

**KUANTUM MEKANİĞİNDE CEBİRSEL
YÖNTEMLER**

Selim AYDIN

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**AĞUSTOS 2009
ANKARA**

Selim AYDIN tarafından hazırlanan KUANTUM MEKANİĞİNDE CEBİRSEL YÖNTEMLER adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Dç. Dr. Hakan ÇİFTCİ
Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK	
Fizik , Gazi Üniversitesi	
Doç.Dr. Hakan ÇİFTCİ	
Fizik, Gazi Üniversitesi	
Yrd.Doç.Dr. Engin ATEŞER	
Fizik, Aksaray Üniversitesi	

Tarih: / / 2009

Bu tez ile G.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Yüksek Lisans derecesini onamıştır.

Prof. Dr. Nail ÜNSAL
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Selim AYDIN

KUANTUM MEKANİĞİNDE CEBİRSEL

YÖNTEMLER

(Yüksek Lisans Tezi)

Selim AYDIN

GAZİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Ağustos 2009

ÖZET

Bu tez çalışmasında esas olarak değişik türdeki potansiyeller için Radyal Schrödinger denkleminin cebirsel yöntemler kullanarak çözümü incelendi. Enerji öz değer ve öz fonksiyonları bulundu. Elde edilen dalga fonksiyonları kullanılarak merdiven operatörleri kuruldu. Ve bu operatörlerin hangi grubun komütasyon bağıntısını sağladığı anlaşılmaya çalışıldı. Elde edilen sonuçlar yorumlandı.

Bilim Kodu : 202.1.149

Anahtar Kelimeler : Schrödinger denklemi, cebirsel metod , merdiven işlemciler, harmonik ossilatör potansiyeli

Sayfa Adedi : 91

Tez Yöneticisi : Doç. Dr. Hakan ÇİFTÇİ

**ALGEBRAIC METHODS IN
QUANTUM MECHANICS**

(M.Sc. Thesis)

Selim AYDIN

**GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

August 2009

ABSTRACT

In this thesis the solution of radial Schrodinger equation for different types of potentials by using algebraic methods is analyzed. Energy eigenvalue and eigen functions are found. By using wave functions that are obtained ladder operators are set and which group's commutation relation is provided by these operators are tried to be investigated. And the results are interpreted.

Science Code	: 202.1.149
Key Words	: Schrödinger equation, algebraic method, ladder operators , oscillator potentials
Page Number	: 91
Adviser	: Assoc. Prof. Dr. Hakan ÇİFTÇİ

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren sayın hocam Dç. Dr. Hakan ÇİFTÇİ'ye şükranlarımı sunarım.

Sevgili arkadaşlarım Hatice AKDERE ve Serdar BADOĞLU'na tezimin hazırlanmasında yardımcı oldukları için teşekkür ederim.

Ayrıca maddi ve manevi yardımlarını hiçbir zaman eksik etmeyen, çalışmalarım süresince beni sabırla destekleyip anlayış gösteren canım anneme teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	x
SİMGELER VE KISALTMALAR	xi
1. GİRİŞ	1
2. ÇEŞİTLİ POTANSİYELLER İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN STANDART DİFERANSİYEL DENKLEM ÇÖZÜMLERİ	3
2.1. Bir Boyutlu Harmonik Salıncı	3
2.2. Küresel Simetrik Potansiyeller	10
2.2.1 Üç boyutlu harmonik salıncı	10
2.2.2. Hidrojen atomu	12
3. CEBİRSEL YÖNTEMLER	17
3.1. Bir Boyutlu Harmonik Salıncı için Cebirsel Yaklaşım	17
3.2. Hidrojen Atomu ve Üç Boyutlu Harmonik Salıncı için Cebirsel Yaklaşım	19
3.2.1. Hidrojen atomu için cebirsel yapı	27
3.2.2. Üç boyutlu harmonik salıncı için cebirsel yapı	31

Sayfa

3.3. Harmonik Salıncı Ve Ters Kare Potansiyeli için Cebirsel Yaklaşım	35
3.4. Morse Potansiyeli İçin Cebirsel Yaklaşım	42
3.4.1. Morse potansiyeli için harmonik limit	50
3.5. İki Boyutlu Pseudoharmonik Potansiyel için Cebirsel Yaklaşım	53
3.6. N Boyutlu Pseudoharmonik Potansiyel için Cebirsel Yaklaşım	58
3.7. Pöschl-Teller Potansiyeli için Cebirsel Yaklaşım	68
3.8. Harmonik Salıncı, Ters Kare ve Coulomb Potansiyeli için Cebirsel Yaklaşım	74
4. SONUÇ	81
KAYNAKLAR	82
EKLER	85
EK– 1 Laguerre polinomları için tekraralama bağıntılarının ispatı	86
EK –2 Konfluent hipergeometrik fonksiyonlar	89
ÖZGEÇMİŞ	91

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Harmonik Ossilatör için normalize edilmiş ilk dört dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerleri	9

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Harmonik ossilatörün potansiyel enerjisi ve enerji özdeğerlerinin grafiği	9
Şekil 2.2. Harmonik ossilatör için ilk dört enerji özdeğeri ve olasılık yoğunlukları.....	10
Şekil 3.1. a^- , a^+ ve N işlemcilerinin merdiven yapısının gösterimi	19
Şekil 3.2. Hidrojen atomu – Coulomb potansiyel eğrileri	28
Şekil 3.3. Hidrojen atomu enerji spektrumunda alçaltıcı ve yükseltici operatörlerin etkisi.....	30
Şekil 3.4. Harmonik ossilatör potansiyeli eğrisi.....	32
Şekil 3.5. Harmonik ossilatörün enerji spektrumunda alçaltıcı ve yükseltici operatörlerin etkisi.....	34
Şekil 3.6. Harmonik ossilatör ve Morse potansiyel eğrilerinin artan enerji düzeylerinde karşılaştırılması.....	43
Şekil 3.7. $\hbar^2 / m$ için Pöschl-Teller Potansiyeli	68

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler

Açıklama

E	Enerji
H	Hamiltonyen
ψ	Dalga Fonksiyonu
P	Momentum
h	Planck Sabiti
$\hbar$	$h/2\pi$
n	Baş Kuantum Sayısı
ℓ	Yörünge Kuantum Sayısı
λ	Dalga Boyu
V	Potansiyel Enerji

Kısaltmalar

Açıklama

PT	Pöschl-Teller
------	---------------

1. GİRİŞ

Kuantum mekaniğinde fiziksel sistemlerin herhangi bir t anındaki durumları sürekli, türevlenebilir, sanal değerli olan ve $\Psi(r,t)$ dalga fonksiyonu denilen bir fonksiyon ile belirlenir. Bu dalga fonksiyonunun uzay ve zaman içindeki evrimi ise kısmi türevli bir çizgisel denklem olan schrödinger denklemi ile belirlenir. Kuantum mekaniğinin başarısı schrödinger denkleminin çözümlerinin doğanın özellikle mikro yapısında varolan pek çok deneysel gerçek ile tam uyumlu sonuçlar vermesine dayanır. Ayrıca bire boylandırılabilen Ψ fonksiyonu sistemle ilgili tüm bilgileri taşır.

Kuantum mekaniğinde Hamiltonyen işlemcisi için özdeğer denklemi $\hat{H}\Psi=E\Psi$ şeklinde verilir. Burada $\hat{H}$ toplam enerjii ifade eder. Klasik mekanikten hatırlanacağı gibi $H = (P^2 / 2m) + V$ şeklinde verilir. İlk terim kinetik enerjii, ikinci terim (V) potansiyel enerjii ifade eder. Kuantum mekaniğinde ise her fiziksel gözlenebire bir hermityen işlemci karşılık gelir. Momentum $\vec{P} = -i\hbar \vec{\nabla}$ şeklinde yazılabilir. Ayrıca dalga fonksiyonunun zaman içindeki evrimi $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$ şeklinde ifade edilen zamana bağlı schrödinger denklemi ile ifade edilir. Bu ifadeler toplam hamiltonyende yerine konulursa $[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V]\Psi = i\hbar (\frac{\partial \Psi}{\partial t})$ şeklinde schrödinger denklemi elde edilir. Burada m ; parçacığın kütlesini, V ; potansiyeli, $\hbar = 10,1 \times 10^{-34} J.s$ değerindeki Planck sabitini ve Ψ parçacığın dalga fonksiyonunu ifade eder.

Bu tez çalışmasında çeşitli potansiyeller için schrödinger denkleminin enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları cebirsel yöntemler kullanılarak bulundu.

İkinci bölümde, önce bir boyutlu sonra üç boyutlu harmonik osilatör ve hidrojen atomu için schrödinger denkleminin standart diferansiyel denklem çözümleri incelendi.

Üçüncü bölümde çeşitli potansiyeller için hamiltonyen, faktörizasyon metodu uygulanarak çarpanlarına ayrıldı, elde edilen komütasyon bağıntılarından hangi grup yapısının sağlandığı bulundu. Enerji özdeğerleri, özfonksiyonları ve beklenen değerler bu yöntemle bulunup cebirsel yöntemlerin daha sade ve daha şık bir metod oldukları gösterildi.

Dördüncü bölümde elde edilen sonuçlar yorumlandı.

2. ÇEŞİTLİ POTANSİYELLER İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN STANDART DİFERANSİYEL DENKLEM ÇÖZÜMLERİ

2.1. Bir Boyutlu Harmonik Salınıcı

Denge konumları civarında küçük genlikli salınımlar yapan çok serbestlik dereceli pek çok sistemin en genel salınım hareketi; her birinin kendine özgü frekansı olan normal kiplerinin bir çizgisel üst üste gelimi olan bir harekettir. Tüm sistemin bir kipteki hareketi tek frekanslı bir salınım olup her bir serbestlik derecesinin hareketi bir basit harmonik salınıcının hareketi ile özdeşdir.[1]

Bir boyutlu bir harmonik salınıcının klasik hamilton fonksiyonu şu şekildedir ;

$$H(x, p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 \quad (2.1)$$

Harmonik salınıcı kuantum mekaniğinde de çok önemli bir yere sahiptir. Moleküllerin örgü titreşimlerinin denge konumu civarında titreşim hareketleri, siyah cisim ışımasında kovuk içindeki osilatörlerin (elektromagnetik alan salınımlarının) kuantum mekaniğin incelemelerinde vb. birçok örnekte harmonik salınıcı önemli bir yer tutar. Harmonik salınıcının bir diğer önemi de; özdeş problemi tam çözülebilen belli başlı problemlerden olduğundan sık sık başvurulmuş bir model olmasıdır.

$$H(x, p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 \quad ; \quad \omega_0^2 = k / m \quad (2.2)$$

$$H(x, p_x) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \quad (2.3)$$

$\hat{H}U(x) = EU(x)$ şeklinde hamilton işlemcisi uygulanırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 U(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 U(x) = EU(x) \quad (2.4)$$

$$\frac{d^2 U(x)}{dx^2} - \frac{mK(x)}{\hbar^2} x^2 U(x) = \frac{-2mE}{\hbar^2} U(x) \quad (2.5)$$

çözümde takip edilecek teknikler sırasıyla şu şekildedir,

- a) Boyutsuzlaştırma
- b) Asimptotik davranış
- c) Standart diferansiyel denklem çözüm yöntemleri

a) Boyutsuzlaştırma: $[X]$ =Uzunluk boyutunda olduğuna göre boyutsuzlaştırma yapmak için problemde $[\alpha]$ = 1/uzunluk olan bir terim aranır. Buna göre $\xi = \alpha x$ boyutsuz bir değişkendir.

$\alpha = (m\omega / \hbar)^{1/2} = [1/\text{uzunluk}]$ şeklinde seçilmelidir.

$$\frac{d}{dx} = \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} = \alpha \frac{d}{d\xi} \quad (2.6)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \alpha^2 \frac{d^2}{d\xi^2} \quad (2.7)$$

bu ifadeler Eş. 2.5 'de yerine yazılırsa,

$$\frac{d^2 U(x)}{d\xi^2} - \xi^2 U(x) = \frac{-2mE}{\alpha^2 \hbar^2} U(x) \quad ; \quad \lambda = \frac{-2mE}{\alpha^2 \hbar^2} \quad (2.8)$$

$$\lambda = \frac{\hbar}{m\omega} \frac{2mE}{\hbar^2} = \left[\frac{2E}{\hbar\omega} \right] = \text{Boyutsuz} \quad (2.9)$$

böylece diferansiyel denklem;

$$\frac{d^2 U}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)U = 0 \quad (2.10)$$

formuna dönüşür.

b) Asimptotik Davranış :

ξ ‘nin büyük değerlerinde U nasıl bir davranış gösterir ?

$$\sim \frac{d^2 U}{d\xi^2} - \xi^2 U = 0 \quad ; \quad (\xi \rightarrow \pm\infty) \quad (2.11)$$

$$U = H(\xi)e^{\pm\xi^2/2} \quad (2.12)$$

burada $H(\xi)$; ξ ‘nin sonlu dereceli bir polinomudur.

$$U' = -\xi e^{-\xi^2/2} H(\xi) + e^{-\xi^2/2} H'(\xi) \quad (2.13)$$

$$U'' = -U + \xi^2 U - 2\xi e^{-\xi^2/2} H'(\xi) + e^{-\xi^2/2} H''(\xi) \quad (2.14)$$

alınan türevler Eş. 2.11 ifadesinde yerine yazılırsa

$$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\lambda - 1)H(\xi) = 0 \quad (2.15)$$

bu denklem ;

$$y''(x) - 2xy'(x) + 2ny(x) = 0 \quad (2.16)$$

olan hermite diferansiyel denklem formundadır. Bu yüzden ;

$$\lambda - 1 = 2n \rightarrow \frac{2E_n}{\hbar\omega} - 1 = 2n \quad (2.17)$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (2.18)$$

şeklinde enerji spektrumu elde edilir.

Eş 2.15 ifadesi kuvvet serisi veya Frobenius yöntemiyle çözülebilir.[2] Çünkü $x=0$ 'da singularite bulunmaktadır. Bunun için $H(\xi)$ hermite polinomu kuvvet serisi şeklinde yazılırsa ;

$$\begin{aligned} H(\xi) &= \sum_{m=0}^{\infty} c_m \xi^m = c_0 + c_1 \xi + c_2 \xi^2 + c_3 \xi^3 + \dots \\ H'(\xi) &= \sum_{m=0}^{\infty} m c_m \xi^{m-1} \\ H''(\xi) &= \sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) c_m \xi^{m-2} \end{aligned} \quad (2.19)$$

alınan türevler Eş. 2.15 ifadesinde yerine yazılırsa ;

$$\sum_{m=0}^{\infty} c_m m(m-1) \xi^{m-2} - 2\xi \sum_{m=0}^{\infty} c_m m \xi^{m-1} + (\lambda - 1) \sum_{m=0}^{\infty} c_m \xi^m = 0 \quad (2.20)$$

ξ^m 'in katsayıları alınır ;

$$(m+2)(m+1)c_{m+2} - 2mc_m + (\lambda - 1)\xi^m c_m = 0 \quad (2.21)$$

buradan c_m katsayıları için aşağıdaki tekrarlama bağıntısı elde edilir.

$$c_{m+2} = \frac{2m+1-\lambda}{(m+1)(m+2)} c_m \quad (\text{Rekürans Bağıntısı}) \quad (2.22)$$

serinin yakınsaklık testine bakıldığında ;

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{c_{m+2}}{c_m} \cong 2/m \text{ şeklinde davrandığı görülür.}$$

$$e^{\xi^2} = 1 + \xi^2 + \frac{\xi^4}{2!} + \dots + \frac{\xi^m}{(m/2)!} + \frac{\xi^{m+2}}{((m+2)/2)!} + \dots \quad (2.23)$$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{(m/2)!}{(m+2/2)!} \cong \lim_{m \rightarrow \infty} [1/(m/2)] \cong 2/m \quad (2.24)$$

şeklinde exponansiyel fonksiyonla aynı davranışı göstermektedir. Bununla beraber Eş. 2.12 ifadesi kullanıldığında ;

$$U = e^{\xi^2} e^{\pm \xi^2/2} = e^{\pm \xi^2/2} \quad (\text{ıraksak çözüm}) \quad (2.25)$$

ıraksak olan çözümden kurtulabilmek için çift ve tek kuvvetli serilerin sonlu sayıda terime sahip olmaları gerekir. Yani sonlu sayıda terimden sonra gelen terimler sıfır olmalıdır. Bu yüzden bir $m = n$ değerinde seri kesilir. Eş. 2.22 ifadesinden ;

$$2n+1-\lambda=0 \quad (2.26)$$

olmalıdır. Böylece dalga fonksiyonu;

$$U_n(\xi) = N_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (n=0,1,2,\dots) \quad (2.27)$$

şeklinde elde edilir. Dalga fonksiyonu normalize edilerek N sabiti bulunabilir.

Hermite polinomlarının diklik bağıntısı ;

$$I_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2/2} d\xi = \pi^{1/2} 2^n n! \delta_{nm} \quad (2.28)$$

şeklinde verilir. Buradan;

$$1 = \frac{|N_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} d\xi \quad (2.29)$$

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} \quad (2.30)$$

olarak elde edilir. Böylece normalize edilmiş dalga fonksiyonları ;

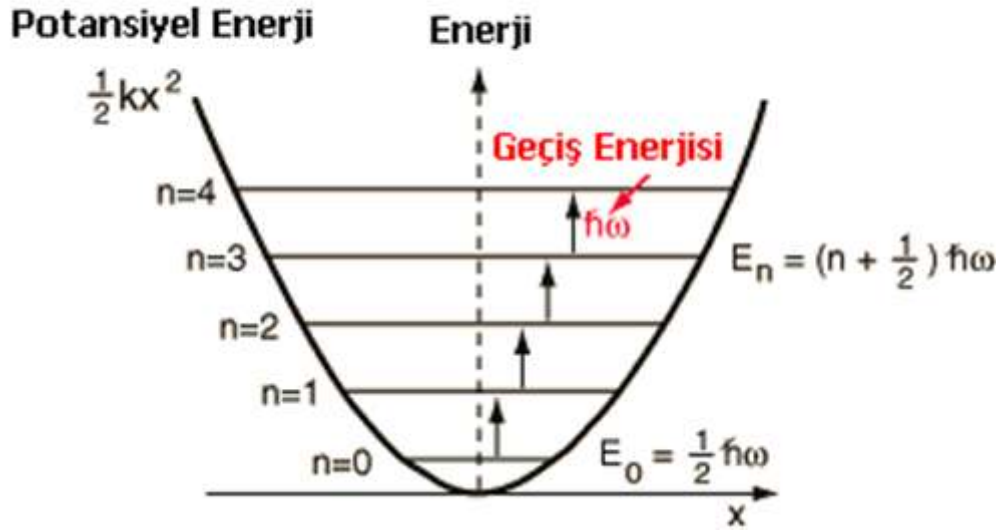
$$U_n(\xi) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (2.31)$$

enerji spektrumu ise; $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ şeklinde elde edilir. Taban durum enerjisinin (n=0) sıfırdan farklı oluşu tamamen kuantal bir etkidir. Çünkü E=0 olsaydı, P=0 ve X=0 olması anlamına gelirdi ki bu ise Heisenberg Belirsizlik İlkesi'ne aykırıdır.

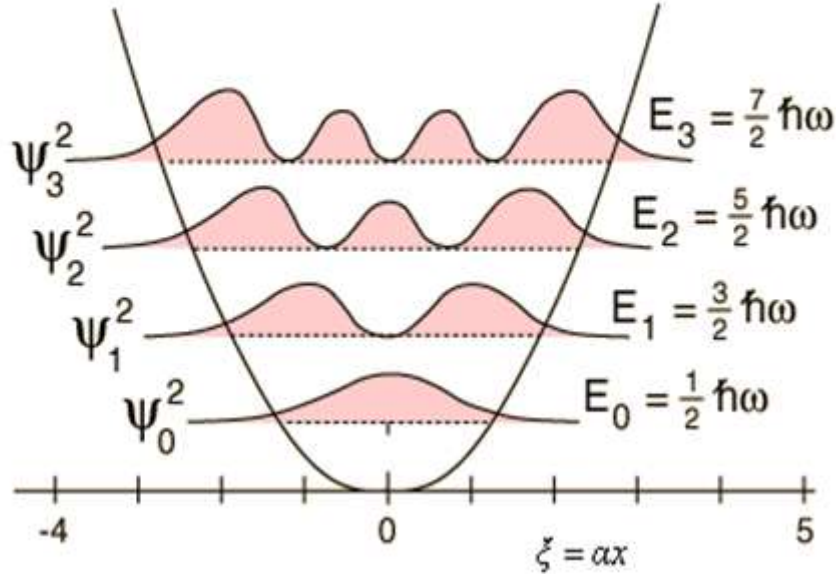
Harmonik salıncının ilk birkaç kuantum durumu için enerji özdeğerlerinin ve olasılık yoğunluklarının grafikleri aşağıdaki gibi verilmiştir.

Çizelge 2.1 Harmonik ossilatör için normalize edilmiş ilk dört dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerleri

n	Ψ	E
0	$(\alpha/\pi)^{1/4} e^{-\xi^2/2}$	$\hbar\omega/2$
1	$(\alpha/\pi)^{1/4} \sqrt{2}\xi e^{-\xi^2/2}$	$3\hbar\omega/2$
2	$(\alpha/\pi)^{1/4} (1/\sqrt{2})(2\xi^2 - 1)e^{-\xi^2/2}$	$5\hbar\omega/2$
3	$(\alpha/\pi)^{1/4} (1/\sqrt{3})(2\xi^3 - 3\xi)e^{-\xi^2/2}$	$7\hbar\omega/2$



Şekil 2.1 Harmonik ossilatörün potansiyel enerji ve enerji özdeğerlerinin grafiği



Şekil 2.2 Harmonik ossilatör için ilk dört enerji özdeğeri ve olasılık yoğunlukları

2.2 Küresel Simetrik Potansiyeller

Kuantum mekaniğinde karşılaşılan sistemler genelde üç boyutlu, çok parçacıklı sistemlerdir. Üç boyutlu izotropik harmonik salıncının $kr^2/2$ potansiyeli, $-Ze^2/r$ Coulomb potansiyeli (Hidrojen atomu) birer küresel simetrik potansiyeldir. Küresel simetrik sistemlerin genel bir özelliği olarak potansiyel açılardan bağımsızdır. Bu tür sistemlerin analizi zordur, ve bu yüzden, eğer varsa, sistemin sahip olduğu simetrilere dayanarak sonuçlar elde edilmeye çalışılır. Simetriden faydalanarak yapılan çözümler bölüm 3’de anlatılmıştır.

2.2.1 Üç Boyutlu Harmonik Salıncı :

3-Boyutlu harmonik salıncı hamiltonyeni,

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 \quad (2.32)$$

olur. Burada $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$ olduğundan potansiyel küresel simetrik; θ ve ϕ açılarından bağımsızdır. O halde radyal schrödinger denklemi küresel koordinatlarda yazılırsa,

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (2.33)$$

$$RE = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) \right) + V(r)R \quad (2.34)$$

$$\frac{2mEr^2}{\hbar^2} R = - \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mV(r)r^2}{\hbar^2} R \quad (2.35)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2(E - V(r))}{\hbar^2} = \lambda R \quad (2.36)$$

burada potansiyel aşağıdaki gibidir,

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2, \quad \lambda = l(l+1) \quad (2.37)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E - \frac{m\omega^2}{2} r^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R(r) = 0 \quad (2.38)$$

basit olması açısından s durumları alınırsa ($l=0$) merkezkaç terim kalkar.[3]

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E - \frac{m\omega^2}{2} r^2 \right] R(r) = 0 \quad (2.39)$$

$R = \chi(r)/r$ olarak seçilirse dalga fonksiyonu ve enerji özdeğeri aşağıdaki gibi olur,

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - \frac{m\omega^2}{2} r^2] \chi(r) = 0 \quad (2.40)$$

$$\chi(r) = N_{2n+1} H_{2n+1}(\alpha r) e^{-\alpha^2 r^2 / 2}, \quad E_n = (2n + \frac{3}{2}) \hbar \omega \quad (2.41)$$

2.2.2 Hidrojen Atomu :

Küresel simetrik bir sisteme diğer bir örnek olarak hidrojen atomu verilebilir. Üç boyutlu uzayda schrödinger denklemi ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2.42)$$

şeklinde verilir. Kutupsal koordinatlara geçilip radyal denklem yazılırsa;

$$\frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}] R(r) = 0 \quad (2.43)$$

burada,

$$V(r) = \frac{-Ze^2}{r} \quad (2.44)$$

olarak alınmıştır. Takip edilecek yöntemler yine,

- a) Boyutsuzlaştırma
- b) Asimptotik davranış
- c) Standart diferansiyel denklem çözüm yöntemleri

şeklindedir.

a) Boyutsuzlaştırma: $[r] \rightarrow \text{uzunluk boyutunda olduğundan,}$

$$\beta = \left[\frac{8m|E|}{\hbar^2} \right]^{1/2} \rightarrow [1/\text{uzunluk}] \quad (2.45)$$

olmak üzere $\rho = \beta r$ olsun. Burada ρ boyutsuzdur. ρ cinsinden Eş. 2.42 tekrar yazılırsa,

$$\frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dR}{d\rho} \right) + \left[\lambda \rho - \frac{\rho^2}{4} - l(l+1) \right] R(\rho) = 0 \quad (2.46)$$

burada; $\lambda = \frac{Ze^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}}$ tanımlaması yapıldı.

b) Asimptotik davranış : $\rho \rightarrow \infty$ durumu için ;

$$\frac{d^2 R_{nl}(\rho)}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R_{nl}(\rho) = 0 \quad (2.47)$$

olur. Çözümler ;

$$R_{nl}(\rho) = e^{-\rho/2} G_{nl}(\rho) \quad (2.48)$$

şeklindedir.

$$\lim_{r \rightarrow 0} R(r) \approx r^l \quad (2.49)$$

olduğu için $G_{nl}(\rho)$ aşağıdaki gibi seçilirse denklem,

$$G_{nl}(\rho) = \rho^l L_{nl}(\rho); \quad (2.50)$$

$$R_{nl}(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} L_{nl}(\rho) \quad (2.51)$$

haline gelir. Bu denklem Eş. 2.42 ifadesinde yerine yazılırsa;

$$\rho L_{nl}''(\rho) + (2l + 2 - \rho) L_{nl}'(\rho) + (\lambda - l - 1) L_{nl}(\rho) = 0 \quad (2.52)$$

olur. Frobenius metoduyla;

$$L(\rho) = c_0 + c_1 \rho + c_2 \rho^2 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \rho^i \quad (2.53)$$

gerekli türevler alınıp ρ^i 'nin katsayıları yazılırsa rekürans bağıntısı;

$$c_{i+1} = \frac{i + l + 1 - \lambda}{(i + 1)(2l + 2 + i)} \quad (2.54)$$

serinin yakınsaklık testine bakıldığında;

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{c_{i+1}}{c_i} \approx \frac{1}{i} \quad (2.55)$$

bu seri $i \rightarrow \infty$ için $\exp(\rho)$ 'nun davranışıyla aynıdır.

$$\exp(\rho) = \sum_i \frac{1}{i} \rho^i \quad (2.56)$$

bu durumda dalga fonksiyonu;

$$R_{nl}(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} L_{nl}(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} e^{\rho} = \rho^l e^{+\rho/2} \quad (2.57)$$

sonuç ıraksak olduğundan çözümün fiziksel olabilmesi için seri bir yerde kesilmelidir. Bunun için de tek yol;

$$\lambda = i_{\max} + l + 1 \text{ seçilmelidir.} \quad (2.58)$$

$i_{\max} \rightarrow n_r$ ve $\lambda \rightarrow n$ ile gösterilirse ;

$$n = n_r + l + 1 \quad (2.59)$$

olur. Burada n_r ve n 'ye sırasıyla radyal ve baş kuantum sayısı denir.

$$n = \frac{Ze^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}} \quad (2.60)$$

$$E_n = \frac{-mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} \text{ (Enerji spektrumu)} \quad (2.61)$$

olur. Bu durumda Eş. 2.48 ifadesi ;

$$\rho L'' + [2(l+1) - \rho]L' + [n - (l+1)]L = 0 \text{ olur.} \quad (2.62)$$

bu ifade aşağıdaki asosiye Laguerre diferansiyel denklemi ile karşılaştırılırsa;

$$\rho L_q'' + [p+1 - \rho]L_q' + [q - p]L_q = 0 \quad (2.63)$$

$$p=2l+1 \quad \text{ve} \quad q=n+l \quad (2.64)$$

elde edilir. Böylece dalga fonksiyonu;

$$R_{nl}(\rho) = N_{nl} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (2.65)$$

olarak bulunur. [4-5]

3. CEBİRSEL YÖNTEMLER

3.1. Bir Boyutlu Harmonik Salıncı İçin Cebirsel Yaklaşım

Çarpanlara ayırma yöntemiyle $\hat{H}$ ayrıştırılıp aynı cebri sağlayan ve birbirinden bir sabit çarpan kadar farklı olan merdiven operatörleri kurulabilir.

a) En sade biçimde ;

$$H(x, p_x) = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 \quad (3.1)$$

$$H(x, p_x) = \left(\frac{P_x}{\sqrt{2m}} - i\sqrt{\frac{k}{2}}x \right) \left(\frac{P_x}{\sqrt{2m}} + i\sqrt{\frac{k}{2}}x \right) \quad (3.2)$$

bu şekilde denklem klasik olarak çarpanlarına ayrılmış olur.[6] Fakat kuantum mekaniğinde x ve P_x sıra değiştirme özelliğine sahip değildir.

$$a^- = \left(\frac{P_x}{\sqrt{2m}} - i\sqrt{\frac{k}{2}}x \right) \quad , \quad a^+ = \left(\frac{P_x}{\sqrt{2m}} + i\sqrt{\frac{k}{2}}x \right) \quad (3.3)$$

$$a^- a^+ = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 + \frac{i}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} (px - xp) \quad (3.4)$$

$$a^- a^+ = H + \frac{i}{2} \omega [p, x] \quad (3.5)$$

$$a^- a^+ = H + \frac{\hbar \omega}{2} \quad (3.6)$$

$$[a^-, a^+] = \hbar \omega \quad (3.7)$$

$$[H, a^\pm] = \pm \hbar \omega a^\pm \quad (3.8)$$

$$b) \quad H(x, p_x) = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 \quad (3.9)$$

Hamiltonyen boyutsuz olarak aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$p = \frac{\hat{P}}{\sqrt{m\omega\hbar}} \quad \text{ve} \quad q = \hat{X} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (3.10)$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (p^2 + q^2) \quad (3.11)$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (q + ip)(q - ip) \quad (3.12)$$

$$a^- = \frac{1}{\sqrt{2}} (q + ip) \quad \text{ve} \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (q - ip) \quad (3.13)$$

benzer şekilde $[q, p] = i$ olduğu ve aynı cebri sağladığı gösterilebilir.[7]

c) Schrödinger denklemini boyutsuzlaştırırken $\alpha = (m\omega / \hbar)^{1/2}$ tanımlaması yapılmıştı. a^- ve a^+ , α cinsinden yazılırsa ;

$$a^- = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \left(x + i \frac{p_x}{\hbar\alpha^2} \right) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{1}{\alpha^2} \frac{d}{dx} \right) \quad (3.14.a)$$

$$a^+ = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \left(x - i \frac{p_x}{\hbar\alpha^2} \right) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{1}{\alpha^2} \frac{d}{dx} \right) \quad (3.14.b)$$

bu operatörlerin dalga fonksiyonuna etkisi,

$$a^+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1} \quad \text{ve} \quad a^- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad (3.15)$$

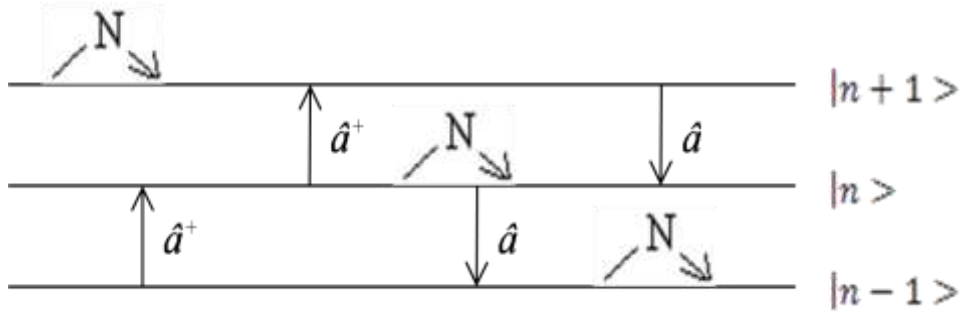
şeklindedir.[8] Merdiven işlemcilerinin cebirsel yapıları şu şekildedir.

$$[a^-, a^+] = 1, \quad N = a^+ a^-, \quad [N, a^-] = -a^-, \quad [N, a^+] = a^+ \quad (3.16)$$

enerji özdeğeri ise

$$E_n = \hbar \omega (n + 1/2) \quad (3.17)$$

şeklindedir. [9]



Şekil 3.1 a^- , a^+ ve N işlemcilerinin merdiven yapısının gösterimi

$\{1, a^-, a^+ \mid [a^-, a^+] = 1\} \rightarrow$ Heisenberg – Weyl Cebri

$\{1, a^-, a^+, N \mid [a^-, a^+] = 1, [a^-, N] = a^-, [a^+, N] = -a^+\} \rightarrow$ Harmonik Salımcı Cebri [10]

Üç boyutlu harmonik salımcı da küresel simetriye sahiptir.

$$H = \hbar \omega (a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2 + a_3^+ a_3 + 3/2) \quad (3.18)$$

$$[a_i^+, a_j] = -\delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \quad (3.19)$$

3.2. Hidrojen Atomu ve Üç Boyutlu Harmonik Salıncı İçin Cebirsel Yaklaşım :

Hidrojen atomunda Ze^2/r (coulomb) veya $kr^2/2$ (üç boyutlu harmonik salıncı) potansiyelleri küresel simetrik potansiyellerdir. Küresel simetrik potansiyellerin genel bir özelliği olarak ;

$$[H, L^2] = 0 \quad , \quad [H, L_z] = 0 \quad \text{ve} \quad [L^2, L_z] = 0 \quad (3.20)$$

komütasyon bağıntıları sağlanır. a^+ ve a^- işlemcilerine benzer olarak $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ açısıl momentum işlemcileri vardır. Sağladığı komütasyon bağıntıları,

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z \quad \text{ve} \quad [L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm} \quad (3.21)$$

şeklindedir. En basit durumda hamiltonyen aşağıdaki şekilde çarpanlarına ayrılabilir,

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{\hbar^2 r^2} \right) \quad (3.22)$$

$$A^- = \frac{d}{dr} - \frac{l}{r} - \frac{1}{l} \quad A^+ = -\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l} \quad (3.23)$$

şeklinde merdiven operatörleri kurulur.

$$A^- A^+ = H_{\ell} + \frac{1}{\ell^2} \quad (3.24)$$

olduğu kolayca görülebilir. L_+ , L_- ve L_z 'den oluşan cebre açısıl momentum veya R^3 'te dönme cebri (SO(3) cebri) denir.

Merkezi kuvvet problemlerinden olan hidrojen atomu ve üç boyutlu harmonik salıncıya ait merdiven operatörleri, dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerlerini genel olarak elde edebilmek için aşağıdaki yöntem kullanılabilir; [11]

$$H|Elm\rangle = E|Elm\rangle \quad (3.25)$$

burada hamiltonyen,

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \quad (3.26)$$

olarak verilir.

Cebirsel Yapının Kurulması

Quantum mekaniksel problemlerin cebirsel çözümlerinde kullanılan iyi bilinen bir örnek açısal momentum problemidir;

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (3.27)$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad (3.28)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad (3.29)$$

Eş. 3.25 ifadesinin cebirsel çözümü için aşağıdaki komütasyon bağıntısı kullanılabilir;

$$[r, p^m] = i\hbar m p^{m-1} \quad (3.30)$$

Eş. 3.30 ifadesinden;

$$[r^a, r^b p] = r^b (i\hbar a r^{a-1}) = i\hbar a r^{a+b-1} \quad (3.31)$$

olur. Eş. 3.27 – Eş. 3.29 ifadeleri kapalı bir cebir oluştururlar. Bu yüzden r^{a+b-1} , r^a 'ya eşit olmalıdır. Bu yüzden $b=1$ ve $[r^a, rp] = i\hbar a r^a$ olmalıdır. Benzer şekilde diğer komütasyon bağıntıları yazılabilir,

$$[r^a, r^{2-a} p^2] = a(a-1) \hbar^2 + 2ia \hbar r p \quad (3.32)$$

$$[rp, r^{2-a} p^2] = ia \hbar r^{2-a} p^2 \quad (3.33)$$

Bu adımdan sonra aşağıdaki değişken değiştirmeleri yapılabilir.

$$V_1 = r^a \quad (3.34)$$

$$V_2 = \frac{1}{a} [rp - \frac{1}{2} i(a-1)\hbar] \quad (3.35)$$

$$V_3 = \frac{1}{a^2} r^{2-a} p^2 \quad (3.36)$$

Eş. 3.31, Eş. 3.32 ve Eş. 3.33'deki komütasyon bağıntıları aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$[V_1, V_2] = i \hbar V_1, \quad (3.37)$$

$$[V_2, V_3] = i \hbar V_3, \quad (3.38)$$

$$[V_3, V_1] = -2i \hbar V_2, \quad (3.39)$$

Eş. 3.34 ifadesinden $r^{-a} = V_1^{-1}$ yazılabileceğinden,

$$[V_2, V_1^{-1}] = i \hbar V_1^{-1} \quad (3.40)$$

Böylece Eş. 3.38 ve Eş. 3.40' dan aşağıdaki komütasyon bağıntısı elde edilir.

$$[V_2, (V_3 + \tau V_1^{-1})] = i \hbar (V_3 + \tau V_1^{-1}) \quad (3.41)$$

burada τ bir sabit veya V_1, V_2, V_3 ile komüte eden herhangi bir operatördür. Eş. 3.37 -3.39 ifadeleri V_3 ve $V_3 + \tau V_1^{-1}$ ifadesinin değiştirilmesi sonucunda invariant kaldığı görülür. V_1, V_2, V_3 'ün son bir lineer kombinasyonu ile aşağıdaki operatörler kurulabilir,

$$T_1 = \frac{1}{2} (V_3 + \tau V_1^{-1} - V_1), \quad (3.42)$$

$$T_2 = V_2, \quad (3.43)$$

$$T_3 = \frac{1}{2} (V_3 + \tau V_1^{-1} + V_1) \quad (3.44)$$

Komütasyon bağıntılarının oluşturduğu cebir ise şu şekildedir ;

$$[T_1, T_2] = -i\hbar T_3 \quad (3.45)$$

$$[T_2, T_3] = i\hbar T_1 \quad (3.46)$$

$$[T_3, T_1] = i\hbar T_2 \quad (3.47)$$

Eş. 3.45 - 3.47' deki ifadeler ile Eş. 3.27 – 3.29' daki ifadeler, Eş. 3.45 ve Eş. 3.27'deki işaret farklılığı haricinde birbirine özdeştir. L_x, L_y, L_z 'den oluşan cebre $SO(3)$ cebri, T_1, T_2, T_3 'den oluşan cebre ise $SO(2,1)$ cebri denilir. Bu iki cebir aşağıdaki gibi karşılaştırılabilir;

$$[T_1, T_2] = i\gamma\hbar T_3 \quad (3.48)$$

$$[T_2, T_3] = i\hbar T_1 \quad (3.49)$$

$$[T_3, T_1] = i\hbar T_2 \quad (3.50)$$

Burada $SO(3)$ için $\gamma = +1$, $SO(2,1)$ için $\gamma = -1$ 'dir.[12] $T_{\pm}$ artırıcı-eksiltici işlemci olmak üzere ;

$$[T_+, T_-] = 2\gamma\hbar T_3 \quad (3.51)$$

$$[T_3, T_{\pm}] = \pm\hbar T_{\pm} \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} T^2 &= \gamma(T_1^2 + T_2^2) + T_3^2 = \gamma T_+ T_- + T_3^2 - \hbar T_3 \\ &= \gamma T_- T_+ + T_3^2 + \hbar T_3 \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$[T^2, T_k] = 0, \quad k=1,2,3 \quad (3.54)$$

T^2 ve T_3 'ün dalga fonksiyonuna etkileri ise,

$$T^2|Qq\rangle = Q|Qq\rangle \quad (3.55)$$

$$T_3|Qq\rangle = q|Qq\rangle \quad (3.56)$$

$$T_3T_\pm|Qq\rangle = (q \pm \hbar)T_\pm|Qq\rangle \quad (3.57)$$

şeklindedir. Bu şekilde T_3 için özdeğerler ve özvektörler elde edilmiş olur. Taban durumundaki dalga fonksiyonu için ,

$$T_-|Qq_0\rangle = 0 \quad (3.58)$$

bulunur. Eş. 3.55 - 3.57 bağıntılarından yararlanılarak,

$$\begin{aligned} T^2|Qq_0\rangle &= (-T_+T_- + T_3^2 - \hbar T_3)|Qq_0\rangle \\ &= (q_0^2 - q_0\hbar)|Qq_0\rangle = q_0(q_0 - \hbar)|Qq_0\rangle \end{aligned} \quad (3.59)$$

yazılabilir. $SO(3)$ cebrinde L^2 'nin özdeğerleri $\ell(\ell+1)$ şeklinde olmasına karşılık, $SO(2,1)$ cebrinde T^2 'nin özdeğerleri $q_0(q_0 - \hbar)$ şeklindedir. q_0 taban durum özdeğeri için T^2 açılımı kullanılarak aşağıdaki ifade yazılabilir,

$$\begin{aligned} T^2 &= -T_1^2 - T_2^2 + T_3^2 = (T_3 - T_1)(T_3 + T_1) - [T_3, T_1] - T_2^2 \\ &= V_1(V_3 + \tau V_1^{-1}) - i\hbar V_2 - V_2^2 \end{aligned} \quad (3.60)$$

Eş. 3.35 ifadesi kullanılarak ,

$$V_2^2 = \frac{1}{a^2} [r^2 p^2 - ia\hbar r p - (\frac{a-1}{2}\hbar)^2] \quad (3.61)$$

Eş. 3.34 - 3.36 ifadeleri kullanılarak Eş. 3.60 ifadesi aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$T^2 = \tau + \frac{\hbar^2}{4a^2}(1 - a^2) \quad (3.62)$$

$$\langle Qq_0 | T^2 | Qq_0 \rangle = q_0(q_0 - \hbar) \quad (3.63)$$

denkleminde ,

$$q_0^2 - q_0\hbar - [\tau + \frac{\hbar^2}{4a^2}(1 - a^2)] = 0 \quad (3.64)$$

denklem tekrar düzenlendiğinde q_0 için aşağıdaki ifade bulunur,

$$q_0 = \frac{\hbar}{2} \left(1 \pm \sqrt{\frac{4\tau}{\hbar^2} + \frac{1}{a^2}} \right) \quad (3.65)$$

taban durumu dalga fonksiyonu aşağıdaki şekilde bulunabilir,

$$(T_- - T_3) | Qq_0 \rangle = -q_0 | Qq_0 \rangle \quad (3.66)$$

$T = T_1 - iT_2$ ve Eş. 3.42 - 3.44 denklemleri kullanılarak ;

$$(V_1 + iV_2 - q_0) | Qq_0 \rangle = 0 \quad (3.67)$$

V_1 ve V_2 'nin açık ifadesi yazıldığında

$$\left[r^a + \frac{irp}{a} + \frac{\hbar}{2} \frac{a-1}{a} - q_0 \right] | Qq_0 \rangle = 0 \quad (3.68)$$

$r \rightarrow \alpha^{-1}r$, $p \rightarrow -i\hbar \alpha \frac{d}{dr}$ ve $| Qq_0 \rangle \rightarrow \psi_0(r)$ dönüşümleri yapıldığında ,

$$r \frac{d\psi_0(r)}{dr} + \left[\frac{a}{\hbar} \left(\frac{r}{\alpha} \right)^a + \frac{a-1}{2} - \frac{aq_0}{\hbar} \right] \psi_0(r) = 0 \quad (3.69)$$

böylece $\psi_0(r)$ aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\psi_0(r) = Ar^c e^{-(1/\hbar)(r/\alpha)^a} \quad (3.70)$$

burada $C = aq_0\hbar^{-1} - 1/2(a-1)$ olur . q_0 ' ın değeri Eş. 3.65 ifadesinden yazıldığında,

$$C = \frac{1}{2} \left[1 \pm \sqrt{\frac{4a^2\tau}{\hbar^2} + 1} \right] \quad (3.71)$$

olur. Şimdi SO(2,1) grubunun operatörü T_3 ile Hamiltonyen operatörü arasındaki bağıntı hesaplanabilir,

$$(T_3 - q_n) = \alpha r^\beta (H - E) \quad (3.72)$$

Eş. 3.42 - 3.44 ifadeleri ve hamiltonyenin açık ifadesi yazılırsa,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{a^2} r^{2-a} p^2 + \frac{\tau}{r^a} + r^a \right) - q_n \\ &= \alpha r^\beta \left[\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E \right) \right] \end{aligned} \quad (3.73)$$

P^2 ' nin katsayıları eşitlenirse $\alpha = ma^{-2}$ ve $\beta = 2-a$ olur. Böylece Eş. 3.73 ifadesi aşağıdaki ifadeye indirgenir,

$$\frac{1}{2} \left(\tau - \frac{l(l+1)\hbar^2}{a^2} \right) + \frac{r^{2a}}{2} - r^a q_n - \frac{m}{a^2} r^2 V(r) + \frac{m}{a^2} r^2 E = 0 \quad (3.74)$$

$r^2V(r)$ 'nin r cinsinden kuvvet serisi aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$r^2V(r) = A + Br^{2a} + Dr^a \quad (3.75)$$

Eş. 3.75 ifadesi Eş. 3.74 'de yazıldığında,

$$\frac{1}{2}(\tau - \frac{l(l+1)\hbar^2}{a^2} - \frac{m}{a^2}A) + (\frac{1}{2} - \frac{m}{a^2}B)r^{2a} - (q_0 + \frac{m}{a^2}D)r^a + \frac{m}{a^2}r^2E = 0 \quad (3.76)$$

bulunur. Eş. 3.75 ifadesi yeniden düzenlenirse ,

$$V(r) = \frac{A}{r^2} + Br^{2a-2} + Dr^{a-2} \quad (3.77)$$

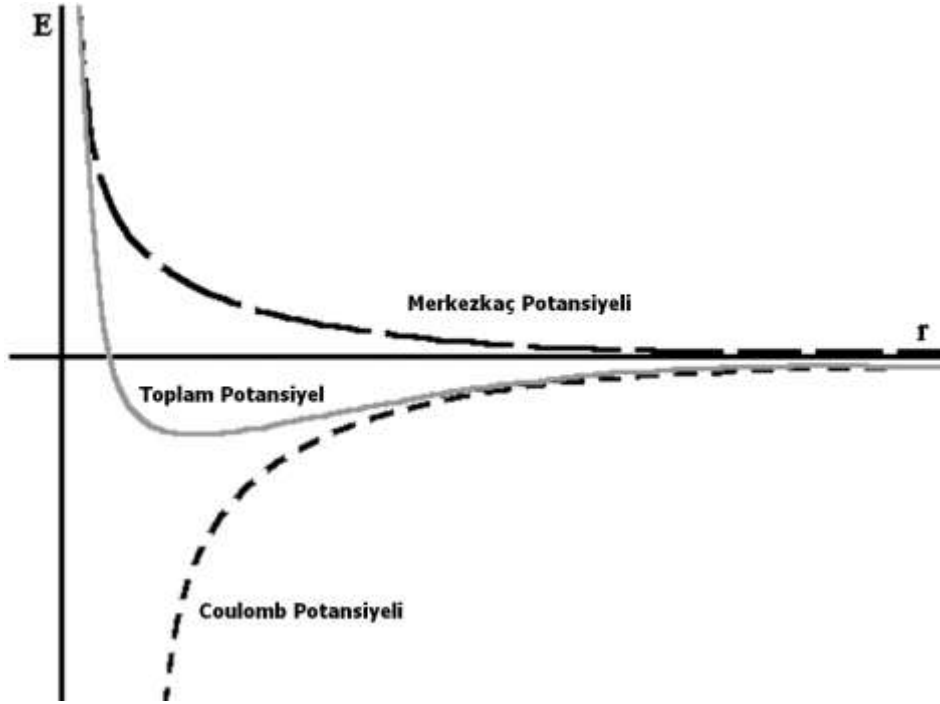
olur. Burada $A=0$ ve $a=1$ iken Coulomb potansiyeli $A=0$ ve $a=2$ iken harmonik ossilatör potansiyeli , $A \neq 0$ ve $a=1$ için A 'nın işaretine göre ya Davidson veya Kratzer molekül potansiyeli elde edilir.[13]

Bu adımdan sonra elde edilen cebirsel yöntemle hidrojen atomu ve üç boyutlu harmonik ossilatörün enerji özdeğer ve özfonksiyonları hesaplanabilir;

a) Hidrojen Atomu için cebirsel yapı :

$$[\frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - E]Elm_l \rangle = 0 \quad (3.78)$$

bu denklemdeki Coulomb ve merkezkaç potansiyel grafiği aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.2. Hidrojen atomu – Coulomb potansiyel noktalı olan çizgi, merkezkaç potansiyeli kesikli olan çizgi, toplam potansiyel ise sürekli olan çizgidir.

Eş. 3.78’de her iki taraf $\mu\alpha r$ ile çarpılıp $R \rightarrow \alpha^{-1}r$ ve $P \rightarrow \alpha p$ değişken değiştirmesi yapılırsa,

$$\left[\frac{RP^2}{2} - \frac{\mu e^2 \alpha}{4\pi\epsilon_0} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2R} - \mu\alpha^2 RE \right] |Elm_l\rangle = 0 \quad (3.79)$$

Eş. 3.34 – 3.36’daki ifadeler kullanılarak denklem,

$$\frac{1}{2} \left[V_3 - \frac{\mu e^2 \alpha}{2\pi\epsilon_0} + l(l+1)\hbar^2 V_1^{-1} - 2\mu\alpha^2 V_1 E \right] |Elm_l\rangle = 0 \quad (3.80)$$

olur. Burada $a=1$ ‘dir. Eş. 3.80 ifadesi , Eş. 3.44 ifadesi ile karşılaştırıldığında,

$$\tau = l(l+1)\hbar^2 \quad (3.81)$$

$$2\mu\alpha^2 E = -1 \quad (3.82)$$

$$q = \frac{\mu e^2 \alpha}{4\pi\epsilon_0} \quad (3.83)$$

böylece Eş. 3.80 ifadesi ,

$$[T_3 - q] |elm_l\rangle = 0 \quad (3.84)$$

denkleminde indirgenir. q değerleri T_3 'ün özdeğerleridir. Eş. 3.65 ifadesinden,

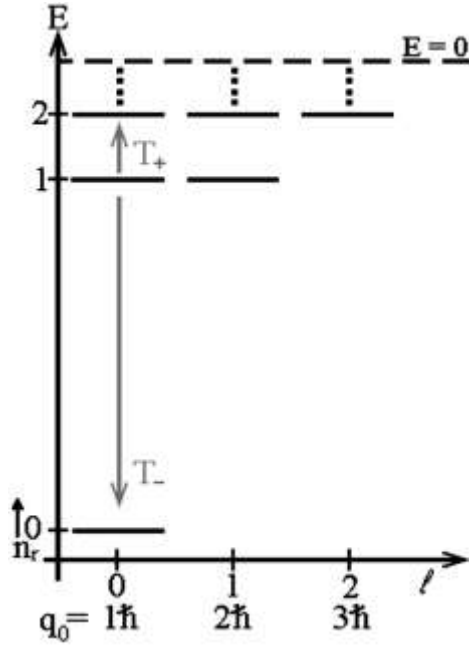
$$q_0 = \frac{\hbar}{2} (1 \pm (2l + 1)) \quad (3.85)$$

q_0 'ın pozitif özdeğerli olması gerekeceğinden ,

$$q_0 = \hbar(l + 1) \quad (3.86)$$

$$T^2 = l(l + 1)\hbar^2 \quad (3.87)$$

son üç denklemden hidrojen atomunun spektrumunda merdiven operatörlerinin etkisi aşağıda bulunan grafikteki gibi gösterilebilir.



Şekil 3.3 Hidrojen atomu enerji spektrumunda alçaltıcı ve yükseltici operatörler bir durumu bir üst veya bir alt duruma geçirirler.

şekilde görüldüğü gibi q özdeğerindeki artışların $n_r \hbar$ kadar olduğu düşünüldüğünde,

$$q = q_0 + n_r \hbar = (l+1)\hbar + n_r \hbar = \frac{\mu e^2 \alpha}{4\pi \epsilon_0} \quad (3.88)$$

buradan α çekildiğinde,

$$\alpha = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar}{\mu e^2} [(l+1) + n_r] \quad (3.89)$$

Eş. 3.82 ifadesi kullanıldığında,

$$E = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{(l+1+n_r)^2} \quad ; \quad n = l+1+n_r \quad (3.90)$$

$$E = -\frac{R_y}{n^2} \quad (3.91)$$

şeklinde enerji özdeğerleri elde edilir. $\psi_0(r) = Ar^C e^{-(1/\hbar)(r/a_0)^a}$ denklemi kullanılarak,

$$\psi_0(r) = Ar^C e^{-\frac{\mu e^2 r}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n}} \quad (3.92)$$

$$\psi_0(r) = Ar^C e^{-r/na_0} \quad (3.93)$$

burada a_0 Bohr yarıçapıdır. C sabiti Eş. 3.71 ifadesinden ;

$$C = \frac{1}{2} [1 \pm \sqrt{4l(l+1)+1}] \quad (3.94)$$

olarak bulunur. Pozitif değerler için,

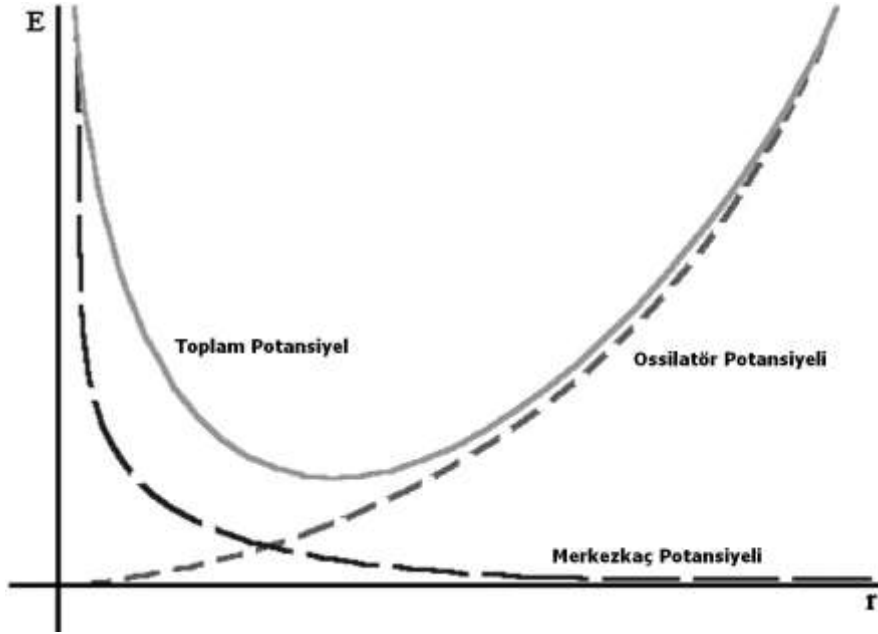
$$C = l+1 \quad (3.95)$$

olarak elde edilir.

b) Üç Boyutlu Harmonik Salıncı için cebirsel yapı :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - E \right] \psi_{lm_l} = 0 \quad (3.96)$$

bu denklemdeki harmonik osilatör ve merkezkaç potansiyelinin grafiği şekilde görüldüğü gibidir,



Şekil 3.4. Harmonik ossilatör potansiyeli noktalı olan çizgi, merkezkaç potansiyeli kesikli olan çizgi, toplam potansiyel ise sürekli olan çizgidir.

Eş.3.96'da her iki taraf $\beta^2/4$ ile çarpılıp $R = \beta^{-1} r$ ve $P = \beta p$ yazılırsa,

$$\left[\frac{P^2}{8m} + \frac{1}{8} m \omega^2 \beta^4 R^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{8mR^2} - \frac{\beta^2 E}{4} \right] |Elm_l\rangle = 0 \quad (3.97)$$

$$\left[\frac{1}{2} \left(\frac{P^2}{4m} + \frac{1}{4} m \omega^2 \beta^4 R^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{4mR^2} \right) - \frac{\beta^2 E}{4} \right] |Elm_l\rangle = 0 \quad (3.98)$$

Eş. 3.34 – 3.36 ifadesinden ,

$$\left[\frac{1}{2m} \left(V_3 + \frac{1}{4} m^2 \omega^2 \beta^4 V_1 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{4V_1} \right) - \frac{\beta^2 E}{4} \right] |Elm_l\rangle = 0 \quad (3.99)$$

bu denklem Eş. 3.44 ifadesi ile karşılaştırıldığında

$$\frac{1}{4} m^2 \omega^2 \beta^4 = 1 \quad (3.100)$$

$$\tau = \frac{l(l+1)\hbar^2}{4} \quad (3.101)$$

özdeğer deklemini yazılabilir,

$$\left[T_3 - \frac{\beta^2 m E}{4} \right] |Elm_l\rangle = 0 \quad (3.102)$$

Eş. 3.65 ifadesinden,

$$\begin{aligned} q_0 &= \frac{1}{2} \left(\hbar \pm \sqrt{4\tau + \frac{\hbar^2}{a^2}} \right) = \frac{1}{2} \left(\hbar \pm \hbar \sqrt{l(l+1) + \frac{1}{4}} \right) \\ &= \frac{1}{2} (\hbar \pm \hbar(l + \frac{1}{2})) \end{aligned} \quad (3.103)$$

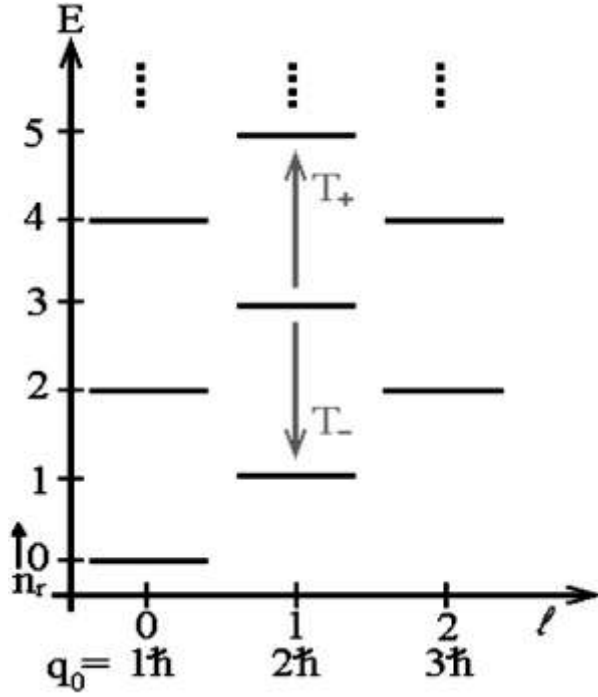
$$q_0 = \frac{\hbar}{2} (l + 3/2) \quad (3.104)$$

bulunur. Böylece enerji özdeğerleri,

$$E = (2n_r + l + 3/2)\hbar\omega \quad ; \quad N = 2n_r + l \quad (3.105)$$

$$E = (N + 3/2)\hbar\omega \quad (3.106)$$

olur. Eş. 3.104 ve Eş. 3.105' den yararlanarak harmonik ossilatörün enerji spektrum grafiğinde de merdiven operatörlerinin etkisi şekildeki gibi gösterilebilir,



Şekil 3.5. Harmonik ossilatörün enerji spektrumunda alçaltıcı ve yükseltici operatörler bir durumu bir üst veya bir alt duruma geçirirler.

dalga fonksiyonu aşağıdaki gibidir ,

$$\psi_0(r) = Ar^C e^{-r^2 / \beta^2 \hbar} \quad (3.107)$$

β 'nın değeri yerine yazıldığında,

$$\psi_0(r) = Ar^C e^{-m\omega r^2 / 2\hbar} \quad (3.108)$$

olur. Eş. 3.71 ifadesinden C sabiti,

$$C = \frac{1}{2} [1 \pm \sqrt{4l(l+1) + 1}] \quad (3.109)$$

pozitif değerler için,

$$C = l + 1 \quad (3.110)$$

elde edilir.

3.3. Harmonik Salıncı Ve Ters Kare Potansiyeli İçin Cebirsel Yaklaşım :

Keyfi bir N boyutunda schrödinger denklemi ,

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_N^2 \psi(x) = [E - V(r)] \psi(x) \quad (3.111)$$

ile verilir. Burada V(r) ;

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2 \alpha}{2mr^2} \quad (3.112)$$

şeklindedir.[14] Dalga fonksiyonu ;

$$\psi_{\ell, N-2, \dots, \ell_1}^{\ell}(x) = r^{-(N-1)/2} R(r) Y_{\ell, N-2, \dots, \ell_1}^{\ell}(x) \quad (3.113)$$

$$\nabla \psi = \frac{1}{r^{n-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{n-1} \frac{\partial \psi}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \Delta_N \psi \quad (3.114)$$

şeklindedir. Δ_N sadece açısal değişkenleri içerir. Örneğin N=3 için ;

$$\Delta_3 \psi = \frac{1}{\sin \phi} \frac{\partial}{\partial \phi} (\sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi}) + \frac{1}{\sin^2 \phi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \quad (3.115)$$

N>3 için Δ_N 'in açık ifadesine gerek yoktur. Çünkü orijine göre küresel simetrik olan bir fonksiyon orijin merkezli ve r yarıçaplı küre üzerindeki noktalarda sadece r

yarıçapına bağlı olup θ ve ϕ değişkenlerine bağlı değildir. Laplasyenin kullanışlı bir ifadesi ;

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{N-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2} \quad \psi(r, \Omega) = r^{-(N-1)/2} R(r) Y_{lm}(\Omega) \quad (3.116)$$

şeklindedir.[15] Burada $Y_{lm}(\Omega)$; L^2 'nin $\ell(\ell + N - 2)$ özdeğerli özfonksiyonudur.

Böylece $\hbar = m = \omega = 1$ seçildiğinde ;

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + (2E - r^2 - \frac{L(L+1)}{r^2}) R(r) = 0 \quad (3.117)$$

olur. Burada ; $L = \frac{-1}{2} + \sqrt{\alpha + (\ell - 1 + N/2)^2}$ şeklinde sabittir. $\rho=r^2$ seçilerek Eş.

3.117 ifadesi aşağıdaki şekilde elde edilir.

$$\frac{d^2 R(r)}{d\rho^2} + \frac{1}{2\rho} \frac{dR}{d\rho} - (\frac{1}{4} + \frac{L(L+1)}{4\rho^2} - \frac{E}{2\rho}) R(r) = 0 \quad (3.118)$$

Asimptotik Davranış : $\rho \rightarrow \infty$ limiti için ;

$$\frac{d^2 R(r)}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R(\rho) = 0 \quad (3.119)$$

$$R_{nl}(\rho) = e^{-\rho/2} F_{nl}(\rho) \quad (3.120)$$

benzer şekilde $\rho \rightarrow 0$ limiti için ;

$$R_{nl}(\rho) \approx \rho^\sigma \quad (3.121)$$

bu durumda dalga fonksiyonu ;

$$R_{nl}(\rho) = \rho^\sigma e^{-\rho/2} F_{nl}(\rho) \quad ; \quad \sigma = (L+1)/2 \quad (3.122)$$

bu çözüm Eş. 3.118 ifadesinde kullanılırsa ;

$$\rho F''(\rho) + (2\sigma + \frac{1}{2} - \rho)F'(\rho) + (\frac{E}{2} - \sigma - \frac{1}{4})F(\rho) = 0 \quad (3.123)$$

olur. Özfonksiyon konfluent hipergeometrik fonksiyon cinsinden ;

$$R(\rho) = N \rho^\sigma e^{-\rho/2} F(\sigma - \frac{E}{2} + \frac{1}{4}, 2\sigma + \frac{1}{2}; \rho) \quad (3.124)$$

şeklinde yazılabilir. Enerji özdeğerleri ;

$$L_n^\alpha(x) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!\Gamma(\alpha+1)} F(-n, \alpha+1; x) \quad (3.125)$$

$$-n = \sigma - \frac{E}{2} + \frac{1}{4} \quad (3.126)$$

$$E_n = \frac{1}{2} + 2n + 2\sigma = 2n + L + \frac{3}{2} \quad (3.127)$$

olarak elde edilir. Laguerre polinomlarının dikliğinden faydalanılarak N normalizasyon katsayısı bulunabilir.

$$\int_0^\infty y^\alpha e^{-y} L_n^\alpha(y) L_m^\alpha(y) dy = \frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!} \delta_{nm} \quad (3.128)$$

buradan N;

$$N_n = \sqrt{2n!/\Gamma(2\sigma + n + 1/2)} \quad \text{ve} \quad (3.129)$$

$$R_n(\rho) = N_n \rho^\sigma e^{-\rho/2} L_n^{2\sigma-1/2}(\rho) \quad (3.130)$$

olur. Merdiven operatörlerini kurmak için $d/d\rho$ türev operatörü dalga fonksiyonuna etki ettirilir ;

$$\frac{d}{d\rho} R_n(\rho) = \left(\frac{\sigma}{\rho} - \frac{1}{2}\right) R_n(\rho) + N_n \rho^\sigma e^{-\rho/2} \frac{d}{d\rho} L_n^{2\sigma-1/2}(\rho) \quad (3.131)$$

Laguerre polinomları için kullanılan iki rekürans bağıntısı aşağıdaki gibidir;

$$x \frac{d}{dx} L_n^\alpha(x) = \begin{cases} n L_n^\alpha(x) - (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(x) \\ (n + 1) L_{n+1}^\alpha(x) - (n + \alpha + 1 - x) L_n^\alpha(x) \end{cases} \quad (3.132)$$

$$(n + 1) L_{n+1}^\alpha(x) - (n + \alpha + 1 - x) L_n^\alpha(x) \quad (3.133)$$

Eş. 3.132 ifadesi Eş. 3.131’de kullanılırsa;

$$N_n \rho^{\sigma-1} e^{-\rho/2} \rho \frac{d}{d\rho} L_n^{2\sigma-1/2}(\rho) \quad (3.134)$$

$$\rho \frac{d}{d\rho} L_n^{2\sigma-1/2}(\rho) = \{n L_n^{2\sigma-1/2}(\rho) - (n + 2\sigma - 1/2)\} L_{n-1}^{2\sigma-1/2}(\rho) \quad (3.135)$$

$$= \frac{N_n}{\rho} \rho^\sigma e^{-\rho/2} [n L_n^{2\sigma-1/2}(\rho) - (n + 2\sigma - 1/2) L_{n-1}^{2\sigma-1/2}(\rho)] \quad (3.136)$$

$$= \frac{n}{\rho} R_n(\rho) - \left(\frac{n + 2\sigma - 1/2}{\rho}\right) N_n \rho^\sigma e^{-\rho/2} L_{n-1}^{2\sigma-1/2}(\rho) \quad (3.137)$$

denklemini R_{n-1} cinsinden yazabilmek için ;

$$\frac{N_n}{N_{n-1}} = \sqrt{\frac{n}{2\sigma + n - 1/2}} \quad (3.138)$$

ile verilir. Böylece Eş. 3.131 denklemi ;

$$\left(\frac{d}{d\rho} - \frac{n+\sigma}{\rho} + \frac{1}{2}\right)R_n(\rho) = \frac{-(n+2\sigma-1/2)}{\rho} \frac{N_n}{N_{n-1}} R_{n-1}(\rho) \quad (3.139)$$

haline gelir. Benzer şekilde Eş. 3.133 bağıntısı kullanılarak Eş. 3.131 ifadesinin sağ tarafı ;

$$\frac{N_n}{\rho} \rho^\sigma e^{-\rho/2} [(n+1)L_{n+1}^{2\sigma-1/2}(\rho) - (n+2\sigma+1/2-\rho)L_n^{2\sigma-1/2}(\rho)] \quad (3.140)$$

$$\frac{N_n}{N_{n+1}} = \sqrt{\frac{n+2\sigma+1/2}{n+1}} \quad (3.141)$$

haline gelir. Böylece Eş. 3.131 ifadesi ,

$$\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{n+\sigma+1/2}{\rho} - \frac{1}{2}\right)R_n(\rho) = \frac{(n+1)}{\rho} \frac{N_n}{N_{n+1}} R_{n+1}(\rho) \quad (3.142)$$

olur. Eş. 3.139 ifadesi $-\rho$, Eş. 3.142 ifadesi de ρ ile soldan çarpılırsa ;

$$\hat{M}_- = -\rho \frac{d}{d\rho} + \sigma + \hat{n} - \frac{\rho}{2} \quad \text{ve} \quad \hat{M}_+ = \rho \frac{d}{d\rho} + \sigma + \hat{n} + \frac{1}{2} - \frac{\rho}{2} \quad (3.143)$$

elde edilir. Burada $\hat{n}$ sayı operatörü olup ;

$$\hat{n} R_n(\rho) = n R_n(\rho). \quad (3.144)$$

şeklinde tanımlanır. Merdiven operatörlerinin özdeğerleri ,

$$\hat{M}_- R_n(\rho) = m_- R_{n-1}(\rho) \quad , \quad \hat{M}_+ R_n(\rho) = m_+ R_{n+1}(\rho) \quad (3.145)$$

$$m_- = (n + 2\sigma - \frac{1}{2}) \frac{N_n}{N_{n-1}} = \sqrt{n(n + 2\sigma - 1/2)} \quad (3.146)$$

$$m_+ = (n + 1) \frac{N_n}{N_{n+1}} = \sqrt{(n + 1)(n + 2\sigma + 1/2)} \quad (3.147)$$

olarak bulunur. Taban durum dalga fonksiyonuna artırıcı işlemci n defa uygulanırsa;

$$R_n(\rho) = N_n M_+^n R_0(\rho) \quad (3.148)$$

$$R_0(\rho) = \sqrt{2/\Gamma(2\sigma + 1/2)} \rho^\sigma e^{-\rho/2} \quad (3.149)$$

bulunan operatörlerin komütasyon bağıntıları şu şekildedir.;

$$[M_-, M_+] R_n(\rho) = [-\rho \frac{d}{d\rho} + \sigma + \hat{n} - \frac{\rho}{2}, \rho \frac{d}{d\rho} + \sigma + \hat{n} + \frac{1}{2} - \frac{\rho}{2}] \quad (3.150)$$

$$[M_-, M_+] R_n(\rho) = \rho R_n(\rho) \quad (3.151)$$

M₋ ve M₊ ifadeleri toplanırsa ;

$$\rho = 2n + 2\sigma + 1/2 - M_- - M_+ \text{ bulunur.} \quad (3.152)$$

$$\langle [M_-, M_+] \rangle = 2(n + \sigma) + 1/2 + m_- \delta_{n',n-1} - m_+ \delta_{n',n+1} \quad (3.153)$$

$$\langle [M_-, M_+] \rangle = 2m_0 \quad ; \quad m_0 = (n + \sigma + 1/4) \quad (3.154)$$

$$\hat{M}_0 = (\hat{n} + \sigma + 1/4) \quad (3.155)$$

$$[M_0, M_-]R_n(\rho) =$$

$$\begin{aligned} M_0(M_-R_n(\rho)) &= \hat{M}_0 m_- |n-1\rangle = m_- \hat{M}_0 |n-1\rangle \\ &= m_- (\sigma + 1/4 + \hat{n}) |n-1\rangle = (\sigma + 1/4)(n-1)m_- |n-1\rangle \end{aligned} \quad (3.156)$$

$$M_-(M_0R_n(\rho)) = \hat{M}_-(\hat{n} + \sigma + 1/4) |n\rangle = (\sigma + 1/4)m_- |n-1\rangle \quad (3.157)$$

$$[M_0, M_-] = -M_- \quad (3.158)$$

benzer şekilde ;

$$[M_0, M_+] = M_+ \quad (3.159)$$

böylece cebir yapısı ;

$$[M_-, M_+] = 2M_0, \quad [M_0, M_-] = -M_-, \quad [M_0, M_+] = M_+ \quad (3.160)$$

olarak elde edilir. Bu ise

$$[K_1, K_2] = -iK_0 \quad [K_2, K_0] = iK_1 \quad [K_0, K_1] = iK_2 \quad (3.161)$$

$$K_{\pm} = \pm i(K_1 \pm iK_2) \quad (3.162)$$

$$[K_0, K_{\pm}] = \pm K_{\pm} \quad , \quad [K_-, K_{\pm}] = 2K_0 \quad (3.163)$$

grup jeneratörlerine sahip olan SU(1,1) cebirini sağlar.[16] Beklenen değerler aşağıdaki gibi bulunur,

$$\rho = 2n + 2\sigma + 1/2 - M_- - M_+ \quad (3.164)$$

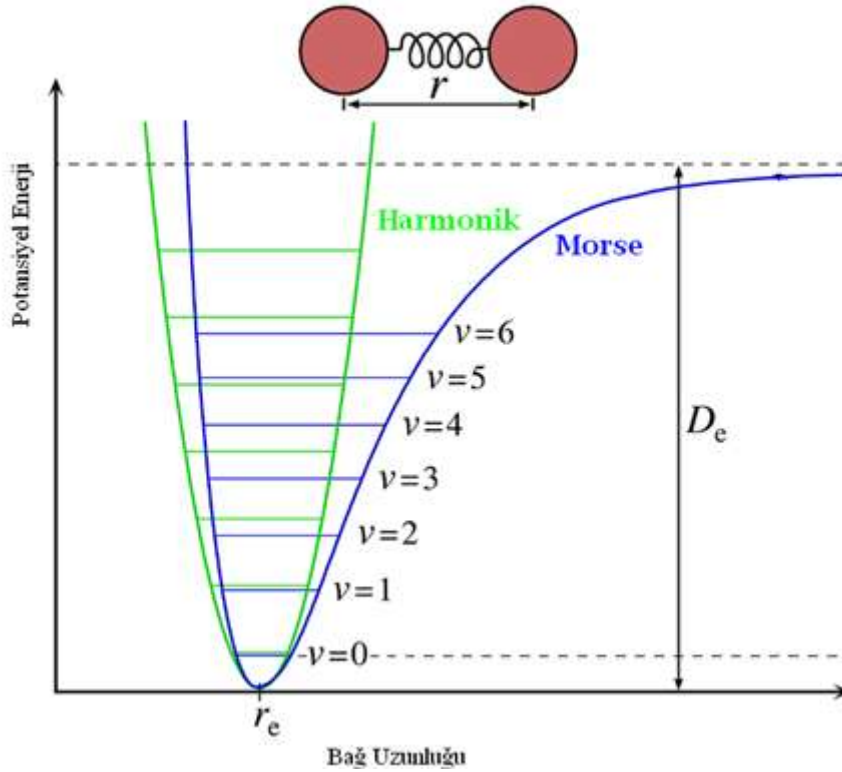
$$\rho \frac{d}{d\rho} = \frac{1}{2} (M_- - M_+ - 1/2) \quad (3.165)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty R_n(r) r^2 R_n(r) dr &= (2n + 2\sigma + 1/2) \delta_{n',n} \\ &- \sqrt{n(n + 2\sigma - 1/2)} \delta_{n',n-1} \\ &- \sqrt{(n+1)(n + 2\sigma + 1/2)} \delta_{n',n+1} \end{aligned} \quad (3.166)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty R_n(r) \frac{r}{2} \frac{d}{dr} R_n(r) dr &= (2n + 2\sigma + 1/2) \delta_{n',n} = 1/2 \sqrt{(n+1)(n + 2\sigma + 1/2)} \delta_{n',n+1} \\ &- 1/2 \sqrt{n(n + 2\sigma - 1/2)} \delta_{n',n-1} \\ &- 1/4 \delta_{n',n} \end{aligned} \quad (3.167)$$

3.4. Morse Potansiyeli İçin Cebirsel Yaklaşım :

Çift atomlu moleküllerdeki atomların denge konumları etrafındaki titreşimleri Morse potansiyel enerjisi ile verilir. Gerçek bir molekül tam bir harmonik ossilatör gibi davranmaz. Çünkü iki atomlu bir molekülün daha yüksek titreşim halleri bilinen harmonik ossilatör potansiyel fonksiyonuna tam olarak uymaz. Şekil3.6'dan görüleceği gibi enerji düzeyleri arttıkça, molekülün potansiyel enerjisine ait parabolik yaklaşıklık daha az doğru olur; yani molekülün potansiyel enerjisi bu yaklaşıklıktan uzaklaşır; Bu sebepten gerçek moleküllere anharmonik (harmonik olmayan) ossilatör denir. Böylece Morse potansiyel fonksiyonu harmonik ossilatör potansiyel fonksiyonundan daha iyi bir yaklaşıklık olmaktadır.



Şekil 3.6. Harmonik ossilatör ve Morse potansiyel eğrilerinin artan enerji düzeyinde karşılaştırılması

Morse potansiyeli şu şekildedir,

$$V_M(x) = D_e(1 - e^{-\beta(x-x_0)})^2 \quad (3.168)$$

burada x_0 denge uzaklığı, x bağ uzunluğu, D_e ise molekülün ayrışma enerjisini ölçen bir niceliktir.(veya potansiyelin minimum derinliği). β ise potansiyel kuyusunun genişliğini belirleyen moleküle ait bir sabit olup $\beta = \sqrt{k/2V_0}$ ile verilir.

Quantum harmonik ossilatöre benzer şekilde, hamiltonyen için faktörizasyon metodu uygulanıp merdiven operatörleri kurularak, Morse potansiyeli için de enerji öz fonksiyonları ve özdeğerleri hesaplanabilir. Ve komütasyon bağıntılarından hangi cebir yapısını sağladığı bulunabilir.

Birbirinden ayırık olan (serbest) atomların enerji düzeyleri, enerjinin sıfır olduğu limit olarak kabul edilirse Morse potansiyeli aşağıdaki şekilde yazılabilir, [17]

$$V(x) = V_0(e^{-2\beta x} - 2e^{-\beta x}) \quad (3.169)$$

Morse potansiyeli için Schrödinger dalga dekleminin çözümü şu şekildedir,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V_0e^{-2\beta x} + 2V_0e^{-\beta x})\psi = 0 \quad (3.170)$$

aşağıdaki biçimde verilen,

$$y = \frac{2\sqrt{2\mu V_0}}{\beta\hbar} e^{-\beta x} \quad (3.171)$$

değişkeni kullanıldığında Schrödinger denklemi,

$$\psi''(y) + \frac{1}{y}\psi' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n+s+1/2}{y} - \frac{s^2}{y^2}\right)\psi = 0 \quad (3.172)$$

biçimine indirgenebilir. Burada,

$$s = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\beta\hbar} \quad (3.173)$$

$$n = \frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\beta\hbar} - (s + 1/2) \quad (3.174)$$

dönüşümleri yapılmıştır. Sınır koşulları göz önüne alındığında ($y \rightarrow \infty$ ve $y \rightarrow 0$), Eş. 3.172 ifadesi için yalnız $e^{-y/2}$ ve y^s çözümleri uygundur.[18]

$$\psi = e^{-y/2} y^s w(y) \quad (3.175)$$

yazılabilir. Bu fonksiyon Eş. 3.172 ifadesinde yerine konursa

$$yw'' + (2s+1-y)w' + nw = 0 \quad (3.176)$$

şeklinde elde edilen denklem asosye Laguerre diferansiyel denklemdir. Ve $w(y)$ fonksiyonu,

$$w(y) = F(-n, 2s+1, y) \equiv \frac{n! \Gamma(2s+1)}{\Gamma(2s+n+1)} L_n^{2s} \quad (3.177)$$

şeklinde yazılabilir. Böylece dalga denkleminin çözümü,

$$\psi_n^\nu(y) = N_n^\nu e^{-y/2} y^s L_n^{2s}(y) , \quad (3.178)$$

şeklinde olur. $L_n^{2s}(y)$ birleşik Laguerre fonksiyonudur. Burada $y = \nu e^{-\beta x}$ ile verilen ifade , konum koordinatıdır ve Eş. 3.178'deki dalga fonksiyonu normalize edildiğinde N_n^ν normalizasyon sabiti,

$$N_n^\nu = \sqrt{\frac{\beta(\nu-2n-1)\Gamma(n+1)}{\Gamma(\nu-n)}} \quad (3.179)$$

olarak bulunur. $2s=\nu-2n-1$ sınır şartı kullanılarak ν ve s değişkenleri sırasıyla

$$\nu = \sqrt{\frac{8\mu V_0}{\beta^2 \hbar^2}} , \quad s = \sqrt{\frac{-2\mu E}{\beta^2 \hbar^2}} \quad (3.180)$$

şeklinde verilir. Burada μ , molekülün indirgenmiş kütlesidir. Diferansiyel operatörler, aşağıdaki yöntem kullanılarak kurulabilir.

$$\hat{o}_{\pm} \psi_n^{\nu}(y) = o_{\pm} \psi_{n\pm 1}^{\nu}(y) \quad (3.181)$$

$$\hat{o}_{\pm} = A_{\pm}(y) \frac{d}{dy} + B_{\pm}(y) \quad (3.182)$$

buna göre d/dy diferansiyel operatörü dalga fonksiyonuna etki ettirilirse;

$$\frac{d}{dy} \psi_n^{\nu}(y) = -\frac{1}{2} \psi_n^{\nu}(y) + \frac{1}{y} s \psi_n^{\nu}(y) + N_n^{\nu} e^{-y/2} y^s \frac{d}{dy} L_n^{2s}(y) \quad (3.183)$$

olur. Birleşik Laguerre fonksiyonu için aşağıdaki tekraralama bağıntısı kullanılabilir,

$$\frac{d}{dy} L_n^{\alpha}(y) = -\frac{1}{(\alpha+1)} [y L_{n-1}^{\alpha+2}(y) + n L_n^{\alpha}(y)] \quad (3.184)$$

bu denklem Eş. 3.183 ifadesinde yerine yazılırsa ,

$$\left[\frac{d}{dy} (2s+1) - \left(\frac{1}{y} s - \frac{1}{2} \right) (2s+1) + n \right] \psi_n^{\nu}(y) = -\frac{N_n^{\nu}}{N_{n-1}^{\nu}} \psi_{n-1}^{\nu}(y) \quad (3.185)$$

denklemini elde edilir. Denkleminde $N_n^{\nu} / N_{n-1}^{\nu}$ değeri gama fonksiyonundan yararlanılarak , $2s=\nu-2n-1$ sınır şartı altında yazıldığında aşağıdaki eksiltici operatör tanımlanabilir,

$$\frac{N_n^{\nu}}{N_{n-1}^{\nu}} = \sqrt{\frac{s}{s+1}} n(\nu-n) \quad (3.186)$$

$$K_- = -\left[\frac{d}{dy} (2s+1) - \frac{1}{y} s(2s+1) + \frac{\nu}{2} \right] \sqrt{\frac{s+1}{s}} \quad (3.187)$$

eksiltici operatörün dalga fonksiyonuna etkisi,

$$\hat{K}_- \psi_n^\nu(y) = k_- \psi_{n-1}^\nu(y) \quad (3.188)$$

şeklindedir. Burada k_- ;

$$k_- = \sqrt{n(\nu - n)} \quad (3.189)$$

olarak bulunur. Artırıcı operatör de benzer şekilde bulunabilir. Laguerre polinomları için verilen iki rekürans bağıntısı aşağıdaki gibidir,

$$y \frac{d}{dy} L_n^\alpha(y) = \begin{cases} n L_n^\alpha(y) - (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(y) & (3.190) \\ (n + 1) L_{n+1}^\alpha(y) - (n + \alpha + 1 - y) L_n^\alpha(y) & (3.191) \end{cases}$$

Eş. 3.190 ve Eş. 3.191 ifadeleri birbirine eşitlenirse,

$$(n + 1) L_{n+1}^\alpha(y) - (2n + \alpha + 1 - y) L_n^\alpha(y) + (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(y) = 0 \quad (3.192)$$

denklemini elde edilir. Eş. 3.192 ifadesi tekrar Eş. 3.190 ifadesinde kullanılarak;

$$y \frac{d}{dy} L_n^\alpha(y) = (-n - \alpha - 1 + y) L_n^\alpha(y) + (n + 1) L_{n+1}^\alpha(y) \quad (3.193)$$

Laguerre polinomları için verilen $L_n^{\alpha-1}(y) = L_n^\alpha(y) - L_{n-1}^\alpha(y)$ eşitliği kullanılarak

Eş. 3.192 bağıntısı şu hale gelir,

$$\frac{\alpha - 1}{n + \alpha} L_{n+1}^\alpha(y) = \left(\frac{\alpha + y - 1}{\alpha + n} \right) L_n^\alpha(y) + L_{n+1}^{\alpha-2}(y) \quad (3.194)$$

bu ifade Eş. 3.193 bağıntısında kullanılarak ,

$$(\alpha - 1) \frac{d}{dy} L_n^\alpha(y) = [(\alpha + n) - \frac{\alpha(\alpha - 1)}{y}] L_n^\alpha(y) + \frac{(n + 1)(n + \alpha)}{y} L_{n+1}^{\alpha-2}(y) \quad (3.195)$$

$$\frac{d}{dy} \psi_n^\nu(y) = (-\frac{s}{y} - \frac{1}{2} + \frac{2s + n}{2s - 1}) \psi_n^\nu(y) + \frac{N_n^\nu}{N_{n+1}^\nu} \frac{(n + 1)(n + 2s)}{2s - 1} \psi_{n+1}^\nu(y) \quad (3.196)$$

$\hat{K}_-$ operatörüne benzer şekilde,

$$K_+ = \left[\frac{d}{dy} (2s - 1) + \frac{1}{y} s(2s - 1) - \frac{\nu}{2} \right] \sqrt{\frac{s - 1}{s}} \quad (3.197)$$

artırıcı operatörün dalga fonksiyonuna etkisi,

$$\hat{K}_+ \psi_n^\nu(y) = k_+ \psi_{n+1}^\nu(y) \quad (3.198)$$

şeklindedir. Burada k_+ ,

$$k_+ = \sqrt{(n + 1)(\nu - n - 1)} \quad (3.199)$$

olarak bulunur.

şimdi $\hat{K}_-$ ve $\hat{K}_+$ operatörlerinin komütasyonuna bakılabilir,

$$\begin{aligned} [\hat{K}_+, \hat{K}_-] &= \hat{K}_+ \hat{K}_- |n\rangle - \hat{K}_- \hat{K}_+ |n\rangle \\ &= \hat{K}_+ \sqrt{n(\nu - n)} |n - 1\rangle - \hat{K}_- \sqrt{(n + 1)(\nu - n - 1)} |n + 1\rangle \\ &= \sqrt{n(\nu - n)} \sqrt{n(\nu - n)} |n\rangle - \sqrt{(n + 1)(\nu - n - 1)} \sqrt{(n + 1)(\nu - n - 1)} |n\rangle \end{aligned}$$

$$= 2n - \nu + 1 \quad (3.200)$$

buna göre aranılan komütasyon bağıntısı,

$$[\hat{K}_+, \hat{K}_-] \psi_n^\nu(y) = 2k_0 \psi_n^\nu(y) \quad (3.201)$$

şeklindedir. Burada k_0 ,

$$k_0 = n - \frac{\nu - 1}{2} \quad (3.202)$$

olarak verilir. Bu ifadeden aşağıdaki operatör tanımlanabilir,

$$\hat{K}_0 = n - \frac{\nu - 1}{2} \quad (3.203)$$

$[\hat{K}_0, \hat{K}_-]$ ve $[\hat{K}_0, \hat{K}_+]$ komütasyonları da benzer şekilde bulunabilir. Sonuç olarak $\hat{K}_+, \hat{K}_-$ ve $\hat{K}_0$ operatörleri için aşağıdaki komütasyon bağıntıları elde edilir.

$$[\hat{K}_+, \hat{K}_-] = 2\hat{K}_0, \quad [\hat{K}_0, \hat{K}_-] = -\hat{K}_-, \quad [\hat{K}_0, \hat{K}_+] = 2\hat{K}_+ \quad (3.204)$$

Komütasyon bağıntıları $SU(2)$ grubunu sağlar.[19]

$\hat{K}_+, \hat{K}_-$ ifadeleri kullanılarak $1/y$ ve d/dy ifadeleri bulunabilir. Eş. 3.187 – Eş. 3.197 ifadelerinden, $\hat{K}_+$ ve $\hat{K}_-$ ifadeleri toplanarak d/dy , çıkartılarak $1/y$ ifadesi hesaplanır.

$$\frac{d}{dy} = \hat{K}_+ \left[\frac{1}{2(2s-1)} \sqrt{\frac{s}{s-1}} \right] - \hat{K}_- \left[\frac{1}{2(2s+1)} \sqrt{\frac{s}{s+1}} \right] + \frac{\nu}{2(2s+1)(2s-1)} \quad (3.205)$$

$$\frac{1}{y} = \hat{K}_+ \left[\frac{1}{2s(2s-1)} \sqrt{\frac{s}{s-1}} \right] + \hat{K}_- \left[\frac{1}{2s(2s+1)} \sqrt{\frac{s}{s+1}} \right] + \frac{\nu}{(2s+1)(2s-1)} \quad (3.206)$$

olarak bulunur. Bu iki fonksiyon için beklenen değerler hesaplanabilir,

$$\begin{aligned} \langle m | \frac{1}{y} | n \rangle &= \frac{1}{\nu - 2n - 2} \sqrt{\frac{(n+1)(\nu - n - 1)}{(\nu - 2n - 1)(\nu - 2n - 3)}} \delta_{m,n+1} \\ &+ \frac{1}{\nu - 2n} \sqrt{\frac{n(\nu - n)}{(\nu - 2n - 1)(\nu - 2n + 1)}} \delta_{m,n-1} \\ &+ \frac{\nu}{(\nu - 2n - 2)(\nu - 2n)} \delta_{m,n} \end{aligned} \quad (3.207)$$

benzer şekilde d/dy için aşağıdaki ifade bulunur,

$$\begin{aligned} \langle m | \frac{d}{dy} | n \rangle &= \frac{1}{2(\nu - 2n - 2)} \times \sqrt{\frac{(n+1)(\nu - n - 1)(\nu - 2n - 1)}{\nu - 2n - 3}} \delta_{m,n+1} \\ &- \frac{1}{2(\nu - 2n)} \sqrt{\frac{n(\nu - n)(\nu - 2n - 1)}{\nu - 2n + 1}} \delta_{m,n-1} \\ &+ \frac{\nu}{2(\nu - 2n)(\nu - 2n - 2)} \delta_{m,n} \end{aligned} \quad (3.208)$$

3.4.1. Morse potansiyeli için harmonik limit

$\beta \rightarrow 0$ ve $V_0 \rightarrow \infty$ limitinde Morse potansiyel problemi standart harmonik osilatör problemine dönüştürülebilir. ($\beta = \sqrt{k/2V_0}$)

$$V_{MORSE}(x) = V_0 (e^{-2\beta x} - 2e^{-\beta x}) \quad (3.209)$$

denklemini $V_0 \rightarrow \infty$ limitinde

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + \dots \quad (3.210)$$

açılımı kullanılarak ,

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty} V_{MORSE} = \frac{1}{2} kx^2 \quad (3.211)$$

$\beta \rightarrow 0$ limitinde $y = \nu e^{-\beta x}$ denklemini,

$$y \cong \nu(1 - \beta x) \quad , \quad \frac{1}{y} \cong \frac{1}{\nu}(1 + \beta x) \quad (3.212)$$

denklemine dönüşür. Böylece d/dy ifadesi,

$$\frac{d}{dy} \cong -\frac{1}{\beta} \frac{1}{y} \frac{d}{dx} \quad (3.213)$$

denklemine indirgenir.

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{d}{dy} = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{\beta} \frac{1}{\nu} (1 + \beta x) \frac{d}{dx} \right] = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{\nu} \frac{d}{dx} \quad (3.214)$$

bu limit durumunda $G_{SU(2)} = \{K_+, \hat{K}_-, \hat{K}_0\}$ cebirinin de harmonik salınıcı cebirine

dönüşmesi beklenir. Bu yüzden $SU(2)$ grubunun jeneratörleri olan $K_+, \hat{K}_-, \hat{K}_0$ işlemcilerinin $\nu \rightarrow \infty$ limitindeki değerleri yazılabilir..

$$b^+ = \frac{\hat{K}_+}{\sqrt{\nu}} \quad b = \frac{\hat{K}_-}{\sqrt{\nu}} \quad b_0 = \frac{\hat{K}_0}{\sqrt{\nu}} \quad (3.215)$$

şeklinde tekrar normalize edilebilir.

Burada $H = \frac{-\hbar\omega}{\nu} K_0^2$ ve $\omega = \frac{\hbar\beta^2\nu}{2\mu}$ olduğundan,

$$\begin{aligned} \lim_{\nu \rightarrow \infty} b^+ &= \frac{\sqrt{\nu}\beta}{2} x - \frac{1}{\beta\sqrt{\nu}} \frac{d}{dx} \\ &= \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} \frac{d}{dx} = a^+ \end{aligned} \quad (3.216)$$

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} b = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} \frac{d}{dx} = a \quad (3.217)$$

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} b_0 = -\frac{1}{2} \quad (3.218)$$

a ve a^+ operatörleri beklendiği gibi aşağıdaki bağıntıları sağlarlar.

$$[a, a^+] = 1 \quad , \quad [a^+, a^+] = [a, a] = 0 \quad (3.219)$$

böylece harmonik limitde $SU(2)$ cebri Weyl cebrine büzülür.

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} G_{SU(2)} = \{a^+, a, 1\}$$

şeklinde ifade edilebilir.

3.5. İki Boyutlu Pseudoharmonik Potansiyel İçin Cebirsel Yaklaşım :

Pseudoharmonik potansiyel harmonik potansiyele benzemekle beraber anharmonik tipte bir potansiyeldir. Ve molekül sistemlerinin daha doğru bir matematiksel yaklaşımını vermektedir. Bu potansiyel lineer, nonlineer sistemleri ve molekül titreşimlerini tanımlamak kullanılabilir. Ayrıca iki atomlu moleküllerin de karakteristik yapısı bu potansiyel tanımıyla analiz edilebilir.

İki boyutta pseudoharmonik potansiyel için yazılan schrödinger denklemi sadece orijinden olan r uzaklığına bağlıdır.

$$H\psi(r,\phi) = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi(r,\phi) + V(r)\psi(r,\phi) = E\psi(r,\phi) \quad (3.220)$$

burada μ indirgenmiş kütle, E enerji, k kuvvet sabiti, r_0 bağ denge uzunluğudur.

burada V(r), pseudoharmonik potansiyel olarak,

$$V(r) = \frac{1}{8} k r_0^2 \left(\frac{r}{r_0} - \frac{r_0}{r} \right)^2 \quad (3.221)$$

ile verilir.[20] Bu potansiyel için schrödinger denklemi çözülerek dalga fonksiyonu,

$$\psi(r,\phi) = N e^{-\alpha r^2 \pm i m \phi} r^\beta R(r) \quad (3.222)$$

olarak elde edilir. Burada $m=1,2,\dots$ açısal momentum kuantum sayısı, N normalizasyon katsayısı olarak verilir. Bulunan dalga fonksiyonu (3.220) denkleminde yerine konulursa radyal denklem,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + r^{-1}[2\beta + 1 - 4\alpha r^2] \frac{dR(r)}{dr} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} + r^2 \left(4\alpha^2 - \frac{\mu k}{4\hbar^2} \right) \right. \\ \left. + \frac{\mu k r_0^2}{2\hbar^2} - 4\alpha(\beta + 1) + r^{-2} \left(\beta^2 - m^2 - \frac{\mu k r_0^4}{4\hbar^2} \right) \right] R(r) = 0 \end{aligned} \quad (3.223)$$

şeklinde elde edilir. Burada α ve β parametreleri r^2 ve r^{-2} 'li terimleri kaldırabilmek için aşağıdaki gibi seçilebilir.

$$\alpha = \frac{\sqrt{\mu k}}{4\hbar} \quad \beta = \left(m^2 + \frac{\mu k r_0^4}{4\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (3.224)$$

$\xi = 2\alpha r^2$ şeklinde yeni bir değişken değiştirmesi yapıldığında Eş. 3.223 ifadesi aşağıdaki şekilde yazılır.

$$\xi \frac{d^2 R(\xi)}{d\xi^2} + [\beta + 1 - \xi] \frac{dR(\xi)}{d\xi} + \left[\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{k}} E + \frac{r_0^2 \sqrt{\mu k}}{4\hbar} - \frac{1}{2}(\beta + 1) \right] R(\xi) = 0 \quad (3.225)$$

bu denklem asosiye Laguerre diferansiyel denklemidir. Bu denklemin çözümünden elde edilen dalga fonksiyonu aşağıdaki gibidir.

$$\psi_{n,m}(r, \phi) = N_{n,m} e^{-\xi/2 \pm i m \phi} \xi^{\beta/2} L_n^\beta(\xi) \quad , \quad \xi = \frac{\sqrt{\mu k}}{2\hbar} r^2 \quad (3.226)$$

bu dalga fonksiyonu Laguerre fonksiyonlarının diklik bağıntısından faydalanarak normalize edildiğinde normalizasyon katsayısı,

$$N_{n,m} = \sqrt{\frac{n! \sqrt{\mu k}}{2\pi \hbar (n + \beta)!}} \quad , \quad \beta = \left(m^2 + \frac{\mu k r_0^4}{4\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (3.227)$$

şeklinde bulunur. Enerji özdeğerleri aşağıdaki gibidir,

$$E_{n,m} = \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}} \left[n + \frac{\beta+1}{2} - \frac{r_0^2 \sqrt{\mu k}}{4\hbar} \right] \quad (3.228)$$

burada r_0 çok büyük veya çok küçük olduğunda,

$$E_{n,m} = \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}} \left[n + \frac{1}{2} + \frac{\hbar m^2}{2r_0^2 \sqrt{\mu k}} \right] \quad ; \quad r_0^2 \gg \frac{2\hbar}{\sqrt{\mu k}} \quad (3.229)$$

$$E_{n,m} = \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}} \left[n + \frac{m+1}{2} - \frac{r_0^2 \sqrt{\mu k}}{4\hbar} + \frac{\mu k r_0^4}{16m\hbar^2} \right] \quad ; \quad r_0^2 \ll \frac{2\hbar}{\sqrt{\mu k}} \quad (3.230)$$

Asosiy Laguerre fonksiyonları için aşağıdaki rekürans bağıntıları yazılabilir

$$(n+1)L_{n+1}^\beta(\xi) + (n+\beta)L_{n-1}^\beta(\xi) + (\xi - 2n - \beta - 1)L_n^\beta(\xi) = 0 \quad (3.231)$$

$$\xi \frac{d}{d\xi} L_n^\beta(\xi) = \begin{cases} nL_n^\beta(\xi) - (n+\beta)L_{n-1}^\beta(\xi) \\ \{n+1\}L_{n+1}^\beta(\xi) - (n+\beta+1-\xi)L_n^\beta(\xi) \end{cases} \quad (3.232)$$

$$\{n+1\}L_{n+1}^\beta(\xi) - (n+\beta+1-\xi)L_n^\beta(\xi) \quad (3.233)$$

$\psi_{n,m}(r, \phi)$ dalga fonksiyonunun türevi

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \psi_{n,m}(r, \phi) = -\frac{1}{2} \psi_{n,m}(r, \phi) + \frac{\beta}{2\xi} \psi_{n,m}(r, \phi) + N_{n,m} e^{-\xi/2 \pm im\phi} \xi^{\beta/2} \frac{d}{d\xi} L_n^\beta(\xi) \quad (3.234)$$

şeklindedir. Eş.3.231 'den aşağıdaki tekrarlama bağıntısı elde edilir.

$$\sqrt{(n+1)(n+\beta+1)} \psi_{(n+1),m}(r, \phi) + \sqrt{n(n+\beta)} \psi_{(n-1),m}(r, \phi)$$

$$= (2n + \beta + 1 - \xi) \psi_{n,m}(r, \phi) \quad (3.235)$$

$$\left[-\frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{1}{2} + \frac{\beta + 2n}{2\xi} \right] \psi_{n,m}(r, \phi) = \frac{\sqrt{n(n + \beta)}}{\xi} \psi_{(n-1),m}(r, \phi) \quad (3.236)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{1}{2} + \frac{\beta + 2n + 2}{2\xi} \right] \psi_{n,m}(r, \phi) = \frac{\sqrt{(n+1)(n + \beta + 1)}}{\xi} \psi_{(n+1),m}(r, \phi) \quad (3.237)$$

bu adımdan sonra çarpanlarına ayırma metodu ile merdiven operatörleri kurulabilir ve grup yapısı elde edilebilir. İlk olarak aşağıdaki gibi üç operatör tanımlayalım,

$$\mathcal{L}_{\pm} \psi_{n,m}(r, \phi) = \ell_{\pm} \psi_{(n\pm 1),m}(r, \phi) \quad (3.238)$$

$$\hat{n} \psi_{n,m}(r, \phi) = n \psi_{n,m}(r, \phi) \quad (3.239)$$

burada $\hat{n}$ sayı operatörü olarak tanımlanır. Yaratıcı ve yok edici operatörler aşağıdaki gibidir,

$$\mathcal{L}_+ = \xi \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\xi}{2} + \frac{\beta}{2} + \hat{n} + 1 \quad (3.240)$$

$$\mathcal{L}_- = -\xi \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{1}{2} \xi + \frac{\beta}{2} + \hat{n} \quad (3.241)$$

Eş. 3.236 ve Eş. 3.237'den

$$\mathcal{L}_- \psi_{n,m}(r, \phi) = \ell_- \psi_{(n-1),m}(r, \phi) \quad , \quad \ell_- = \sqrt{n(n + \beta)} \quad (3.242)$$

$$\mathcal{L}_+ \psi_{n,m}(r, \phi) = \ell_+ \psi_{(n+1),m}(r, \phi) \quad , \quad \ell_+ = \sqrt{(n+1)(n + \beta + 1)} \quad (3.243)$$

elde edilir. Komütasyon bağıntısı

$$[\mathcal{L}_-, \mathcal{L}_+] \psi_{n,m}(r, \phi) = (2n + \beta + 1) \psi_{n,m}(r, \phi) = 2 \mathcal{L}_0 \psi_{n,m}(r, \phi) \quad (3.244)$$

şeklindedir. Burada $\mathcal{L}_0$,

$$\mathcal{L}_0 = n + \frac{(\beta + 1)}{2} \quad (3.245)$$

şeklinde tanımlanır.

$$\mathcal{L}_0 \psi_{n,m}(r, \phi) = \ell_0 \psi_{n,m}(r, \phi) \quad \ell_0 = n + \frac{(\beta + 1)}{2} \quad (3.246)$$

elde edilen komütasyon bağıntıları şu şekildedir.

$$[\mathcal{L}_-, \mathcal{L}_+] = 2 \mathcal{L}_0, \quad [\mathcal{L}_0, \mathcal{L}_\pm] = \pm \mathcal{L}_\pm \quad (3.247)$$

$\mathcal{L}_\pm$ ve $\mathcal{L}_0$ operatörlerinin komütasyon bağıntıları $SU(1,1)$ grubunu sağlar. Matris elemanları aşağıdaki şekilde hesaplanabilir.

$$\xi = 2 \mathcal{L}_0 - \mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_- \quad (3.248)$$

$$2\xi \frac{\partial}{\partial \xi} = \mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_- - 1 \quad (3.249)$$

$$\begin{aligned} \langle n | \xi | n' \rangle &= \langle n | 2 \mathcal{L}_0 - \mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_- | n' \rangle \\ &= (2n + \beta + 1) \delta_{n,n'} - \sqrt{(n'+1)(n'+\beta+1)} \delta_{n(n'+1)} - \sqrt{n'(n'+\beta)} \delta_{n(n'-1)} \end{aligned} \quad (3.250)$$

$$\langle n | 2\xi \frac{\partial}{\partial \xi} | n' \rangle = \langle n | \mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_- - 1 | n' \rangle$$

$$= \sqrt{(n'+1)(n'+\beta+1)}\delta_{n(n'+1)} - \sqrt{n'(n'+\beta)}\delta_{n(n'-1)} - \delta_{nn'} \quad (3.251)$$

3.6. N Boyutlu Pseudoharmonik Potansiyel İçin Cebirsel Yaklaşım :

Bölüm (3.4)' de incelenen Pseudoharmonik Potansiyel problemi N boyuta genelleştirilebilir.[21]

$$V(r) = \frac{1}{8}kr_0^2\left(\frac{r}{r_0} - \frac{r_0}{r}\right)^2 \quad (3.252)$$

şeklinde verilen pseudoharmonik potansiyel ile keyfi bir N boyutunda schrödinger denklemi,

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_N^2 + \frac{1}{8}kr_0^2\left(\frac{r}{r_0} - \frac{r_0}{r}\right)^2 \right] \psi(r, \Omega_N) = E \psi(r, \Omega_N) \quad (3.253)$$

şeklinde yazılır. N boyutta laplasyen aşağıdaki gibidir,

$$\nabla_N^2 = \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\Lambda_N^2(\Omega_N)}{r^2} \quad (3.254)$$

Burada Λ_N ,

$$\Lambda_N^2(\Omega_N) Y_\ell^m(\Omega_N) = \ell(\ell + N - 2) Y_\ell^m(\Omega_N) \quad (3.255)$$

şeklindedir.

$$\psi_{n_r, \ell, m}(r, \Omega_N) = R_{n_r, \ell}(r) Y_\ell^m(\Omega_N) \quad (3.256)$$

Eş. 3.256 ifadesi Eş. 3.253 ifadesinde yazıldığında

$$R''_{n_r, \ell}(r) + \left(\frac{N-1}{r}\right)R'_{n_r, \ell}(r) - \ell(\ell + N - 2) \frac{R_{n_r, \ell}(r)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{1}{8} k r_0^2 \left(\frac{r}{r_0} - \frac{r_0}{r} \right)^2 \right] R_{n_r, \ell}(r) = 0 \quad (3.257)$$

$$\Lambda_N^2(\Omega_N) Y_\ell^m(\Omega_N) - \ell(\ell + N - 2) Y_\ell^m(\Omega_N) = 0 \quad (3.258)$$

olur. Burada E enerji özdeğeri ve ℓ açısal momentum kuantum sayısıdır. Aşağıda,

$$K^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad (3.259)$$

Şeklinde bir terim tanımlanırsa Eş. 3.257 ifadesi,

$$R''(r) + \left(\frac{N-1}{r}\right)R'(r) + \left[K^2 + \frac{\mu k r_0^2}{2\hbar^2} - \frac{\mu k r^2}{4\hbar^2} - \frac{\mu_l(\mu_l + N - 2)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (3.260)$$

formunda olur. Burada

$$\mu_l = \frac{1}{2} \left[\frac{-(N-2)}{2} + \sqrt{(2\ell + N - 2)^2 + \frac{\mu k}{\hbar^2} r_0^4} \right] \quad (3.261)$$

ile verilir. Radyal dalga fonksiyonunun $r \rightarrow 0$ ve $r \rightarrow \infty$ limitindeki kabul edilebilir çözümleri,

$$R(r) = C r^{\mu_l} e^{-\lambda r^2} f(r) \quad (3.262)$$

şeklindedir. Bu çözüm Eş. 3.260 ifadesinde yerine konulduğunda,

$$f''(r) + \left[\frac{(2\mu_l + N - 1)}{r} - 4\lambda r \right] f'(r) + \left[\frac{\mu k r_0^2}{2\hbar^2} - \frac{\mu k r^2}{4\hbar^2} - 2\lambda(2\mu_l + N) + 4\lambda^2 r^2 + K^2 \right] f(r) = 0 \quad (3.263)$$

$$4\lambda^2 = \frac{\mu k}{4\hbar^2} \Rightarrow \lambda = \frac{1}{4\hbar} \sqrt{\mu k} \quad (3.264)$$

şeklinde λ değeri de denklemde yazılırsa,

$$f''(r) + \left[\frac{(2\mu_l + N - 1)}{r} - \sqrt{\frac{\mu k}{\hbar^2}} r \right] f'(r) - \frac{1}{2} \left[(2\mu_l + N) \sqrt{\frac{\mu k}{\hbar^2}} - \frac{\mu k r_0^2}{2\hbar^2} - K^2 \right] f(r) = 0 \quad (3.265)$$

olur. Aşağıdaki değişken değiştirmesi yapılırsa Eş. 3.265 ifadesi

$$\rho = 2\lambda r^2 \quad (3.266)$$

$$\rho f''(\rho) + \left[\frac{2\mu_l + N}{2} - \rho \right] f'(\rho) - \left[\frac{(2\mu_l + N)}{4} - \sqrt{\frac{\mu k}{16\hbar^2}} r_0^2 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{\mu k}} K^2 \right] f(\rho) = 0 \quad (3.267)$$

formunda olur. Bu denklemin çözümü konfluent hipergeometrik fonksiyonlar cinsinden ,

$$f(\rho) = F \left[\frac{1}{4} \left((2\mu_l + N) - r_0^2 \sqrt{\frac{\mu k}{\hbar^2}} - 2K^2 \sqrt{\frac{\hbar^2}{\mu k}} \right), \frac{2\mu_l + N}{2}; \rho \right] \quad (3.268)$$

şeklinde yazılabilir. Hipergeometrik fonksiyonun içindeki virgülden önceki ilk terim aşağıdaki gibi,

$$n_r = \frac{1}{4} [2K^2 \sqrt{\frac{\hbar^2}{\mu k}} + r_0^2 \sqrt{\frac{\mu k}{\hbar^2}} - 2\mu_l - N]; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (3.269)$$

şeklinde adlandırılırsa bu denklem bize aşağıdaki enerji özdeğerlerini verir.

$$E_{n,r} = (n_r + \frac{2\mu_l + N}{4}) \sqrt{\frac{\hbar^2 k}{\mu}} - \frac{kr_0^2}{4} = \frac{1}{2} (n + \frac{N}{2}) \sqrt{\frac{\hbar^2 k}{\mu}} - \frac{kr_0^2}{4} \quad (3.270)$$

Böylece radyal Schrödinger denkleminin normalize edilmeyen özfonksiyonu,

$$R_{n,l}(r, \phi) = C_{n,l} r^{\mu_l} \exp(-\sqrt{\frac{\mu k}{16\hbar^2}} r^2) F(-n_r, \frac{2\mu_l + N}{2}; \sqrt{\frac{\mu k}{4\hbar^2}}) \quad (3.271)$$

şeklindedir.

$$\int |R_{n,l}(t)|^2 r^{N-1} dr = 1 \quad (3.272)$$

denklemini kullanılarak dalga fonksiyonu normalize edilebilir. Konfluent hipergeometrik fonksiyonun Laguerre polinomu cinsinden açılımı,

$$F(-\gamma, m+1; Z) = \frac{\gamma! m!}{(\gamma + m)!} L_\gamma^m(Z) \quad (3.273)$$

şeklindedir. Laguerre polinomları için diklik bağıntısı ise aşağıdaki gibidir,

$$\int_0^\infty y^\alpha e^{-y} L_n^\alpha(y) L_m^\alpha(y) dy = \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)}{n!} \delta_{nm} \quad (3.274)$$

buna göre normalizasyon sabiti,

$$C_{n,l} = \left[\frac{2 \left(\frac{\mu k}{4\hbar^2} \right)^{\frac{1}{4}(2\mu_l + N)} n_r!}{\Gamma(n_r + \mu_l + \frac{N}{2})} \right]^{1/2} \frac{(\mu_l + n_r + \frac{N-2}{2})!}{n_r! (\mu_l + \frac{N-2}{2})} \quad (3.275)$$

olarak bulunur. Böylece Eş. 3.271 ifadesi ,

$$R(r) = \left[\frac{2 \left(\frac{\mu k}{4\hbar^2} \right)^{\frac{1}{4}(2\mu_l + N)} n_r!}{\Gamma(n_r + \mu_l + \frac{N}{2})} \right]^{1/2} r^{\mu_l} \exp\left(-\sqrt{\frac{\mu k}{16\hbar^2}} r^2\right) L_n^{\mu_l + \frac{N-2}{2}}\left(\sqrt{\frac{\mu k}{4\hbar^2}} r^2\right) \quad (3.276)$$

ve bu dalga fonksiyonuna karşı gelen enerji özdeğeri,

$$E_{n,r} = \left(n_r + \frac{2\mu_l + N}{4}\right) \sqrt{\frac{\hbar^2 k}{\mu}} - \frac{kr_0^2}{4} = \frac{1}{2} \left(n + \frac{N}{2}\right) \sqrt{\frac{\hbar^2 k}{\mu}} - \frac{kr_0^2}{4} \quad (3.277)$$

olarak bulunur. Sonuç olarak N boyutta bu potansiyelin toplam enerji özfonksiyonları,

$$\psi_{n_r, \ell, m}(r, \Omega_N) = C_{n,l} R_{n_r, \ell}(r) Y_\ell^m(\Omega_N) \quad (3.278)$$

şeklinde özetle verilebilir. Daha önce bahsedildiği gibi $Y_\ell^m(\Omega_N)$ küresel harmoniklerdir.

Dalga fonksiyonu elde edildiğinden merdiven operatörleri kurulabilir. Artırıcı eksiltici operatörlerin dalga fonksiyonuna etkisi aşağıdaki gibidir,

$$\mathcal{L}_{\pm} \psi_{n,m}(r, \phi) = \ell_{\pm} \psi_{(n\pm 1),m}(r, \phi) \quad (3.279)$$

bu operatörler genel olarak aşağıdaki diferansiyel operatör formundadırlar.

$$\mathcal{L}_{\pm} = A_{\pm}(r) \frac{d}{dr} + B_{\pm}(r) \quad (3.280)$$

Eş. 3.276' daki dalga fonksiyonu λ cinsinden tekrar yazılabilir,

$$R_{n,l}(r) = N_n^l r^{\mu_l} \exp(-\lambda r^2) L_n^{\mu_l + \frac{N-2}{2}}(2\lambda r^2) \quad (3.281)$$

Benzer şekilde normalizasyon sabiti de λ cinsinden yazılabilir,

$$N_n^{\lambda} = \left[\frac{2(2\lambda)^{(2\mu_l + N)/2} n_r!}{(n_r + \mu_l + \frac{N}{2})!} \right]^{1/2} \quad (3.282)$$

Eş. 3.280 ifadesine göre dalga fonksiyonunun her iki tarafının r' ye göre türevi alındığında ,

$$\frac{d}{dr} R_{n,l}(r) = \frac{\mu_l}{r} R_{n,l}(r) - 2\lambda r R_{n,l}(r) + N_n^{\lambda} r^{\mu_l} \exp(-\lambda r^2) \frac{d}{dr} L_n^{\mu_l + \frac{N-2}{2}}(2\lambda r^2) \quad (3.283)$$

olur. Bu denklemin son kısmı için Laguerre polinomlarının aşağıdaki

$$x \frac{d}{dx} L_n^{\alpha}(x) = n L_n^{\alpha}(x) - (n + \alpha) L_{n-1}^{\alpha}(x) \quad (3.284)$$

rekürans bağıntısı kullanılabilir. ($x = 2\lambda r^2$)

$$\frac{r}{2} \frac{d}{dr} L_n^\alpha(2\lambda r^2) = n L_n^\alpha(2\lambda r^2) - (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(2\lambda r^2) \quad (3.285)$$

bu denklem Eş. 3.283 ifadesinde kullanıldığında,

$$\begin{aligned} & -\frac{d}{dr} R_{n,l}(r) + \frac{\mu_l}{r} R_{n,l}(r) - 2\lambda r R_{n,l}(r) + \frac{2n_r}{r} R_{n,l}(r) \\ & = \frac{2}{r} (n_r + \mu_l + \frac{N-2}{2}) \frac{N_n^\lambda}{N_{n-1}^\lambda} R_{n-1,l}(r) \end{aligned} \quad (3.286)$$

elde edilir. $N_n^\lambda / N_{n-1}^\lambda$ değeri denklemde yerine yazıldığında,

$$\frac{1}{2} \left[-r \frac{d}{dr} - 2\lambda r^2 + 2n_r + \mu_l \right] R_{n,l}(r) = \sqrt{n_r(n_r + \mu_l + \frac{N-2}{2})} R_{n-1,l}(r) \quad (3.287)$$

böylece $\mathcal{L}$. işlemcisi

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[-r \frac{d}{dr} - 2\lambda r^2 + 2n_r + \mu_l \right] \quad (3.288)$$

olarak bulunur.

$$\mathcal{L} R_{n,l}(r) = \ell_- R_{n-1,l}(r) \quad (3.289)$$

$\mathcal{L}$. özdeğerleri de,

$$\ell_- = \sqrt{n_r(n_r + \mu_l + \frac{N-1}{2})} \quad (3.290)$$

olarak bulunur. Benzer şekilde $\mathcal{L}_+$ bulunabilir.

$$\frac{d}{dr} R_{n,l}(r) - \frac{\mu_l}{r} R_{n,l}(r) + 2\lambda r R_{n,l}(r) = N_n^{\lambda} r^{\mu_l} \exp(-\lambda r^2) \frac{d}{dr} L_n^{\mu_l + \frac{N-2}{2}}(2\lambda r^2) \quad (3.291)$$

dalga fonksiyonunun türevinin son kısmı için bu defa,

$$x \frac{d}{dx} L_n^{\alpha}(x) = (n+1) L_{n+1}^{\alpha}(x) - (n+\alpha+1-x) L_{n-1}^{\alpha}(x) \quad (3.292)$$

rekürans bağıntısı kullanıldığında,

$$\mathcal{L}_+ = \frac{1}{2} \left[r \frac{d}{dr} - 2\lambda r^2 + 2n_r + \mu_l + N \right] \quad (3.293)$$

bulunur.

$$\mathcal{L}_+ R_{n,l}(r) = \ell_+ R_{n+1,l}(r) \quad (3.294)$$

$\mathcal{L}_+$ özdeğerleri de,

$$\ell_+ = \sqrt{(n_r+1)(n_r + \mu_l + \frac{N}{2})} \quad (3.295)$$

şeklinde bulunur. Buna göre $\mathcal{L}_-$ ve $\mathcal{L}_+$ 'nın komütasyonu,

$$\begin{aligned} [\mathcal{L}_-, \mathcal{L}_+] R_{n_r, \ell}(r) &= \mathcal{L}_- \{ \mathcal{L}_+ R_{n_r, \ell}(r) \} - \mathcal{L}_+ \{ \mathcal{L}_- R_{n_r, \ell}(r) \} \\ &= \sqrt{(n_r+1)(n_r + \mu_l + \frac{N}{2})} \{ \mathcal{L}_- R_{n+1,l}(r) \} \\ &\quad - \sqrt{n_r(n_r + \mu_l + \frac{N-1}{2})} \{ \mathcal{L}_+ R_{n-1,l}(r) \} \end{aligned}$$

$$= (2n_r + \mu_l + \frac{N}{2}) = 2\ell_0 R_{n_r, \ell}(r) \quad (3.296)$$

olur. Burada,

$$\ell_0 = n_r + \frac{2\mu_l + N}{4} \quad \text{ve} \quad \mathcal{L}_0 = \hat{n}_r + \frac{2\mu_l + N}{4} \quad (3.297)$$

olarak tanımlanır. $\mathcal{L}_0, \mathcal{L}_-$ komütasyonuna bakıldığında,

$$\begin{aligned} & [\mathcal{L}_0, \mathcal{L}_-] R_{n_r, \ell}(r) \\ &= \mathcal{L}_0 \{ \mathcal{L}_- R_{n_r, \ell}(r) \} - \mathcal{L}_- \{ \mathcal{L}_0 R_{n_r, \ell}(r) \} \\ &= \sqrt{n_r(n_r + \mu_l + \frac{N-1}{2})} \{ \mathcal{L}_0 R_{n-1, l}(r) \} - (n_r + \frac{2\mu_l + N}{4}) \{ \mathcal{L}_- R_{n_r, \ell}(r) \} \\ &= \sqrt{n_r(n_r + \mu_l + \frac{N-1}{2})} \{ (n_r - 1 + \frac{2\mu_l + N}{4}) - (n_r + \frac{2\mu_l + N}{4}) \} R_{n-1, \ell}(r) \\ &= -\sqrt{n_r(n_r + \mu_l + \frac{N-1}{2})} R_{n-1, l}(r) = -\ell_- R_{n-1, l}(r) = -\mathcal{L}_- R_{n_r, \ell}(r) \quad (3.298) \end{aligned}$$

bulunur. Benzer şekilde $\mathcal{L}_0, \mathcal{L}_+$ komütasyonu

$$[\mathcal{L}_0, \mathcal{L}_+] R_{n_r, \ell}(r) \quad (3.299)$$

$$\begin{aligned} &= \mathcal{L}_0 \{ \mathcal{L}_+ R_{n_r, \ell}(r) \} - \mathcal{L}_+ \{ \mathcal{L}_0 R_{n_r, \ell}(r) \} \\ &= \sqrt{(n_r + 1)(n_r + \mu_l + \frac{N}{2})} \{ \mathcal{L}_0 R_{n+1, l}(r) \} - (n_r + \frac{2\mu_l + N}{4}) \{ \mathcal{L}_+ R_{n_r, \ell}(r) \} \\ &= \sqrt{(n_r + 1)(n_r + \mu_l + \frac{N}{2})} R_{n+1, l}(r) = \ell_+ R_{n+1, l}(r) = \mathcal{L}_+ R_{n_r, \ell}(r) \quad (3.300) \end{aligned}$$

bu komütasyon bağıntıları $SU(1,1) \sim SO(2,1)$ grubunu sağlar.[22]

Aşağıdaki ifadeler $\mathcal{L}_\pm$ ve $\mathcal{L}_0$ operatörleri kullanılarak hesaplanabilir,

$$r^2 R_{n_r, \ell}(r) = \frac{1}{2\lambda} [2\mathcal{L}_0 - (\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) R_{n_r, \ell}(r)] \quad (3.301)$$

$$r \frac{d}{dr} R_{n_r, \ell}(r) = (\mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_-) R_{n_r, \ell}(r) - \frac{N}{2} R_{n_r, \ell}(r) \quad (3.302)$$

r^2 matris elemanı için,

$$\begin{aligned} \langle R_{m_r, \ell}(r) | r^2 | R_{n_r, \ell}(r) \rangle &= \frac{1}{2\lambda} [\langle R_{m_r, \ell}(r) | 2\mathcal{L}_0 | R_{n_r, \ell}(r) \rangle] \\ &\quad - \langle R_{m_r, \ell}(r) | \mathcal{L}_+ | R_{n_r, \ell}(r) \rangle - \langle R_{m_r, \ell}(r) | \mathcal{L}_- | R_{n_r, \ell}(r) \rangle \\ &= \frac{1}{2\lambda} \left[\int_0^\infty \left(2n_r + \frac{2\mu_l + N}{2} \right) |R_{m_r, \ell}(r) R_{n_r, \ell}(r)| dr \right. \\ &\quad \left. - \int_0^\infty \ell_+ |R_{m_r, \ell}(r) R_{n+1_r, \ell}(r)| dr - \int_0^\infty \ell_- |R_{m_r, \ell}(r) R_{n-1_r, \ell}(r)| dr \right] \\ &= \frac{1}{2\lambda} \left[(2n_r + \frac{2\mu_l + N}{2}) \delta_{m,n} - \ell_+ \delta_{m,n+1} - \ell_- \delta_{m,n-1} \right] \end{aligned} \quad (3.303)$$

şeklinde bulunur. Benzer şekilde,

$$\begin{aligned} \langle R_{n_r, \ell}(r) | r \frac{d}{dr} | R_{n_r, \ell}(r) \rangle &= \langle R_{m_r, \ell}(r) | \mathcal{L}_+ | R_{n_r, \ell}(r) \rangle \\ &\quad - \langle R_{m_r, \ell}(r) | \mathcal{L}_- | R_{n_r, \ell}(r) \rangle - \langle R_{m_r, \ell}(r) | \frac{N}{2} | R_{n_r, \ell}(r) \rangle \\ &= \int_0^\infty \ell_+ |R_{m_r, \ell}(r) R_{n+1_r, \ell}(r)| dr - \int_0^\infty \ell_- |R_{m_r, \ell}(r) R_{n-1_r, \ell}(r)| dr \\ &\quad - \int_0^\infty \frac{N}{2} |R_{m_r, \ell}(r) R_{n_r, \ell}(r)| dr \end{aligned}$$

$$= \ell_+ \delta_{m,n+1} - \ell_- \delta_{m,n-1} - \frac{N}{2} \delta_{m,n} \quad (3.304)$$

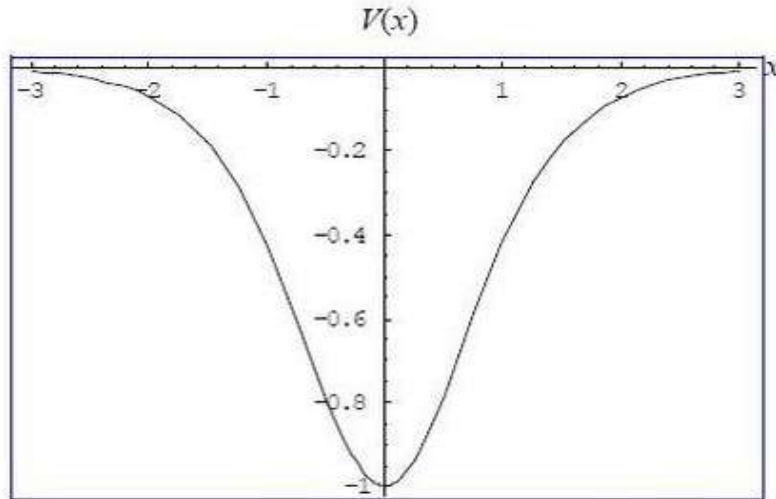
bulunur.

3.7. Pöschl-Teller Potansiyeli İçin Cebirsel Yaklaşım

Anharmonik tipte bir potansiyeldir. Ve molekül sistemlerinin titreşim enerjilerini tanımlar. Moleküldeki her bir bağ bu anharmonik tipteki potansiyeli içeren salıncı gibi düşünülebilir. Ayrıca bağların bükülme titreşimlerini tanımlamak için uygundur. Potansiyel ifadesi şu şekildedir,

$$V(x) = -\frac{D}{\cosh^2(\alpha x)} \quad (3.305)$$

Burada D kuyu derinliği α , potansiyelin büyüklüğüyle ilgili bir sabit ve x denge noktasından olan bağıl uzaklıktır. Bu potansiyelin grafiği aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.7 $\hbar^2 / m$ için Pöschl-Teller Potansiyeli

Bu potansiyel ile birlikte schrödinger denklemi,

$$\frac{d^2 \psi_n^q(x)}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{D}{\cosh^2(\alpha x)} \right) \psi_n^q(x) = 0 \quad (3.306)$$

şeklindedir Burada μ molekülün indirgenmiş kütlesidir. Ve q potansiyelin derinliği ile ilgilidir. Denklemin çözümünden elde edilen dalga fonksiyonu aşağıdaki gibidir,[23]

$$\psi_n^q(u) = N_n^q (1-u^2)^{\varepsilon/2} C_n^{q+\frac{1}{2}-n}(u) \quad , \quad E_n = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2\mu} (q-n)^2 \quad , \quad n=0,1,2,\dots \quad (3.307)$$

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{-2\mu}{\alpha^2 \hbar^2}} \quad , \quad q(q+1) = \frac{2\mu D}{\alpha^2 \hbar^2} \quad , \quad q = \frac{1}{2}(-1+2k) \quad , \quad k = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2\mu D}{\alpha^2 \hbar^2}} \quad ,$$

$$\nu = 2k = 2q+1 \quad (3.308)$$

burada,

$$u = \tanh(\alpha x) \quad , \quad \varepsilon = q-n > 0, \quad N_n^q = \sqrt{\frac{\alpha n! (q-n-\frac{1}{2})(2q-2n)!}{\pi^{1/2} (q-n-1)!(2q-n)!}} \quad (3.309)$$

ile verilir. Şimdi PT potansiyeline ait merdiven operatörlerini kurmak için faktörizasyon metodu uygulanabilir,

$$\hat{P}_{\pm} \psi_n^q(u) = p_{\pm} \psi_{n\pm 1}^q(u) \quad (3.310)$$

bu operatör genel olarak aşağıdaki diferansiyel formda yazılır,

$$\hat{P}_{\pm} = A_{\pm}(u) \frac{d}{du} + B_{\pm}(u) \quad (3.311)$$

Pöschl-Teller dalga fonksiyonuna d/du diferansiyel operatörü etki ettirilerek artırıcı-eksiltici işlemciler kurulabilir .

$$\frac{d\psi_n^q(u)}{du} = -\frac{u(q-n)}{1-u^2}\psi_n^q(u) + N_n^q(1-u^2)^{\varepsilon/2} \frac{d}{du} \left(C_n^{q+\frac{1}{2}-n}(u) \right) \quad (3.312)$$

denklemin sol tarafındaki türevden kurtulmak için,

$$\frac{dC_n^\lambda(t)}{dt} = 2\lambda C_{n-1}^{\lambda+1}(t) \quad (3.313)$$

eşitliği kullanıldığında [24] , Eş. 3.312,

$$\frac{d\psi_n^q(u)}{du} = -\frac{u(q-n)}{1-u^2}\psi_n^q(u) + \frac{2q-2n+1}{\sqrt{1-u^2}} \frac{N_n^q}{N_{n-1}^q} \psi_{n-1}^q(u) \quad (3.314)$$

olur. Normalizasyon sabitinin değeri denklemde yerine yazılırsa

$$\sqrt{1-u^2} \left(\frac{d}{du} + \frac{u(q-n)}{1-u^2} \right) \sqrt{\frac{q-n+1}{q-n}} \psi_n^q(u) = \sqrt{n(2q-n+1)} \psi_{n-1}^q(u) \quad (3.315)$$

denklemini elde edilir. Buradan $\hat{P}_-$ eksiltici operatör tanımlanabilir,

$$\hat{P}_- = \sqrt{1-u^2} \left(\frac{d}{du} + \frac{u(q-n)}{1-u^2} \right) \sqrt{\frac{q-n+1}{q-n}} \quad (3.316)$$

$\varepsilon = q - n$ değeri yerine yazılırsa,

$$\hat{P}_- = \sqrt{1-u^2} \left(\frac{d}{du} + \frac{u}{1-u^2} \varepsilon \right) \sqrt{\frac{\varepsilon+1}{\varepsilon}} \quad (3.317)$$

olur. Eksiltici operatörün dalga fonksiyonuna etkisi aşağıdaki gibidir,

$$\hat{P}_- \psi_n^\nu(u) = p_- \psi_{n-1}^\nu(u) \quad (3.318)$$

$2\varepsilon = \nu - 2n - 1 = 2q - 2n$ değeri yerine yazılırsa Eş. 3.315 ifadesinden eksiltici operatörün özdeğeri aşağıdaki gibi bulunur.

$$p_- = \sqrt{n(\nu - n)} \quad (3.319)$$

denklemden de anlaşıldığı gibi eksiltici operatör $\psi_0^\nu(u)$ taban durumunu yok etmektedir.

Eksiltici operatöre benzer şekilde, $\hat{P}_+$ artırıcı operatör aşağıdaki tekrarlama bağıntısı kullanılarak bulunabilir,[25]

$$2(\lambda - 1)(2\lambda - 1)x C_n^\lambda(x) = 4\lambda(\lambda - 1)(1 - x^2) C_{n-1}^{\lambda+1}(x) + (2\lambda + n - 1)(n + 1) C_{n+1}^{\lambda-1}(x) \quad (3.320)$$

Eş. 3.313 ifadesi bu denklemde yerine yazılırsa,

$$\frac{d\psi_n^q(u)}{du} = \frac{u(q - n)}{1 - u^2} \psi_n^q(u) - \frac{(n + 1)(2q - n)}{\sqrt{1 - u^2} (2q - 2n - 1)} \frac{N_n^q}{N_{n+1}^q} \psi_{n+1}^q(u) \quad (3.321)$$

normalizasyon sabitinin değeri yerine yazıldığında denklem,

$$-\sqrt{1 - u^2} \left(\frac{d}{du} - \frac{u(q - n)}{1 - u^2} \right) \sqrt{\frac{q - n - 1}{(q - n)}} \psi_n^q(u) = \sqrt{(n + 1)(2q - n)} \psi_{n+1}^q(u) \quad (3.322)$$

haline gelir. Buradan $\hat{P}_+$ artırıcı operatör tanımlanabilir,

$$\hat{P}_+ = \sqrt{1 - u^2} \left(-\frac{d}{du} + \frac{u}{1 - u^2} \varepsilon \right) \sqrt{\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon}} \quad (3.323)$$

bu operatörün dalga fonksiyonuna etkisi,

$$\hat{P}_+ \psi_n^\nu(u) = p_+ \psi_{n+1}^\nu(u) \quad (3.324)$$

şeklindedir. Özdeğerleri ise,

$$p_+ = \sqrt{(n+1)(\nu-n-1)} \quad (3.325)$$

şeklindedir. Artırıcı operatörün taban durum dalga fonksiyonuna etkisi aşağıdaki gibidir.

$$\psi_n^\nu(u) = N_n^\nu \hat{P}_+ \psi_0^\nu(u) \quad (3.326)$$

bulunan merdiven operatörlerinin komütasyon bağıntıları aşağıdaki gibidir.

$$[\hat{P}_+, \hat{P}_-] \psi_n^\nu(u) = 2p_0 \psi_n^\nu(u) \quad (3.327)$$

burada p_0 ;

$$p_0 = -\left(\frac{\nu-1}{2} - n\right) \quad (3.328)$$

şeklindedir. Bu değere karşılık gelen $\hat{P}_0$ operatörü aşağıdaki şekilde tanımlanabilir,

$$\hat{P}_0 = n - \frac{\nu-1}{2} \quad (3.329)$$

sonuç olarak $P_{\pm,0}$ operatörleri aşağıdaki komütasyon bağıntılarını sağlarlar,

$$[\hat{P}_+, \hat{P}_-] = 2\hat{P}_0, \quad [\hat{P}_0, \hat{P}_-] = -\hat{P}_-, \quad [\hat{P}_0, \hat{P}_+] = \hat{P}_+ \quad (3.330)$$

bu komütasyon bağıntıları $SU(2)$ grubunu sağlarlar. Ayrıca aşağıdaki ifadeler merdiven operatörleri kullanılarak hesaplanabilir,

$$\frac{u}{\sqrt{1-u^2}} = \frac{1}{2} \left(\hat{P}_- \sqrt{\frac{1}{\varepsilon(\varepsilon+1)}} + \hat{P}_+ \sqrt{\frac{1}{\varepsilon(\varepsilon-1)}} \right) \quad (3.331)$$

$$\sqrt{1-u^2} \frac{d}{du} = \frac{1}{2} \left(\hat{P}_- \sqrt{\frac{\varepsilon}{(\varepsilon+1)}} - \hat{P}_+ \sqrt{\frac{\varepsilon}{(\varepsilon-1)}} \right) \quad (3.332)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^\nu(u) | \frac{u}{\sqrt{1-u^2}} | \psi_n^\nu(u) \rangle &= \langle \psi_n^\nu(u) | \sinh(\alpha x) | \psi_n^\nu(u) \rangle \\ &= \sqrt{\frac{n(\nu-n)}{(\nu-2n-1)(\nu-2n+1)}} \delta_{n',n-1} \\ &\quad + \sqrt{\frac{(n+1)(\nu-n-1)}{(\nu-2n-1)(\nu-2n-3)}} \delta_{n',n+1} \end{aligned} \quad (3.333)$$

benzer şekilde,

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^\nu(u) | \sqrt{1-u^2} \frac{d}{du} | \psi_n^\nu(u) \rangle &= \langle \psi_n^\nu(x) | \frac{\cosh(\alpha x)}{\alpha} \frac{d}{dx} | \psi_n^\nu(x) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{n(\nu-n)(\nu-2n-1)}{(\nu-2n+1)}} \delta_{n',n-1} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(n+1)(\nu-n-1)(\nu-2n-1)}{(\nu-2n-3)}} \delta_{n',n+1} \end{aligned} \quad (3.334)$$

olarak elde edilir.

3.8. Harmonik Salıncı, Ters Kare ve Coulomb Potansiyeli İçin Cebirsel

Yaklaşım

Harmonik salıncı için hermite; coulomb, morse , pseudoharmonik ve diğer potansiyeller için Laguerre denklemi kullanılmıştır. Buna göre aynı anda verilen bu üç potansiyel için Schrödinger denkleminin çözümü hangi diferansiyel denklem formundadır ?

Genel olarak bu etkin potansiyel,

$$V_{eff} = \frac{g + l(l+1)}{r^2} + \frac{\alpha}{r} + \sum_{k=1}^n a_k r^k \quad (3.335)$$

olmak üzere; ($\hbar = m = 1$)

$$R(r) = \chi(r)/r \quad (3.336)$$

seçilirse Eş. 3.111 denkleminde verilen Schrödinger denklemi,

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + 2[E - V_{eff}] \chi(r) = 0 \quad (3.337)$$

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + 2 \left[E - \frac{g + l(l+1)}{r^2} - \frac{\alpha}{r} - \sum_{k=1}^n a_k r^k \right] \chi(r) = 0 \quad (3.338)$$

olur. $r = u^2$ dönüşümü yapıldığında,

$$\frac{d^2 \chi(r)}{du^2} - \frac{1}{u} \frac{d\chi}{du} + 8u^2 \left[E - \frac{g + l(l+1)}{u^4} - \frac{\alpha}{u^2} + \sum_{k=1}^n a_k u^{2k} \right] \chi(u) = 0 \quad (3.339)$$

bulunur. Burada,

$$\frac{du}{dr} = \frac{1}{2\sqrt{r}} = \frac{1}{2u} \quad , \quad \frac{d^2u}{dr^2} = -\frac{1}{4r^{3/2}} = -\frac{1}{4u^3} \quad (3.340)$$

kullanılmıştır. Denklemin çözümü için dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi seçilirse,

$$\chi(u) = e^{ig(u)} \sigma(u) \quad (3.341)$$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{d^2}{du^2} + 8u^2(E - V_{eff}) \right] \sigma(u) + \left(2i \frac{dg}{du} - \frac{1}{u} \right) \frac{d\sigma(u)}{du} \\ & + \left[i \frac{d^2g}{du^2} - \left(\frac{dg}{du} \right)^2 - i \frac{dg}{du} \right] \sigma(u) = 0 \end{aligned} \quad (3.342)$$

denklemini bulunur. Parantezlerin içi ayrı ayrı sıfır olması gerekeceğinden,

$$\frac{dg}{du} = \frac{-i}{2u} \quad (3.343)$$

bulunur. Her iki tarafın integrali alınırsa,

$$g(u) = \frac{-i}{2} \ln u, \quad \frac{d^2g}{du^2} = \frac{i}{2u^2}, \quad \left(\frac{dg}{du} \right)^2 = \frac{-1}{4u^2} \quad (3.344)$$

olur. Bunlar Eş. 3.342 ifadesinde yerine yazılırsa,

$$\left[\frac{d^2}{du^2} + 8u^2(E - V_{eff}) - \frac{3}{4u^2} \right] \sigma(u) = 0 \quad (3.345)$$

elde edilir. Eş. 3.338 ile verilen etkin potansiyel ifadesi bu eşitlikte yazılıp denklem düzenlenirse,

$$\frac{d^2\sigma(u)}{du^2} - \left[\frac{8[g + \ell(\ell+1)] + 3/4}{u^2} + 8\alpha - 8u^2E - 8\sum_{k=1}^n a_k u^{2(k+1)} \right] \sigma(u) = 0 \quad (3.346)$$

olur. $\chi(u)$ fonksiyonu Eş. 3.341 ve Eş. 3.344 ifadeleri kullanıldığında,

$$\chi(u) = \sqrt{u} \sigma(u) \quad (3.347)$$

şekline dönüşmüş olur.

$$\frac{d\chi(u)}{du} = \frac{1}{2} u^{-1/2} \sigma(u) + \sqrt{u} \frac{d\sigma(u)}{du} \quad (3.348)$$

$$\frac{d^2\chi(u)}{du^2} = -\frac{1}{4} u^{-3/2} \sigma(u) + u^{-1/2} \frac{d\sigma(u)}{du} + \sqrt{u} \frac{d^2\sigma(u)}{du^2} \quad (3.349)$$

değerleri Eş.3.339 ifadesinde yazılıp denklem düzenlenirse,

$$\frac{d^2\sigma(u)}{du^2} + \left[\frac{-3}{u^2} + 8u^2(E - V_{eff}) \right] \sigma(u) = 0 \quad (3.350)$$

şeklinde Schrödinger tipi denklem elde edilir, buradan da verilen bir n değeri için $\sigma(u)$ fonksiyonu belirlenip diferansiyel denklem sadece cebrik işlemlerle çözülebilir. Sonuçlardan da parametreler arasındaki ilişkiler yardımıyla enerji özdeğerleri belirlenir.[26]

Genel olarak anharmonik tipte kuvvet serisi şeklindeki bazı potansiyeller için Schrödinger denkleminin tam çözümü,

$$y''(x) + \frac{1}{x} [f(x) + 2a]y'(x) + \frac{1}{x^2} [(a + kx)f(x) - k^2x^2 + a(a-1)]y(x) = 0 \quad (3.351)$$

şeklinde verilen Kamke diferansiyel denklemi ve bu denklemin çözümleri olan,

$$y(x) = x^{-a} e^{-bx} \left[C_1 + C_2 \int \exp(2kx') - \int \frac{f(x'')}{x''} dx'' \right] dx' \quad (3.352)$$

ile verilir.

$$P = \frac{1}{x} (f(x) + 2a) \quad (3.353)$$

$$Q = \frac{1}{x^2} (a + kx) f(x) - k^2 x^2 + a(a-1) \quad (3.354)$$

$$y''(x) + \frac{1}{x} P(x) y'(x) + \frac{1}{x^2} Q(x) y(x) = 0 \quad (3.355)$$

formuna gelir.

bu potansiyele ait bir cebir yapısı incelenebilir,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V \quad ; \quad V = g^2 / x^2 \quad (3.356)$$

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2} = a^+ a + \frac{1}{2} \quad (3.357)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) , \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \quad (3.358)$$

$$B_2^+ = (a^+)^2 - \frac{g^2}{x^2} , \quad B_2 = a^2 - \frac{g^2}{x^2} \quad (3.359)$$

olarak tanımlanırsa,

$$[H, B_2^+] = 2B_2^+, [H, B_2] = -2B_2, [B_2, B_2^+] = 4H \quad (3.360)$$

olur. Bu sonuca göre H, B_2^+ ve B_2 $SU(1,1)$ 'in grup jeneratörleridir.[27]
Komütasyon bağıntıları hesaplanırken,

$$[V(x), a^{+2}]f = xf \frac{dV}{dx} - \frac{f}{2} \frac{d^2V}{dx^2} \quad (3.361)$$

$$[a^+a, V(x)]f = -\frac{f}{2} \frac{d^2V}{dx^2} \quad (3.362)$$

$$[a^2, V(x)]f = xf \frac{dV}{dx} + \frac{f}{2} \frac{d^2V}{dx^2} \quad (3.363)$$

bağıntıları kullanılmıştır. Buna göre $\psi_E(x)$, hamiltonyenin özfonksiyonu ise,

$$H\psi_E = E\psi_E \quad (3.364)$$

yazılabileceğinden $B_2^+\psi_E(x)$ ve $B_2^-\psi_E(x)$ 'de hamiltonyenin sırasıyla $(E+2)$ ve $(E-2)$ özdeğerli özfonksiyonlarıdır. Hamiltonyenin enerji özdeğer ve özfonksiyonları Schrödinger denklemi çözülmeden sadece cebirsel işlemle bulunabilir. ψ_0 taban durum dalga fonksiyonu olmak üzere,

$$B_2^-\psi_0 = 0 \quad (3.365)$$

olduğundan

$$\psi_0 = c_0 x^\alpha \exp(-x^2/2) \quad , \quad \alpha = \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{4} + 2g^2\right)^{1/2} \quad (3.366)$$

olur. Enerji özdeğerleri,

$$H\psi_0 = E_0\psi_0 \quad (3.367)$$

özdeğer denkleminde,

$$E_0 = \alpha + 1/2 \quad (3.368)$$

olarak bulunur. Keyfi bir n boyutunda ψ_n dalga fonksiyonu, yükseltici operatörün taban durum dalga fonksiyonuna n defa uygulanması ile aşağıdaki gibi bulunabilir.

$$\psi_n = c_n (B_2^+)^n \psi_0(x), \quad E_n = 2n + E_0 \quad (3.369)$$

Eğer potansiyel,

$$V(x) = \frac{g^2}{x^2} - \frac{\beta}{x} \quad (3.370)$$

şeklinde ise,

$$C_2^+ = (a^+)^2 - \frac{g^2}{x^2} \pm \frac{\beta}{x} \quad (3.371)$$

$$C_2^- = a^2 - \frac{g^2}{x^2} \pm \frac{\beta}{x} \quad (3.372)$$

olarak tanımlanan operatörlerin de, Eş. 3.361-3.362.-3.363. ifadeleri kullanılarak, aşağıdaki komütasyon bağıntılarını sağladıkları görülür.

$$[H, C_2^+] = 2C_2^+, [H, C_2^-] = -2C_2^-, [C_2^-, C_2^+] = 4H \quad (3.373)$$

Yazılan komutasyon bağıntılarına göre C_2^+ , C_2^- ve H operatörleri de $SU(1,1)$ grubunun jeneratörleridir. Eş. 3.65 ifadesine benzer şekilde ψ_0 taban durum dalga fonksiyonu olmak üzere,

$$C_2^- \psi_0 = 0 \quad (3.374)$$

olduğundan

$$\psi_0 = c_0 x^\alpha \exp(-\sqrt{2}x - x^2/2) {}_1F_1\left[\frac{-\beta}{\sqrt{2}} + \alpha, 2\alpha, 2\sqrt{2}x\right] \quad (3.375)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{4} + 2g^2\right)^{1/2} \quad (3.376)$$

şeklinde bulunur.

4. SONUÇ

Bu tez çalışmasında çeşitli potansiyeller için Schrödinger denkleminin işlemciler metodu kullanılarak çözümü incelendi. enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları bulundu.

Bu metod genel olarak radyal Schrödinger denkleminin faktörizasyon metodu uygulanarak ayrıştırılması esasına dayanır.

Faktörizasyon metoduyla hamiltonyen ayrıştırıldıktan sonra merdiven işlemcileri kurulur. Bu adımdan sonra enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları, beklenen değerler ve sistemle ilgili her türlü ifade merdiven işlemciler kullanılarak bulunabilir.

Faktörizasyon metodunun bilinen kuantum sistemlerine uygulanması, 2. Bölümde anlatılan ve oldukça uzun hesaplar gerektiren standart diferansiyel denklem çözümlerinin yerini alacaktır. Bu ise kuantum mekaniğinin hem anlatılması hem de hesaplanmasını oldukça sadeleştirecektir.

Bu metod, bir sistem için merdiven operatörleri kurulup elde edilen komütasyon bağıntılarından sistemin sağladığı cebir bulunduğunda, aynı cebri sağlayan benzer sistemlere de uygulanabilmektedir. Ve benzer sistemin çözümü doğrudan öngörülebilmektedir. Ayrıca üçüncü bölümde incelenen potansiyellerin Schrödinger denkleminin çözülmesinden elde edilen diferansiyel operatörler, aynı sistem için farklı şekillerde kurulabilmektedir. [28]

KAYNAKLAR

1. Dereli,T., Verçin, A.,“Harmonik salıncı”, Kuantum mekaniği 1, **Metu press**, Ankara,125-126 (2000).
2. Karaoğlu,B.,“ Tek boyutlu sistemler”, Kuantum mekaniğine giriş, **Seyir yayıncılık**, İstanbul, 80-83 (2003).
3. Karaoğlu,B., “3 Boyutlu problemler boyutlu”, Kuantum mekaniğine giriş, **Seyir yayıncılık**, İstanbul, 138-139 (2003).
4. Başar B., “Bir elektronlu atom ve iyon”, **Birsen yayıncılık**, İstanbul, 260-266, 425-434 (2000).
5. Dereli,T., Verçin, A.,“Küresel simetrik potansiyeller ve hidrojen atomu”, Kuantum mekaniği 1, **Metu press**, Ankara,171-184 (2000).
6. Dikici, M., “Kuantum mekaniğinde işlemci yöntemi”, Kuantum fiziğine giriş, **Ondokuz Mayıs Üniv. Yayınları**, Samsun,157-163 (1994).
7. Zettili, N., “One-dimensional problems”, Quantum mechanics, **John Wiley & sons**, England, 227-231 (2003).
8. Griffiths,. J.D., “Time-Independent schrödinger equation”, Quantum mechanics, **Pearson Education**, U.S.A., 42-49 (2005).
9. Dereli,T., Verçin, A.,“Harmonik salıncı”, Kuantum mekaniği 1, **Metu press**, Ankara,134-141 (2000).
10. Cooper F., Khare A., Sukhatme U., “Factorization of a general hamiltonian”, Supersymmetry in quantum mechanics, **World scientific**, London, 28-33 (2000)
11. T. H., Cooke and J. L., Wood, “An algebraic method for solving central force problems”, **Am. J. Phys.**, 70(9):945-950(2002)
12. Sternberg, S., “Compact groups and lie groups”, Group theory and physics, **Cambridge University Press**, Australia, 173-198 (1995)
13. Eğrifes H., “Klasik ortogonal polinomlar ile kuantum mekaniksel sistemlerin tam çözümlerinin araştırılması”, Doktora Tezi, **Ege Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, İzmir, 122-128 (1997)
14. Dong,S.H., M. Lozada-Cassou, “Algebraic approach to a harmonic oscillator plus an inverse squared potential and its recurrence relation”, **Phys. Scr.**, 73(2):173-177(2006)

15. Par N., "Schrödinger denkleminin çeşitli potansiyellerle ve değişik matematiksel yöntemlerle çözümleri", Yüksek Lisans Tezi, **Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 3-5 (1994)
16. Hassani S., "Groups and Lie algebras", Mathematical Physics, **Springer-Verlag**, Berlin, 833-868 (1985)
17. Dong, S.H., LEMUS, R., FRANK, A., "Ladder operators for the Morse potential", **Int. Jour. Quant. Chem.** 86(5):433-439(2001)
18. Landau L.D, Lifshitz E.M. "Schrödinger denklemi", Kuantum Meaniği 1, **Bilim yayıncılık**, Ankara, 110-112, (2000).
19. Gilmore, R., "Lie Algebras", Lie groups, Lie Algebras and some of their applications, **John Wiley & sons**, New York, 120-128 (1974).
20. Dong,S.H, Zhong Q.M., "Algebraic approach to the Pseudoharmonic Oscillator in 2D", **Int. Jour. of Mod Phys**, 11(2):155-160 (2002).
21. Oyewumi, K.J., Akinpelu, F.O., Agboola, A.D., "Exactly complete Solutions of the Pseudoharmonic Potential in N-Dimensions", **Int. J.Theor Phys.**, 47:1039-1057 (2008)
22. Ata E., "SO(n) Özel ortogonal ve SU(n) özel üniter grupları ve bu grupların kuantum mekaniğine uygulamaları ", Yüksek Lisans Tezi, **Anadolu Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Eskişehir, 63-66 (2001)
23. Dong, S.H., LEMUS, R.," A new dynamical group approach to the Modified Pöschl-Teller potential", **Springer** 52(6):753-764 (2001)
24. Gradshteyn, I. S. and Ryzhik, I. M., "Tables of Integrals, Series, and Products", **Academic Press**, New York, 934-935 (1994)
25. Talman, J. D., Special Functions:A group theoretic approach, **Mathematical Physics Monograph Series**, New York, 10.43 (1968).
26. Uğur ,Ş., "Bazı anharmonik ve singüler ($r=0$) potansiyeller için Schrödinger denkleminin çözüm metodları", Yüksek Lisans Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 33-42 (1994)
27. Perelomov, A., "Quantum singular ocillator", Generalized coherent states and their applications, **Springer-Verlag**, Berlin, 217-226 (1985)
28. Nunez-Yepepe, H.,N., Lopez-Bonilla, J.L., Navarette D. and Salas-Brito A.L., "Oscillator in one and two dimensions and ladder operators for the Morse and Coulomb problems", **Int. Jour. Quant. Chem.** 62(2):177-183 (1997)

29. Bayın, S.,Ş., “Gauss denklemi ve çözümleri”, Fen ve Mühendislik Bilimlerinde Matematik Yöntemler, **Metu press**, Ankara,68-74 (2004).

EKLER

EK - 1 Laguerre polinomları için tekrarlama bağıntılarının ispatı

Tekrarlama bağıntılarının ispatında kullanılacak olan Laguerre polinomları için doğurucu fonksiyon aşağıdaki gibidir,

$$G(\rho, s) = \frac{e^{-\rho s / 1-s}}{(1-s)^{k+1}} = \sum_{m=0}^{\infty} L_m^k(\rho) s^m$$

$$i) \quad L_m^{k'}(\rho) = -L_{m-1}^{k+1}(\rho)$$

bu eşitliğin ispatı için doğurucu fonksiyonun ρ ' ya göre türevi alınırsa,

$$\frac{-s}{(1-s)^{k+2}} e^{-\rho s / 1-s} = \sum_{m=0}^{\infty} L_m^{k'}(\rho) s^m$$

$$- \sum_{m=0}^{\infty} L_m^{k+1}(\rho) s^{m+1} = \sum_{m=0}^{\infty} L_m^{k'}(\rho) s^m$$

Toplamlar sadeleştirildiğinde,

$$L_m^{k'}(\rho) = -L_{m-1}^{k+1}(\rho)$$

bulunur.

$$ii) \quad L_m^k(\rho) = L_m^{k'}(\rho) - L_{m+1}^k(\rho)$$

denklemin ispatı için ilk ispattaki denklem tekrar yazılırsa

$$\frac{-s}{(1-s)^{k+1}} e^{-\rho s / 1-s} = (1-s) \sum_{m=0}^{\infty} L_m^{k'}(\rho) s^m$$

EK - 1 (Devam) Laguerre polinomları için tekrarlama bağıntılarının ispatı

$$-\sum_{m=0}^{\infty} L_m^k(\rho) s^{m+1} = (1-s) \sum_{m=0}^{\infty} L_m^{k'}(\rho) s^m$$

$$L_m^k(\rho) = L_m^{k'}(\rho) - L_{m+1}^{k'}(\rho)$$

olarak bulunur.

$$\text{iii) } \rho L_m^k(\rho) = (2m+k+1)L_m^k(\rho) - (m+k)L_{m-1}^k(\rho) - (m+1)L_{m+1}^k(\rho)$$

bu eşitliğin ispatı için de doğurucu fonksiyonun bu defa s' ye göre türevi alınırsa,

$$\frac{e^{-\rho/1-s}}{(1-s)^{k+1}} \left[\frac{k+1}{1-s} - \rho \left(\frac{1}{1-s} + \frac{s}{(1-s)^2} \right) \right] = \sum_{m=0}^{\infty} m L_m^k(\rho) s^{m-1}$$

paydalar eşitlendiğinde,

$$(k+1) - \rho - (k+1)s \sum_{m=0}^{\infty} L_m^k(\rho) s^m = (1-2s+s^2) \sum_{m=0}^{\infty} m L_m^k(\rho) s^{m-1}$$

s^m ' in katsayıları alınıp toplamalar sadeleştirilirse,

$$\rho L_m^k(\rho) = (2m+k+1)L_m^k(\rho) - (m+k)L_{m-1}^k(\rho) - (m+1)L_{m+1}^k(\rho)$$

bulunur.

$$\text{iv) } \rho L_m^{k'}(\rho) = m L_m^k(\rho) - (m+k)L_{m-1}^k(\rho)$$

Bu eşitliğin ispatı için üçüncü bağıntının ρ' ya göre türevi alınırsa,

EK - 1 (Devam) Laguerre polinomları için tekraralama bağıntılarının ispatı

$$L_m^k(\rho) + \rho L_m^{k'}(\rho) = (2m + k + 1)L_m^{k'}(\rho) - (m + k)L_{m-1}^k(\rho) - (m + 1)L_{m+1}^{k'}(\rho)$$

ikinci ispatta bulunan $L_{m+1}^{k'}(\rho)$ değeri bu denklemde yerine yazılırsa,

$$L_m^k(\rho) + \rho L_m^{k'}(\rho) = (2m + k + 1)L_m^{k'}(\rho) - (m + k)L_{m-1}^k(\rho) - (m + 1)L_m^{k'}(\rho) + (m + 1)L_m^k(\rho)$$

denklem düzenlendiğinde,

$$\rho L_m^{k'}(\rho) = (m + k)L_m^{k'}(\rho) - (m + k)L_{m-1}^{k'}(\rho) + mL_m^k(\rho)$$

olur. $L_{m-1}^k(\rho)$ ifadesi yerine yine ispat 2’de verilen denklem yazılırsa (bu defa $m \rightarrow m-1$)

$$L_{m-1}^{k'}(\rho) = L_m^{k'}(\rho) - L_{m-1}^k(\rho)$$

bu ifade de yukarıdaki denklemde yazılırsa gerekli sadeleştirmelerden sonra,

$$\rho L_m^{k'}(\rho) = mL_m^k(\rho) - (m + k)L_{m-1}^k(\rho)$$

bulunur.

EK – 2 Konfluent Hipergeometrik Fonksiyonlar

Hipergeometrik fonksiyonlar diğer özel fonksiyonların kendisi cinsinden yazılabildiği çok genel bir fonkiyondur. Hipergeometrik (veya Gauss) diferansiyel denklemi,

$$x(1-x)y''(x) + [c - (a+b+1)x]y'(x) - ab y(x) = 0$$

şeklindedir.[29]

Pek çok 2. derece diferansiyel denklem hipergeometrik denklem ve (a,b,c) gibi üç parametre cinsinden sınıflandırılabilir. Tezde kullanılan ve hipergeometrik fonksiyonların özel bir hali olan konfluent hipergeometrik diferansiyel denklemi aşağıdaki gibidir,

$$xy''(x) + [c - x]y'(x) - a y(x) = 0$$

Laguerre fonksiyonları, konfluent hipergeometrik fonksiyon cinsinden,

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)}{\Gamma(\alpha + 1)n!} {}_1F_1(-n, \alpha + 1, x)$$

şeklindedir. Burada ${}_1F_1$,

$${}_1F_1(a, c, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{c_n} \frac{x^n}{n!}$$

şeklindedir. Benzer şekilde Bessel fonksiyonları, konfluent hipergeometrik fonksiyon cinsinden,

EK - 2 (Devam) Konfluent Hipergeometrik Fonksiyonlar

$$J_n(x) = \frac{e^{-ix}}{n!} \left(\frac{x}{2}\right)^n {}_1F_1(n+1/2, 2n+1, 2ix)$$

şeklindedir. Benzer şekilde Legendre fonksiyonları, konfluent hipergeometrik fonksiyon cinsinden;

$$P_n(x) = {}_2F_1(n+1/2, 2n+1, 2ix)$$

şeklinde verilir.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : AYDIN, Selim
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 26.03.1983, AMASYA
Medeni hali : Bekar
Telefon : 0 (507) 247 98 94
e-mail : selimaydin571@hotmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	Ankara Üniversitesi	2005
Lise	Erbaa İ.H.L.	2000

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Bilgisayar programı çalışmak, elektronik devre yapmak, kuantum fiziği okumak, spor yapmak.