarının kullanılmış olmasıdır. Bu yüzden (2.1.32) denkleminde verilen vektör potansiyelin Coulomb ayar koşulunu sağlayıp sağlamadığı kontrol edilmelidir:

$$\vec{A} = \hat{e}(kx\hat{x} + ky\hat{y} + kz\hat{z} - \omega t) \quad (2.1.33)$$

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} \cdot \vec{A} &= \vec{\nabla}(\cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) + (\cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))(\vec{\nabla} \cdot \hat{e}) \\
&= -\sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \left[ (k\hat{i} + k\hat{j} + k\hat{k}) \cdot \hat{e} \right] \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{2.1.34}$$

Bu sonuç elde edilirken elektromanyetik dalgalarda kutuplanma vektörü  $\hat{e}$  ve dalga vektörü  $\vec{k}$  nın birbirine dik olmaları kullanılmıştır. Coulomb ayar koşulunun sağlandığı açıkça görülür. Elektrik alan vektörü;

$$\vec{E} = \vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{\omega}{c} \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \hat{e} \tag{2.1.35}$$

denklemleri aracılığı ile elde edilir [48]. (2.1.32) denkleminde verilen vektör potansiyel ifadesi kullanılarak, boş (yüksüz) uzayda elektriksel potansiyel  $\Phi$  nin sıfır olmasından dolayı elektrik alan vektörü  $\|\vec{k}\| = \frac{\omega}{c}$  eşitliği kullanılarak

$$\vec{E} = \|\vec{k}\| \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \hat{e} \tag{2.1.36}$$

şeklinde elde edilirken manyetik alan vektörü;  $\|\vec{k}\| = \frac{\omega}{c}$  eşitliği

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = -\vec{k} \times \hat{e} \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \tag{2.1.37}$$

olarak bulunur. Elektrik ve manyetik alan vektörleri

$$\vec{k} \perp \vec{E} \perp \vec{B} \quad \|\vec{E}\| = \|\vec{B}\|$$

koşulunu sağladığı (2.1.36) ve (2.1.37) denklemlerinden görülmektedir. Elektromanyetik dalgalarda enerjinin yayılma yönünü veren Poynting vektörü ;

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \vec{E} \times \vec{B} \tag{2.1.38}$$

şeklinde tanımlanmıştır [2]. Poynting vektörünün normu, elektromanyetik dalganın iletildiği enerji yoğunluğunu verir. Enerji yoğunluğunun bir periyot üzerindeki zaman ortalaması dalganın şiddetini verir:

$$\begin{aligned}
I(\omega) &= \langle \|\vec{S}\| \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \|\vec{S}\| dt \\
&= \frac{1}{T} \frac{\omega}{4\pi} e^2 \|\vec{k}\| \int_0^T \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) dt \\
&= \frac{\omega^2 \|\vec{e}\|^2}{8\pi c}.
\end{aligned} \tag{2.1.39}$$

Bu ifadeyi (2.1.31) tedirgenme terimini daha rahat hesap yapabileceğimiz bir şekilde yazmak için kullanacağız.  $\vec{A}$  vektörü kutuplanma yönünde olduğundan,  $\vec{\nabla}$  vektörünün kutuplanma yönündeki bileşeni gereklidir:

$$\frac{\vec{e}}{\|e\|} \cdot \vec{\nabla} = \nabla_e \quad (2.1.40)$$

Ayrıca (2.1.39) denklemi kullanarak kutuplanma yönündeki birim vektör

$$\hat{e} = \sqrt{\frac{8\pi c I(\omega)}{\omega^2}} \frac{\vec{e}}{\|e\|} \quad (2.1.41)$$

şeklinde yazılabilir. (2.1.39) eşitliğinden de görülebileceği üzere bu denklem  $\hat{e}$  birim vektörünü "1" sayısı ile çarpmaya benzetmektedir. Bunu yapmamızın nedeni, tedirgenme terimini elektromanyetik dalganın şiddeti cinsinden yazıldığında hem daha rahat yaklaşım yapılabilir, hem de deneyle daha rahat karşılaştırılabilir bir biçimde yazılabilmesidir. (2.1.40) ve (2.1.41) denklemleri kullanılarak, (2.1.31) denklemindeki tedirgenme terimi

$$\hat{V}(t) = \frac{i\hbar q}{mc} \sqrt{\frac{8\pi c I(\omega)}{\omega^2}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \frac{\vec{e}}{\|e\|} \cdot \vec{\nabla} \quad (2.1.42)$$

biçiminde yazılabilir. Bu eşitlikteki  $\cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$  fonksiyonunun exponansiyel fonksiyonlar cinsinde açılımı kullanılarak bu terim

$$\hat{V}(t) = e^{i\omega t} \frac{\hbar q}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c I(\omega)}{\omega^2}} (e^{-i\vec{k}\vec{r}} i\nabla_e) + e^{-i\omega t} \frac{\hbar q}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c I(\omega)}{\omega^2}} (e^{i\vec{k}\vec{r}} i\nabla_e) \quad (2.1.43)$$

biçiminde ifade edilebilir. Pertürbasyon terimini bu şekilde yazmadaki amaç hidrojen atomu Hamiltoniyenini  $\hat{H}_0$ ' ın özvektörleri ile daha kolay hesap yapılabilecek bir biçime getirmektir.

Şimdi birinci dereceden pertürbasyon teorisi kullanarak hidrojen atomunun üzerine elektromanyetik dalga gönderildiğinde atomun enerji düzeyleri arasındaki geçiş genlik ve olasılıklarını hesaplayalım. Enerji seviyeleri arasındaki farkın  $\hbar$  ye bölümünü  $\frac{E_{n'} - E_n}{\hbar} = \omega_0$  olarak tanımlayalım. Pertürbasyon teorisinden  $\hat{V}(t')$

pertürbasyonu altındaki bir sistemin geçiş genliğini (elektromanyetik dalganın  $t \geq 0$  durumunda atoma uygulandığını varsayıyoruz)

$$a_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle k | \hat{V}'(t) | n \rangle e^{i\omega_{kn}t'} dt'$$

bulmuştuk.

$$\langle k | = \langle n'l'm' |$$

$$| n \rangle = | nlm \rangle$$

şeklinde tanımlandığında birinci dereceden pertürbasyon teorisindeki geçiş genliği;

$$\begin{aligned} a_{n \rightarrow n'}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle n'l'm' | \frac{\hbar q}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c I(\omega)}{\omega^2}} (e^{-i\vec{k}\vec{r}} i\nabla_e) e^{i\omega t'} \\ &+ \frac{\hbar q}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c I(\omega)}{\omega^2}} (e^{i\vec{k}\vec{r}} i\nabla_e) e^{-i\omega t'} | nlm \rangle e^{i\omega_0 t'} dt' \\ &= \frac{q}{imc} \sqrt{\frac{2\pi c I(\omega)}{\omega^2}} \langle n'l'm' | (e^{-i\vec{k}\vec{r}} i\nabla_e) | nlm \rangle \int_0^t e^{i(\omega_0 + \omega)t'} dt' \\ &+ \frac{q}{imc} \sqrt{\frac{2\pi c I(\omega)}{\omega^2}} \langle n'l'm' | (e^{i\vec{k}\vec{r}} i\nabla_e) | nlm \rangle \int_0^t e^{i(\omega_0 - \omega)t'} dt' \quad (2.1.44) \end{aligned}$$

şeklinde bulunur. Burada ilk terim uyarılmış ışığa, ikinci terim rezonans soğurumuna karşı gelmektedir [2]. Rezonans soğurumu olasılığı ;

$$P_{n \rightarrow n'}(t, \omega) = \frac{q^2}{4m^2 c^2} \frac{8\pi c I(\omega)}{\omega^2} | \langle n'l'm' | (e^{-i\vec{k}\vec{r}} i\nabla_e) | nlm \rangle |^2 \frac{\sin^2(\frac{\omega_0 - \omega}{2} t)}{(\frac{\omega_0 - \omega}{2})^2} \quad (2.1.45)$$

ve uyarılmış ışınım olasılığı ise

$$P_{n \rightarrow n'}(t, \omega) = \frac{q^2}{4m^2 c^2} \frac{8\pi c I(\omega)}{\omega^2} | \langle n'l'm' | (e^{i\vec{k}\vec{r}} i\nabla_e) | nlm \rangle |^2 \frac{\sin^2(\frac{\omega_0 + \omega}{2} t)}{(\frac{\omega_0 + \omega}{2})^2} \quad (2.1.46)$$

olarak elde edilir. Son durumun enerji düzeyine tüm diğer enerji düzeylerinden geçişler olabilir. Bu nedenle toplam geçiş olasılığı, yukarıdaki ifadenin  $\omega$  frekansı üzerinden integre edilmesiyle hesaplanır. Bu integrali alabilmek için elektromanyetik dalga şiddetinin frekans dağılımı, yani  $I(\omega)$  fonksiyonunun bilinmesi gerekir. Burada  $I(\omega)$  yı rezonans frekansında tepe yapan dar bir Gauss dağılımı gibi düşünüp

$$I(\omega) \approx I(\omega_0)$$



olarak hesaplara devam edilirse toplam geiş olasılıđı;

$$\begin{aligned}
 P_{n'}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} P_{n \rightarrow n'}(t, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} \\
 &\approx \frac{4\pi^2 q^2}{m^2 c \omega^2} I(\boldsymbol{\omega}) t \left| \langle n' l' m' | (e^{i\vec{k}\vec{r}} i\nabla_e) | n l m \rangle \right|^2 \quad (2.1.47)
 \end{aligned}$$

olarak bulunur.

### 3. İntegral Dönüşümleri Kullanılarak Zamana Bağlı Hamiltoniyenler İçin Schrödinger Dalga Denkleminin çözümü

Zamana açıkça bağlı olan Hamiltoniyenlerin Schrödinger denkleminin çözümleri için genel bir teori yoktur [6]. Bu yüzden her Hamiltoniyene ya da benzer türdeki Hamiltoniyenlere has çözüm yöntemleri aranır. Potansiyel terimleri, katsayıları zamana açıkça bağlı Dirac  $\delta$  potansiyelleri olan Hamiltoniyenler için sıklıkla kullanılan yöntem integral dönüşümleridir [32,33].

Dirac  $\delta$  potansiyelleri genellikle çok kısa erimli etkileşmeleri betimleyen (etkileşmenin menzilinün bir parçacığın de Broglie  $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{mkT}}$  dalga boyundan çok daha az olduğu durumlar) potansiyellerdir. Bu potansiyel için Schrödinger denkleminin çözümünün basitliği, bu potansiyelin eğitimsel olarak sıklıkla kullanılmasına yol açmış olmakla birlikte bu potansiyelden birçok fiziksel sistemi betimlemede de yararlanılmıştır [34].

Bu bölümde tanıtmaya çalışacağımız yöntem [32] çalışmasında kullanılmış olan yöntemdir. Ayrıca, yöntemin uygulamaları tanıtılırken [33] çalışmasından da yararlanılmıştır. Bu bölümde diğer bölümlerden farklı olarak  $\hbar = 2m = 1$  kullanılacaktır. Bu seçimi yapmamızdaki amaç literatürde bu konuda yapılmış çalışmalarla uyumu sağlamaktır.

Potansiyel terimi  $V(x,t) = c(t)\delta(x)$  olan bir Hamiltoniyeni ele alalım. Burada  $c(t)$  zamana bağlı sürekli ve türevlenebilir bir fonksiyonu temsil etmektedir. Bir boyutta bu potansiyelle sahip bir Hamiltoniyen için zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + c(t)\delta(x)\Psi \quad (3.0.1)$$

şeklinindedir. Çözülmesi zor olan bu differansiyel denklem önce Laplace dönüşümü ardından Fourier dönüşümü uygulanarak çözülebilir cebirsel bir denkleme dönüştürülebilir. Şimdi sırasıyla bu adımları uygulayalım. Yazım kolaylığı

bakımından,  $\Psi_t = \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ ,  $\Psi_x = \frac{\partial \Psi}{\partial x}$ ,  $\Psi_{xx} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$  notasyonları kullanıp,  $\hbar = 2m = 1$  seçimleri yapıldığında (3.0.1) denklemi

$$-\Psi_{xx} + c(t)\delta(x)\Psi = i\hbar\Psi_t \quad (3.0.2)$$

halini alır.

İlk olarak (3.0.2) denkleminin zaman değişkenine göre Laplace dönüşümünü alacağız. Fonksiyonların Laplace dönüşümlerini üzerlerine bir çizgi çizerek,

$$\bar{f}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (3.0.3)$$

ya da parantez kullanarak

$$\mathcal{L}\left\{f(t)\right\} = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (3.0.4)$$

göstereceğiz. Şimdi (3.0.2) denkleminin zaman değişkenine göre Laplace dönüşümünü hesaplayalım:

$$\bar{\Psi}_{xx}(x,s) - i\Psi(x,0) + is\bar{\Psi}(x,s) = \delta(x)\mathcal{L}\left\{c(t)\Psi(0,t)\right\} \quad (3.0.5)$$

Bu denklemi elde ederken bir fonksiyonun türevinin Laplace dönüşümünün sağladığı

$$\mathcal{L}\left\{\frac{df(t)}{dt}\right\} = -f(0) + s\bar{f}(s) \quad (3.0.6)$$

eşitliği kullanılmıştır.

Görüldüğü üzere, (3.0.2) denkleminin zaman değişkenine göre Laplace dönüşümünü alarak denklemdeki zaman türevinden kurtulabildik. Ancak (3.0.5) denklemi halen konum değişkeni  $x$  cinsinden differansiyel bir denklemdir. Bu nedenle bu denklemin de  $x$  değişkenine göre Fourier dönüşümünü alacağız. Fonksiyonların Fourier dönüşümlerini üzerlerine " $\hat{\phantom{f}}$ " işareti koyarak göstereceğiz:

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx} dx. \quad (3.0.7)$$

Şimdi (3.0.5) denkleminin Fourier dönüşümünü alalım:

$$-k^2\hat{\Psi}(k,s) - i\hat{\Psi}(k,0) + is\hat{\Psi}(k,s) = \mathcal{L}\left\{c(t)\Psi(0,t)\right\}. \quad (3.0.8)$$

Bu denklemi elde ederken fonksiyonların birinci ve ikinci türevlerinin Fourier dönüşümlerinin sağladığı

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{df(x)}{dx} e^{-ikx} dx = ik\hat{f}(k) \quad (3.0.9)$$

ve

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2f(x)}{dx^2} e^{-ikx} dx = -k^2\hat{f}(k) \quad (3.0.10)$$

eşitliklerini ve Dirac  $\delta$  fonksiyonunun sağladığı

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)f(x)dk = f(a) \quad (3.0.11)$$

denklemini kullandık.

Laplace ve Fourier dönüşümü alındıktan sonra elde edilen (3.0.8) denklemi, (3.0.2) eşitliğinde verilen durum fonksiyonu  $\Psi(x,t)$  nin zaman değişkenine göre Laplace, konum değişkenine göre Fourier dönüşümleri olan  $\hat{\Psi}(k,s)$  fonksiyonu cinsinden cebirsel bir denklemdir ve kolaylıkla çözülebilir:

$$\hat{\Psi}(k,s) = \frac{i\hat{\Psi}(k,0) + \mathcal{L}\left\{c(t)\Psi(0,t)\right\}}{(-k^2 + is)}. \quad (3.0.12)$$

Durum fonksiyonunun integral dönüşümleri olan  $\hat{\Psi}(k,s)$  fonksiyonunu bulduktan sonra yapılması gereken ters dönüşümleri hesaplamaktır. Öncelikle  $\hat{\Psi}(k,s)$ ' nin konum değişkeninin karşılığı olan  $k$  (momentum) değişkenine göre ters Fourier dönüşümünü alalım.

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}(x,s) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \frac{i\hat{\Psi}(k,0) + \mathcal{L}\left\{c(t)\Psi(0,t)\right\}}{(-k^2 + is)} \\ &= i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ikx}\hat{\Psi}(k,0)}{(-k^2 + is)} + \mathcal{L}\left\{c(t)\Psi(0,t)\right\} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ikx}}{(-k^2 + is)} \end{aligned} \quad (3.0.13)$$

Bu denklemde  $\Psi(k,0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx'} \Psi(x',0) dx'$  ifadesini kullanmak ters Fourier dönüşümünü almayı kolaylaştırmaktadır:

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}(x,s) &= i \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-ikx'} \Psi(x',0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ikx}}{(-k^2 + is)} \\ &+ \mathcal{L} \left\{ c(t) \Psi(0,t) \right\} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ikx}}{(-k^2 + is)}. \end{aligned} \quad (3.0.14)$$

Böylece denklemin sağ tarafında her iki terimdeki  $k$  değişkeni üzerinden alınan integral  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ikx}}{(-k^2 + is)}$  integrali olur. Rezidü teoremi yardımıyla bu integral alınarak (bkz. 1.1)

$$\bar{\Psi}(x,s) = \frac{1}{2\sqrt{is}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x',0) e^{i\sqrt{is}|x-x'|} dx' - \frac{ie^{i\sqrt{is}|x|}}{2\sqrt{is}} \mathcal{L} \left\{ c(t) \Psi(0,t) \right\} \quad (3.0.15)$$

bulunur.

Çözümü elde etmek için gerekli son işlem (3.0.15) denkleminde verili olan  $\bar{\Psi}(x,s)$  fonksiyonunun zamana karşık gelen  $s$  değişkenine göre ters Laplace dönüşümünü bulmaktır.  $\bar{\Psi}(x,s)$  fonksiyonunun ters Laplace dönüşümünü bulmak için

$$\bar{g}(s) = \frac{1}{2\sqrt{is}} \exp(i\sqrt{is}x') \quad (3.0.16)$$

fonksiyonunun Bromwich integrali hesaplanmalıdır. Bu integral alınarak (ayrıntılar için ekler kısmının 1.2 bölümüne bakınız) ve Laplace dönüşümü için konvoüsyon kullanılarak [35]

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{it}\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x',0) e^{i\frac{(x-x')^2}{4t}} dx' + \frac{1}{2i\sqrt{it}\pi} \int_0^t \frac{c(t') \Psi(0,t')}{\sqrt{t-t'}} e^{i\frac{x^2}{4(t-t')}} dt' \quad (3.0.17)$$

elde edilir.

(3.0.17) denklemi ile (3.0.2) denkleminin çözümü formal olarak bulunmuş gibi görünmekle birlikte çözüm halen tam olarak elde edilememiştir. Çünkü (3.0.17) denkleminde verilen ifadede de  $\Psi(x,t)$  fonksiyonu,  $\Psi(0,t)$  ye bağlıdır. Ancak

$\Psi(x,t)$  nin genel ifadesi bilinmiyorsa bu fonksiyonun  $x = 0$  alındığındaki ifadesi olan  $\Psi(0,t)$  de bilinmiyor demektir. Bu yüzden çözüm tam olarak elde edilememiştir.  $\Psi(x,t)$  yi tam olarak bulmak için (3.0.17) denkleminde  $x = 0$  alınarak elde edilen

$$\Psi(0,t) = \frac{1}{2\sqrt{it\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x',0) e^{i\frac{(x')^2}{4t}} dx' + \frac{1}{2i\sqrt{i\pi}} \int_0^t \frac{c(t')\Psi(0,t')}{\sqrt{t-t'}} dt' \quad (3.0.18)$$

integral denklemi çözülmelidir. Bu denklem çözülüp,  $\Psi(0,t)$  (3.0.17) denkleminde yerine konursa durum fonksiyonu tüm zamanlar için belirlenerek çözüm elde edilmiş olur. (3.0.18) integral denkleminin çözülebilir olması Dirac  $\delta$  fonksiyonunun katsayısı  $c(t)$  fonksiyonuna bağlıdır. Şimdi (3.0.2) denkleminin analitik çözümünün mümkün olduğu bir örneği inceleyelim.

### 3.1. $\delta$ Potansiyelinin Katsayısı Zamanla Ters Orantılı

Şimdi [33] çalışmasında yer alan, (3.0.1) denklemindeki  $\delta$  potansiyelinin katsayısının,  $\alpha$  bir sabit olmak üzere  $c(t) = \frac{\alpha}{t}$  olduğu örneği inceleyeceğiz. (3.0.15) denkleminde  $c(t)$  için yapılan bu seçim yerine konduğunda

$$\bar{\Psi}(x,s) = \frac{1}{2\sqrt{is}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\sqrt{is}|x-x'|} \Psi(x',0) dx' - \frac{i}{2\sqrt{is}} e^{i\sqrt{is}|x|} \mathcal{L} \left\{ \frac{\alpha}{t} \Psi(0,t) \right\}. \quad (3.1.19)$$

elde edilir. Bu durumda  $\Psi(x,t)$  durum fonksiyonunu, başlangıç durum fonksiyonu  $\Psi(x,0)$  cinsinden veren Green fonksiyonu  $G(x,x',t)$

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x,x',t) \Psi(x,0) dx' \quad (3.1.20)$$

analitik olarak çözülebilmektedir.

Bu çözümü elde ederken (3.0.18) gibi bir integral denklemi çözmek yerine,  $\Psi(x,t)$  nin Laplace dönüşüm fonksiyonu  $\bar{\Psi}(x,s)$  fonksiyonunda,  $x = 0$  alınarak elde edilen fonksiyon  $\bar{\Psi}(0,s)$  nin sağladığı bir differansiyel denklem çözümünden

yararlanacağız. Bu denklemi elde etmek için

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L} \left\{ \frac{1}{t} f(t) \right\} &= \int_0^{\infty} e^{-st} \frac{1}{t} f(t) dt = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) \left( \int_0^{\infty} e^{-s't} ds' \right) dt \\
 &= \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-(s+s')t} f(t) ds' dt \\
 &= \int_0^{\infty} \left( \int_0^{\infty} e^{-(s+s')t} dt \right) ds' = \int_0^{\infty} \bar{f}(s+s') ds' \\
 &= \int_s^{\infty} \mathcal{L} \{ f(t) \} ds'. \tag{3.1.21}
 \end{aligned}$$

eşitliğini kullanacağız [33]. (3.1.19) denkleminde  $x = 0$  seçilip, (3.1.21) denkleminde elde edilen sonuç kullanılarak

$$\bar{\psi}(0, s) = \frac{\alpha}{2i\sqrt{is}} \int_s^{\infty} \bar{\psi}(0, s') ds' + \frac{1}{2\sqrt{is}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\sqrt{is}|x'|} \psi(x', 0) dx'. \tag{3.1.22}$$

elde edilir.

$$u(s) = \int_s^{\infty} \bar{\psi}(0, s') ds', \tag{3.1.23}$$

tanımı yapılırsa (3.1.22) denklemi,  $u(s)$  fonksiyonu cinsinden

$$\bar{\psi}(0, s) = -\frac{\alpha}{2i\sqrt{is}} u(s) + \frac{1}{2\sqrt{is}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{i\sqrt{is}|x'|} \psi(x', 0). \tag{3.1.24}$$

denklemine dönüşür.  $\bar{\psi}(0, s) = -\frac{du(s)}{ds}$  olduğundan bu denklem

$$\frac{du(s)}{ds} + \frac{\alpha}{2i\sqrt{is}} u(s) = -\frac{1}{2\sqrt{is}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{i\sqrt{is}|x'|} \psi(x', 0). \tag{3.1.25}$$

biçiminde birinci dereceden bir differansiyel denklem olarak yazılabilir. Bu denklemin çözümü

$$u(s) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left( \frac{e^{i\sqrt{is}|x'|}}{i\alpha + |x'|} \right) \psi(x', 0). \tag{3.1.26}$$

verir.  $s$  değişkenine göre türev ve  $x'$  değişkenine göre integralin yer değiştirebilmelerinin sonucunda

$$\bar{\psi}(0, s) = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{|x'|}{|x'| + i\alpha} \right) \left( \frac{e^{i\sqrt{is}|x'|}}{2\sqrt{is}} \right) \psi(x', 0) dx'. \tag{3.1.27}$$

bulunur.

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{e^{i\sqrt{is}|x|}}{2\sqrt{is}} \right\} = \frac{1}{\sqrt{\pi it}} e^{\frac{ix^2}{4t}} \quad (3.1.28)$$

denklemleri kullanılarak

$$\psi(0,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi it}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{|x'| e^{i\frac{x'^2}{4t}}}{|x'| + i\alpha} \right) \psi(x',0) dx'. \quad (3.1.29)$$

eşitliği elde edilir.  $\psi(0,t)$  için elde edilen bu ifade,  $\frac{\alpha}{t} \psi(0,t)$  nin Laplace dönüşümünde yerine konarak

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\alpha}{t} \psi(0,t) \right\} = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left( \frac{\alpha e^{i\sqrt{is}|x'|}}{|x'| + i\alpha} \right) \psi(x',0). \quad (3.1.30)$$

elde edilir. Bu sonucu da Eq.(3.1.19) denkleminin sağ tarafının ikinci teriminde yerine koyduğumuzda  $\bar{\psi}(x,s)$  için

$$\bar{\psi}(x,s) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{is}} \left[ e^{i\sqrt{is}|x-x'|} - i\alpha \left( \frac{e^{i\sqrt{is}(|x|+|x'|)}}{|x'| + i\alpha} \right) \right] \psi(x',0) dx'. \quad (3.1.31)$$

ifadesini buluruz. Bu denklemden  $s$  değişkenine göre Green fonksiyonunun

$$\bar{G}(x,x',s) = \frac{1}{2\sqrt{is}} \left[ e^{i\sqrt{is}|x-x'|} - i\alpha \left( \frac{e^{i\sqrt{is}(|x|+|x'|)}}{|x'| + i\alpha} \right) \right]. \quad (3.1.32)$$

olduğu görülmektedir. Bu fonksiyonun ters dönüşümü (3.1.28) denklemleri kullanılarak  $c(t) = \frac{\alpha}{t}$  için alınıp (3.0.1) denklemindeki Hamiltoniyen için iletici (propagator) elde edilir:

$$G(x,x',t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi it}} \left[ \exp \left[ \frac{i(x-x')^2}{4t} \right] - \frac{i\alpha}{|x'| + i\alpha} \exp \left[ i \frac{(|x| + |x'|)^2}{4t} \right] \right]. \quad (3.1.33)$$

İleticinin bu ifadesi kullanılarak durum fonksiyonu için

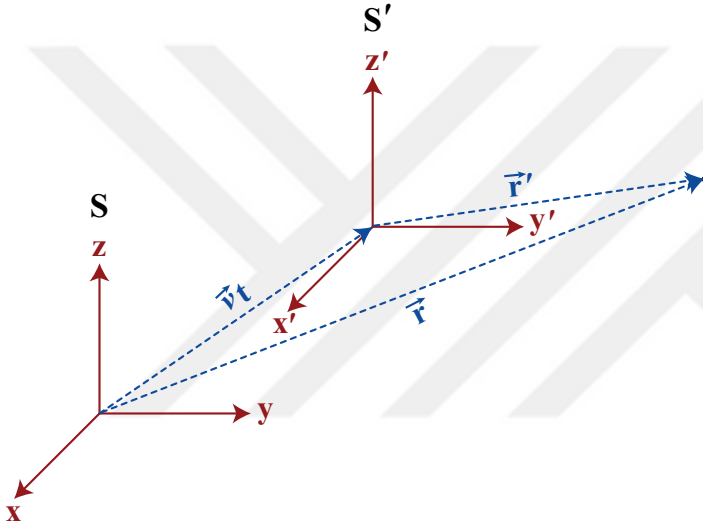
$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ g \frac{1}{\sqrt{4\pi it}} \exp \left[ \frac{i(x-x')^2}{4t} \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{i\alpha}{|x'| + i\alpha} \exp \left[ i \frac{(|x| + |x'|)^2}{4t} \right] \right\} \psi(x',0) dx'. \end{aligned} \quad (3.1.34)$$

ifadesi bulunur.



#### 4. Galilei Dönüşümü Kullanılarak Sabit Hızla Giden Dirac $\delta$ Potansiyelinin Bağlı Durum Çözümü

Bu bölümde sabit hızla giden Dirac  $\delta$  potansiyelinin bağlı durum çözümünü Galilei dönüşümü kullanarak yapacağız. Öncelikle durağan olduğunu kabul ettiğimiz bir



Şekil 4.1. Koordinat Sistemi

S koordinat sistemi için zamana bağlı Schrödinger denklemini yazalım:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)\rangle = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\vec{r}, t) \right] |\Psi(\vec{r}, t)\rangle \quad (4.0.1)$$

Bu denklemi, S koordinat sistemine göre sabit  $\vec{v}$  hızı hareket etmekte olan bir S' sistemindeki koordinatlar cinsinden yazmak için Galilei dönüşümlerini uygulayıp düzenlersek,

$$|\Psi'(\vec{r}', t)\rangle = \exp \left[ -i \frac{m\vec{v} \cdot \vec{r}' + \frac{m \cdot v^2}{2} t}{\hbar} \right] |\Psi(\vec{r}, t)\rangle$$

denklemi [36] ile verilmek üzere Schrödinger denklemi;

$$\frac{i\hbar \partial}{\partial t} |\Psi'(\vec{r}', t)\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 |\Psi'(\vec{r}', t)\rangle + V(\vec{r}', t) |\Psi'(\vec{r}', t)\rangle \quad (4.0.2)$$

şeklinde elde edilir. Bu sayede  $V(\vec{r} - \vec{v}t)$  şeklinde potansiyel terimine sahip Hamiltoniyenler için,  $\vec{v}$  sabit olduğundan  $\vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}t$  Galilei dönüşümü yaparak

potansiyel zamandan bağımsız hale getirilebilir. Böylece  $S'$  koordinat sistemindeki Hamiltoniyen artık açıkça zamana bağlı değildir. Bu sayede çözüm bu sistemde elde edilip, ters Galilei dönüşümü yapılarak  $V(\vec{r} - \vec{v}t)$  potansiyeli için çözüm bulunmuş olur. Şimdi  $\lambda\delta(x - vt)$  potansiyel enerjisine sahip bir sabit hızla hareketeden  $\delta$  fonksiyonunun çözümüne bakalım. İşlem kolaylığı bakımından  $\hbar = m = 1$  olarak alınacaktır. Bu durumda çözümlenmesi gereken Hamiltoniyen

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda\delta(x - vt) \quad (4.0.3)$$

şeklindedir. Burada  $x' = x - vt$  Galilei dönüşümü uygulandığında Hamiltoniyen;

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx'^2} + \lambda\delta(x') \quad (4.0.4)$$

şeklinde elde edilir. Bu Hamiltoniyenin bağıl durum çözümü iyi bilinmektedir [6].

Bu durumun özdeğeri

$$E = -\frac{\lambda^2}{2}$$

olup durum fonksiyonu

$$|\Psi_0(x', t)\rangle = \sqrt{-\lambda} \exp\left[\lambda|x'| + i\frac{\lambda^2}{2}t\right] \quad (4.0.5)$$

şeklindedir [6]. Daha sonra

$$|\Psi(x', t)\rangle \rightarrow |\Psi(x - vt, t')\rangle$$

Galilei dönüşümü uygulandığında durum fonksiyonu;

$$|\Psi(x, t)\rangle = \sqrt{-\lambda} \exp\left[\lambda|x - vt| + i\lambda x - i\left(-\frac{\lambda^2}{2} + \frac{v^2}{2}\right)t\right] \quad (4.0.6)$$

olarak yazılabilir. Bağıl durumlarda faz çarpanındaki zaman değişkeninin kat sayısı enerji olarak yorumlandığından  $S'$  sisteminin bağıl durum enerjisi;

$$E = -\frac{\lambda^2}{2} + \frac{v^2}{2} \quad (4.0.7)$$

olarak bulunur. Bu sonuç sezgilerimizle uyumludur;  $x'$  koordinat sistemine göre  $E'$  enerjisine sahip bir sistemin  $x$  sistemine göre  $E = E' + m\frac{v^2}{2}$  enerjisine sahip olması

beklenir.

**NOT:** Zamana bağılı potansiyeller için eğer potansiyel bir Galilei dönüşümü ile durağan bir potansiyele dönüştürülemiyorsa, sistemin enerjisinin ne olduğu belirsizdir. Yani genel olarak zamana bağılı potansiyellerde dalga (durum) fonksiyonunun exponansiyel terimindeki  $\frac{i\hbar}{\hbar}$  nin katsayısına enerji denemez. Çünkü durum fonksiyonlarının zaman bağımlılığının  $e^{i\frac{Et}{\hbar}}$  olması, potansiyelin zamandan bağımsız olduğu sistemler için geçerlidir. Yani

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})T(t) \quad (4.0.8)$$

tanımı yapıp zamana bağılı Schrödinger denkleminde yerine konduğunda;

$$\psi(\vec{r})i\hbar\frac{\partial T(t)}{\partial t} = T(t)\hat{H}\psi(\vec{r}) \quad (4.0.9)$$

sonucu elde edilir. Burada  $\psi(\vec{r})$  bir öz durumsa  $\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$  olur ve

$$\psi(\vec{r})i\hbar\frac{\partial T(t)}{\partial t} = T(t)E\psi(\vec{r}) \quad (4.0.10)$$

şeklinde yazılır.

$$i\hbar\frac{\partial T(t)}{\partial t} = ET(t) \Rightarrow T(t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (4.0.11)$$

olduğundan dalga fonksiyonu

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (4.0.12)$$

olarak elde edilir.

## 5. Spin $\frac{1}{2}$ Sistemlerin Zamana Bağlı Manyetik Alanlar İçinde Evrimi

### 5.1. Zamana Açıkça Bağlı İnvaryant İşlemciler ve Bu İşlemcilerin Schrödinger Denklemine Çözümü İle İlişkileri

Zamana açıkça bağlı

$$\hat{H} = \hat{H}(t)$$

şeklindeki Hamiltoniyenlerin bir kısmı için invaryant işlemci adı verilen ve zamandan bağımsız bir işlemci tanımlamak mümkündür.

**Tanım İnvaryant işlemci:** Bir invaryant işlemci zamana göre tam türevi sıfır olan Hermitik bir işlemcidir. Yani işlemci

$$\frac{d\hat{I}(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{I}(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{I}(t), \hat{H}(t)] = 0 \quad (5.1.1)$$

şartını sağlar. Zamana göre tam türevin sistemin evrimini belirleyen Hamiltoniyene bağlı olmasından dolayı, invaryant işlemcinin Hamiltoniyene has olduğu bu denklemden görülmektedir. Bir invaryant işlemcinin kendisine has olan Hamiltoniyenin Schrödinger denkleminin çözümünde kullanılabilmesi için Hermitik olması gerekmektedir.

$$\hat{I} = \hat{I}^\dagger \quad (5.1.2)$$

Bu işlemciler zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümlerinde kullanışlı olabilirler. Bir vektör ( $|u(t)\rangle$ ) ün sağladığı Schrödinger denklemi

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |u(t)\rangle = \hat{H}(t) |u(t)\rangle \quad (5.1.3)$$

şeklinde dir. (5.1.1) denklemi kullanılarak [23] birkaç ara işlemden sonra

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{I} |u(t)\rangle) = \hat{H} (\hat{I} |u(t)\rangle) \quad (5.1.4)$$

denklemini elde edilir. (5.1.4) denklemi;  $|u(t)\rangle$  vektörü Schrödinger denkleminin bir çözümü ise, bu vektöre invaryant işlemci uygulandığında Schrödinger denkleminin başka bir çözümünün elde edildiğini göstermektedir. İnvaryant işlemci Hermitik olduğundan etki ettiği uzayın boyutu kadar karşılıklı ortonormal özvektöre sahiptir. Bu özvektörleri  $|\lambda, K\rangle$  ile gösterelim. Burada  $\lambda$ ,  $\hat{I}$  nın özdeğerlerini,  $K$  da diğer kuantum sayısını temsil etmektedir.

O halde;

$$\hat{I}(t)|\lambda, K\rangle = \lambda|\lambda, K\rangle \quad (5.1.5a)$$

$$\langle\lambda', K'|\lambda, K\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{KK'} \quad (5.1.5b)$$

şeklindedir.  $\hat{I}^\dagger = \hat{I}$  olduğundan  $\lambda$  özdeğerleri gerçel sayılardır. (5.1.5a) denkleminin zamana göre türevini alalım;

$$\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda, K\rangle + \hat{I}\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, K\rangle = \frac{\partial\lambda}{\partial t}|\lambda, K\rangle + \lambda\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, K\rangle \quad (5.1.6)$$

ve (5.1.1) denklemindeki her bir terimi  $|\lambda, K\rangle$  vektörüne yani *invaryant* işlemcinin herhangi bir özvektörüne uygulayalım. (Burada sol taraf sıfır olduğundan (5.1.1) denkleminin  $i\hbar$  ile çarpılmış halini kullanıyoruz)

$$i\hbar\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda, K\rangle + \hat{I}\hat{H}|\lambda, K\rangle - \hat{H}\hat{I}|\lambda, K\rangle = 0 \quad (5.1.7)$$

$|\lambda, K\rangle$  vektörü  $\hat{I}$  işlemcisinin özvektörü olduğundan bu denklem

$$i\hbar\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda, K\rangle + \hat{I}\hat{H}|\lambda, K\rangle - \lambda\hat{H}|\lambda, K\rangle = 0 \quad (5.1.8)$$

şeklinde yazılabilir. (5.1.8) denklemindeki invaryant işlemcinin  $|\lambda, K\rangle$  özvektöründen farklı özdeğerli bir özvektörü  $|\lambda', K'\rangle$  ile iç çarpımını alalım

$$i\hbar\langle\lambda', K'|\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda, K\rangle + \langle\lambda', K'|\hat{I}\hat{H}|\lambda, K\rangle - \lambda\langle\lambda', K'|\hat{H}|\lambda, K\rangle = 0$$

Bu denklem  $\hat{I}$  nın hermitikliği kullanılarak

$$i\hbar\langle\lambda', K'|\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda, K\rangle + (\lambda' - \lambda)\langle\lambda', K'|\hat{H}|\lambda, K\rangle = 0 \quad (5.1.9)$$

biçiminde yazılabilir. Bu denklemde  $\lambda = \lambda'$  alınırsa

$$i\hbar \langle \lambda, K' | \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} | \lambda, K \rangle = 0 \quad (5.1.10a)$$

elde edilir. Bu denklemde  $K = K'$  seçilerek;

$$\langle \lambda, K | \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} | \lambda, K \rangle = 0 \quad (5.1.10b)$$

elde edilir. Yani invaryant işlemcinin türevinin bir  $|\lambda, K\rangle$  durumunda beklenen değeri sıfırdır. Şimdi (5.1.6) denkleminin  $\langle \lambda, K |$  ile sayısal çarpımını alalım.

$$\langle \lambda, K | \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} | \lambda, K \rangle + \lambda \langle \lambda, K | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, K \rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \langle \lambda, K | \lambda, K \rangle + \lambda \langle \lambda, K | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, K \rangle$$

Böylece (5.1.10b) denkleminden üstteki denklemin orta eşitliğinin sıfır olduğu görülebilir.

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle \lambda, K | \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} | \lambda, K \rangle = 0 \quad (5.1.11)$$

elde edilir ve invaryant işlemcinin özdeğerlerinin zamana göre türevinin sıfır olduğu görülür:

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = 0 \quad (5.1.12)$$

Şimdi,  $\hat{I}$ 'nin özvektörleri ile Schrödinger denkleminin çözümleri arasında bir ilişki bulmaya çalışacağız. Bunun için ilk olarak (5.2.28) denkleminde bulduğumuz sonucu kullanarak (5.1.6) denklemini yeniden yazalım.

$$(\lambda - \hat{I}) \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, K \rangle = \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} | \lambda, K \rangle \quad (5.1.13)$$

Bu denklemin her iki tarafının  $\langle \lambda', K' |$  vektörü ile iç çarpımını alalım.

$$\lambda \langle \lambda', K' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, K \rangle + \langle \lambda', K' | \hat{I} \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, K \rangle = \langle \lambda', K' | \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} | \lambda, K \rangle \quad (5.1.14)$$

$\langle \lambda', K' | \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} | \lambda, K \rangle$  ifadesinden kurtulabilmek için (5.1.9) denklemini bu ifade için çözüp, (5.1.14) denkleminde yerine koyarak

$$\langle \lambda', K' | \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} | \lambda, K \rangle = \frac{1}{i\hbar} (\lambda - \lambda') \langle \lambda', K' | \hat{H} | \lambda, K \rangle$$

ya da

$$i\hbar(\lambda - \lambda')\langle \lambda', K' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, K \rangle = (\lambda - \lambda')\langle \lambda', K' | \hat{H} | \lambda, K \rangle \quad (5.1.15)$$

denklemini elde ederiz. Eğer  $\lambda \neq \lambda'$  ise yani farklı özdeğerlere gelen özvektörler için, (5.1.15) denklemindeki  $(\lambda - \lambda')$  ifadelerini sadeleştirerek  $\lambda \neq \lambda'$  için ;

$$\langle \lambda', K' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, K \rangle = \langle \lambda', K' | \hat{H} | \lambda, K \rangle \quad (5.1.16a)$$

yazılabilir.  $\lambda = \lambda'$  için (5.1.15) denkleminde yola çıkılarak

$$i\hbar \langle \lambda, K | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, K' \rangle = \langle \lambda, K | \hat{H} | \lambda, K' \rangle \quad (5.1.16b)$$

yazılamaz. Eğer (5.1.16b) denklemi sağlansaydı, (5.1.16a) ve (5.1.16b) denklemlerini kullanarak,  $|\lambda, K\rangle$  vektörünün Schrödinger denklemini sağladığını söyleyebilirdik. çünkü bu vektörün ortonormal  $\{|\lambda, K\rangle\}$  bazında tüm bileşenleri Schrödinger denklemi sağlamış olacaktı (ancak verili bir  $|\lambda, K\rangle$  vektörü için kendisi ile aynı yozlaşmış alt uzayda bulunan bileşenlerin Schrödinger denklemini sağladığını (5.1.16b) denkleminin sağlandığından emin olamadığımızdan söyleyemiyoruz).

O halde, yozlaşmış alt uzayda Schrödinger denklemini sağlayan karşılıklı bir ortonormal baz kümesi bulmaya çalışalım. Bilindiği gibi verili bir  $|\lambda, K\rangle$  vektörünün fazı fiziksel durumunu değiştirmez. Diğer bir deyişle  $|\lambda, K\rangle$  ve  $\Theta \in \mathbb{R}$  olmak üzere  $e^{i\Theta}|\lambda, K\rangle$  aynı kuantum durumuna karşılık gelmektedir. Şu ana kadar yaptığımız işlemlerde  $|\lambda, K\rangle$  nın fazına dair herhangi bir kabul yapmadık. Yani  $|\lambda, K\rangle$  vektörünü halen zamana da bağlı olabilecek (yani  $\Theta = \Theta(t)$  olabilir, yeterki  $\Theta(t)$  tüm zamanlar için gerçel değerler alsın) bir faz ile çarpabiliriz. Diğer bir deyişle başlangıçta seçtiğimiz  $\hat{I}(t)$  nin baz vektörleri ( $|\lambda, K\rangle$  ları) kullanarak yeni bir bazı

$$|\lambda, K\rangle = e^{i\alpha_{\lambda K}(t)} |\lambda, K\rangle \quad \alpha_{\lambda K}(t) \in \mathbb{R} \quad (5.1.17)$$

şeklinde tanımlayabiliriz. (5.1.17) denkleminde ki  $\alpha_{\lambda K}(t)$  faz fonksiyonları zamana bağlı gerçel değerler alan fonksiyonlardır.

$\hat{I}(t)$  işlemcisinin zamana göre türev içeren bir terime sahip olmadığını varsaydığımızdan

$$\hat{I}(t)|\lambda, K\rangle_{\alpha} = \lambda e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}|\lambda, K\rangle$$

Ayrıca

$${}_{\alpha}\langle\lambda', K'|\lambda, K\rangle_{\alpha} = e^{i(\alpha_{\lambda K}(t) - \alpha_{\lambda' K'}(t))}\langle\lambda, K|\lambda', K'\rangle$$

eşitlikleri sağlanır. Diğer bir değişle (5.1.17) denklemi ile tanımlanan  $|\lambda, K\rangle_{\alpha}$  vektörleri de  $\hat{I}(t)$  işlemcisinin karşılıklı ortonormal özvektörleridir. O halde denklem (5.1.16a) eşitliği de dahil,  $\hat{I}(t)$  nin  $\{|\lambda, K\rangle\}$  özvektör bazı için türettiğimiz tüm eşitlikler  $\{|\lambda, K\rangle\}_{\alpha}$  bazını (5.1.16b) denkleminin aynı zamanda  $\lambda = \lambda'$  içinde geçerli olacak şekilde seçebilirsek  $\{|\lambda, K\rangle\}_{\alpha}$  bazındaki bütün vektörler Schrödinger denklemini sağlamış olurlar. Bu  $\alpha_{\lambda K}(t)$  fonksiyonlarını istenen koşul sağlanacak şekilde seçmekle mümkün olabilir.

Bu koşulu bulmak için (5.1.17) denkleminde tanımlanmış  $\{|\lambda, K\rangle\}$  vektörlerini ( $\lambda = \lambda'$ ) için yazılmış (5.1.16b) denkleminde yerleştirirsek

$$-\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\alpha_{\lambda K}(t)\right)e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}\langle\lambda, K'|\lambda, K\rangle + i\hbar e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}\langle\lambda, K'|\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, K\rangle = \langle\lambda, K'|\hat{H}e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}|\lambda, K\rangle$$

ya da

$$-\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\alpha_{\lambda K}(t)\right)e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}\delta_{KK'} + i\hbar e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}\langle\lambda, K'|\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, K\rangle = \langle\lambda, K'|\hat{H}e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}|\lambda, K\rangle$$

denklemlerini elde ederiz.  $\hat{H}$  nin türev içeren bir terimi olmadığını varsayarak son denklem

$$e^{i\alpha_{\lambda K}(t)} - \left(\hbar\frac{\partial}{\partial t}\alpha_{\lambda K}(t)\right)\delta_{KK'} + \hbar e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}\langle\lambda, K'|\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, K\rangle = e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}\langle\lambda, K'|\hat{H}|\lambda, K\rangle$$

biçiminde yazılarak  $e^{i\alpha_{\lambda K}(t)}$  terimleri sadeleştirilerek

$$\hbar\delta_{KK'}\frac{d\alpha_{\lambda K}}{dt} = \langle\lambda, K'|i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}|\lambda, K\rangle$$



biçiminde yazabiliriz. Bu denklem  $K \neq K'$  için sağlanabilmesi için sağ taraf sıfır olmalıdır. Bu  $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})$  işlemcisinin invaryant işlemcinin öz bazında köşegenleştirilmesi anlamına gelir. Bu köşegenleştirme her zaman mümkün çünkü  $[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}, \hat{I}] = 0$  dır ve  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}$  Hermitik bir işlemcidir. (5.1.1) denkleminde ki

$$\frac{d\hat{I}(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{I}(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{I}(t), \hat{H}(t)] = 0$$

koşulundan yola çıkarak  $[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}, \hat{I}] = 0$  olduğunu göstermek basittir.  $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})^\dagger = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}$ . O halde invaryant işlemci  $\hat{I}$  kullanılarak yapılacak çözümlerde en başta ele alınan bazda  $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})$  işlemcisi köşegenleştirilerek devam edilmelidir. O halde geriye kalan  $K = K'$  seçip zamana bağlı fazları

$$\hbar \frac{d\alpha_{\lambda K}}{dt} = \langle \lambda, K | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} | \lambda, K \rangle \quad (5.1.18)$$

## 5.2. İnvaryant İşlemcinin Spin $\frac{1}{2}$ Sistemlere Uygulanması

Bu bölümde, zamana bağlı manyetik alanların etkisi altındaki spin  $\frac{1}{2}$  sistemlerin evrimini inceleyeceğiz. Üç boyutta (en genel) zamana bağlı manyetik alanı;

$$\vec{B}(t) = B_1(t)\hat{x} + B_2(t)\hat{y} + B_3(t)\hat{z} \quad (5.2.19)$$

şeklinde yazabiliriz. Böyle bir manyetik alanın etkisi altında hareket eden spin  $\frac{1}{2}$  sistemin (bu noktadan sonra spin  $\frac{1}{2}$  sistemi kısaca spin olarak yazacağız) zaman evriminin;  $B_1(t), B_2(t)$  ve  $B_3(t)$  ne şekilde seçilirse ya da aralarındaki ilişki ne olursa analitik olarak çözülebilir olduğunu bulmaya çalışacağız. Bu çalışmada çözülebilir en genel durumu yani çözülebilir tüm durumları bulduğumuzu iddia etmiyoruz. Yalnızca çözülebilir bazı durumları göstermeyi hedefliyoruz. Spinin manyetik dipol momenti,  $\gamma$  jiromanyetik oranı göstermek üzere;

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S} \quad (5.2.20)$$

şeklinindedir [2]. Bu manyetik dipol momente sahip bir spinin evrimini veren Hamiltoniyen ise;

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{B} \cdot \vec{S} \quad (5.2.21)$$

denklemleri ile verilmektedir [2]. (5.2.20) ve (5.2.21) denklemlerinde  $\hat{S}$  spin işlemcisini göstermektedir ve  $\vec{S}$  spin işlemcisi Pauli spin matrisleri ile temsil edilirler:

$$\hat{S} = -\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} = -\frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_x \hat{x} + \hat{\sigma}_y \hat{y} + \hat{\sigma}_z \hat{z}). \quad (5.2.22)$$

(5.2.22) denklemindeki  $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$  ve  $\hat{\sigma}_z$  nin matris temsilleri,  $\hat{\sigma}_z$  nin özvektörleri baz olarak seçilmesi durumunda

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.2.23)$$

şeklinde dirler [49]. (5.2.21), (5.2.22) ve (5.2.23) denklemleri kullanılarak (5.2.19) denklemleri ile verilen manyetik alanın etkisi altındaki spini betimleyen Hamiltoniyen

$$\hat{H} = -\frac{\gamma \hbar}{2} \begin{bmatrix} B_3(t) & B_1(t) - iB_2(t) \\ B_1(t) + iB_2(t) & -B_3(t) \end{bmatrix} \quad (5.2.24)$$

matris değerli bir fonksiyon olarak bulunur [37]. O halde amacımız (5.2.24) denkleminde verilen Hamiltoniyen için evrim işlemcisini ya da durumlar arası geçiş olasılıklarını,  $B_1(t), B_2(t)$  ve  $B_3(t)$  nin hangi seçimlerinde analitik olarak hesaplayacağımızı bulmaktır. Zamana bağlı Hamiltoniyenler içinde evrim işlemcisi en kolay hesaplanabilen grup Hamiltoniyenler, farklı zamandaki ifadeleri birbirleri ile sıra değiştiren Hamiltoniyenlerdir [6]. Bu tarz Hamiltoniyenler için evrim işlemcisi zamandan bağımsız Hamiltoniyenler için kullanılan ifadenin basit bir genelleştirmesidir.  $[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] = 0$  eşitliği her  $t_1$  ve  $t_2$  anı için sağlanıyorsa, evrim işlemcisi

$$U(t) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H(t') dt' \right] \quad (5.2.25)$$

eşitliği ile ifade edilir. Sonlu ( $N$ ) boyutlu Hamiltoniyen işlemcisi ( $N \times N$ ) lik kare matrisler ile temsil edilebilmektedir. Bir matrisin integrali her bir terimin integrali alınarak hesaplandığından [37], (5.2.25) denklemleri verili bir Hamiltoniyen için hesaplanabilir. Bu yüzden ilk olarak (5.2.24) denkleminde verilen Hamiltoniyenin

farklı her iki zamanda sıra deęiřtirmesinin řartlarının ne olduęunu inceleyeceęiz. (5.2.24) denkleminde verilen  $\hat{H}(t)$  Hamiltoniyenin farklı iki zamanda yazıp sıra deęiřimlerini hesaplayalım.

$$\begin{aligned}
\left[ \hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2) \right] &= \left( -\frac{\gamma \hbar}{2} \right)^2 \times \\
&\left\{ \begin{aligned} &\left[ \begin{array}{cc} B_3(t_1) & B_1(t_1) - iB_2(t_1) \\ B_1(t_1) + iB_2(t_1) & -B_3(t_1) \end{array} \right] \left[ \begin{array}{cc} B_3(t_2) & B_1(t_2) - iB_2(t_2) \\ B_1(t_2) + iB_2(t_2) & -B_3(t_2) \end{array} \right] \\ &- \left[ \begin{array}{cc} B_3(t_2) & B_1(t_2) - iB_2(t_2) \\ B_1(t_2) + iB_2(t_2) & -B_3(t_2) \end{array} \right] \left[ \begin{array}{cc} B_3(t_1) & B_1(t_1) - iB_2(t_1) \\ B_1(t_1) + iB_2(t_1) & -B_3(t_1) \end{array} \right] \end{aligned} \right\} \\
&= \left( -\frac{\gamma \hbar}{2} \right)^2 \times \\
&\left[ \begin{array}{cc} i(B_1(t_1)B_2(t_2) - B_1(t_2)B_2(t_1)) & [B_1(t_2)B_3(t_1) - B_1(t_1)B_3(t_2) \\ & + i(B_2(t_1)B_3(t_2) - B_2(t_2)B_3(t_1))] \\ [B_1(t_1)B_2(t_2) - B_1(t_2)B_3(t_1) & \\ + i(B_2(t_1)B_3(t_2) - B_2(t_2)B_3(t_1))] & i(B_1(t_2)B_2(t_1) - B_1(t_1)B_2(t_2)) \end{array} \right] \quad (5.2.26)
\end{aligned}$$

Daha öncede belirttięimiz gibi  $[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] = 0$  olduęunda sistem analitik olarak çözülebilmektedir. Bu řartın saęlanması için (5.2.26) denkleminde de görülebileceęi üzere

$$B_1(t_1)B_2(t_2) = B_1(t_2)B_2(t_1) \quad (5.2.27a)$$

$$B_1(t_2)B_3(t_1) = B_1(t_1)B_3(t_2) \quad (5.2.27b)$$

$$B_2(t_1)B_3(t_2) = B_2(t_2)B_3(t_1) \quad (5.2.27c)$$

eřitlikleri tüm  $t_1$  ve  $t_2$  zamanları için saęlanmalıdır. (5.2.27) denklemleri oldukça kısıtlayıcıdır. Bu üç kořulun saęlanabilmesi için řu iki durumdan biri saęlanmalıdır.

$$1. \quad k_1, k_2, k_3, \text{ sabit olmak üzere } k_1 B_1(t) = k_2 B_2(t) = k_3 B_3(t) \quad (5.2.28a)$$

$$2. \quad i \neq j \neq k \quad B_i(t) = 0 \quad B_j(t) = kB_k(t). \quad (5.2.28b)$$

Ancak bu iki durumda ilginç deęildir, çünkü her iki durumda da sistem, bir koordinat dönüşümü ile manyetik alanın yalnızca  $z$  yönünde olduęu bir sisteme

dönüştürülüp kolayca çözülebilir. Farklı zamanlardaki Hamiltoniyenlerin birbiri ile sıra değiştirdiği durumun manyetik alanın yalnızca bir yönde olduğu duruma eşdeğer olduğunu gördük. Neyse ki zamana bağlı bir manyetik alan içinde hareket eden bir spinin evrimini bulmak için başka yöntemler de denenebilir. Ele aldığımız durum iki boyutlu durum uzayına sahip olduğundan, zamana bağlı Schrödinger denkleminin doğrudan çözümünü denemek yararlı olabilir. İki boyutta zamana bağlı en genel durum her an için

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} g_1(t) \\ g_2(t) \end{pmatrix}, \quad g_1^2(t) + g_2^2(t) = 1 \quad (5.2.29)$$

şeklinde ifade edilebilir. Manyetik alan içinde hareket eden spinin Hamiltoniyeni (5.2.24) denkleminde verilmişti. (5.2.29) denkleminde verilen durum ve (5.2.24) denklemindeki Hamiltoniyen için zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (5.2.30)$$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{g}_1(t) \\ \dot{g}_2(t) \end{pmatrix} = -\frac{\gamma\hbar}{2} \begin{bmatrix} B_3(t) & B_1(t) - iB_2(t) \\ B_1(t) + iB_2(t) & -B_3(t) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} g_1(t) \\ g_2(t) \end{pmatrix} \quad (5.2.31)$$

biçiminde bir matris denklemine dönüşür. Matris eşitliğini satırları için ayrı ayrı yazarak

$$\frac{dg_1(t)}{dt} = \dot{g}_1(t) = \frac{i\gamma}{2} B_3(t) g_1(t) + \frac{i\gamma}{2} \beta^*(t) g_2(t) \quad (5.2.32a)$$

$$\frac{dg_2(t)}{dt} = \dot{g}_2(t) = \frac{i\gamma}{2} \beta(t) g_1(t) - \frac{i\gamma}{2} B_3(t) g_2(t) \quad (5.2.32b)$$

elde ederiz. (5.2.32) denklemlerinde yer alan  $\beta(t)$

$$\beta(t) = B_1(t) + iB_2(t) \quad (5.2.33)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Bu denklemi çözmek için iki ayrı yöntem izlenebilir. Birincisi çiftlenmiş bir denklem ikilisi olan (5.2.32) denklemlerini ayrıştırmaktır. Bu yöntemin dezavantajı elde edilen denklemlerin karmaşık fonksiyonlar için denklemler olarak kalmasıdır. İkinci yöntem ise  $g_1(t)$  ve  $g_2(t)$  karmaşık

fonksiyonlarını reel fonksiyonlar cinsinden ifade edip yalnızca reel değişkenler cinsinden diferansiyel denklemler elde etmektir. Bu yöntemin dezavantajı ise elde edilecek denklemlerin hem sayısının artması hem de denklemlerin çiftlenmiş olarak kalmasıdır. Manyetik alanın bileşen fonksiyonlarının cinsine göre bazen birinci, bazen de ikinci yöntem daha kullanışlı olabilir. Birinci yöntemde ilk adım birinci dereceden diferansiyel denklemleri çözmekte kullanılan integral çarpanı kullanmaktır. Bu çarpan (5.2.32a) denklemini için

$$\mu(t) = e^{-\frac{i\gamma}{2} \int^t B_3(t') dt'} \quad (5.2.34a)$$

iken (5.2.32b) denklemini için;

$$\mu^{-1}(t) = e^{\frac{i\gamma}{2} \int^t B_3(t') dt'} \quad (5.2.34b)$$

şeklindedir. Daha sonra ki işlemlerde basitlik olması açısından

$$h(t) = \frac{\gamma}{2} \int^t B_3(t') dt' \quad (5.2.35)$$

tanımı yapalım.

$$\frac{dh(t)}{dt} = h'(t) = \frac{\gamma}{2} B_3(t) \quad (5.2.36)$$

olduğuna dikkat ediniz. (5.2.32a) ve (5.2.32b) denklemleri sırasıyla (5.2.34a) ve (5.2.34b) denklemlerinde verilen  $\mu(t)$  ve  $\mu^{-1}(t)$  integral çarpanları ile çarpılırsa denklemler

$$\frac{d}{dt} \left( e^{-ih(t)} g_1(t) \right) = \frac{i\gamma}{2} e^{-ih(t)} \beta^*(t) g_2(t) \quad (5.2.37a)$$

ve

$$\frac{d}{dt} \left( e^{ih(t)} g_2(t) \right) = \frac{i\gamma}{2} e^{ih(t)} \beta(t) g_1(t) \quad (5.2.37b)$$

denklemlerine dönüşürler. Şimdi

$$s_1(t) = \mu(t) g_1(t) = e^{-ih(t)} g_1(t) \quad (5.2.38a)$$

$$s_2(t) = \mu^{-1}(t) g_2(t) = e^{ih(t)} g_2(t) \quad (5.2.38b)$$

tanımlarını yapıp, (5.2.37) denklemlerini (5.2.38) tanımları cinsinden yazalım:

$$\frac{d}{dt}s_1(t) = \frac{i\gamma}{2}\beta^*(t)e^{-2ih(t)}s_2(t) \quad (5.2.39a)$$

$$\frac{d}{dt}s_2(t) = \frac{i\gamma}{2}\beta(t)e^{2ih(t)}s_1(t) \quad (5.2.39b)$$

Her iki denklemin bir kez daha türevi alınıp, (5.2.39) denklemleri kullanılarak, yine (5.2.39) denklemleri çiftlenmiş halinden kurtarılıp ayrıştırılabilir. Bu işlemi öncelikle (5.2.39a) denklemi için yapalım

$$\frac{d^2s_1(t)}{dt^2} = \frac{i\gamma}{2}e^{-2ih(t)} \left[ \left( \dot{\beta}^*(t) - i\gamma\beta^*(t)B_3(t) \right) s_2(t) + \beta^*(t)\dot{s}_2(t) \right] \quad (5.2.40)$$

şimdi (5.2.39a) denkleminden  $s_2(t)$ , (5.2.39b) denkleminden  $\dot{s}_2(t)$  yi çekip (5.2.40) denkleminde yerine koyalım.

$$\frac{d^2s_1(t)}{dt^2} = \left( \frac{d}{dt} \ln\beta^*(t) - i\gamma B_3(t) \right) \frac{ds_1(t)}{dt} - \frac{\gamma}{4}|\beta(t)|^2s_1(t) \quad (5.2.41)$$

elde ederiz. Bu denklemi yazarken her  $f(t)$  fonksiyonu için geçerli olan  $\frac{df(t)/dt}{f(t)} = \frac{d}{dt} \ln[f(t)]$  eşitliğini kullandık. (5.2.41) denklemini manyetik alanın orijinal bileşenleri cinsinden

$$\begin{aligned} \frac{d^2s_1(t)}{dt^2} - \left\{ \frac{d}{dt} \ln[B_1(t) - iB_2(t)] - i\gamma B_3(t) \right\} \frac{ds_1(t)}{dt} \\ + \frac{\gamma^2}{4}[B_1^2(t) + B_2^2(t)]s_1(t) = 0 \end{aligned} \quad (5.2.42)$$

şeklinde yazabiliriz.

Benzer şekilde (5.2.39b) denkleminin zamana göre birkez daha türevini alalım ve (5.2.39) denklemlerini  $s_1(t)$  ve  $\dot{s}_1(t)$  yi,  $s_2(t)$  ve  $\dot{s}_2(t)$  cinsinden yazmak için kullanalım:

$$\frac{d^2s_2(t)}{dt^2} = \frac{i\gamma}{2}e^{2ih(t)} \left[ \left( \dot{\beta}(t) + i\gamma\beta(t)B_3(t) \right) s_2(t) + \beta(t)\dot{s}_2(t) \right] \quad (5.2.43)$$

$$\frac{d^2s_2(t)}{dt^2} = \left( \frac{d}{dt} \ln\beta(t) + i\gamma B_3(t) \right) \frac{ds_2(t)}{dt} - \frac{\gamma}{4}|\beta(t)|^2s_2(t) \quad (5.2.44)$$

(5.2.44) denklemi de orijinal manyetik alan bileşenleri cinsinden

$$\frac{d^2 s_2(t)}{dt^2} - \left\{ \frac{d}{dt} \ln[B_1(t) + iB_2(t)] + i\gamma B_3(t) \right\} \frac{ds_2(t)}{dt} + \frac{\gamma^2}{4} [B_1^2(t) + B_2^2(t)] s_2(t) = 0 \quad (5.2.45)$$

şeklinde yazılabilir. Her ne kadar (5.2.42) ve (5.2.45) denklemlerinde görüldüğü gibi, (5.2.32) denklemlerinde  $|\Psi(t)\rangle$  durum vektörünün bileşenleri  $g_1(t)$  ve  $g_2(t)$  için elde edilen differansiyel denklemler ayrıştırılmış olsa da, denklemdeki katsayıların hem karmaşık olması hem de zamana bağlılığından dolayı  $B_i(t)$ lerin, ( $i = 1, 2, 3$ ) çok az bir seçimi için bu denklemler çözülebilir olacaktır.

Zamana bağlı Schrödinger denklemini çözmek için denenebilecek ikinci yöntem karmaşık birer fonksiyon olan  $g_1(t)$  ve  $g_2(t)$  fonksiyonlarını

$$g_1(t) = u_1(t) + i v_1(t) \quad (5.2.46a)$$

ve

$$g_2(t) = u_2(t) + i v_2(t) \quad (5.2.46b)$$

şeklinde gerçel bileşenlerine ayrıştırıp, bu ifadeleri (5.2.32) denklemlerinde yerine koymaktır. Böylece

$$\begin{aligned} \dot{u}_1(t) + i \dot{v}_1(t) = & \frac{i\gamma}{2} \left\{ B_3(t) \left( u_1(t) + i v_1(t) \right) \right. \\ & \left. + \left[ B_1(t) - i B_2(t) \right] \left[ u_2(t) + i v_2(t) \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.2.47a)$$

ve

$$\begin{aligned} \dot{u}_2(t) + i \dot{v}_2(t) = & \frac{i\gamma}{2} \left[ B_1(t) + i B_2(t) \right] \left[ u_1(t) + i v_1(t) \right] \\ & - \left\{ B_3(t) \left( u_2(t) + i v_2(t) \right) \right\} \end{aligned} \quad (5.2.47b)$$

elde edilir. (5.2.47) denklemlerinde  $\beta(t) = B_1(t) + i B_2(t)$  fonksiyonunun açık ifadesini yazdık çünkü amacımız denklemleri gerçel ve sanal kısımlarına ayırarak

tamamen gerçel değişken ve sabitlerden oluşan denklemler elde etmek. Bu nedenle (5.2.47a) ve (5.2.47b) denklemlerinin gerçel ve sanal kısımlarını birbirine eşitleyeceğiz. Bu yapıldığında

$$\dot{u}_1(t) = \frac{\gamma}{2} \left[ -B_3(t)v_1(t) + B_2(t)u_2(t) - B_1(t)v_2(t) \right] \quad (5.2.48a)$$

$$\dot{v}_1(t) = \frac{\gamma}{2} \left[ B_3(t)u_1(t) + B_1(t)u_2(t) + B_2(t)v_2(t) \right] \quad (5.2.48b)$$

$$\dot{u}_2(t) = \frac{\gamma}{2} \left[ -B_2(t)u_1(t) - B_1(t)v_1(t) + B_3(t)v_2(t) \right] \quad (5.2.48c)$$

$$\dot{v}_2(t) = \frac{\gamma}{2} \left[ B_1(t)u_1(t) - B_2(t)v_1(t) - B_3(t)u_2(t) \right] \quad (5.2.48d)$$

denklemleri elde edilir. Görüldüğü gibi bu denklem sisteminin her biri gerçel ve birinci dereceden de olsa bilinmeyenlerin birbirine bağlı olduğu ve sabit katsayılı olmayan bir denklem sistemi olduğundan, bu sistemin de çok özel durumlar dışında çözümünü bulmak oldukça zordur.

### 5.3. İnvaryant İşlemci ile Zaman Evriminin Hesaplanması:

Zamana bağlı Hamiltoniyenler ile ilgili problemlerde sıklıkla kullanılan invaryant işlemci yöntemi [22,23,38–41], zamanla değişen manyetik alanların etkisi altındaki spinlerin zaman evrimi problemi için de kullanılabilir. İnvaryant işlemcinin tanımlayıcı iki özelliği vardır:

1. Zamana göre tam türevi sıfırdır:

$$\frac{d\hat{I}}{dt} = \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} [\hat{I}, \hat{H}] = 0. \quad (5.3.49)$$

2. Hermitiktir.

İlgilendiğimiz spin $\frac{1}{2}$  sistemlerin durum uzayı 2 boyutlu olduğundan, bu uzaya etki eden invaryant işlemci de iki boyutludur. Bu işlemcinin Hermitiklik özelliğini de kullanarak,  $I_{11}(t)$  ve  $I_{22}(t)$ , matrisin Hermitikliğinden dolayı gerçel sayılar olmak



üzere, invaryant matrisin en genel halini

$$\hat{I} = \begin{bmatrix} I_{11}(t) & I_{12}(t) \\ I_{21}(t) & I_{22}(t) \end{bmatrix} \quad (5.3.50)$$

biçiminde yazabiliriz. Şimdi (5.2.24) denkleminde verilen Hamiltoniyen ve (5.3.50) denkleminde verilen invaryant işlemciyi birbiri ile sıra değişimini alıp, (5.3.49) denkleminde yerine koyarak invaryant matrisin elemanları için bir diferansiyel denklem sistemi elde etmeye çalışalım:

$$\begin{aligned} & \left[ \hat{I}(t), \hat{H}(t) \right] = \\ & - \frac{\gamma \hbar}{2} \left\{ \begin{bmatrix} I_{11}(t) & I_{12}(t) \\ I_{21}(t) & I_{22}(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_3(t) & B_1(t) - iB_2(t) \\ B_1(t) + iB_2(t) & -B_3(t) \end{bmatrix} \right. \\ & \left. - \begin{bmatrix} B_3(t) & B_1(t) - iB_2(t) \\ B_1(t) + iB_2(t) & -B_3(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{11}(t) & I_{12}(t) \\ I_{21}(t) & I_{22}(t) \end{bmatrix} \right\} \end{aligned}$$

$$B_1(t) + iB_2(t) = \beta, \quad B_1(t) - iB_2(t) = \beta^* \quad (5.3.51)$$

tanımlarını yaparak;

$$\begin{aligned} & \left[ \hat{I}(t), \hat{H}(t) \right] = \\ & - \frac{\gamma \hbar}{2} \begin{bmatrix} iIm[I_{12}(t)\beta(t)] & \frac{1}{2}[I_{11}(t) - I_{22}(t)]\beta^*(t) - I_{12}(t)B_3(t) \\ \frac{1}{2}[I_{22}(t) - I_{11}(t)]\beta(t) + I_{12}^*(t)B_3(t) & iIm[I_{12}^*(t)\beta^*(t)] \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.3.52)$$

elde edilir. Bir matrisin türevi tek tek elemanlarının türevinin alınması ile elde edildiğinden [37], (5.3.52) denklemini (5.3.49) denkleminde yerine konduğunda

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \frac{\partial I_{11}(t)}{\partial t} & \frac{\partial I_{12}(t)}{\partial t} \\ \frac{\partial I_{11}(t)}{\partial t} & \frac{\partial I_{22}(t)}{\partial t} \end{bmatrix} \\ & + \frac{i\gamma}{2} \begin{bmatrix} iIm[I_{12}(t)\beta(t)] & \frac{1}{2}[I_{11}(t) - I_{22}(t)]\beta^*(t) - I_{12}(t)B_3(t) \\ \frac{1}{2}[I_{22}(t) - I_{11}(t)]\beta(t) + I_{12}^*(t)B_3(t) & iIm[I_{12}^*(t)\beta^*(t)] \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.3.53)$$

bulunur. Bu matris denklemi üç tane bağımsız diferansiyel denklemden oluşan bir denklem sistemi verir. Bu denklem sistemi şu şekildedir;

$$\frac{\partial I_{11}(t)}{\partial t} - \gamma \text{Im}[I_{12}(t)\beta(t)] = 0 \quad (5.3.54a)$$

$$\frac{\partial I_{12}(t)}{\partial t} + \frac{i\gamma}{2}[I_{11}(t) - I_{22}(t)]\beta^*(t) - iI_{12}(t)B_3(t) = 0 \quad (5.3.54b)$$

$$\frac{\partial I_{22}(t)}{\partial t} - \gamma \text{Im}[I_{12}^*(t)\beta^*(t)] = 0$$

Son denklem  $\text{Im}(z^*) = -\text{Im}(z)$  eşitliğini kullanarak

$$\frac{\partial I_{22}(t)}{\partial t} + \gamma \text{Im}[I_{12}(t)\beta(t)] = 0 \quad (5.3.54c)$$

biçiminde yazılabilir. (5.3.54a) ve (5.3.54c) denklemleri toplanarak

$$\frac{\partial I_{11}(t)}{\partial t} + \frac{\partial I_{22}(t)}{\partial t} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial I_{11}(t)}{\partial t} = -\frac{\partial I_{22}(t)}{\partial t} \quad (5.3.54d)$$

elde edilir. Burada amacımız, (5.2.24) denklemi ile verilen Hamiltoniyen için, zaman evrimini hesaplayabileceğimiz bir tane invaryant işlemci bulmaktır. Aynı Hamiltoniyen için birden fazla invaryant işlemci bulunabilir ancak bu invaryant işlemcilerin hepsi aynı zaman evrimini verir [23]. Bu yüzden denklemleri mümkün olduğunca kolaylaştırmaya çalışacağız ve invaryant işlemcinin tüm elemanlarının yalnızca zaman değişkenine bağlı olduğunu varsayacağız. Böylece kısmi türev yerine tam türev kullanabiliriz. Bunun sonucunda (5.3.54d) denkleminin integrali alınarak

$$I_{11}(t) = -I_{22}(t) + c \quad (5.3.55)$$

elde edilir. Amacımız en kolay yoldan bir invaryant işlemci bulmak olduğundan  $c = 0$  kabul edebiliriz. Böylece

$$I_{11}(t) = -I_{22}(t) = \alpha_0(t) \quad (5.3.56)$$

tanımını yapabiliriz. Bu tanımları (5.3.54b) denkleminde yerine koyarak

$$\frac{\partial I_{12}(t)}{\partial t} + \frac{i\gamma}{2}2\alpha_0(t)\beta^*(t) - i\gamma I_{12}(t)B_3(t) = 0$$

ya da gerekli sadeleştirmeleri yaparak

$$\frac{\partial I_{12}(t)}{\partial t} + i\gamma[\alpha_0(t)\beta^*(t) - I_{12}(t)B_3(t)] = 0 \quad (5.3.57)$$

elde ederiz. Şu ana kadar invaryant işlemcinin elemanları için elde ettiğimiz denklemler karmaşık fonksiyonlar cinsinden denklemlerdir. Gerçek fonksiyonlar cinsinden diferansiyel denklemler elde etmek için,  $\alpha_1(t)$  ve  $\alpha_2(t)$  gerçek fonksiyonlar olmak üzere

$$I_{12}(t) = \alpha_1(t) + i\alpha_2(t) \quad (5.3.58)$$

tanımı yapalım ve (5.3.56), (5.3.58) ve (5.3.51) denklemlerindeki tanımları (5.3.54a) ve (5.3.57) denklemlerinde yerine koyalım. (5.3.54a) denklemindeki ikinci terim  $\alpha_1(t)$  ve  $\alpha_2(t)$  cinsinden

$$\begin{aligned} \text{Im}[I_{12}(t)\beta(t)] &= \text{Im}[(\alpha_1(t) + i\alpha_2(t))(B_1(t) + iB_2(t))] \\ &= \alpha_1(t)B_2(t) + \alpha_2(t)B_1(t) \end{aligned} \quad (5.3.59)$$

verir. Böylece (5.3.54a) denkleminde

$$\frac{d\alpha_0(t)}{dt} = \gamma[B_2(t)\alpha_1(t) + B_1(t)\alpha_2(t)] \quad (5.3.60a)$$

eşitliği elde edilir. (5.3.57) denkleminde,  $\alpha_0(t)$ ,  $\alpha_1(t)$ ,  $\alpha_2(t)$  ve  $B_1(t)$  ve  $B_2(t)$  cinsinden açıkça yazarak

$$\frac{d\alpha_1(t)}{dt} + i\frac{d\alpha_2(t)}{dt} = -i\gamma\left\{\alpha_0(t)[B_1(t) - iB_2(t)] - [\alpha_1(t) + i\alpha_2(t)]B_3(t)\right\}$$

elde edilir. Bu denklemin gerçel ve sanal kısımları birbirine eşitlenerek

$$\frac{d\alpha_1(t)}{dt} = -\gamma B_2(t)\alpha_0(t) - \gamma B_3(t)\alpha_2(t) \quad (5.3.60b)$$

$$\frac{d\alpha_2(t)}{dt} = -\gamma B_1(t)\alpha_0(t) + \gamma B_3(t)\alpha_1(t) \quad (5.3.60c)$$

elde edilir.

İnvariant işlemcinin elemanlarını bulmak için yazılan bu denklem sistemi, Schrödinger denkleminin çözümü için elde edilen (5.2.48) nolu denklem sisteminden bir hayli farklıdır. (5.3.60) denklem sistemi üç gerçel denklemden oluşurken, (5.2.48) denklem sistemi dört gerçel denklemden oluşmaktadır ve (5.2.48) nolu denklem sistemindeki denklemler, (5.3.60) nolu denklem sistemindeki denklemlerden daha fazla denklem içermektedir. Bu yüzden invariant işlemciyi sonlu boyutlu sistemlerde kullanmanın, Schrödinger denkleminin çözülemediği bazı durumlarda işe yarayabileceği düşünülebilir. Şimdi, manyetik alanın zamana bağlı olduğu bazı özel örnekleri inceleyeceğiz.

## 5.4. Bir Spin (1/2) Sisteminin Zamana Bağlı Manyetik Alanlar Altında Zaman Evrimi

### 5.4.1. Bir Spin (1/2) Sistemin $\vec{B}(t) = at^n \hat{e}_x + bt^n \hat{e}_y$ Alanı Altındaki Evrimi

Bu bölümde bir spinin iki bileşeni zamana üstel olarak bağlı

$$\vec{B}(t) = at^n \hat{e}_x + bt^n \hat{e}_y \quad (5.4.61)$$

manyetik alanı altındaki davranışını inceleyeceğiz. Manyetik alanı bu formda seçmemizin nedeni, bu manyetik alan altında evrilen bir spinin evrim işlemcisinin yukarıda bahsettiğimiz her üç yöntemle de hesaplanabiliyor olmasıdır. Böylece her üç yöntemin de kullanılabilirdiği durumda aynı sonucu verdiklerini özel bir örnek üzerinde göstermiş olacağız. Evrim işlemcisini ilk olarak standart yöntem ile hesaplayacağız. (5.4.61) denkleminde verilen manyetik alanın etkisi altında hareket eden bir spinin Hamiltoniyeni, (5.2.24) denkleminde

$$\hat{H} = -\frac{\gamma \hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & z^* t^n \\ z t^n & 0 \end{bmatrix} \quad (5.4.62)$$

olarak bulunur. Bu denklemde  $z = a + ib$  olarak alınmıştır. (5.4.62) denkleminde verilen Hamiltoniyenin elemanlarını oluşturan manyetik alan bileşenleri (5.2.28b)

koşulunu sağladığından, iki farklı zamandaki (5.4.62) Hamiltoniyenleri birbiri ile sıra değiştirirler. Böylece, bu sistemin ilerleticisini (5.2.25) formülünü kullanarak bulabiliriz. Daha önce de vurgulandığı gibi bir matrisin integrali, her bir elemanın integrali alınarak elde edilir [37]. Bu yüzden;

$$\hat{G}(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t H(t') dt' = \frac{\gamma}{2} \begin{bmatrix} 0 & z^* t^{n+1} \\ z \frac{t^{n+1}}{n+1} & 0 \end{bmatrix} \quad (5.4.63)$$

tanımı kullanılarak

$$\hat{U}(t) = \exp \left[ i \hat{G}(t) \right] \quad (5.4.64)$$

yazılabilir. Evrim işlemcisi  $\hat{U}(t)$  yi Hermitik  $\hat{G}(t)$  matrisinin bir fonksiyonudur. Bu yüzden Hermitik bir matrisin köşegenleştirilerek fonksiyonunu hesaplama yöntemi kullanılabilir [42]. İlk olarak matrisi bir benzerlik dönüşümü aracılığıyla köşegenleştirmek için matrisin özdeğerleri ve boylanmış (normalize) özvektörleri bulunur ve bu özvektörlerin sütunlarından oluşan  $S$  matrisi kurulur. Matrisin özdeğerleri ve bu özdeğerlere karşılık gele boylanmış özvektörleri sırasıyla şu şekildedir:

$$g_+ = \frac{\gamma |z| t^{n+1}}{2(n+1)}, \quad g_- = -\frac{\gamma |z| t^{n+1}}{2(n+1)}, \quad (5.4.65)$$

ve

$$|g_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{z^*}{|z|} \\ 1 \end{pmatrix} \quad |g_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{z^*}{|z|} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.4.66)$$

Bu özvektörler kullanılarak  $\hat{G}(t)$  matrisini  $S^{-1} \hat{G} S$  benzerlik dönüşümü aracılığıyla köşegenleştirecek  $S$  matrisi

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{z^*}{|z|} & -\frac{z^*}{|z|} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.4.67)$$

biçiminde elde edilir. Bu matrisin tersi

$$S^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{|z|}{z^*} \begin{pmatrix} 1 & \frac{z^*}{|z|} \\ -1 & \frac{z}{|z|} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (5.4.68)$$

şekindedir. Artık benzerlik dönüşümü yapılabilir:

$$S^{-1} G S = \hat{D}_G = \begin{pmatrix} \frac{\gamma |z| t^{n+1}}{2(n+1)} & 0 \\ 0 & -\frac{\gamma |z| t^{n+1}}{2(n+1)} \end{pmatrix} \quad (5.4.69)$$

Bir köşegen matrisin fonksiyonu köşegendeki elemanların fonksiyonları alınarak elde edilir [42]. Örneğin iki boyutlu köşegen bir matrisin fonksiyonu

$$f \left[ \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} f(a_1) & 0 \\ 0 & f(a_2) \end{pmatrix} \quad (5.4.70)$$

şeklindedir. Buradan

$$e^{i\hat{D}_G} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\gamma|z|t^{n+1}}{2(n+1)}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\gamma|z|t^{n+1}}{2(n+1)}} \end{pmatrix} \quad (5.4.71)$$

Son olarak ters benzerlik dönüşümü yapılarak ( $e^{i\hat{G}(t)} = S e^{i\hat{D}_G} S^{-1}$ ) evrim işlemcisi bulunur:

$$f(t) = \frac{\gamma|z|t^{n+1}}{2(n+1)} \quad (5.4.72)$$

şeklinde tanımlanmış olmak üzere evrim işlemcisinin matris ifadesi,

$$\hat{U}(t) = e^{i\hat{G}(t)} = \begin{pmatrix} \cos[f(t)] & \frac{i|z|}{z} \sin[f(t)] \\ \frac{iz}{|z|} \sin[f(t)] & \cos[f(t)] \end{pmatrix} \quad (5.4.73)$$

şeklindedir. Evrim işlemcisinin birimsellik (üniterlik,  $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$ ) özelliğini sağladığı kolaylıkla görülebilir.

Şimdi aynı problemi yani (5.4.62) Hamiltoniyeni altında evrilen bir spinin evrim işlemcisini bulma problemini Schrödinger denklemini çözüp sonuçları karşılaştıralım. İlgilendiğimiz spin sisteminin durum uzayı iki boyutludur ve iki boyutta herhangi bir durum vektörünün genel ifadesi (5.2.29) denkleminde verilmiştir. Bu gösterimde başlangıç durum vektörü

$$|\Psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} g_1(0) \\ g_2(0) \end{pmatrix} \quad g_1(0)^2 + g_2(0)^2 = 1 \quad (5.4.74)$$

vektörü olacaktır. Schrödinger denklemini çözerek evrim işlemcisini bulmak demek,  $|\Psi(t)\rangle$  vektörünü, her  $t$  anı için  $|\Psi(0)\rangle$  vektörü cinsinden verecek işlemciyi (matrisi) bulmak  $\Psi(t) = \hat{U}(t)\Psi(0)$  anlamına gelmektedir.

(5.2.29) vektörü ve (5.4.62) Hamiltoniyeni (5.2.30) denkleminde yerine konulduğunda

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} g_1(t) \\ g_2(t) \end{pmatrix} = -\frac{\gamma\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & z^*t^n \\ zt^n & 0 \end{bmatrix} \quad (5.4.75)$$

denklemini elde edilir. Bu matris denklemi  $g_1(t)$  ve  $g_2(t)$  fonksiyonlarını birinci dereceden çiftlenmiş bir differansiyel denklem sistem aracılığı ile birbiri ile ilişkilendirir:

$$\frac{dg_1(t)}{dt} = \frac{i\gamma}{2} z^* t^n g_2(t) \quad (5.4.76a)$$

$$\frac{dg_2(t)}{dt} = \frac{i\gamma}{2} z t^n g_1(t). \quad (5.4.76b)$$

Bu denklemler (5.4.76a) denkleminin bir kez daha zamana göre türevi alınıp, elde edilen denklemdeki  $g_2(t)$  ve  $dg_2(t)/dt$  fonksiyonlarından kurtulmak için yine (5.4.76) denklemleri kullanılarak ayrıştırılabilmektedir:

$$\frac{d^2 g_1(t)}{dt^2} - \frac{n}{t} \frac{dg_1(t)}{dt} - \frac{\gamma^2 |z|^2}{4} t^{2n} g_1(t) = 0 \quad (5.4.77)$$

Her ne kadar elde edilen (5.4.77) denklemi değişken katsayılı bir denklem olsa da, bu denklem

$$u = t^{n+1} \quad (5.4.78)$$

değişken dönüşümü kullanılarak,

$$\phi = \frac{\gamma |z|}{2(n+1)} \quad (5.4.79)$$

olmak üzere, sabit katsayılı

$$\frac{d^2 g_1(u)}{du^2} + \phi^2 g_1(u) = 0 \quad (5.4.80)$$

denklemine dönüştürülebilir. Bu denklemin genel çözümünün

$$g_1(u) = c_1 \cos(u) + c_2 \sin(u)$$

ya da  $t$  değişkeni cinsinden

$$g_1(t) = c_1 \cos(\phi t^{n+1}) + c_2 \sin(\phi t^{n+1}) \quad (5.4.81)$$

olduğu iyi bilinmektedir [37].  $g_1(t)$  nin bu ifadesi (5.4.76b) denkleminde yerine konarak  $g_2(t)$  fonksiyonunu bulmak mümkündür.

$$\frac{dg_2(t)}{dt} = \frac{i\gamma}{2} z t^n [c_1 \cos(\phi t^{n+1}) + c_2 \sin(\phi t^{n+1})]. \quad (5.4.82)$$

Bu denklem integre edilerek

$$g_2(t) = \frac{iz}{|z|} [c_1 \sin(\phi t^{n+1}) - c_2 \cos(\phi t^{n+1})]. \quad (5.4.83)$$

elde edilir. Burada vurgulamakta yarar olan bir nokta olduğunu düşünmekteyiz. (5.4.82) fonksiyonu integre edilirken  $g_2(t)$  fonksiyonuna üçüncü bir ( $c_3$ ) sabiti eklenmesi gerektiği düşünülebilir. Ancak  $g_1(t)$  ve  $g_2(t)$  fonksiyonları kontrol etmek için (5.4.76) denklemlerinde yerine konulduğunda  $c_3$  sabitinin sıfır olması gerektiği görülür. Bu fazladan sabitin ortaya çıkma nedeni (5.4.76) denklemlerini ayırıştırmak için (5.4.76a) denkleminin bir kez daha türevini almış olmamızdır.

Daha önce de belirttiğimiz gibi amacımız evrim işlemcisini bu yöntemle de bularak, standart yöntemle hesapladığımız (5.4.73) denklemindeki evrim işlemcisi ile karşılaştırmaktır. Bu nedenle  $|\Psi(t)\rangle$  vektörünü  $|\Psi(0)\rangle$  vektörü cinsinden belirlemeliyiz. Bu nedenle (5.4.81) ve (5.4.83) denklemlerindeki  $c_1$  ve  $c_2$  sabitlerini  $g_1(0)$  ve  $g_2(0)$  cinsinden yazmalıyız. Bu (5.4.81) ve (5.4.83) denklemlerinde  $t = 0$  alınarak kolaylıkla başarılabılır.

$$c_1 = g_1(0) \quad (5.4.84a)$$

$$c_2 = \frac{i|z|}{z} g_2(0) \quad (5.4.84b)$$

Bu eşitlikler kullanılarak (5.4.81) ve (5.4.83) denklemleri

$$g_1(t) = \cos(\phi t^{n+1}) g_1(0) + \frac{i|z|}{z} \sin(\phi t^{n+1}) g_2(0) \quad (5.4.85a)$$

$$g_2(t) = \frac{i|z|}{z} \sin(\phi t^{n+1}) g_1(0) + \cos(\phi t^{n+1}) g_2(0). \quad (5.4.85b)$$

şeklinde yazılabilir. (5.4.85) denklemlerinden evrim işlemcisini okumak kolaydır. (5.4.72) denkleminde tanımlanan  $f(t)$  fonksiyonunu kullanarak evrim işlemcisi

$$\hat{U}(t) = \begin{pmatrix} \cos[f(t)] & \frac{i|z|}{z} \sin[f(t)] \\ \frac{iz}{|z|} \sin[f(t)] & \cos[f(t)] \end{pmatrix}. \quad (5.4.86)$$

olarak bulunur ki, bu işlemci olması gerektiği gibi (5.4.73) denkleminde bulunan evrim işlemcisi ile aynıdır.



Son olarak (5.4.61) denklemleri ile verilen manyetik alanın etkisi altındaki spin sisteminin evrim işlemcisini invaryant işlemci yöntemini kullanarak bulalım. Bu sisteme etki eden manyetik alan bileşenleri, (5.3.60) denklemlerinde  $B_1(t) = at^n$ ,  $B_2(t) = bt^n$  ve  $B_3(t) = 0$  seçimlerine karşılık gelir. Böylece (5.3.60) denklemleri bu sistem için

$$\frac{d\alpha_0(t)}{dt} = \gamma bt^n \alpha_1(t) + \gamma at^n \alpha_2(t) \quad (5.4.87a)$$

$$\frac{d\alpha_1(t)}{dt} = -\gamma bt^n \alpha_0(t) \quad (5.4.87b)$$

$$\frac{d\alpha_2(t)}{dt} = -\gamma at^n \alpha_0(t) \quad (5.4.87c)$$

halini alır. Bu denklem sistemi de çözülebilir bir denklem sistemidir. (5.4.76a) denkleminde yaptığımızı benzer bir biçimde bu denklem sisteminde de ilk denklem olan (5.4.87a) denkleminin zamana göre bir kez daha türevini alarak ve elde edilen denklemde  $\alpha_1(t)$  ve  $\alpha_2(t)$  fonksiyonlarından kurtulmak için tekrar (5.4.87) denklemlerini kullanarak (5.4.87a) denklemini

$$\frac{d^2\alpha_0(t)}{dt^2} - \frac{n}{t} \frac{d\alpha_0(t)}{dt} + k^2 t^{2n} \alpha_0(t) = 0 \quad (5.4.88)$$

haline getirilir. Bu denklemdeki  $k^2$  sabiti

$$k^2 = (\gamma a)^2 + (\gamma b)^2 \quad (5.4.89)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Bu denklem (5.4.77) denklemini ile aynı formdadır ve o denklemde olduğu gibi, (5.4.78) dönüşümü kullanılarak çözümlenerek,  $c_4$  ve  $c_5$  differansiyel denklemin çözümünden gelen rastgele sabitler olmak üzere

$$\alpha_0(t) = c_4 \cos\left(\frac{k t^{n+1}}{n+1}\right) + c_5 \sin\left(\frac{k t^{n+1}}{n+1}\right) \quad (5.4.90)$$

bulunur.  $\alpha_0(t)$  nin bu ifadesi (5.4.87b) ve (5.4.87c) denklemlerinde yerine konduktan sonra bu denklemler birinci dereceden olup denklemlerin sağ taraflarında bilinmeyen fonksiyonun herhangi bir terimi bulunmadığından kolaylıkla integre edilerek  $\alpha_1(t)$  ve  $\alpha_2(t)$  fonksiyonları sırasıyla

$$\alpha_1(t) = -\frac{\gamma b}{k} \left[ c_4 \sin\left(\frac{k t^{n+1}}{n+1}\right) - c_5 \cos\left(\frac{k t^{n+1}}{n+1}\right) \right] \quad (5.4.91)$$

ve

$$\alpha_2(t) = -\frac{\gamma a}{k} \left[ c_4 \sin \left( \frac{k t^{n+1}}{n+1} \right) - c_5 \cos \left( \frac{k t^{n+1}}{n+1} \right) \right] \quad (5.4.92)$$

bulunur. Böylece (5.3.56), (5.3.58), (5.4.90), (5.4.91) ve (5.4.92) denklemleri kullanılarak bu sistem için invaryant işlemci elde edilir:

$$\hat{I}(t) = \begin{pmatrix} \cos[\xi_{n+1}(t)] & -\frac{\gamma}{k}(b+ia) \sin[\xi_{n+1}(t)] \\ -\frac{\gamma}{k}(b+ia) \sin[\xi_{n+1}(t)] & \cos[\xi_{n+1}(t)] \end{pmatrix}. \quad (5.4.93)$$

Bu denklemdeki  $\xi_{n+1}(t)$  fonksiyonu

$$\xi_n(t) = \frac{kt^n}{n} \quad (5.4.94)$$

olarak tanımlanmıştır.

İnvariant matris yönteminin zamana açıkça bağlı Hamiltoniyenlerin Schrödinger denkleminin çözümünde yararlı olmasının nedeni gerekirse zamana bağlı fazlar kullanarak özvektörlerinin Schrödinger denklemini çözecek şekilde seçilebiliyor olmasıdır [23] (Ayrıca bkz. Ekler). Bu nedenle öncelikle invaryant işlemcinin özdeğer ve özvektörlerini elde ettik. (5.4.93) denklemindeki invaryant matrisin özdeğerleri

$$\lambda_+ = 1 \quad \text{ve} \quad \lambda_- = -1 \quad (5.4.95)$$

dir. Burada genel teoride kanıtlandığı gibi invaryant matrisin elemanları zamana bağlı olsa da özdeğerlerin birer sabit olduğu açıkça görülmektedir. (5.4.95) denkleminde verilen özdeğerlere karşılık gelen özvektörler ise  $z = a + ib$  olmak üzere

$$|\lambda_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{i\gamma z^*}{k} \cos \left[ \frac{\xi_{n+1}}{2} \right] \\ \sin \left[ \frac{\xi_{n+1}}{2} \right] \end{pmatrix} \quad (5.4.96)$$

ve

$$|\lambda_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{i\gamma z^*}{k} \sin \left[ \frac{\xi_{n+1}}{2} \right] \\ \cos \left[ \frac{\xi_{n+1}}{2} \right] \end{pmatrix} \quad (5.4.97)$$

şeklinindedir. İnvaryant işlemci Hermitik bir matris olduğundan ve bu iki özvektör farklı özdeğerlere karşılık geldiğinden özvektörler birbirine ortogonal olmalıdır.

$\gamma^2|z|^2 = k^2$  eşitliği dikkate alınarak bu vektörlerin birbirine ortogonal olduğu kolaylıkla görülebilir.

$|\lambda_+(t)\rangle$  ve  $|\lambda_-(t)\rangle$  vektörlerin her ikisi de (5.4.62) denkleminde verilen Hamiltoniyen için Schrödinger denklemini sağlamaktadırlar. Diğer bir deyişle  $\hat{H}(t)$  (5.4.62) denkleminde verilen Hamiltoniyen olmak kaydıyla,  $|\lambda_+(t)\rangle$  ve  $|\lambda_-(t)\rangle$  vektörleri

$$i\hbar \frac{d\lambda_{\pm}(t)}{dt} = \hat{H}(t)\lambda_{\pm}(t)$$

denklemini sağlamaktadırlar. Bu iki vektör Hermitik olan invaryant matrisin özvektörleri olduğundan durum uzayını tararlar. Yani durum uzayındaki her vektör bu iki vektörün bir çizgisel (lineer) bileşimi olarak yazılabilir. Bu sayede ve bu iki vektör Schrödinger denklemini sağladığından durum uzayındaki her vektörün zaman evrimi bu iki vektör yardımı ile bulunabilir. Öncelikle verilen başlangıç durumu bu vektörler cinsinden açılır:

$$|\Psi(0)\rangle = a_1|\lambda_+(0)\rangle + a_2|\lambda_-(0)\rangle. \quad (5.4.98)$$

Schrödinger denklemini sağladığından, başlangıç vektörünün daha sonraki bir  $t$  anındaki ifadesi  $|\lambda_+(t)\rangle$  ve  $|\lambda_-(t)\rangle$  nin (5.4.98) denkleminde başlangıç anı için verilen açılımı ile aynıdır:

$$|\Psi(t)\rangle = a_1|\lambda_+(t)\rangle + a_2|\lambda_-(t)\rangle. \quad (5.4.99)$$

İlgilendiğimiz problem için bu işlemleri yapmadan önce vurgulamakta yarar olan bir nokta vardır. İnvaryant işlemcinin ilk hesaplanan özvektörleri Schrödinger denklemini hemen sağlamayabilirler. Bu durumda bu özvektörleri zaman bağlı bir faz ile çarpmak gerekir [23]. Ancak bu problemde ilk bulunan özvektörler Schrödinger denklemini sağladığından buna gerek kalmamıştır.

Şimdi (5.2.29) denkleminde verilen iki boyutlu bir uzayda en genel durum vektörünün zaman evrimini  $|\lambda_+(t)\rangle$  ve  $|\lambda_-(t)\rangle$  vektörleri aracılığı ile bulalım.

(5.2.29) denkleminde verilen durumun  $t = 0$  anındaki ifadesi

$$|\Psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} g_1(0) \\ g_2(0) \end{pmatrix}$$

dır.  $|\lambda_+(t)\rangle$  ve  $|\lambda_-(t)\rangle$  vektörlerinin  $t = 0$  anındaki ifadeleri ise (5.4.96) ve (5.4.96) denklemlerinden

$$|\lambda_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{i\gamma z^*}{k} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.4.100)$$

ve

$$|\lambda_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.4.101)$$

bulunur. Buradan  $|\Psi(0)\rangle$  ın  $t = 0$  anında,  $|\lambda_{\pm}(0)\rangle$  vektörleri cinsinden açımı

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{i\gamma z}{k} g_1(0) |\lambda_+(0)\rangle + g_2(0) |\lambda_-(0)\rangle \quad (5.4.102)$$

bulunur. O halde yukarıda anlatılanlardan herhangi bir andaki durum vektörü

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{i\gamma z}{k} g_1(0) |\lambda_+(t)\rangle + g_2(0) |\lambda_-(t)\rangle \quad (5.4.103)$$

olarak elde edilir.  $|\lambda_{\pm}(0)\rangle$ , (5.4.96) ve (5.4.97) denklemlerinden yerine konarak ve  $|\Psi(t)\rangle$  nin (5.2.20) denkleminde verilen sütun vektörü hali kullanılarak

$$\begin{pmatrix} g_1(t) \\ g_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\gamma^2 |z|^2}{k^2} \cos\left[\frac{\xi_{n+1}}{2}\right] g_1(0) + \frac{i\gamma z^*}{k} \sin\left[\frac{\xi_{n+1}}{2}\right] g_2(0) \\ \frac{i\gamma z}{k} \sin\left[\frac{\xi_{n+1}}{2}\right] \cos\left[\frac{\xi_{n+1}}{2}\right] g_1(0) + g_2(0) \end{pmatrix} \quad (5.4.104)$$

elde edilir. (5.4.72) denkleminde verilen  $f(t)$  fonksiyonunun  $f(t) = \frac{\xi_{n+1}}{2}$  ve  $k^2 = \gamma^2 |z|^2 \rightarrow k = \gamma |z|$  olduğu dikkate alınarak

$$\hat{U}(t) = \begin{pmatrix} \cos[f(t)] & \frac{i|z|}{z} \sin[f(t)] \\ \frac{i|z|}{z} \sin[f(t)] & \cos[f(t)] \end{pmatrix}. \quad (5.4.105)$$

bulunur. Bu daha önce diğer iki yöntemle buluna evrim işlemcileri ile aynıdır. Bu sonuç bir anlamda ivaryant işlemci yönteminin standart metotların çalıştığı bir durumda test edilmesini sağlamıştır.

## 5.4.2. İnvaryant İşlemci ile Çözülebilir Bir Sistem

Bu ünite de son olarak yalnız invaryant işlemci ile analitik olarak çözülebilen bir durumu ele alacağız. Yapılan hesaplamaları anlatmadan önce vurgulanması gereken bir nokta, bu bölümde invaryant işlemci (bkz. (5.4.119) denklemi) bulunduktan sonra elde edilen ifadelerin uzunluğu nedeni ile, hesaplamaları yaparken Mathematica programından yararlandığımızdır.

$B_0$  ve  $B_{\perp}$  manyetik alan,  $\omega$  frekans boyutunda birer sabit olmak üzere

$$\vec{B}(t) = B_{\perp} \cos(\omega t) \hat{e}_x + B_0 \hat{e}_y + B_{\perp} \sin(\omega t) \hat{e}_z \quad (5.4.106)$$

manyetik alanının etkisindeki bir spini ele alalım. Bu manyetik alanın bileşenlerinin

$$B_1 = B_{\perp} \cos(\omega t), \quad B_2 = B_0, \quad B_3 = B_{\perp} \sin(\omega t) \quad (5.4.107)$$

olduğu aşıkardır. Bu bileşenler (5.2.24) denkleminde yerine konarak bu sistemin Hamiltoniyeni

$$\hat{H} = -\frac{\gamma \hbar}{2} \begin{bmatrix} B_{\perp} \sin(\omega t) & B_{\perp} \cos(\omega t) - iB_0 \\ B_{\perp} \cos(\omega t) + iB_0 & -B_{\perp} \sin(\omega t) \end{bmatrix} \quad (5.4.108)$$

olarak elde edilir. Bu Hamiltoniyeni oluşturan manyetik alan bileşenlerinin (5.2.28a) ve (5.2.28b) koşullarının her ikisini de sağlamamaktadırlar. Bu yüzden bu sistem için evrim işlemcisi (5.2.25) denklemi ile elde edilemez. Ayrıca (5.4.107) denklemdeki bileşenler için Schrödinger denkleminin doğrudan bir çözümünü denemek çözülebilir bir denklem sistemi vermemektedir. Bu nedenle çözümü invaryant işlemci yöntemi ile bulmayı deneyeceğiz.

İnvaryant işlemciyi kullanarak çözümü elde etmek için ilk olarak (5.4.107) denklemlerinde verilen manyetik alan bileşenleri (5.3.60) denklemlerinde yerine koyarak

$$\frac{d\alpha_0(t)}{dt} = \gamma B_0 \alpha_1(t) + \gamma B_{\perp} \cos(\omega t) \alpha_2(t) \quad (5.4.109a)$$

$$\frac{d\alpha_1(t)}{dt} = -\gamma B_0 \alpha_0(t) - \gamma B_{\perp} \sin(\omega t) \alpha_2(t) \quad (5.4.109b)$$

$$\frac{d\alpha_2(t)}{dt} = -\gamma B_p \cos(\omega t) \alpha_0(t) + \gamma B_{\perp} \sin(\omega t) \alpha_1(t) \quad (5.4.109c)$$

denklem sistemi elde edilir. Şimdi amacımız bu denklem sistemini çözerek invaryant işlemciyi (ya da matrisi) kurmaktır. Bu denklem sistemini çözmek için denklemler ayrıştırılırken ilk olarak (5.4.109c) denkleminin zamana göre iki kez türevi alınıp bu denklemdeki  $\alpha_0(t)$  ve  $\alpha_1(t)$  fonksiyonlarından kurtulmak için gereken her seferde yine (5.4.109) kullanılmalıdır. Bu yapıldığında yalnızca  $\alpha_2(t)$  fonksiyonu cinsinden

$$\frac{d^3 \alpha_2(t)}{dt^3} + [(\gamma B_{\perp})^2 + (\omega - \gamma B_0)^2] \frac{d\alpha_2(t)}{dt} = 0 \quad (5.4.110)$$

denklemini elde edilir. Bu denklem

$$h(t) = \frac{d\alpha_2(t)}{dt} \quad (5.4.111)$$

ve

$$\Gamma = \sqrt{(\gamma B_{\perp})^2 + (\omega - \gamma B_0)^2} \quad (5.4.112)$$

tanımları yapılarak çözümü iyi bilinen ikinci dereceden

$$\frac{d^2 h(t)}{dt^2} + \Gamma^2 h(t) = 0 \quad (5.4.113)$$

denklemine dönüştürülebilir. Bu denklemin çözümü iyi bilinmektedir:

$$h(t) = b_1 \cos(\Gamma t) + b_2 \sin(\Gamma t). \quad (5.4.114)$$

Bu denklemde elde edilen  $h(t)$  fonksiyonunun çözümü bir kez integre edilerek  $\alpha_2(t)$  fonksiyonu

$$\alpha_2(t) = \frac{b_1}{\Gamma} \sin(\Gamma t) - \frac{b_2}{\Gamma} \cos(\Gamma t) + b_3. \quad (5.4.115)$$

olarak bulunur.  $\alpha_2(t)$  fonksiyonu için bulunan bu ifade (5.4.109b) ve (5.4.109c) denklemlerinde yerine konursa bu kez  $\alpha_0(t)$  ve  $\alpha_1(t)$  bilinmeyen fonksiyonları için iki tane differansiyel denklemden oluşan homojen olmayan birinci dereceden bir denklem sistemi elde edilir. Bu denklem sistemi bu bölümün başında genel sistemin Schrödinger denklemi çözümlerini anlattığımız (5.2.32) çiftlenmiş denkleminin ayrıştırılmasına benzer bir şekilde integral çarpanı kullanılarak

ayrıştırılabilmektedir. Bu ayrıştırma yapıp elde edilen yalnızca  $\alpha_0(t)$  ve  $\alpha_1(t)$  için denklemler çözümlenerek

$$\begin{aligned}\alpha_0(t) &= -\frac{\gamma B_{\perp} b_1}{2\Gamma} \left\{ \frac{1}{\gamma + \omega} \cos[(\Gamma + \omega)t] + \frac{1}{\gamma - \omega} \cos[(\Gamma - \omega)t] \right\} \\ &\quad - \frac{\gamma B_{\perp} b_2}{2\Gamma} \left\{ \frac{1}{\gamma + \omega} \sin[(\Gamma + \omega)t] + \frac{1}{\gamma - \omega} \sin[(\Gamma - \omega)t] \right\} \\ &\quad + \frac{\gamma B_{\perp} b_3}{\omega} \sin(\omega t).\end{aligned}\quad (5.4.116)$$

ve

$$\begin{aligned}\alpha_1(t) &= -\frac{\gamma B_{\perp} b_1}{2\Gamma} \left\{ \frac{1}{\gamma + \omega} \sin[(\Gamma + \omega)t] - \frac{1}{\gamma - \omega} \sin[(\Gamma - \omega)t] \right\} \\ &\quad - \frac{\gamma B_{\perp} b_2}{2\Gamma} \left\{ -\frac{1}{\gamma + \omega} \cos[(\Gamma + \omega)t] + \frac{1}{\gamma - \omega} \cos[(\Gamma - \omega)t] \right\} \\ &\quad + \frac{\gamma B_{\perp} b_3}{\omega} \cos(\omega t).\end{aligned}\quad (5.4.117)$$

elde edilir. (5.4.116), (5.4.117) ve (5.4.115) denklemlerindeki  $b_1$ ,  $b_2$  ve  $b_3$  sabitlerinin seçimlerine göre birçok farklı invaryant işlemci matrisi elde edilebilir. Ancak bu matrislerin hepsi de kuantum mekaniğinde geçiş olasılıkları gibi gözlenebilir olgularda aynı sonucu vereceklerdir [23]. Bu yüzden en kolay hesap yapılabilecek invaryant matris seçilmelidir. Bu da  $b_1 = b_2 = 0$ ,  $b_3 = 1$  seçimine karşılık gelmektedir. Bu seçimle  $\alpha_0(t)$ ,  $\alpha_1(t)$  ve  $\alpha_2(t)$  fonksiyonları

$$\alpha_0(t) = \frac{\gamma B_{\perp}}{\omega} \sin(\omega t) \quad (5.4.118a)$$

$$\alpha_1(t) = \frac{\gamma B_{\perp}}{\omega} \cos(\omega t) \quad (5.4.118b)$$

$$\alpha_2(t) = 1 \quad (5.4.118c)$$

biçiminde basitleşir. Bu seçimle bu sistem için invaryant matris,

$$\hat{I}(t) = \begin{pmatrix} \frac{\gamma B_{\perp}}{\omega} \sin(\omega t) & \frac{\gamma B_{\perp}}{\omega} \cos(\omega t) - i \\ \frac{\gamma B_{\perp}}{\omega} \cos(\omega t) + i & -\frac{\gamma B_{\perp}}{\omega} \sin(\omega t) \end{pmatrix}. \quad (5.4.119)$$

olarak elde edilir. Şimdi bu matrisin özdeğerlerini ve Schrödinger denklemini sağlayan özvektörlerini bulmaya çalışalım. Bu matris  $2 \times 2$  lik bir matris

olduğundan özdeğerlerini bulmak kolaydır:

$$\lambda_+ = \frac{\sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2}}{\gamma B_0 - \omega}, \quad \lambda_- = \frac{\sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2}}{\gamma B_0 - \omega} \quad (5.4.120)$$

Bu özdeğerlere karşılık gelen özvektörler de

$$|\tilde{\lambda}_+ \rangle = \begin{pmatrix} \frac{i(\sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2} - \gamma B_\perp \sin(\omega t))}{\gamma B_0 - \omega - i\gamma B_\perp \cos(\omega t)} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.4.121a)$$

$$|\tilde{\lambda}_- \rangle = \begin{pmatrix} \frac{i(\sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2} + \gamma B_\perp \sin(\omega t))}{\gamma B_0 - \omega - i\gamma B_\perp \cos(\omega t)} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.4.121b)$$

şeklinde. Bu özvektörlerin boylanmış olmadığına dikkat ediniz. Bunu bilerek tercih ettik çünkü boylanmış özvektörlerle zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümlerini kontrol etmek daha zor olmaktadır. Bu yüzden öncelikle boylanmamış özvektörlerle çalışıp, olasılık hesabı yaparken vektörleri boylayacağız.

(5.4.121) denkleminde verilen özvektörler ne yazık ki Schrödinger denklemini sağlamamaktadırlar. Ancak, invaryant işlemcinin genel teorisinden bildiğimiz gibi [23], bu vektörler zamana bağlı bir fazla  $(\theta(t) \in \mathbb{R}$  olmak üzere  $e^{i\theta(t)}$ ) çarpılarak, Schrödinger denklemini sağlayan vektörler de elde edilebilmektedir ve elde edilen yeni vektörler invaryant işlemcinin özvektörlerinden yalnız bir faz çarpanı kadar farklı olduklarından invaryant işlemcinin özvektörleridir (Ayrıntılar için ekler kısmına bakınız).

Faz çarpımı sonucu elde edilen vektörlerin yozlaşmanın olmadığı durumlarda Schrödinger denklemini sağlaması için  $|\lambda(t)\rangle$  invaryant işlemcinin yozlaşmamış bir özvektörünü göstermek üzere

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = \langle \lambda(t) | i \frac{d}{dt} - \hat{H} | \lambda(t) \rangle \quad (5.4.122)$$



denklemini sağlamalıdır [23]. İlgilendiğimiz sistemdeki özvektörlerde yozlaşma olmadığından her iki vektör için de bu denklemi kullanabiliriz:

$$\frac{d\theta_+(t)}{dt} = \langle \lambda_+(t) | i \frac{d}{dt} - \hat{H} | \lambda_+(t) \rangle \quad (5.4.123a)$$

$$\frac{d\theta_-(t)}{dt} = \langle \lambda_-(t) | i \frac{d}{dt} - \hat{H} | \lambda_-(t) \rangle. \quad (5.4.123b)$$

(5.4.108) Hamiltoniyeni ve (5.4.121a) ve denklemlerindeki özvektörler sırasıyla, (5.4.123a) ve (5.4.123b) denklemlerinde yerine konduğunda  $\theta_+$  ve  $\theta_-$  için

$$\frac{d\theta_+(t)}{dt} = \frac{\sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2} [\gamma B_0 - i\gamma B_\perp \cos(\omega t)] + \gamma B_\perp \omega \sin(\omega t)}{2(\gamma B_0 - i\gamma B_\perp \cos(\omega t) - \omega)} \quad (5.4.124a)$$

$$\frac{d\theta_-(t)}{dt} = \frac{-\sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2} [\gamma B_0 - i\gamma B_\perp \cos(\omega t)] + \gamma B_\perp \omega \sin(\omega t)}{2(\gamma B_0 - i\gamma B_\perp \cos(\omega t) - \omega)}. \quad (5.4.124b)$$

Bu denklemler integre edilerek faz fonksiyonları

$$\begin{aligned} \theta_+(t) &= \frac{t}{2} \sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2} + \tan^{-1} \left( \frac{(\gamma B_0 + i\gamma B_\perp - \omega) \tan \left[ \frac{\omega t}{2} \right]}{\sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2}} \right) \\ &- \frac{i}{4} \log \{ 2(\gamma B_0 - \omega)^2 + [(\gamma B_\perp)^2 + 1] \cos(2\omega t) \} \\ &- \frac{1}{2} \tan^{-1} \left[ \frac{\gamma B_\perp \cos(\omega t)}{B_0 - \omega} \right] \end{aligned} \quad (5.4.125a)$$

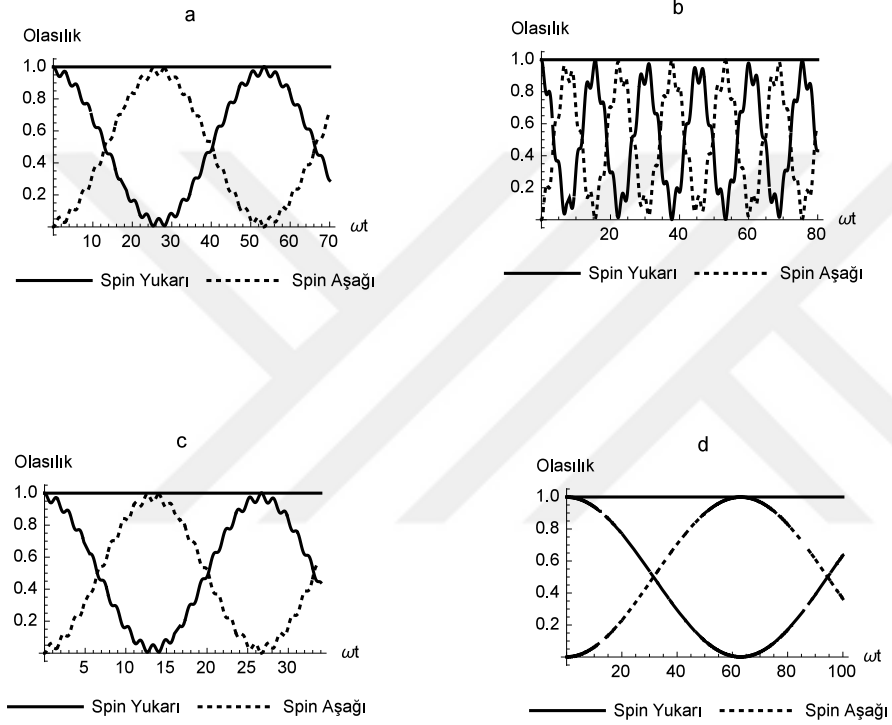
$$\begin{aligned} \theta_-(t) &= -\frac{t}{2} \sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2} - \tan^{-1} \left( \frac{(\gamma B_0 + i\gamma B_\perp - \omega) \tan \left[ \frac{\omega t}{2} \right]}{\sqrt{(\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_\perp)^2}} \right) \\ &- \frac{i}{4} \log \{ 2(\gamma B_0 - \omega)^2 + [(\gamma B_\perp)^2 + 1] \cos(2\omega t) \} \\ &- \frac{1}{2} \tan^{-1} \left[ \frac{\gamma B_\perp \cos(\omega t)}{B_0 - \omega} \right] \end{aligned} \quad (5.4.125b)$$

olarak bulunur. Bu fazlar kullanılarak (5.4.119) denkleminde verilen invaryant işleminin Schrödinger denklemini sağlayan özvektörleri  $|\tilde{\lambda}_\pm\rangle$  (5.4.121) ve  $\theta_\pm$  (5.4.125) denklemlerinde verilmek üzere

$$|\lambda_+\rangle = e^{i\theta_+} |\tilde{\lambda}_+\rangle \quad (5.4.126a)$$

$$|\lambda_-\rangle = e^{i\theta_-} |\tilde{\lambda}_-\rangle \quad (5.4.126b)$$

z yönünde spin yukarı ve aşağı bulunma olasılıklarının değişimi



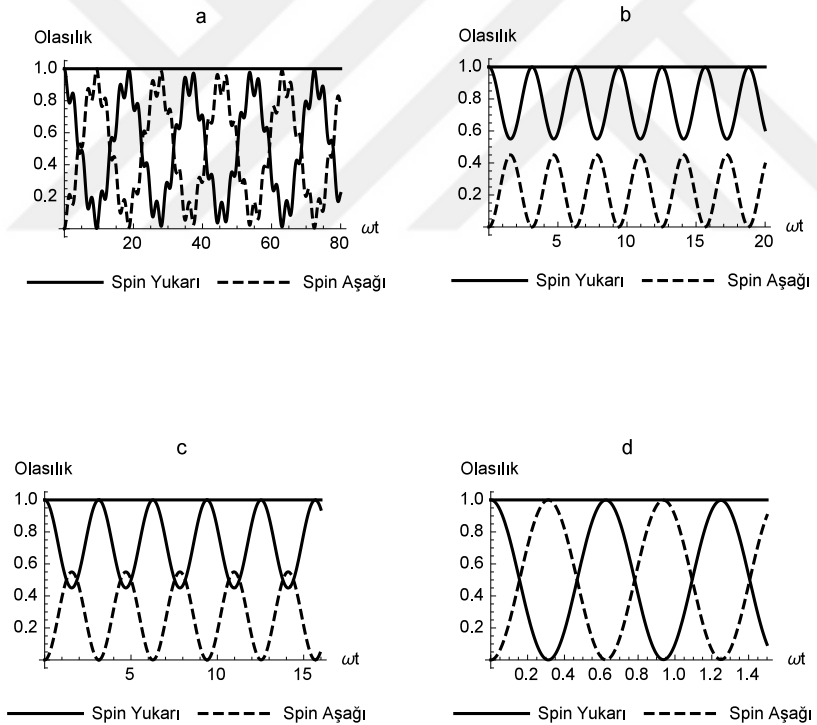
Şekil 5.1.  $\gamma B_0 = 0$ , a)  $\gamma B_{\perp} = 1/2 \omega$ , b)  $\gamma B_{\perp} = \omega$ , c)  $\gamma B_{\perp} = 2 \omega$ , d)  $\gamma B_{\perp} = 10 \omega$

Bu iki vektör Schrödinger denklemini sağladıklarından, bir önceki bölümde anlatıldığı gibi herhangi bir başlangıç durum vektörü bu vektörlerin başlangıç anındaki ifadeleri cinsinden açılarak, vektörün daha sonraki ifadesi, aynı açılım katsayıları,  $|\lambda_{\pm}\rangle$  vektörlerinin açılım katsayıları alınarak bulunur.

Elde edilen denklemlerin karmaşıklığı nedeni ile bu açılımları daha önce de belirttiğimiz gibi Mathematica programı kullanarak yaptık. Şimdi farklı başlangıç durumlarının (5.4.108) Hamiltoniyenin etkisi altında evrilirken farklı durumlara geçiş olasılıklarını inceleyeceğiz.

İlk olarak başlangıçta  $z$  yönünde spin pozitif durumda olan  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  bir spinin (5.4.119) denklemindeki Hamiltoniyenin etkisi altında evrilirken, yine spin  $z$  yönünde pozitif ya da spin  $z$  yönünde negatif bir durumda bulunma olasılıklarının zamanla değişimini farklı  $\gamma B_0$  ve  $\gamma B_{\perp}$  değerleri için grafiklerle göstereceğiz. Bu grafikler  $\gamma B_0$  ve  $\gamma B_{\perp}$  in  $\omega$  nın farklı oranlarına göre çizilmiştir.

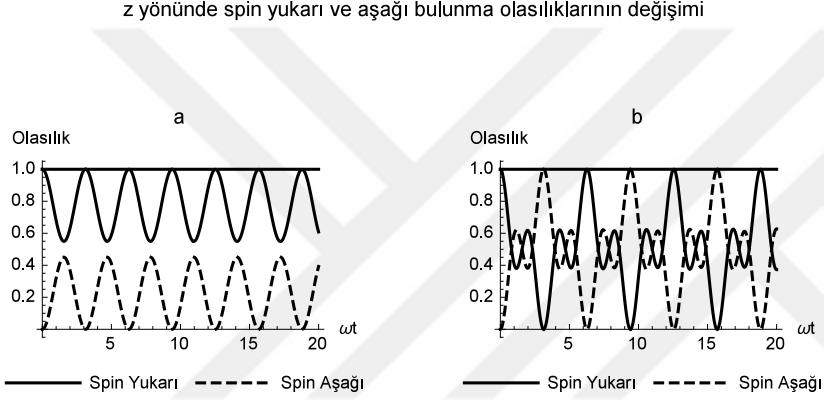
$z$  yönünde spin yukarı ve aşağı bulunma olasılıklarının değişimi



Şekil 5.2.  $\gamma B_{\perp} = \omega$ , a)  $\gamma B_0 = 1/10 \omega$ , b)  $\gamma B_0 = 9/10 \omega$ , c)  $\gamma B_0 = 11/10 \omega$ , d)  $\gamma B_0 = 10 \omega$

Şekil 5.1 deki grafiklerin tümünde manyetik alanın sabit bileşeni  $\gamma B_0 = 0$  alınmış ve a, b, c ve d grafiklerinde sırasıyla  $\gamma B_{\perp} = 1/2(\omega)$ ,  $\gamma B_{\perp} = (\omega)$ ,  $\gamma B_{\perp} = 2(\omega)$  ve  $\gamma B_{\perp} = 10(\omega)$  için başlangıçta spin  $z$  yönünde pozitif olan bir durumun geçiş olasılıklarının zamanla değişimi gösterilmiştir. Tüm bu grafiklerde geçiş

olasılıkları zamanla kesinlik ve sıfır olasılık arasında salınmakla birlikte  $\gamma B_{\perp}$  in görece küçük değerler aldığı ilk üç grafikte salınımın kendi içinde de dalgalanmalar gösterdiği ancak  $\gamma B_{\perp}$  in diğer üç grafiğe göre oldukça büyük değerler aldığı Şekil 5.1 in son grafiğinde bu iç dalgalanmaların sönümlendiği görülmektedir.



Şekil 5.3. a)  $\gamma B_{\perp} = \omega, \gamma B_0 = 9/10 \omega$ , b)  $\gamma B_{\perp} = 2\omega, \gamma B_0 = 9/10 \omega$

Şekil 5.2 deki grafiklerin tümünde manyetik alanın salınan bileşenlerinin genliği ile ilgili terim  $\gamma B_{\perp} = \omega$  alınmış ve sabit bileşen ile ilgili terim  $\gamma B_0$  a, b, c ve d grafiklerinde sırasıyla  $\gamma B_0 = (1/10) \omega$ ,  $\gamma B_0 = (9/10) \omega$ ,  $\gamma B_0 = (11/10) \omega$  ve  $\gamma B_0 = 10(\omega)$  alınmıştır. Bu değerlerin seçilmesindeki amaç şu şekilde özetlenebilir: İlk olarak  $\gamma B_0$  in sıfırdan farklı ama küçük bir değeri seçilerek sabit terimin etkisini Şekil 5.1 grafiklerle karşılaştırabilmek; daha sonra ise (5.4.120) denkleminde de görülebileceği gibi invaryant matrisin özdeğerlerinin sonsuza gitmesine yol açan  $\gamma B_0 = \omega$  değerine yakın iki değer, sırasıyla ( $\gamma B_0 - \omega$ ) ifadesini negatif ve pozitif yapacak biçimde seçip, rezonans olarak adlandırılacak bir değere yakın değerlerde olasılıkları incelemek ve son olarak manyetik alanın sabit bileşeninin, salınan bileşen  $\gamma B_{\perp}$  e ve  $\omega$  ya göre oldukça büyük olduğu durumda olasılıkların değişimini görebilmektir.  $\gamma B_0$  in sıfırdan farklı ama küçük bir değer aldığı Şekil 5.2 a) grafiği, özellikle  $\gamma B_{\perp}$  in aynı değeri aldığı Şekil 5.1 b) grafiği ile

karşılaştırıldığında olasılıkların değişiminin  $\gamma B_0$  bileşeninin olmadığı durumdakine benzer biçimde sıfır ile bir arasında değiştiği ve grafikteki iç dalgalanmaların varlığını sürdürdüğü farkedilmektedir. Ancak manyetik alanın sabit bileşeninin artarak  $\gamma B_0$  in rezonansa yakın olduğu değerlerde olasılıkların artık sıfır ile bir arasında değişmediği, başlangıç durumunun ileriki bir zamanda kendi ile aynı durumda bulunma olasılığının hiçbir zaman yok olmadığı diğer bir deyişle spin dönme (spin flip) olayının bu değerlerde gerçekleşmediği görülmektedir. Ayrıca,  $\gamma B_0$  in artmasıyla olasılıkların zamanla değişiminin düzgün eğriler haline gelip iç dalgalanmalar göstermediği de gözlemlenmektedir. Şekil 5.2 d) de gösterildiği gibi,  $\gamma B_0$  değeri daha da büyüyüp rezonanstan uzaklaştıkça olasılıkların salınımının tekrar sıfır ile bir arasında salınmaya başladığı ve olasılık eğrilerinin iç dalgalanmalar göstermeyip düzgün şeklini koruduğu farkedilmektedir.

Şekil 5.3 de  $\gamma B_0$  rezonansa yakın olduğu  $\gamma B_0 = (9/10)\omega$  değerinde iken  $\gamma B_{\perp}$  arttırıldığında olasılıklara etkisi anlaşılmaya çalışılmış ve  $\gamma B_{\perp}$  in artmasıyla birlikte olasılık salınımlarının yine kesinlik ve sıfır arasında olduğu görülmüştür.

İlk olarak incelediğimiz başlangıç durumunun z yönünde spin pozitif olduğu durum sistemin Hamiltoniyeninin başlangıç anındaki ( $t = 0$ ) öz durumu değildir. Bu nedenle ayrıca başlangıç durumunun ( $t = 0$ ) anındaki Hamiltoniyenin öz durumlarından biri olduğunda  $\gamma B_{\perp}$  ve  $\gamma B_0$  ın farklı değerlerindeki geçiş olasılıklarının zamanla değişimini de inceledik. (5.4.108) denkleminde  $t = 0$  alındığında Hamiltoniyen

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{\hbar}{2}(\gamma B_{\perp} - i\gamma B_0) \\ -\frac{\hbar}{2}(\gamma B_{\perp} - i\gamma B_0) & 0 \end{pmatrix} \quad (5.4.127)$$

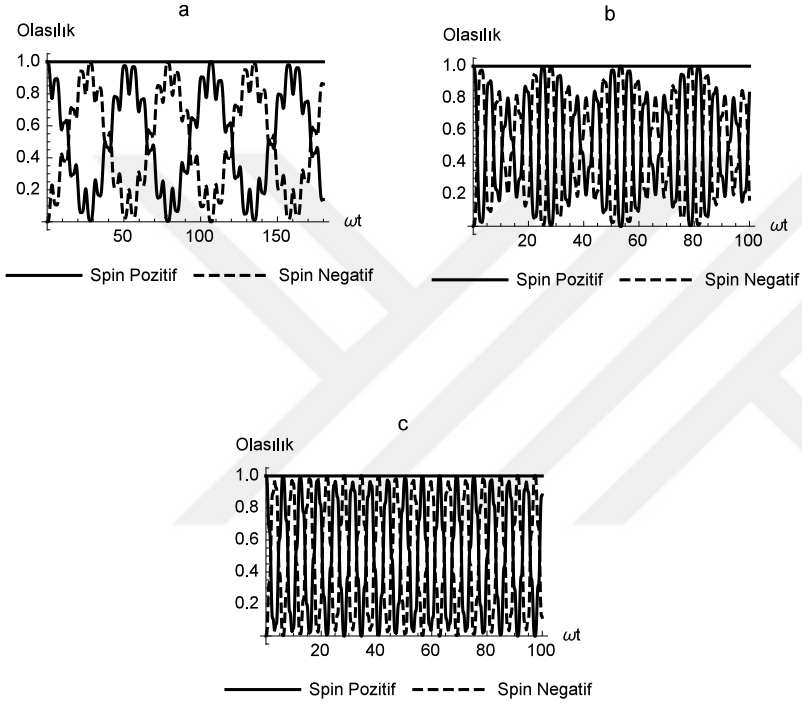
şeklini alır. Bu Hamiltoniyenin özdeğerleri

$$\lambda_{0+} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{(\gamma B_0)^2 + (\gamma B_{\perp})^2} \quad \text{ve} \quad \lambda_{0-} = -\frac{\hbar}{2} \sqrt{(\gamma B_0)^2 + (\gamma B_{\perp})^2} \quad (5.4.128)$$

şeklinde olup bu özdeğerlere karşık gelen boylanmış özvektörleri

$$|\lambda_{0+}\rangle = \begin{pmatrix} \frac{-B_{\perp} + iB_0}{\sqrt{2[(\gamma B_0)^2 + (\gamma B_{\perp})^2]}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \text{ve} \quad |\lambda_{0-}\rangle = \begin{pmatrix} \frac{B_{\perp} - iB_0}{\sqrt{2[(\gamma B_0)^2 + (\gamma B_{\perp})^2]}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (5.4.129)$$

z yönünde spin pozitif ve negatif bulunma olasılıklarının değişimi

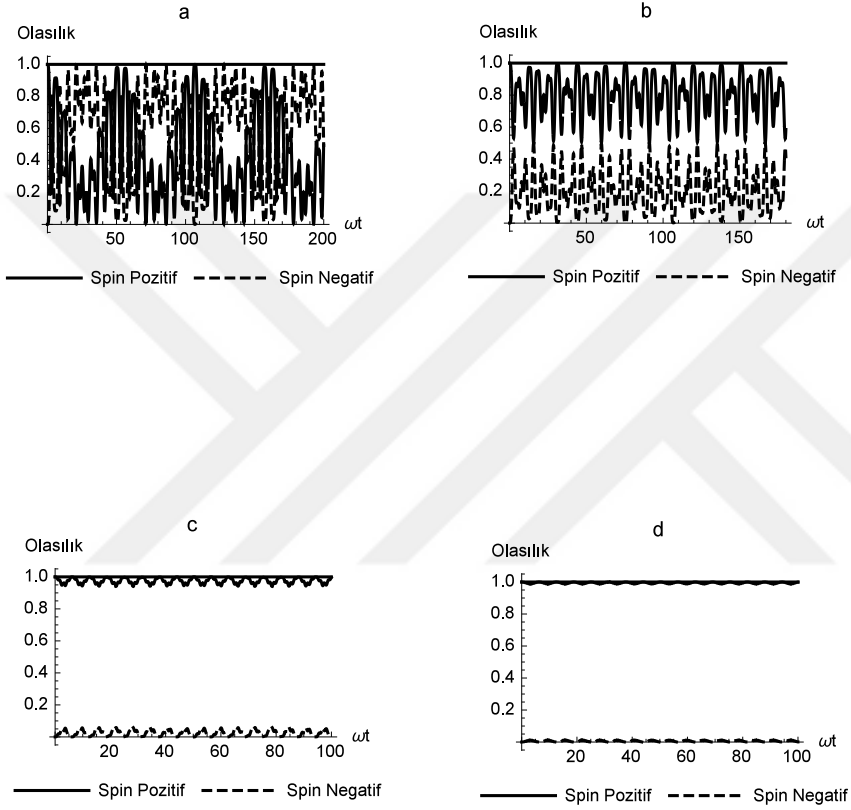


Şekil 5.4.  $\gamma B_0 = 0$ , a)  $\gamma B_{\perp} = 1/2 \omega$ , b)  $\gamma B_{\perp} = 2 \omega$ , c)  $\gamma B_{\perp} = 5 \omega$ ,

ifadeleridir. Bu özvektörlerden ilkini spin pozitif, ikincisini de spin negatif olarak adlandıracağız.

Şekil 5.4 te spin pozitif olan özvektörün (5.4.108) Hamiltoniyeni altında evrilirken, kendisinde (spin pozitif) ve kendine ortogonal olan durumda bulunma olasılıklarının zamanla değişimini  $\gamma B_0 =$  değerleri için gösterdik. Bu şekillerdeki grafiklerde manyetik alanın salınan bileşenine karşılık gelen terimler sırasıyla a)  $\gamma B_{\perp} = 1/2 \omega$ , b)  $\gamma B_{\perp} = 2 \omega$ , c)  $\gamma B_{\perp} = 5 \omega$  alınmıştır. Bu grafiklerde seçilen manyetik alan değerleri için başlangıç durumu z yönünde spin pozitif olan durumdan çok da farklı sonuçlar elde edilmemiştir. Gösterilen her üç durumda

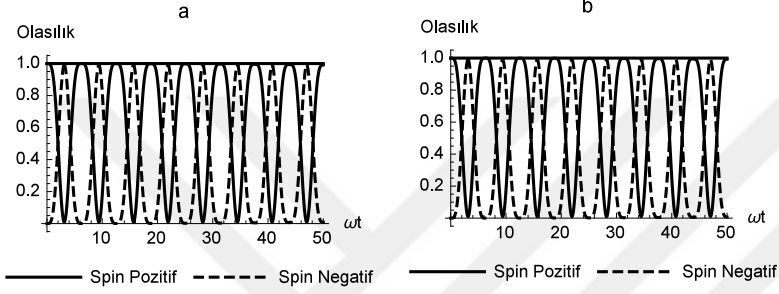
z yönünde spin pozitif ve negatif bulunma olasılıklarının değişimi



Şekil 5.5.  $\gamma B_{\perp} = \omega$ , a)  $\gamma B_0 = 1/2 \omega$ , b)  $\gamma B_0 = 2 \omega$ , c)  $\gamma B_0 = 5 \omega$ , d)  $\gamma B_0 = 10 \omega$  da olasılıklar, sıfır ve bir arasında salınmakta olup, salınımlarda iç dalgalanmalar gözlenmektedir.

Şekil (5.5) te ise  $\gamma B_{\perp} = \omega$  değeri için a)  $\gamma B_0 = 1/2 \omega$ , b)  $\gamma B_0 = 2 \omega$ , c)  $\gamma B_0 = 5 \omega$ , d)  $\gamma B_0 = 10 \omega$  değerlerinde olasıkların zamanla değişimi incelendi. Bu grafiklerde başlangıç durum spin z pozitif olan durumdan belirgin bir farklılık göze çarpmaktadır. Başlangıç durumu  $t = 0$  anındaki öz durumlarından biri olduğunda  $\gamma B_0$  in artan değerlerinde salınımın genliğinin iyice azalıp, başlangıç durumunun kendinde bulunma olasılığının kesinlik civarında küçük salınımlar yaptığı,  $\gamma B_0$  in değeri arttıkça salınımın neredeyse tamamen kaybolduğu

z yönünde spin pozitif ve negatif bulunma olasılıklarının değişimi



Şekil 5.6.  $\gamma B_{\perp} = \omega$ , a)  $\gamma B_0 = 9/10 \omega$ , b)  $\gamma B_0 = 11/10 \omega$

görülmektedir. Bu beklenen ve yorumlaması kolay bir olgudur.  $\gamma B_0$  manyetik alanın sabit bileşenine karşılık gelen bir terimdir ve bu terim diğer terimler göre baskın gelmeye başladığında Hamiltoniyendeki zamanla değişen terimler önemini kaybetmektedir. Bu nedenle Hamiltoniyen zamana açıkça bağlı olmayan Hamiltoniyenler gibi davranıp, bu Hamiltoniyenin özvektörleri de durağan durumlar gibi davranmakta ve başlangıç durumundaki özvektör ilerleyen tüm zamanlarda durumunu değiştirmemektedir.

Son olarak Şekil 5.6 da,  $\gamma B_0$  in "rezonansa" yakın değerlerinde başlangıç durumu  $|\lambda_{0+}\rangle$  in zamanla değişimi gösterilmiştir. Bu durum da başlangıç durumu spin z yönünde yukarı olan durumdan farklılıklar göstermektedir.  $\gamma B_0$  in "Rezonansa" yakın değerlerinde olasılıklar sıfır ve bir arasında salınmakta olup salınım eğrileri iç dalgalanmalar göstermemektedir.



## 6. SONUÇ

Bu tezde zamana açıkça bağlı Hamiltoniyenler için Schrödinger denkleminin çözümleri ele alınmıştır. İlk olarak tezin bütünlüğü açısından bu tür sistemler için yaklaşık sonuç bulmaya yarayan ve literatürdeki lisans seviyesinde ki kuantum mekaniği kitaplarının birçoğunda da yer alan zamana bağlı pertürbasyon teorisi ele alındı. Daha sonra, bu tezin bir uygulamasının tanıtılması amacıyla, Hidrojen atomunun enerji düzeyleri arasında ki geçiş olasılıklarının hesabı yapıldı. Tezin üçüncü kısmında integral dönüşümleri kullanılarak zamana bağlı delta potansiyelleri içeren Hamiltoniyenlerin Schrödinger denkleminin çözümü gösterildi. Tezin dördüncü kısmında Galilei dönüşümleri kullanılarak sabit hızla hareket eden  $\delta$  potansiyelleri için Schrödinger denkleminin çözümleri gösterildi. Son olarak tezin beşinci kısmında Schrödinger denkleminin çözümü için kullanılan bir diğer yöntem olan İnvaryant işlemci yöntemi incelendi. İnvaryant işlemci yöntemi ile zamanla değişen manyetik alan altında zamana bağlı spin  $\frac{1}{2}$  sistemlerinin çözümleri yapıldı. Bu bölümde yapılan hesaplar sonucunda, daha önce sonlu boyutlu uzaylardaki zamana açıkça bağlı Hamiltoniyenler için hiç denenmemiş olan invaryant işlemci yönteminin, en azından iki ve üç boyutlu gibi küçük boyutlu uzaylarda işe yarayabileceğini göstermiş olduğumuzu düşünüyoruz. Ayrıca spin  $1/2$  sistemlere uyguladığımız bu yöntemin zamana bağlı Hamiltoniyenler altında evrimleşen spinler arasındaki dolaşıklıkta da kullanılabileceği öngörülebilir.

## KAYNAKLAR

- [1] Singh, C., Marshman E. 2015. Review of student difficulties in upper-level quantum mechanics, **Phys. Rev. Special Topics**, 11, 020117.
- [2] Dereli, T., Verçin A. 2014. Kuantum Mekaniği, Üçüncü Baskı. Tüba Yayınları, Ankara.
- [3] Griffiths, D. J. 2010. Kuantum Mekaniğine Giriş Çeviri: H. Özbek, S. Durukan Feyzioğlu. Nobel Yayınları, İstanbul
- [4] Shankar, R. 1994. Principles of Quantum mechanics. 2. Baskı., Plenum Press, NewYork.
- [5] Bransden, B.H., Joachain, B.H., 2000. Pearson Education, Harlow.
- [6] Sakurai, J.J. 1994. Modern Quantum mechanics. Addison-Wesley Publishing Company, Reading.
- [7] Landau, L.D., Lifshitz, E.M. 2003. Quantum mechanics Butterworth-Heinemann, Burlington.
- [8] Weinberg, S. 2013. Lectures on Quantum mechanics. Cambridge University Press, Cambridge.
- [9] M. Kruskal, Asymptotic Theory of Hamiltonian and Other Systems with all Solutions Nearly Periodic, **J. Math. Phys.**, 3, 806 (1962).
- [10] J.F. Annett *Superconductivity, Superfluids and Condansates*, Oxford University Press Oxford (2004).
- [11] Metcalf, H.C., van der Straten, P. 2002. Laser Cooling and Trapping. Springer Verlag, Berlin.
- [12] Rios Rubiano, C. A., Gravielle, M. S. 2012. Band-structure effects in photoelectron-emission spectra from metal surfaces. **Phys. Rev. A**, 85: 043422-1-043422-8.
- [13] Acuña, G.P., Miiraglia, J.P. 2006. Time-dependent induced potentials in convoy electron emission **Surf. Sci.**, 600: 4961-4965.
- [14] Bohn, C.L., Betzel, G.T., Sideris, I.V. 2006. Chaotic dynamics and halo formation in charged-particle beams. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, 561: 230-236.

- [15] Vikas. 2005. Current-independent quantum fluid dynamics of helium atom in strong time-dependent magnetic field. **Chem. Phys. Lett.**, 413: 216-220.
- [16] Cayssol, J., Dóras, B., Simon, F., Moessner, R. 2013. Floquet topological insulators. **Phys. Status Solidi**, 7: 101-108.
- [17] Harper, F., Roy R., Rudner, M. S., Sondhi, M. S. 2020. Topology and Broken Symmetry in Floquet Systems. **Annual Review of Condensed Matter Physics**, 11: 345-368.
- [18] Sadiq G., Lashin, E. I., Sabewe Abdalla, M. 2009. Entanglement of a two-qubit system with anisotropic XYZ exchange coupling in a nonuniform time-dependent external magnetic field. **Physica B**, 404: 1719-1728.
- [19] M. Kleber, *Physics Reports*, **236**, 331 (1994).
- [20] Osman Çetintaş, *Algebraic Methods and Exact Solutions of Quantum Parametric Oscillator*, Master Thesis, İzmir Institute of Technology, (2019).
- [21] R. J. Cordero-Sato, *Solvable Time-Dependent Models in Quantum Mechanics*, PhD. Dissertation, Arizona State University, (2011).
- [22] Lewis, H.R. 1968. Class of exact invariants for classical and quantum harmonic oscillator. **J.Math.Phys.**, 9:1976-1986.
- [23] Lewis, H.R., Riesenfeld, W.B., 1969. An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field. **J.Math.Phys.**, 10:1458-1473.
- [24] Malkin, I.A., V.I. , D.A. Trifonov, Coherent States and Transition Probabilities in a Time-Dependent Electromagnetic Field, **Phys. Rev. D**, 2, 1371 (1970).
- [25] I.A. Malkin, Man'ko, V.I., Trifonov D.A. Dynamical Symmetry of Nonstationary Systems, **Nuovo Cimento A** , 4, 773 (1971).
- [26] I.A. Malkin, Man'ko, V.I. Dynamical Symmetries and Coherent States of Quantum Systems, Nauka, Moscow (1979).
- [27] Wei J., Norman E. Lie Algebraic Solution of Linear Differential Equations. **J.Math.Phys.**, 4, 575 (1963).
- [28] X Brinkmann, A.. 2016. Introduction average Hamiltonian Theory. I. Basics, **Concepts Magn. Reson. Part A** 45A: e12414, 1-19.

- [29] Ramsey, N.F. 1950. A Molecular Beam Resonance Method With Separated Oscillating Fields. **Phys. Rev.**, 778: 695-699.
- [30] Ramsey, N.F. 1990. Experiments With Separated Oscillatory Fields and Hydrogen Masers. [<https://www.nobelprize.org/uploads/2018/06/ramsey-lecture.pdf>], Erişim Tarihi: 28.06.2020.
- [31] Manoukian, E.B., 2006. Quantum Theory A Wide Spectrum. Springer Verlag, Dordrecht.
- [32] Erman, F., Gadella, M., Uncu, H. 2020. The Propagators for  $\delta$  and  $\delta'$  Potentials With Time-Dependent Strengths. **Front. in Phys.**, 8: 65 (1-10).
- [33] Campbell, J. 2009. Some exact results for the Schrödinger wave equation with a time-dependent potential. **J.Phys.A.:Math. Theor.**, 42: 365212.
- [34] Belloni, M, Robinett, R.W. 2014. The infinite well and Dirac delta function potentials as pedagogical, mathematical and physical models in quantum mechanics. **Phys. Rep.**, 540: 25-122.
- [35] Weinberger, H.F., 1995. A First Course In Partial Differential Equations With Complex Variables and Transform Methods. Dover Publications, Inc, New York.
- [36] Merzbacher E., 1998. Quantum Mechanics, Üçüncü Baskı. John Wiley and Sons, Inc, New Jersey.
- [37] Edwards, C.H., Penney, D.E. 2006. Bilgisayar Destekli ve Matematiksel Modellemeli Differansiyel Denklemler ve Sınır Değer Problemleri (Üçüncü baskıdan çeviri, Çeviri Editörü: Ön). Palme Yayınları. Ankara
- [38] Lewis, H.R., Leach, P.G.L. 1982. A Direct Approach of Finding Exact Invariants for One Dimensional Time Dependent Classical Hamiltonians. **J. Math.Phys**, 23: 2371-2374. **J. Math.Phys**, 41:215303 (1-11).
- [39] Menouar, S., Maamache1, M., Saâdi, Y., Choi, J R. 2008. Exact wavefunctions for a time-dependent Coulomb potential.
- [40] Ji, J-Y., Kim, S.P., Soh, K-S. 1995 Exact Wave Functions and Nonadiabatic Berry Phases of a Time-Dependent Harmonic Oscillator. **Phys. Rev. A**, 52: 3352-3355.
- [41] Feng, M. 2001. Complete Solution of the Schrödinger Equation for the Time Dependent Linear Potential. **Phys.Rev. A** 64: 034101

- [42] Beker, H. 2006. Fen ve Mühendislikte Matematiksel Metotlar. Boğaziçi Üniversitesi Yayınları, İstanbul.
- [43] Manoukian, E.B., 1989. Explicit derivation of the propagator for a Dirac delta potential. **J.Phys.A.:Math. Gen.**, 22: 67-70.
- [44] Baek, S.K., Yi,S.D., Kim,M., 2016. Particle in a box with a time-dependent  $\delta$ - function potential. **arXiv** 1611.07129v1.
- [45] Feng, M., 2001. Complete solution of the Schrödinger equation for time-dependent linear potential. **Phys.Rev.A.**, 64: 034101
- [46] Banaoche, G.J., 2001. Splitting the wave function of a particle in a box. **Am.J.Phys.**, 70: 307.
- [47] van Enk, S.J., 2009. Splitting the wave functions of two particles in two boxes. **Am.J.Phys.**, 77: 140.
- [48] Griffiths, D., J., 2003. Elektromanyetik Teori. Gazi Kitabevi Tic. Ltd. Şti.
- [49] L. Susskind, A. Friedman, Quantum Mechanics: The Theoretical Minimum, Basic Books, New York (2014)
- [50] Churchill, R.V., Brown, J.W., Verhey, R.H.1976. Complex Variables and Applications. Mc Graw Hill Bökk Company Üçüncü Baskı.

## A. Ekler

### 1.1. Bazı İntegrallerin Hesaplanması

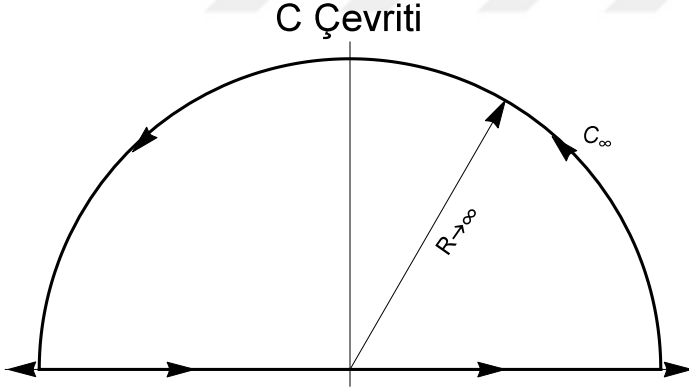
Bu bölümde tez içerisinde yer alan

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ikx}}{(-k^2 + is)} \quad (1.1.1)$$

integralinin çözümü gösterilecektir. Bu integral Rezidü yöntemi kullanılarak çözülebilir. Bu integralin sonucunu bulmak için karmaşık (kompleks) düzlemde Şekil A.1 de gösterilen çevrit (contour) üzerinden

$$\oint_C \frac{dz}{2\pi} \frac{e^{izx}}{(-z^2 + is)}. \quad (1.1.2)$$

integralini ele aldık çünkü bu integralin sonucu, integrale sonsuz yarıçaplı yarım daire üzerinden ( $C_\infty$ ) gelen katkı sıfır olduğundan, (1.1.1) denklemindeki integralin sonucu ile aynıdır. İlk olarak bunu kanıtlayalım. Sonsuz yarım daire üzerinde



Şekil A.1. (1.1.1) integralinin hesabı için seçilen çevrit

integral değişkeni  $z$ , kutupsal koordinatlar kullanılarak,  $z = iRe^{i\theta}$  şeklinde yazılır.  $C_\infty$  üzerinde  $R$  sabit olduğundan  $\theta$  değişkeni cinsinden (1.1.2) denklemindeki integral

$$\int_0^\pi \frac{Rie^{i\theta} d\theta}{2\pi} \frac{e^{iRe^{i\theta}}}{-R^2 e^{2i\theta} + is} \quad (1.1.3)$$

şeklinde yazılabilir. İntegrand fonksiyonunu  $f(\theta)$  olarak adlandıralım; yani

$$f(\theta) = \frac{Rie^{i\theta}}{2\pi} \frac{e^{iRe^{i\theta}}}{-R^2 e^{2i\theta} + is}$$

tanımını yapalım. Bu fonksiyonun mutlak değeri

$$|f(\theta)| = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{Re^{iR(\cos\theta + i\sin\theta)x}}{-R^2 + is} \right| \quad (1.1.4)$$

denklemleri ile verilir.  $R \rightarrow \infty$  limitinde

$$|f(\theta)| = \frac{1}{2\pi} \frac{|Re^{-R \sin \theta x}|}{|R^2 + is|} \leq \lim_{R \rightarrow \infty} \left| \frac{Re^{-R \sin \theta x}}{R} \right| \quad (1.1.5)$$

olarak bulunur.  $x > 0$  için,  $s > 0$  için,  $C_\infty$  üzerinde  $0 < \theta < \pi \Rightarrow \sin \theta$  olduğundan

$$\lim_{R \rightarrow \infty} |f(\theta)| \rightarrow 0 \quad (1.1.6)$$

elde edilir. O halde  $C_\infty$  üzerinde

$$\int_{C_\infty} |f(\theta)| d\theta \rightarrow 0 \quad (1.1.7)$$

bulunur. Bir fonksiyonun mutlak değerinin bir çevrit üzerindeki integrali sıfır ise fonksiyonun kendisinin de bu çevrit üzerindeki integrali sıfırdır [50]. Buradan, (1.1.1) ile (1.1.2) denklemlerindeki integrallerin sonuçlarının aynı olduğu görülür. (1.1.2) denklemindeki integral kapalı bir çevrit üzerinden alındığından rezidü teoremi [50] kullanılarak hesaplanabilir.

(1.1.2) denklemindeki integralin rezidü teoremini kullanarak integralini alabilmek için önce bu integralin çevrit içindeki tekil noktalarını bulmalıyız. Bu tekil noktalar  $\frac{e^{ikx}}{(-k^2 + is)}$  fonksiyonunun paydasını sıfır yapan noktalarıdır:

$$\begin{aligned} -z^2 + is &= 0 \Rightarrow z^2 - is = 0 \\ z^2 &= is \Rightarrow z = \mp \sqrt{is}. \end{aligned} \quad (1.1.8)$$

Burada  $i = e^{i\frac{\pi}{2}}$  eşitliğini kullanarak (1.1.8) denkleminin köklerini;

$$z_1 = \sqrt{s} e^{i\frac{\pi}{4}} \quad (1.1.9a)$$

$$z_2 = \sqrt{s} e^{i\frac{5\pi}{4}} \quad (1.1.9b)$$

şeklinde yazabiliriz. Bu köklerden (1.1.9b) çevrit dışında kaldığından (1.1.9a) denklemindeki  $z_1$  kök değerinde rezidü hesaplanır. Şimdi  $z^2 - is$  eşitliğini açık halde yazalım:

$$z^2 - is = (z - \sqrt{is})(z + \sqrt{is}). \quad (1.1.10)$$

Buradan

$$\frac{1}{-z^2 + is} = -\frac{1}{(z - \sqrt{is})(z + \sqrt{is})} \quad (1.1.11)$$

olarak yazılabilir. Bu denklemden de görüldüğü gibi  $z = z_1 = \sqrt{is}$  değerinde birinci dereceden bir kutup vardır. Bu yüzden bu noktadaki rezidü değeri

$$Res f(z)|_{z=z_0} = (z - z_0)f(z) \quad (1.1.12)$$

eşitliği ile hesaplanabilir [50]. Bu eşitlik kullanılarak

$$\text{Res}f(z_1) = -(z - \sqrt{is}) \frac{e^{izx}}{(z - \sqrt{is})(z + \sqrt{is})} \Big|_{z=z_0} = -\frac{ie^{i\sqrt{is}|x|}}{2\sqrt{is}} \quad (1.1.13)$$

bulunur. Rezidü teoremi

$$\oint_C f(z) dz = 2\pi i \sum_i \text{Res}[f(z_i)] \quad (1.1.14)$$

kullanılarak [50], (1.1.2) denklemindeki integralin sonucu

$$\int_C \frac{dz}{2\pi} \frac{e^{izx}}{(-z^2 + is)} = -\frac{ie^{i\sqrt{is}|x|}}{2\sqrt{is}} \quad (1.1.15)$$

olarak bulunur. Daha önce de belirtildiği gibi, (1.1.1) denklemindeki integral ile (1.1.2) denklemindeki integralin sonucu aynı olduğundan

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ikx}}{(-k^2 + is)} = -\frac{ie^{i\sqrt{is}|x|}}{2\sqrt{is}} \quad (1.1.16)$$

elde edilir.

## 1.2. Bromwich İntegrali

Ekler kısmının bu bölümünde

$$\bar{g}(s) = \frac{1}{2\sqrt{is}} e^{(i\sqrt{is}x')} \quad (1.2.17)$$

fonksiyonunun Bromwich integrali aracılığıyla ters Laplace dönüşümünü hesaplayacağız. Bu fonksiyonun Bromwich integrali

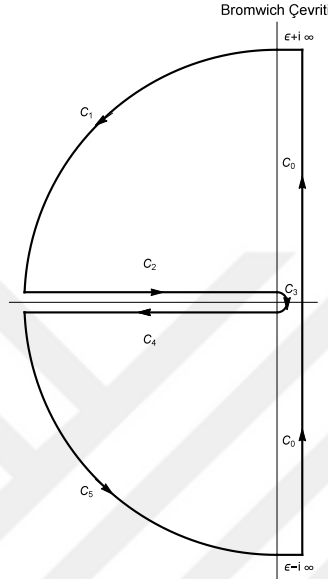
$$\mathcal{L}^{-1}\{g(z)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \frac{e^{(i\sqrt{iz}x')}}{2\sqrt{iz}} e^{zt} dz, \quad \varepsilon > 0 \quad (1.2.18)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Bu integralin paydasında ve üstelinde bulunan  $\sqrt{z}$  çarpanı  $z = 0$  da bir dallanma noktasına (branch point) sahip olduğundan,  $z = 0$  noktası, bu integrali karmaşık düzlemde hesaplamak için kullanılacak bir çevritten dışlanmalıdır. Bu yüzden bu integralin sonucunu bulmak için  $C$  çevriti Şekil A.2 de gösterilen çevrit olmak üzere

$$\oint_C \frac{e^{(i\sqrt{iz}x')}}{2\sqrt{iz}} e^{zt} dz, \quad \varepsilon > 0 \quad (1.2.19)$$

integralini alacağız.  $C$  çevriti şekilde gösterildiği gibi alt çevritlere parçalanmıştır. Bu parçalardan  $C_0$  hesaplamak istediğimiz Bromwich integralidir. Çevrit içinde





Şekil A.2. Bromwich integralinin hesabı için kullanılan çevrit.

(1.2.18) integralindeki integrandın hiç bir tekil noktası yoktur. Diğer bir deyişle çevritin içindeki bölgede integrand fonksiyonu analiktir. Dolayısıyla bu kapalı çevrit boyunca integral sıfırdır. Bu yüzden hesaplamak istediğimiz  $C_0$  çevriti üzerinden integral diğer tüm parçaların toplam değerinin negatifine eşittir.

$C_1$ ,  $C_3$  and  $C_5$  çevritlerinin herbiri üzerinden alınan integral sıfırdır. Bu, daha önce de vurgulanan; bir fonsiyonun mutlak değerinin bir çevrit üzerindeki integrali sıfır ise fonsiyonun kendisinin de bu çevrit üzerindeki integrali sıfırdır [50] teoremi kullanılarak gösterilebilir.  $C_1$  ve  $C_5$  boyunca,  $R$  sonsuza giden bir sabit,  $\theta$ ,  $\pi < \theta < 2\pi$  aralığında olup, integral değişkeni  $z$ ,  $\theta$  cinsinden  $z = Re^{i\theta}$  ( $\rightarrow dz = iRe^{i\theta}d\theta$ ) şeklinde parametrize edilebilirler. O halde bu eğriler boyunca  $\cos \theta < 0$  eşitsizliği sağlanır. Ayrıca bu eğriler boyunca

$$iz = Re^{i(\theta + \frac{\pi}{2})} \Rightarrow \sqrt{iz} = R^{\frac{1}{2}} e^{i(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4})} \Rightarrow i\sqrt{iz} = R^{\frac{1}{2}} e^{i(\frac{\theta}{2} + \frac{3\pi}{4})} \quad (1.2.20)$$

eşitliği de geçerlidir. Böylece  $C_1$  and  $C_5$  boyunca integrand fonksiyonunun mutlak değeri

$$\begin{aligned} & \lim_{R \rightarrow \infty} \left| \frac{e^{(i\sqrt{iz}|x'|) e^{zt}}}{2\sqrt{i}\sqrt{z}} dz \right| \\ &= \left| \frac{R^{\frac{1}{2}} e^{t \left( R \cos \theta + iR \sin \theta \right) + |x'| \left( R^{\frac{1}{2}} \cos \left( \frac{\theta}{2} + \frac{3\pi}{4} \right) + iR^{\frac{1}{2}} \sin \left( \frac{\theta}{2} + \frac{3\pi}{4} \right) \right)}{2} \right| \\ &= \left| R^{\frac{1}{2}} e^{t \left( R \cos \theta + R^{\frac{1}{2}} \cos \left( \frac{\theta}{2} + \frac{3\pi}{4} \right) |x'| \right)} \right|, \quad \pi < \theta < 2\pi \quad (1.2.21) \end{aligned}$$

olarak bulunur.  $\pi < \theta < 2\pi$  aralığında  $\pi < \theta < 2\pi \Rightarrow (\frac{5\pi}{4} < \frac{\theta}{2} + \frac{3\pi}{4} < \frac{7\pi}{4})$  eşitsizlikleri sağlandığından exponansiyel üzerindeki her iki kosinüs fonksiyonu da negatiftir.  $t$  ve  $|x'|$  çarpanlarının her ikisi de pozitif olduğundan,  $R \rightarrow \infty$  limitinde integrand fonksiyonunun mutlak değeri sıfırdır:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \left| \frac{e^{(i\sqrt{z}|x'|)z} e^{zt}}{2\sqrt{i}\sqrt{z}} dz \right| = \lim_{R \rightarrow \infty} \left| \frac{R^{\frac{1}{2}} e^{t(R \cos \theta + R^{\frac{1}{2}} \cos(\frac{\theta}{2} + \frac{3\pi}{4})|x'|)}{2} \right| \rightarrow 0. \quad (1.2.22)$$

Bir önceki bölümde vurgulandığı gibi mutlak değeri bir çevrit boyunca sıfır olan bir fonksiyonun bu çevrit boyunca integrali sıfır verir. Dolayısıyla  $C_1$  and  $C_5$  parçalarından (1.2.19) integraline hiç bir katkı gelmez.

Şimdi,  $C_3$  çevritinden de integrale gelen katkının olmadığını gösterelim. Bu çevrit boyunca,  $\varepsilon \rightarrow 0$  olmak üzere, integral değişkeni  $z = \varepsilon e^{i\theta}$  dir. Böylece integrand fonksiyonunun  $C_3$  boyunca mutlak değeri sıfıra gider:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left| \frac{e^{(i\sqrt{z}|x'|+zt)}}{2\sqrt{i}\sqrt{z}} \right| = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left| \frac{e^{(\varepsilon^{\frac{1}{2}}|x'|e^{i(\frac{\theta}{2} + \frac{3\pi}{4})} + \varepsilon t e^{i\theta})\varepsilon e^{i\theta}}}{2\varepsilon e^{i(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{2})}} \right| \rightarrow 0 \quad (1.2.23)$$

dolayısıyla buradan da integrale katkı gelmez.

O halde (1.2.18) denkleminde verilen Bromwich integralini bulmak için Along  $C_2$  ve  $C_4$  çevritleri üzerinden (1.2.19) integraline gelen katkıları bulmalıyız.  $C_2$  doğrusu boyunca integral değişkeni  $z$  gerçeldir ve

$$z = e^{i\pi} Re(z) = e^{i\pi} x = -x \Rightarrow \sqrt{z} = e^{\frac{i\pi}{2}} \sqrt{x} = i\sqrt{x}$$

eşitlikleri sağlanır. Benzer şekilde  $C_4$  boyunca da

$$z = e^{-i\pi} Re(z) = e^{-i\pi} x = -x \Rightarrow \sqrt{z} = e^{-\frac{i\pi}{2}} \sqrt{x} = -i\sqrt{x}$$

eşitliği sağlanır. Dolayısıyla, bu doğrular boyunca  $dz = -dx$  olur. Bu eşitlikler kullanılarak

$$\begin{aligned} \int_{C_2+C_4} \frac{e^{(i\sqrt{z}|x'|)}{2\sqrt{z}} e^{zt} dz &= -\frac{1}{2\pi i} \left( -\int_{\infty}^0 \frac{e^{(-i\sqrt{i}|x'|\sqrt{x}-tx)}}{2i\sqrt{ix}} dx + \int_0^{\infty} \frac{e^{(-tx+\sqrt{i}|x'|\sqrt{x})}}{2i\sqrt{ix}} dx \right) \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \left( \int_0^{\infty} \frac{e^{(\sqrt{i}|x'|\sqrt{x})} + e^{(-\sqrt{i}|x'|\sqrt{x})}}{2i\sqrt{i}\sqrt{x}} dx \right) \end{aligned} \quad (1.2.24)$$

Bu integraller  $x = u^2 \Rightarrow \sqrt{x} = u \Rightarrow \frac{dx}{2\sqrt{x}} = du$  değişken dönüşümü aracılığıyla

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{2\pi\sqrt{i}} \left( \int_0^{\infty} e^{(-tu^2+\sqrt{i}|x'|u)} + e^{(-i\sqrt{i}|x'|u)} du \right) \\ &= \frac{1}{4\pi\sqrt{i}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{(-tu^2+\sqrt{i}|x'|u)} du + \int_{-\infty}^{\infty} e^{(-tu^2-\sqrt{i}|x'|u)} du \right) \end{aligned} \quad (1.2.25)$$

Gaussiyen integraller için iyi bilinen  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = e^{\frac{b^2}{4a}} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$  eşitliklerini kullanarak

$$\int_{C_2+C_4} \frac{e^{(i\sqrt{iz}x')}}{2\sqrt{iz}} e^{zt} dz = \frac{1}{2\pi i} \sqrt{\frac{\pi}{t}} e^{\frac{i(x')^2}{4t}} = \frac{1}{2\sqrt{i\pi t}} e^{\frac{i(x')^2}{4t}} \quad (1.2.26)$$

bulunur.

$C$  çevriti boyunca hiçbir kutup yoktur, buradan

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{e^{(i\sqrt{iz}|x'|)} e^{zt}}{2\sqrt{i}\sqrt{z}} dz &= 0 \Rightarrow \\ \mathcal{L}^{-1}\{g(z)\} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \frac{e^{(i\sqrt{iz}x')}}{2\sqrt{iz}} e^{zt} dz \\ &= - \int_{C_2+C_4} \frac{e^{(i\sqrt{iz}x')}}{2\sqrt{iz}} e^{zt} dz = - \frac{1}{2\sqrt{i\pi t}} e^{\frac{i(x')^2}{4t}} \end{aligned} \quad (1.2.27)$$

elde edilir.



## ÖZ GEÇMİŞ

### KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : METİN ASLAN  
Doğum Yeri ve Tarihi : Samandağ, 07.10.1990

### EĞİTİM DURUMU

Lisans Öğrenimi : Adnan Menderes Üniversitesi  
Fen- Edebiyat Fakültesi  
Fizik Bölümü  
Yüksek Lisans Öğrenimi : Adnan Menderes Üniversitesi  
Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü  
Bildiği Yabancı Diller : İngilizce

### İLETİŞİM

E-posta Adresi : aslan.metin.1990@gmail.com