

**T.C.
ERCIYES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**HİPERBOLİK SCHRÖBERL MERKEZCİL
POTANSİYELİ İÇİN SCHRÖDİNGER
DENKLEMİNİN ÇÖZÜMÜ**

**Tezi Hazırlayan
İsmail ERMİŞ**

**Tezi Yöneten
Doç. Dr. Yılmaz DAĞDEMİR**

**Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi**

**Ocak 2009
KAYSERİ**

Doç. Dr. Yılmaz DAĞDEMİR danışmanlığında **İsmail ERMİŞ** tarafından hazırlan
**'Hiperbolik Schröberl merkezci potansiyeli için Schrödinger denkleminin anali
çözümü'** adlı bu çalışma, jürimiz tarafından Erciyes Üniversitesi Fen Biliml
Enstitüsü Fizik Ana Bilim Dalında **Yüksek Lisans** tezi olarak kabul edilmiştir.

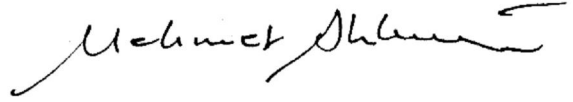
16/01/2

JÜRİ:

Başkan: Doç. Dr. İsmail BOZTOSUN



Üye: Prof. Dr. Mehmet AKKURT



Üye: Doç. Dr. Yılmaz DAĞDEMİR



ONAY:

Bu tezin kabulü, Enstitü Yönetim Kurulunun 16./01./2009 ve 2009/02-21 sayılı kararı
le onaylanmıştır.

16/01/2009



N. Ayyıldız

Prof. Dr. Nusret AYYILDIZ

Asistör

TEŐEKKÜR

Bu alıőmamın gerekleőmesinde yardımları ve sürekli desteęi iin tez yöneticisi sayın hocam Do. Dr. Yılmaz DAĐDEMİR Bey'e,

Yoęun alıőma temposunda deęerli zamanını ve desteęini hibir zaman esirgemeyen sayın Hocalarım Orhan BAYRAK Bey ve Do. Dr. İsmail BOZTOSUN Bey'e,

Ayrıca bana hayatımın her anında maddi ve manevi yardımını esirgemeyen aileme sonsuz teőekkürlerimi sunarım.

HİPERBOLİK SCHRÖBERL MERKEZCİL POTANSİYELİ İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜLMESİ

İsmail ERMİŞ

Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Yüksek Lisans Tezi, Ocak 2009
Tez Danışmanı: Doç. Dr. Yılmaz DAĞDEMİR

ÖZET

Bu çalışmada hiperbolik Schröberl merkezci potansiyeli için radyal Schrödinger denkleminin çözümünü Asimtotik İterasyon Metodu ve Nikiforov- Uvarov Metotlarını kullanarak elde ettik. Bu metotlar, ikinci derece homojen lineer diferansiyel denklemlerin çözümünde oldukça sık kullanılır.

İlk iki bölümde zamandan bağımsız ve zamana bağlı Schrödinger denklemini elde ettik. Üçüncü bölümde hiperbolik Schröberl merkezci potansiyeli için radyal Schrödinger denkleminin analitik çözümü için Asimtotik İterasyon Metodunu, dördüncü bölümde ise Nikiforov- Uvarov Metodunu kullandık.

Son bölümde ise her iki metodu kullanarak $n \leq 4$ ve farklı l değerleri için enerji özdeğerlerini hesapladık ve sonuçların gerçek değerlerle uyumlu olduğunu gösterdik.

Anahtar Kelimeler: Bağlı durumlar, Merkezci potansiyel, Nikiforov-Uvarov Metod, Asimtotik İterasyon Metod.

THE SOLUTION OF SCHRÖDINGER EQUATION FOR HYPERBOLIC SCHRÖBERL CENTRAL POTENTIAL

İsmail ERMİŞ

Erciyes University, Graduate School of Natural and Applied Sciences

M. Sc. Thesis, January 2009

Thesis Supervisor: Assoc. Prof. Yılmaz DAĞDEMİR

ABSTRACT

We have found the approximate analytical solution of the radial Schrödinger equation for hyperbolic Schröberl molecular potential with centrifugal term by using Asymptotic Iteration Method and Nikiforov- Uvarov Method. These methods are frequently used for the solution of the second-order homogenous linear differential equations.

In the first two chapters, we have obtained the time independent and time dependent Schrödinger equation. In third chapter, we have used the Asymptotic Iteration Method for the analytical solution of the radial Schrödinger equation for hyperbolic molecular potential with centrifugal term. In the fourth chapter, we have used the Nikiforov-Uvarov Method for analytical solution of the radial Schrödinger equation with the same potential.

In the final chapter, the bound state energy eigenvalues are derived for values of l with $n \leq 4$ by using both methods and we have shown that the results are in good agreement with exact values.

Keywords: Bound state, Central potential, Asymptotic Iteration Method, Nikiforov-Uvarov Method.

İÇİNDEKİLER

KABUL ve ONAY	i
TEŞEKKÜR.....	ii
ÖZET.....	iii
ABSTRACT.....	iv
1. BÖLÜM	
GİRİŞ.....	1
2. BÖLÜM	
SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİNİN ELDE EDİLMESİ	
2.1. Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi.....	3
2.2. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi.....	4
2.3. Merkezi Potansiyeller.....	5
3. BÖLÜM	
ASİMTOTİK İTERASYON METODU	
3.1. Asimtotik İterasyon Metodunun Genel Tanımı.....	12
3.2. Schröberl Potansiyelinin Asimtotik İterasyon Metodu İle Tam Çözümü...15	
4. BÖLÜM	
NIKİFOROV-UVAROV METODU	
4.1. Nikiforov- Uvarov Metodunun Genel Tanımı.....	24
4.2 Schröberl Potansiyelinin Nikiforov- Uvarov Metodu İle Tam Çözümü...26	
5. BÖLÜM	
SONUÇ VE TARTIŞMA.....	33
KAYNAKLAR.....	35
ÖZGEÇMİŞ	37

1. BÖLÜM

GİRİŞ

Bu çalışmada exponansiyel yapıdaki Schrödinger merkezci potansiyeli için radyal Schrödinger denkleminin bağlı durumlarının çözümünün analitik yolla bulunması, enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlarının Nikiforov- Uvarov (NU) ve Asimtotik İterasyon Metodları (AIM) ile hesaplanması hedeflenmiştir. Kuantum mekaniğinde relativistik ve relativistik olmayan dalga denklemlerinin tam çözümü çok önemlidir. Çünkü bu denklemler kuantum sistemleri için gerekli duyulan tüm bilgileri içermektedir.

Merkezcil potansiyeller için Schrödinger denkleminin tam çözümü son yıllarda oldukça ilgi çekici bir konudur. Kuantum mekaniği problemlerinde enerji özdeğerlerini ve enerji özfonksiyonlarının değerlerinin hesaplanmasında çok çeşitli yöntemler kullanılmıştır. Örneğin Morse potansiyeli $V_m(r) = D(e^{-2ax} - 2e^{-ax})$, Hulthen potansiyeli $V_H = -V_0 \frac{e^{-\lambda x}}{(1 - e^{-\alpha x})}$, Pöschl-Teller potansiyeli $V_{PT} = -\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$ gibi exponansiyel ve trigonometrik potansiyeller ve diğer çok parametrelili exponansiyel tipi potansiyellerin çözümü yaklaşım metotlarıyla daha önce yapılmıştır [1- 4] .

Yukarıda bahsedildiği gibi Schrödinger denklemi, birçok potansiyel için farklı metotlarla çözülmüştür; ancak diğer metotlardan farklı olarak Nikiforov- Uvarov Metodu (NU) ve Asimtotik İterasyon Metodu (AIM) bu denklemin analitik yolla çözümünde bir çok açıdan kolaylıklar sağlamaktadır.

Nikiforov-Uvarov Metodu ve Asimtotik İterasyon Metodu ikinci dereceden homojen lineer diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılan iki metottur. Bu çalışmada her iki metot da aynı potansiyel için ilk kez çözülecek ve enerji özdeğerleri hesaplanacaktır.

2. Bölüm’de merkezi potansiyeller altındaki iki cisim problemi incelemek ve Schrödinger dalga denklemi elde edilecektir. Elde edilen zamandan bağımsız dalga denkleminde küresel koordinatlar yardımıyla, Schröberl merkezi potansiyel için enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlarını bulmamızı sağlayacak olan radyal schrödinger denklemi elde edilecektir.

3.Bölüm’de Schrödinger denkleminin bağılı durumlarının çözümünde kullanılan Asimtotik İterasyon Metodu hakkında bilgi verilerek, Schröberl potansiyeli için Schrödinger denkleminin çözümü ilk defa analitik yolla yapılacak ve enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları hesaplanacaktır. Bu metodla bulunan enerji değerleri de tablo halinde incelenecektir

4.Bölüm’de Schrödinger denkleminin bağılı durumlarının çözümünde kullanılan bir diğer metot olan Nikiforov-Uvarov Metodu hakkında bilgi verilip, Schröberl potansiyeli için Schrödinger denkleminin çözümü ilk defa analitik yolla yapıp enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları bulunacaktır. Bulunan enerji özdeğer ifadesinin bir uygulaması yapılacak ve bulunan değerler bir tablo halinde incelenecektir.

5.Bölüm’de Nikiforov-Uvarov Metodu ve Asimtotik İterasyon Metodu ile hesaplanan değerlerin karşılaştırması yapılacak ve elde edilen sonuçlar tablo halinde gösterilip, değerlerin uyumlu olup olmadıkları tartışılacaktır.

2. BÖLÜM

SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİNİN ELDE EDİLMESİ

2.1. Zamana Bağlı Schrödinger Denklemine Elde Edilmesi

$\Psi(x, t)$ de Broglie dalgası

$$\Psi(x, t) = Ae^{-iw(t-\frac{x}{v})} \quad (2.1)$$

biçiminde tanımlanır.

Böyle bir dalga paketi değil de tek bir dalgadan meydana gelen kütlesi m ve momentumu p olan (dolayısıyla $K = \frac{p^2}{2m}$ kinetik enerjili) bir tanecik için

$$\omega = 2\pi f ,$$

$$E = hf ,$$

$$\lambda = \frac{h}{p} , \quad (2.2)$$

$$v = \lambda f = \frac{hf}{p}$$

ifadelerini (2.1) de yerine yazarsak,

$$\Psi(x, t) = Ae^{-\frac{2\pi i}{h}(Et-px)} , \quad (2.3)$$

şekline dönüşür.

Eğer tanecik bir kuvvet alanında ise, taneciğin toplam E enerjisi enerjinin korunumu ilkesi uyarınca zamana bağlı olmayıp, K kinetik enerjisiyle V potansiyel enerjisinin toplamına eşittir.

$$E = K(x) + V(x) \quad , \quad (2.4)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad , \quad (2.5)$$

Öte yandan (2.3) den x' e göre ikinci türevi ve sonra da t' ye göre birinci türevi alınır.

$$p^2\Psi = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \quad (2.6)$$

$$E\Psi = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (2.7)$$

denklemleri elde edilir.

(2.4) denkleminin her iki yanını da Ψ ile çarptıktan sonra (2.6) ve (2.7) denklemlerini de göz önünde bulundurarak

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - V(x)\Psi \quad , \quad (2.8)$$

denklemini elde edilir. Böylece zamana bağlı Schrödinger denklemini elde edilmiş olur.[5]

2.2. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi

Taneciğe karşılık gelen de Broglie dalgası

$$\Psi(x,t) = A e^{\frac{-2\pi i}{h}(Et - px)} = A e^{\frac{2\pi i px}{h}} e^{\frac{-2\pi i Et}{h}} \quad , \quad (2.9)$$

$$\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{\frac{-2\pi i Et}{h}} \quad , \quad (2.10)$$

şeklinde tanımlanır.

Bu ifade $\Psi(x,t)$ 'nin yalnız x' e bağlı bir fonksiyon ile yalnız t' ye bağlı bir fonksiyonun çarpımı olarak yazılabildiğini göstermektedir. Buna göre taneciğin x' i içeren dx aralığında t anında bulunması ihtimaliyeti

$$\Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) dx = \Psi^*(x) e^{\frac{2\pi i Et}{h}} \cdot \Psi(x) e^{\frac{-2\pi i Et}{h}} dx \quad , \quad (2.11)$$

$$= \Psi^*(x)\Psi(x) , \quad (2.12)$$

dir.

Bu sonuç, göz önüne alınan ihtimalin zamana bağlı olmadığını göstermektedir. Bu ihtimaliyeti bulmak için $\Psi(x,t)$ 'yi bulmak yerine $\Psi(x)$ 'i bulmak yeterlidir. E enerjisi, enerjinin korunumu ilkesine göre sabittir. V potansiyel fonksiyonu ise x ' in fonksiyonudur. (2.10)' i (2.7)' de yerine koyarsak,

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - V(x)] \Psi(x) = 0 , \quad (2.13)$$

bulunur. Böylece zamandan bağımsız Schrödinger denklemi elde edilmiş olur [6].

2.3. İki Cisim Problemi İçin Merkezi Potansiyeller

Kütleleri m_1 ve m_2 olan iki parçacığın konum ve momentumlarını, sırasıyla \vec{r}_1, \vec{r}_2 ve \vec{p}_1, \vec{p}_2 ile gösterelim. Bu sistemin hamiltonyeni

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) , \quad (2.14)$$

şeklinde yazılır.

Burada V potansiyeli, küresel simetriden dolayı sadece parçacıklar arasındaki uzaklığın bir fonksiyonudur. Bu tür potansiyellere merkezi potansiyeller denir.

Momentum işlemcileri $\hat{P} = -i\hbar\nabla$ ve $P^2 = -\hbar^2\nabla^2$ (2.14) denkleminde yerine yazılırsa;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(r) \quad (2.14)$$

elde edilir.

(2.14)' denkleminin her iki tarafı Ψ ile çarpılırsa,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(r) \right\} \Psi = E\Psi \quad (2.15)$$

olur.

Dalga fonksiyonu

$$\Psi = \Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) \quad (2.16)$$

dir.

Buradaki $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2$ bu sistemin bulunduğu 3 boyutlu uzaydaki koordinatlarıdır.

Bu denklemdeki kütle merkezi koordinatları X, Y, Z leri bağıl hareketin koordinatları olan x, y ve z cinsinden aşağıdaki şekilde yazarız.

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}, \quad Y = \frac{m_1 y_1 + m_2 y_2}{m_1 + m_2}, \quad Z = \frac{m_1 z_1 + m_2 z_2}{m_1 + m_2} \quad (2.17)$$

$$x = x_2 - x_1, \quad y = y_2 - y_1, \quad z = z_2 - z_1 \quad (2.18)$$

Böylece toplam kinetik enerji

$$K = \frac{1}{2} m_1 (\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{z}_1^2) + \frac{1}{2} m_2 (\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2 + \dot{z}_2^2) \quad (2.19)$$

ve $M = m_1 + m_2$ şeklinde tanımlanırsa, denklem (2.17) ve (2.18) den

$$MX = m_1 x_1 + m_2 x_2$$

$$x_2 = x + x_1$$

bulunur.

(2.18) denklemi (2.17) de yerine yazılırsa

$$MX = m_1 x_1 + m_2 (x + x_1) = m_1 x_1 + m_2 x + m_2 x_1 \quad (2.20)$$

$$= (m_1 + m_2) x_1 + m_2 x \quad (2.21)$$

$$= M x_1 + m_2 x$$

$$x_1 = X - \frac{m_2}{(m_1 + m_2)} \cdot \frac{m_1}{m_1} \cdot x \quad (2.22)$$

bulunur. Ayrıca her iki kütle için yerine

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.23)$$

indirgenmiş kütle kullanabiliriz.

Diğer işlemlerde benzer şekilde yapılırsa,

$$x_1 = X - \frac{\mu}{m_1} x, \quad y_1 = Y - \frac{\mu}{m_1} y, \quad z_1 = Z - \frac{\mu}{m_1} z, \quad (2.24)$$

$$x_2 = X + \frac{\mu}{m_2} x, \quad y_2 = Y + \frac{\mu}{m_2} y, \quad z_2 = Z + \frac{\mu}{m_2} z \quad (2.25)$$

Denklem (2.25), (2.19) da yerine yazılırsa

$$T = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2) + \frac{1}{2}\mu(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) \quad (2.26)$$

olur. (2.26) denklemini momentum işlemcileri cinsinden yazılırsa,

$$P_x = MX \quad P_y = MY \quad P_z = MZ \quad (2.27)$$

$$p_x = \mu x \quad p_y = \mu y \quad p_z = \mu z \quad (2.28)$$

elde edilir. Böylece (2.26) denklemi,

$$K = \frac{1}{2}M(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) + \frac{1}{2}\mu(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \quad (2.29)$$

$E = K + V$ ve momentum işlemcileri kullanılırsa, Hidrojen atomu için Schrödinger denklemi,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{km}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) \right\} \Psi = E\Psi, \quad (2.30)$$

$$\Psi(X, Y, Z, x, y, z) = \Psi_{km}(X, Y, Z)\Psi(x, y, z) \quad (2.31)$$

şeklinde tanımlanırsa, (2.31) denkleminin (2.30) da yerine yazılmasıyla,

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{km}^2 \Psi_{km} = E_{km} \Psi_{km}, \quad (2.32)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right\} \Psi = E\Psi, \quad (2.33)$$

olur.

E_{km} kütle merkezinin öteleme hareket enerjisi, E ise bağıl hareketin enerjisidir. Kütle merkezinin hareketi potansiyel enerjiden bağımsız olduğu için bu denklemin (2.32) çözümü merkezi potansiyel için enerji öz değer ve öz vektörleri bulmamıza yardımcı olmaz. Bu nedenle (2.33) denklemi ile ilgileneceğiz.

Önce (2.32) ile verilen denklemi küresel koordinatlarda yazıp, merkezi potansiyelde hareket eden μ kütleli spinsiz bir parçacık için en genel hareket denklemini veren Schrödinger denklemini aşağıdaki şekilde elde edebiliriz.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \right) \Psi(r, \theta, \phi) = E\Psi(r, \theta, \phi) \quad (2.33)$$

Köşeli parantezler içindeki terimlerin negatifi açısal momentum işlemcisinin karesidir (\bar{L}^2). Bu işlemcinin öz fonksiyonları dejeneredir ve $Y_{lm}(\theta, \phi)$ küresel harmonikler ile

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.34)$$

özdeğer eşitlikleri tanımlanır.

Küresel koordinatlarda $\Psi \rightarrow \Psi(r, \theta, \phi)$ değişkenlerine ayrılarak şöyle yazılabilir.

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)f(\theta)g(\phi) \quad (2.35)$$

Denklem (2.33) deki sadece ϕ 'ye bağlı olan denklemi $-m_l^2$ ye eşitlersek (çünkü böyle bir sistemin $0 \leq \phi \leq \infty$ aralığında her an doğru olabilmesi için denklemin bir sabite eşit olması gerekir. O sabit $-m_l^2$ şeklinde bir kuantum sayısı olarak seçilir) denklem;

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2} + m_l^2 g = 0 \quad (2.36)$$

şeklini alır.

Bu denklem ise basit hareket denklemdir. Çözümü ise;

$$g(\phi) = A e^{im\phi} \quad (2.37)$$

olur.

A ' yı bulmak için ise normalizasyon şartı kullanılır;

$$\int_0^{2\pi} g_{(\phi)}^* g_{(\phi)} d\phi = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.38)$$

Böylece $g(\phi)$ çözümü,

$$g_{m_l} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \text{ kuantum sayısı} \quad (2.39)$$

(2.33) eşitliğinin $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$ aralığında yani tüm uzayda her an doğru olabilmesi için denklemin bir sabite eşit olması gerektiği belirtilmişti. Burada seçeceğimiz sabit ise denklem (2.34) dan görüldüğü gibi $l(l+1)$ dir.

Yukarıdaki denklemler açısal momentumun karesinin \hbar^2 'ye bölümü boyutu olduklarından m_l ve l kuantum sayıları açısal momentum kuantum sayıları olmak zorundadırlar. Böylece denklemin sol ve sağ tarafları $l(l+1)$ 'e eşit olduklarından dolayı Schrödinger denkleminin küresel koordinatlarda her üç değişkene ayrılmış şekli

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2} + m_l^2 g = 0 \quad (2.40)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \right] f = 0 \quad (2.41)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0 \quad (2.42)$$

şeklinde elde edilirler.

(2.40) denkleminin çözümü $g_{m_l}(\phi) = Ae^{im_l\phi}$ şeklinde bulunmuştur. Denklem (2.41) 'in çözümü için Legendre polinomları ve Rodrigues formülleri kullanılarak çözüme gidilir. Bu durumda θ 'ya bağlı çözüm fonksiyonu,

$$f(\theta) = N_{l,m_l} P_{l,m_l}(\cos\theta) \quad (2.43)$$

şeklinde olup normalizasyon sabiti,

$$N_{l,m_l} = (-1)^{\frac{(m_l+|m_l|)}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!}} \quad (2.44)$$

ve Legendre polinomları,

$$P_{m_l}(\cos\theta) = \left[1 - \cos^2\theta \right]^{\frac{m_l}{2}} \frac{\partial^{m_l} P_l(\cos\theta)}{\partial \theta^{m_l}} \quad (2.45)$$

ifadeleri ile belirlidir. Burada $(\cos\theta = \xi)$ dersek, $P_l(\xi)$ ise

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^\ell} \ell! \frac{\partial^\ell}{\partial \xi^\ell} (\xi^2 - 1)^\ell \quad (2.46)$$

ile verilir.

Burada $P_l^{m_l}(\xi)$ Asosiy Legendre fonksiyonu, $P_l(\xi)$ ise Legendre polinomudur. Buradaki l yörüngesel açısal momentum kuantum sayısı ve m_l manyetik kuantum sayıdır.

Denklem (2.42) ile verilen Schrödinger denkleminin radyal kısmı için ise aşağıdaki değişken değişiklikleri çözümü oldukça kolaylaştırır. Önce türev ifadesini açarak denklemi tekrar yazarsak,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right) R_{nl}(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{nl}(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R_{nl}(r) = 0 \quad (2.47)$$

biçimini alır.

$R_{nl}(r)$ aşağıdaki şekilde yazarsak

$$R_{nl}(r) = \frac{U_{nl}(r)}{r} \quad (2.48)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right) \frac{U_{nl}(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} U_{nl}(r) \quad (2.49)$$

şeklinde ifade edilir. Böylece (2.42) ile verilen radyal Schrödinger denklemini aşağıdaki oldukça basit şekle dönüştürülür. [7]

$$\frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] U_{nl}(r) = 0 \quad , \quad (2.50)$$

3. BÖLÜM

ASİMTOTİK İTERASYON METODU

3.1. Asimtotik İterasyon Metodunun Genel Tanımı

Bu bölümde ikinci dereceden homojen lineer diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılan Asimtotik İterasyon Metodu ayrıntılı bir şekilde anlatılacak ve Schröberl potansiyeli [8] için radyal Schrödinger denklemi çözülecek ve enerji öz değerleri hesaplanacaktır.

Son zamanlarda ikinci dereceden homojen lineer diferansiyel denklemin çözümünde kullanılan Asimtotik iterasyon metodu olarak adlandırılan metot oldukça yaygın kullanılmaktadır [9]. Asimtotik iterasyon metodunda (AIM) ikinci dereceden homojen lineer diferansiyel denklemi şu biçimde

$$y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y \quad (3.1)$$

yazılır.

Burada $\lambda_0(x) \neq 0$, $s_0(x)$ ve λ_0 türevlenebilir fonksiyonlardır. Bu denklemin genel çözümünü bulmak için (3.1) denkleminin x 'e göre türevi alınırsa

$$y'''(x) = \lambda_1(x)y' + s_1(x)y, \quad (3.2)$$

bulunur. Burada,

$$\lambda_1(x) = \lambda_0'(x) + s_0(x) + \lambda_0^2(x), \quad (3.3)$$

$$s_1(x) = s_0'(x) + s_0(x)\lambda_0(x), \quad (3.4)$$

Benzer şekilde denklem (3.2)' nin bir kez daha türevi alınırsa

$$y^{(n)}(x) = \lambda_2(x)y'(x) + s_2(x)y(x), \quad (3.5)$$

bulunur.

Burada

$$\lambda_2(x) = \lambda_1'(x) + s_1(x) + \lambda_0\lambda_1(x), \quad (3.6)$$

$$s_2(x) = s_1'(x) + s_0(x)\lambda_1(x) \quad (3.7)$$

Denklem (3.1) in iterasyonundan $(k+1)$ inci ve $(k+2)$ nci türevler ve $k = 0,1,2,3 \dots$ olmak üzere,

$$y_n^{(k+1)}(x) = \lambda_{k-1}(x)y_n'(x) + s_{k-1}(x)y_n(x) \quad (3.8)$$

$$y_n^{(k+2)}(x) = \lambda_k(x)y_n'(x) + s_k(x)y_n(x) \quad (3.9)$$

şeklinde tanımlanır. Burada,

$$\lambda_k(x) = \lambda_{k-1}'(x) + s_{k-1}(x) + \lambda_0\lambda_{k-1}(x) \quad (3.10)$$

$$s_k(x) = s_{k-1}'(x) + s_0(x)\lambda_{k-1}(x) \quad (3.11)$$

tekrarlama terimleri olarak bilinir. $(k+1)$ inci ve $(k+2)$ nci türevler oranından

$$\frac{d}{dr} \ln[y_n^{k+1}(x)] = \frac{y_n^{k+2}(x)}{y_n^{k+1}(x)} = \frac{\lambda_k(x)}{\lambda_{k-1}(x)} \frac{\left[y_n'(x) + \frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)} y_n(x) \right]}{\left[y_n'(x) + \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} y_n(x) \right]} \quad (3.12)$$

bulunur.

Yeterince büyük k değerleri için

$$\frac{s_k}{\lambda_k} = \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} = \alpha(x), \quad (3.13)$$

dır.

(3.12) ifadesi sade bir biçimde yazılacak olunursa,

$$\frac{d}{dr} \ln[y_n^{k+1}(r)] = \frac{\lambda_k(x)}{\lambda_{k-1}(x)} \quad (3.14)$$

şeklini alır ve bu oran AIM'in karakteristik yapısını ifade eder. Böylece k 'ya bağlı genel çözüm aşağıdaki şekilde yazılabilir

$$y_n^{k+1}(x) = C_1 \exp\left(\int \frac{\lambda_k(x)}{\lambda_{k-1}(x)} dx\right) = C_1 \lambda_{k-1}(x) \exp([\alpha(x)\lambda_0(x)]dx) \quad (3.15)$$

Burada C_1 bir integral sabitidir. Denklem (3.15), (3.8) ve (3.9) da yerine yazılırsa; birinci dereceden diferansiyel denklem aşağıdaki şekilde ifade edilebilir.

$$y_n'(x) + \alpha(x)y_n(x) = C_1 \exp\left(\int [\alpha(x) + \lambda_0(x)] dx\right) \quad (3.16)$$

Bu şekildeki birinci dereceden diferansiyel denklem kolaylıkla çözülebilir. (3.1) eşitliğinin en genel çözümü aşağıdaki şekildeki gibidir.

$$y_n'(x) = \exp\left(-\int \alpha(x_1) dx_1\right) \left[C_2 + C_1 \int \exp([\lambda_0(x_2) + 2\alpha(x_2)] dx_2) dx_1 \right] \quad (3.17)$$

Verilen bir potansiyel için radyal Schrödinger denklemi (3.1) eşitliğine dönüşür. Daha sonra $\lambda_0(x)$ ve $s_0(x)$ hesaplanıp, $\lambda_k(x)$ ve $s_k(x)$ parametreleri (3.10) ve (3.11) eşitliği yardımıyla hesaplanır. Enerji özdeğerleri de (3.13) eşitliği ile verilen kuantumlanma durumuyla elde edilir. Dolayısıyla (3.13) eşitliğiyle birlikte var olan durumun kuantumlanma aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$\delta_k(x) = \lambda_k(x)s_{k-1}(x) - \lambda_{k-1}(x)s_k(x) = 0 \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (3.18)$$

Burada k iterasyon sayısıdır.

Tam olarak çözülebilen potansiyeller için, radyal kuantum sayısı n 'in iterasyon sayısı k 'ya eşit olduğu durumda problem tam çözülebiliyorsa, enerji özdeğerleri (3.18) eşitliğinden bulunur. Kolayca çözülemeyen potansiyeller için tam çözüm yoktur, seçilen bir n temel kuantum sayısı için, uygun r_0 noktası seçilir ve asimtotik dalga fonksiyonunun maksimum değeri, potansiyelin minimum değeri, ortalama enerji özdeğerleri, k iterasyon değerinin n -temel kuantum sayısından büyük değerleri için bu eşitlik yardımıyla hesaplanır [9,10]

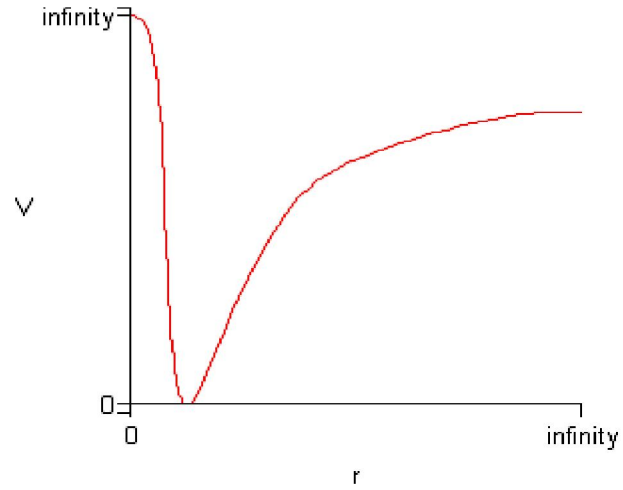
3.2. Schröberl Potansiyelinin AIM İle Tam Çözümü

Şimdiye kadar olan kısımda AIM ile ilgili bilgiler verildi. Şimdi Schröberl exponansiyel hiperbolik potansiyelli Schrödinger denklemini AIM ile çözüp enerji öz değerleri elde edeceğiz.

Schröberl potansiyeli,

$$V(r) = D[1 - \sigma \coth(\alpha r)]^2 \quad (3.19)$$

şeklinde tanımlanır. Bu potansiyelin Maple programında çizilen grafiği aşağıdaki



gibidir

Şekil 3.1: $D=10$, $\sigma = 0.1$, $\alpha = 0.1$ değerleri için Schröberl potansiyelinin grafiği.

Burada D, σ ve α moleküle ait bazı sabit parametrelerdir. Zamandan bağımsız bir $V(r)$ potansiyeli etkisinde bulunan ve kütlesi μ olan bir parçacığı hareketini tanımlayan Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) - E \right] \Psi(\vec{r}) = 0, \quad (3.20)$$

ile verilir. Potansiyelimiz r ' ye bağlı olduğundan Bölüm 2' de elde ettiğimiz

$$\frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] U_n(r) = 0 \quad (3.21)$$

denklemini ele alacağız. Burada toplam (etkin) potansiyelimiz ise,

$$V(r) = D[1 - \sigma \coth(\alpha r)]^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (3.22)$$

dir. Burada $\frac{1}{r^2} \approx \frac{4\alpha^2 e^{-2\alpha r}}{(1 - e^{-2\alpha r})^2}$ yaklaşıklığı yapılır ve $e^{-2\alpha r} = s$ değişken dönüşü

yapılırsa,

$$\coth(\alpha r) = \frac{\frac{e^{\alpha r} + e^{-\alpha r}}{2}}{\frac{e^{\alpha r} - e^{-\alpha r}}{2}} = \frac{e^{\alpha r} + e^{-\alpha r}}{e^{\alpha r} - e^{-\alpha r}} = \left[1 - \frac{\sigma \left(\frac{1}{\sqrt{s}} + \sqrt{s} \right)}{\frac{1}{\sqrt{s}} - \sqrt{s}} \right]^2 = \left[1 - \frac{\sigma(1+s)}{(1-s)} \right]^2 = \left[\frac{s(-1-\sigma) - \sigma + 1}{1-s} \right]^2$$

olarak bulunur. $e^{-2\alpha r} = s$ ifadesinin birinci ve ikinci türevleri alınırsa,

$$\frac{d}{dr} = 2\alpha s \frac{d}{ds}$$

$$\frac{d^2}{dr^2} = 4\alpha^2 s \frac{d}{ds} + 4\alpha^2 s^2 \frac{d^2}{ds^2} \quad (3.23)$$

şeklinde tanımlanır ve (3.23) denklemi (3.21) de yerine yazılırsa

$$s^2 \frac{d^2 R}{ds^2} + s \frac{dR}{ds} - \left[\beta^2 - k(1-\sigma)^2 + \frac{l(l+1)s}{(1-s)^2} + k \frac{(1-\sigma)^2 + s^2(1+\sigma)^2 - 2(1-\sigma^2)s}{(1-s)^2} \right] R = 0$$

(3.24)

elde edilir. Burada

$$\beta^2 = -\frac{\mu E}{2\alpha^2 \hbar^2}, \quad k = \frac{\mu D}{2\alpha^2 \hbar^2}$$

kısaltmaları yapıldı.

Bu denklemi AIM ile çözebilmek için

$$y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y \quad (3.25)$$

biçimine dönüştürmeliyiz.

Bu diferansiyel denklemin $r \rightarrow \infty$ da düzensiz tekillikleri vardır. Bağlı durumdaki normalize edilmiş çözümleri $\exp(-\varepsilon r)$ şeklinde davranır. Benzer şekilde $r \rightarrow 0$ da da tekillikler vardır. Bu durumda $R_{nl}(r) \approx r^{1+\delta}$ dir. Bu denklemi AIM ile çözmek için aşağıda şekilde verilen uygun bir dalga fonksiyonu önerilirse,

$$R(s) = (1-s)^{1+\delta} s^\beta f(s) \quad (3.26)$$

$$\delta = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{1+16k\sigma^2 + 4l^2 + 4l}}{2} \quad (3.27)$$

(3.26) denklemi (3.24) de yerine yazılırsa (3.25) biçimine uygun ikinci dereceden homojen lineer diferansiyel denklemi elde ederiz.

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f(s)}{ds^2} = & -\frac{1}{2} \frac{(4s + 2\sqrt{1+16k\sigma^2 + 4l^2 + 4l} + 4ls + 4\beta s - 4\beta - 2)}{s(s-1)} \frac{df(s)}{ds} \\ & - \frac{1 - 8f(s)k\sigma + 8f(s)k\sigma^2 + 2\beta f(s)\sqrt{1+16k\sigma^2 + 4l^2 + 4l}}{2s(s-1)} \\ & - \frac{1}{2} \frac{2f(s)l^2 + f(s) + f(s)\sqrt{1+16k\sigma^2 + 4l^2 + 4l} + 2f(s)l + 2\beta f(s)}{s(s-1)} \end{aligned} \quad (3.28)$$

(3.25) denkleminde λ_0 ve s_0 ı aşağıdaki gibi tanımlayabiliriz.

$$\lambda_0 = -\frac{(2\delta + 1)s + 2s + 2\beta s - 2\beta - 1}{s(s-1)}$$

$$s_0 = -\frac{-8k\sigma + 8k\sigma^2 + 2\beta(2\delta + 1) + 2\beta + 2 + 2\delta + 2l^2 + 2l}{2s(s-1)}$$

$$\lambda_k = \lambda'_{k-1} + s_{k-1} + \lambda_0 \lambda_{k-1} \text{ ve } s_k = s'_{k-1} + s_0 \lambda_{k-1}$$

denklemleri yardımıyla,

$$\lambda_1 = \lambda_0 + s_0 + \lambda_0^2$$

$$\lambda_1 = \frac{2s\delta + 3s + 2\beta s - 2\beta - 1}{s(s-1)} - \frac{1 - 8k\sigma + 8k\sigma^2 + 2\beta(2\delta + 1) + 2\beta + 2 + 2\delta + 2l^2 + l}{2s(s-1)} + \frac{((2\delta + 1)s + 2s + 2\beta s - 2\beta - 1)^2}{s^2(s-1)^2}$$

$$s_1 = s'_0 + s_0 \lambda_0$$

$$s_1 = \frac{1 - 8k\sigma + 8k\sigma^2 + 2\beta(2\delta + 1) + 2\beta + 2 + 2\delta + 2l^2 + 2l}{2s^2(s-1)^2} + \frac{1 - 8k\sigma + 8k\sigma^2 + 2\beta(2\delta + 1) + 2\beta + 2 + 2l^2 + 2l}{2s(s-1)^2} + \frac{1}{2} \frac{(-8k\sigma + 8k\sigma^2 + 2\beta(2\delta + 1) + 2\beta + 2 + 2\delta + 2l^2 + 2l)(2\delta + 1)s + 2s + 2\beta s - 2\beta - 1}{s^2(s-1)^2}$$

bulunur.

$$\delta_1 = s_0 \lambda_1 - s_1 \lambda_0 = 0 \quad (3.29)$$

$$\delta_1 = \frac{(4 + 3\delta + 4\beta + l^2 + l - 4k\sigma + 4k\sigma^2 + 2\beta\delta)(-4k\sigma + 4k\sigma^2 + 2\beta\delta + 2\beta + 1 + \delta + l^2 + l)}{s^2(s-1)^2}$$

(3.30)

$\delta_2, \delta_3 \dots$ de aynı metot yardımıyla hesaplanır. Buradan β ' yı hesaplırsak

$$\beta_{\delta_1} = -\frac{-4k\sigma + 4k\sigma^2 + 1 + \delta + l^2 + l}{2(1 + \delta)} \quad (3.31)$$

Aynı yöntemle $\beta_{\delta_2}, \beta_{\delta_3}$ hesaplanırsa tekrarlama bağıntısından E aşağıdaki gibi hesaplanır.[11-13]

$$\beta^2 = - \left[\frac{(n+1)^2 - 4k\sigma(1-\sigma) + l(l+1) + (2n+1)\delta}{2(n+\delta+1)} \right]^2 \quad (3.32)$$

$$-\frac{\mu E}{2\alpha^2 \hbar^2} = \left[\left[\frac{(n+1)^2 - 4k\sigma(1-\sigma) + l(l+1) + (2n+1)\delta}{2(n+\delta+1)} \right]^2 - k(1-\sigma)^2 \right]$$

$$E = -\frac{2\alpha^2 \hbar^2}{\mu} \left[\left[\frac{(n+1)^2 - 4k\sigma(1-\sigma) + l(l+1) + (2n+1)\delta}{2(n+\delta+1)} \right]^2 - k(1-\sigma)^2 \right] \quad (3.33)$$

Böylece Schröberl potansiyeli için enerji özdeğerlerini verecek olan denklem elde edilmiş olur. Bu denklemin uygulamalarını yapmak için $\hbar = \mu = 1$, $D = 10$, $\sigma = 0.1$ ve $\sigma = 0.2$, ve farklı α değerleri için $2p$, $3p$, $3d$, $4p$, $4d$, $4f$, $5p$, $5d$, $5f$, $5g$, $6p$, $6d$, $6f$ ve $6g$ seviyelerindeki enerji özdeğerleri Tablo-3.1 ve Tablo-3.2'de gösterilmiştir.

Tablo 3.1. $\hbar = \mu = 1$, $D = 10$, $\sigma = 0.1$ ve farklı α deęerleri için $2p$, $3p$, $3d$, $4p$, $4d$, $4f$, $5p$, $5d$, $5f$, $5g$, $6p$, $6d$, $6f$ ve $6g$ seviyelerindeki enerji özdeęerleri.

Durumlar	α	$\sigma = 0.1$		
		AIM metodu ile bulunan enerji deęerleri (eV)	Schröberl [8] (eV)	Radial Basis Function[23] (eV)
2p	0.10	2.61556	2.61935	2.61894
	0.15	3.89830	3.90645	3.90747
	0.20	4.99062	5.00457	5.01275
	0.25	5.86611	5.88725	5.90352
3p	0.10	4.73223	4.73638	4.73561
	0.15	6.03829	6.04649	6.04692
	0.20	6.90394	6.91733	6.92170
	0.25	7.46417	7.48358	7.49063
3d	0.10	3.61747	3.62769	3.62742
	0.15	5.27263	5.29510	5.29491
	0.20	6.43684	6.47598	6.47596
	0.25	7.19574	7.25516	7.25521
4p	0.10	5.99969	6.00390	6.00289
	0.15	7.10812	7.11589	7.07923
	0.20	7.70634	7.71826	7.72052
	0.25	8.00048	8.01528	8.02475
4d	0.10	5.32177	5.33216	5.33165
	0.15	6.71441	6.73642	6.73610
	0.20	7.50672	7.54331	7.54322
4f	0.10	4.69058	4.67061	4.69043
	0.15	6.38708	6.43112	6.43103
	0.20	7.35782	7.43334	7.43322
5p	0.10	6.80027	6.80432	6.80364

Tablo 3.1' in devamı

Durumlar	α	$\sigma = 0.1$		
		AIM metodu ile bulunan enerji değerleri (eV)	Schröberl (eV)	Radial Basis Function (eV)
5d	0.10	6.36810	6.37842	6.37783
	0.20	7.95561	7.98606	7.99659
5f	0.10	5.96159	5.98147	5.98118
	0.20	7.89634	7.96203	7.96479
5g	0.10	5.59631	5.62926	5.62919
	0.20	7.8515	7.9682	7.96859
6p	0.10	7.32099	7.32476	7.33638
6d	0.10	7.03872	7.04873	7.04900
6f	0.10	6.77575	6.79528	6.79496
6g	0.10	6.54204	6.57452	6.79497

Tablo 3.2. $\hbar = \mu = 1$, $D = 10$, $\sigma = 0.2$ ve farklı α deęerleri için $2p$, $3p$, $3d$, $4p$, $4d$, $4f$, $5p$, $5d$, $5f$, $5g$, $6p$, $6d$, $6f$ ve $6g$ seviyelerindeki enerji özdeęerleri.

Durumlar	α	$\sigma = 0.2$	Schröberl[8] (eV)	Radial Basis Function[23] (eV)
		AIM metodu ile bulunan enerji deęerleri (eV)		
2p	0.10	1.20559	1.20903	1.20889
	0.15	1.85922	1.86689	1.86662
	0.20	2.50731	2.5208	2.52043
	0.25	3.126831	3.14766	3.14744
3p	0.10	2.6799	2.68358	2.68319
	0.15	3.66413	3.67198	3.67141
	0.20	4.45247	4.46579	4.46516
	0.25	5.07247	5.09235	5.09192
3d	0.10	1.56921	1.5792	1.57919
	0.15	2.52631	2.54859	2.54871
	0.20	3.44311	3.48228	3.48393
	0.25	4.25156	4.31185	4.31758
4p	0.10	3.75375	3.75758	3.75700
	0.15	4.80501	4.81274	4.81206
	0.20	5.51842	5.53087	5.53028
	0.25	5.98303	6.00032	5.94166
4d	0.10	2.94305	2.95317	2.95317
	0.15	4.08268	4.1047	4.10489

Tablo 3.2' nin devamı

Durumlar	α	$\sigma = 0.2$		
		AIM metodu ile bulunan enerji değerleri (eV)	Schröberl[8] (eV)	Radial Basis Function[23] (eV)
	0.20	4.96371	5.00137	5.00301
4f	0.10	2.05438	2.07417	2.07416
	0.15	3.31338	3.35742	3.35743
	0.20	4.39793	4.47486	4.47499
5p	0.10	4.54628	4.55015	4.54976
	0.20	6.08749	6.09822	6.10326
5d	0.10	3.94725	3.9574	3.95697
	0.20	5.79634	5.83083	5.83057
5f	0.10	3.29593	3.31567	3.31552
	0.20	5.48854	5.56096	5.56087
5g	0.10	2.60844	2.64124	2.64123
	0.20	5.19365	5.31882	5.31881
6p	0.10	7.51344	5.13824	5.13839
6d	0.10	4.68977	4.69979	4.69987
6f	0.10	4.20751	4.22706	4.22706
6g	0.10	3.70128	3.73378	3.73375

4. BÖLÜM

NIKIFOROV-UVAROV METODU

4.1. Nikiforov-Uvarov Metodunun Genel Tanımı

Nikiforov-Uvarov Metodu (NU) ikinci dereceden lineer denklemlerin özel fonksiyonlarla çözümünün yapıldığı bir metottur.

Bu metot, relativistik olmayan Schrödinger denkleminin veya benzer şekilde zamandan bağımsız ikinci dereceden diferansiyel eşitliklerin çözümünde sıkça kullanılan bir metottur [14-18]. Bu metodun daha iyi anlaşılması için bu metot hakkında bu kısımda kısaca bilgi vermek yerinde olacaktır. Bu metodun herhangi bir Schrödinger eşitliğini veya ikinci dereceden bir diferansiyel denklemi aşağıdaki biçimde ifade etmek gerekir.

$$\Psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \Psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \Psi(s) = 0, \quad (4.1)$$

Burada $\sigma(s)$ ve $\tilde{\sigma}(s)$ çoğunlukla ikinci dereceden polinomlar, $\tilde{\tau}(s)$ ise birinci dereceden bir polinomdur. Dolayısıyla, bu metotla Schrödinger denklemi veya Schrödinger tipi denklemler analitik olarak çözülebilir. Denklem (4.1)' in özel çözümünü bulmak için aşağıdaki dönüşüm kullanılırsa,

$$\Psi(s) = \phi(s)y(s), \quad (4.2)$$

denklem (4.1) aşağıdaki formda verilen hipergeometrik tipteki eşitliğe indirgenir.

$$\sigma(s)y'' + \tau(s)y' + y = 0, \quad (4.3)$$

$\phi(s)$ logaritmik türev olarak tanımlanır ve bunun çözümü aşağıdaki denklemden elde edilebilir.

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \quad (4.4)$$

Diğer kısım $y(s)$ ise hipergeometrik tipteki fonksiyondur ve bunun polinom çözümü Rodrigues ilişkisi ile aşağıdaki gibi elde edilir.

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s) \rho(s)], \quad (4.5)$$

Burada B_n normalizasyon sabitidir. Ağırlık fonksiyonu $\rho(s)$ ise

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \quad (4.6)$$

şartını sağlamalıdır. Bu metotta π fonksiyonu ve λ parametresi aşağıdaki şekilde tanımlanır.

$$\pi = \left(\frac{\sigma' - \tau'}{2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tau'}{2} \right)^2 - \tilde{\sigma} + k\sigma} \quad (4.7)$$

k değerini bulmak için karekök altındaki ifade polinomun karesi olmalıdır. Bulunan k değeri denklem (4.8) de yerine yazılırsa

$$k = \lambda - \pi'(s) \quad (4.8)$$

λ değeri bulunur. Böylece Schrödinger denklemi için yeni enerji özdeğer denklemi

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2} \sigma''; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.9)$$

şeklinde olur.

$\tau(s)$ değeri ise

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \quad (4.10)$$

denklemleri ile bulunur ve $\tau(s)$ nin türevi negatif olmalıdır. (4.8) ve (4.9) denklemleri eşitlenirse buradan enerji özdeğeri bulunabilir [19-21].

4.2. Schrödinger Potansiyelinin Nikiforov- Uvarov Metodu İle Çözümü

Biz Schrödinger denkleminin radyal kısmını

$$\frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] U_{nl}(r) = 0 \quad (4.11)$$

ile verildiğini 2. bölümde ispatlamıştık (Denklem 2.50).

Burada

$$V(r) = D[1 - \sigma \coth(\alpha r)]^2 \quad (4.12)$$

potansiyelini yukarıdaki (4.11) denkleminde yerine yazıp, denklemin $l = 0$ için enerji özdeğerini hesaplayacağız.[22] Ayrıca bir önceki bölümde Asimtotik İterasyon metodu ile bulunan sonuçla uyumlu olup olmadığı karşılaştıracğız.

Burada $e^{2\alpha r} = s$ değişken dönüşümü yapılırsa

$$\begin{aligned} \coth(\alpha r) &= \frac{\frac{e^{\alpha r} + e^{-\alpha r}}{2}}{\frac{e^{\alpha r} - e^{-\alpha r}}{2}} = \frac{e^{\alpha r} + e^{-\alpha r}}{e^{\alpha r} - e^{-\alpha r}} = \left[1 - \frac{\sigma(\sqrt{s} + \frac{1}{\sqrt{s}})}{\sqrt{s} - \frac{1}{\sqrt{s}}} \right]^2 = \left[1 - \frac{\sigma(s+1)}{(s-1)} \right]^2 = \left[\frac{s(1-\sigma) - \sigma - 1}{s-1} \right]^2 \\ \coth(\alpha r) &= \left[\frac{s(1-\sigma) - \sigma - 1}{s-1} \right]^2 \end{aligned} \quad (4.13)$$

denklemleri elde edilir. Yine aynı değişken dönüşümünden

$$e^{2\alpha r} = s$$

$$2\alpha e^{2\alpha r} dr = ds$$

$$\frac{d}{dr} = 2\alpha \frac{d}{ds}$$

$$\frac{d^2}{dr^2} = 4\alpha^2 s \frac{d}{ds} + 4\alpha^2 s^2 \frac{d^2}{ds^2}$$

elde edilir.

Bu dönüşümler (4.11) denkleminde yerine yazılırsa

$$4\alpha^2 s^2 \frac{d^2 U}{ds^2} + 4\alpha^2 s \frac{dU}{ds} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{2\mu D}{\hbar^2} \left(1 - \frac{2\sigma(s+1)}{(s-1)} + \frac{\sigma^2(s+1)^2}{(s-1)^2}\right) \right] U = 0$$

Her iki taraf $4\alpha^2 s^2$ ye bölünürse

$$\frac{d^2 U}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{dU}{ds} + \frac{1}{s^2} \left[\frac{1}{4\alpha^2} \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{1}{4\alpha^2} \frac{2\mu D}{\hbar^2} \left(1 - \frac{2\sigma(s+1)}{(s-1)} + \frac{\sigma^2(s+1)^2}{(s-1)^2}\right) \right] U = 0$$

$$\frac{d^2 U}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{dU}{ds} + \frac{1}{s^2} \left[\frac{\mu E}{2\alpha^2 \hbar^2} - \frac{\mu D}{2\alpha^2 \hbar^2} \left(1 - \frac{2\sigma(s+1)}{(s-1)} + \frac{\sigma^2(s+1)^2}{(s-1)^2}\right) \right] U = 0 \quad (4.14)$$

denklemini elde edilmiş olur. Burada

$$\lambda = \sqrt{\frac{\mu E}{2\alpha^2 \hbar^2}} \quad \text{ve} \quad \beta = -\frac{\mu D}{2\alpha^2 \hbar^2}$$

değişkenlerini tanımlarsak denkleminiz

$$\frac{d^2 U}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{dU}{ds} + \frac{1}{s^2} \left[\lambda^2 + \beta \left(1 - \frac{2\sigma(s+1)}{(1-s)} + \frac{\sigma^2(1+s)^2}{(1-s)^2}\right) \right] U = 0$$

şekline dönüşür. Parantez içerisinde gerekli düzenlemeler yapılırsa,

$$\frac{d^2 U}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{(1-s)}{(1-s)} \frac{dU}{ds} + \frac{1}{s^2} \frac{1}{(1-s)^2} \left[(\lambda^2 + \beta)(1-s)^2 - 2\sigma\beta(1-s^2) + \beta\sigma^2(1+s)^2 \right] U = 0$$

$$\frac{d^2 U}{ds^2} + \frac{(1-s)}{s(1-s)} \frac{dU}{ds} + \frac{1}{s^2} \frac{1}{(1-s)^2} \left[s^2(\lambda^2 + \beta + 2\sigma\beta + \beta\sigma^2) - s(2\lambda^2 + 2\beta - 2\beta\sigma^2) - 2\sigma\beta + \beta\sigma^2 + \lambda^2 + \beta \right] U = 0$$

bulunur. Denklem bu biçimiyle (4.1) denkleminde uygun hale getirilmiş oldu. Şimdi

$$\pi = \left(\frac{\sigma' - \tau'}{2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tau'}{2} \right)^2 - \tilde{\sigma} + k\sigma}$$

denkleminde π değerini hesaplayalım. Burada

$$\sigma = s(1-s)$$

$$\tilde{\tau} = 1-s$$

$$\tilde{\sigma} = s^2(\lambda^2 + \beta + 2\sigma\beta + \beta\sigma^2) - s(2\lambda^2 + 2\beta - 2\beta\sigma^2) - 2\sigma\beta + \beta\sigma^2 + \lambda^2 + \beta$$

değerleri yukarıdaki denklemde yerine yazılırsa

$$\pi = \left(\frac{(1-2s)-(1-s)}{2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{(1-2s)-(1-s)}{2} \right)^2 - s^2(\lambda^2 + \beta + 2\sigma\beta + \beta\sigma^2) - s(2\lambda^2 + 2\beta - 2\beta\sigma^2) - 2\sigma\beta + \beta\sigma^2 + \lambda^2 + \beta + k\sigma}$$

$$\pi = \left(-\frac{s}{2} \right) \pm \sqrt{\left(-\frac{s}{2} \right)^2 - \tilde{\sigma} + ks(1-s)}$$

$$\pi = \left(-\frac{s}{2} \right) \pm \sqrt{s^2\left(\frac{1}{4} - k - \lambda^2 - \beta - 2\sigma\beta - \beta\sigma^2\right) + s(k + 2\lambda^2 + 2\beta - 2\beta\sigma^2) + (2\beta\sigma - \beta\sigma^2 - \lambda^2 - \beta)}$$

Burada,

$$c^2 = -\lambda^2 - \beta - \beta\sigma^2 + 2\sigma\beta \quad (4.15)$$

dönüşümü yapılırsa

$$\pi = \left(-\frac{s}{2} \right) \pm \sqrt{s^2\left(\frac{1}{4} - k + c^2 - 4\sigma\beta\right) + s(k - 2c^2 - 4\beta\sigma^2 + 4\sigma\beta + \beta) + c^2} \quad (4.16)$$

elde edilir.

Nikiforov-Uvarov metodunda çözüme ulaşabilmemiz için karekök içerisindeki ifadeyi tam kare yapmamız gerekiyor. Bunun için k değeri,

$$k = -4\sigma\beta + 4\sigma^2\beta + c\sqrt{1-16\beta\sigma^2} \quad (4.17)$$

şeklinde bulunur.

$$\sqrt{\frac{1-16\beta\sigma^2}{4}} = b$$

şeklinde tanımlarsak (4.17) denklemi

$$k = -4\sigma\beta + 4\sigma^2\beta + 2c\sqrt{\frac{1-16\beta\sigma^2}{4}}$$

$$k = -4\sigma\beta + 4\sigma^2\beta + 2bc \quad (4.18)$$

biçimine dönüşmüş olur. (4.18) denklemini (4.16) da yerine yazılırsa

$$\pi = -\frac{s}{2} \pm \left\{ \begin{array}{l} (c-b)s - c; k_1 \\ (c+b)s - c; k_2 \end{array} \right\} \quad (4.19)$$

bulunur.

π için uygun değer seçilirse,

$$\tau(s) = \tilde{\tau} + 2\pi$$

$$\tau(s) = (1-s) + 2\left(-\frac{s}{2} - (c+b)s - c\right)$$

$$\tau(s) = 1 - 2s - 2(b+c)s - c$$

$$\tau' = -2 - 2(b+c) \quad (4.20)$$

değerleri bulunur. Böylece bu fonksiyonun türevinin negatif olma şartı da sağlamış oldu.

Buradan enerji öz değerini elde etmek için gerekli olan

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' \quad (4.21)$$

denklemini bulmalıyız. Denklem (4.20) yi yukarıdaki denklemde yerine yazarsak,

$$\lambda_1 = n^2 + n(1 + 2b + 2c) \quad (4.22)$$

elde edilir.

Diğer λ değeri de ,

$$\lambda = k + \pi' \quad (4.23)$$

formülüyle hesaplayacağız.

$$\lambda_2 = -4\sigma\beta + 4\sigma^2\beta - 2bc - \frac{1}{2} - (b+c) \quad (4.24)$$

bulunur. (4.22) ve (4.24) denklemleri eşitlenirse,

$$\lambda = -\frac{(n+1)^2 - 4k\sigma(1-\sigma) + (2n+1)\left(\frac{1+\sqrt{1+16k\sigma^2}}{2}\right)}{2\left(n+1+\frac{1+\sqrt{1+16k\sigma^2}}{2}\right)} - k(1-\sigma)^2 \quad (4.25)$$

elde edilir.

(4.25) denklemi aşağıdaki denklemde yerine yazılır ve her iki tarafın karesi alınırsa

$$\lambda = \sqrt{\frac{\mu E}{2\alpha^2 \hbar^2}}$$
$$E = -\frac{2\alpha^2 \hbar^2}{\mu} \left[\frac{(n+1)^2 - 4k\sigma(1-\sigma) + (2n+1)\left(\frac{1+\sqrt{1+16k\sigma^2}}{2}\right)}{2\left(n+1+\frac{1+\sqrt{1+16k\sigma^2}}{2}\right)} - k(1-\sigma)^2 \right] \quad (4.26)$$

denklemini elde edilir.

Bu denklem

$$V(r) = D[1 - \sigma \coth(\alpha r)]^2$$

potansiyelli bir Schrödinger denkleminin enerji özdeğerini veren denklemdir. . Bu denklemin uygulamalarını yapmak için $\hbar = \mu = 1$, $D = 10$, $\sigma = 0.1$ ve $\sigma = 0.2$, ve farklı α değerleri için $n = 1,2,3,4$ seviyelerindeki enerji özdeğerleri Tablo-4.1' de gösterilmiştir.

Tablo 4.1. $\hbar = \mu = 1$, $D = 10$, $\sigma = 0.1$ ve farklı α deęerleri için $n = 1,2,3,4$ seviyelerindeki enerji özdeęerleri.

Durumlar	$\sigma = 0.1$ α	Nikiforov- Uvarov Metodu ile bulunan Enerji deęeri (eV)
n=1	0.10	4.3644
	0.15	5.5249
	0.20	6.3339
	0.25	6.9089
n=2	0.10	5.7733
	0.15	6.8428
	0.20	7.4628
	0.25	7.8212
n=3	0.10	6.6553
	0.15	7.5322
	0.20	7.9384
	0.25	8.0881
n=4	0.10	7.2258
	0.15	7.8927
	0.20	8.0934
	0.25	8.0452

5. BÖLÜM

SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tezde, öncelikle merkezi potansiyel altındaki iki cisim problemi incelenmiş ve Schrödinger dalga denklemi elde edilmiştir. Elde edilen zamandan bağımsız bu denklem küresel koordinatlar yardımıyla çözülmüş ve radyal Schrödinger denklemi farklı bir formata dönüştürülmüştür. Elde edilen bu radyal Schrödinger denklemi, 3. bölümde Asimtotik İterasyon metot (AIM) ve 4. bölümde Nikiforov-Uvarov metodu (NU) yardımıyla Schröberl potansiyelinin çözümü için kullanılmıştır.

Daha sonra, 3. Bölümde ikinci dereceden homojen lineer diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılan Asimtotik İterasyon Metot hakkında ayrıntılı bir bilgi verilmiş ve Schröberl potansiyeline ilk defa uygulanmış, merkezi potansiyel yaklaşıklılığı yapılarak enerji özdeğerleri başarılı bir şekilde elde edilmiştir. Bu metot Schrödinger ve Schrödinger benzeri denklemlerin çözümünde kullanılan diğer metotlara oranla daha basittir. Ayrıca bir başka avantajı da enerji özdeğerlerinin hiçbir yaklaşım yapmadan ve ek bir metoda gereksinim duymadan direk uygulanmasıyla elde edilmiştir. Bulduğumuz enerji özdeğerleri Schröberl [8] ve Radial Basis Function [23] nümerik hesaplamalarıyla elde edilen enerji özdeğerleriyle karşılaştırılmış, sonuçlar tablo halinde gösterilmiştir. Sonuçların birbirleriyle oldukça uyumlu olduğu gözlenmiştir.

4.Bölümde ise yine ikinci dereceden homojen lineer diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılan Nikiforov-Uvarov metodu hakkında geniş bilgi verilmiş, ve aynı potansiyel bu yöntemle çözülmüştür. Bu yöntemde AIM de olduğu gibi oldukça basittir, ancak metot içerisindeki $\lambda = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''$ ifadesinin türevinin negatif olması zorunluluğu, dolayısıyla bazı özel fonksiyonlar için bu metodun uygulanamaz oluşu en önemli eksikliğidir. Ancak bu sınırlamaya karşın bu metodun oldukça basit yapıda ve kullanışlı olmasından dolayı bir çok potansiyelin enerji özdeğerlerinin hesaplanmasında kullanılmıştır. Bu bölümde Schröberl potansiyelli denklemlerimizden elde ettiğimiz enerji özdeğerleri gerçek değeri ile bire bir uyumlu olduğu gözlenmiştir.

5.Bölümde ise, hem 3. bölümde Asimtotik iterasyon metot (AIM) hem de 4. bölümde Nikiforov-Uvarov metodu (NU) yardımıyla farklı n değerleri için hesaplanan enerji

özdeğerleri MAPLE programı ile hesaplanmış ve bulunan sonuçların bire bir uyumlu olduğu gözlenmiştir. Tablo 5.1 de ise bu değerler gösterilmiştir.

Tablo 5.1. $\hbar = \mu = 1$, $D = 10$, $\sigma = 0.1$, $l = 0$ ve farklı α değerleri için $n = 1,2,3,4$ seviyelerindeki enerji özdeğerleri.

Durumlar	$\sigma = 0.1$	
	NU Metot ile bulunan enerji özdeğerleri (eV)	AIM Metot ile bulunan enerji özdeğerleri (eV)
n=1	4.3644	4.3644
n=2	5.7733	5.7733
n=3	6.6550	6.6550
n=4	7.2258	7.2258

KAYNAKLAR

1. Infeld, L., Hull, T.E., The Factorization method, Rev. Mod. Phys., 21- 23, 1951.
2. Qiang, W. C. , Dong, S. H. , Arbitrary l-state solutions of the rotating Morse potential through the exact quantization rule method, Phys. Lett. A, 363, 169-177, 2007.
3. Bayrak, O., Kocak, G., Boztosun, I. , Any l-state solutions of the Hulthen potential by the asymptotic iteration method, J. Phys : Math. Gen., 39, 11521-11529, 2006.
4. Aktas, M., Sever, R., Exact Supersymmetric Solution of Schrödinger Equation for central confining Potentials by using the Nikiforov-Uvarov Method, J.Molec.Struc. 710-719 2004.
5. Bransden, B.H., Joachain, C.J. , Physics of Atomic and Molecular
6. Grenier, W., Relativistic Quantum Mechanics Wave Equations, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
7. Serway, R.A., Physics for Scientist and Engineers, Sounders Golden sunburst series, 1992.
8. D. Schröberg, Mol. Phys. 59, 1123-1135, 1986.
9. Ciftci, H., et al., Asymptotic Iteration Method for Eigenvalue Problems, J. Phys, A: Math. Gen., 36, 2003.
10. Ciftci, H., et al., Consruction of Exact Solutions to the Eigenvalue Problems by the Asymptotic Iteration Method., J. Phys. A. 38, 2005.
11. Bayrak, O., et al., Exact Analytical Solutions to the Kratzer Potential by the Asymptotic Iteration Method, International Journal of Quantum Chemistry 107, pp. 540-544, 2007.
12. Bayrak, O., et al., Analytical Solutions to the Huthén and the Morse Potentials by Using the Asymptotic Iteration Method, Journal of Molecular Structure: Theochem 802, pp. 17-21, 2006.
13. Bayrak, O., Boztosun, İ., Arbitrary l-state solutions of the rotating Morse potential by the asymptotic iteration method, J.Phys.A39:6955-6964,2006.

14. Nikiforov, A.F., Uvarov, V.B., *Special Functions of Mathematical Physics*, Birkhauser, Basel, 1988.
15. Aktas, M., Sever, R., Exact Solution of Schrodinger Equation with Deformed Ring- Shaped Potential, *J. Phys. Math. Chem.* 37(2), 2005.
16. Egrifes, H., Demirhan, D., Buyukkılıç, F., Polynomial Solutions of the Schrödinger Equation the "Deformed" Hyperbolic Potentials by Nikiforov–Uvarov Method, F., *Phys Scripta* 59, pp. 90, 1999.
17. Yasuk, F., Berkdemir, C., Berkdemir, A., Exact Solutions of the Schrödinger Equation with Non-Central Potential by the Nikiforov-Uvarov Method, *J. Phys. A: Math. Gen.* 38, pp. 6579, 2005.
18. Berkdemir, C., Berkdemir, A., Han, J., Bound State Solutions of the Schrödinger Equation for Modified Kratzer’s Molecular Potential *Chem. Phys. Lett.* 417, pp. 326, 2006.
19. Sameer, M.I., Sever, R., Exact Solutions of the Pseudo-Coulomb Potential Plus Ring- Shaped Potential in the D-Dimensional Schrödinger Equation by the Nikiforov-Uvarov Method, *quant-ph/073042V1*, 2007.
20. Yasuk, F., Boztosun, I., Durmus A., Orthogonal Polynomial Solutions to the Non-Central Modified Kratzer Potential, *quant-ph/0605007V3*, 2007.
21. Göküzüm, B., Manyetik Alanda Hareket Eden Yüklü Bir Parçacığın Hareket Denklemleri Yüksek Lisans Tezi, Erciyes Üniversitesi, Kayseri, 2007
22. Dong, S., Garcia-Ravelo, J., Analytical approximations to the solutions of the hyperbolic molecular potential with centrifugal term, *Quantum Physics/03.65.Ge,34.20.Cf*.
23. Boztosun, I.,Caner, T., Mesh- Free Radial Basis Functions Method for the Accurate Numerical Solution of the Radial Schrödinger Equation: I- Bound States, *AIP conf. Proc.* 1072-1075, 2008.

ÖZGEÇMİŐ

İsmail ERMİŐ, 1982 yılında Kayseri’de doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Kayseri’de tamamladı. 2000’de kazandıđı Erciyes Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünden 2004 yılında mezun oldu. 2006 yılında Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Ana Bilim Dalında Yüksek Lisansa başladı. 2005 yılından bu yana özel bir eğitim kurumunda Fizik Öğretmeni olarak görev yapmaktadır.

Adres: Gültepe Mah. Kaşaltı Sok. Eylül Apt. No: 14/18

Telefon: 0 505 575 56 36

E-posta: iermis@hotmail.com