



**T.C.
ERCIYES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**N-BOYUTTA SPİN-0 VE SPİN-1/2 PARÇACIKLARIN
RELATİVİSTİK DAVRANIŞLARINA MERKEZCİL
OLMAYAN POTANSİYELLERİN ETKİSİ**

**Hazırlayan
Aysel ÖZFİDAN**

**Danışman
Doç. Dr. Ayşen DURMUŞ**

Doktora Tezi

**Mayıs 2018
KAYSERİ**

**T.C.
ERCIYES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**N-BOYUTTA SPİN-0 VE SPİN-1/2 PARÇACIKLARIN
RELATİVİSTİK DAVRANIŞLARINA MERKEZCİL
OLMAYAN POTANSİYELLERİN ETKİSİ
(Doktora Tezi)**

**Hazırlayan
Aysel ÖZFİDAN**

**Danışman
Doç. Dr. Ayşen DURMUŞ**

**Bu çalışma, Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi
tarafından FDK-2017-7161 kodlu proje ile desteklenmiştir.**

**Mayıs 2018
KAYSERİ**

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK

Bu çalışmadaki tüm bilgilerin, akademik ve etik kurallara uygun bir şekilde elde edildiğini beyan ederim. Aynı zamanda bu kural ve davranışların gerektirdiği gibi, bu çalışmanın özünde olmayan tüm materyal ve sonuçları tam olarak aktardığımı ve referans gösterdiğimi belirtirim.

A.Özfıdan

Aysel ÖZFİDAN

“N-Boyutta Spin-0 ve Spin-1/2 Parçacıkların Relativistik Davranışlarına Merkezil Olmayan Potansiyellerin Etkisi” adlı Doktora tezi, Erciyes Üniversitesi Lisansüstü Tez Önerisi ve Tez Yazma Yönergesi’ ne uygun olarak hazırlanmıştır.

A.Özfıdan

Hazırlayan

Aysel ÖZFİDAN



Danışman

Doç. Dr. Ayşen DURMUŞ



Fizik ABD Başkanı

Prof. Dr. Mustafa GENÇASLAN

Doç. Dr. Ayşen DURMUŞ danışmanlığında **Aysel ÖZFİDAN** tarafından hazırlanan **“N-Boyutta Spin-0 ve Spin-1/2 Parçacıkların Relativistik Davranışlarına Merkezci Olmayan Potansiyellerin Etkisi”** adlı bu çalışma, jürimiz tarafından Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü **Fizik** Anabilim Dalında **Doktora** tezi olarak kabul edilmiştir.

04.05.2018

JÜRİ:

Başkan: Prof. Dr. Fevziye YAŞUK

Üye : Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN

Üye : Doç. Dr. Evren MUTLUGÜN

Üye : Doç. Dr. Ayşen DURMUŞ

Üye : Doç. Dr. Mehmet ERTAŞ

ONAY:

Bu tezin kabulü, Enstitü Yönetim Kurulunun 15/05/2018 tarih ve 2018/21-09 sayılı kararı ile onaylanmıştır.


15/05/2018

Prof. Dr. Mehmet AKKURT
Enstitü Müdürü

ÖNSÖZ/TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca emek ve yardımlarını esirgemeyen, bilgi birikimi ve tecrübeleriyle beni aydınlatan saygıdeğer hocam Doç. Dr. Ayşen DURMUŞ'a ve tez izleme komite üyeleri değerli hocalarım Prof. Dr. Fevziye YAŞUK ve Doç. Dr. Mehmet ERTAŞ'a en içten dileklerle teşekkürlerimi sunarım.

Doktora öğrenimim süresince sağladıkları burstan dolayı Türk Eğitim Vakfı'na teşekkürü bir borç bilirim.

Tez çalışması süresince FDK-2017-7161 kodlu proje kapsamında sağladığı destekten dolayı Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimine teşekkür ederim.

Hayatımın her aşamasında desteklerini esirgemeyen ve bu günlere gelmemde sonsuz payı olan canım aileme minnet ve şükranlarımı sunarım.

Aysel ÖZFİDAN

Mayıs 2018, KAYSERİ

N-BOYUTTA SPİN-0 VE SPİN-1/2 PARÇACIKLARIN RELATİVİSTİK DAVRANIŞLARINA MERKEZCİL OLMAYAN POTANSİYELLERİN ETKİSİ

Aysel ÖZFİDAN

Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü

Doktora Tezi, Mayıs 2018

Danışman: Doç. Dr. Ayşen DURMUŞ

ÖZET

N-boyutta küresel simetrik olmayan alanda hareket eden spin-0 ve spin-1/2 parçacıklar için relativistik dalga denklemlerinin analitik çözümleri asimptotik iterasyon metodu ve kuantum Hamilton-Jacobi formalizmi ile araştırıldı. Yüksek küresel koordinatlarda, Hartmann potansiyeli için Klein-Gordon denkleminin çözümleri asimptotik iterasyon metodu (AİM) çerçevesinde elde edildi. Merkezci olmayan potansiyel alandaki hidrojen molekülünün açısal olasılık dağılımları N-boyutta kapsamlı olarak incelendi. Aynı zamanda, relativistik teoride Hartmann potansiyeli için N-boyutta radyal beklenen değerler bulundu. Yüksek küresel koordinatlarda, merkezci olmayan Morse ve merkezci olmayan Manning-Rosen potansiyelleri ile etkileşen spin-0 parçacıkları için relativistik dönme-titreşim enerjileri, normalize dalga fonksiyonları AİM ile elde edildi. Merkezci olmayan Morse potansiyelini kullanarak modellenen toprak alkali iki atomlu moleküllerin relativistik titreşim frekansları hesaplandı ve elde edilen sonuçlar Rydberg-Klein-Rees (RKR) deneysel verileriyle karşılaştırıldı. Farklı boyutlu sistemlerde, Manning-Rosen potansiyeli için relativistik olmayan enerji özdeğerlerinin nümerik değerleri verildi. Diğer taraftan, N-boyutta double ring-shaped Kratzer ve Makarov potansiyelleri için spin simetri durumunda Dirac denkleminin bağlı durum çözümleri kuantum Hamilton-Jacobi formalizmiyle incelendi. Double ring-shaped Kratzer potansiyeli için bağlı durum relativistik enerjileri üzerinde açığa bağlı potansiyel parametrelerinin etkisi araştırıldı. Merkezci olmayan potansiyel alanda, iki atomlu moleküller için relativistik dalga fonksiyonları üzerinde boyutun etkisi tartışıldı. Makarov potansiyeli etkisindeki spin-1/2 parçacığın küresel ve kutupsal koordinatlarda açısal dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları üç ve beş boyutlu sistemlerde incelendi.

Anahtar Kelimeler: Merkezci olmayan potansiyeller, Yüksek küresel koordinatlar, Asimptotik iterasyon metodu, Kuantum Hamilton-Jacobi formalizmi, Dirac denklemi, Klein-Gordon denklemi, Açısal Olasılık Dağılımları, İki atomlu moleküller

EFFECT OF NON-CENTRAL POTENTIALS TO RELATIVISTIC BEHAVIOURS OF SPIN-0 AND SPIN-1/2 PARTICLES IN N-DIMENSIONAL

Aysel ÖZFİDAN

Erciyes University, Graduate School of Natural and Applied Sciences

Ph.D. Thesis, May 2018

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Ayşen DURMUŞ

ABSTRACT

Analytical solutions of relativistic wave equations for spin-0 and spin-1/2 particles moving in N-dimensional spherically non-symmetrical field are investigated with asymptotic iteration method and quantum Hamilton-Jacobi formalism. Solutions of Klein-Gordon equation for Hartmann potential in hyperspherical coordinates are obtained within the framework of asymptotic iteration method (AIM). The angular probability distributions of hydrogen molecule in non-central potential field in N-dimensions are examined in detail. N-dimensional radial expectation values for Hartmann potential are also found in relativistic theory. In hyperspherical coordinates, relativistic rovibrational energies, the normalized wavefunctions for spin-0 particles interacting with non-central Morse and non-central Manning-Rosen potentials are obtained with AIM. Relativistic vibrational frequencies of the alkaline earth diatomic molecules modeled with non-central Morse potential are calculated and the results are compared with the Rydberg-Klein-Rees (RKR) data. Numerical calculations of non-relativistic energy eigenvalues for Manning-Rosen potential in different dimensional systems are introduced. On the other hand, bound state solutions of the Dirac equation under condition of spin symmetry for double ring-shaped Kratzer and Makarov potentials in N-dimensions are investigated via quantum Hamilton-Jacobi formalism. The influence of the angle-dependent potential parameters on the bound state relativistic energies are probed for double ring-shaped Kratzer potential. The effect of dimension on the relativistic wavefunctions for diatomic molecules in non-central potential field are discussed. Angular probability distributions in spherical and polar coordinates of spin-1/2 particle in the presence of Makarov potential are investigated in three and five dimensional systems.

Keywords: Non-central potentials, Hyperspherical coordinates, Asymptotic iteration method, Quantum Hamilton-Jacobi formalism, Dirac equation, Klein-Gordon equation, Angular probability distributions, Diatomic molecules

İÇİNDEKİLER

N-BOYUTTA SPİN-0 VE SPİN-1/2 PARÇACIKLARIN RELATİVİSTİK DAVRANIŞLARINA MERKEZCİL OLMAYAN POTANSİYELLERİN ETKİSİ

Sayfa

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK.....	i
YÖNERGEYE UYGUNLUK SAYFASI.....	ii
KABUL VE ONAY.....	iii
ÖNSÖZ / TEŞEKKÜR.....	iv
ÖZET.....	v
ABSTRACT.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	xi
TABLolar LİSTESİ.....	xii
GİRİŞ.....	1

1. BÖLÜM

METODLAR VE MATEMATİKSEL ARAÇLAR

1.1. Asimptotik İterasyon Metodu.....	9
1.2. Kuantum Hamilton-Jacobi Yöntemi.....	11
1.3. Yüksek Küresel Koordinatlarda Gradyent Operatörünün Elde Edilmesi. .	13
1.4. Yüksek Küresel Koordinatlarda Laplasyen Operatörünün Elde Edilmesi	15

2. BÖLÜM

YÜKSEK KÜRESEL KOORDİNATLARDA MERKEZCİL OLMAYAN POTANSİYELLERİN ETKİSİNDEKİ SPİN-0 PARÇACIK İÇİN KLEİN-GORDON DENKLEMİ

2.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Klein-Gordon Denkleminin Elde Edilmesi .	19
2.2. Asimptotik İterasyon Metodu İle Hartmann Potansiyeli İçin N-Boyutta Klein-Gordon Denkleminin Analitik Çözümleri.	21
2.2.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısal Klein-Gordon Denkleminin Bağlı Durum Çözümleri.	21
2.2.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Klein-Gordon Denkleminin Bağlı Durum Çözümleri.	26
2.2.3. N-Boyutta Radyal Beklenen Değerler.	31
2.2.4. Hidrojen Molekülü İçin Relativistik Enejinin Nümerik Hesaplamaları. . .	34
2.2.5. Farklı Boyutlar İçin Küresel ve Kutupsal Koordinatlarda Açısal Dalga Fonksiyonlarının Olasılık Dağılımları.	35
2.3. Asimptotik İterasyon Metodu İle Merkezci Olmayan Morse Potansiyeli İçin N-Boyutta Klein-Gordon Denkleminin Yaklaşık Çözümleri.	40
2.3.1. Merkezci Olmayan Potansiyel İçin Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısal Klein-Gordon Denkleminin Çözümleri.	43
2.3.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Klein-Gordon Denkleminin Yaklaşık Çözümleri.	47
2.3.3. Toprak Alkali Metal İki Atomlu Moleküllerin Relativistik Titreşim Frekansları.	52
2.4. Asimptotik İterasyon Metodu İle Merkezci Olmayan Manning-Rosen Potansiyeli İçin N-Boyutta Klein-Gordon Denkleminin Yaklaşık Çözümleri .	57
2.4.1. Merkezci Olmayan Potansiyel İçin Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısal Klein-Gordon Denkleminin Çözümleri	58
2.4.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Klein-Gordon Denkleminin Yaklaşık Çözümleri.	62

2.4.3. Manning-Rosen Potansiyeli İçin Farklı Boyutlarda Enerjinin Nümerik Değerleri.	68
---	----

3. BÖLÜM

YÜKSEK KÜRESEL KOORDİNATLARDA MERKEZCİL OLMAYAN POTANSİYELLERİN ETKİSİNDEKİ SPİN-1/2 PARÇACIK İÇİN DİRAC DENKLEMİ

3.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Spin Simetri Durumunda Dirac Denkleminin Elde Edilmesi.	74
3.2. Kuantum Hamilton-Jacobi Yöntemi İle Double Ring-shaped Kratzer Potansiyeli için N-Boyutta Spin Simetri Durumunda Dirac Denkleminin Çözümleri.	78
3.2.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Spin Simetri Durumunda Relativistik Enerji Spektrumu.	79
3.2.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Dalga Fonksiyonu.	84
3.2.3. Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısız Dalga Fonksiyonu.	87
3.2.4. Double Ring-Shaped Kratzer Potansiyeli İçin Spin Simetri Durumunda Enerjinin Nümerik Değerleri.	91
3.2.5. İki Atomlu Moleküller İçin Relativistik Enerji Spektrumunun Nümerik Değerlerinde ve Relativistik Dalga Fonksiyonlarında Boyutun Etkisi. ...	93
3.3. Kuantum Hamilton-Jacobi Yöntemi İle Makarov Potansiyeli için N-Boyutta Spin Simetri Durumunda Dirac Denkleminin Çözümleri.	101
3.3.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Enerji Spektrumu ve Dalga Fonksiyonu.	102
3.3.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısız Enerji Spektrumu ve Dalga Fonksiyonu.	104
3.3.3. N-Boyutta Makarov Potansiyeli İçin Spin Simetri Durumunda Relativistik Enerji Spektrumu.	108
3.3.4. Küresel ve Kutupsal Koordinatlarda Açısız Dalga Fonksiyonlarının Olasılık Dağılımları.	109

4. BÖLÜM

SONUÇ-TARTIŞMA VE ÖNERİLER

Sonuç-Tartışma ve Öneriler.....	112
KAYNAKLAR.....	115
ÖZGEÇMİŞ.....	127



ŞEKİLLER LİSTESİ

- Şekil 2.1. Çekici bölgede H_2 molekülü için Hartmann potansiyelinin yüzey grafiği 21
- Şekil 2.2. (a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 3$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısıl dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları..... 36
- Şekil 2.3. (a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 4$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısıl dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları..... 37
- Şekil 2.4. (a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 5$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısıl dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları..... 38
- Şekil 2.5. Merkezci olmayan Morse potansiyeli etkisindeki $Ca_2 X^1\Sigma^+$ molekülü için yüzey grafiği (a) $\eta = \beta = \gamma = 1 eVA^{0.2}$ (b) $\eta = \beta = \gamma = 10^{-6} eVA^{0.2}$ 40
- Şekil 2.6. Merkezci olmayan Morse potansiyeli etkisindeki $MgCa X^1\Sigma^+$ molekülü için yüzey grafiği (a) $\eta = \beta = \gamma = 1 eVA^{0.2}$ (b) $\eta = \beta = \gamma = 10^{-6} eVA^{0.2}$ 41
- Şekil 2.7. Merkezci olmayan Morse potansiyeli etkisindeki $Sr_2 X^1\Sigma^+$ molekülü için yüzey grafiği (a) $\eta = \beta = \gamma = 1 eVA^{0.2}$ (b) $\eta = \beta = \gamma = 10^{-6} eVA^{0.2}$ 41
- Şekil 2.8. Merkezci olmayan Morse potansiyeli etkisindeki $Sr_2 A^1\Sigma^+$ molekülü için yüzey grafiği (a) $\eta = \beta = \gamma = 1 eVA^{0.2}$ (b) $\eta = \beta = \gamma = 10^{-6} eVA^{0.2}$ 42
- Şekil 2.9. Toprak alkali metal iki atomlu moleküller için Pekeris yaklaşımının analizi..... 48
- Şekil 2.10. Merkezci olmayan Manning-Rosen potansiyelinin yüzey grafiği..... 58
- Şekil 2.11. Farklı σ değerleri için Greene-Aldrich yaklaşımının analizi..... 63
- Şekil 3.1. $NaH X^1\Sigma^+$ molekülü için double ring-shaped Kratzer potansiyelinin yüzey grafiği..... 78
- Şekil 3.2. $MgH X^2\Sigma^+$ molekülü için double ring-shaped Kratzer potansiyelinin yüzey grafiği..... 79

Şekil 3.3.	HI $a^3\Sigma^+$ molekülü için double ring-shaped Kratzer potansiyelinin yüzey grafiği.....	79
Şekil 3.4.	HI $a^3\Sigma^+$ molekülü için radyal dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi	94
Şekil 3.5.	HI $a^3\Sigma^+$ molekülü için açısall dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi.	95
Şekil 3.6.	NaH $X^1\Sigma^+$ molekülü için radyal dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi.....	96
Şekil 3.7.	NaH $X^1\Sigma^+$ molekülü için açısall dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi.....	98
Şekil 3.8.	MgH $X^2\Sigma^+$ molekülü için radyal dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi.....	99
Şekil 3.9.	MgH $X^2\Sigma^+$ molekülü için açısall dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi.....	100
Şekil 3.10.	(a) Çekici bölgede (b) İtici bölgede Makarov potansiyelinin yüzey grafiği.....	102
Şekil 3.11.	(a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 3$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısall dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları.....	109
Şekil 3.12.	(a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 5$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısall dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları.....	110

TABLOLAR LİSTESİ

Tablo 2.1.	Hartmann potansiyeli etkisindeki H_2 molekülü için farklı boyutlarda hesaplanan relativistik enerji değerleri.....	34
Tablo 2.2.	$n = 1, l_1 = 0$ durumunda H_2 molekülü için üç, dört ve beş boyutlu relativistik dönme-titreşim enerjilerinin nümerik değerleri	34
Tablo 2.3.	$N = 3$ için Jacobi polinomları.....	35
Tablo 2.4.	$N = 4$ için Jacobi polinomları.....	35
Tablo 2.5.	$N = 5$ için Jacobi polinomları.....	35
Tablo 2.6.	İki atomlu moleküllerin spektroskopik sabitleri.....	42
Tablo 2.7.	İki atomlu moleküller için potansiyel parametre sabitleri.....	53

Tablo 2.8. $Ca_2 X^1\Sigma^+$ molekülü için teorik relativistik titreşim frekansları ve deneysel RKR değerleri.....	54
Tablo 2.9. $Sr_2 X^1\Sigma^+$ molekülü için teorik relativistik titreşim frekansları ve deneysel RKR değerleri.....	55
Tablo 2.10. $Sr_2 A^1\Sigma^+$ molekülü için teorik relativistik titreşim frekansları ve deneysel RKR değerleri.....	56
Tablo 2.11. $MgCa X^1\Sigma^+$ molekülü için teorik relativistik titreşim frekansları ve deneysel RKR değerleri.	57
Tablo 2.12. N=2 için farklı kuantum durumlarında titreşim-dönme enerjisinin ($-E_{n,l}$) (a.b.) hesaplanan değerleri	69
Tablo 2.13. N=4 için farklı kuantum durumlarında titreşim-dönme enerjisinin ($-E_{n,l}$) (a.b.) hesaplanan değerleri	69
Tablo 2.14. N=3 ve $\sigma = 0.75$ için farklı kuantum durumlarında titreşim-dönme enerjisinin ($-E_{n,l}$) (a.b.) hesaplanan değerleri	70
Tablo 2.15. N=3 ve $\sigma = 1.50$ için farklı kuantum durumlarında titreşim-dönme enerjisinin ($-E_{n,l}$) (a.b.) hesaplanan değerleri	71
Tablo 2.16. 2p, 3p, 4p ve 3d durumlarında $\langle r^{-2} \rangle$ (a.b.)'nin nümerik değerleri...	73
Tablo 3.1. Double ring-shaped Kratzer potansiyeli için spin simetri durumunda relativistik enerji özdeğerleri (fm^{-1}).....	91
Tablo 3.2. Double ring-shaped Kratzer potansiyeli için spin simetri durumunda relativistik enerji özdeğerleri (fm^{-1}).....	92
Tablo 3.3. İki atomlu moleküllerin spektroskopik parametreleri	93
Tablo 3.4. İki atomlu moleküllerin üç ve beş boyutta hesaplanan relativistik enerji değerleri	93
Tablo 3.5. İki atomlu moleküllerin relativistik dönme-titreşim enerji değerleri ...	94

GİRİŞ

Bir parçacık kuvvetli bir potansiyel alanda hareket ettiği zaman relativistik etkiler ortaya çıkar. Relativistik etkiler hesaba katılırsa parçacığın hareketi Klein-Gordon, Dirac ve Duffin-Kemmer-Petiau dalga denklemleriyle tanımlanır [1]. Klein-Gordon dalga denklemi ilk olarak 1926 yılında Klein [2], Fock [3] ve Gordon [4] tarafından yazıldı. Pion, mezon ve kaon gibi spin-0 mikroskobik parçacıkların davranışını tanımlamak için bu relativistik dalga denklemi kullanılır. Dirac [5], elektronların ve diğer spin-1/2 parçacıkların özelliklerini tanımlayan relativistik dalga denklemini 1928’de önerdi. Dirac dalga denklemi relativistik kuantum mekaniğinde en sık kullanılan denklemdir. Bu denklemin fizik ve matematiği oldukça kapsamlıdır. Dirac denklemi relativistik olmayan durumda açıklanamayan farklı fiziksel olayları aydınlatmıştır. Bu denklem, parçacıkta spinin varlığını ortaya koymuştur. Aynı zamanda, Dirac dalga denklemi sayesinde modern teorik fiziğin en büyük başarılarından biri olan pozitronun keşfinden önce varlığı öngörülmüştür. Duffin-Kemmer-Petiau [6-9] dalga denklemi spin-0 ve spin-1 parçacıkların hareketini tanımlamaktadır.

Atom ve moleköl fiziği, kuantum optiği, katıhal fiziği ve nükleer fizik gibi alanlarda N boyutlu uzayda fiziksel problemleri ele almak önemlidir. Yüksek koordinatlarda dalga denklemleri hakkında yapılan tüm çalışmalar genelleştirilmiş yörüngesel açısal momentuma dayandırılır. İlk olarak Louck, tam çözülebilir model olan harmonik osilatör potansiyel ile çalıştı [10-12]. Aslında, bu genelleme Appel, Fock, Bargmann, Sommerfeld gibi birçok araştırmacı tarafından yapılan daha önceki çalışmalara dayanmaktadır [13-16]. Louck’ın çalışmalarını takiben, de Broglie ve çalışma arkadaşları [17], daha yüksek boyutlu harmonik osilatör ve moleküler titreşimi analiz etmek için temel olarak yüksek küresel harmonikleri önerdi. Bu çalışmada, Minkowski uzayında relativistik genişletilmiş yapılar olarak temel parçacıkların döndürücü modelini göz önüne aldılar. Bu varsayımın altında “temel parçacıklar nokta benzeri yapıda değildir bundan ziyade Minkowski uzayında genişletilmiş yapıdadırlar” prensibi bulunmaktadır.

İki yıl sonra Granzow [18], N-boyutlu uzayda ortogonal kutupsal koordinat sistemleri üzerine çalışmasını yayınladı ve toplam yörüngesel açısal momentum operatörü için tam ve açık gösterimleri çalışmasında açıkladı. Aynı zamanda, çalışmasında kutupsal koordinattan kartezyen koordinata dönüşümü ispatladı ve kartezyen koordinatta x^n terimini kuantum sisteminde dalga fonksiyonu olarak yorumladı. Çalışmaları genelleştirilmiş açısal momentum teorisine dayanan Bergmann ve Frishman [19], dalga denklemleri ve dalga fonksiyonları üzerinde temel dönüşümler yaparak hidrojen atomu ve harmonik osilatör arasında ilişki kurdular. Cizek, Paldus, Kosteletzky'nin ve daha birçok araştırmacının çalışmalarında vardıkları sonuç N-boyutta çalışmak gerçek fiziksel sistemleri tanımlamak için çok önemlidir [20]. Bu nedenle fiziksel problemlerin N-boyutlu uzayda incelenmesi fiziğin birçok alanında önemli rol oynar.

Merkezcil olmayan potansiyeller fizik ve kimyanın birçok alanında önemli rol oynamaktadır. Küresel simetrik olmayan sistemlerin kuantum dinamiğini açıklamak için bu potansiyeller yardımcı olur. Elde edilen sonuçlar kullanılarak gerçek fiziksel sistemlerin enerji spektrumu bulunur. Merkezcil olmayan potansiyeller nanoyapılar ve saçılma teorisi, benzen gibi halka şeklinde moleküllerin incelenmesi, katıların yapısal özelliklerinin anlaşılması, çok bileşenli metalik camların yapısal ve dinamik özelliklerini tanımlayan modellerin geliştirilmesinde çalışılır [21-26]. Fiziksel öneminden dolayı bu potansiyeller için relativistik dalga denklemlerinin analitik çözümleri teorik fizikçilere katkı sağlamaktadır.

Kuantum mekaniğinde tam olarak çözülebilen potansiyellerden biri olan Hartmann potansiyeli, halkalı polien ve benzen gibi molekülleri çalışmak için 1972'de önerildi [27]. Böylece, birçok araştırmacı Hartmann moleküler potansiyel üzerine çalışmaya yöneldi. Literatürde, bu potansiyel için relativistik olmayan enerji seviyeleri standart metodla elde edilmiştir [28]. Sonra, bu metodun dışında path integral yaklaşımı [29-30], süpersimetri ve ayar değişmezliği [31-33], Kustaanheimo-Steifel (KS) dönüşümü [34-35] ve dinamik grup teori yöntemiyle [36-39] çözümler üzerine çalışılmıştır. Aynı zamanda, Hartmann potansiyeli etkisindeki bir parçacık için üç boyutta relativistik bağlı ve saçılma durumlarında çözümler mevcuttur [40-42]. N-boyutta Hartmann potansiyeli için Schrödinger denkleminin çözümleri asimptotik iterasyon metoduyla Durmuş ve Özfidan [43] tarafından elde edildi. Bu tez çalışmasında, N-boyutta Hartmann potansiyel etkisindeki spin-0 parçacık için skaler ve vektör potansiyellerinin eşit olduğu durumda

çözümler aynı metodla araştırıldı. 1973 yılında, Hautot [44] çalışmasında bir grup merkezci olmayan potansiyel önerdi. Daha sonra, bu çalışmadaki potansiyellerin üç boyutta relativistik olmayan [45] ve relativistik [46-50] dalga denklemlerinin çözümleri yapılmıştır. Bu çalışmada ise Hautot'un önerdiği potansiyellerden ikisi ele alınarak N-boyutta Klein-Gordon denkleminin çözümleri incelendi. Makarov potansiyeli 1967'de önerildi [51]. Bu potansiyel genel bir potansiyeldir. Bundan dolayı, potansiyeldeki parametrelerin özel durumlarının alınmasıyla Coulomb, Aharonov-Bohm ve Hartmann potansiyeli elde edilir. Literatürde, bu potansiyel için küresel koordinatlarda relativistik olmayan dalga denklemlerinin çözümleri Nikiforov-Uvarov [52-53], süpersimetri ve ayar değişmezliği [54], Laplace dönüşümü [55] ve asimptotik iterasyon yöntemiyle [56] çalışılmıştır. Diğer taraftan, üç boyutta relativistik parçacık için enerji spektrumu faktörizasyon metodu [57], Nikiforov-Uvarov [58-59] ve Laplace dönüşümü [60] ile elde edilmiştir. Aynı zamanda, kuantum Hamilton-Jacobi yöntemiyle skaler ve vektör potansiyellerinin eşit olduğu koşulda küresel koordinatlarda Makarov potansiyeli için Dirac denklemi çözülmüştür [61]. N-boyutta Makarov potansiyeli etkisindeki relativistik olmayan parçacık için çözümler asimptotik iterasyon metoduyla Durmuş ve Özfidan [43] tarafından elde edilmiştir. Bu çalışmada ise, yüksek küresel koordinatlarda Makarov potansiyeli için spin simetri durumunda Dirac denkleminin çözümü kuantum Hamilton-Jacobi formalizmiyle incelendi.

Kratzer potansiyeli 1920'de Kratzer tarafından önerildi [62]. Bu potansiyel, kuantum kimyasında iki atomlu moleküllerin yapılarının ve etkileşimlerinin tanımlanmasında önemli olduğundan dolayı birçok çalışmada ele alınmıştır [63-68]. Literatürde, double ring-shaped Kratzer potansiyeli için küresel koordinatta çalışmalar mevcuttur. Durmuş ve Yaşuk [63] bu potansiyel için Klein-Gordon ve Schrödinger denkleminin çözümlerini AİM, Arda ve Sever [55] Schrödinger denkleminin çözümlerini Laplace dönüşümü, Oyewumi ve arkadaşları [69] spin ve pseudospin simetri durumunda Dirac denkleminin çözümlerini AİM, Kasri ve Chetouani [70] Schrödinger denkleminin çözümlerini tam kuantumlanma yöntemi ile elde etti. Gharbi ve çalışma arkadaşları [71], double ring-shaped Kratzer potansiyeli için küresel koordinatta Klein-Gordon denkleminin çözümlerini kuantum Hamilton-Jacobi yöntemi kullanarak buldu. Bu çalışmada da, aynı potansiyel için N-boyutta spin simetri durumunda Dirac denkleminin çözümleri kuantum Hamilton-Jacobi yöntemiyle araştırıldı.

Moleküller arasındaki titreşim hareketi yay benzeri geri çağırıcı kuvvet özelliği gösterip Hooke kanunuyla açıklanır. Fakat, bu varsayım denge konumundan küçük yerdeştirmeler söz konusu olduğunda geçerlidir. İki atomlu moleküllerin gerçek davranışı tam olarak harmonik değildir. Bundan dolayı, r 'nin büyük değerlerinde moleküller ayrışır, birbirlerinden etkilenmezler ve kuvvet sabiti sıfır olur. Potansiyel enerjide değişim olmadan r sonsuza doğru arttırılabilir. Böylece, potansiyel enerji eğrisi ayrışma enerjisi potansiyele eşit olduğunda düzleşir. Ayrışma enerjisi, kuvvet sabiti sıfıra yaklaştığında moleküller arasındaki bağ gittikçe zayıflar. Bu durumda en uygun modelleme harmonik olmayan Morse potansiyel fonksiyonuyla yapılır. Bu nedenle, moleküler fizikte temel oluşturan Morse potansiyeli birçok çalışmada araştırmacılar tarafından ele alınmıştır [72-76]. Bu potansiyel Morse tarafından 1929'da önerildi [77]. Morse potansiyeli faktörizasyon metodu [78-81], süpersimetri yaklaşımı [82-83], Green fonksiyon yaklaşımı [84] gibi farklı metodlar kullanılarak çözülebilmektedir. Morse potansiyeli için $l = 0$ durumunda Schrödinger denkleminin çözümleri elde edilmiştir [85-86]. Fakat $l \neq 0$ durumu karmaşık olduğundan dolayı dalga denklemi sadece pertürbasyon ve yaklaşım yapılarak çözülebilir. Relativistik veya non-relativistik dalga denklemini çözmek için en iyi yaklaşımlardan biri Pekeris metodudur. Bu metod, 1934'te Pekeris tarafından önerildi [87]. Morse potansiyeli için N-boyutta Schrödinger denklemi seriler [88], Laplace dönüşümü [89] ve N-boyutta Klein-Gordon denklemi [90] ile çözümleri mevcuttur. Aynı zamanda, üç boyutta relativistik ve non-relativistik dalga denklemlerinin çözümleri asimptotik iterasyon metoduyla incelenmiştir [91-94]. Bu tez çalışmasında, Morse potansiyeli için yüksek küresel koordinatlarda Klein-Gordon denkleminin yaklaşık çözümleri asimptotik iterasyon metoduyla elde edildi. Bu çalışmada ele alınan bir diğer merkezci potansiyel Manning-Rosen potansiyelidir. Bu potansiyel, 1932'de Manning-Rosen tarafından önerildi [95-96]. Üstel fonksiyonlu potansiyel varlığında Klein-Gordon denklemi $l = 0$ olduğunda analitik olarak çözülebilir [97-98]. Fakat, herhangi bir l durumunda yaklaşım kullanmadan denklemi çözmek mümkün değildir. Bu nedenle, relativistik dalga denklemini çözmek için Greene-Aldrich [99] yaklaşımı kullanılır. Literatürde, Manning-Rosen potansiyeli için yüksek küresel koordinatlarda Schrödinger denkleminin çözümleri Nikiforov-Uvarov [100], kuantumlanma metodu [101]; küresel koordinatlarda Schrödinger denkleminin çözümleri standart metod [102-104], Nikiforov-Uvarov [105-107], GPS [108], AIM [109] ve Klein-Gordon denkleminin çözümleri [110] mevcuttur. Bu çalışmada ise

Manning-Rosen potansiyeli için N -boyutta Klein-Gordon denkleminin çözümleri aynı metodla elde edildi. Manning-Rosen potansiyeli Hulthén potansiyeline indirgenmektedir. Böylece, Hulthén potansiyeli etkisindeki spin-0 parçacık için N boyutlu relativistik bağlı durum çözümleride bulundu.

Bu tez çalışmasında, farklı potansiyeller için çözümlerin elde edilmesinde kullanılan yöntemlerden biri asimptotik iterasyon metodudur. Bu yöntem, ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklemleri çözmek için Çiftçi ve arkadaşları tarafından önerilmiştir [111-114]. Asimptotik iterasyon yöntemi, merkezcil ve merkezcil olmayan potansiyellerle etkileşen relativistik ve relativistik olmayan parçacıklar için çözümlerin etkin ve sistematik olarak elde edilebilmesinde yardımcı olmaktadır. Yüksek küresel koordinatlarda Hartmann potansiyeli, merkezcil olmayan Morse ve merkezcil olmayan Manning-Rosen potansiyeli etkisindeki spin-0 parçacık için Klein-Gordon dalga denkleminin çözümleri bu yöntemle araştırıldı. Diğer taraftan, yüksek küresel koordinatlarda double ring-shaped Kratzer ve Makarov potansiyeli için spin simetri durumunda Dirac dalga denkleminin çözümleri Leacock ve Padgett [115-116] tarafından önerilen kuantum Hamilton-Jacobi yöntemiyle incelendi. Bu formalizm, kuantum mekaniğinde tam olarak çözülebilen potansiyellerin enerji spektrumunu belirlemek için kullanılan etkin bir yöntemdir. Bir boyutlu [117-118], iki boyutlu merkezcil potansiyeller [119], merkezcil olmayan potansiyeller [120] ve üç boyutlu merkezcil potansiyeller [121] için kuantum Hamilton-Jacobi metoduyla çözümler literatürde mevcuttur. Kapoor ve arkadaşları [122] bu yöntemi geliştirerek tam kuantizasyon koşulunu kullanmadan hem enerji özdeğerlerini hem de enerji özfonksiyonlarını elde etmişlerdir. Tam kuantizasyon koşulunu kullanmadan küresel koordinatta tam olarak çözülebilen potansiyeller için çözümler mevcuttur [123-124].

Bu çalışmada, merkezcil olmayan potansiyel etkisindeki görelî kuantum sistemi için yüksek küresel koordinatlarda Klein-Gordon ve Dirac denklemlerinin bağlı durumda analitik çözümleri araştırılacaktır. N -boyutta küresel simetrik olmayan potansiyel alanda hareket eden spin-0 ve spin-1/2 parçacıkların tam çözümlerinin doğru bir şekilde elde edilmesi amaçlanmaktadır. Yüksek küresel koordinatlarda, Hartmann, merkezcil olmayan Morse ve merkezcil olmayan Manning-Rosen potansiyelleri için Klein-Gordon dalga denkleminin çözümleri etkin ve sistematik olarak asimptotik iterasyon metoduyla elde edilecektir. Farklı boyutlu sistemlerde, iki atomlu moleküller için relativistik

titreşim-dönme enerjisinin değerleri bulunarak kullanılan metodun geçerliliği tespit edilecektir. Diğer taraftan, yüksek küresel koordinatlarda double ring-shaped Kratzer ve Makarov potansiyelleri etkisindeki spin-1/2 parçacık için spin simetri bağlı durum çözümleri kuantum Hamilton-Jacobi yöntemiyle incelenecektir. Böylelikle, kuantum Hamilton-Jacobi formalizminin merkezci olmayan potansiyeller için küresel koordinatlarda relativistik dalga denklemlerinin çözümlerinin yanısıra N-boyutta relativistik dalga denklemlerinin analitik çözümlerinin elde edilebileceğini göstermek hedeflenmektedir. Double ring-shaped Kratzer potansiyeli için spin simetri bağlı durum relativistik enerjileri üzerinde açığa bağlı potansiyel parametrelerinin ve iki atomlu moleküller için relativistik dalga fonksiyonları üzerinde boyutun etkisi araştırılacaktır. Makarov potansiyeli için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısallık dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları farklı boyutlarda incelenecektir.

Bu tez çalışmasının ilk bölümünde kullanılan yöntemler, yüksek küresel koordinatlarda gradyent ve laplasyenin nasıl elde edildiği anlatıldı. İkinci bölümde, yüksek küresel koordinatlarda skaler ve vektör potansiyellerinin eşit olduğu durumda Klein-Gordon denklemlerinin çıkarılışı verildi. Spin-0 parçacık için çözümler asimptotik iterasyon metoduyla araştırıldı. İlk olarak, N-boyutta Hartmann potansiyeli etkisindeki hidrojen molekülü için relativistik enerji spektrumu ve dalga fonksiyonu elde edildi. H_2 molekülünün küresel ve kutupsal koordinatlarda açısallık olasılık dağılımları üzerinde boyutun etkisi detaylı bir şekilde araştırıldı. Relativistik durumda, N-boyutta Hartmann potansiyeli için köşegen matris elemanları ve bu matris elemanlarının analitik ifadeleri arasındaki tekrarlı bağıntıları elde edildi. Beklenen değerler $\langle nl|r^s|nl \rangle$, $-4 \leq s \leq 4$ aralığı için bulundu. Beklenen değerler, diğer fiziksel nicelikleri hesaplamakta kullanıldığından önemlidir. Örneğin, Kirkwood [125] ve Buckingham [126] çalışmalarında $s \geq 1$ için $\langle r^s \rangle$ ifadelerini atomların kutuplanmasını hesaplamada kapsamlı olarak kullanmıştır. $\langle r^{-1} \rangle$ ve $\langle r^2 \rangle$ ifadeleri hidrojen gibi atomlar ve izotropik harmonik osilatörler için potansiyelin ortalama değerinin doğrudan sonucunu verir. Aynı zamanda, $\langle r^{-1} \rangle$ diamanyetik perdeleme sabitini hesaplamada kullanılır [127-128]. $\langle r^{-2} \rangle$ ise son zamanlarda çalışılan bir konu olan kuantum bilgi teorisinde önemli rol oynamaktadır. Şimdiye kadar, N-boyutta Hartmann potansiyeli için relativistik beklenen değerleri içeren bir çalışma yoktur. Ayrıca, hidrojen molekülü için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısallık olasılık dağılımları üzerine çalışılmamıştır. Bu nedenle, N-boyutta

Hartmann potansiyeli etkisindeki hidrojen molekülü için yapılan hesaplama ve grafikler önemlidir. Diğer taraftan, yüksek küresel koordinatlarda merkezci olmayan Morse potansiyelinin yaklaşık çözümleri üzerine çalışıldı. Toprak alkali metaller periyodik cetvelde IIA grubundadır. Homonükleer $Ca_2 X^1\Sigma^+$, $Sr_2 X^1\Sigma^+$, $Sr_2 A^1\Sigma^+$ ve heteronükleer $MgCaX^1\Sigma^+$ iki atomlu molekülleri için merkezci olmayan Morse potansiyelinin yüzey grafikleri kapsamlı olarak incelendi. Bu yüzey grafiklerinde merkezci olmayan potansiyel parametrelerinin farklı değerler alması durumundaki etkisi gösterildi. Kalsiyum, magnezyum-kalsiyum moleküllerinin taban durumunda, strontiyum molekülünün hem taban durumunda hem de uyarılmış durumda yüzey grafikleri çizildi. Aynı zamanda, $Ca_2 X^1\Sigma^+$, $MgCa X^1\Sigma^+$, $Sr_2 X^1\Sigma^+$ ve $Sr_2 A^1\Sigma^+$ moleküllerinin relativistik titreşim frekansları hesaplandı. Kalsiyum molekülünün soğurma spektrumu 1975’de Balfour ve Whitlock [129] tarafından gözlenmiştir. Daha sonra, bu molekül için araştırmalar lazer floresan metodu kullanılarak Sakurai ve Broida [130], Vidal [131], Hofmann ve Harris [132] tarafından yapılmıştır. Strontiyum molekülü ilk olarak Bergeman ve Lio [133] tarafından gözlenmiştir. Sonra, Gerber ve çalışma arkadaşları [134] daha doğru sonuçlar elde etmek için lazer floresans yöntemiyle kesikli ve sürekli spektrumu analiz etmişlerdir. Magnezyum-kalsiyum molekülünün soğurma spektrumu Miller ve çalışma arkadaşları [135] tarafından gözlenmiştir. Bu çalışmanın ardından Atmanspacher ve arkadaşları [136], lazer floresan metodunu kullanarak araştırma yapmışlardır. Bu çalışmalar dikkate alınarak toprak alkali metal grubundan iki atomlu moleküller için elde edilen relativistik titreşim frekanslarının deneysel sonuçlarla [131,134,136] karşılaştırması yapıldı. Bir diğer çalışılan merkezci olmayan Manning-Rosen potansiyeli için N-boyutta yaklaşık çözümler araştırıldı. Belirli parametrelerin indirgenmesi durumunda Manning-Rosen potansiyeli Hulthen potansiyeline dönüşür. Bu nedenle, bu indirgemeler yapılarak yüksek küresel koordinatlarda Hulthen potansiyeli için de çözümler elde edildi. Manning-Rosen potansiyeli için elde edilen N-boyutta relativistik enerji değeri $c \rightarrow \infty$ limitinde non-relativistik enerjiye indirgenerek farklı kuantum durumları için iki, üç ve dört boyutta atomik birimde nümerik değerler hesaplandı. Kullanılan metodun geçerliliği ve hesaplanan enerji değerlerinin doğruluğu literatürdeki çalışmalarla karşılaştırılarak gösterildi. Aynı zamanda, aynı potansiyel için Hellmann-Feynmann teoremi [137-139] kullanılarak $\langle r^{-2} \rangle$ beklenen değeri elde edildi. Sonra, 2p, 3p, 3d, 4p durumlarındaki $\langle r^{-2} \rangle$ ’nin nümerik değerleri hesaplandı. Üçüncü bölümde, kuantum Hamilton-Jacobi formalizmi çerçevesinde incelenen yüksek küresel

koordinatlarda spin simetri durumunda Dirac denklemlerinin çıkarılışları verildi. N-boyutta double ring-shaped Kratzer potansiyelinin spin simetri durumunda relativistik enerji spektrumu ve dalga fonksiyonu elde edildi. Bulunan enerji spektrumu küresel koordinata indirgendi ve bu spektrum üzerinde merkezcil olmayan potansiyel parametrelerin değişimi incelendi. Ayrıca, double ring-shaped Kratzer potansiyeli etkisindeki iki atomlu moleküller ($\text{HI } \alpha^3\Sigma^+$, $\text{NaH } X^1\Sigma^+$, $\text{MgH } X^2\Sigma^+$) için üç ve beş boyutta $S(r, \theta_{N-1}) = V(r, \theta_{N-1})$ koşulundaki relativistik enerjinin değerleri elde edildi. Hidrojen halojenürler birçok relativistik yaklaşımda önemli rol oynar. Ağır bir atoma bağlı hidrojenenden oluşan moleküller için hesaplamalar farklı yöntemlerde kolaylıkla uygulanabilir [140]. $\text{HI } \alpha^3\Sigma^+$ molekülü hidrojen halojenürler grubundadır. $\text{NaH } X^1\Sigma^+$ ve $\text{MgH } X^2\Sigma^+$ molekülleri ise metal hidrür grubudur. Bu moleküller için radyal ve açısal dalga fonksiyonlarının grafiklerinde boyutun etkisi kapsamlı olarak araştırıldı. Yüksek küresel koordinatlarda Makarov potansiyeli etkisindeki spin-1/2 parçacık için çözümler elde edildi. Aynı potansiyel için farklı boyutlarda açısal dalga fonksiyonunun küresel ve kutupsal koordinatlarda olasılık dağılımlarının grafikleri çizildi. N-boyutlu uzayda farklı potansiyellerin çözümleri kuantum Hamilton-Jacobi formalizminde ilk defa bu tez çalışmasında incelendi. Bundan dolayı, N-boyutta double ring-shaped Kratzer ve Makarov potansiyelleri için yapılan hesaplama ve uygulamalar önemlidir. Son bölümde, elde edilen sonuçların tartışması yapıldı.

1. BÖLÜM

METODLAR ve MATEMATİKSEL ARAÇLAR

1.1. Asimptotik İterasyon Metodu

Standart bir yapı olarak

$$y''(x) = \lambda_0(x)y'(x) + s_0(x)y(x) \quad (1.1.1)$$

şeklinde yazılabilen denklemler ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklemler olarak adlandırılır. Fizik ve mühendislikte bu diferansiyel denklemlerle çok sık karşılaşılır. İkinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklemleri sınır koşullarıyla çözmek için pek çok yöntem mevcuttur. Çiftçi ve arkadaşları [111-114], bu yapıdaki denklemlerin çözümü için asimptotik iterasyon metodunu önermiştir.

Denklem (1.1.1)'de, $\lambda_0(x) \neq 0$ olmak üzere $\lambda_0(x)$ ve $s_0(x)$ $C_\infty(a, b)$ aralığında tanımlı türevlenebilir fonksiyonlardır. Denklemin genel çözümünü bulmak için denklem (1.1.1)'in x 'e göre türevi alındığında

$$y'''(x) = \lambda_1(x)y'(x) + s_1(x)y(x) \quad (1.1.2)$$

elde edilir ve burada

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

$$s_1(x) = s_0'(x) + s_0(x)\lambda_0(x) \quad (1.1.3)$$

şeklindedir. Benzer olarak, denklem (1.1.1)'in dördüncü mertebeden türevi

$$y^{(4)}(x) = \lambda_2(x)y'(x) + s_2(x)y(x) \quad (1.1.4)$$

olarak bulunur. Burada, λ_2 ve s_2

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

$$s_2(x) = s'_1(x) + s_0(x)\lambda_1(x) \quad (1.1.5)$$

şeklinde yazılır. Denklem (1.1.1)'in $(n+1)$. ve $(n+2)$. mertebeden türevleri alındığında $n = 1, 2, 3 \dots$ olmak üzere

$$\begin{aligned} y^{(n+1)}(x) &= \lambda_{n-1}(x)y'(x) + s_{n-1}(x)y(x) \\ y^{(n+2)}(x) &= \lambda_n(x)y'(x) + s_n(x)y(x) \end{aligned} \quad (1.1.6)$$

elde edilir. Bu denklemlerde

$$\begin{aligned} \lambda_n(x) &= \lambda'_{n-1}(x) + s_{n-1}(x) + \lambda_0(x)\lambda_{n-1}(x) \\ s_n(x) &= s'_{n-1}(x) + s_0(x)\lambda_{n-1}(x) \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

şeklinde dir. Denklem (1.1.7) tekrarlama bağıntısı olarak bilinir. $(n+1)$. mertebeden türev $(n+2)$. mertebeden türeve oranlandığında

$$\frac{d}{dx} \ln[y^{(n+1)}(x)] = \frac{y^{(n+1)}(x)}{y^{(n+2)}(x)} = \frac{\lambda_n(x)[y'(x) + \frac{s_n(x)}{\lambda_n(x)}y(x)]}{\lambda_{n-1}(x)[y'(x) + \frac{s_{n-1}(x)}{\lambda_{n-1}(x)}y(x)]} \quad (1.1.8)$$

olarak bulunur. Yeterince büyük n değerleri için,

$$\frac{s_n(x)}{\lambda_n(x)} = \frac{s_{n-1}(x)}{\lambda_{n-1}(x)} \equiv \alpha(x) \quad (1.1.9)$$

elde edilir ve kuantizasyon şartı olarak adlandırılır. Bu denklem, özdeğer problemi analitik çözümlere sahip olduğunda

$$\delta_n(x) = \lambda_n(x)s_{n-1}(x) - \lambda_{n-1}(x)s_n(x) = 0 \quad (1.1.10)$$

her bir yaklaşıklıkta x 'den bağımsız bir ifade üretir.

Denklem (1.1.9), denklem (1.1.8)'de kullanılır ve birkaç matematiksel işlem yapıldıktan sonra

$$\frac{d}{dx} \ln[y^{(n+1)}(x)] = \frac{\lambda_n(x)}{\lambda_{n-1}(x)} \quad (1.1.11)$$

denklemini elde edilir ve buradan

$$y^{(n+1)}(x) = C_1 \exp\left(\int \frac{\lambda_n(x)}{\lambda_{n-1}(x)} dx\right) \quad (1.1.12)$$

olarak bulunur. Denklem (1.1.7)'den $\lambda_n(x)$, denklem (1.1.12)'de kullanılır ve gerekli düzenleme yapılırsa

$$y^{(n+1)}(x) = C_1 \lambda_{n-1}(x) \exp\left(\int [\alpha(x) + \lambda_0(x)] dx\right) \quad (1.1.13)$$

denklemini elde edilir. Burada C_1 integrasyon sabiti olarak adlandırılır. Denklem (1.1.13) ve denklem (1.1.7)'den birinci mertebeden diferansiyel denklem

$$y'(x) + \alpha(x)y(x) = C_1 \exp\left(\int [\alpha(x) + \lambda_0(x)] dx\right) \quad (1.1.14)$$

şeklinde elde edilir. Bu diferansiyel denklemin çözümü

$$y(x) = \exp\left(-\int^x \alpha dx'\right) \left[C_2 + C_1 \int^x \exp\left(\int^{\tau} [\lambda_0(\tau) + 2\alpha(\tau)] d\tau\right) dx' \right] \quad (1.1.15)$$

olarak bulunur. Burada elde edilen (1.1.15) çözümü, denklem (1.1.1) eşitliği ile verilen ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denkleminin genel çözümüdür. Bu çözümde, ilk terim fiziksel olarak kabul edilebilir çözümü sağlarken ikinci terim fiziksel çözümleri içermez. Sonuç olarak, analitik çözülebilen potansiyeller için enerji özdeğerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonları

$$y(x) = C_2 \exp\left(-\int^{x'} \frac{s_n(x')}{\lambda_n(x')} dx'\right) \quad (1.1.16)$$

bağıntıdan elde edilir. Burada, C_2 normalizasyon sabiti olup normalizasyon koşulundan belirlenir.

1.2. Kuantum Hamilton-Jacobi Yöntemi

Kuantum Hamilton-Jacobi formalizmi klasik Hamilton-Jacobi teorisini temel alarak geliştirilmiştir. Bu formalizm, kuantum mekaniğinde tam olarak çözülebilen sistemlerin bağlı durum enerji özdeğerlerini elde etmek için etkin bir yöntemdir. Leacock ve Padgett [115-116], bu enerji özdeğerlerini sistemin dalga fonksiyonlarını hesaplamaya gerek kalmadan nasıl elde edileceğini gösteren ilk araştırmacılarıdır.

$V(\hat{x})$ potansiyeli etkisinde tek boyutta hareket eden bir parçacığın Hamiltoniyeni

$$\hat{H} \equiv H(\hat{x}, \hat{p}) = \hat{p}^2 + V(\hat{x}) \quad (1.2.1)$$

şeklinde tanımlanır. Burada, $\hat{x}$ lineer konum operatörü ve $\hat{p}$ momentum operatörü olmak üzere $\hat{x} = x$, $\hat{p} = (\hbar/i) \partial/\partial x$ şeklindedir. Leacock ve Padgett, kuantum

Hamilton-Jacobi yönteminde $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{Q}$, $\hat{P}$ ve $\hat{H}$ operatörlerinin yerine x , p , Q , P ve E özdeğerlerini kullanır. Böylece, bu nicelikler kullanılarak kuantum kanonik dönüşümü,

$$p = \frac{\partial W(x, E(P))}{\partial x}, \quad Q = \frac{\partial W(x, E(P))}{\partial P} \quad (1.2.2)$$

klasik dönüşümdeki aynı yapıyla tanımlanır. Burada, $W(x, E(P))$ kuantum Hamilton'un karakteristik fonksiyonu olarak adlandırılır. Denklem (1.2.1) ve denklem (1.2.2)'den kuantum Hamilton-Jacobi denklemi

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right)^2 = E - V(x) \quad (1.2.3)$$

elde edilir. Burada, $W(x, E)$, fiziksel olarak sınır şartlarını sağlayan fonksiyondur. Kuantum Hamilton-Jacobi denkleminin iki, üç ve daha yüksek boyutlara genelleştirilmesi

$$-i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} W + \vec{\nabla} W \cdot \vec{\nabla} W = E - V \quad (1.2.4)$$

olarak yazılabilir.

Aslında, kuantum Hamilton-Jacobi yöntemi, kuantum momentum fonksiyonun tekil yapısı üzerine kuruludur. Aynı zamanda, kuantum momentum fonksiyonu

$$p(x, E) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \ln \psi(x) \quad (1.2.5)$$

şeklinde tanımlıdır. Denklem (1.2.2)'de tanımlanan kuantum momentum fonksiyonu $p(x, E)$, denklem (1.2.3)'de yerine yazıldığında

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p^2(x, E) = E - V(x) = p_k^2(x, E) \quad (1.2.6)$$

şeklinde elde edilir. Bu denkleme kuantum momentum fonksiyon denklemi denir. Burada, $p_k(x, E)$ klasik momentum fonksiyonudur. Klasik limitte $\hbar \rightarrow 0$, kuantum momentum fonksiyonu klasik momentum fonksiyonuna indirgenir.

$$p(x, E) \rightarrow p_k(x, E) = \sqrt{E - V(x)} \quad (1.2.7)$$

Klasik momentum fonksiyonu, x_1 ve x_2 dönme noktalarında sıfıra eşittir.

$$p_k(x_1, E) = p_k(x_2, E) = 0$$

Kompleks x düzlemi üzerinde tanımlı $p_k(x, E)$ 'nin fiziksel olarak gerekli ve anlamlı çözümü, karşılama ilkesi gereği $p(x, E)$ 'nin davranışını sınırlandırır. Daha kapsamlı bilgiler Leacock ve Padegett'in çalışmalarından elde edilebilir [115-116].

Kuantum hareket değişkeninin kompleks bölgede kuantum momentum fonksiyonun C kapalı eğrisi üzerinden integrali

$$J = J(E) \equiv \frac{1}{2\pi} \oint_C p(x, E) dx \quad (1.2.8)$$

şeklinde yazılır. Kuantum momentum fonksiyonunun kutup noktaları, ele alınan sistemde uyarılmış durumları verir. Örneğin, taban durumunda $p(x, E)$ 'nin kutup noktası yoktur. Birinci uyarılmış durumda 1 tane, ikinci uyarılmış durumda 2 tane kutup noktasına sahiptir. Bu yoldan hareketle, kuantum hareket değişkeni kullanılarak tam kuantizasyon koşulu

$$J = n\hbar = J(E) \quad (1.2.9)$$

şeklinde yazılır. Burada, $n = 0, 1, 2 \dots$ değerlerini alır. Bu denklem, enerji spektrumunu bulmak için kullanılır.

Kapoor ve çalışma arkadaşları [122], kuantum Hamilton-Jacobi formalizmini geliştirmişler ve tam kuantizasyon koşulunu kullanmadan hem enerji özdeğerlerini hem de enerji özfonksiyonlarını elde etmişlerdir.

1.3. Yüksek Küresel Koordinatlarda Gradyent Operatörünün Elde Edilmesi

Bu bölümde, yüksek küresel koordinatlarda kuantum Hamilton-Jacobi denkleminde karşımıza çıkan N-boyutta gradyent operatörü elde edilecek.

N boyutta gradyent, kartezyen koordinatlarda $(x_1, x_2, \dots, x_N)$

$$\vec{\nabla}_N = \sum_{k=1}^N \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (1.3.1)$$

şeklinde tanımlıdır.

Louck [10-12] ve Chatterjee [141]'nin çalışmalarına göre N-boyutlu uzayda küresel koordinatlar

$$\begin{aligned}
x_1 &= r \cos \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \dots \sin \theta_{N-1} \\
x_2 &= r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \dots \sin \theta_{N-1} \\
x_3 &= r \cos \theta_2 \sin \theta_3 \sin \theta_4 \dots \sin \theta_{N-1} \\
x_4 &= r \cos \theta_3 \sin \theta_4 \sin \theta_5 \dots \sin \theta_{N-1} \\
&\vdots \\
x_k &= r \cos \theta_{k-1} \sin \theta_k \sin \theta_{k+1} \dots \sin \theta_{N-1}, \quad 3 \leq k \leq N-1 \\
x_N &= r \cos \theta_{N-1}
\end{aligned} \tag{1.3.2}$$

şeklinde yazılır. Burada, $N = 3, 4, 5 \dots$ değerlerini alır. r , N -boyutlu bir kürenin yarıçapıdır. Bütün uzayda tanımlı r , θ_1 ve θ_k parametrelerinin tanım aralıkları sırasıyla $k = 2, 3, \dots, N-1$ için $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta_1 \leq 2\pi$, $0 \leq \theta_k \leq \pi$ şeklindedir. $N = 2$ için $x_1 = r \cos \theta_1$, $x_2 = r \sin \theta_1$ ve $N = 3$ için $x_1 = r \cos \theta_1 \sin \theta_2$, $x_2 = r \sin \theta_1 \sin \theta_2$ ve $x_3 = r \cos \theta_2$ olarak bulunur.

Skala faktörü h_j ve metrik katsayılar g_{jj} arasındaki bağıntı

$$h_j^2 = g_{jj} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial x_k}{\partial \theta_j} \right)^2 \tag{1.3.3}$$

olarak yazılır. N -boyutta skala faktörleri

$$\begin{aligned}
h_0 &= 1 \\
h_1 &= r \sin \theta_2 \sin \theta_3 \dots \sin \theta_{N-1} \\
h_2 &= r \sin \theta_3 \sin \theta_4 \dots \sin \theta_{N-1} \\
h_3 &= r \sin \theta_4 \sin \theta_5 \dots \sin \theta_{N-1} \\
&\vdots \\
h_j &= r \sin \theta_{j+1} \sin \theta_{j+2} \dots \sin \theta_{N-1}, \quad 1 \leq j \leq N-1 \\
h_{N-2} &= r \sin \theta_{N-1} \\
h_{N-1} &= r
\end{aligned} \tag{1.3.4}$$

$N = 3, 4, 5 \dots$ olmak üzere şeklinde yazılır. $N = 2$ için $h_0 = 1$, $h_1 = r$ ve $N = 3$ için $h_0 = 1$, $h_1 = r \sin \theta_2$ ve $h_2 = r$ olarak elde edilir.

Denklem (1.3.2) ve denklem (1.3.4)'ü kullanarak $\theta_0 = r$ olmak üzere yüksek küresel koordinatlarda gradyent

$$\vec{\nabla}_N = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{h_j} \frac{\partial}{\partial \theta_j} \hat{\theta}_j \quad (1.3.5)$$

şeklinde elde edilir.

1.4. Yüksek Küresel Koordinatlarda Laplasyen Operatörünün Elde Edilmesi

Bu bölümde, Louck [10-12] ve Chatterjee [141]'nin çalışmaları temel alınarak yüksek küresel koordinatlarda Laplasyen operatörünün çıkarılışı verilecek. N-boyutta Laplasyen operatörü elde edilirken genelleştirilmiş açısal momentum operatörlerinin nasıl tanımlandığı ve bu operatörlerin kartezyen koordinatlarla nasıl ilişkilendirildiği incelenecek. Daha sonra, genelleştirilmiş açısal momentum operatörlerinin özdeğerleri ve özfonksiyonları elde edilecek.

N-boyutta kartezyen koordinatlarda $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ tanımlı olan Laplasyen operatörü

$$\nabla_N^2 = \sum_{k=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \quad (1.4.1)$$

şeklinde dir. N-boyutlu uzayda küresel koordinatlar önceki bölümde verilmişti. Buradan hareketle, N-boyutta küresel koordinatlarda tanımlı Laplasyen operatörü, $\theta_0 = r$ ve

$$h = \prod_{k=0}^{N-1} h_k \quad \text{olmak üzere}$$

$$\nabla_N^2 = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial}{\partial \theta_j} \left(\frac{h}{h_j^2} \frac{\partial}{\partial \theta_j} \right) \quad (1.4.2)$$

şeklinde yazılır. Burada, h_j önceden bahsedildiği gibi skala faktörüdür ve N-boyuttaki ifadeleri denklem (1.3.4)'de verilir. h 'nin açılımı

$$h = r^{N-1} \sin \theta_2 \sin^2 \theta_3 \sin^2 \theta_4 \dots \sin^{j-1} \theta_j \dots \sin^{N-2} \theta_{N-1} \quad (1.4.3)$$

olarak yazılır.

Denklem (1.3.4) ve denklem (1.4.3), denklem (1.4.2)'de yerine yazıldığında yüksek küresel koordinatlarda Laplasyen operatörü

$$\begin{aligned}
\nabla_N^2 = & \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r} \\
& + \frac{1}{r^2} \sum_{j=1}^{N-2} \frac{1}{\sin^2 \theta_{j+1} \sin^2 \theta_{j+2} \dots \sin^2 \theta_{N-1}} \left(\frac{1}{\sin^{j-1} \theta_j} \frac{\partial}{\partial \theta_j} \sin^{j-1} \theta_j \frac{\partial}{\partial \theta_j} \right) \\
& + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin^{N-2} \theta_{N-1}} \frac{\partial}{\partial \theta_{N-1}} \sin^{N-2} \theta_{N-1} \frac{\partial}{\partial \theta_{N-1}} \right)
\end{aligned} \tag{1.4.4}$$

şeklinde elde edilir.

Genelleştirilmiş yörünge açısal momentum bileşenleri

$$L_{ij} = -L_{ji} = x_i p_j - x_j p_i \tag{1.4.5}$$

$i = 1, 2, 3, \dots, j-1$ ve $j = 2, 3, \dots, N$ şeklinde yazılır. Burada p_i momentum operatörü olmak üzere

$$p_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} = -i\hbar \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{\partial \theta_j}{\partial x_k} \right) \frac{\partial}{\partial \theta_j} = -i\hbar \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{1}{h_j^2} \frac{\partial x_k}{\partial \theta_j} \right) \frac{\partial}{\partial \theta_j} \tag{1.4.6}$$

şeklindedir.

Denklem (1.4.5)'de tanımlanan yörünge açısal momentumun $\frac{N(N-1)}{2}$ bileşeni

$$L_k^2 = \sum_{j=2}^{k+1} \sum_{i=1}^{j-1} L_{ij}^2, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N-1 \tag{1.4.7}$$

olarak yazılır. Açısal momentum operatör ifadeleri genelleştirildiğinde

$$\begin{aligned}
L_1^2 &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta_1^2} \\
L_2^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta_2} \frac{\partial}{\partial \theta_2} \sin \theta_2 \frac{\partial}{\partial \theta_2} - \frac{L_1^2}{\hbar^2 \sin^2 \theta_2} \right) \\
L_3^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin^2 \theta_3} \frac{\partial}{\partial \theta_3} \sin^2 \theta_3 \frac{\partial}{\partial \theta_3} - \frac{L_2^2}{\hbar^2 \sin^2 \theta_3} \right) \\
&\vdots \\
L_k^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin^{k-1} \theta_k} \frac{\partial}{\partial \theta_k} \sin^{k-1} \theta_k \frac{\partial}{\partial \theta_k} - \frac{L_{k-1}^2}{\hbar^2 \sin^2 \theta_k} \right)
\end{aligned}$$

⋮

$$L_{N-1}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin^{N-2}\theta_{N-1}} \frac{\partial}{\partial \theta_{N-1}} \sin^{N-2}\theta_{N-1} \frac{\partial}{\partial \theta_{N-1}} - \frac{L_{N-2}^2}{\hbar^2 \sin^2\theta_{N-1}} \right) \quad (1.4.8)$$

şeklinde tanımlanır. Burada ilk iki operatörde $\theta_1 = \varphi$, $\theta_2 = \theta$ alındığında üç boyutta açısal momentum operatörleri olan L_z^2 ve L^2 bulunur. Böylece, yüksek küresel koordinatlarda Laplasyen operatörü

$$\nabla_N^2 = \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L_{N-1}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (1.4.9)$$

şeklinde elde edilir.

$L_1^2, L_2^2, \dots, L_{N-1}^2$ operatörlerinin özdeğer denklemi

$$L_k^2 Y_{\lambda_{N-1}, \lambda_{N-2}, \dots, \lambda_2, \lambda_1}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}) = \lambda_k \hbar^2 Y_{\lambda_{N-1}, \lambda_{N-2}, \dots, \lambda_2, \lambda_1}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}) \quad (1.4.10)$$

şeklinde yazılır. Burada, $k = 1, 2, 3, \dots, N-1$ değerlerini alır. Özdeğer denkleminde λ_k , L_k^2 'nin özdeğeridir.

Denklem (1.4.8) verilen açısal momentum operatörlerinin özfonksiyonları

$$Y_{\lambda_{N-1}, \lambda_{N-2}, \dots, \lambda_2, \lambda_1}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}) = \prod_{k=1}^{N-1} \Theta_{\lambda_k, \lambda_{k-1}}(\theta_k) \quad (1.4.11)$$

olarak yazılır. Bu eşitlikte, $\Theta_{\lambda_k, \lambda_{k-1}}(\theta_k)$ fonksiyonu sadece θ_k 'ya bağlıdır ve $\Theta(\lambda_1, \lambda_0) = \Theta_1(\lambda_1)$ 'dir. Böylece, özdeğer denklemleri

$$\begin{aligned} L_1^2 \Theta_1(\theta_1) &= \lambda_1 \hbar^2 \Theta_1(\theta_1) \\ L_k^2(\lambda_{k-1}) \Theta_{\lambda_k, \lambda_{k-1}}(\theta_k) &= \lambda_k \hbar^2 \Theta_{\lambda_k, \lambda_{k-1}}(\theta_k) \end{aligned} \quad (1.4.12)$$

şeklinde yeniden düzenlenir. Burada, $k = 2, 3, \dots, N-1$ olmak üzere

$$L_k^2(\lambda_{k-1}) = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta_k^2} + (k-1) \cot \theta_k \frac{\partial}{\partial \theta_k} - \frac{\lambda_{k-1}}{\sin^2 \theta_k} \right] \quad (1.4.13)$$

olarak ifade edilir. $k = 2$ için denklem (1.4.12) ve denklem (1.4.13), üç boyutta küresel harmonikleri verir. Yükseltme ve alçaltma operatörleri kullanılarak

$$\lambda_1 = l_1^2, \lambda_2 = l_2(l_2 + 1) \quad (1.4.14)$$

$l_2 = 0, 1, 2, \dots$; $l_1 = l_2, l_2 - 1, \dots, -l_2 + 1, -l_2$ olmak üzere bulunur. Bu denklem genelleştirildiğinde

$$\lambda_k = l_k(l_k + k - 1) \quad (1.4.15)$$

elde edilir. Denklem (1.4.15), denklem (1.4.12)'de yerleştirildiğinde

$$L_k^2(l_{k-1})\Theta_k(l_k, l_{k-1}) = l_k(l_k + k - 1)\hbar^2\Theta_k(l_k, l_{k-1}) \quad (1.4.16)$$

$k = 1, 2, 3, \dots, N - 1$ olmak üzere elde edilir. Böylece, genelleştirilmiş açısal momentum operatörlerinin özdeğer denklemi

$$\begin{aligned} L_{N-1}^2 Y_{l_{N-1}, l_{N-2}, \dots, l_2, l_1}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}) \\ = l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2)\hbar^2 Y_{l_{N-1}, l_{N-2}, \dots, l_2, l_1}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}) \end{aligned} \quad (1.4.17)$$

olarak bulunur. $l_{N-1} = 0, 1, 2, \dots$; $l_{N-2} = 0, 1, 2, \dots, l_{N-1}$; $l_{N-3} = 0, 1, 2, \dots, l_{N-2}$; $l_3 = 0, 1, 2, \dots, l_4$; $l_2 = 0, 1, 2, \dots, l_3$; $l_1 = -l_2, -l_2 + 1, \dots, l_2 - 1, l_2$ olmak üzere L_{N-1}^2 'in özfonksiyonu $Y_{l_{N-1}, l_{N-2}, \dots, l_2, l_1}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1})$ genelleştirilmiş küresel harmoniklerdir. Bu konu hakkında daha detaylı bilgi edinmek için Louck [10-12] ve Chatterjee [141]'nin çalışmalarına bakılabilir.

2. BÖLÜM

YÜKSEK KÜRESEL KOORDİNATLARDA MERKEZCİL OLMAYAN POTANSİYEL ETKİSİNDEKİ SPİN-0 PARÇACIK İÇİN KLEİN-GORDON DENKLEMİ

2.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Klein-Gordon Denkleminin Elde Edilmesi

N-boyutta merkezci olmayan Lorentz skaler potansiyel $S(r, \theta_{N-1})$ ve Lorentz vektör potansiyeli $V(r, \theta_{N-1})$ etkisindeki μ kütleli spin-0 parçacığın hareketini tanımlayan Klein-Gordon denklemi

$$-\hbar^2 c^2 \nabla_N^2 \psi(r, \theta_{N-1}) + \left[(\mu c^2 + S(r, \theta_{N-1}))^2 - (E - V(r, \theta_{N-1}))^2 \right] \psi(r, \theta_{N-1}) = 0 \quad (2.1.1)$$

şeklindedir. Burada N uzaysal boyut $N \geq 2$, ∇_N^2 N boyutta Laplasyen işlemcisi, $\hbar$ Planck sabiti, c ışık hızı, E relativistik enerjidir.

(2.1.1) denklemi $S(r, \theta_{N-1}) = V(r, \theta_{N-1})$ koşulunda nonrelativistik limite indirgendiğinde $2V$ potansiyel için Schrödinger denklemini verir. Bundan dolayı, nonrelativistik limitte V potansiyeli için Schrödinger denklemini sağlaması gerektiğinden skaler ve vektör potansiyelleri Alhaidari ve arkadaşlarının [142] çalışması esas alınarak işlem yapıldı. Bu bilginin sonucunda yüksek küresel koordinatlarda Klein-Gordon denklemi $S(r, \theta_{N-1}) = V(r, \theta_{N-1})$ durumu için

$$-\hbar^2 c^2 \nabla_{N-1}^2 \psi(r, \theta_{N-1}) + [(E + \mu c^2)V(r, \theta_{N-1}) - (E^2 - \mu^2 c^4)] \psi(r, \theta_{N-1}) = 0 \quad (2.1.2)$$

şeklinde elde edilir. Bu denkleme değişkenlerine ayırma yöntemi uygulanır. Dalga fonksiyonu

$$\psi(r, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}) = R(r) Y_{l_{N-1}, l_{N-2}, \dots, l_2, l_1}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}) \quad (2.1.3)$$

$R(r)$ dalga fonksiyonu, $Y_{l_{N-1}, l_{N-2}, \dots, l_2, l_1}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1})$ genelleştirilmiş küresel harmonik olmak üzere iki çarpandan oluşur.

N-boyutta Laplasyen operatörü denklem (2.1.2)'de yerine yazıldığında

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R(r)} \frac{r^2}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} r^{N-1} \frac{\partial R(r)}{\partial r} - \frac{r^2}{\hbar^2 c^2} (E + \mu c^2) V(r) + \frac{r^2}{\hbar^2 c^2} (E^2 - \mu^2 c^4) \\ & + \frac{1}{Y_{l_{N-1}, l_{N-2}, \dots, l_2, l_1}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1})} \left(\frac{1}{\sin^{N-2} \theta_{N-1}} \frac{\partial}{\partial \theta_{N-1}} \sin^{N-2} \theta_{N-1} \frac{\partial}{\partial \theta_{N-1}} - \frac{l_{N-2}^2}{\hbar^2 \sin^2 \theta_{N-1}} \right) \\ & - \frac{r^2}{\hbar^2 c^2} (E + \mu c^2) V(\theta_{N-1}) = 0 \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

elde edilir. Buradan, yüksek küresel koordinatlarda relativistik dalga denkleminin radyal kısmı

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{N-1}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \left[\frac{(E^2 - \mu^2 c^4)}{\hbar^2 c^2} - \frac{(E + \mu c^2)}{\hbar^2 c^2} V(r) - \frac{l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (2.1.5)$$

ve N-boyutta açısal Klein-Gordon denklemleri

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}^2} + (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} \frac{d\Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}} - \left[\frac{(E + \mu c^2)}{\hbar^2 c^2} r^2 V(\theta_{N-1}) - l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2) \right. \\ & \quad \left. + \frac{l_{N-1}(l_{N-1} + N - 3)}{\sin^2 \theta_{N-1}} \right] \Theta(\theta_{N-1}) = 0 \\ & \frac{d^2 \Theta(\theta_1)}{d\theta_1^2} + l_1^2 \Theta(\theta_1) = 0 \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

şeklinde elde edilir. Klein-Gordon denklemi $(\theta_1, \theta_2, \theta_3 \dots \theta_{N-1})$ açısal değişkenleri için (N-1) açısal denkleme ve r radyal değişken için bir radyal denkleme ayrılır.

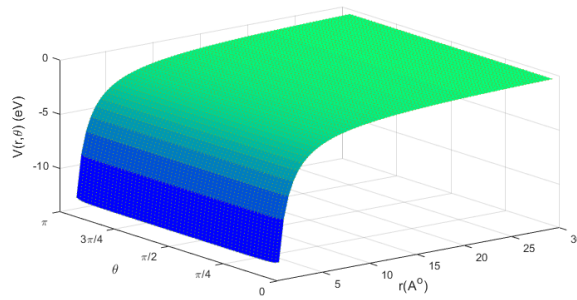
2.2. Asimptotik İterasyon Metodu İle Hartmann Potansiyeli İçin N-Boyutta Klein-Gordon Denkleminin Analitik Çözümleri

N-boyutta Hartmann potansiyeli

$$V(r, \theta_{N-1}) = \eta \sigma^2 \left(\frac{2a_0}{r} - q\eta \frac{a_0^2}{r^2 \sin^2 \theta_{N-1}} \right) \varepsilon_0 \quad (2.2.1)$$

şeklindedir. Burada $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ Bohr yarıçapı, $\varepsilon_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$ hidrojen atomunun temel enerji düzeyi, η ve σ kuantum kimyasındaki uygulamalarda 1 ve 10 aralığındaki pozitif sayılardır, q ise gerçek parametredir [27]. (2.2.1)'de hidrojen atomu için $\eta \sigma^2 = Z$, $q =$

$\eta = 1$ olarak alınır [36-37]. Hidrojen molekülü için Hartmann potansiyelinin yüzey grafiği Matlab yazılımı ile elde edilmiş ve Şekil 2.1’de gösterilmiştir. Şekil 2.1’e bakıldığında Hartmann potansiyeli etkisindeki iki hidrojen atomu arasındaki uzaklık arttıkça potansiyel enerjinin azaldığı açıkça görülmektedir.



Şekil 2.1. Çekici bölgede H_2 molekülü için Hartmann potansiyelinin yüzey grafiği

2.2.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısal Klein-Gordon Denkleminin Bağlı Durum Çözümleri

Bu bölümde asimptotik iterasyon metodu kullanılarak açıya bağlı N-boyutlu Klein-Gordon denkleminin çözümleri elde edilecektir.

Merkezcil olmayan potansiyel için N-boyutta açısal relativistik dalga denklemi

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}^2} + (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} \frac{d\Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}} - [-l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2) \\ + \frac{l_{N-2}(l_{N-2} + N - 3)}{\sin^2 \theta_{N-1}} + \frac{\left(\frac{E + \mu c^2}{2\mu c^2}\right) q \eta^2 \sigma^2}{\sin^2 \theta_{N-1}}] \Theta(\theta_{N-1}) = 0 \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

şeklindedir. (2.2.2) denkleminde

$$l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2) = l_{N-1}'^2 - \frac{(N-2)}{4} \quad m'^2 = l_{N-2}(l_{N-2} + N - 3) \quad (2.2.3)$$

yazılırsa

$$\frac{d^2 \Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}^2} + (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} \frac{d\Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}} - \left[\frac{\left(\frac{E+\mu c^2}{2\mu c^2} \right) q \eta^2 \sigma^2 + m'^2}{\sin^2 \theta_{N-1}} - l'^2_{N-1} + \frac{(N-2)}{4} \right] \Theta(\theta_{N-1}) = 0 \quad (2.2.4)$$

denklemin dönüşür. (2.2.4) denklemini çözmek için $x = \cos \theta_{N-1}$ dönüşümü uygulanırsa

$$\frac{d^2 \Theta(x)}{dx^2} - \frac{(N-1)x}{1-x^2} \frac{d\Theta(x)}{dx} - \left[\frac{\left(\frac{E+\mu c^2}{2\mu c^2} \right) q \eta^2 \sigma^2 + m'^2}{(1-x^2)^2} - \frac{l'^2_{N-1} - \frac{(N-2)}{4}}{(1-x^2)} \right] \Theta(x) = 0 \quad (2.2.5)$$

elde edilir. (2.2.5) denkleminin $x \rightarrow 1 (\theta = 0)$ ve $x \rightarrow -1 (\theta = \pi)$ limitinde asimptotik davranışı incelenirse önerilen çözüm

$$\Theta(x) = (1-x^2)^{\frac{3-N}{4} + \frac{1}{4}} \sqrt{4 \left(\left(\frac{E+\mu c^2}{2\mu c^2} \right) q \eta^2 \sigma^2 + m'^2 \right) + (N-3)^2} f(x) \quad (2.2.6)$$

şeklindedir. Burada $f(x)$, bu aralıkta dalga fonksiyonunu sonlu tutan belirlenecek fonksiyondur. (2.2.6) ifadesinde

$$p = \frac{3-N}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\left(\frac{E+\mu c^2}{2\mu c^2} \right) q \eta^2 \sigma^2 + m'^2 \right) + \left(\frac{N-3}{2} \right)^2} \quad (2.2.7)$$

kısaltması kullanılır ve önerilen çözüm (2.2.5) denkleminde yerine yazılırsa

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \left(\frac{(4p+N-1)x}{1-x^2} \right) \frac{df(x)}{dx} + \left(\frac{4p^2 + 2p(N-2) + \frac{1}{4}(N-2) - l'^2_{N-1}}{1-x^2} \right) f(x) \quad (2.2.8)$$

elde edilir. (2.2.8) denklemi asimptotik iterasyon metoduna uygundur.

(2.2.8) denklemi (1.1.1) denklemi ile karşılaştırıldığında

$$\lambda_0(x) = \frac{(4p+N-1)x}{1-x^2}$$

$$s_0(x) = \frac{4p^2 + 2p(N-2) + \frac{1}{4}(N-2) - l'^2_{N-1}}{1-x^2}$$

belirlenir. Maple programında, (1.1.7) denklemleri kullanılarak $\lambda_n(x)$ ve $s_n(x)$ değerleri elde edilir.

$$\begin{aligned}\lambda_1(x) &= \frac{(4p+N-1)}{1-x^2} + \frac{2(4p+N-1)x^2}{(1-x^2)^2} + \frac{4p^2+2p(N-2)+\frac{1}{4}(N-2)-l'^2_{N-1}}{1-x^2} \\ &\quad + \frac{(4p+N-1)^2x^2}{(1-x^2)^2} \\ s_1(x) &= \frac{2(4p^2+2p(N-2)+\frac{1}{4}(N-2)-l'^2_{N-1})x}{(1-x^2)^2} + \frac{(4p^2+2p(N-2)+\frac{1}{4}(N-2)-l'^2_{N-1})(4p+N-1)x}{(1-x^2)^2} \\ &\vdots\end{aligned}\tag{2.2.9}$$

AİM'nun iterasyon şartı olan (1.1.9) denkleminde N-boyutta l'_{N-1} değerleri

$$\begin{aligned}\frac{s_0}{\lambda_0} = \frac{s_1}{\lambda_1} &\Rightarrow l'^2_{N-1} = 4p^2 + 2p(N-2) + \frac{1}{4}N - \frac{1}{2} \\ \frac{s_1}{\lambda_1} = \frac{s_2}{\lambda_2} &\Rightarrow l'^2_{N-1} = 4p^2 + 2pN + \frac{5}{4}N - \frac{3}{2} \\ \frac{s_2}{\lambda_2} = \frac{s_3}{\lambda_3} &\Rightarrow l'^2_{N-1} = 4p^2 + 2p(N+2) + \frac{9}{4}N - \frac{1}{2} \\ &\vdots\end{aligned}\tag{2.2.10}$$

olarak bulunur. Genelleştirme yapıldığında

$$l'^2_{N-1} = 4p^2 + 2p(N-2+2n_\theta) + \left(n_\theta + \frac{1}{4}\right)N + \left(n_\theta^2 - 2n_\theta - \frac{1}{2}\right)\tag{2.2.11}$$

$$n_\theta = 0, 1, 2, \dots$$

olarak elde edilir. p ve l'^2_{N-1} değerleri (2.2.11) denkleminde yazılırsa yüksek küresel koordinatlarda l_{N-1} değeri

$$l_{N-1} = \frac{3-N}{2} + \sqrt{\left(\left(\frac{E+\mu c^2}{2\mu c^2}\right)q\eta^2\sigma^2 + m'^2\right) + \left(\frac{N-3}{2}\right)^2} + n_\theta\tag{2.2.12}$$

şeklinde elde edilir.

N-boyutta merkezci olmayan potansiyel için açılal dalga fonksiyonları (1.1.16) denklemi kullanılarak elde edilir.

$$\begin{aligned}
f_0(x) &= C_2 = C_2 {}_2F_1\left(0, 4p + N - 2, 2p + \frac{N-1}{2}; \frac{1-x}{2}\right) \\
f_1(x) &= C_2 [(4p + N - 1)x] \\
&= C_2 \left(2p + \frac{N-1}{2}\right) {}_2F_1\left(-1, 4p + N - 1, 2p + \frac{N-1}{2}; \frac{1-x}{2}\right) \\
f_2(x) &= C_2 [(4p + N)(4p + N + 1)x^2 - (4p + N + 1)] \\
&= C_2 \left(2p + \frac{N-1}{2}\right) \left(2p + \frac{N+1}{2}\right) {}_2F_1\left(-2, 4p + N, 2p + \frac{N-1}{2}; \frac{1-x}{2}\right) \\
f_3(x) &= C_2 [(4p + N + 1)(4p + N + 2)(4p + N + 3)x^3 \\
&\quad - 3(4p + N + 1)(4p + N + 3)x] \\
&= C_2 \left(2p + \frac{N-1}{2}\right) \left(2p + \frac{N+1}{2}\right) \left(2p + \frac{N+3}{2}\right) {}_2F_1\left(-3, 4p + N + 1, 2p + \frac{N-1}{2}; \frac{1-x}{2}\right) \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{2.2.13}$$

Bu sonuçlardan $f(x)$ için genel çözüm

$$f_{n_\theta}(x) = C_2 \left(2p + \frac{N-1}{2}\right) {}_2F_1\left(-n_\theta, 4p + N - 2 + n_\theta, 2p + \frac{N-1}{2}; \frac{1-x}{2}\right) \tag{2.2.14}$$

şeklinde yazılır. Burada, ${}_2F_1$ Gauss hipergeometrik fonksiyondur. Gauss hipergeometrik fonksiyonun ifadesi

$${}_2F_1(-n, \beta, \gamma; x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k n!}{(n-k)! k!} \frac{\Gamma(\beta+k)\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma+k)} x^k \tag{2.2.15}$$

şeklindedir [143]. (2.2.14) denklemi (2.2.5) denkleminde yerine yazılır ve x 'den θ_{N-1} 'e geçiş yapılarak N-boyutlu merkezci olmayan potansiyel için normalize olmamış açısall dalg fonksiyonu

$$\begin{aligned}
\Theta(\theta_{N-1}) &= C_2 (\sin \theta_{N-1})^{2p} \left(2p + \frac{N-1}{2}\right)_{n_\theta} \\
&\quad \times {}_2F_1\left(-n_\theta, 4p + N - 2 + n_\theta, 2p + \frac{N-1}{2}; \frac{1-\cos \theta_{N-1}}{2}\right)
\end{aligned} \tag{2.2.16}$$

olarak bulunur. Burada C_2 normalizasyon sabitidir ve $\int_0^\pi |\Theta(\theta_{N-1})|^2 \sin^{N-2} \theta_{N-1} d\theta_{N-1} = 1$ normalizasyon şartından bulunacaktır. Normalizasyon sabiti hesaplanırken

$$\begin{aligned} \int_0^1 x^{\gamma-1} (1-x)^{\alpha-\gamma} {}_2F_1(-n, \alpha+n, \gamma, x) {}_2F_1(-k, \alpha+k, \gamma, x) dx \\ = \frac{\Gamma^2(\gamma)\Gamma(\alpha-\gamma+n+1)}{\Gamma(\alpha+n)\Gamma(\gamma+n)} \frac{n!}{\alpha+2n} \delta_{nk} \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

hipergeometrik polinomlarının (2.2.17) diklik bağıntısı [143] kullanılır ve gerekli düzenlemelerden sonra normalize olmuş N-boyutta açılal dalga fonksiyonu

$$\begin{aligned} \Theta(\theta_{N-1}) = \frac{1}{\Gamma(2p+\frac{N-1}{2})} \left[\frac{\Gamma(4p+N-2+n_\theta)(4p+N-2+2n_\theta)}{2^{4p+N-2} n_\theta!} \right]^{\frac{1}{2}} (\sin \theta_{N-1})^{2p} \\ \times {}_2F_1\left(-n_\theta, 4p+N-2+n_\theta, 2p+\frac{N-1}{2}; \frac{1-\cos \theta_{N-1}}{2}\right) \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

şeklinde elde edilir. Gauss hipergeometrik fonksiyonun Jacobi polinomları arasındaki bağıntı [143]

$${}_2F_1\left(-n, \alpha+\beta+n+1, \alpha+1, \frac{1-x}{2}\right) = \frac{n!}{(\alpha+1)_n} P_n^{(\alpha, \beta)}(x) \quad (2.2.19)$$

kullanılırsa N-boyutta merkezci olmayan potansiyel için normalize olmuş açılal dalga fonksiyonu Jacobi polinomları cinsinden

$$\begin{aligned} \Theta(\theta_{N-1}) = \left[\frac{n_\theta! \Gamma(4p+N-2+n_\theta)(4p+N-2+2n_\theta)}{2^{4p+N-2} \Gamma(2p+\frac{N-1}{2}+n_\theta) \Gamma(2p+\frac{N-1}{2}+n_\theta)} \right]^{\frac{1}{2}} (\sin \theta_{N-1})^{2p} \\ \times P_{n_\theta}^{(2p+\frac{N-3}{2}, 2p+\frac{N-3}{2})}(\cos \theta_{N-1}) \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

şeklinde elde edilir. Jacobi ve Gegenbauer polinomları arasında

$$C_n^\lambda = \frac{\Gamma(n+2\alpha+1)\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(2\alpha+1)\Gamma(n+\alpha+1)} P_n^{(\alpha, \alpha)}(x) \quad (2.2.21)$$

şeklinde bağıntı vardır [144]. Denklem (2.2.20), denklem (2.2.21) kullanılarak yeniden düzenlendiğinde N-boyutta spin-0 parçacık için normalize olmuş açılal dalga fonksiyonu Gegenbauer polinomu cinsinden

$$\Theta(\theta_{N-1}) = \left[\frac{n_\theta!(4p+N-2+2n_\theta)}{2^{N-2}\Gamma(4p+N-2+n_\theta)} \right]^{\frac{1}{2}} (\sin\theta_{N-1})^{2p} \\ \times \sum_{m=0}^{n/2} \frac{(-1)^m \Gamma(2n_\theta - 2m + 4p + N - 2)}{2^{n_\theta+2p} \Gamma\left(n_\theta - m + 2p + \frac{N-1}{2}\right) m!(n_\theta - 2m)!} (\cos\theta_{N-1})^{n_\theta-2m} \quad (2.2.22)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.2.22), non-relativistik limitte Chen ve çalışma arkadaşlarının [28] elde ettiği küresel koordinatlarda relativistik olmayan dalga fonksiyonuna indirgenir.

2.2.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Klein-Gordon Denkleminin Bağlı Durum Çözümleri

Bu bölümde, N-boyutta radyal enerji spektrumu ve dalga fonksiyonu elde edilecektir.

Hartmann potansiyeli için N boyutta radyal Klein-Gordon denklemi

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{(N-1)}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \left[\frac{(E+\mu c^2)}{\hbar^2 c^2} \frac{\eta \sigma^2 e^2}{r} + \frac{(E^2 - \mu^2 c^4)}{\hbar^2 c^2} - \frac{l_{N-1}(l_{N-1}+N-2)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (2.2.23)$$

şeklindedir. Radyal dalga fonksiyonu

$$R(r) = r^{-\frac{N-1}{2}} u(r) \quad (2.2.24)$$

şeklinde alınır ve (2.2.23) denkleminde yerine yazılırsa N-boyutta radyal Klein-Gordon denklemi

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{(E+\mu c^2)}{\hbar^2 c^2} \frac{\eta \sigma^2 e^2}{r} - \frac{(N-1)(N-3)}{4r^2} + \frac{(E^2 - \mu^2 c^4)}{\hbar^2 c^2} - \frac{l_{N-1}(l_{N-1}+N-2)}{r^2} \right] u(r) = 0 \quad (2.2.25)$$

elde edilir. (2.2.25) denklemini düzenlemek için

$$\kappa = \left(\frac{E+\mu c^2}{\hbar^2 c^2 \varepsilon} \right) \eta \sigma^2 e^2 \quad \varepsilon^2 = -4 \left(\frac{E^2 - \mu^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \right) \quad (2.2.26)$$

uygun kısaltmalar yapıldıktan sonra $x = \varepsilon r$ dönüşümü yapılırsa

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \left[\frac{\kappa}{x} - \frac{1}{4} - \frac{(N-1)(N-3)}{4x^2} + \frac{l_{N-1}(l_{N-1}+N-2)}{x^2} \right] u(x) = 0 \quad (2.2.27)$$

denklemleri elde edilir. Dalga fonksiyonu sonlu olması gerektiğinden $x \rightarrow 0$ ve $x \rightarrow \infty$ 'a giderken

$$u(x) = x^{l_{N-1} + \frac{N-1}{2}} e^{-\frac{x}{2}} f(x) \quad (2.2.28)$$

şeklinde dalga fonksiyonu önerilir. Bu limitlerde $f(x)$, önerilen çözümü sonlu tutan bir fonksiyondur. Önerilen dalga fonksiyonu (2.2.27) denkleminde yerine yazılırsa ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklem

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \left(1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}\right) \frac{df(x)}{dx} + \left(\frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x} - \frac{\kappa}{x}\right) f(x) \quad (2.2.29)$$

elde edilir ve (2.2.29) denklemleri asimptotik iterasyon metoduna uygundur. (2.2.29) denklemini çözmek için (1.1.1) denklemleri ile karşılaştırılırsa

$$\lambda_0(x) = 1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}$$

$$s_0(x) = \frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x} - \frac{\kappa}{x}$$

belirlenir. (1.1.7) denklemleri kullanılarak $\lambda_n(x)$ ve $s_n(x)$ hesaplanır.

$$\lambda_1(x) = \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x^2} + \frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x} - \frac{\kappa}{x} + \left(1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}\right)^2$$

$$s_1(x) = -\frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x^2} + \frac{\kappa}{x^2} + \left(\frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x} - \frac{\kappa}{x}\right) \left(1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}\right)$$

$$\begin{aligned} \lambda_2(x) = & -\frac{2(2l_{N-1} + N - 1)}{x^3} - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x^2} + \frac{\kappa}{x^2} + \frac{2\left(1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}\right)(2l_{N-1} + N - 1)}{x^2} \\ & + \left(\frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x} - \frac{\kappa}{x}\right) \left(1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}\right) \\ & + \left(1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}\right) \left(\frac{2l_{N-1} + N - 1}{x^2} + \frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x} - \frac{\kappa}{x} + \left(1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}\right)^2\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} s_2(x) = & \frac{(2l_{N-1} + N - 1)}{x^3} - \frac{2\kappa}{x^3} + \left(-\frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x^2} + \frac{\kappa}{x^2}\right) \left(1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}\right) \\ & + \frac{\left(\frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x} - \frac{\kappa}{x}\right)(2l_{N-1} + N - 1)}{x^2} \\ & + \left(\frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x} - \frac{\kappa}{x}\right) \left(\frac{2l_{N-1} + N - 1}{x^2} + \frac{2l_{N-1} + N - 1}{2x} - \frac{\kappa}{x} + \left(1 - \frac{2l_{N-1} + N - 1}{x}\right)^2\right) \end{aligned}$$

...

(2.2.30)

Kullanılan metotta (1.1.9) denkleminde N-boyutta relativistik enerji özdeğerleri

$$\begin{aligned}
 \frac{s_0}{\lambda_0} = \frac{s_1}{\lambda_1} &\Rightarrow \kappa_{0l_{N-1}} = l_{N-1} + \frac{N-1}{2} \\
 \frac{s_1}{\lambda_1} = \frac{s_2}{\lambda_2} &\Rightarrow \kappa_{1l_{N-1}} = l_{N-1} + \frac{N+1}{2} \\
 \frac{s_2}{\lambda_2} = \frac{s_3}{\lambda_3} &\Rightarrow \kappa_{2l_{N-1}} = l_{N-1} + \frac{N+3}{2} \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{2.2.31}$$

şeklinde bulunur. (2.2.31) eşitliğindeki ifadeler genelleştirilirse

$$\kappa_{nl_{N-1}} = l_{N-1} + \frac{N-1}{2} + n \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{2.2.32}$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.2.26)'da tanımlanan eşitlikler denklem (2.2.32)'de yerine yazılırsa Hartmann potansiyeli için N-boyutta relativistik radyal enerji spektrumu

$$\frac{E_{nl_{N-1}} - \mu c^2}{E_{nl_{N-1}} + \mu c^2} = - \frac{(\eta \sigma^2 e^2)^2}{4 \hbar^2 c^2 \left[l_{N-1} + \frac{N-1}{2} + n \right]^2} \tag{2.2.33}$$

elde edilir. Denklem (2.2.12), denklem (2.2.33)'de yerine yazılır ve gerekli düzenleme yapılırsa Hartmann potansiyeli için N-boyutta relativistik titreşim-dönme enerji spektrumu

$$\frac{E_{nn_\theta m'} - \mu c^2}{E_{nn_\theta m'} + \mu c^2} = - \frac{(\eta \sigma^2 e^2)^2}{4 \hbar^2 c^2 \left[n + n_\theta + 1 + \sqrt{\left(\frac{N-3}{2} \right)^2 + \left(\frac{E + \mu c^2}{2 \mu c^2} \right) q \eta^2 \sigma^2 + m'^2} \right]^2} \tag{2.2.34}$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.2.34), non-relativistik limitte ($c \rightarrow \infty$), Durmus ve Özfıdan[43]'ın elde ettiği sonucu sağlamaktadır.

Denklem (2.2.31)'deki N-boyutta enerji özdeğerlerine karşı gelen radyal dalga fonksiyonları hesaplanır. Bölüm 1'de verilen (1.1.16) denklemini kullanılarak Maple programı yardımıyla N-boyutta radyal dalga fonksiyonları

$$\begin{aligned}
f_0(x) &= C_2 = C_2 {}_1F_1(0, 2l_{N-1} + N - 1, x) \\
f_1(x) &= -C_2(2l_{N-1} + N - 1 - x) = -C_2(2l_{N-1} + N - 1) {}_1F_1(-1, 2l_{N-1} + N - 1, x) \\
f_2(x) &= C_2[(2l_{N-1} + N - 1)(2l_{N-1} + N) - (2l_{N-1} + N)x + x^2] \\
&= C_2(2l_{N-1} + N - 1)(2l_{N-1} + N) {}_1F_1(-2, 2l_{N-1} + N - 1, x) \\
f_3(x) &= -C_2[(2l_{N-1} + N - 1)(2l_{N-1} + N)(2l_{N-1} + N + 1) \\
&\quad - 3(2l_{N-1} + N)(2l_{N-1} + N + 1)x + 3(2l_{N-1} + N + 1)x^2 - x^3] \\
&= C_2(2l_{N-1} + N - 1)(2l_{N-1} + N)(2l_{N-1} + N + 1) {}_1F_1(-3, 2l_{N-1} + N - 1, x) \\
&\vdots
\end{aligned}$$

şeklinde elde edilir. Bu sonuçlardan $f(x)$ için genel çözüm

$$f_n(x) = C_2(-1)^n(2l_{N-1} + N - 1)_n {}_1F_1(-n, 2l_{N-1} + N - 1, x) \quad (2.2.35)$$

olarak bulunur. Burada

$${}_1F_1(-n, \gamma, y) = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k n! \Gamma(\gamma)}{(n-k)! k! \Gamma(\gamma+k)} y^k \quad (2.2.36)$$

konfluent hipergeometrik fonksiyondur [143]. (2.2.35) denklemi, (2.2.28) denkleminde yerine yazılırsa yüksek küresel koordinatlarda Hartmann potansiyeli için normalize olmamış radyal dalga fonksiyonu

$$u(x) = C_2(-1)^n(2l_{N-1} + N - 1)_n x^{l_{N-1} + \frac{N-1}{2}} e^{-\frac{x}{2}} {}_1F_1(-n, 2l_{N-1} + N - 1, x) \quad (2.2.37)$$

elde edilir. Burada C_2 normalizasyon sabitidir. Normalizasyon sabiti

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^{N-1} dr = 1 \quad (2.2.38)$$

şartından bulunur. Konfluent hipergeometrik fonksiyonlarla Laguerre polinomları arasındaki bağıntı [143]

$${}_1F_1(-n, \alpha, x) = \frac{\Gamma(\alpha)n!}{\Gamma(\alpha+n)} L_n^{\alpha-1}(x) \quad (2.2.39)$$

normalizasyon sabitinin bulunmasında yardımcı olmaktadır.

Denklem (2.2.37), denklem (2.2.24)'de yerine yazılır. Daha sonra, (2.2.39) bağıntısı ve $x = \varepsilon r$ dönüşümü kullanılarak N-boyutta normalize olmamış dalga fonksiyonu

$$R(r) = C_2 (-1)^n \varepsilon^{l_{N-1} + \frac{N-1}{2}} r^{l_{N-1}} e^{-\frac{\varepsilon r}{2}} n! L_n^{2l_{N-1} + N - 2}(\varepsilon r) \quad (2.2.40)$$

şeklinde düzenlenir. Denklem (2.2.40), denklem (2.2.38)'de yerine yazılır ve elde edilen integralin çözümü için Laguerre polinomunun diklik bağıntısı [149-150]

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\beta \left[L_n^{\beta-1}(x) \right]^2 dx = \frac{(\beta+2n)\Gamma(\beta+n)}{n!} \quad (2.2.41)$$

kullanılır. Normalizasyon sabiti bulunarak denklem (2.2.40)'da yerine yazılırsa

$$R(r) = \left[\frac{n! \varepsilon^{2l_{N-1} + N}}{(2l_{N-1} + N - 2 + n)!(2n + 2l_{N-1} + N - 1)} \right]^{\frac{1}{2}} r^{l_{N-1}} e^{-\frac{\varepsilon r}{2}} (-1)^n L_n^{2l_{N-1} + N - 2}(\varepsilon r) \quad (2.2.42)$$

yüksek küresel koordinatlarda Hartmann potansiyeli için normalize radyal dalga fonksiyonu elde edilir.

2.2.3. N-Boyutta Radyal Beklenen Değerler

Bu bölümde, Chen ve arkadaşlarının [28] çalışmasındaki yaklaşım kullanılarak relativistik teorige N-boyutta Hartmann potansiyeli için köşegen matris elemanları ve bu matris elemanlarının analitik ifadeleri arasındaki tekrarlama bağıntıları elde edilir.

N-boyutta Hartmann potansiyeli için normalize edilmiş radyal dalga fonksiyonu

$$u(r) = N'(\varepsilon r)^{l_{N-1} + \frac{N-1}{2}} e^{-\frac{\varepsilon r}{2}} {}_1F_1(-n_r, 2l_{N-1} + N - 1, \varepsilon r) \quad (2.2.43)$$

şeklindedir. Burada N' , normalizasyon sabitidir.

$$N' = \left[\frac{\varepsilon \Gamma(2l_{N-1} + N - 1 + n_r)}{n_r! (\Gamma(2l_{N-1} + N - 1))^2 (2l_{N-1} + N - 1 + 2n_r)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.2.44)$$

İşlem kolaylığı için $l_{N-1} = l$ alınır ve yüksek küresel koordinatlarda Hartmann potansiyeli için beklenen değer

$$\begin{aligned}\langle nl|r^s|nl\rangle &= \int_0^\infty r^s [u_{nl}(r)]^2 dr \\ &= N'^2 \varepsilon^{2l+N-1} \int_0^\infty r^{2l+N-1+s} e^{-\varepsilon r} \left[{}_1F_1(-n, 2l+N-1, \varepsilon r) \right]^2 dr\end{aligned}\quad (2.2.45)$$

şeklinde yazılır. Konfluent hipergeometrik fonksiyonu içeren integral formülü [147]

$$A_\nu = \int_0^\infty e^{-kz} z^{\nu-1} \left[{}_1F_1(-n, \alpha, kz) \right]^2 dz \quad (2.2.46)$$

şeklindedir. Burada, n tamsayı ve $Re \nu > 0$. (2.2.46) eşitliği kullanılarak beklenen değer

$$\langle nl|r^s|nl\rangle = N'^2 \varepsilon^{2l+N-1} A_{2l+N+s} \quad (2.2.47)$$

olarak yazılır. Denklem (2.2.45) ile denklem (2.2.46) karşılaştırılırsa $k = \varepsilon$, $\nu = 2l + N + s$, $\alpha = 2l + N - 1$ olarak elde edilir. A_ν integrali

$$A_{\alpha+p} = \frac{(\alpha-p-1)(\alpha-p)\dots(\alpha+p-1)}{k^{2p+1}} A_{\alpha-p-1} \quad (2.2.48)$$

şeklinde tanımlıdır [153]. Burada p herhangi bir tamsayıdır. $p = s + 1$ alınır ve (2.2.48) eşitliğinde α 'nın değeri yerine yazıldığında

$$A_{2l+N+s} = \frac{(2l+N-3-s)(2l+N-2-s)\dots(2l+N-1+s)}{\varepsilon^{2s+3}} A_{2l+N-3-s} \quad (2.2.49)$$

elde edilir. (2.2.47) denkleminin elde edilmesine benzer şekilde

$$\langle nl|r^{-s-3}|nl\rangle = C_2^2 \varepsilon^{2l+N-1} A_{2l+N-s-3} \quad (2.2.50)$$

denklemini yazılır. Denklem (2.2.47) ve denklem (2.2.50)'den faydalanarak (2.2.49) eşitliği yeniden düzenlendiğinde yüksek küresel koordinatlarda radyal beklenen değerler için tekrarlamaya bağıntısı

$$\langle nl|r^s|nl\rangle = \frac{(2l+N-3-s)(2l+N-2-s)\dots(2l+N-1+s)}{\varepsilon^{2s+3}} \langle nl|r^{-s-3}|nl\rangle \quad (2.2.51)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.2.26)'nın denklem (2.2.25)'de yerine yazılması Hartmann potansiyelinin için N-boyutta radyal beklenen değerleri için diğer tekrarlamaya bağıntısını elde etmemizi sağlar. Böylece, N-boyutta radyal Klein-Gordon denklemi

$$\frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + \left[-\frac{\varepsilon^2}{4} + \frac{\kappa\varepsilon}{r} - \frac{(N-1)(N-3)}{4r^2} - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right] u_{nl}(r) = 0 \quad (2.2.52)$$

şeklinde yazılır ve bu denklemin her terimini $r^s u_{nl}(r)$ ile çarpıp $\int_0^\infty \dots dr$ integrali alınır ve gerekli cebirsel işlemler yapılır ise

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^s \left(\frac{du_{nl}(r)}{dr} \right)^2 dr &= \left(\frac{s(s-1)}{2} - \frac{(N-1)(N-3)}{4} - l(l+N-2) \right) \langle nl | r^{s-2} | nl \rangle \\ &\quad - \frac{\varepsilon^2}{4} \langle nl | r^s | nl \rangle + \kappa\varepsilon \langle nl | r^{s-1} | nl \rangle \end{aligned} \quad (2.2.53)$$

elde edilir. (2.2.52) denkleminin her terimini $r^{s+1} \frac{du_{nl}(r)}{dr}$ ile çarpıp $\int_0^\infty \dots dr$ integrali alınır ve gerekli işlemler yapıldıktan sonra

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^s \left(\frac{du_{nl}(r)}{dr} \right)^2 dr &= \frac{\varepsilon^2}{4} \langle nl | r^s | nl \rangle - \kappa\varepsilon \left(\frac{s}{s+1} \right) \langle nl | r^{s-1} | nl \rangle \\ &\quad + \left(\frac{(N-1)(N-3)}{4} + l(l+N-2) \right) \frac{s-1}{s+1} \langle nl | r^{s-2} | nl \rangle \end{aligned} \quad (2.2.54)$$

elde edilir. (2.2.53) ve (2.2.54) eşitliklerini karşılaştırdığımızda N-boyutta Hartmann potansiyeli için beklenen değerlerin bir diğer tekrarlama bağıntısı

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon^2}{2} \langle nl | r^s | nl \rangle &= \kappa\varepsilon \left(\frac{2s+1}{s+1} \right) \langle nl | r^{s-1} | nl \rangle \\ &\quad - \frac{s}{2(s+1)} [(2l+N-2)^2 - s^2] \langle nl | r^{s-2} | nl \rangle \end{aligned} \quad (2.2.55)$$

elde edilir. (2.2.51) ve (2.2.55) tekrarlama bağıntılarını kullanarak Hartmann potansiyeli için N-boyutta beklenen değerler

$$\begin{aligned} \langle nl | r^4 | nl \rangle &= 2 \left(\frac{\hbar^2 c^2}{(E + \mu c^2) \eta \sigma^2 e^2} \right)^4 \left(l + \frac{N-1}{2} + n \right)^4 \left[63 \left(l + \frac{N-1}{2} + n \right)^4 - (70l(l+N-2) \right. \\ &\quad \left. + \frac{35}{2} (N^2 - 4N - 3)) \left(l + \frac{N-1}{2} + n \right)^2 + 15 \left(l + \frac{N-1}{2} \right) \left(l + \frac{N-3}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \left(l + \frac{N-5}{2} \right) \left(l + \frac{N+1}{2} \right) - 20 \left(l + \frac{N-1}{2} \right) \left(l + \frac{N-3}{2} \right) + 12 \right] \\ \langle nl | r^3 | nl \rangle &= \left(\frac{\hbar^2 c^2}{(E + \mu c^2) \eta \sigma^2 e^2} \right)^3 \left(l + \frac{N-1}{2} + n \right)^2 \left[35 \left(l + \frac{N-1}{2} + n \right)^4 - (30l(l+N-2) \right. \\ &\quad \left. + \frac{15}{2} N^2 - 30N - \frac{5}{2}) \left(l + \frac{N-1}{2} + n \right)^2 + 3 \left(l + \frac{N-1}{2} \right) \left(l + \frac{N-3}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \left(l + \frac{N-5}{2} \right) \left(l + \frac{N+1}{2} \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle nl|r^2|nl\rangle &= 2\left(\frac{\hbar^2 c^2}{(E+\mu c^2)\eta\sigma^2 e^2}\right)^2 \left(l+\frac{N-1}{2}+n\right)^2 \left[5\left(l+\frac{N-1}{2}+n\right)^2 - \frac{3}{4}(2l+N-2)^2 + \frac{7}{4}\right] \\
\langle nl|r|nl\rangle &= \frac{\hbar^2 c^2}{(E+\mu c^2)\eta\sigma^2 e^2} \left[3\left(l+\frac{N-1}{2}+n\right)^2 - \frac{1}{4}((2l+N-2)^2 - 1)\right] \\
\langle nl|r^{-1}|nl\rangle &= \frac{1}{2}\left(\frac{E+\mu c^2}{\hbar^2 c^2}\right) \frac{\eta\sigma^2 e^2}{\left(l+\frac{N-1}{2}+n\right)^2} \\
\langle nl|r^{-2}|nl\rangle &= \left(\frac{E+\mu c^2}{\hbar^2 c^2}\right)^2 \frac{(\eta\sigma^2 e^2)^2}{2\left(l+\frac{N-1}{2}+n\right)^3 (2l+N-2)} \\
\langle nl|r^{-3}|nl\rangle &= \left(\frac{E+\mu c^2}{\hbar^2 c^2}\right)^3 \frac{(\eta\sigma^2 e^2)^3}{\left(l+\frac{N-1}{2}+n\right)^3 (2l+N-3)(2l+N-2)(2l+N-1)} \\
\langle nl|r^{-4}|nl\rangle &= \left(\frac{E+\mu c^2}{\hbar^2 c^2}\right)^4 \frac{(\eta\sigma^2 e^2)^4}{\left(l+\frac{N-1}{2}+n\right)^5} \frac{\left[3\left(l+\frac{N-1}{2}+n\right)^2 - \frac{1}{4}(2l+N-3)(2l+N-1)\right]}{(2l+N-4)(2l+N-3)(2l+N-2)(2l+N-1)(2l+N)} \quad (2.2.56)
\end{aligned}$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.2.56)'da elde edilen radyal beklenen değerler, küresel koordinatlarda non-relativistik limitte ($c \rightarrow \infty$) Chen ve çalışma arkadaşlarının [28] elde ettiği sonuçlara indirgenmektedir. $\eta\sigma^2 = Z$ ve $N = 3$ için denklem (2.2.56)'daki radyal beklenen değerler nonrelativistik limitte Bockasten [148]'in çalışmasını sağlamaktadır.

2.2.4. Hidrojen Molekülü İçin Relativistik Enerjinin Nümerik Hesaplamaları

Bu bölümde, N-boyutta radyal enerji spektrumu olan denklem (2.2.33) kullanılarak hidrojen molekülünün üç, dört ve beş boyutta farklı kuantum durumları için relativistik enerjinin (E_{nl}) nümerik değerleri elde edildi ve bu değerler Tablo 2.1'de verildi. Ayrıca, denklem (2.2.12) kullanılarak N boyutta dönme ve titreşim spektrumunun hidrojen molekülü için üç, dört ve beş boyutta $n = 1$, $l_1 = 0$ ve farklı n_θ durumlarında hesaplaması yapıldı. Denklem (2.2.3)'de verilen m'^2 tanımından $N = 3$ için $m'^2 = l_1^2$, $N = 4$ için $m'^2 = l_2(l_2 + 1)$ ve $N = 5$ için $m'^2 = l_3(l_3 + 2)$ olarak belirlenir. İlk olarak, $N = 3$, l_1 ve n_θ sıfır alınıp, denklem (2.2.12)'de yerine yazılırsa l_2 denklemi elde edilir. Elde edilen l_2 denklemi, (2.2.33) denkleminde yerine yazılarak relativistik enerjinin değeri bulundu. Benzer şekilde, farklı boyut ve açısız kuantum durumlarında hesaplanan E_{nm} değerleri Tablo 2.2'de verildi.

Hidrojen molekülü için üç, dört ve beş boyutta relativistik enerjinin nümerik değerlerini hesaplarken $\mu = 0.50391 amu$, $\hbar c = 1973.29 \times 10^{-10} eVm$ olarak alındı.

Tablo 2.1. Hartmann potansiyeli etkisindeki H_2 molekülü için farklı boyutlarda hesaplanan relativistik enerji değerleri

n	l	$N = 3$ $E_{nl}(MeV)$	$N = 4$ $E_{nl}(MeV)$	$N = 5$ $E_{nl}(MeV)$
1	0	469.3900514	469.3911751	469.3917855
2	0	469.3917855	469.3921536	469.3923924
2	1	469.3923924	469.3925562	469.3926734
3	0	469.3923924	469.3925562	469.3926734
3	1	469.3926734	469.3927601	469.3928260
3	2	469.3928260	469.3928773	469.3929180

Tablo 2.2. $n = 1, l_1 = 0$ durumunda H_2 molekülü için üç, dört ve beş boyutlu dönme-titreşim relativistik enerjilerinin nümerik değerleri

n_θ	$N = 3$ $E_{nm}(MeV)$	$N = 4$ $E_{nm}(MeV)$	$N = 5$ $E_{nm}(MeV)$
0	469.3917855	469.3923094	469.3925591
1	469.3923924	469.3927875	469.3929392
2	469.3926734	469.3929589	469.3930533
3	469.3930260	469.3920376	469.3931008

2.2.5. Farklı Boyutlar İçin Küresel ve Kutupsal Koordinatlarda Açısal Dalga Fonksiyonlarının Olasılık Dağılımları

Bu bölümde, Hartmann potansiyeli etkisindeki H_2 molekülü için üç, dört ve beş boyutlu açısal relativistik dalga fonksiyonlarının küresel ve kutupsal koordinatlarda olasılık dağılımlarının grafikleri Matlab programı kullanılarak çizildi. Bu grafiklerin çiziminde Tablo 2.2’de elde edilen relativistik dönme-titreşim enerjileri denklem (2.2.7)’de kullanılarak her bir durum için p değeri elde edildi. Hesaplanan bu değer denklem (2.2.20)’de yerine yazılarak üç, dört ve beş boyut için farklı kuantum durumlarında normalize olmamış açısal dalga fonksiyonları bulundu.

Denklem (2.2.6) yardımıyla denklem (2.2.19)’daki Jacobi polinomlarının $N = 3$, $N = 4$ ve $N = 5$ boyut için açılımları Tablo 2.3, 2.4 ve 2.5’de verildi.

Tablo 2.3. $N = 3$ için Jacobi polinomları

n_θ	p	$P_{n_\theta}^{(2p,2p)}(\cos\theta)$
0	0.4999996305	1
1	0.4999997921	$1.999999584\cos\theta$
2	0.4999998670	$-0.7499999333+3.749999266\cos^2\theta$
3	0.4999999076	$6.999998878\cos^3\theta -2.999999678\cos\theta$

Tablo 2.4. $N = 4$ için Jacobi polinomları

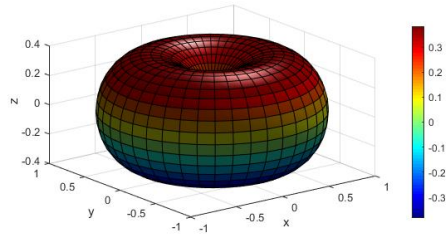
n_θ	p	$P_{n_\theta}^{(2p+\frac{1}{2},2p+\frac{1}{2})}(\cos\theta)$
0	0.651387384	1
1	1.096290970	$3.692581940\cos\theta$
2	1.570027329	$-1.410013664+14.49509461\cos^2\theta$
3	2.054886069	$59.60223687\cos^3\theta -12.57471495\cos\theta$

Tablo 2.5. $N = 5$ için Jacobi polinomları

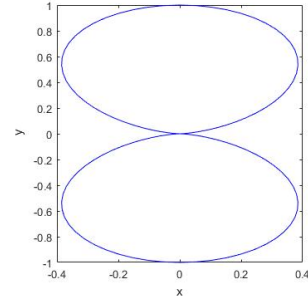
n_θ	p	$P_{n_\theta}^{(2p+1,2p+1)}(\cos\theta)$
0	0.755266006	1
1	1.655095304	$5.310190608\cos\theta$
2	2.610477096	$-2.055238550+31.73680539\cos^2\theta$
3	3.585596776	$202.0846106\cos^3\theta -28.40609296\cos\theta$

Tablo 2.3 elde edilen açılımlar denklem (2.2.20)'de yazıldı ve H_2 molekülü için küresel ve kutupsal koordinatlarda açılal relativistik dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları elde edildi. Bu dağılımlar Şekil 2.2'de verildi. Benzer şekilde, Tablo 2.4 ve 2.5 'deki açılımların yardımıyla $N = 4$ ve $N = 5$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açılal relativistik dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları elde edildi ve sırasıyla Şekil 2.3, 2.4'de gösterildi. Grafikler incelendiğinde $N = 4$ ve $N = 5$ boyutta hidrojen molekülü için açılal olasılık dağılımlarının $N = 3$ boyutta elde edilen olasılık dağılımlarından farklı olduğu görülmektedir. Farklı açılal kuantum sayılarında, boyut artışı ile birlikte

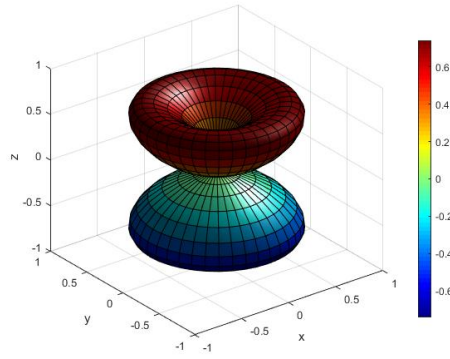
olasılık dağılımlarında küresel boğum yüzeyinin çapı azalıp açısız dalga fonksiyonlarının genliğinin arttığı gözlenmektedir.



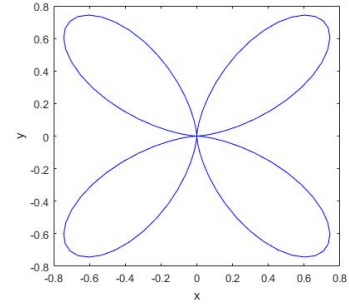
(a)



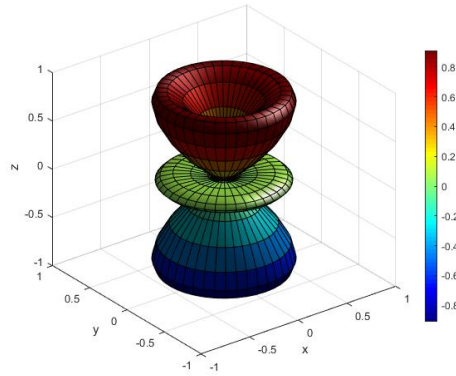
(b)



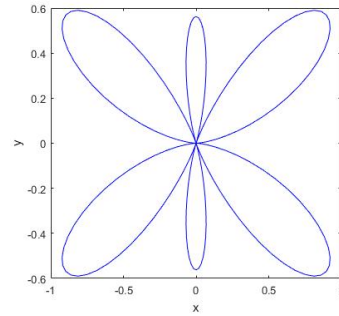
(c)



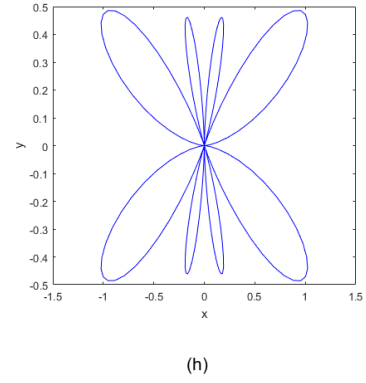
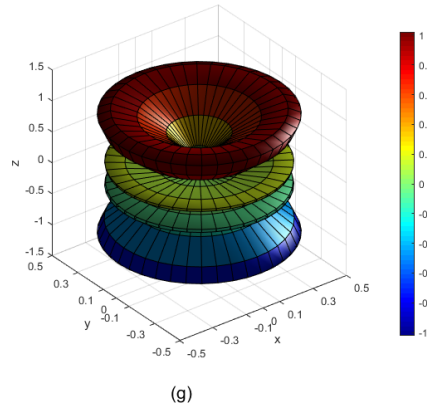
(d)



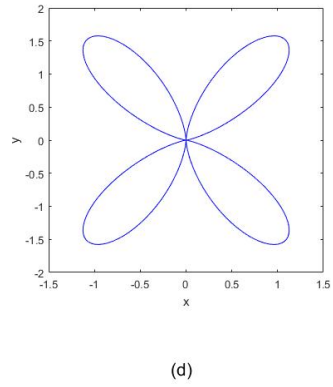
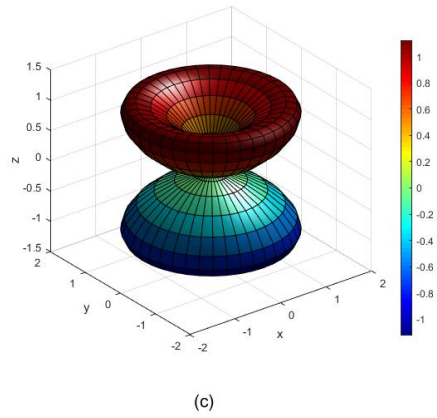
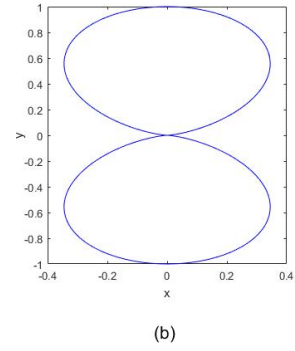
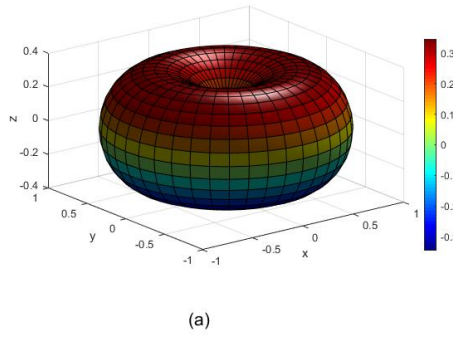
(e)

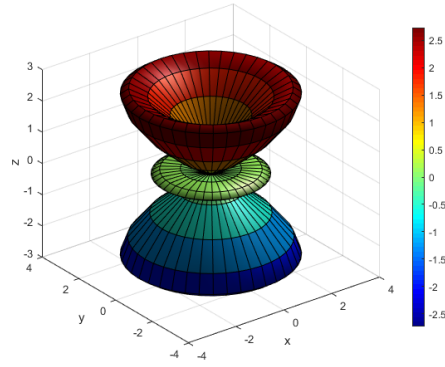


(f)

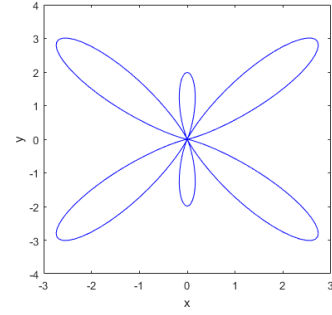


Şekil 2.2. (a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 3$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısız dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları

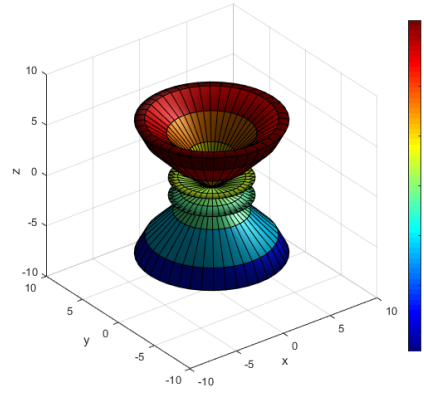




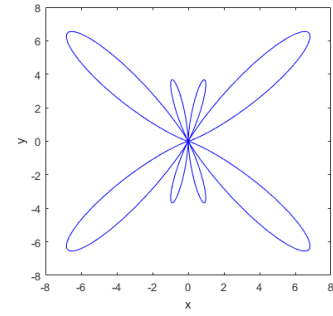
(e)



(f)

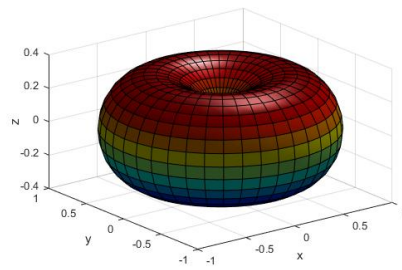


(g)

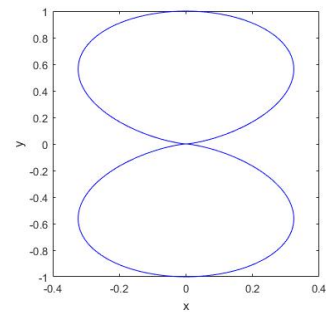


(h)

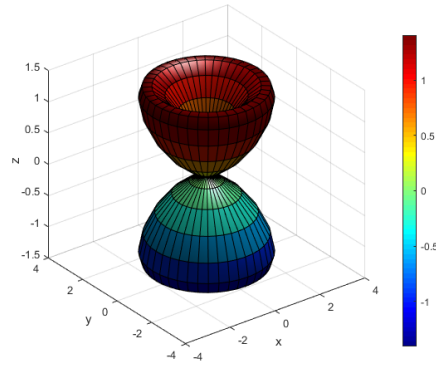
Şekil 2.3. (a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 4$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısıl dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları



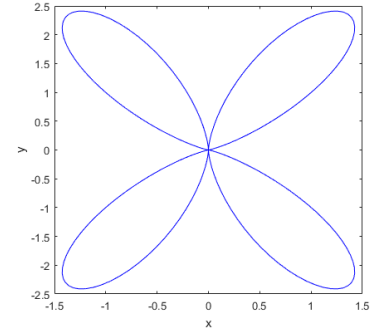
(a)



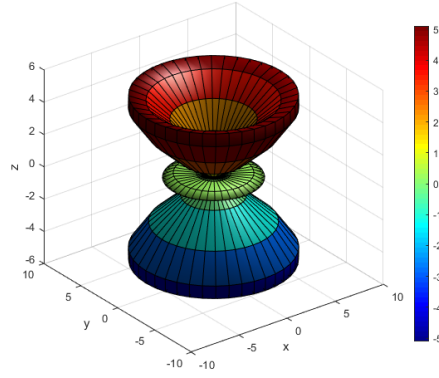
(b)



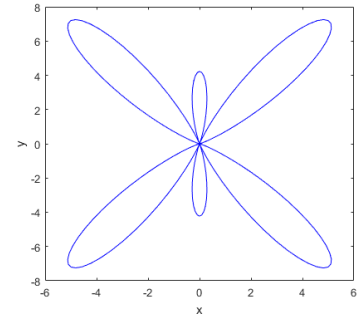
(c)



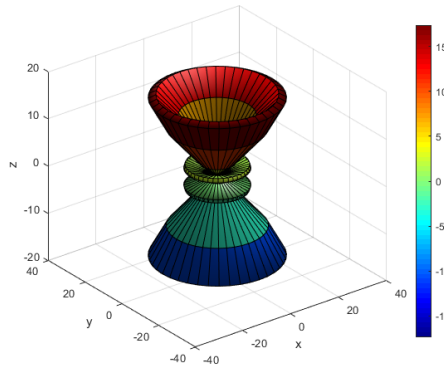
(d)



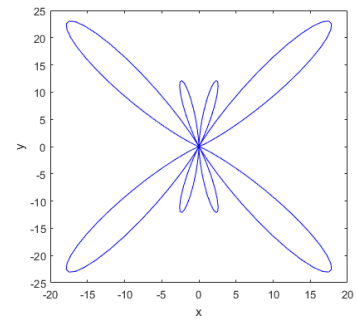
(e)



(f)



(g)



(h)

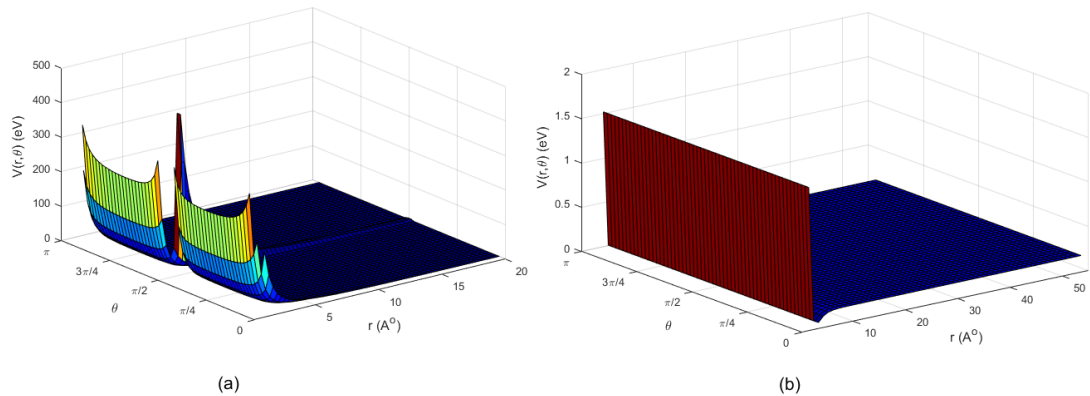
Şekil 2.4. (a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 5$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısız dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları

2.3. Asimptotik İterasyon Metodu İle Merkezci Olmayan Morse Potansiyeli İçin N- Boyutta Klein-Gordon Denkleminin Yaklaşık Çözümleri

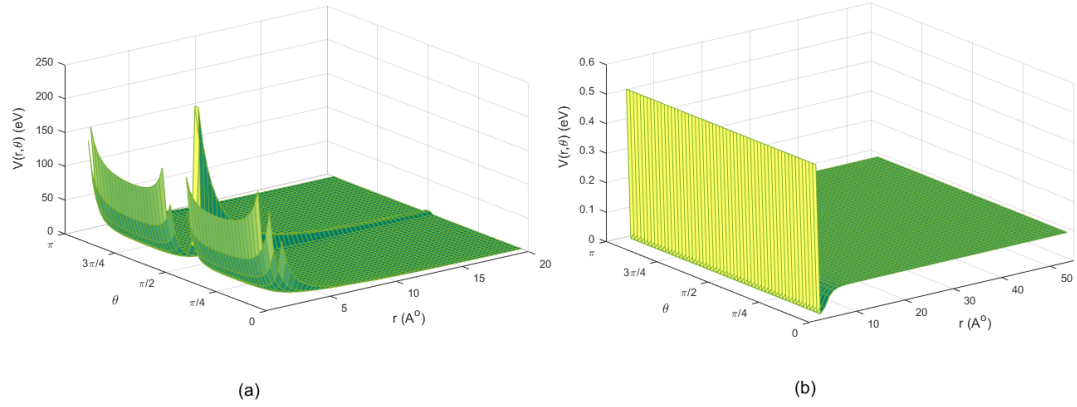
Merkezcil olmayan Morse potansiyeli

$$V(r, \theta_{N-1}) = D_e (1 - e^{-\alpha(r-r_e)})^2 + \frac{\eta \cos^4 \theta_{N-1} + \beta \cos^2 \theta_{N-1} + \gamma}{r^2 \sin^2 \theta_{N-1} \cos^2 \theta_{N-1}} \quad (2.3.1)$$

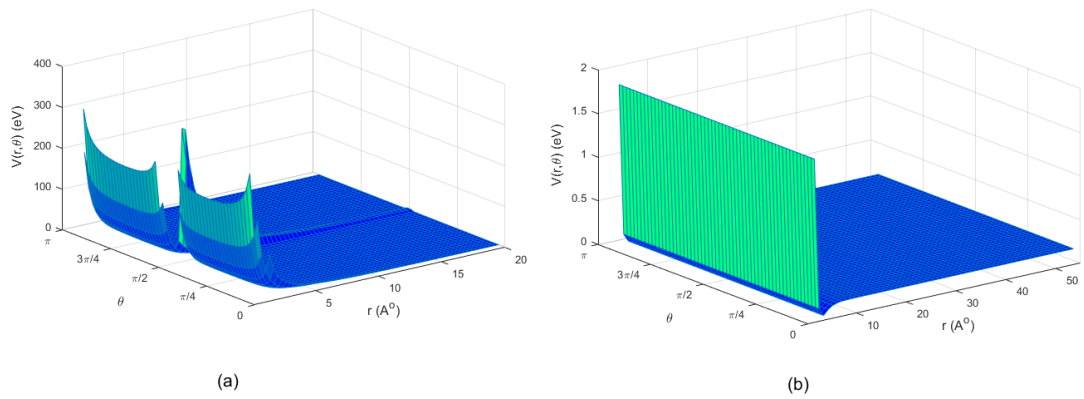
şeklinde tanımlanır. Burada, r_e atomlar arasındaki denge uzaklığı, D_e ayrışma enerjisi, α potansiyeli tanımlayan spektroskopik sabit, η , β ve γ potansiyeli tanımlayan parametrelerdir. Toprak alkali iki atomlu moleküller ($Ca_2 X^1\Sigma^+$, $MgCa X^1\Sigma^+$, $Sr_2 X^1\Sigma^+$ ve $Sr_2 A^1\Sigma^+$) için merkezcil olmayan Morse potansiyelinin yüzey grafikleri Şekil 2.5, 2.6, 2.7 ve 2.8’de verildi. $\eta = \beta = \gamma = 1 \text{ eVA}^{02}$ alındığında merkezcil olmayan Morse potansiyelinin yüzey grafiklerinde açılal katkı etkisini net bir şekilde görebiliriz. Fakat, merkezcil olmayan potansiyel parametrelerini 10^{-6} eVA^{02} değerine eşit veya küçük alıp her grafikte r ’nin aralığını aynı tutarsam vardığımız sonuç toprak alkali metal grubu moleküllerinden uyarılmış durumda strontiyum molekülü için çizdiğimiz yüzey grafiğı merkezcil potansiyelin yüzey grafiğıne en yakın eğriyi vermiştir. Daha sonra, sırasıyla taban durumunda magnezyum-kalsiyum, strontiyum ve kalsiyum molekülleri için çizdiğimiz yüzey grafiklerinin merkezcil potansiyelin yüzey grafiğıne yaklaştığı görölmektedir. Kullanılan moleküller için spektroskopik sabitler Tablo 2.6’da verildi.



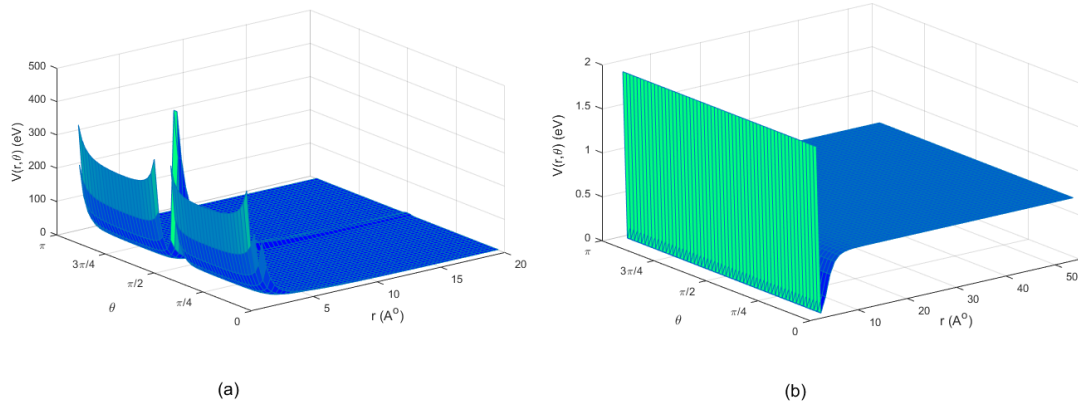
Şekil 2.5. Merkezci olmayan Morse potansiyeli etkisindeki $Ca_2 X^1\Sigma^+$ molekülü için yüzey grafiğı (a) $\eta = \beta = \gamma = 1 \text{ eVA}^{02}$ (b) $\eta = \beta = \gamma = 10^{-6} \text{ eVA}^{02}$



Şekil 2.6. Merkezci olmayan Morse potansiyeli etkisindeki $MgCa X^1\Sigma^+$ molekülü için yüzey grafiği (a) $\eta = \beta = \gamma = 1 eVA^{02}$ (b) $\eta = \beta = \gamma = 10^{-6} eVA^{02}$



Şekil 2.7. Merkezci olmayan Morse potansiyeli etkisindeki $Sr_2 X^1\Sigma^+$ molekülü için yüzey grafiği (a) $\eta = \beta = \gamma = 1 eVA^{02}$ (b) $\eta = \beta = \gamma = 10^{-6} eVA^{02}$



Şekil 2.8. Merkezci olmayan Morse potansiyeli etkisindeki $Sr_2 A^1\Sigma^+$ molekülü için yüzey grafiği (a) $\eta = \beta = \gamma = 1 \text{ eV}\text{\AA}^0{}^2$ (b) $\eta = \beta = \gamma = 10^{-6} \text{ eV}\text{\AA}^0{}^2$

Tablo 2.6. İki atomlu moleküllerin spektroskopik sabitleri

	$Ca_2 X^1\Sigma^+$	$MgCa X^1\Sigma^+$	$Sr_2 X^1\Sigma^+$	$Sr_2 A^1\Sigma^+$
$D_e(\text{cm}^{-1})$	1095.0	691.5	1060.0	5400.0
$w_e(\text{cm}^{-1})$	65.0748	60.257	40.32	85.07
$r_e(\text{\AA}^0)$	4.276891	4.039	4.4464	3.9518
$\mu(\text{amu})$	19.981296	14.988896	43.9528095	43.9528095

2.3.1. Merkezci Olmayan Potansiyel İçin Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısız Klein-Gordon Denkleminin Çözümleri

Bu bölümde, merkezci olmayan potansiyel etkisindeki spin-0 parçacık için N-boyutta açısız Klein-Gordon denkleminin çözümleri elde edilecektir.

Merkezci olmayan potansiyel için N-boyutta relativistik açısız dalga denklemi

$$\frac{d^2\Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}^2} + (N-2) \frac{\cos\theta_{N-1}}{\sin\theta_{N-1}} \frac{d\Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}} - \left[\frac{(E+\mu c^2)\eta \cos^4\theta_{N-1} + \beta \cos^2\theta_{N-1} + \gamma}{\hbar^2 c^2 \sin^2\theta_{N-1} \cos^2\theta_{N-1}} + \frac{l_{N-2}(l_{N-2}+N-3)}{\sin^2\theta_{N-1}} - l_{N-1}(l_{N-1}+N-2) \right] \Theta(\theta_{N-1}) = 0 \quad (2.3.2)$$

şeklinde yazılır. (2.3.2) denkleminde

$$l_{N-1}(l_{N-1}+N-2) = l_{N-1}^2 - \frac{1}{4}(N-2) \quad m^2 = l_{N-2}(l_{N-2}+N-3) \quad (2.3.3)$$

tanımları kullanılır ve $z = \cos^2 \theta_{N-1}$ dönüşümü uygulanırsa

$$4z(1-z) \frac{d^2 \Theta(z)}{dz^2} + 2(1-Nz) \frac{d\Theta(z)}{dz} - \left[\xi - \frac{\nu}{z(1-z)} - \frac{\omega}{1-z} \right] \Theta(z) = 0 \quad (2.3.4)$$

elde edilir. Burada,

$$\xi = \frac{\eta(E+\mu c^2)}{\hbar^2 c^2} + l'^2_{N-1} - \frac{1}{4}(N-2) \quad (2.3.5)$$

$$\omega = (\beta + \eta) \frac{(E+\mu c^2)}{\hbar^2 c^2} + m^2 \quad (2.3.6)$$

$$\nu = \frac{\gamma(E+\mu c^2)}{\hbar^2 c^2} \quad (2.3.7)$$

olarak alınır. Açısal dalga fonksiyonun asimptotik davranışı incelendiğinde önerilen çözüm

$$\Theta(z) = z^{\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{1+4\nu}}{4}} (1-z)^{\frac{3-N}{4} + \frac{\sqrt{(N-3)^2 + 4\omega + 4\nu}}{4}} f(z) \quad (2.3.8)$$

şeklindedir. Burada, $f(z)$ belirlenecek fonksiyondur. Denklem (2.3.8)'de

$$A = \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{1+4\nu}}{4}$$

$$B = \frac{3-N}{4} + \frac{\sqrt{(N-3)^2 + 4\omega + 4\nu}}{4} \quad (2.3.9)$$

olarak tanımlanır ve denklem (2.3.8), denklem (2.3.4)'de yerine yazılırsa

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} = \left[\frac{z(2A+2B+\frac{N}{2}) - (2A+\frac{1}{2})}{z(1-z)} \right] \frac{df(z)}{dz} + \left[\frac{(A+B)^2 + (A+B)\frac{(N-2)}{2} - \frac{\xi}{4}}{z(1-z)} \right] f(z) \quad (2.3.10)$$

ikinci mertebeden lineer diferansiyel denklem elde edilir. Denklem (2.3.10)'un yapısı asimptotik iterasyon yöntemine uygundur.

Denklem (2.3.10), denklem (1.1.1) ile karşılaştırıldığında

$$\lambda_0(z) = \frac{z\left(2A+2B+\frac{N}{2}\right)-(2A+\frac{1}{2})}{z(1-z)}$$

$$s_0(z) = \frac{(A+B)^2+(A+B)\frac{(N-2)}{2}-\frac{\xi}{4}}{z(1-z)}$$

olarak belirlenir. Denklem (1.1.9) kullanılarak $\lambda_n(z)$ ve $s_n(z)$ değerleri

$$\begin{aligned} \lambda_1(z) &= \frac{2A+2B+\frac{N}{2}}{z(1-z)} - \frac{z\left(2A+2B+\frac{N}{2}\right)-(2A+\frac{1}{2})}{z^2(1-z)} + \frac{z\left(2A+2B+\frac{N}{2}\right)-(2A+\frac{1}{2})}{z(1-z)^2} + \frac{(A+B)^2+(A+B)\frac{(N-2)}{2}-\frac{\xi}{4}}{z(1-z)} \\ &\quad + \frac{\left(z\left(2A+2B+\frac{N}{2}\right)-(2A+\frac{1}{2})\right)^2}{z^2(1-z)^2} \\ s_1(z) &= -\frac{(A+B)^2+(A+B)\frac{(N-2)}{2}-\frac{\xi}{4}}{z^2(1-z)} + \frac{(A+B)^2+(A+B)\frac{(N-2)}{2}-\frac{\xi}{4}}{z(1-z)^2} \\ &\quad + \frac{\left((A+B)^2+(A+B)\frac{(N-2)}{2}-\frac{\xi}{4}\right)\left(z\left(2A+2B+\frac{N}{2}\right)-(2A+\frac{1}{2})\right)}{z^2(1-z)^2} \\ &\quad \vdots \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

elde edilir.

Asimptotik iterasyon metodunun denklem (1.1.9)'da verilen kuantizasyon koşulu kullanılarak yüksek küresel koordinatlarda enerji özdeğerleri

$$\begin{aligned} \frac{s_0}{\lambda_0} = \frac{s_1}{\lambda_1} &\Rightarrow \xi_0 = 4(A+B)^2 + 2(N-2)(A+B) \\ \frac{s_1}{\lambda_1} = \frac{s_2}{\lambda_2} &\Rightarrow \xi_1 = 4(A+B)^2 + 2(N+2)(A+B) + 2N \\ \frac{s_2}{\lambda_2} = \frac{s_3}{\lambda_3} &\Rightarrow \xi_2 = 4(A+B)^2 + 2(N+6)(A+B) + 2(2N+4) \\ &\quad \vdots \end{aligned} \quad (2.3.12)$$

olarak bulunur. $n = 0, 1, 2, \dots$ olmak üzere (2.3.12) eşitliğindeki ifadeler genelleştirildiğinde

$$\xi_n = 4(A+B)^2 + [8n + 2(N-2)](A+B) + n(2N + 4n - 4) \quad (2.3.13)$$

eşitliği elde edilir. Denklem (2.3.3) ve denklem (2.3.5), denklem (2.3.13)'de yerine yazılır ve belirli işlem basamaklarından sonra yüksek küresel koordinatlarda l_{N-1} ifadesi

$$l_{N-1} = \frac{2-N}{2} + \frac{\sqrt{(N-2)^2 + 16(A+B)^2 + 4[8n+2(N-2)](A+B) + 4n(2N+4n-4) - \frac{4\eta(E+\mu c^2)}{\hbar^2 c^2}}}{2} \quad (2.3.14)$$

şeklinde elde edilir. Burada, $n = 0, 1, 2, \dots$ değerlerini alır.

N-boyutta merkezci olmayan potansiyel için açısız dalga fonksiyonları (1.1.16) denklemi kullanılarak elde edilir.

$$\begin{aligned} f_0(z) &= C_2 = C_2 {}_2F_1\left(0, 2A + 2B + \frac{N-2}{2}, 2A + \frac{1}{2}; z\right) \\ f_1(z) &= -C_2[4A + 1 - (4A + 4B + N)z] \\ &= -C_2\left(2A + \frac{1}{2}\right) {}_2F_1\left(-1, 2A + 2B + \frac{N}{2}, 2A + \frac{1}{2}; z\right) \\ f_2(z) &= C_2[(4A + 1)(4A + 3) - 2(4A + 4B + N + 2)(4A + 3)z \\ &\quad + (4A + 4B + N + 2)(4A + 4B + N + 5)z^2] \\ &= C_2\left(2A + \frac{3}{2}\right)\left(2A + \frac{1}{2}\right) {}_2F_1\left(-2, 2A + 2B + \frac{N+2}{2}, 2A + \frac{1}{2}; z\right) \\ f_3(z) &= -C_2[-(4A + 5)(4A + 3)(4A + 1) + 3(4A + 4B + N + 4)(4A + 5)(4A + 3)z \\ &\quad - 3(4A + 4B + N + 6)(4A + 4B + N + 4)(4A + 5)z^2 - (4A + 4B + N + 8) \\ &\quad \times (4A + 4B + N + 6)(4A + 4B + N + 4)z^3] \\ &= -C_2\left(2A + \frac{5}{2}\right)\left(2A + \frac{3}{2}\right)\left(2A + \frac{1}{2}\right) {}_2F_1\left(-3, 2A + 2B + \frac{N+4}{2}, 2A + \frac{1}{2}; z\right) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (2.3.15)$$

$f(z)$ için elde edilen sonuçlar genelleştirildiğinde

$$f_n(z) = C_2(-1)^n \left(2A + \frac{1}{2}\right)_n {}_2F_1\left(-n, 2A + 2B + \frac{N-2}{2} + n, 2A + \frac{1}{2}; z\right) \quad (2.3.16)$$

olarak bulunur. Denklem (2.3.16)'da ${}_2F_1$, Gauss hipergeometrik fonksiyondur. Denklem (2.3.16), denklem (2.3.8)'de yerine yazılır ve z 'den θ_{N-1} 'e geçiş yapıldığında yüksek küresel koordinatlarda normalize olmamış açısız relativistik dalga fonksiyonu

$$\begin{aligned}\Theta(\theta_{N-1}) &= C_2 (\cos^2 \theta_{N-1})^A (1 - \cos^2 \theta_{N-1})^B (-1)^n \left(2A + \frac{1}{2}\right)_n \\ &\quad \times {}_2F_1\left(-n, 2A + 2B + \frac{N-2}{2} + n, 2A + \frac{1}{2}; \cos^2 \theta_{N-1}\right)\end{aligned}\quad (2.3.17)$$

şeklinde elde edilir. $\int_0^\pi |\Theta(\theta_{N-1})|^2 \sin^{N-2} \theta_{N-1} d\theta_{N-1} = 1$ normalizasyon şartı kullanılarak denklem (2.3.17)'deki C_2 normalizasyon sabiti bulunur. Buradan, merkezci olmayan potansiyel etkisindeki spin-0 parçacık için normalize dalga fonksiyonu

$$\begin{aligned}\Theta(\theta_{N-1}) &= \left[\frac{\Gamma\left(2A+2B+\frac{N-2}{2}+n\right)\Gamma\left(2A+\frac{1}{2}+n\right)\left(2A+2B+\frac{N-2}{2}+2n\right)}{\Gamma\left(2B+\frac{N-1}{2}+n\right)n!} \right]^{1/2} \\ &\quad \times (\cos^2 \theta_{N-1})^A (1 - \cos^2 \theta_{N-1})^B (-1)^n \frac{1}{\Gamma\left(2A+\frac{1}{2}\right)} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(-n, 2A + 2B + \frac{N-2}{2} + n, 2A + \frac{1}{2}; \cos^2 \theta_{N-1}\right)\end{aligned}\quad (2.3.18)$$

şeklinde elde edilir. Gauss hipergeometrik fonksiyon ve Jacobi polinomu arasındaki bağıntı [143] kullanılarak

$${}_2F_1(-n, a_0 + b_0 + 1 + n, a_0 + 1; s) = P_n^{(a_0, b_0)}(1 - 2s) \quad (2.3.19)$$

denklem (2.3.18) Jacobi polinomu cinsinden

$$\begin{aligned}\Theta(\theta_{N-1}) &= (\cos^2 \theta_{N-1})^A (1 - \cos^2 \theta_{N-1})^B (-1)^n \left[\frac{\Gamma\left(2A+2B+\frac{N-2}{2}+n\right)\left(2A+2B+\frac{N-2}{2}+2n\right)n!}{\Gamma\left(2A+\frac{1}{2}+n\right)\Gamma\left(2B+\frac{N-1}{2}+n\right)} \right]^{1/2} \\ &\quad \times P_n^{\left(2A-\frac{1}{2}, 2B+\frac{N-3}{2}\right)}(1 - 2\cos^2 \theta_{N-1})\end{aligned}\quad (2.3.20)$$

olarak bulunur.

2.3.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Klein-Gordon Denkleminin Yaklaşık Çözümleri

Bu bölümde, N-boyutta radyal relativistik enerji spektrumu ve radyal dalga fonksiyonu elde edilecektir.

Morse potansiyeli için N-boyutta radyal Klein-Gordon denklemi

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{(E^2 - \mu^2 c^4)}{\hbar^2 c^2} - \frac{(E + \mu c^2)}{\hbar^2 c^2} D_e (1 - e^{-\alpha(r-r_e)})^2 - \frac{l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2) + \frac{(N-1)(N-3)}{4}}{r^2} \right] u(r) = 0 \quad (2.3.21)$$

şeklindedir. Denklem (2.3.21)'de $x = e^{-\alpha(r-r_e)}$ dönüşümü uygulanırsa

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du(x)}{dx} + \left[\frac{E^2 - \mu^2 c^4 - (E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2 x^2} - \frac{(E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2} + \frac{2(E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2 x} - \frac{(l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2) + \frac{(N-1)(N-3)}{4})}{\alpha^2 x^2} \left(r_e - \frac{\ln x}{\alpha} \right)^{-2} \right] u(x) = 0 \quad (2.3.22)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.3.22)'de $A = \frac{l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2) + \frac{(N-1)(N-3)}{4}}{r_e^2}$ olarak tanımlanır.

Pekeris yaklaşımı [87] kullanılarak $\left(r_e - \frac{\ln x}{\alpha} \right)^{-2}$ ifadesi $x = 1$ civarında Taylor serisine açılırsa,

$$\frac{1}{\left(1 - \frac{\ln x}{\alpha r_e} \right)^2} = 1 + \frac{2}{\alpha r_e} (x - 1) + \left[-\frac{1}{\alpha r_e} + \frac{3}{\alpha^2 r_e^2} \right] (x - 1)^2 + \left[\frac{2}{3\alpha r_e} - \frac{3}{\alpha^2 r_e^2} + \frac{4}{\alpha^3 r_e^3} \right] (x - 1)^3 + \dots \quad (2.3.23)$$

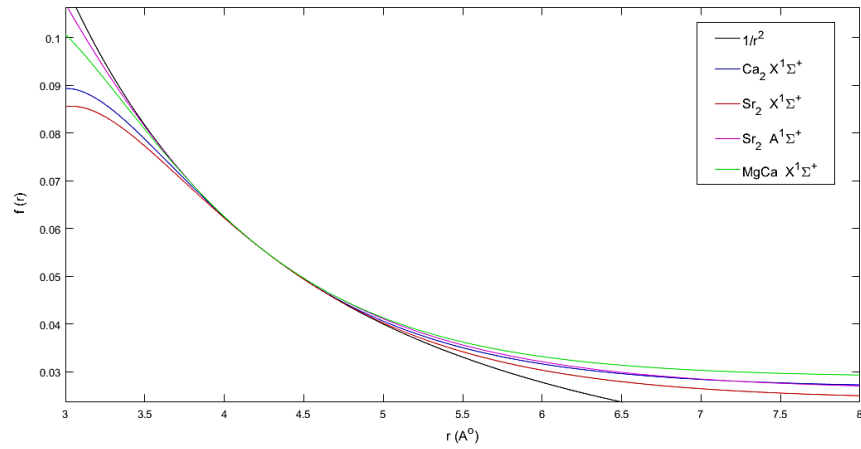
eşitliği elde edilir. Denklem (2.3.22)'de denklem (2.3.23) kullanılarak

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du(x)}{dx} + \left[\frac{E^2 - \mu^2 c^4 - (E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2 x^2} - \frac{(E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2} + \frac{2(E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2 x} - \frac{d}{\alpha^2 x^2} - \frac{d_1}{\alpha^2 x} - \frac{d_2}{\alpha^2} \right] u(x) = 0 \quad (2.3.24)$$

elde edilir. Burada,

$$\begin{aligned} d &= A \left[1 - \frac{3}{\alpha r_e} + \frac{3}{\alpha^2 r_e^2} \right] \\ d_1 &= A \left[\frac{4}{\alpha r_e} - \frac{6}{\alpha^2 r_e^2} \right] \\ d_2 &= A \left[-\frac{1}{\alpha r_e} + \frac{3}{\alpha^2 r_e^2} \right] \end{aligned} \quad (2.3.25)$$

olarak alınır. Toprak alkali metal grubundan iki atomlu moleküller için Pekeris yaklaşımının $1/r^2$ 'li terime uyumluluğu Şekil 2.9'da gösterildi. $Ca_2 X^1\Sigma^+$, $MgCa X^1\Sigma^+$, $Sr_2 X^1\Sigma^+$ ve $Sr_2 A^1\Sigma^+$ moleküllerinin r_e sabiti Tablo 2.6'da verildi. Tablo 2.6'dan bakıldığında toprak alkali metal iki atomlu moleküllerin atomlar arasındaki denge uzaklığı yaklaşık $4 A^0$ 'dur. Şekil 2.9 incelendiğinde Pekeris yaklaşımının atomlar arasındaki denge uzaklığında daha geçerli olduğu görülmektedir.



Şekil 2.9. Toprak alkali metal iki atomlu moleküller için Pekeris yaklaşımının analizi

Denklem (2.3.24)'de işlem kolaylığı için

$$-\varepsilon^2 = \left(\frac{E^2 - \mu^2 c^4 - (E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2} - \frac{d}{\alpha^2} \right) \quad (2.3.26)$$

$$\Lambda_1 = \left(\frac{2(E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2} - \frac{d_1}{\alpha^2} \right) \quad (2.3.27)$$

$$\Lambda_2^2 = \left(\frac{(E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2} + \frac{d_2}{\alpha^2} \right) \quad (2.3.28)$$

kısaltmaları kullanılır ve gerekli düzenlemeler yapıldığında

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du(x)}{dx} + \left[-\frac{\varepsilon^2}{x^2} - \Lambda_2^2 + \frac{\Lambda_1}{x} \right] u(x) = 0 \quad (2.3.29)$$

ikinci metebeden denklem elde edilir. Dalga fonksiyonu sonlu olması gerektiğinden $x \rightarrow 0$ ve $x \rightarrow \infty$ limit durumlarında

$$u(x) = x^\varepsilon e^{-\Lambda_2 x} f(x) \quad (2.3.30)$$

şeklinde dalga fonksiyonu önerilir. Bu limitlerde $f(x)$ fonksiyonu, çözümü sonlu tutan bir fonksiyondur. Önerilen dalga fonksiyonu (2.3.29) denkleminde yerine yazılırsa ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklem

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \left[\frac{2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1}{x} \right] \frac{df(x)}{dx} + \left[\frac{\Lambda_2 + 2\Lambda_2 \varepsilon - \Lambda_1}{x} \right] f(x) \quad (2.3.31)$$

elde edilir ve bu denklem asimptotik iterasyon metoduna uygundur. Denklem (2.3.31), denklem (1.1.1) ile karşılaştırılırsa

$$\lambda_0(x) = \frac{2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1}{x}$$

$$s_0(x) = \frac{\Lambda_2 + 2\Lambda_2 \varepsilon - \Lambda_1}{x}$$

olarak belirlenir. Maple programında, (1.1.7) denklemini kullanılırsa

$$\begin{aligned} \lambda_1(x) &= \frac{2\Lambda_2}{x} - \frac{2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1}{x^2} + \frac{2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1}{x} + \frac{(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1)^2}{x^2} \\ s_1(x) &= -\frac{2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1}{x^2} + \frac{(2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1)(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1)}{x^2} \\ \lambda_2(x) &= -\frac{4\Lambda_2}{x^2} + \frac{2(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1)}{x^3} - \frac{2(2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1)}{x^2} + \frac{4\Lambda_2(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1)}{x^2} - \frac{2(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1)^2}{x^3} \\ &\quad + \frac{(2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1)(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1)}{x^2} \\ &\quad + \frac{(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1) \left(\frac{2\Lambda_2}{x} - \frac{2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1}{x^2} + \frac{2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1}{x} + \frac{(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1)^2}{x^2} \right)}{x} \\ s_2(x) &= \frac{2(2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1)}{x^3} - \frac{2(2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1)(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1)}{x^3} + \frac{2\Lambda_2(2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1)}{x^2} \\ &\quad + \frac{(2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1) \left(\frac{2\Lambda_2}{x} - \frac{2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1}{x^2} + \frac{2\varepsilon\Lambda_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1}{x} + \frac{(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1)^2}{x^2} \right)}{x} \\ &\quad \vdots \end{aligned} \quad (2.3.32)$$

olarak elde edilir.

AİM’de denklem (1.1.9)’da verilen kuantizasyon koşulu kullanılarak yüksek küresel koordinatlarda enerji özdeğerleri

$$\begin{aligned}
 \frac{s_0}{\lambda_0} = \frac{s_1}{\lambda_1} &\Rightarrow \varepsilon_0 = \frac{\Lambda_1 - \Lambda_2}{2\Lambda_2} \\
 \frac{s_1}{\lambda_1} = \frac{s_2}{\lambda_2} &\Rightarrow \varepsilon_1 = \frac{\Lambda_1 - 3\Lambda_2}{2\Lambda_2} \\
 \frac{s_2}{\lambda_2} = \frac{s_3}{\lambda_3} &\Rightarrow \varepsilon_2 = \frac{\Lambda_1 - 5\Lambda_2}{2\Lambda_2} \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{2.3.33}$$

olarak bulunur. (2.3.33) eşitliğindeki ifadeler genelleştirilirse

$$\varepsilon_{nl_{N-1}} = \frac{\Lambda_1 - (2n+1)\Lambda_2}{2\Lambda_2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{2.3.34}$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.3.26), denklem (2.3.27) ve denklem (2.3.28), denklem (2.3.34)’de yerine yazıldığında Morse potansiyeli etkisindeki spin-0 parçacık için N-boyutta enerji spektrumu

$$\frac{E^2 - \mu^2 c^4}{\hbar^2 c^2} = \frac{(E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2} + d - \alpha^2 \left[\frac{\frac{2(E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2} - \frac{d_1}{\alpha^2}}{2 \left(\frac{(E + \mu c^2) D_e}{\hbar^2 c^2 \alpha^2} + \frac{d_2}{\alpha^2} \right)^{\frac{1}{2}}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{2.3.35}$$

şeklinde elde edilir.

Bölüm 1’de verilen denklem (1.1.16) kullanılarak N-boyutta radyal dalga fonksiyonları

$$f_0(x) = C_2 = C_2 {}_1F_1(0, 2\varepsilon + 1, 2\Lambda_2 x)$$

$$f_1(x) = -C_2(2\Lambda_2 x - 2\varepsilon - 1) = -C_2(2\varepsilon + 1) {}_1F_1(-1, 2\varepsilon + 1, 2\Lambda_2 x)$$

$$\begin{aligned}
 f_2(x) &= C_2[(2\varepsilon + 2)(2\varepsilon + 1) - 4\Lambda_2 x(2\varepsilon + 2) + 4\Lambda_2^2 x^2] \\
 &= C_2(2\varepsilon + 2)(2\varepsilon + 1) {}_1F_1(-2, 2\varepsilon + 1, 2\Lambda_2 x)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_3(x) &= -C_2[(2\varepsilon + 3)(2\varepsilon + 2)(2\varepsilon + 1) - 6\Lambda_2 x(2\varepsilon + 3)(2\varepsilon + 2) + 8\Lambda_2^2 x^3 \\
 &\quad - 12(2\varepsilon + 3)\Lambda_2^2 x^2] \\
 &= -C_2(2\varepsilon + 3)(2\varepsilon + 2)(2\varepsilon + 1) {}_1F_1(-3, 2\varepsilon + 1, 2\Lambda_2 x)
 \end{aligned}$$

$$\vdots \quad (2.3.36)$$

şeklinde bulunur. Bu sonuçlardan $f(x)$ için genel çözüm

$$f_n(x) = (-1)^n C_2 (2\varepsilon + 1)_n {}_1F_1(-n, 2\varepsilon + 1, 2\Lambda_2 x) \quad (2.3.37)$$

olarak bulunur. Burada, ${}_1F_1$ konfluent hipergeometrik fonksiyondur [143]. Denklem (2.3.37), denklem (2.2.30)'da yerine yazılırsa yüksek küresel koordinatlarda Morse potansiyeli için normalize olmamış radyal dalga fonksiyonu

$$u(x) = x^\varepsilon e^{-\Lambda_2 x} (-1)^n C_2 (2\varepsilon + 1)_n {}_1F_1(-n, 2\varepsilon + 1, 2\Lambda_2 x) \quad (2.3.38)$$

elde edilir. Burada C_2 normalizasyon sabiti olup normalizasyon şartından bulunur. Denklem (2.2.24) denklem (2.2.38)'de yerine yazılır ve

$$\int e^{-cz} z^{\alpha-1} {}_1F_1(a, b, cz) dz = \frac{z^\alpha}{\alpha} {}_2F_2(-a + b, \alpha; b, 1 + \alpha; -cz) \quad (2.3.39)$$

integrali [149] kullanılırsa, yüksek küresel koordinatlarda Morse potansiyeli için normalize radyal dalga fonksiyonu

$$R(x) = x^\varepsilon e^{-\Lambda_2 x} \sqrt{\frac{\alpha}{r_e s_n}} {}_1F_1(-n, 2\varepsilon + 1, 2\Lambda_2 x) \quad (2.3.40)$$

şeklinde elde edilir. Burada s_n ,

$$s_n = \sum_{m=0}^n \frac{(-n)_m}{m!(2\varepsilon + 1)_m} (2\Lambda_2)^m \frac{e^{\alpha r_e (2\varepsilon + m)}}{2\varepsilon + m} \times {}_2F_2(n + 2\varepsilon + 1, 2\varepsilon + m; 2\varepsilon + 1, 2\varepsilon + 1 + m; -2\Lambda_2 e^{\alpha r_e}) \quad (2.3.41)$$

şeklinde elde edilir.

2.3.3. Toprak Alkali Metal İki Atomlu Moleküllerin Relativistik Titreşim Frekansları

Bu bölümde, toprak alkali metal grubundan $Ca_2 X^1\Sigma^+$, $MgCa X^1\Sigma^+$, $Sr_2 X^1\Sigma^+$ ve $Sr_2 A^1\Sigma^+$ iki atomlu moleküller için relativistik titreşim frekansları hesaplanacak.

Kalsiyum ve strontiyum eş çekirdekli olup homonükleer iki atomlu moleküller olarak adlandırılır. Magnezyum-kalsiyum farklı çekirdek içerdiği için heteronükleer iki atomlu moleküldür. Toprak alkali metal grubu kalsiyum, magnezyum ve strontiyum atomlarının nükleer spinleri sıfırdır.

İki atomlu moleküllerin titreşim hareketi molekül fiziği, astrofizik ve plazma fiziği gibi birçok alanda önemli bir araştırma konusudur. Bu moleküler sistemler için titreşim enerji seviyeleri farklı metodlarla elde edilir. Deneysel olarak gözlenen titreşim seviyeleri doğru potansiyel enerji eğrisini oluşturmak için kullanılır. Özetle, potansiyel enerji eğrileri molekülün yapısı hakkında bilgi verir. Potansiyel enerji minimumdayken denge uzaklığı belirlenir. Potansiyel enerjinin r 'ye göre ikinci türevi kuvvet sabitini verir ve buradan molekülün titreşim ve dönme seviyeleri bulunur [150].

Potansiyel enerji fonksiyonunun, iki atomlu moleküller için ayrışma enerjisi (D_e), atomlar arasındaki denge uzaklığı (r_e) ve titreşim frekansı (w_e) arasındaki ilişki

$$V(r_e) - V(\infty) = -D_e \quad (2.3.42)$$

$$\left(\frac{dV(r)}{dr}\right)_{r=r_e} = 0 \quad (2.3.43)$$

$$\left(\frac{d^2V(r)}{dr^2}\right)_{r=r_e} = k_e = 4\pi^2\mu c^2 w_e^2 \quad (2.3.44)$$

şeklinde verilir [150]. Denklem (2.3.1)'deki Morse potansiyel parametresi α , denklem (2.3.44)'den

$$\alpha = \pi c w_e \sqrt{\frac{2\mu}{D_e}} \quad (2.3.45)$$

şeklinde elde edilir. Tablo 2.6'daki her bir molekül için verilen spektroskopik parametreler denklem (2.3.45)'de yerine yazılırsa, potansiyel parametresi hesaplanır. Her bir molekül için elde edilen sonuçlar Tablo 2.7'de verildi.

Tablo 2.7. İki atomlu moleküller için potansiyel parametre sabiti

	$\alpha \left(A^0^{-1} \right)$
$Ca_2 X^1\Sigma^+$	1.069980816
$MgCa X^1\Sigma^+$	1.079828084
$Sr_2 X^1\Sigma^+$	0.999353856
$Sr_2 A^1\Sigma^+$	0.934181483

Küresel koordinatlarda, denklem (2.3.35)'de $l = 0$ olarak alındığında $A = 0$ olur ve dolayısıyla $d = 0$, $d_1 = 0$ ve $d_2 = 0$ olur. Böylece, Morse potansiyelinin relativistik titreşim spektrumu

$$E^2 - \mu^2 c^4 = 2\hbar c \alpha \sqrt{D_e(E + \mu c^2)} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \hbar^2 c^2 \alpha^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (2.3.46)$$

şeklinde elde edilir. Jia ve Cao [151], küresel koordinatlarda Morse potansiyeli için Klein-Gordon denkleminin çözümlerini süpersimetri yaklaşımıyla elde etmiştir. Denklem (2.3.46), bu çalışmadaki enerji spektrumunu sağlamaktadır. İki atomlu moleküllerin ayrışma enerjisi (D_e), titreşim frekansı (w_e), atomlar arasındaki denge uzaklığı (r_e) ve indirgenmiş kütlesi (μ) Tablo 2.6'da verilmişti. Bu tablodaki sabitler ve denklem (2.3.46) kullanılarak taban durumunda kalsiyum, strontiyum ve magnezyum-kalsiyum; uyarılmış durumda strontiyum moleküllerinin titreşim enerjileri hesaplanarak buradan relativistik titreşim frekansları elde edildi. Elde edilen teorik titreşim frekansları ve deneysel Rydberg-Klein-Rees (RKR) sonuçları Tablo 2.8, 2.9, 2.10 ve 2.11'de verildi. Tablodaki sonuçlara bakarak mutlak sapmayı incelediğimizde, deneysel sonuçlara en yakın değerleri homonükleer moleküllerden uyarılmış durumda strontiyum molekülü için hesapladığımız titreşim frekansları göstermiştir. Taban durumunda strontiyum molekülü için elde ettiğimiz titreşim frekansları da deneysel verilere oldukça yakın sonuç vermiştir. Aynı zamanda, Tablo 2.8 ve 2.11'de görüldüğü gibi kalsiyum ve magnezyum-kalsiyum molekülleri için hesapladığımız frekanslar deneysel sonuçlarla uyumludur.

Tablo 2.8. $Ca_2 X^1\Sigma^+$ molekülü için teorik relativistik titreşim frekansları ve deneysel RKR değerleri

$n \rightarrow n - 1$	$\nu_{teorik}(cm^{-1})$	$\nu_{deneysel}(cm^{-1})[131]$	mutlak sapma $\Delta\nu$
1	63.1121059	62.91	0.2021059
2	61.1802731	60.77	0.4102731
3	59.2484403	58.64	0.6084403
4	57.3166073	56.54	0.7766073
5	55.3847745	54.47	0.9147745
6	53.4529417	52.4	1.0529417
7	51.5211087	50.36	1.1611087
8	49.589276	48.34	1.249276
9	47.657443	46.34	1.317443
10	45.7256102	44.37	1.3556102
11	43.7937774	42.41	1.3837774
12	41.8619444	40.47	1.3919444
13	39.9301116	38.56	1.3701116
14	37.9982787	36.67	1.3282787
15	36.0664458	34.79	1.2764458
16	34.1346131	32.94	1.1946131
17	32.2027803	31.11	1.0927803
18	30.2709474	29.29	0.9809474
19	28.3391135	27.51	0.8291135
20	26.4072817	25.73	0.6772817
21	24.4754488	23.99	0.4854488
22	22.543616	22.26	0.283616
23	20.611783	20.55	0.061783
24	18.6799502	18.87	0.1900498
25	16.748117	17.2	0.451883
26	14.816284	15.56	0.743716
27	12.884452	13.93	1.045548
28	10.952618	12.33	1.377382
29	9.020786	10.75	1.729214
30	7.088953	9.18	2.091047

Tablo 2.9. $Sr_2 X^1\Sigma^+$ molekülü için teorik relativistik titreşim frekansları ve deneysel RKR değerleri

$n \rightarrow n - 1$	$\nu_{teorik}(cm^{-1})$	$\nu_{deneysel}(cm^{-1})[134]$	mutlak sapma $\Delta\nu$
1	40.19478194	39.515	0.67978194
2	39.42866539	38.709	0.71966539
3	38.6625489	37.904	0.7585489
4	37.8964323	37.104	0.7924323
5	37.1303159	36.304	0.8263159
6	36.3641993	35.509	0.8551993
7	35.5980828	34.714	0.8840828
8	34.8319661	33.924	0.9079661
9	34.0658497	33.135	0.9308497
10	33.2997332	32.35	0.9497332
11	32.5336167	31.566	0.9676167
12	31.7675	30.785	0.9825
13	31.0013836	30.008	0.9933836
14	30.235267	29.231	1.004267
15	29.4691506	28.459	1.0101506
16	28.7030339	27.688	1.0150339
17	27.9369174	26.921	1.0159174
18	27.170801	26.155	1.015801
19	26.4046843	25.393	1.0116843
20	25.6385678	24.632	1.0065678
21	24.8724514	23.875	0.9974514
22	24.1063348	23.120	0.9863348
23	23.3402181	22.367	0.9732181
24	22.5741022	21.618	0.9561022
25	21.8079847	20.871	0.9369847
26	21.0418692	20.126	0.9158692
27	20.2757516	19.384	0.8917516
28	19.5096361	18.644	0.8656361
29	18.7435186	17.908	0.8355186
30	17.9774021	17.173	0.8044021
31	17.2112865	16.442	0.7692865
32	16.445169	15.712	0.733169
33	15.6790534	14.986	0.6930534
34	14.912936	14.261	0.651936
35	14.1468205	13.541	0.6058205

Tablo 2.10. $Sr_2 A^1\Sigma^+$ molekülü için teorik relativistik titreşim frekansları ve deneysel RKR değerleri

$n \rightarrow n - 1$	$\nu_{teorik}(cm^{-1})$	$\nu_{deneysel}(cm^{-1})[134]$	mutlak sapma $\Delta\nu$
1	84.36036847	84.402	0.04163153
2	83.6909175	83.729	0.0380825
3	83.0214666	83.055	0.0335334
4	82.3520156	82.382	0.0299844
5	81.6825647	81.708	0.0254353
6	81.0131137	81.034	0.0208863
7	80.3436629	80.361	0.0173371
8	79.6742119	79.686	0.0117881
9	79.0047609	79.011	0.0062391
10	78.3353099	78.338	0.0026901
11	77.6658591	77.662	0.0038591
12	76.9964084	76.988	0.0084084
13	76.326957	76.313	0.013957
14	75.657506	75.638	0.019506
15	74.988055	74.963	0.025055
16	74.318604	74.287	0.031604
17	73.649154	73.612	0.037154
18	72.979702	72.936	0.043702
19	72.310251	72.261	0.049251
20	71.640801	71.584	0.056801
21	70.971350	70.908	0.06335
22	70.301899	70.232	0.069899
23	69.632447	69.555	0.077447
24	68.962997	68.879	0.083997
25	68.293546	68.202	0.091546
26	67.624095	67.525	0.099095
27	66.954644	66.848	0.106644
28	66.285193	66.171	0.114193
29	65.615742	65.493	0.122742
30	64.946291	64.816	0.130291
31	64.276840	64.138	0.13884

Tablo 2.11. $MgCa X^1\Sigma^+$ molekülü için teorik relativistik titreşim frekansları ve deneysel RKR değerleri

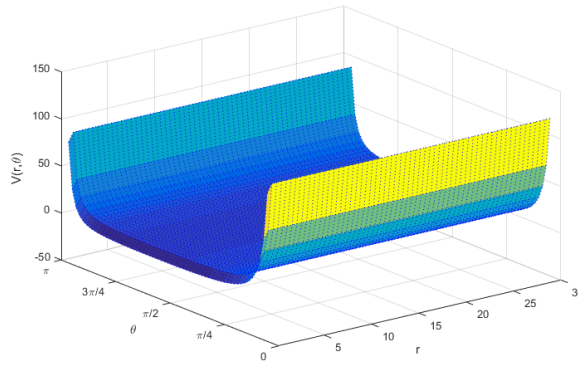
$n \rightarrow n - 1$	$\nu_{teorik}(cm^{-1})$	$\nu_{deneysel}(cm^{-1})[136]$	mutlak sapma $\Delta\nu$
1	57.605724	57.03	0.575724
2	54.98281102	53.92	1.06281102
3	52.3598979	50.96	1.3998979
4	49.7369849	48.1	1.6369849
5	47.1140719	45.32	1.7940719
6	44.4911589	42.61	1.8811589
7	41.8682458	39.96	1.9082458
8	39.2453328	37.38	1.8653328
9	36.6224198	34.86	1.7624198
10	33.9995068	32.39	1.6095068
11	31.3765938	29.95	1.4265938
12	28.7536807	27.56	1.1936807
13	26.1307676	25.19	0.9407676
14	23.5078547	22.85	0.6578547
15	20.8849416	20.51	0.3749416
16	18.2620286	18.2	0.0620286
17	15.6391156	15.91	0.2708844
18	13.0162025	13.67	0.6537975
19	10.3932895	11.5	1.1067105
20	7.7703765	9.48	1.7096235
21	5.1474634	7.63	2.4825366

2.4. Asimptotik İterasyon Metodu İle Merkezci Olmayan Manning-Rosen Potansiyeli İçin N-Boyutta Klein-Gordon Denkleminin Yaklaşık Çözümleri

Merkezci olmayan Manning-Rosen potansiyeli,

$$V(r, \theta_{N-1}) = \frac{\hbar^2 \sigma^2}{2\mu} \left[\frac{\eta(\eta-1)e^{-2\sigma r}}{(1-e^{-\sigma r})^2} - \frac{Ae^{-\sigma r}}{1-e^{-\sigma r}} \right] + \frac{\alpha \cos^2 \theta_{N-1} + \beta \cos \theta_{N-1} + \gamma}{r^2 \sin^2 \theta_{N-1}} \quad (2.4.1)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada, η ve A potansiyel parametreleri, $\sigma = \frac{1}{b}$ olup b uzunluk boyutundadır, α , β ve γ ise potansiyeli tanımlayan parametrelerdir. Bu potansiyelin yüzey grafiği Şekil 2.10'da gösterildi. Grafik çiziminde $\sigma = 0.025$, $\eta = 0.75$, $A = 0.05$ ve $\alpha = \beta = \gamma = 1$ olarak alındı.



Şekil 2.10. Merkezci olmayan Manning-Rosen potansiyelinin yüzey grafiği

2.4.1. Merkezci Olmayan Potansiyel İçin Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısal Klein-Gordon Denkleminin Çözümleri

Bu bölümde, merkezci olmayan potansiyel etkisindeki spin-0 parçacık için N-boyutta açısal Klein-Gordon denkleminin analitik çözümleri elde edilecektir.

Merkezci olmayan potansiyel için N-boyutta açısal relativistik dalga denklemi

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}^2} + (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} \frac{d\Theta(\theta_{N-1})}{d\theta_{N-1}} - \left[\frac{(E + \mu c^2)}{\hbar^2 c^2} \frac{\alpha \cos^2 \theta_{N-1} + \beta \cos \theta_{N-1} + \gamma}{\sin^2 \theta_{N-1}} \right. \\ \left. + \frac{l_{N-2}(l_{N-2} + N - 3)}{\sin^2 \theta_{N-1}} - l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2) \right] \Theta(\theta_{N-1}) = 0 \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

şeklinde yazılır. Burada

$$l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2) = l_{N-1}'^2 - \frac{(N-2)}{4} \quad m'^2 = l_{N-2}(l_{N-2} + N - 3)$$

kısaltmaları kullanıldığında ve $x = \cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2}$ dönüşümü uygulandığında

$$x(1-x) \frac{d^2 \Theta(x)}{dx^2} + (N-1) \frac{(1-2x)}{2} \frac{d\Theta(x)}{dx} - \left[\kappa - \frac{p}{x(1-x)} - \frac{q}{1-x} \right] \Theta(x) = 0 \quad (2.4.3)$$

ikinci mertebeden denklem elde edilir. Burada, κ , q ve p ifadeleri

$$\begin{aligned}
\kappa &= \frac{\alpha(E+\mu c^2)}{\hbar^2 c^2} + l'^2_{N-1} - \frac{1}{4}(N-2) \\
q &= \beta \frac{(E+\mu c^2)}{4\hbar^2 c^2} \\
p &= \frac{(\gamma-\beta+\alpha)(E+\mu c^2)}{4\hbar^2 c^2} + \frac{m^2}{4}
\end{aligned} \tag{2.4.4}$$

şeklinde tanımlanır. Açısal dalga fonksiyonun asimptotik davranışı incelenerek önerilen çözüm

$$\theta(x) = x^{\frac{3-N}{4} + \frac{\sqrt{(N-3)^2 + 16p}}{4}} (1-x)^{\frac{3-N}{4} + \frac{\sqrt{(N-3)^2 + 16q + 16p}}{4}} f(x) \tag{2.4.5}$$

şeklindedir. Burada,

$$\begin{aligned}
\Lambda_1 &= \frac{3-N}{4} + \frac{\sqrt{(N-3)^2 + 16p}}{4} \\
\Lambda_2 &= \frac{3-N}{4} + \frac{\sqrt{(N-3)^2 + 16q + 16p}}{4}
\end{aligned} \tag{2.4.6}$$

şeklinde tanımlanır. Denklem (2.4.5), denklem (2.4.3)'te yerine yazılırsa ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklem

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \left[\frac{x(2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 1) - (2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2})}{x(1-x)} \right] \frac{df(x)}{dx} + \left[\frac{(\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + (\Lambda_1 + \Lambda_2)(N-2) - \kappa}{x(1-x)} \right] f(x) \tag{2.4.7}$$

elde edilir. Bu denklem asimptotik iterasyon metoduna uygundur. Denklem (2.4.7), denklem (1.1.1) ile karşılaştırılarak $\lambda_0(x)$ ve $s_0(x)$ belirlenir. Daha sonra, denklem (1.1.7) kullanılarak $\lambda_n(x)$ ve $s_n(x)$ değerleri bulunur.

$$\begin{aligned}
\lambda_0 &= \frac{x(2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 1) - (2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2})}{x(1-x)} \\
s_0 &= \frac{(\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + (\Lambda_1 + \Lambda_2)(N-2) - \kappa}{x(1-x)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \frac{(2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 1)}{x(1-x)} - \frac{x(2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 1) - (2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2})}{x^2(1-x)} + \frac{x(2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 1) - (2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2})}{x(1-x)^2} \\
&\quad + \frac{(\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + (\Lambda_1 + \Lambda_2)(N-2) - \kappa}{x(1-x)} + \frac{\left(x(2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 1) - (2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2})\right)^2}{x^2(1-x)^2} \\
s_1 &= -\frac{(\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + (\Lambda_1 + \Lambda_2)(N-2) - \kappa}{x(1-x)} + \frac{(\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + (\Lambda_1 + \Lambda_2)(N-2) - \kappa}{x(1-x)^2} \\
&\quad + \frac{\left(x(2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 1) - (2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2})\right)((\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + (\Lambda_1 + \Lambda_2)(N-2) - \kappa)}{x^2(1-x)^2} \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{2.4.8}$$

Asimptotik iterasyon metodunda kuantizasyon koşulu kullanılarak yüksek küresel koordinatlarda enerji özdeğerleri

$$\begin{aligned}
\frac{s_0}{\lambda_0} = \frac{s_1}{\lambda_1} &\Rightarrow \kappa_0 = (\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + (N-2)(\Lambda_1 + \Lambda_2) \\
\frac{s_1}{\lambda_1} = \frac{s_2}{\lambda_2} &\Rightarrow \kappa_1 = (\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + N(\Lambda_1 + \Lambda_2) + N - 1 \\
\frac{s_2}{\lambda_2} = \frac{s_3}{\lambda_3} &\Rightarrow \kappa_2 = (\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + (N+2)(\Lambda_1 + \Lambda_2) + 2N \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{2.4.9}$$

bulunur. Bu ifadeler genelleştirildiğinde

$$\kappa_n = (\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + [N + 2n - 2](\Lambda_1 + \Lambda_2) + n(N + n - 2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{2.4.10}$$

bulunur. Kullanılan kısaltmalar yerine yazılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa yüksek küresel koordinatlarda merkezci olmayan potansiyel için l_{N-1} değeri

$$l_{N-1} = \frac{2-N}{2} + \frac{\sqrt{(N-2)^2 + 4(\Lambda_1 + \Lambda_2)^2 + 4[N + 2n - 2](\Lambda_1 + \Lambda_2) + 4n(N + n - 2) - \frac{4\alpha(E + \mu c^2)}{\hbar^2 c^2}}}{2} \tag{2.4.11}$$

şeklinde elde edilir.

Bölüm 1’de verilen (1.1.16) denklemi kullanılarak N-boyutta merkezci olmayan potansiyel için açışal dalga fonksiyonları

$$\begin{aligned}
f_0(x) &= C_2 = C_2 {}_2F_1\left(0, 2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 2, 2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}, x\right) \\
f_1(x) &= -C_2[4\Lambda_1 + N - 1 - (4\Lambda_1 + 4\Lambda_2 + 2N - 2)x] \\
&= -C_2 2\left(2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}\right) {}_2F_1\left(-1, 2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 1, 2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}, x\right) \\
f_2(x) &= C_2[(4\Lambda_1 + N - 1)(4\Lambda_1 + N + 1) - 2(4\Lambda_1 + 4\Lambda_2 + 2N)(4\Lambda_1 + N + 1)x \\
&\quad + (8\Lambda_1 + 8\Lambda_2 + 4N)(8\Lambda_1 + 8\Lambda_2 + 4N + 4)x^2] \\
&= C_2 4\left(2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}\right)\left(2\Lambda_1 + \frac{N+1}{2}\right) {}_2F_1\left(-2, 2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N, 2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}, x\right) \\
f_3(x) &= -C_2[(4\Lambda_1 + N + 3)(4\Lambda_1 + N + 1)(4\Lambda_1 + N - 1) - 3(4\Lambda_1 + 4\Lambda_2 + 2N + 2) \\
&\quad \times (4\Lambda_1 + N + 3)(4\Lambda_1 + N + 1)x + 3(4\Lambda_1 + 4\Lambda_2 + 2N + 4)(4\Lambda_1 + 4\Lambda_2 + 2N + 2) \\
&\quad \times (4\Lambda_1 + N + 3)x^2 - (4\Lambda_1 + 4\Lambda_2 + 2N + 6)(4\Lambda_1 + 4\Lambda_2 + 2N + 4) \\
&\quad \times (4\Lambda_1 + 4\Lambda_2 + 2N + 2)x^3] \\
&= -C_2 8\left(2\Lambda_1 + \frac{N+3}{2}\right)\left(2\Lambda_1 + \frac{N+1}{2}\right)\left(2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}\right) \\
&\quad \times {}_2F_1\left(-3, 2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N + 1, 2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}, x\right) \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{2.4.12}$$

olarak bulunur. Elde edilen sonuçlar için genelleme yapıldığında

$$\begin{aligned}
f_n(x) &= C_2 2^n (-1)^n \left(2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}\right)_n \\
&\quad \times {}_2F_1\left(-n, 2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 2 + n, 2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}, x\right)
\end{aligned} \tag{2.4.13}$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.4.13), denklem (2.4.5)'de yerleştirilir ve uygulanan dönüşüm yerine yazılırsa

$$\begin{aligned}
\Theta(\theta_{N-1}) &= \left(\cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2}\right)^{\Lambda_1} \left(1 - \cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2}\right)^{\Lambda_2} C_2 2^n (-1)^n \left(2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}\right)_n \\
&\quad \times {}_2F_1\left(-n, 2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 2 + n, 2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}, \cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2}\right)
\end{aligned} \tag{2.4.14}$$

elde edilir. $\int_0^\pi |\Theta(\theta_{N-1})|^2 \sin^{N-2} \theta_{N-1} d\theta_{N-1} = 1$ normalizasyon şartından C_2 normalizasyon sabiti bulunur. Bu integrali alabilmek için hipergeometrik polinomların diklik bağıntısından [143]

$$\int_0^1 y^{\gamma-1} (1-y)^{\alpha-\gamma} {}_2F_1(-n, \alpha+n, \gamma, y) {}_2F_1(-k, \alpha+k, \gamma, y) dy$$

$$= \frac{\Gamma^2(\gamma)\Gamma(\alpha-\gamma+n+1)}{\Gamma(\alpha+n)\Gamma(\gamma+n)} \frac{n!}{\alpha+2n} \delta_{nk}$$

faýdalanılır. Elde edilen normalizasyon sabiti denklem (2.4.14)'de yerine yazıldığında

$$\begin{aligned} \Theta(\theta_{N-1}) &= \left(\cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2} \right)^{\Lambda_1} \left(1 - \cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2} \right)^{\Lambda_2} \\ &\times \frac{1}{\Gamma(2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2})} \left[\frac{\Gamma(2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 2 + n) \Gamma(2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2} + n) (2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 2 + 2n)}{\Gamma(2\Lambda_2 + \frac{N-1}{2} + n) n! 2^{N-2}} \right]^{1/2} \\ &\times {}_2F_1 \left(-n, 2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 2 + n, 2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2}, \cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2} \right) \end{aligned} \quad (2.4.15)$$

elde edilir. Hipergeometrik ve Jacobi polinomları arasındaki bağıntı [143] kullanılarak yüksek küresel koordinatlarda merkezci olmayan potansiyel etkisindeki spin-0 parçacık için normalize açısız dalga fonksiyonu

$$\begin{aligned} \Theta(\theta_{N-1}) &= \left(\cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2} \right)^{\Lambda_1} \left(1 - \cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2} \right)^{\Lambda_2} \left[\frac{\Gamma(2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 2 + n) n! (2\Lambda_1 + 2\Lambda_2 + N - 2 + 2n)}{\Gamma(2\Lambda_1 + \frac{N-1}{2} + n) \Gamma(2\Lambda_2 + \frac{N-1}{2} + n) 2^{N-2}} \right]^{1/2} \\ &\times P_n^{(2\Lambda_1 + \frac{N-3}{2}, 2\Lambda_2 + \frac{N-3}{2})} \left(1 - 2\cos^2 \frac{\theta_{N-1}}{2} \right) \end{aligned} \quad (2.4.16)$$

şeklinde elde edilir.

2.4.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Klein-Gordon Denkleminin Yaklaşık Çözümleri

Bu bölümde, Manning-Rosen potansiyeli etkisindeki spin-0 parçacık için N-boyutta radyal Klein-Gordon denkleminin yaklaşık çözümleri elde edilecektir.

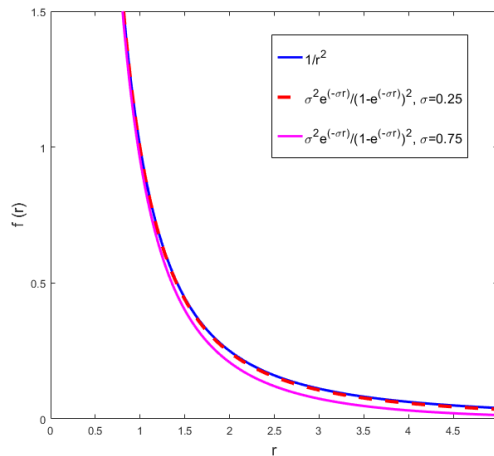
Manning-Rosen potansiyeli için N-boyutta relativistik radyal dalga denklemi

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \left[\frac{(E^2 - \mu^2 c^4)}{\hbar^2 c^2} - \frac{(E + \mu c^2) \sigma^2}{2\mu c^2} \frac{\eta(\eta-1)e^{-2\sigma r}}{(1-e^{-\sigma r})^2} + \frac{(E + \mu c^2) \sigma^2}{2\mu c^2} \frac{Ae^{-\sigma r}}{(1-e^{-\sigma r})} \right. \\ \left. - \frac{(N-1)(N-3)}{4r^2} - \frac{l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2)}{r^2} \right] R(r) = 0 \end{aligned} \quad (2.4.17)$$

şeklinde yazılır. Bu denklem $l \neq 0$ durumunda analitik olarak çözülmesi zor olduğundan sadece pertürbasyon ve yaklaşıklık yapılarak çözülebilir. Bu nedenle, denklem (2.4.17)'yi çözmek için

$$\frac{1}{r^2} \approx \sigma^2 \frac{e^{-\sigma r}}{(1-e^{-\sigma r})^2}, \quad \sigma = \frac{1}{b} \quad (2.4.18)$$

şeklinde verilen Greene-Aldrich yaklaşımı [99] kullanılır. Bu yaklaşıklığın $1/r^2$ 'li terime uyumluluğu Şekil 2.11'de gösterilmiştir. Grafikten anlaşıldığı gibi Greene-Aldrich yaklaşımı σ 'nın küçük değerlerinde geçerlidir.



Şekil 2.11. Farklı σ değerleri için Greene-Aldrich yaklaşımının analizi

Denklem (2.4.18), denklem (2.4.17)'de yerine yazıldığında

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \left[\frac{(E^2 - \mu^2 c^4)}{\hbar^2 c^2} - \frac{(E + \mu c^2) \sigma^2 \eta(\eta-1) e^{-2\sigma r}}{2\mu c^2 (1-e^{-\sigma r})^2} + \frac{(E + \mu c^2) \sigma^2}{2\mu c^2} \frac{A e^{-\sigma r}}{(1-e^{-\sigma r})} \right. \\ \left. - \left(\frac{(N-1)(N-3)}{4} + l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2) \right) \left(\sigma^2 \frac{e^{-\sigma r}}{(1-e^{-\sigma r})^2} \right) \right] R(r) = 0 \quad (2.4.19) \end{aligned}$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.4.19)'da $z = e^{-\sigma r}$ dönüşümü uygulandığında

$$\frac{d^2 R(z)}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dR(z)}{dz} + \left[-\frac{\varepsilon^2}{z^2} + \frac{A'}{z(1-z)} - \frac{(E + \mu c^2)}{2\mu c^2} \frac{\eta(\eta-1)}{(1-z)^2} - \kappa(\kappa+1) \frac{z}{(1-z)^2} \right] R(z) = 0 \quad (2.4.20)$$

olarak düzenlenir. Burada işlem kolaylığı için

$$-\varepsilon^2 = \frac{(E^2 - \mu^2 c^4)}{\hbar^2 c^2 \sigma^2}, \quad \kappa = l_{N-1} + \frac{N-3}{2}, \quad A' = \frac{(E + \mu c^2)}{2\mu c^2} A \quad (2.4.21)$$

kısaltmaları kullanılır. Dalga fonksiyonu sınır şartlarını sağlaması gerektiğinden dolayı çözüm

$$R(z) = (1 - z)^{\gamma' + 1} z^\varepsilon f(z) \quad (2.4.22)$$

şeklinde önerilir. Burada, $f(z)$ fonksiyonu dalga fonksiyonunu sonlu tutan bir fonksiyondur. Denklem (2.4.22)'de

$$\gamma' = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{\frac{4(E + \mu c^2)}{2\mu c^2} \eta(\eta - 1) + (2\kappa + 1)^2}}{2} \quad (2.4.23)$$

olarak alınır. Denklem (2.4.23), denklem (2.4.20)'de yerine yazılır ve gerekli düzenleme yapılırsa asimptotik iterasyon metoduna uygun ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklem

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} = \left[\frac{(2\gamma' + 2\varepsilon + 3)z - (2\varepsilon + 1)}{z(1 - z)} \right] \frac{df(z)}{dz} + \left[\frac{\kappa(\kappa + 1) + (1 + \gamma')(2\varepsilon + 1) - A'}{z(1 - z)} \right] f(z) \quad (2.4.24)$$

şeklinde elde edilir. Bu denklem, (1.1.1) denklemi ile karşılaştırıldığında

$$\lambda_0 = \left[\frac{(2\gamma' + 2\varepsilon + 3)z - (2\varepsilon + 1)}{z(1 - z)} \right]$$

$$s_0 = \left[\frac{\kappa(\kappa + 1) + (1 + \gamma')(2\varepsilon + 1) - A'}{z(1 - z)} \right]$$

olarak belirlenir. Maple programında, (1.1.7) denklemleri kullanılarak $\lambda_n(x)$ ve $s_n(x)$ değerleri

$$\lambda_1 = \frac{2\gamma' + 2\varepsilon + 3}{z(1 - z)} - \frac{(2\gamma' + 2\varepsilon + 3)z - (2\varepsilon + 1)}{z^2(1 - z)} + \frac{(2\gamma' + 2\varepsilon + 3)z - (2\varepsilon + 1)}{z(1 - z)^2} + \frac{\kappa(\kappa + 1) + (1 + \gamma')(2\varepsilon + 1) - A'}{z(1 - z)}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\left((2\gamma' + 2\varepsilon + 3)z - (2\varepsilon + 1)\right)^2}{z^2(1-z)^2} \\
s_1 = & - \frac{\kappa(\kappa+1) + (1+\gamma')(2\varepsilon+1) - A'}{z^2(1-z)} + \frac{\kappa(\kappa+1) + (1+\gamma')(2\varepsilon+1) - A'}{z(1-z)^2} \\
& + \frac{(\kappa(\kappa+1) + (1+\gamma')(2\varepsilon+1) - A')((2\gamma' + 2\varepsilon + 3)z - (2\varepsilon + 1))}{z^2(1-z)^2} \\
& \vdots
\end{aligned} \tag{2.4.25}$$

şeklinde elde edilir.

Kullanılan metotta (1.1.9) denklemiyle verilen koşulla N-boyutta relativistik enerji özdeğerleri

$$\begin{aligned}
\frac{s_0}{\lambda_0} = \frac{s_1}{\lambda_1} & \Rightarrow A'_0 = \kappa(\kappa + 1) + 2\varepsilon\gamma' + 2\varepsilon + \gamma' + 1 \\
\frac{s_1}{\lambda_1} = \frac{s_2}{\lambda_2} & \Rightarrow A'_1 = \kappa(\kappa + 1) + 2\varepsilon\gamma' + 4\varepsilon + 3\gamma' + 4 \\
\frac{s_2}{\lambda_2} = \frac{s_3}{\lambda_3} & \Rightarrow A'_2 = \kappa(\kappa + 1) + 2\varepsilon\gamma' + 6\varepsilon + 5\gamma' + 9 \\
& \vdots
\end{aligned} \tag{2.4.26}$$

elde edilir. (2.4.26) eşitliğindeki ifadeler genelleştirildiğinde

$$A'_n = \kappa(\kappa + 1) + \varepsilon(2\gamma' + 2n + 2) + (2n + 1)\gamma' + (n + 1)^2, n = 0, 1, 2, \dots \tag{2.4.27}$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.4.27)'de kullanılan kısaltmalar yerine yazılır ve gerekli düzenleme yapılırsa Manning-Rosen potansiyeli için N-boyutta radyal relativistik enerji spektrumu

$$E^2 - \mu^2 c^4 = -\hbar^2 c^2 \sigma^2 \left(\frac{(n+1)^2 - \frac{(E+\mu c^2)}{2\mu c^2} A + \frac{(N+2l_{N-1}-2)^2 - 1}{4} + (2n+1)\gamma'}{2(n+1+\gamma')} \right)^2 \tag{2.4.28}$$

şeklinde elde edilir. Qiang ve Dong [102], Manning-Rosen potansiyelinin üç boyutta relativistik olmayan enerji spektrumunu standart metodla elde etmiştir. $N = 3$ için non-relativistik limitte denklem (2.4.28), bu metodla bulunan çalışmadaki sonucu sağlamaktadır. N-boyutta ise Schrödinger denkleminin çözümleri Nikiforov-Uvaraov yöntemiyle Ikdhair ve Sever [100] tarafından çalışılmıştır ve nonrelativistik limitte denklem (2.4.28) bu çalışmada elde edilen spektruma indirgenmektedir.

Bölüm 1’de verilen (1.1.16) denklemi kullanılarak N-boyutta radyal dalga fonksiyonları

$$\begin{aligned}
 f_0(z) &= C_2 = C_2 {}_2F_1(0, 2\gamma' + 2\varepsilon + 2, 2\varepsilon + 1, z) \\
 f_1(z) &= -C_2[2\varepsilon + 1 - (2\gamma' + 2\varepsilon + 3)z] \\
 &= -C_2(2\varepsilon + 1){}_2F_1(-1, 2\gamma' + 2\varepsilon + 3, 2\varepsilon + 1, z) \\
 f_3(z) &= -C_2[(2\varepsilon + 1)(2\varepsilon + 2)(2\varepsilon + 3) - 3(2\gamma' + 2\varepsilon + 5)(2\varepsilon + 3)(2\varepsilon + 2)z \\
 &\quad + 3(2\gamma' + 2\varepsilon + 6)(2\gamma' + 2\varepsilon + 5)(2\varepsilon + 3)z^2 - (2\gamma' + 2\varepsilon + 7) \\
 &\quad \times (2\gamma' + 2\varepsilon + 6)(2\gamma' + 2\varepsilon + 5)z^3] \\
 &= -C_2(2\varepsilon + 1)(2\varepsilon + 2)(2\varepsilon + 3){}_2F_1(-3, 2\gamma' + 2\varepsilon + 5, 2\varepsilon + 1, z) \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{2.4.29}$$

şeklinde elde edilir. Buradan $f(z)$ için genelleştirme yapıldığında

$$f_n(z) = C_2(2\varepsilon + 1)_n(-1)^n {}_2F_1(-3, 2\gamma' + 2\varepsilon + 5, 2\varepsilon + 1, z) \tag{2.4.30}$$

olarak bulunur. Denklem (2.4.30), denklem (2.4.22)’de yerine yazıldığında N-boyutta normalize olmamış radyal dalga fonksiyonu

$$\begin{aligned}
 R(z) &= (1 - z)^{\gamma'+1} z^\varepsilon C_2(2\varepsilon + 1)_n(-1)^n \\
 &\quad \times {}_2F_1(-n, 2\gamma' + 2\varepsilon + 2 + n, 2\varepsilon + 1, z)
 \end{aligned} \tag{2.4.31}$$

elde edilir. Burada, $z = e^{-\sigma r}$ yerine yazılır ve hipergeometrik fonksiyon ile Jacobi polinomları arasındaki bağıntı [143] kullanılırsa

$$R(r) = (1 - e^{-\sigma r})^{\gamma'+1} e^{-\sigma \varepsilon r} C_2 n! P_n^{(2\varepsilon, 2\gamma'+1)}(1 - 2e^{-\sigma r}) \tag{2.4.32}$$

olarak bulunur. Normalizasyon sabitini bulmak için

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 (1 - x)^{\nu-1} (1 + x)^\mu \left[P_n^{(\nu, \mu)}(x) \right]^2 dx &= 2^{\nu+\mu} \frac{\Gamma(n+\nu+1)\Gamma(n+\mu+1)}{n! \Gamma(n+\nu+\mu+1)} \\
 \int_{-1}^1 (1 - x)^\nu (1 + x)^\mu \left[P_n^{(\nu, \mu)}(x) \right]^2 dx &= 2^{\nu+\mu+1} \frac{\Gamma(n+\nu+1)\Gamma(n+\mu+1)}{n! \Gamma(n+\nu+\mu+1)(2n+\nu+\mu+1)}
 \end{aligned}$$

integrallerinden [143] faydalanılır ve gerekli matematiksel işlemler yapıldıktan sonra yüksek küresel koordinatlarda normalize radyal dalga fonksiyonu

$$R(r) = (1 - e^{-\sigma r})^{\gamma'+1} e^{-\sigma \varepsilon r} \left[\frac{2\varepsilon(n+\gamma'+\varepsilon+1)n!\Gamma(2\gamma'+2\varepsilon+2+n)\sigma}{(n+\gamma'+1)\Gamma(2\gamma'+2+n)\Gamma(2\varepsilon+1+n)} \right]^{1/2} \\ \times P_n^{(2\varepsilon, 2\gamma'+1)}(1 - 2e^{-\sigma r}) \quad (2.4.33)$$

şeklinde elde edilir.

$\eta = 0$ veya $\eta = 1$ durumunda Manning-Rosen potansiyeli Hulthén potansiyeline indirgenir.

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-\sigma r}}{1 - e^{-\sigma r}}, \quad V_0 = Ze^2\sigma, \quad \sigma = \frac{1}{b} \quad (2.4.34)$$

Burada σ , potansiyelin genişliğini tanımlayan parametredir. Denklem (2.4.28)'de gerekli indirgemeler yapıldığında yüksek küresel koordinatlarda Hulthen potansiyeli için relativistik enerji spektrumu

$$E^2 - \mu^2 c^4 = -\hbar^2 c^2 \sigma^2 \left(\frac{\frac{(2n+N+2l_{N-1}-1)^2}{4} - \frac{(E+\mu c^2)A}{2\mu c^2}}{(2n+N+2l_{N-1}-1)} \right)^2 \quad (2.4.35)$$

şeklinde elde edilir. Non-relativistik limitte, bu enerji spektrumu literatürle uyum sağlamaktadır [100].

N-boyutta Hulthen potansiyeli için radyal relativistik dalga fonksiyonu denklem (2.4.33)'den

$$R(r) = (1 - e^{-\sigma r})^{l_{N-1} + \frac{N-1}{2}} e^{-\sigma \varepsilon r} \left[\frac{2\varepsilon(n+\varepsilon+l_{N-1} + \frac{N-1}{2})n!\Gamma(2l_{N-1}+2\varepsilon+N-1+n)\sigma}{(n+l_{N-1} + \frac{N-1}{2})\Gamma(2l_{N-1}+N-1+n)\Gamma(2\varepsilon+1+n)} \right]^{1/2} \\ \times P_n^{(2\varepsilon, 2l_{N-1}+N-2)}(1 - 2e^{-\sigma r}) \quad (2.4.36)$$

olarak bulunur.

2.4.3. Manning-Rosen Potansiyeli İçin Farklı Boyutlarda Enerjinin Nümerik Değerleri

Bu bölümde, Manning-Rosen potansiyeli için elde edilen N-boyutta relativistik enerji değeri $c \rightarrow \infty$ limitinde non-relativistik enerjiye indirgenerek farklı n ve l durumları için iki, üç ve dört boyutta atomik birimde nümerik değerleri hesaplandı. Ayrıca, bu potansiyel için Hellmann-Feynmann teoremi kullanılarak $\langle r^{-2} \rangle$ beklenen değeri elde edildi ve 2p, 3p, 3d, 4p durumlarındaki nümerik sonuçları bulundu.

Denklem (2.4.28), non-relativistik limitte

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu b^2} \left[\frac{(n+1)^2 - A + \frac{(N+2l_{N-1}-2)^2 - 1}{4} + (2n+1)\gamma'}{2(n+\gamma'+1)} \right]^2 \quad (2.4.37)$$

şeklinde elde edilir. Bu denklemde, $A = 2b$ ve atomik birimde $\hbar = \mu = 1$ alınarak farklı boyutlardaki relativistik olmayan enerjinin nümerik değerleri elde edildi ve sonuçlar Tablo 2.12, 2.13, 2.14 ve 2.15’de verildi. Tablodaki sonuçlardan boyutun etkisi kolaylıkla analiz edilebilir. Potansiyel σ parametresinin aynı değeri için sonuçları karşılaştırdığımızda boyut arttığında enerjinin değerinde de artış olduğu görülmektedir. Asimptotik iterasyon metodunun geçerliliği ve hesapladığımız enerjilerin doğruluğu literatürde farklı yöntemler kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılarak gösterilmiştir.

Tablo 2.12. N=2 için farklı kuantum durumlarında titreşim-dönme enerjisinin ($-E_{n,l}$) (a.b.) hesaplanan değerleri

	1/b	$\sigma = 0.75$		$\sigma = 1.50$	
		AİM	NU[100]	AİM	NU[100]
2p	0.025	0.241087727	0.241087728	0.140949065	0.140949065
	0.050	0.227946676	0.227946676	0.131737328	0.131737328
	0.075	0.215173756	0.215173874	0.122836186	0.122836866
	0.100	0.202769319	0.202769319	0.114247678	0.114247678
3p	0.025	0.074279113	0.074279113	0.051933431	0.051933432
	0.050	0.062813563	0.062813564	0.042142549	0.042142549
	0.075	0.052308568	0.052308602	0.033373396	0.033373420
	0.100	0.042764227	0.042764227	0.025626042	0.025626042
3d	0.025	0.070734690	0.070734690	0.058898861	0.058898861
	0.050	0.059344084	0.059344084	0.049054155	0.049054156
	0.075	0.048952519	0.048952839	0.040108841	0.040109106
4p	0.025	0.031448122	0.031448122	0.023381941	0.023381941
4d	0.025	0.030209821	0.030209821	0.026068346	0.026068346
4f	0.025	0.029833655	0.029833656	0.027228277	0.027228277
5p	0.025	0.014735069	0.014732070	0.011100960	0.011100961
5d	0.025	0.014180351	0.014180352	0.012357598	0.012357598

Tablo 2.13. N=4 için farklı kuantum durumlarında titreşim-dönme enerjisinin ($-E_{n,l}$) (a.b.) hesaplanan değerleri

	1/b	$\sigma = 0.75$		$\sigma = 1.50$	
		AİM	NU[100]	AİM	NU[100]
2p	0.025	0.070619466	0.070734690	0.058898861	0.058898861
	0.050	0.059247415	0.059344084	0.049054155	0.049054156
	0.075	0.048872778	0.048952839	0.040108841	0.040109106
	0.100	0.039496510	0.039560954	0.032063712	0.032063712
3p	0.025	0.030209821	0.030209821	0.026068346	0.026068346
	0.050	0.020395577	0.020395577	0.017092049	0.017092049
	0.075	0.012502801	0.012502916	0.010003140	0.010003237
	0.100	0.006531839	0.006531840	0.004801907	0.004801908
3d	0.025	0.029833655	0.029833656	0.027228277	0.027228277
	0.050	0.020047208	0.020047209	0.018176768	0.018176769
	0.075	0.012199557	0.012199670	0.010947871	0.010947973
4p	0.025	0.014180351	0.014180352	0.012357598	0.012357598
4d	0.025	0.014011823	0.014011823	0.012892982	0.012892982
4f	0.025	0.013929373	0.013929374	0.013182138	0.013182139
5p	0.025	0.006591028	0.007127957	0.005695750	0.006175251
5d	0.025	0.006506751	0.006506751	0.008828005	0.005967020

Tablo 2.14. $N=3$ ve $\sigma = 0.75$ için farklı kuantum durumlarında titreşim-dönme enerjisinin ($-E_{n,l}$) (a.b.) hesaplanan değerleri

	$\sigma = 0.75$			
	1/b	Hesaplanan değerler	Standard[102]	GPS[108]
2p	0.025	0.1205793	0.1205793	0.1205723089
	0.050	0.1084227	0.1084228	0.1082151728
	0.075	0.0969063	0.0969120	
3p	0.025	0.0459296	0.0459297	0.0458778846
	0.050	0.0352672	0.0352672	0.0350633277
	0.075	0.0260090	0.0260110	
3d	0.025	0.0449299	0.0449299	0.0447742874
	0.050	0.0343082	0.0343082	0.0350633277
	0.075	0.0251168	0.0251168	
4p	0.025	0.0208608	0.0208608	
4d	0.025	0.0204555	0.0204555	0.0203017276
4f	0.025	0.0202886	0.0202887	
5p	0.025	0.0098576	0.0098576	0.0098079253
5d	0.025	0.0096636	0.0096637	
	1/b	D-K[152]	Num[153]	AİM[109]
2p	0.025	0.1205297	0.1205271	0.120579348
	0.050	0.1082245	0.1082151	0.108422798
	0.075		0.0964469	0.094099532
3p	0.025	0.0458800	0.0458779	0.045929694
	0.050	0.0350689	0.0350633	0.035267202
	0.075	0.0255647	0.0255654	0.026010959
3d	0.025	0.0447812	0.0447743	0.044929943
	0.050	0.0337133	0.0336930	0.034308244
	0.075	0.0237782	0.0237621	0.025116813
4p	0.025	0.0208112	0.0208097	0.020860820
4d	0.025	0.0203068	0.0203017	0.020455547
4f	0.025	0.0199911	0.0199797	0.020288663
5p	0.025	0.0098080	0.0098079	0.009663688
5d	0.025	0.0095150	0.0095141	0.009583676

Tablo 2.15. $N=3$ ve $\sigma = 1.50$ için farklı kuantum durumlarında titreşim-dönme enerjisinin ($-E_{n,l}$) (a.b.) hesaplanan değerleri

	1/b	$\sigma = 1.50$ Hesaplanan değerler	Standard[102]	GPS[108]
2p	0.025	0.0900228	0.0900229	0.0899708754
	0.050	0.0802472	0.0802472	0.0800399908
	0.075	0.0710332	0.0710332	
3p	0.025	0.0369650	0.0369651	0.0369133922
	0.050	0.0274719	0.0274719	0.0272696509
	0.075	0.0193850	0.0193850	
3d	0.025	0.0396344	0.0396345	0.0394789425
	0.050	0.0300629	0.0300629	0.0294495639
	0.075	0.0218120	0.0218121	
4p	0.025	0.0172249	0.0172249	
4d	0.025	0.0183649	0.0183649	0.0182114637
4f	0.025	0.0189222	0.0189223	
5p	0.025	0.0081307	0.0081308	0.0080816394
5d	0.025	0.0086902	0.0086902	
	1/b	D-K[152]	Num.[153]	AİM[109]
2p	0.025	0.0899732	0.0899708	0.089902617
	0.050	0.0802472	0.0800400	0.079787754
	0.075		0.0705701	0.070050273
3p	0.025	0.0369154	0.0369134	0.036911875
	0.050	0.0272736	0.0272696	0.027286328
	0.075	0.0189388	0.0189474	0.019030789
3d	0.025	0.0394857	0.0394789	0.039464723
	0.050	0.0294680	0.0294496	0.029466438
	0.075	0.0204734	0.0204663	0.020664098
4p	0.025	0.0171753	0.0171740	0.017197171
4d	0.025	0.0182162	0.0182115	0.018277246
4f	0.025	0.0186247	0.0186137	0.018742772
5p	0.025	0.0080812	0.0080816	0.008115365
5d	0.025	0.0085415	0.0085415	0.008862907

Hellmann-Feynmann teoremi [137-139]

$$\frac{\partial E_n(q)}{\partial q} = \left\langle \psi(q) \left| \frac{\partial H(q)}{\partial q} \right| \psi(q) \right\rangle \quad (2.4.38)$$

şeklindedir. Burada q parametre, $E_n(q)$ ve $\psi(q)$ Hamiltonyenin özdeğeri ve özfonksiyonudur. Küresel koordinatlarda, Manning-Rosen potansiyeli için Hamiltonyen

$$H = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu b^2} \left[\frac{\eta(\eta-1)e^{-\frac{2r}{b}}}{\left(1-e^{-\frac{r}{b}}\right)^2} - \frac{Ae^{-\frac{r}{b}}}{1-e^{-\frac{r}{b}}} \right] \quad (2.4.39)$$

olarak yazılır. (2.4.38) eşitliğinde, denklem (2.4.39) ve küresel koordinatlarda non-relativistik enerji spektrumu yerine yazılır. Daha sonra, $q = l$ için gereken işlemler yapılırsa $\langle r^{-2} \rangle$ beklenen değeri

$$\begin{aligned} \langle r^{-2} \rangle = & -\frac{2}{(2l+1)b^2} \left[\frac{(n+1)^2 - A + l(l+1) + (2n+1)\left(-\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{4\eta(\eta-1) + (2l+1)^2}}{2}\right)}{2n+1 + \sqrt{4\eta(\eta-1) + (2l+1)^2}} \right] \\ & \times \left[\frac{2l+1 + \frac{(2n+1)(8l+4)}{4\sqrt{4\eta(\eta-1) + (2l+1)^2}}}{2n+1 + \sqrt{4\eta(\eta-1) + (2l+1)^2}} \frac{(8l+4)\left((n+1)^2 - A + l(l+1) + (2n+1)\left(-\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{4\eta(\eta-1) + (2l+1)^2}}{2}\right)\right)}{2(2n+1 + \sqrt{4\eta(\eta-1) + (2l+1)^2})^2 \sqrt{4\eta(\eta-1) + (2l+1)^2}} \right] \end{aligned} \quad (2.4.40)$$

şeklinde elde edilir. Farklı kuantum durumları için $\langle r^{-2} \rangle$ beklenen değerinin atomik birimde nümerik sonuçları hesap edildi ve literatürdeki çalışma [108] ile karşılaştırılarak uyumlu sonuçlar verdiği gözlemlendi. Bu sonuçların Tablo 2.16'da karşılaştırması yapıldı.

Tablo 2.16. 2p, 3p, 4p ve 3d durumlarında $\langle r^{-2} \rangle$ (a.b.)'nin nümerik değerleri

	1/b=0.1, $\eta = 0.75$		1/b=0.1, $\eta = 1.5$	
	AİM	GPS[108]	AİM	GPS[108]
2p	0.090777	0.091584	0.052664	0.053464
3p	0.021882	0.022569	0.013740	0.014398
4p	0.004352	0.039654	0.001232	0.002030
3d	0.104222	0.103225	0.010096	0.010760

3. BÖLÜM

YÜKSEK KÜRESEL KOORDİNATLARDA MERKEZCİL OLMAYAN POTANSİYEL ETKİSİNDEKİ SPİN-1/2 PARÇACIK İÇİN DİRAC DENKLEMİ

3.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Spin Simetri Durumunda Dirac Denkleminin Elde Edilmesi

Merkezcil olmayan Lorentz skaler ve vektör potansiyel etkisindeki M kütleli spin-1/2 parçacık için N-boyutta Dirac denklemi

$$\left[c \sum_{j=1}^N \hat{\alpha}_j \cdot p_j + \hat{\beta} [Mc^2 + S(r, \theta_{N-1})] + V(r, \theta_{N-1}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (3.1.1)$$

şeklinde yazılır. Burada N uzaysal boyut $N \geq 2$, c ışık hızı, p_j momentum işlemcisi, E relativistik enerji ve $\hat{\alpha}_j, \hat{\beta}$ $N \times N$ kare Dirac matrislerdir.

Dirac dalga fonksiyonu

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r}) \\ \chi(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (3.1.2)$$

şeklindedir. Denklem (3.1.1)'de denklem (3.1.2) yerine yazıldığında

$$\begin{pmatrix} Mc^2 + S(r, \theta_{N-1}) + V(r, \theta_{N-1}) & c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \\ c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) & -Mc^2 - S(r, \theta_{N-1}) + V(r, \theta_{N-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r}) \\ \chi(\vec{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r}) \\ \chi(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (3.1.3)$$

elde edilir. Burada $\varphi(\vec{r})$ ve $\chi(\vec{r})$ spin yukarı ve spin aşağı bileşenlerdir. Denklem (3.1.3) düzenlenirse

$$[E - Mc^2 - S(r, \theta_{N-1}) - V(r, \theta_{N-1})]\varphi(\vec{r}) - c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\chi(\vec{r}) = 0 \quad (3.1.4)$$

$$[E + Mc^2 + S(r, \theta_{N-1}) - V(r, \theta_{N-1})]\chi(\vec{r}) - c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\varphi(\vec{r}) = 0 \quad (3.1.5)$$

denklemleri elde edilir. Denklem (3.1.5)'de $\chi(\vec{r})$ çekilir, denklem (3.1.4)'de yerine yazılır ve gerekli düzenleme ve işlemler yapılırsa

$$\begin{aligned} & [\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}_N^2 + (E + Mc^2 + S(r, \theta_{N-1}) - V(r, \theta_{N-1})) \\ & \times (E - Mc^2 + S(r, \theta_{N-1}) - V(r, \theta_{N-1}))]\varphi(\vec{r}) = 0 \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

denklemini elde edilir. Denklem (3.1.6)'da

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} W(\vec{r})\right) \\ \Delta(\vec{r}) &= V(r, \theta_{N-1}) - S(r, \theta_{N-1}) \\ \Sigma(\vec{r}) &= V(r, \theta_{N-1}) + S(r, \theta_{N-1}) \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

tanımları kullanılır ve spin simetri durumu için $\Delta(\vec{r}) = C_s$ olarak alınırsa, spin simetri durumunda relativistik kuantum Hamilton-Jacobi denklemi

$$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_N^2 W(\vec{r}) + \left(\vec{\nabla}_N W(\vec{r}) \right)^2 - \frac{A^2}{c^2} - \frac{B\Sigma(\vec{r})}{c^2} = 0 \quad (3.1.8)$$

şeklinde elde edilir. Burada

$$A^2 = E^2 - M^2 c^4 - C_s(E - Mc^2) \ , \ B = C_s - E - Mc^2 \quad (3.1.9)$$

olarak alınır. Yüksek küresel koordinatlarda, merkezci olmayan potansiyel

$$\Sigma(\vec{r}) = V_1(r) + \frac{V_2(\theta_{N-1})}{r^2} \quad (3.1.10)$$

ve kuantum karakteristik fonksiyonu $W(\vec{r})$

$$W(\vec{r}) = W_r(r) + W_{\theta_{N-1}}(\theta_{N-1}) + W_{\theta_1}(\theta_1) \quad (3.1.11)$$

şeklindedir. Bölüm 1'de elde ettiğimiz yüksek küresel koordinatlarda gradyent ve Laplasyen operatörleri ile denklem (3.1.10) ve denklem (3.1.11), denklem (3.1.8)'de yerine yazılıp değişkenlerine ayırma metodu uygulanırsa

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} r^{N-1} \frac{\partial W_r(r)}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2 L_{N-1}^2}{i \hbar^2 r^2} \left(W_{\theta_{N-1}}(\theta_{N-1}) + W_{\theta_1}(\theta_1) \right) + \left(\frac{\partial W_r(r)}{\partial r} \right)^2 \\ & + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial W_{\theta_{N-1}}(\theta_{N-1})}{\partial \theta_{N-1}} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta_{N-1}} \left(\frac{\partial W_{\theta_1}(\theta_1)}{\partial \theta_1} \right)^2 - \frac{A^2}{c^2} - \frac{BV_1(r)}{c^2} - \frac{V_2(\theta_{N-1})B}{c^2} = 0 \end{aligned} \quad (3.1.12)$$

elde edilir. Buradan yüksek küresel koordinatlarda radyal ve açısal relativistik dalga denklemleri

$$\frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial^2 W_r(r)}{\partial r^2} + \frac{N-1}{r} \frac{\partial W_r(r)}{\partial r} \right] + \left(\frac{\partial W_r(r)}{\partial r} \right)^2 = \frac{A^2}{c^2} + \frac{BV_1(r)}{c^2} - \frac{a}{r^2} \quad (3.1.13)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial^2 W_{\theta_{N-1}}(\theta_{N-1})}{\partial \theta_{N-1}^2} + (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} \frac{\partial W_{\theta_{N-1}}(\theta_{N-1})}{\partial \theta_{N-1}} \right] + \left(\frac{\partial W_{\theta_{N-1}}(\theta_{N-1})}{\partial \theta_{N-1}} \right)^2 \\ & = a - \frac{b}{\sin^2 \theta_{N-1}} + \frac{V_2(\theta_{N-1})B}{c^2} \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W_{\theta_1}(\theta_1)}{\partial \theta_1^2} + \left(\frac{\partial W_{\theta_1}(\theta_1)}{\partial \theta_1} \right)^2 = b \quad (3.1.15)$$

şeklinde elde edilir. Burada a ve b , denklemin bağımsız değişkenlerinin her değerinde doğrulanabilmesini sağlayan ayırma sabitleridir.

Yüksek küresel koordinatlarda kuantum momentum fonksiyonu

$$\vec{p} = \vec{\nabla}_N W(\vec{r}) \quad (3.1.16)$$

şeklinde tanımlanır. Denklem (3.1.7)'de $\varphi(\vec{r})$ tanımı ve denklem (3.1.16)'dan kuantum momentum fonksiyonu

$$\vec{p} = \frac{\hbar \vec{\nabla}_N \varphi(\vec{r})}{i \varphi(\vec{r})} \quad (3.1.17)$$

elde edilir. Denklem (3.1.11), denklem (3.1.16)'da yerine yazıldığında

$$p_r = \frac{\partial W_r(r)}{\partial r}, \quad p_{\theta_{N-1}} = \frac{\partial W_{\theta_{N-1}}(\theta_{N-1})}{\partial \theta_{N-1}}, \quad p_{\theta_1} = \frac{\partial W_{\theta_1}(\theta_1)}{\partial \theta_1} \quad (3.1.18)$$

olarak bulunur. Radyal ve açısal kuantum kanonik dönüşümler denklem (3.1.13), (3.1.14) ve (3.1.15)'de yerine yazılırsa N-boyutta spin simetri durumunda radyal ve açısal relativistik dalga denklemleri

$$\frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial p_r}{\partial r} + \frac{(N-1)}{r} p_r \right] + p_r^2 = \frac{A^2}{c^2} + \frac{BV_1(r)}{c^2} - \frac{a}{r^2} \quad (3.1.19)$$

$$\frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial p_{\theta_{N-1}}}{\partial \theta_{N-1}} + (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} p_{\theta_{N-1}} \right] + p_{\theta_{N-1}}^2 = a - \frac{b}{\sin^2 \theta_{N-1}} + \frac{V_2(\theta_{N-1})B}{c^2} \quad (3.1.20)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p_{\theta_1}}{\partial \theta_1} + p_{\theta_1}^2 = b \quad (3.1.21)$$

şeklinde elde edilir. Yüksek küresel koordinatlarda dalga fonksiyonu

$$\varphi(\vec{r}) = r^{-\frac{(N-1)}{2}} R(r) \frac{H(\theta_{N-1})}{(\sin \theta_{N-1})^{\frac{(N-2)}{2}}} e^{im'\theta_1} \quad (3.1.22)$$

şeklinde alınır. Denklem (3.1.16) ve denklem (3.1.17) kullanılarak

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \frac{R'(r)}{R(r)} - \frac{\hbar}{i} \frac{(N-1)}{2r} \quad (3.1.23)$$

$$p_{\theta_{N-1}} = \frac{\hbar}{i} \frac{H'(\theta_{N-1})}{H(\theta_{N-1})} - \frac{\hbar}{i} \frac{(N-2)}{2} \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} \quad (3.1.24)$$

elde edilir. Radyal kuantum momentum fonksiyonu yeniden

$$\tilde{p}_r = p_r + \frac{\hbar}{i} \frac{(N-1)}{2r} \quad (3.1.25)$$

olarak tanımlanır. Denklem (3.1.23) ve denklem (3.1.25)'den radyal dalga fonksiyonu

$$R(r) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int \tilde{p}_r dr \right) \quad (3.1.26)$$

elde edilir. Açısal kuantum momentum fonksiyonu yeniden

$$\tilde{p}_{\theta_{N-1}} = p_{\theta_{N-1}} + \frac{\hbar}{2i} (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} \quad (3.1.27)$$

olarak tanımlanır. Bu tanımlama ve denklem (3.1.24) kullanılarak açısal dalga fonksiyonu

$$H(\theta_{N-1}) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int \tilde{p}_{\theta_{N-1}} d\theta_{N-1} \right) \quad (3.1.28)$$

olarak elde edilir.

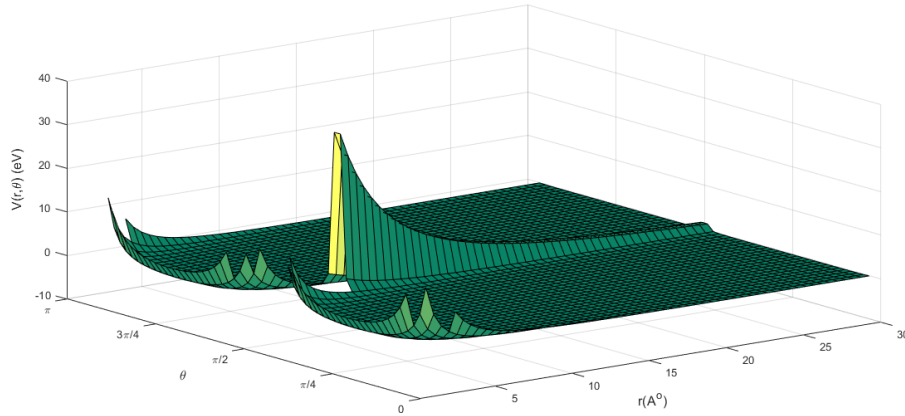
3.2. Kuantum Hamilton-Jacobi Yöntemi İle Double Ring-shaped Kratzer Potansiyeli İçin N-Boyutta Spin Simetri Durumunda Dirac Denkleminin Çözümleri

Yüksek küresel koordinatlarda, double ring-shaped Kratzer potansiyeli

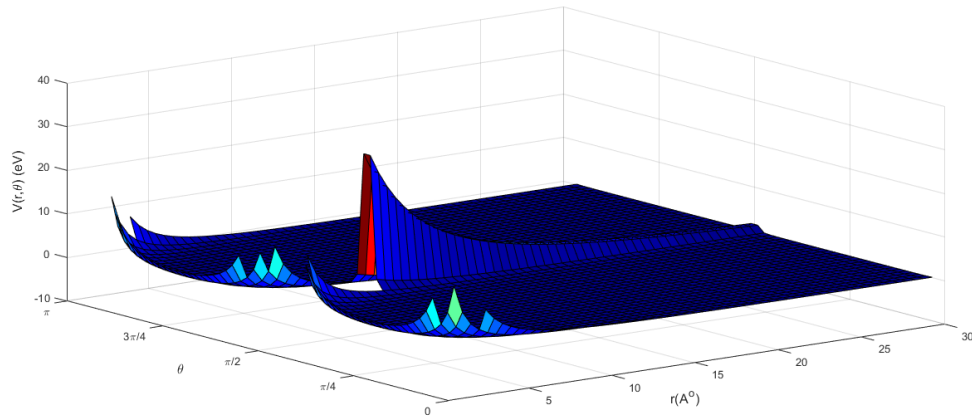
$$V(r, \theta_{N-1}) = -2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{1}{2} \frac{r_e^2}{r^2} \right) + \frac{\alpha}{r^2 \sin^2 \theta_{N-1}} + \frac{\beta}{r^2 \cos^2 \theta_{N-1}} \quad (3.2.1)$$

şeklinde tanımlanır. Burada, r_e atomlar arasındaki denge uzaklığı, D_e ayrışma enerjisi, α ve β pozitif gerçel parametrelerdir.

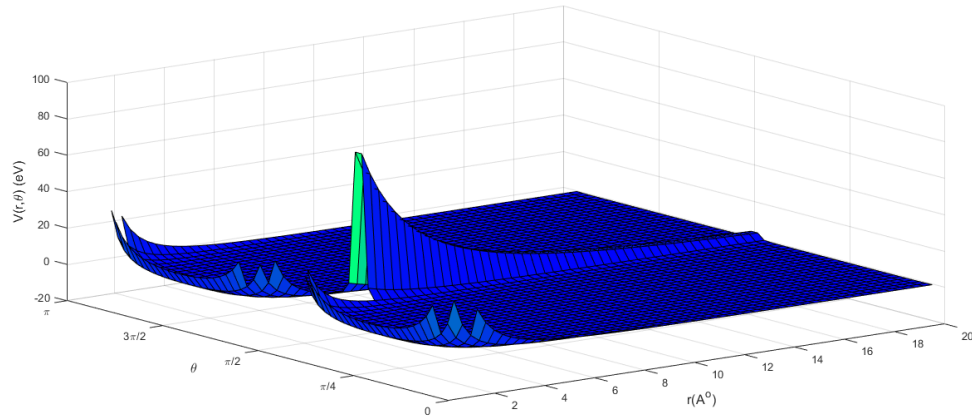
İki atomlu moleküller (NaH $X^1\Sigma^+$, MgH $X^2\Sigma^+$, HI $a^3\Sigma^+$) için double ring-shaped Kratzer potansiyelinin yüzey grafikleri Şekil 3.1, 3.2 ve 3.3'de gösterildi. Potansiyelin yüzey grafiği çizilirken kullanılan moleküler sabitler NaH $X^1\Sigma^+$ [154] için $D_e = 15900.0 \text{ cm}^{-1}$, $r_e = 1.887015 \text{ Å}$; HI $a^3\Sigma^+$ [155] için $D_e = 25811.60 \text{ cm}^{-1}$, $r_e = 1.604 \text{ Å}$; MgH $X^2\Sigma^+$ [154] için $D_e = 11104.7 \text{ cm}^{-1}$, $r_e = 0.967804 \text{ Å}$ olarak alınmıştır. Bu yüzey grafikleri Matlab programında çizilmiştir.



Şekil 3.1. NaH $X^1\Sigma^+$ molekülü için double ring-shaped Kratzer potansiyelinin yüzey grafiği



Şekil 3.2. MgH $X^2\Sigma^+$ molekülü için double ring-shaped Kratzer potansiyelinin yüzey grafiği



Şekil 3.3. HI $a^3\Sigma^+$ molekülü için double ring-shaped Kratzer potansiyelinin yüzey grafiği

3.2.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Spin Simetri Durumunda Relativistik Enerji Spektrumu

Bu bölümde, yüksek küresel koordinatlarda double ring-shaped Kratzer potansiyeli için spin simetri durumunda relativistik enerji spekturumu elde edilecektir.

Kratzer potansiyeli, (3.1.19) denkleminde yerine yazılırsa

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial P_r}{\partial r} + \frac{(N-1)}{r} P_r \right] + P_r^2 = \frac{E^2 - M^2 c^4 - C_s(E - M c^2)}{c^2} - \frac{a}{r^2} \\ + \frac{(C_s - E - M c^2)}{c^2} \left(-\frac{2D_e r_e}{r} + \frac{D_e r_e^2}{r^2} \right) \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

şeklinde elde edilir.

Kuantum Hamilton-Jacobi metoduyla N-boyutta radyal enerji spektrumunu bulmak için kuantum hareket değişkenini tanımlamamız gerekir. Kuantum hareket değişkeni, kompleks bölgede kuantum momentum fonksiyonunun $p(x, E)$, C çevresi üzerinden integralidir.

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint_C p(x, E) dx \quad (3.2.3)$$

Burada, C saat ibresinin tersi yönünde tanımlanan kapalı bir eğridir. Dalga fonksiyonunun kutup noktaları, kuantum momentum fonksiyonun sabit olmayan noktalarına denk gelir. Bölüm 1’de anlatıldığı gibi Leacock ve Padgett [115-116] enerji spektrumunu elde etmek için kuantum momentum fonksiyonunu kullanarak tam kuantizasyon koşulu tanımlanır.

$$J = n\hbar, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4)$$

Radyal kuantum hareket değişkeni

$$J_r = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_r} p_r dr \quad (3.2.5)$$

şeklinde. Burada, C_r saat ibresinin tersi yönünde tanımlanan konturdur. Radyal hareket değişkeni, $r=0$ ve $r=\infty$ kutup noktalarındaki kuantum hareket değişkenlerinin toplamıdır.

$$J_r = J_0 + J_\infty \quad (3.2.6)$$

J_0 integralini hesaplamak için $r = 0$ noktası yakınında p_r Laurent serisine açılır ve $p_r = \frac{b_1}{r} + a_0 + a_1 r + \dots$ şeklinde alınarak sonra (3.2.2) denkleminde yerine yazılır. $\frac{1}{r^2}$ li terimlerin katsayısından b_1 elde edilir.

$$b_1 = i\hbar \frac{(N-2)}{2} \pm i \sqrt{\frac{(N-2)^2 \hbar^2}{4} + a + \frac{D_e r_e^2 (E + M c^2 - C_s)}{c^2}} \quad (3.2.7)$$

Klasik momentum fonksiyonu tanımından $\tilde{p}_z^c \approx -i \frac{|M|}{z}$,

$$b_1 = i\hbar \frac{(N-2)}{2} - i\sqrt{\frac{(N-2)^2\hbar^2}{4} + a + \frac{D_e r_e^2 (E + M c^2 - C_s)}{c^2}} \quad (3.2.8)$$

olarak alınır. Rezidü teoremi kullanılarak

$$J_0 = -\frac{\hbar}{2}(N-2) - \sqrt{\frac{\hbar^2(N-2)^2}{4} + a + \frac{D_e r_e^2 (E + M c^2 - C_s)}{c^2}} \quad (3.2.9)$$

elde edilir.

J_∞ integralini hesaplamak için $r = \frac{1}{s}$ dönüşümü uygulanır ve

$$J_\infty = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_s} \frac{p_s}{s^2} ds \quad (3.2.10)$$

olarak bulunur. $s = 0$ noktası yakınında p_s Laurent serisine $p_s = a_0 + a_1 s + \dots$ şeklinde açılır ve (3.2.2) denkleminde yerine yazılırsa

$$a_1 = i\hbar \frac{(N-1)}{2} - \frac{D_e r_e}{c} \sqrt{\frac{(E + M c^2 - C_s)}{E - M c^2}} \quad (3.2.11)$$

olarak bulunur. Rezidü teoremi kullanılırsa

$$J_\infty = -\hbar \frac{(N-1)}{2} + \frac{D_e r_e}{c} \sqrt{-\frac{(E + M c^2 - C_s)}{E - M c^2}} \quad (3.2.12)$$

elde edilir. (3.2.9) ve (3.2.12) denklemleri, (3.1.6) denkleminde yerine yazıldığında

$$J_r = -\frac{\hbar}{2} - \sqrt{\frac{\hbar^2(N-2)^2}{4} + a + \frac{D_e r_e^2 (E + M c^2 - C_s)}{c^2}} + \frac{D_e r_e}{c} \sqrt{-\frac{(E + M c^2 - C_s)}{E - M c^2}} = n_r \hbar \quad (3.2.13)$$

$n_r = 0, 1, 2, \dots$ olmak üzere elde edilir.

Açısal kuantum hareket değişkeni

$$J_\theta = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_\theta} p_\theta d\theta \quad (3.2.14)$$

şeklindedir. (3.1.20) denkleminde merkezci olmayan potansiyel yerine yazılır. $z = \sin^2 \theta_{N-1}$ dönüşümü uygulanır ve $p_z = 2\sqrt{z(1-z)}\tilde{p}_z$ tanımı kullanılırsa

$$\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial \tilde{p}_z}{\partial z} + \frac{(N-1)-Nz}{2z(1-z)} \tilde{p}_z \right) + \tilde{p}_z^2 = \frac{a}{4z(1-z)} - \frac{\left(\frac{E + M c^2 - C_s}{c^2} \right) \alpha + \hbar^2 m^2}{4z^2(1-z)} - \frac{\left(\frac{E + M c^2 - C_s}{c^2} \right) \beta}{4z(1-z)^2} \quad (3.2.15)$$

elde edilir. Dönüşümler sonucunda açısal kuantum hareket değişkeni denklem (3.2.14),

$$J_\theta = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_z} \tilde{p}_z dz \quad (3.2.16)$$

şeklinde elde edilir. Açısal kuantum hareket değişkeni, $z = 0$, $z = 1$, $z = \infty$ kutup noktalarındaki hareket değişkenlerinin toplamıdır.

$$J_\theta = J_0 + J_1 + J_\infty \quad (3.2.17)$$

Burada,

$$J_0 = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_0} \tilde{p}_z dz \quad (3.2.18)$$

şeklindedir. C_0 saat ibresi yönünde tanımlanan konturdur. $z = 0$ noktası yakınında $\tilde{p}_z$ Laurent serisine $\tilde{p}_z = \frac{b_1}{z} + a_0 + a_1 z + \dots$ şeklinde açılır ve denklem (3.2.15)' de yerine yazılır. $\frac{1}{z^2}$ li terimlerin katsayısından b_1 elde edilir.

$$b_1 = i\hbar \frac{(N-3)}{4} \pm \frac{i}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2(N-3)^2}{4} + b + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{c^2}\right)\alpha} \quad (3.2.19)$$

Klasik momentum fonksiyonu tanımından $\tilde{p}_z^c \approx -i \frac{|M|}{z}$,

$$b_1 = i\hbar \frac{(N-3)}{4} - \frac{i}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2(N-3)^2}{4} + b + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{c^2}\right)\alpha} \quad (3.2.20)$$

olarak alınır. Rezidü teoremi kullanılarak

$$J_0 = \frac{1}{2} \left(\hbar \frac{(N-3)}{2} - \sqrt{\frac{\hbar^2(N-3)^2}{4} + b + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{c^2}\right)\alpha} \right) \quad (3.2.21)$$

elde edilir.

Denklem (3.2.17)' de

$$J_1 = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_1} \tilde{p}_z dz \quad (3.2.22)$$

şeklindedir. C_1 saat ibresi yönünde tanımlanan konturdur. $z = 1$ noktası yakınında $\tilde{p}_z = \frac{b_1}{(z-1)} + a_0 + \dots$ şeklinde Laurent seriye açılır ve denklem (3.2.15)' de yerine yazılır. $\frac{1}{(z-1)^2}$ li terimlerin katsayısından b_1 elde edilir.

$$b_1 = -\frac{i\hbar}{4} \pm \frac{i}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{4} + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{c^2}\right)\beta} \quad (3.2.23)$$

Klasik momentum fonksiyonu tanımından $\tilde{p}_z^c \approx -i \frac{|M|}{z}$,

$$b_1 = -\frac{i\hbar}{4} - \frac{i}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{4} + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{c^2}\right) \beta} \quad (3.2.24)$$

olarak alınır. Rezidü teoremi kullanılarak

$$J_1 = -\frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{2} + \sqrt{\frac{\hbar^2}{4} + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{c^2}\right) \beta} \right) \quad (3.2.25)$$

elde edilir.

Denklem (3.2.17)'de

$$J_\infty = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_\infty} \tilde{p}_z dz \quad (3.2.26)$$

şeklindedir. Denklem (3.2.26)'da $z = \frac{1}{s}$ dönüşümü uyugulanırsa

$$J_\infty = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_s} \frac{p_s}{s^2} ds \quad (3.2.27)$$

elde edilir. Burada, C_s saat ibresinin tersi yönünde tanımlanan konturdur. $s = 0$ noktası yakınında p_s Laurent serisine $p_s = a_0 + a_1 s + \dots$ şeklinde açılır ve denklem (3.2.15)'de yerine yazılırsa

$$a_1 = \frac{1}{2} \left(i\hbar \frac{(N-2)}{2} - i \sqrt{\frac{\hbar^2(N-2)^2}{4} + a} \right) \quad (3.2.28)$$

olarak bulunur. Rezidü teoremi kullanılarak

$$J_\infty = \frac{1}{2} \left(-\hbar \frac{(N-2)}{2} + \sqrt{\frac{\hbar^2(N-2)^2}{4} + a} \right) \quad (3.2.29)$$

elde edilir. (3.2.21), (3.2.25), (3.2.29) denklemleri, (3.2.17) denkleminde yerine yazılırsa

$$J_\theta = -\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{(N-2)^2}{4} + \frac{a}{\hbar^2}} - \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{1}{4} + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{\hbar^2 c^2}\right) \beta} \\ - \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{\hbar^2 c^2}\right) \alpha} = n_\theta \hbar, \quad n_\theta = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.30)$$

elde edilir.

(3.2.13) ve (3.2.30) denklemleri, (3.2.4) denkleminde yerine yazılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa double ring-shaped Kratzer potansiyeli için N-boyutta spin simetri durumunda relativistik enerji spektrumu

$$-\left(\frac{2D_e r_e}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{E-Mc^2}\right) = \left(2n_r + 1 + 2\sqrt{\left(2n_\theta + 1 + \sqrt{\frac{1}{4} + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{\hbar^2 c^2}\right)\beta} + \sqrt{\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{\hbar^2 c^2}\right)\alpha}\right)^2 + \frac{D_e r_e^2 (E+Mc^2-C_s)}{\hbar^2 c^2}}\right)^2 \quad (3.2.31)$$

şeklinde elde edilir. Falaye ve arkadaşları [69], küresel koordinatta double ring-shaped Kratzer potansiyeli için spin simetri durumunda relativistik enerji spektrumunu asimptotik iterasyon metoduyla elde etti. N-boyutta spin simetri durumunda bulunan (3.2.31) denklemi küresel koordinata indirgenerek Falaye'nin çalışmasında elde edilen enerji spektrumuyla aynı sonucu vermektedir. Aynı zamanda denklem (3.2.31), $N = 3$ için $C_s = 0$ durumunda, Gharbi ve arkadaşları [71] tarafından elde edilen relativistik enerji spektrumunu sağlamaktadır.

3.2.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Dalga Fonksiyonu

Bu bölümde, Kratzer potansiyeli etkisindeki spin-1/2 parçacık için N-boyutta relativistik radyal dalga denklemi kuantum Hamilton-Jacobi yöntemiyle çözülerek dalga fonksiyonu bulunur. Daha sonra, N-boyutta elde edilen radyal dalga fonksiyonu normalize edilir.

(3.2.2) denkleminde

$$\tilde{p}_r = p_r + \frac{\hbar}{i} \frac{(N-1)}{2r} \quad (3.2.32)$$

tanımı kullanılırsa

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_r}{\partial r} + \tilde{p}_r^2 - \frac{\hbar^2 (N-1)(3-N)}{4r^2} = \frac{E^2 - M^2 c^4 - C_s (E - M c^2)}{c^2} + \frac{2D_e r_e^2 (E + M c^2 - C_s)}{c^2 r} - \frac{a^2}{r^2} - \frac{D_e r_e^2 (E + M c^2 - C_s)}{c^2 r^2} \quad (3.2.33)$$

elde edilir. (3.2.33) denkleminde $y = \frac{r}{r_e}$ dönüşümü uygulanır. Uygun kısaltmalar

$$\kappa^2 = -\frac{(E^2 - M^2 c^4 - C_s (E - M c^2))}{\hbar^2 c^2} r_e^2 \quad (3.2.34)$$

$$\sigma^2 = \frac{(E+Mc^2-C_s)}{\hbar^2 c^2} D_e r_e^2 \quad (3.2.35)$$

ve ayırma sabiti

$$a = \hbar^2 l_{N-1} (l_{N-1} + N - 2) \quad (3.2.36)$$

denklem (3.2.33)'de yerine yazıldığında

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_y}{\partial y} + \tilde{p}_y^2 - \frac{\hbar^2 (N-1)(3-N)}{4y^2} = \hbar^2 \left(-\kappa^2 + \frac{2\sigma^2}{y} - \frac{\sigma^2 + l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2)}{y^2} \right) \quad (3.2.37)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.1.26)'dan $\tilde{p}_r$ çekilir ve $\tilde{p}_y = \tilde{p}_r r_e$ tanımı uygulanarak

$$\tilde{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{R'(y)}{R(y)} \quad (3.2.38)$$

olarak bulunur. Sonlu kompleks y düzleminde, kuantum momentum fonksiyonu $\tilde{p}_y$, n_r sabit olmayan noktalara ve $y = 0$ ' da sabit bir kutup noktasına sahiptir. Böylece, kuantum momentum fonksiyonu

$$\tilde{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{Q'_{n_r}(y)}{Q_{n_r}(y)} + \frac{b_1}{y} + c \quad (3.2.39)$$

şeklinde yazılır. b_1 i bulmak için $\tilde{p}_y$, $y = 0$ yakınında Laurent serisine açıldığında

$$\tilde{p}_y \approx \frac{b_1}{y} + a_0 \quad (3.2.40)$$

olarak yazılır. Denklem (3.2.40), denklem (3.2.37)'de yerine yazılır ve $\frac{1}{y^2}$ li terimlerin katsayılarından b_1 hesaplanır.

$$b_1 = -\frac{i\hbar}{2} \pm \frac{i\hbar}{2} \sqrt{(N-2)^2 + 4[\sigma^2 + l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2)]} \quad (3.2.41)$$

Dalga fonksiyonunun sonlu olması gerektiğinden

$$b_1 = -i\hbar\nu \quad (3.2.42)$$

olarak bulunur. Burada, $\nu = \frac{1}{2} + \sqrt{\sigma^2 + \left(l_{N-1} + \frac{N-2}{2}\right)^2}$ olarak alınır. Benzer şekilde, dalga fonksiyonunun sınır şartlarından dolayı $c = +i\hbar\kappa$ olarak bulunur. b_1 ve c , denklem (3.2.39)' da yerine yazıldıktan sonra bu denklem, denklem (3.2.37)'de kullanılırsa

$$\frac{Q''_{n_r}(y)}{Q_{n_r}(y)} + \frac{Q'_{n_r}(y)}{Q_{n_r}(y)} \left(\frac{2\nu}{y} - 2\kappa \right) - \frac{2\nu\kappa}{y} + \frac{2\sigma^2}{y} = 0 \quad (3.2.43)$$

elde edilir. (3.2.43) denklemine, $x = 2\kappa y$ dönüşümü uygulandığında

$$xQ''_{n_r}(x) + Q'_{n_r}(x)((2\nu - 1) + 1 - x) + \left(\frac{\sigma^2}{\kappa} - \nu \right) Q_{n_r}(x) = 0 \quad (3.2.44)$$

elde edilir. (3.2.34), (3.2.35), (3.2.13) denklemleri ve ν tanımlarından

$$n_r = \frac{\sigma^2}{\kappa} - \nu \quad (3.2.45)$$

olarak bulunur. (3.2.44) denklemi

$$xQ''_{n_r}(x) + Q'_{n_r}(x)((2\nu - 1) + 1 - x) + n_r Q_{n_r}(x) = 0 \quad (3.2.46)$$

şeklinde yeniden yazılır. (3.2.46) denklemi genelleştirilmiş Laguerre [156] diferansiyel denklemdir. Bundan dolayı, (3.2.46) denkleminin çözümü

$$Q_{n_r}(x) = L_{n_r}^{2\nu-1}(x) \quad (3.2.47)$$

şeklindedir. Radyal dalga fonksiyonu

$$R(y) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int \tilde{p}_y dy\right) \quad (3.2.48)$$

ile hesaplanır. Önceden elde edilen b_1 ve c 'nin değerleri denklem (3.2.39)'da yerine yazılırsa

$$\tilde{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{Q'_{n_r}(y)}{Q_{n_r}(y)} - i\hbar \frac{\nu}{y} + i\hbar\kappa \quad (3.2.49)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.2.49), denklem (3.2.48)'de yazılır ve $y = \frac{r}{r_e}$ dönüşümü uygulanır. Gerekli düzenleme ve hesaplamalar sonucunda N-boyutta relativistik dalga fonksiyonu

$$R(r) = C_2 \left(\frac{r}{r_e} \right)^\nu e^{-\kappa \frac{r}{r_e}} L_{n_r}^{2\nu-1} \left(2\kappa \frac{r}{r_e} \right) \quad (3.2.50)$$

olarak bulunur. Burada, C_2 normalizasyon sabitidir. Normalizasyon sabiti

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 dr = 1 \quad (3.2.51)$$

şartından bulunur. Denklem (3.2.50), denklem (3.2.51)'de yerine yazılır. Bu integralin çözümü için Laguerre polinomunun diklik bağıntısı [145-146]

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\beta \left[L_n^{\beta-1}(x) \right]^2 dx = \frac{(\beta+2n)\Gamma(\beta+n)}{n!} \quad (3.2.52)$$

kullanılırsa normalizasyon sabiti

$$C_2 = \left[\frac{(2\kappa)^{2\nu+1} n_r!}{2r_e(n_r+\nu)(n_r+2\nu-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.2.53)$$

şekinde elde edilir. Denklem (3.2.53), denklem (3.2.50)' da yerine yazılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa N-boyutta normalize edilmiş relativistik radyal dalga fonksiyonu

$$R(r) = \left((2\kappa)^{2\nu+1} \frac{n_r!}{r_e(2\nu+2n_r)\Gamma(2\nu+n_r)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{r_e} \right)^\nu e^{-\kappa \frac{r}{r_e}} L_{n_r}^{2\nu-1} \left(2\kappa \frac{r}{r_e} \right) \quad (3.2.54)$$

bulunur.

3.2.3. Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısal Dalga Fonksiyonu

Bu bölümde, merkezci olmayan potansiyel için yüksek küresel koordinatlarda relativistik açısal dalga denklemi kuantum Hamilton-Jacobi metoduyla çözülerek dalga fonksiyonu bulunur. Daha sonra, yüksek küresel koordinatlarda elde edilen açısal dalga fonksiyonu normalize edilir.

Merkezcil olmayan potansiyel, (3.1.20) denkleminde yerine yazılırsa

$$\frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial P_{\theta_{N-1}}}{\partial \theta_{N-1}} + (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} P_{\theta_{N-1}} \right] + P_{\theta_{N-1}}^2 = \hbar^2 l_{N-1} (l_{N-1} + N - 2) - \frac{\left(\frac{E+Mc^2-C_s}{c^2} \right) \alpha + \hbar^2 m'^2}{\sin^2 \theta_{N-1}} - \frac{\left(\frac{E+Mc^2-C_s}{c^2} \right) \beta}{\cos^2 \theta_{N-1}} \quad (3.2.55)$$

elde edilir. (3.2.55) denkleminde

$$\tilde{p}_{\theta_{N-1}} = p_{\theta_{N-1}} + \frac{\hbar}{2i} (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} \quad (3.2.56)$$

tanımı uygulanır ve

$$l_{N-1} (l_{N-1} + N - 2) = l'_{N-1}{}^2 - \frac{(N-2)}{4} \quad (3.2.57)$$

$$\varepsilon = \sqrt{m'^2 + \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{\hbar^2 c^2} \right) \alpha + \frac{(N-3)^2}{4}} - \frac{1}{2} \quad (3.2.58)$$

$$\rho = \sqrt{\left(\frac{E+Mc^2-C_s}{\hbar^2 c^2} \right) \beta + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \quad (3.2.59)$$

şeklindeki uygun kısaltmalar kullanılırsa

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_{\theta_{N-1}}}{\partial \theta_{N-1}} + \tilde{p}_{\theta_{N-1}}^2 = \hbar^2 \left[l_{N-1}'^2 + \frac{(N-2)(N-3)}{4} - \frac{\varepsilon(\varepsilon+1)}{\sin^2 \theta_{N-1}} - \frac{\rho(\rho+1)}{\cos^2 \theta_{N-1}} \right] \quad (3.2.60)$$

denklemi elde edilir. (3.2.60) denkleminde $z = \sin^2 \theta_{N-1}$ dönüşümü uygulanır ve

$$\tilde{p}_z = 2\sqrt{z(1-z)}\gamma(z) \quad (3.2.61)$$

$$\chi(z) = \gamma(z) + \frac{\hbar}{4i} \frac{(1-2z)}{z(1-z)} \quad (3.2.62)$$

tanımları kullanılırsa

$$\chi^2(z) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi(z)}{\partial z} = \frac{3\hbar^2}{16} \frac{(1-2z)^2}{z^2(1-z)^2} + \frac{\hbar^2}{2z(1-z)} + \hbar^2 \left[\frac{l_{N-1}'^2}{4z(1-z)} - \frac{\varepsilon(\varepsilon+1)}{4z^2(1-z)} - \frac{\rho(\rho+1)}{4z(1-z)^2} \right] \quad (3.2.63)$$

olarak bulunur. Sonlu kompleks z düzleminde, kuantum momentum fonksiyonu $\chi(z)$, n_θ sabit olmayan noktalara, $z = 0$ ve $z = 1$ ' de sabit iki kutup noktasına sahiptir. Böylece, kuantum momentum fonksiyonu

$$\chi(z) = \frac{b_1}{z} + \frac{b_1'}{z-1} + \frac{\hbar}{i} \frac{Q_{n_\theta}'(z)}{Q_{n_\theta}(z)} + c \quad (3.2.64)$$

şeklinde yazılır. b_1 'i bulmak için $z = 0$ noktası yakınında $\chi(z)$ Laurent serisine açıldığında

$$\chi(z) \approx \frac{b_1}{z} + a_0 + \dots \quad (3.2.65)$$

olarak yazılır. Denklem (3.2.65), denklem (3.2.63)'de yerine yazılırsa $\frac{1}{z^2}$ 'li terimlerin katsayılarından b_1 hesaplanır. Burada b_1 ,

$$b_1 = -\frac{i\hbar}{2} \pm \frac{i\hbar}{2} \left(\varepsilon + \frac{1}{2} \right) \quad (3.2.66)$$

şeklindedir. Dalga fonksiyonunun sonlu olması gerektiğinden b_1 ifadesi

$$b_1 = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\varepsilon}{2} + \frac{3}{4} \right) \quad (3.2.67)$$

olarak bulunur.

b_1' bulmak için $\chi(z)$, $z = 1$ noktası yakınında Laurent serisine açılırsa

$$\chi(z) \approx \frac{b_1'}{z-1} + a_0 + \dots \quad (3.2.68)$$

şeklinde yazılır. Denklem (3.2.68), denklem (3.2.63)'de yerine yazılır ve $\frac{1}{(z-1)^2}$ 'li terimlerin katsayısından b'_1 elde edilir.

$$b'_1 = -\frac{i\hbar}{2} \pm \frac{i\hbar}{2} \left(\rho + \frac{1}{2} \right) \quad (3.2.69)$$

Dalga fonksiyonunun sonlu olması gerektiğinden

$$b'_1 = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\rho}{2} + \frac{3}{4} \right) \quad (3.2.70)$$

olarak bulunur. Benzer şekilde, c sabitini bulmak için denklem (3.2.64), denklem (3.2.63)' de yerine yazılır ve sabit terimleri karşılaştırarak $c = 0$ olarak bulunur. Bu düzenlemeler sonucunda, kuantum momentum fonksiyonu

$$\chi(z) = \frac{\hbar Q'_{n_\theta}(z)}{i Q_{n_\theta}(z)} + \frac{\hbar \left(\frac{\varepsilon}{2} + \frac{3}{4} \right)}{i z} + \frac{\hbar \left(\frac{\rho}{2} + \frac{3}{4} \right)}{i z-1} \quad (3.2.71)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.2.71), denklem (3.2.63)'de yerine yazıldığında

$$\begin{aligned} z(1-z)Q''_{n_\theta}(z) + Q'_{n_\theta}(z) \left[\left(\frac{3}{2} + z \right) - z(\rho + \varepsilon + 3) \right] \\ - \left[\left(-\frac{l'_{N-1}}{2} + \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\rho}{2} + 1 \right) \left(\frac{l'_{N-1}}{2} + \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\rho}{2} + 1 \right) \right] Q_{n_\theta}(z) = 0 \end{aligned} \quad (3.2.72)$$

elde edilir. (3.2.72) denklemi, hipergeometrik [156] diferansiyel denklemdir. Bundan dolayı, denklemin çözümü

$$Q_{n_\theta}(z) = {}_2F_1 \left(-\frac{l'_{N-1}}{2} + \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\rho}{2} + 1, \frac{l'_{N-1}}{2} + \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\rho}{2} + 1, \frac{3}{2} + \varepsilon, z \right) \quad (3.2.73)$$

olarak bulunur. (3.2.30), (3.2.57), (3.2.58) ve (3.2.59) tanımlarından

$$n_\theta = \frac{l'_{N-1}}{2} - \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\rho}{2} - 1 \quad n_\theta = 0, 1, 2 \dots \quad (3.2.74)$$

şeklinde elde edilir.

Denklem (3.1.28)'de $z = \sin^2 \theta_{N-1}$ dönüşümü uygulanır ve (3.2.61) tanımı kullanılırsa

$$H(z) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int \gamma(z) dz \right) \quad (3.2.75)$$

olarak bulunur. Denklem (3.2.62), denklem (3.2.75)' de yerine yazılır ve integral hesabı sonucu

$$H(z) = C_1 z^{\frac{\varepsilon+1}{2}} (z-1)^{\frac{\rho+1}{2}} Q_{n_\theta}(z) \quad (3.2.76)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.2.73), denklem (3.2.76)'de yerine yazıldığında

$$H(\theta_{N-1}) = C_1 (\sin \theta_{N-1})^{1+\varepsilon} (\cos \theta_{N-1})^{1+\rho} \times {}_2F_1\left(-n_\theta, n_\theta + \varepsilon + \rho + 2, \frac{3}{2} + \varepsilon, \sin^2 \theta_{N-1}\right) \quad (3.2.77)$$

N boyutta normalize edilmemiş relativistik açısız dalga fonksiyonu elde edilir. Burada, C_1 normalizasyon sabitidir. Normalizasyon sabiti

$$\int_0^\pi H(\theta_{N-1}) d\theta_{N-1} = 1 \quad (3.2.78)$$

şartından bulunur. Jacobi polinomu ve hipergeometrik fonksiyon arasındaki bağıntı [143]

$${}_2F_1(-n, a_0 + b_0 + n + 1, a_0 + 1, s) = \frac{n!}{(a_0+1)_n} P_n^{(a_0, b_0)}(1-2s) \quad (3.2.79)$$

kullanılarak denklem (3.2.77)

$$H(\theta_{N-1}) = C_1 (\sin \theta_{N-1})^{1+\varepsilon} (\cos \theta_{N-1})^{1+\rho} \frac{n!}{\left(\frac{3}{2} + \varepsilon\right)_n} \times P_n^{(\varepsilon + \frac{1}{2}, \rho + \frac{1}{2})}(1 - 2\sin^2 \theta_{N-1}) \quad (3.2.80)$$

olarak yazılır. Denklem (3.2.80), denklem (3.2.78)'de yerine yazılır ve integralin çözümü için Jacobi polinomunun diklik bağıntısı [143]

$$\int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\beta \left[P_n^{(\alpha, \beta)}(x) \right]^2 dx = \frac{2^{\alpha+\beta+1} \Gamma(n+\alpha+1) \Gamma(n+\beta+1)}{n! (2n+\alpha+\beta+1) \Gamma(n+\alpha+\beta+1)} \quad (3.2.81)$$

kullanılır ve matematiksel işlemler sonucunda N-boyutta normalize edilmiş relativistik açısız dalga fonksiyonu

$$H(\theta_{N-1}) = (\sin \theta_{N-1})^{1+\varepsilon} (\cos \theta_{N-1})^{1+\rho} \left[\frac{n! (2n+\varepsilon+\rho+2) \Gamma(n+\varepsilon+\rho+2)}{\Gamma(n+\varepsilon+\frac{3}{2}) \Gamma(n+\rho+\frac{3}{2})} \right]^{\frac{1}{2}} \times P_n^{(\varepsilon + \frac{1}{2}, \rho + \frac{1}{2})}(1 - 2\sin^2 \theta_{N-1}) \quad (3.2.82)$$

şeklinde elde edilir.

3.2.4. Double Ring-shaped Kratzer Potansiyeli İçin Spin Simetri Durumunda Enerjinin Nümerik Değerleri

N-boyutta spin simetri durumunda relativistik enerji spektrumu, $N = 3$ boyutta farklı kuantum durumlarında ve $C_s = 5 \text{ fm}^{-1}$, $r_e = 0.4 \text{ fm}^{-1}$, $D_e = 15 \text{ fm}^{-1}$, $M = 5 \text{ fm}^{-1}$ değerleri için elde edildi ve sonuçlar Tablo 3.1, Tablo 3.2’de gösterildi. Burada elde edilen sonuçlar Falaye ve arkadaşları [69] tarafından bulunan sonuçlar ile uyumludur.

Tablo 3.1 Double ring-shaped Kratzer potansiyeli için spin simetri durumunda relativistik enerji özdeğerleri (fm^{-1})

n_r	n_θ	m	$\alpha = \beta = 1$		$\alpha = 0 \quad \beta = 1$	
			QHJ	AİM[69]	QHJ	AİM[69]
0	0	0	2.072188142	2.072188142	1.406939539	1.406939539
			9.060994524	9.060994522	12.09217551	12.09217551
1	0	0	2.725765192	2.725765193	2.166121214	2.166121214
			8.207625096	8.207625097	10.32429829	10.32429829
1	0	1	2.845560701	2.845560703	2.315560483	2.315560481
			8.103584650	8.103584648	10.16638485	10.16638485
1	1	0	3.425589262	3.425589261	3.012069405	3.012069404
			7.186557628	7.186557630	8.504093195	8.504093195
1	1	1	3.490508001	3.490508001	3.099115025	3.099115024
			7.113819334	7.113819334	8.378950513	8.378950515
2	0	0	3.167137609	3.167137607	2.720904245	2.720904245
			7.561368030	7.561368032	9.033462864	9.033462867
2	0	1	7.479670323	7.479670321	2.820166861	2.820166862
			3.247127505	3.247127506	8.910883178	8.910883178
2	1	0	3.678964622	3.678964621	3.346561780	3.346561778
			6.787568955	6.787568957	7.717297246	7.717297246
2	1	1	3.727193110	3.727193112	3.410443772	3.410443771
			6.730700771	6.730700771	7.623294976	7.623294975
2	2	0	4.010999393	4.010999391	3.774204752	3.774204752
			6.281221372	6.281221374	6.839147058	6.839147059
2	2	1	4.041936970	4.041936969	3.815408674	3.815408674
			6.242991096	6.242991096	6.776804597	6.776804599
3	0	0	3.485915059	3.485915060	3.131267846	3.131267848
			7.073115012	7.073115012	8.106020477	8.106020479
3	0	1	3.543052442	3.543052442	3.201037906	3.201037907
			7.009267663	7.009267661	8.012834666	8.012834667
3	1	0	3.874907652	3.874907652	3.605610391	3.605610390
			6.482650215	6.482650213	7.153253653	7.153253654
3	1	1	3.911932693	3.911932694	3.653932541	3.653932542
			6.437892254	6.437892252	7.082243861	7.082243862

Tablo 3.2 Double ring-shaped Kratzer potansiyeli için spin simetri durumunda relativistik enerji özdeğerleri (fm^{-1})

n_r	n_θ	m	$a = \beta = 0$		$a = 1 \quad \beta = 0$	
			QHJ	AIM[69]	QHJ	AIM[69]
0	0	0	17.29953765	17.29953766	1.116712575	1.116712576
			0.7441797016	0.744179704	12.74519748	12.74519748
			-0.4009466430	-0.400946639	-0.2410864897	
1	0	0	1.493268566	1.493268566	1.947036164	1.947036165
			13.98804932	13.98804932	10.81287613	10.81287612
			-0.7512716058	-0.751271606		
1	0	1	1.955144904	1.955144908	2.447369326	2.447369328
			13.07639777	13.07639776	9.779027299	9.779027300
			-1.666666667	-1.666666667		
1	1	0	2.389717507	2.389717500	2.860071672	2.860071672
			11.87959407	11.87959406	8.868839383	8.868839382
			-3.079630226	-3.079630218		
1	1	1	2.769682621	2.769682610	3.193384975	3.193384975
			10.59130824	10.59130823	8.115160359	8.115160360
			-5.205436923	-5.205436911		
2	0	0	11.53551968	11.53551968	2.561073200	2.561073200
			2.156404229	2.156404231	9.389148001	9.389148000
2	0	1	2.500000000	2.500000000	2.922513886	2.922513885
			10.82905932	10.82905932	8.634882756	8.634882758
			-2.292912051	-2.292912051		
2	1	0	2.834669754	2.834669759	3.230176780	3.230176780
			9.943446165	9.943446173	7.978234689	7.978234688
			-4.123924148	-4.123924146		
2	1	1	3.132086643	3.132086660	3.484971874	3.484971875
			9.038300042	9.038300004	7.436562471	7.436562470
			-6.702239959	-6.702239952		
2	2	0	3.387164205	3.38716421	3.694652627	3.694652628
			8.235838079	8.23583808	7.003717432	7.003717432
			-10.17752526	-10.17752526		
2	2	1	3.602671867	3.60267187	3.867483357	3.867483358
			7.586741735	7.58674172	6.662707035	6.662707035
			-14.61359280	-14.61359280		
3	0	0	2.678986991	2.678986992	3.012356170	3.012356170
			9.795375767	9.795375780	8.362128944	8.362128945
3	0	1	2.932318930	2.932318925	3.280500248	3.280500248
			9.272753320	9.272753313	7.816722460	7.816722460
			-2.604114295	-2.604114296		
3	1	0	3.188810548	3.188810550	3.514963519	3.514963518
			8.640638655	8.640638643	7.341939089	7.341939088
			-4.888919081	-4.888919080		
3	1	1	3.421849736	3.421849740	3.713426640	3.713426640
			8.014106864	8.01410686	6.947883889	6.947883890
			-7.848088909	-7.848088905		

3.2.5. İki Atomlu Moleküller İçin Relativistik Enerji Spektrumunun Nümerik Değerlerinde ve Relativistik Dalga Fonksiyonlarında Boyut Etkisi

Bu bölümde, denklem (3.2.31)'de $C_s = 0$ için yüksek küresel koordinatlarda $S(r, \theta_{N-1}) = V(r, \theta_{N-1})$ koşulundaki relativistik enerji spektrumu elde edildi ve iki atomlu moleküller (HI $a^3\Sigma^+$, NaH $X^1\Sigma^+$, MgH $X^2\Sigma^+$) için üç ve beş boyutta relativistik enerji değerleri hesaplandı. Aynı zamanda, dönme ve titreşim spektrumunun (E_{nm}) nümerik değerleri, üç boyutta $n = 1$, $l_1 = 0$ durumunda elde edildi. Maple programında HI $a^3\Sigma^+$, NaH $X^1\Sigma^+$, MgH $X^2\Sigma^+$ moleküllerinin $N = 3$ ve $N = 5$ boyutta $l_{N-1} = 0, 1, 2$ durumlarında radyal ve açısal dalga fonksiyonlarının grafikleri çizildi.

İki atomlu moleküllerin üç ve beş boyutta relativistik enerjinin nümerik değerlerinin hesaplamasında kullanılan moleküler sabitlerin değerleri Tablo 3.3'de verildi.

Tablo 3.3. İki atomlu moleküllerin spektroskopik parametreleri

	NaH $X^1\Sigma^+$	HI $a^3\Sigma^+$	MgH $X^2\Sigma^+$
$D_e(\text{cm}^{-1})$	15900.0	25811.60	11104.7
$r_e(\text{\AA})$	1.887015	1.604	1.729682
$\mu(\text{amu})$	0.9655499	1.0002	0.967804

Bu değerler kullanılarak elde edilen relativistik enerjinin nümerik değerleri Tablo 3.4'de verildi.

Tablo 3.4. İki atomlu moleküllerin üç ve beş boyutta hesaplanan relativistik enerji değerleri

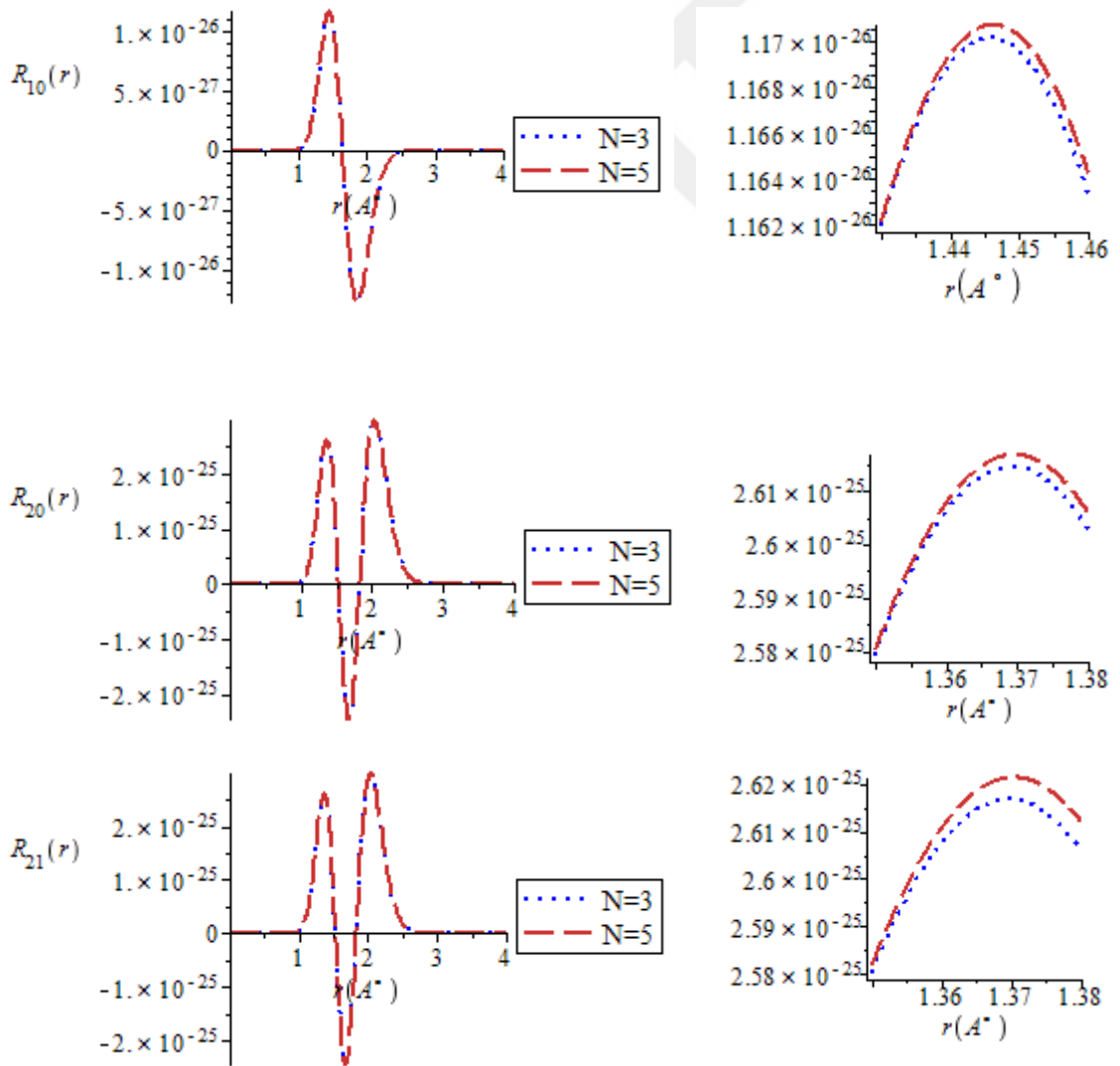
n	l	N=3 ve N=5		
		$E_{nl}^{\text{NaH}}(\text{MeV})$	$E_{nl}^{\text{HI}}(\text{MeV})$	$E_{nl}^{\text{MgH}}(\text{MeV})$
1	0	899.3648624	931.6882973	901.5119844
2	0	899.3648625	931.6882974	901.5119845
2	1	899.3648625	931.6882974	901.5119845
3	0	899.3648626	931.6882975	901.5119845
3	1	899.3648626	931.6882975	901.5119845
3	2	899.3648626	931.6882975	901.5119845

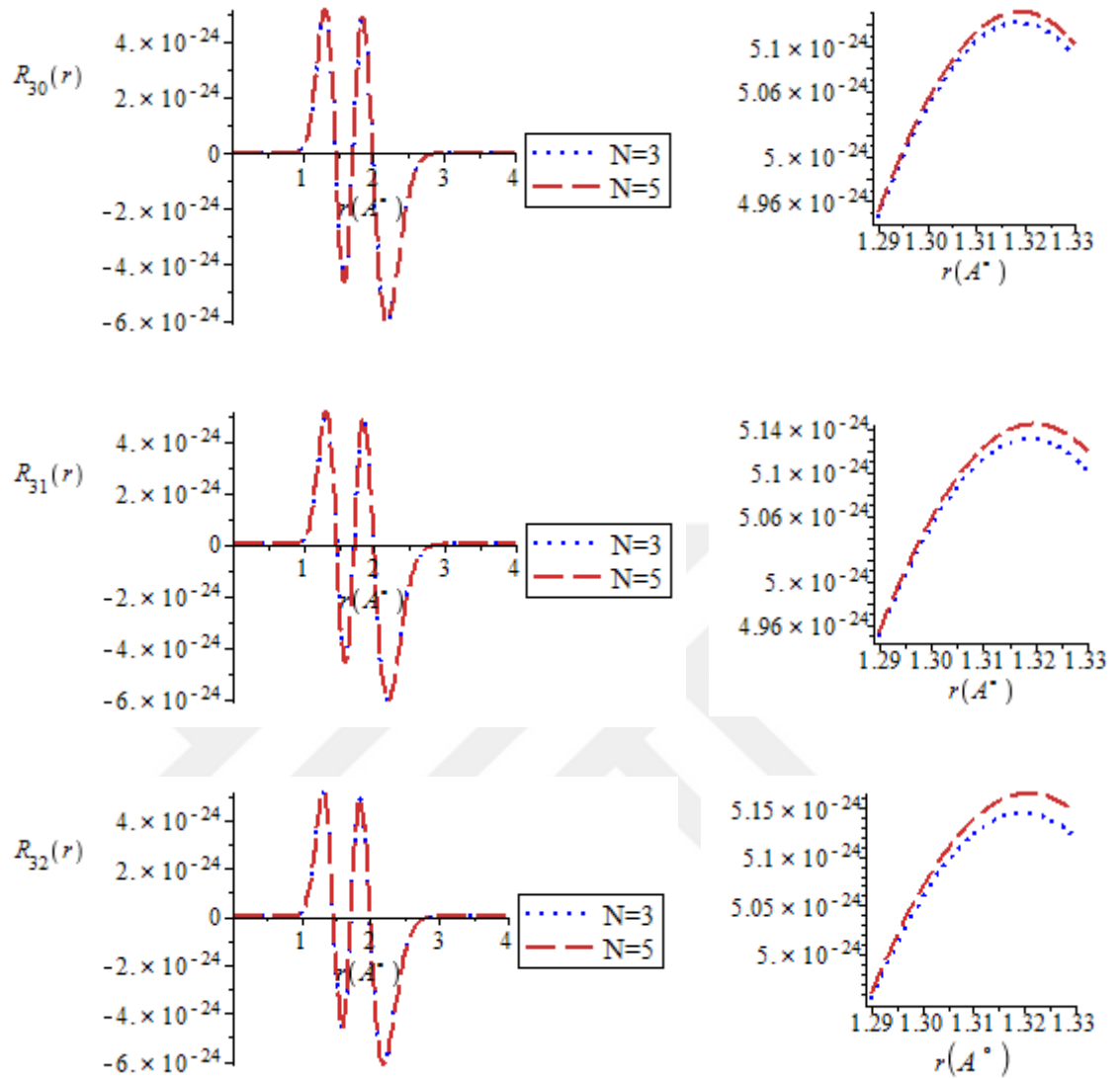
Tablo 3.3'deki deęerler kullanılarak elde edilen 1s durumundaki dnme-titreřim relativistik enerji spekturumunun (E_{nl}) ve aısal katkılı dnme-titreřim relativistik enerji spekturumunun (E_{nm}) nmerik sonuları Tablo 3.5'de verildi.

Tablo 3.5. İki atomlu molekllerin dnme-titreřim relativistik enerji deęerleri

	$E_{nl}(MeV)$	$E_{nm}(MeV)$
NaH $X^1\Sigma^+$	899.3648624	899.3648643
HI $a^3\Sigma^+$	931.6882973	931.6883004
MgH $X^2\Sigma^+$	901.5119844	901.5119857

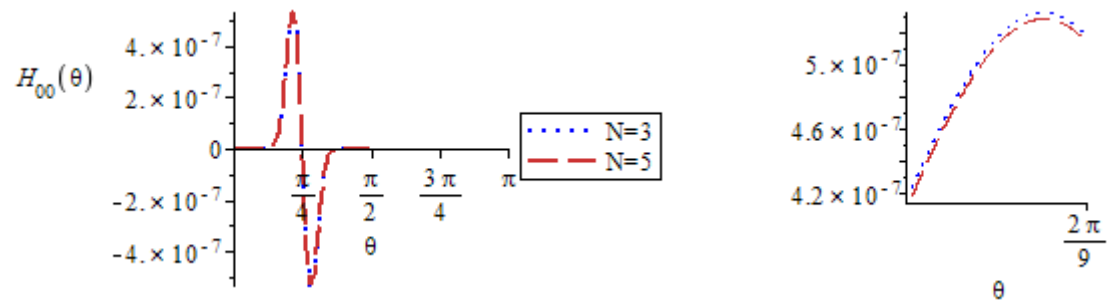
HI $a^3\Sigma^+$ molekl iin $n=1, 2, 3$ ve $0 \leq l_{N-1} \leq n-1$ durumlarında  ve beř boyutta radyal dalga fonksiyonlarının grafikleri řekil 3.4'de verildi.

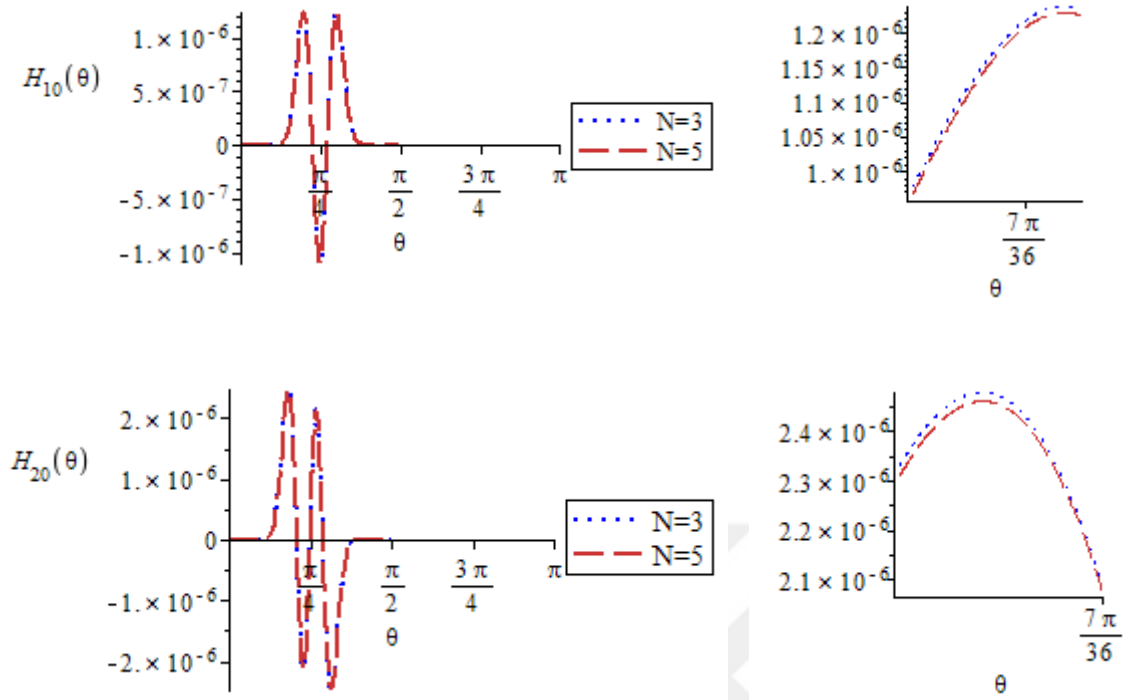




Şekil 3.4. HI $a^3\Sigma^+$ molekülü için radyal dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi

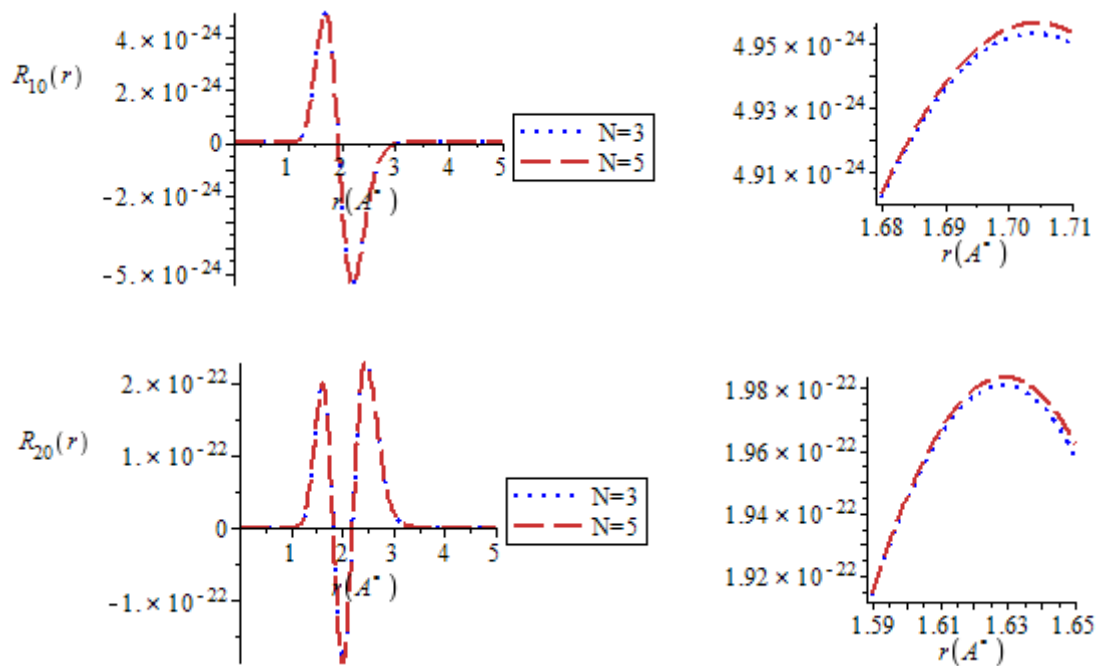
HI $a^3\Sigma^+$ molekülü için $l_{N-1} = 0,1,2$ durumlarında üç ve beş boyutta açılal dalga fonksiyonlarının grafikleri Şekil 3.5’de gösterildi.

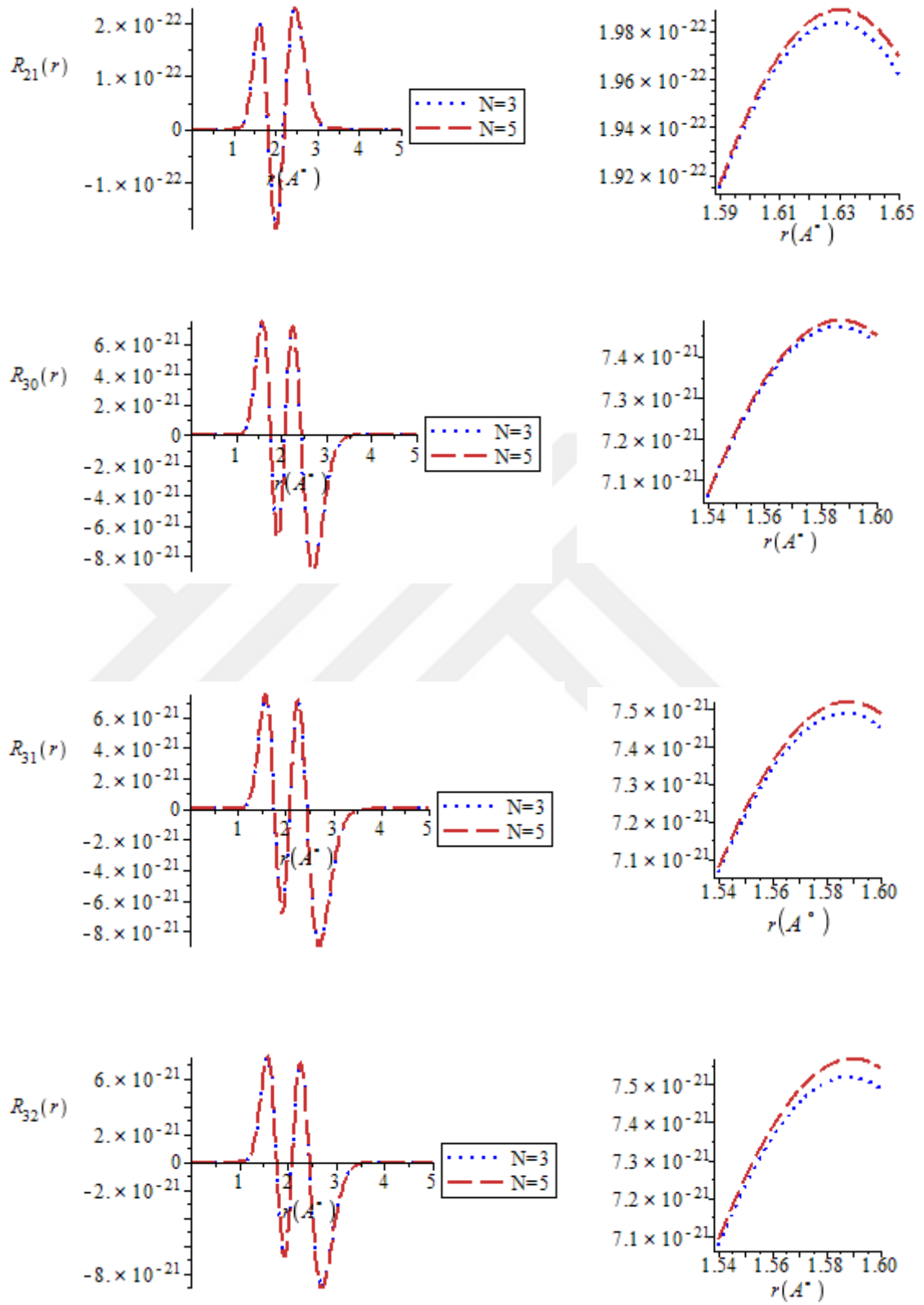




Şekil 3.5. HI $a^3\Sigma^+$ molekülü için açısız dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi

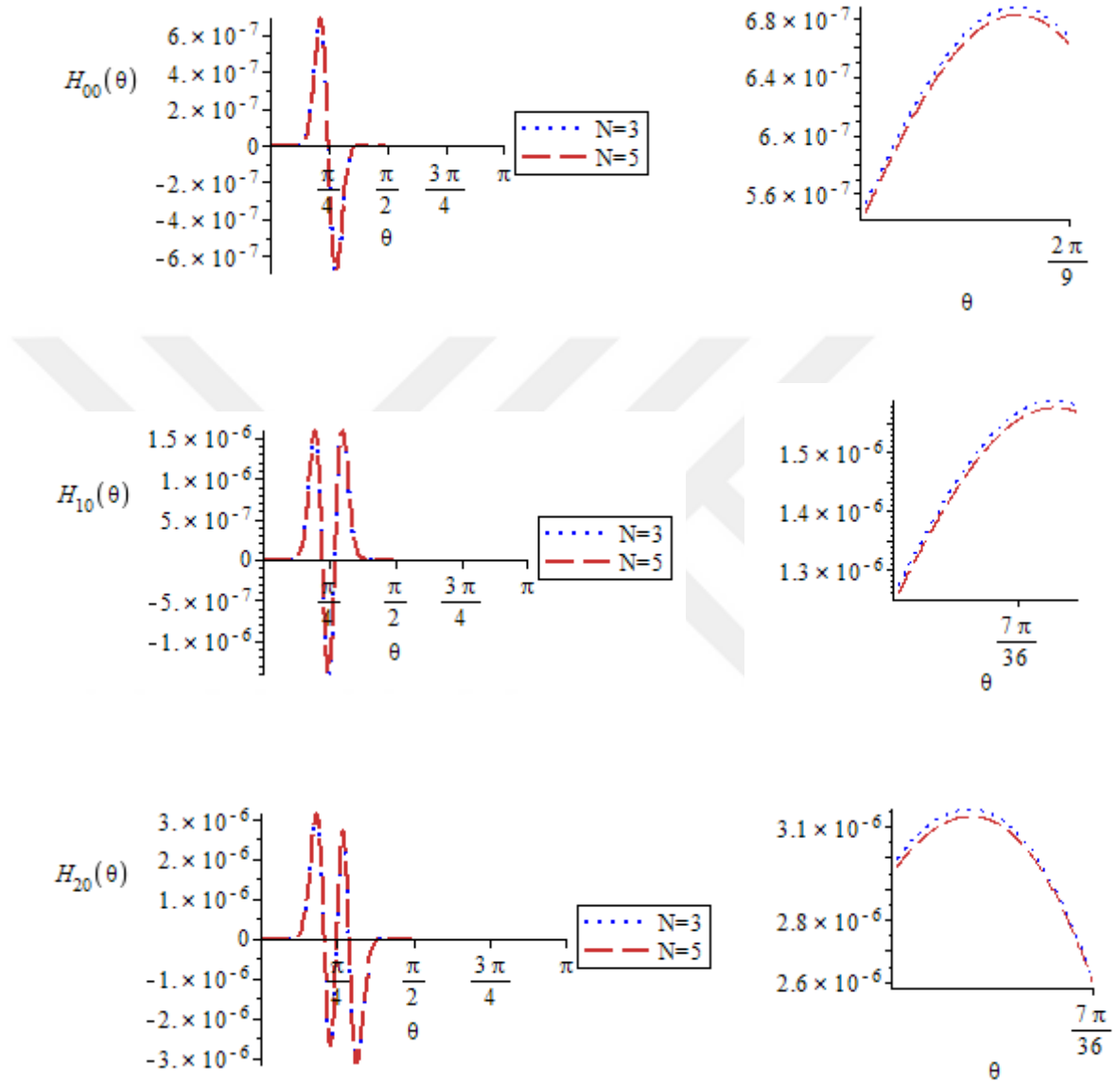
NaH $X^1\Sigma^+$ molekülü için $n=1, 2, 3$ ve $0 \leq l_{N-1} \leq n-1$ durumlarında üç ve beş boyutta radyal dalga fonksiyonlarının grafikleri Şekil 3.6'da verildi.





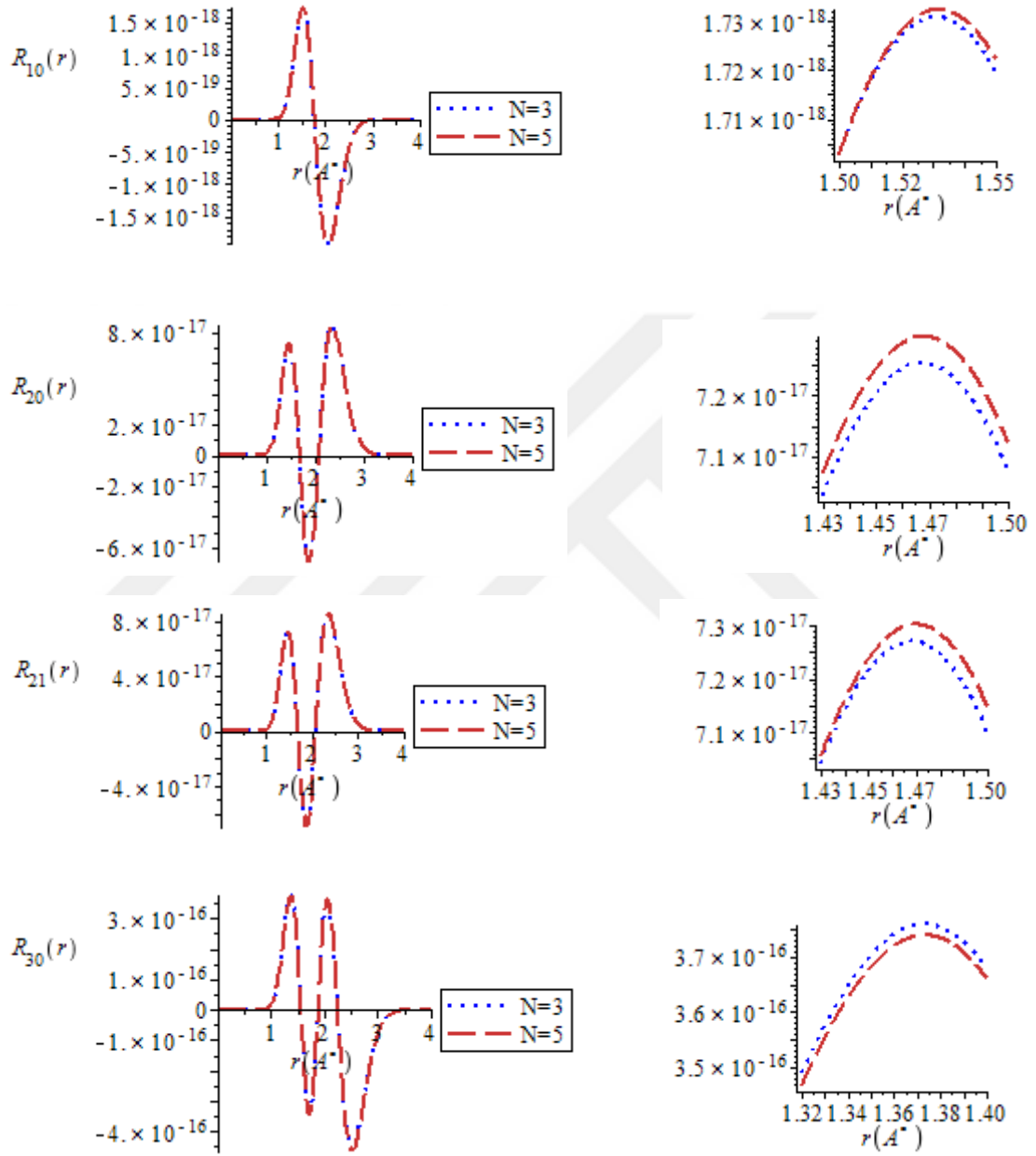
Şekil 3.6. $\text{NaH } X^1\Sigma^+$ molekülü için radyal dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi

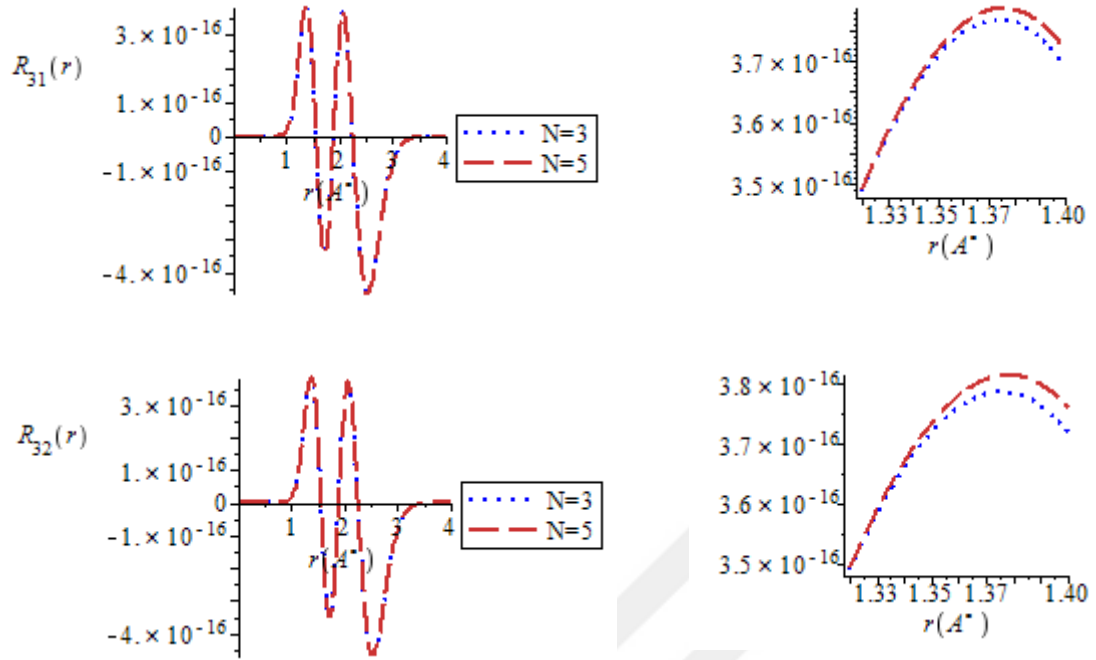
NaH $X^1\Sigma^+$ molekülü için $l_{N-1} = 0,1,2$ durumlarında üç ve beş boyutta açılal dalga fonksiyonlarının grafikleri Şekil 3.7’de verildi.



Şekil 3.7. NaH $X^1\Sigma^+$ molekülü için açılal dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi

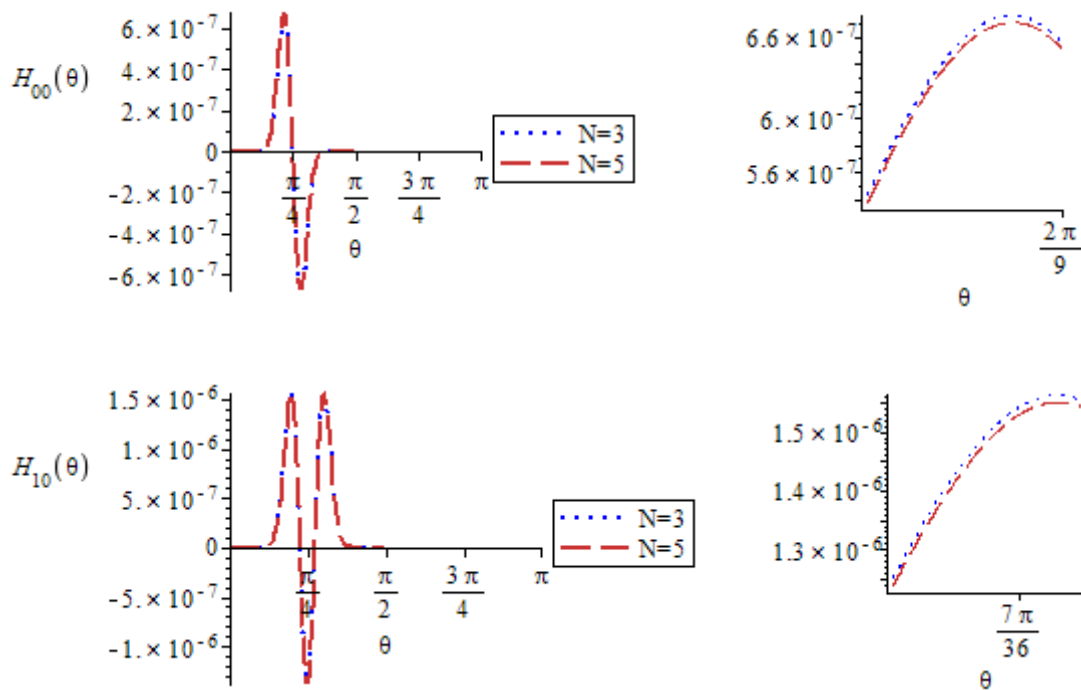
MgH $X^2\Sigma^+$ molekülü için $n=1, 2, 3$ ve $0 \leq l_{N-1} \leq n-1$ durumlarında üç ve beş boyutta radyal dalga fonksiyonlarının grafikleri Şekil 3.8’de verildi.

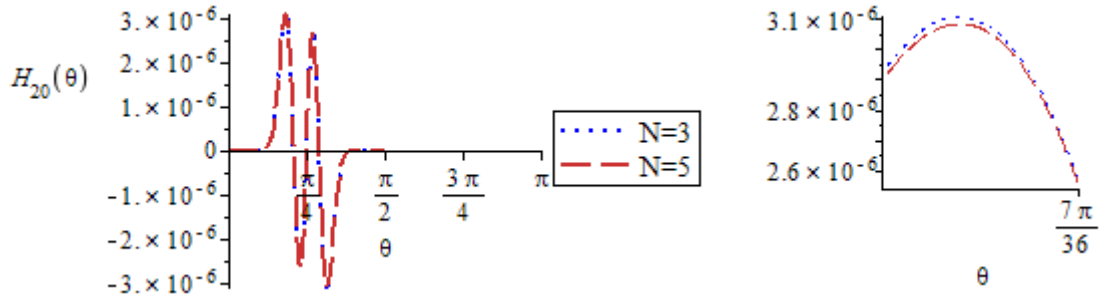




Şekil 3.8. MgH $X^2\Sigma^+$ molekülü için radyal dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi

MgH $X^2\Sigma^+$ molekülü için $l_{N-1} = 0, 1, 2$ durumlarında üç ve beş boyutta açılal dalga fonksiyonlarının grafikleri Şekil 3.9’da verildi.





Şekil 3.9. MgH $X^2\Sigma^+$ molekülünün açısıl dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi

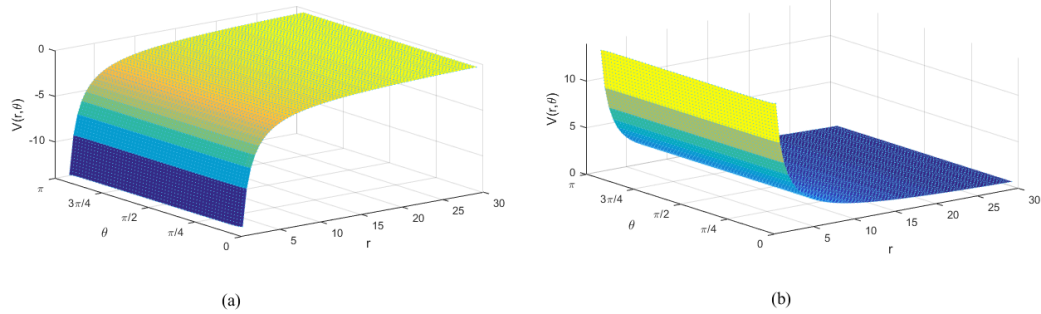
HI $a^3\Sigma^+$, NaH $X^1\Sigma^+$ ve MgH $X^2\Sigma^+$ iki atomlu moleküller için $N = 3$, $N = 5$ boyutta radyal dalga fonksiyonları çakışık gibi görünse de aslında belirli bir r aralığında grafiği incelediğimizde boyut farkı görülmektedir. Aynı n kuantum sayısında l değerinin artması aradaki farkın belirginleşmesine neden olmaktadır. Bu moleküller için $N = 3$ ve $N = 5$ boyutta açısıl dalga fonksiyonlarının grafikleri üst üste gelmiş görünmesine rağmen belirli θ aralığında boyutun etkisi analiz edilebilmektedir.

3.3. Kuantum Hamilton-Jacobi Yöntemiyle Makarov Potansiyeli İçin N-Boyutta Spin Simetri Durumunda Dirac Denkleminin Çözümleri

Yüksek küresel koordinatlarda, Makarov potansiyeli

$$V(r, \theta_{N-1}) = \frac{\eta}{r} + \frac{\beta + \gamma \cos \theta_{N-1}}{r^2 \sin^2 \theta_{N-1}} \quad (3.3.1)$$

şeklinde tanımlanır. Burada η , β ve γ potansiyeli tanımlayan parametrelerdir. Makarov potansiyeli, $\eta < 0$ durumunda çekici bölgededir ve bütün r değerleri için negatiftir; $\eta > 0$ durumunda itici bölgededir ve bütün r değerleri için pozitifdir. Her iki durumda Makarov potansiyelinin yüzey grafiği Şekil 3.13'de verildi. Yüzey grafiği çiziminde potansiyel parametreleri $\eta = 15$, $\beta = 5 \times 10^{-4}$, $\gamma = 20 \times 10^{-4}$ olarak alındı.



Şekil 3.10. (a) Çekici bölgede (b) İtici bölgede Makarov potansiyelinin yüzey grafiği

3.3.1. Yüksek Küresel Koordinatlarda Radyal Enerji Spektrumu ve Dalga Fonksiyonu

Bu bölümde, yüksek küresel koordinatlarda merkezci potansiyel için relativistik radyal dalga denklemi çözülerek enerji özdeğeri ve enerji özdeğerine karşı gelen dalga fonksiyonu bulundu.

Merkezcil potansiyel, (3.1.19) denkleminde yerine yazıldığında

$$\frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial p_r}{\partial r} + \frac{(N-1)}{r} p_r \right] + p_r^2 = -\hbar^2 \kappa^2 - \hbar^2 \frac{v\eta}{r} - \frac{a}{r^2} \quad (3.3.2)$$

şeklinde elde edilir. Burada kullanılan kısaltmalar

$$-\kappa^2 = \frac{E^2 - M^2 c^4 - C_S(E - M c^2)}{\hbar^2 c^2} \quad v = \frac{(E + M c^2 - C_S)}{\hbar^2 c^2} \quad (3.3.3)$$

şeklinde tanımlanır. (3.3.2) denkleminde

$$\tilde{p}_r = p_r + \frac{\hbar}{i} \frac{(N-1)}{2r} \quad (3.3.4)$$

tanımı kullanıldığında

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_r}{\partial r} + \tilde{p}_r^2 - \frac{\hbar^2 (N-1)(3-N)}{4r^2} = -\hbar^2 \kappa^2 - \hbar^2 \frac{v\eta}{r} - \frac{a}{r^2} \quad (3.3.5)$$

elde edilir. $\tilde{p}_r$, $r = 0$ da sonlu kompleks- r düzleminde sabit bir kutup noktasına ve n_r sabit olmayan noktaya sahiptir. Böylece, kuantum momentum fonksiyonu

$$\tilde{p}_r = \frac{\hbar Q'_{n_r}(r)}{i Q_{n_r}(r)} + \frac{b_1}{r} + c \quad (3.3.6)$$

şeklinde yazılır. b_1 'i bulmak için $\tilde{p}_r$, $r = 0$ yakınında Laurent serisine açıldığında

$$\tilde{p}_r = \frac{b_1}{r} + a_0 \quad (3.3.7)$$

olarak yazılır. Denklem (3.3.7), denklem (3.3.5)'de yerine yazılır ve $\frac{1}{r^2}$ li terimlerin katsayısından b_1 elde edilir.

$$b_1 = -\frac{i\hbar}{2} \pm \frac{i\hbar}{2} \sqrt{(N-2)^2 + 4l_{N-1}(l_{N-1} + N - 2)} \quad (3.3.8)$$

(3.3.7) denklemi (3.1.26) denkleminde yerine yazılır ve dalga fonksiyonu $r \rightarrow 0$ 'a giderken sonlu olması gerektiğinden

$$b_1 = -i\hbar \left(l_{N-1} + \frac{N-1}{2} \right) \quad (3.3.9)$$

olarak bulunur.

Denklem (3.3.5) denklem (3.3.6)'da yerine yazılır ve r 'nin büyük değerleri için sabit terimler eşitlenirse

$$c = \pm i\hbar\kappa \quad (3.3.10)$$

elde edilir. Dalga fonksiyonu $r \rightarrow \infty$ limitinde sonlu olması gerektiğinden $c = i\hbar\kappa$ olarak alınır. Denklem (3.3.9) ve elde edilen c değeri denklem (3.3.6)'da yerine yazılırsa

$$\tilde{p}_r = \frac{\hbar Q'_{n_r}(r)}{i Q_{n_r}(r)} + \frac{\hbar \left(l_{N-1} + \frac{N-1}{2} \right)}{i r} + i\hbar\kappa \quad (3.3.11)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.3.11), denklem (3.3.5)'de yerleştirilir ve $x = 2\kappa r$ dönüşümü uygulanırsa

$$x Q''_{n_r}(x) + Q'_{n_r}(x) \left(2 \left(l_{N-1} + \frac{N-1}{2} \right) - x \right) + \left(- \left(l_{N-1} + \frac{N-1}{2} \right) - \frac{v\eta}{2\kappa} \right) Q_{n_r}(x) = 0 \quad (3.3.12)$$

genelleştirilmiş Laguerre [156] diferansiyel denkleminde edilir. Denklem (3.3.12)'den N-boyutta radyal enerji özdeğeri

$$n_r = - \left(l_{N-1} + \frac{N-1}{2} \right) - \frac{v\eta}{2\kappa} \quad (3.3.13)$$

olarak bulunur. Genelleştirilmiş Laguerre diferansiyel denklemin çözümü

$$Q_{n_r}(x) = L_{n_r}^{(2l_{N-1}+N-2)}(2\kappa r) \quad (3.3.14)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.3.11), denklem (3.1.26)'da yerine yazılırsa N-boyutta normalize olmamış radyal dalga fonksiyonu

$$R(r) = C_2 r^{l_{N-1} + \frac{N-1}{2}} e^{-\kappa r} L_{n_r}^{(2l_{N-1}+N-2)}(2\kappa r) \quad (3.3.15)$$

şeklinde elde edilir. Burada, C_2 normalizasyon sabitidir. Normalizasyon sabiti

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 dr = 1 \quad (3.3.16)$$

normalizasyon şartından bulunur. Bu integralin çözümü için Bölüm 3.2.2'de tanımlanan Laguerre polinomunun diklik bağıntısı denklem (3.2.52) kullanılırsa normalizasyon sabiti

$$C_2 = \left[\frac{n_r! (2\kappa)^{2l_{N-1}+N}}{(2l_{N-1}+N-1+2n_r)! \Gamma(2l_{N-1}+N-1+n_r)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.3.17)$$

elde edilir. Denklem (3.3.17), denklem (3.3.15)'de yazılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa N-boyutta normalize edilmiş relativistik radyal dalga fonksiyonu

$$R(r) = \left(\frac{n_r! (2\kappa)^{2l_{N-1}+N}}{(2l_{N-1}+N-1+2n_r)! \Gamma(2l_{N-1}+N-1+n_r)} \right)^{\frac{1}{2}} r^{l_{N-1} + \frac{N-1}{2}} e^{-\kappa r} L_{n_r}^{(2l_{N-1}+N-2)}(2\kappa r) \quad (3.3.18)$$

şeklinde bulunur.

3.3.2. Yüksek Küresel Koordinatlarda Açısal Enerji Spektrumu ve Dalga Fonksiyonu

Bu bölümde, yüksek küresel koordinatlarda merkezci olmayan potansiyel etkisindeki spin-1/2 parçacık için relativistik açısal dalga denkleminin çözümleri elde edilecek.

Merkezcil olmayan potansiyel, (3.1.20) denkleminde yerine yazılırsa

$$\frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial p_{\theta_{N-1}}}{\partial \theta_{N-1}} + (N-2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} p_{\theta_{N-1}} \right] + p_{\theta_{N-1}}^2 = a - \frac{b + \hbar^2 \nu (\beta + \gamma \cos \theta)}{\sin^2 \theta} \quad (3.3.19)$$

elde edilir. Burada, ayırma sabitleri

$$a = \hbar^2 l_{N-1} (l_{N-1} + N - 2) \quad (3.3.20)$$

$$b = \hbar^2 l_{N-2} (l_{N-2} + N - 3) = \hbar^2 m'^2 \quad (3.3.21)$$

şeklindedir. Denklem (3.3.19)'da ,

$$\tilde{p}_{\theta_{N-1}} = p_{\theta_{N-1}} + \frac{\hbar}{2i} (N - 2) \frac{\cos \theta_{N-1}}{\sin \theta_{N-1}} \quad (3.3.22)$$

tanımı ve $l_{N-1} (l_{N-1} + N - 2) = l_{N-1}'^2 - \frac{1}{4} (N - 2)$ kısaltması kullanıldığında

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_{\theta_{N-1}}}{\partial \theta_{N-1}} + \tilde{p}_{\theta_{N-1}}^2 = \hbar^2 \left[l_{N-1}'^2 - \frac{m'^2 + v(\beta + \gamma \cos \theta_{N-1}) - \frac{(N-2)(3-N)}{2} - \frac{(N-2)^2}{4}}{\sin^2 \theta_{N-1}} \right] \quad (3.3.23)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.3.23)'de $z = \cos \theta_{N-1}$ dönüşümü uygulanır ve

$$\chi(z) = \xi(z) - \frac{\hbar}{i} \frac{z}{2(1-z^2)} \quad (3.3.24)$$

$$\tilde{p}_z(z) = -\sqrt{1-z^2} \xi(z) \quad (3.3.25)$$

tanımları kullanılırsa

$$\chi^2(z) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi(z)}{\partial z} = \frac{\hbar^2}{4} \frac{(z^2+2)}{(1-z^2)^2} + \hbar^2 \frac{l_{N-1}'^2}{1-z^2} - \hbar^2 \frac{m'^2 - \frac{(N-2)(3-N)}{2} - \frac{(N-2)^2}{4} + v(\beta + \gamma z)}{(1-z^2)^2} \quad (3.3.26)$$

olarak bulunur. Sonlu kompleks z düzleminde, kuantum momentum fonksiyonu $\chi(z)$, n_θ sabit olmayan nokta, $z = 1$ ve $z = -1$ ' de sabit iki kutup noktasına sahiptir. Böylece, kuantum momentum fonksiyonu

$$\chi(z) = \frac{b_1}{z-1} + \frac{b_1'}{z+1} + \frac{\hbar}{i} \frac{Q'_{n_\theta}(z)}{Q_{n_\theta}(z)} + c \quad (3.3.27)$$

olarak yazılır. b_1 'i bulmak için $z = 1$ noktası yakınında $\chi(z)$ Laurent serisine açıldığında

$$\chi(z) = \frac{b_1}{z-1} + a_0 + \dots \quad (3.3.28)$$

olarak yazılır. Denklem (3.3.28), denklem (3.3.26)'de yerine yazılır ve $\frac{1}{(z-1)^2}$ terimlerin katsayısından

$$b_1 = -\frac{i\hbar}{2} \pm \frac{i\hbar}{2} \sqrt{\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + v(\beta + \gamma)} \quad (3.3.29)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.3.29), denklem (3.1.28)'de yerine yazılıp gerekli işlemler yapılırsa açılal dalga fonksiyonu

$$H(z) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int \xi(z) dz\right) \quad (3.3.30)$$

olarak bulunur. Denklem (3.3.24), denklem (3.3.28) ve denklem (3.3.29), denklem (3.3.30)'da yerine yazılarak dalga fonksiyonunun sınır şartlarında sonlu olması gerektiğinden b_1

$$b_1 = -\frac{i\hbar}{2} - \frac{i\hbar}{2} \sqrt{\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + v(\beta + \gamma)} \quad (3.3.31)$$

şekinde alınır.

b'_1 bulmak için $\chi(z)$, $z = -1$ noktası yakınında Laurent serisine açılırsa

$$\chi(z) = \frac{b_1}{z+1} + a_0 + \dots \quad (3.3.32)$$

şeklinde yazılır. Denklem (3.3.32), denklem (3.3.26)'de yerine yazılır ve $\frac{1}{(z+1)^2}$ terimlerin katsayısından

$$b'_1 = -\frac{i\hbar}{2} \pm \frac{i\hbar}{2} \sqrt{\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + v(\beta - \gamma)} \quad (3.3.33)$$

şeklinde elde edilir. Dalga fonksiyonunu $H(z)$, $\theta = \pi$ ($z = -1$)'de sınır şartını sağlaması için

$$b'_1 = -\frac{i\hbar}{2} - \frac{i\hbar}{2} \sqrt{\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + v(\beta - \gamma)} \quad (3.3.34)$$

olarak alınır. Denklem (3.3.27), denklem (3.3.26)'de yerine yazılır ve her iki taraftaki eşitlikten $c = 0$ bulunur. Denklem (3.3.31), denklem (3.3.34) ve bulunan c değeri denklem (3.3.27)'de yerleştirildiğinde

$$\chi(z) = \frac{\hbar}{2i} \frac{1+p}{z-1} + \frac{\hbar}{2i} \frac{1+q}{z+1} + \frac{\hbar}{i} \frac{Q'_{n_\theta}(z)}{Q_{n_\theta}(z)} \quad (3.3.35)$$

şeklinde elde edilir. Burada, işlem kolaylığı için

$$p = \sqrt{\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + v(\beta + \gamma)} \quad (3.3.36)$$

$$q = \sqrt{\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + v(\beta - \gamma)} \quad (3.3.37)$$

olarak alınır. Denklem (3.3.35), denklem (3.3.26)'de yazılır ve z^2 'li terim katsayıları eşitlenerek N-boyutta açısai enerji özdeğeri

$$n_{\theta} = l_{N-1} - \frac{(3-N)}{2} - \frac{p}{2} - \frac{q}{2} \quad (3.3.38)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.3.35) ve denklem (3.3.38), denklem (3.3.26)'da yerleştirilir, gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$(1 - z^2)Q''_{n_{\theta}}(z) + Q'_{n_{\theta}}(z)(q - p - (q + p + 2)z) + Q_{n_{\theta}}(z)(n_{\theta}(n_{\theta} + q + p + 1)) = 0 \quad (3.3.39)$$

elde edilir. Denklem (3.3.39), Jacobi diferansiyel [156] denklemidir. Bundan dolayı, denklem (3.3.39)'un çözümü Jacobi polinomu

$$Q_{n_{\theta}}(z) = P_{n_{\theta}}^{(p,q)}(z) \quad (3.3.40)$$

olarak bulunur.

Denklem (3.3.35), denklem (3.3.30)'da yerine yazılır ve denklem (3.3.40) kullanılırsa matematiksel düzenlemeler sonrasında N-boyutta normalize olmamış açısai dalga fonksiyonu

$$H(z) = C_2(1 - z)^{\frac{(p+1)}{2}}(1 + z)^{\frac{(q+1)}{2}}(1 - z^2)^{-\frac{1}{4}}P_{n_{\theta}}^{(p,q)}(z) \quad (3.3.41)$$

şeklinde elde edilir. Burada, C_2 normalizasyon sabitidir. Normalizasyon sabiti

$$\int_0^{\pi} H(\theta_{N-1})d\theta_{N-1} = 1 \quad (3.3.42)$$

şartından bulunur. Denklem (3.3.41), denklem (3.3.42)'de yerine yazılır ve integralin çözümü için Bölüm 3.2.3'de verilen Jacobi polinomunun diklik bağıntısı denklem (3.2.82) kullanılarak normalizasyon sabiti

$$C_2 = \left[\frac{n_{\theta}!(2n_{\theta}+p+q+1)\Gamma(n_{\theta}+p+q+1)}{2^{p+q+1}\Gamma(n_{\theta}+p+1)\Gamma(n_{\theta}+q+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.3.43)$$

elde edilir. Denklem (3.3.43), denklem (3.3.41)'de yazılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa N-boyutta normalize edilmiş relativistik açısai dalga fonksiyonu

$$H(\theta_{N-1}) = \left[\frac{n_\theta!(2n_\theta+p+q+1)\Gamma(n_\theta+p+q+1)}{2^{p+q+1}\Gamma(n_\theta+q+1)\Gamma(n_\theta+p+1)} \right]^{\frac{1}{2}} (1 - \cos\theta_{N-1})^{\frac{p}{2}} (1 + \cos\theta_{N-1})^{\frac{q}{2}} \\ \times (\sin\theta_{N-1})^{\frac{1}{2}} P_{n_\theta}^{(p,q)}(\cos\theta_{N-1}) \quad (3.3.44)$$

şeklinde elde edilir.

3.3.3. N-Boyutta Makarov Potansiyeli İçin Spin Simetri Durumunda Relativistik Enerji Spektrumu

Bu bölümde, 3.3.1 ve 3.3.2 bölümlerinde elde edilen radyal ve açısal enerji özdeğerleri kullanılarak yüksek küresel koordinatlarda Makarov potansiyeli için spin simetri durumunda relativistik enerji spektrumu bulunacak.

Denklem (3.3.13) ve denklem (3.3.39)

$$n_r + n_\theta = - \left(l_{N-1} + \frac{N-1}{2} \right) - \frac{v\eta}{2\kappa} + l_{N-1} - \frac{(3-N)}{2} - \frac{p}{2} - \frac{q}{2} \quad (3.3.45)$$

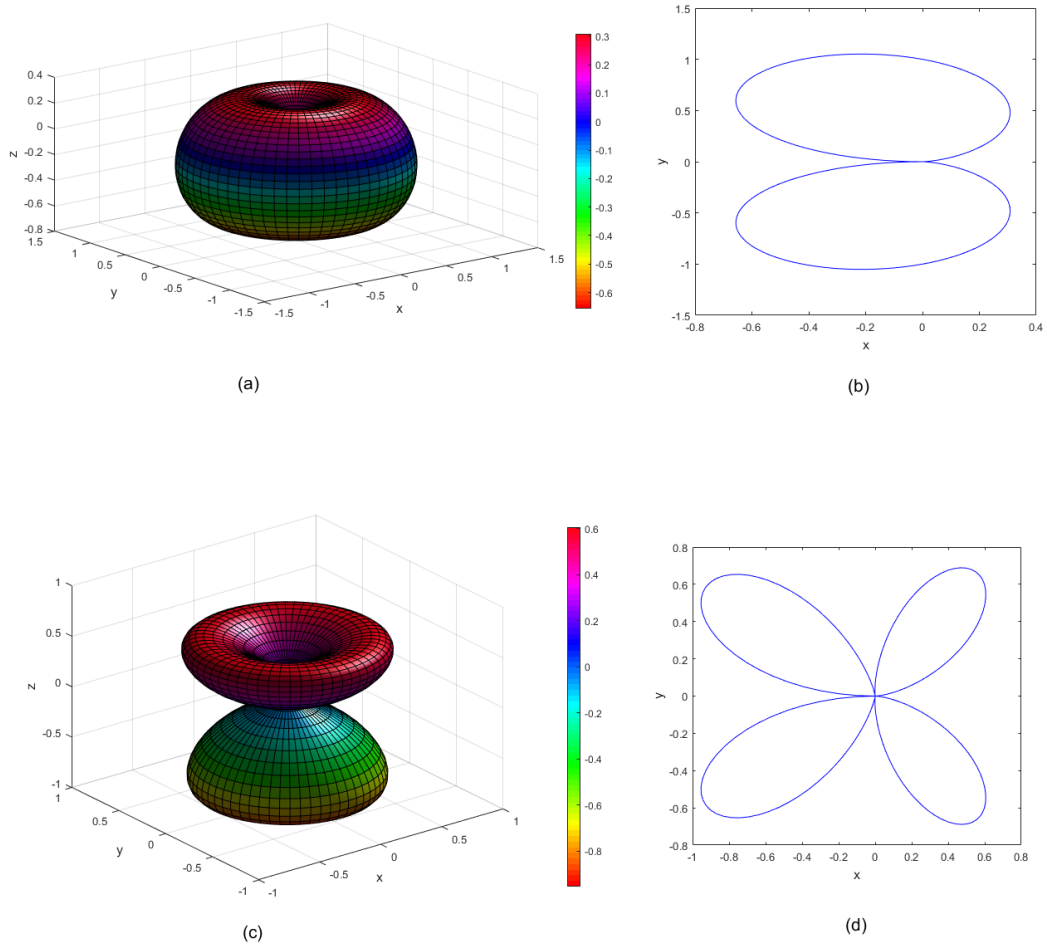
olarak yazılır. Denklem (3.3.3), denklem (3.3.45)'de yerine yazılır ve gerekli işlemler yapılırsa N-boyutta Makarov potansiyeli için spin simetri durumunda relativistik enerji spektrumu

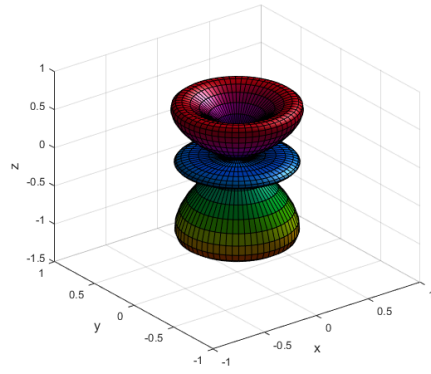
$$-\frac{\mu^2}{\hbar^2 c^2} \frac{E+Mc^2-C_s}{E-Mc^2} = 4[(n_\theta + n_r + 1) \\ + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + \frac{E+Mc^2-C_s}{\hbar^2 c^2} \beta + \sqrt{\left(\frac{(N-3)^2}{4} + m'^2 + \frac{E+Mc^2-C_s}{\hbar^2 c^2} \beta \right)^2 - \gamma^2 \left(\frac{E+Mc^2-C_s}{\hbar^2 c^2} \right)^2} \right)^{\frac{1}{2}}] \quad (3.3.46)$$

şeklinde elde edilir. Bu relativistik enerji spektrumu, $N = 3$ için $C_s = 0$ durumunda Touloum ve arkadaşları [61] tarafından elde edilen enerji spektrumuna indirgenmektedir. Burada $C_s = 0$ durumunda ve $c \rightarrow \infty$ limitinde denklem (3.3.46), N-boyutta non-relativistik enerji spektrumuna indirgenir ve bu sonuç Durmuş ve Özfidan [43]'in çalışmasını sağlamaktadır.

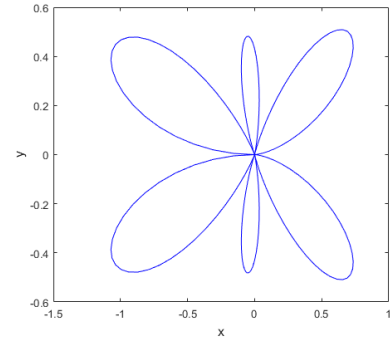
3.3.4. Küresel ve Kutupsal Koordinatlarda Açılal Dalga Fonksiyonlarının Olasılık Dağılımları

Bu bölümde, Makarov potansiyeli etkisindeki spin-1/2 parçacık için $N = 3$ ve $N = 5$ boyutta küresel ve kutupsal koordinatlarda açılal dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımlarının grafikleri çizildi. Grafik çiziminde, denklem (3.3.3)'de tanımlanan $\nu = 1$ değeri için denklem (3.3.36), denklem (3.3.37) düzenlenerek denklem (3.3.44)'de yerine yazıldı. Merkezci olmayan potansiyeldeki parametreler $\beta = 0.75$, $\gamma = 0.25$ alınarak $N = 3$ boyut için Şekil 3.14 ve $N = 5$ boyut için Şekil 3.15'deki grafikler elde edildi. Grafikler incelendiğinde beş boyutlu sistemdeki olasılık dağılımlarının üç boyutlu sistemden farklı sonuçlar verdiği görülmektedir. Bu dağılımlarda boyut artışı küresel boğum yüzey çapının azalmasına ve açılal dalga fonksiyonlarında genliğin artmasına neden olmuştur.

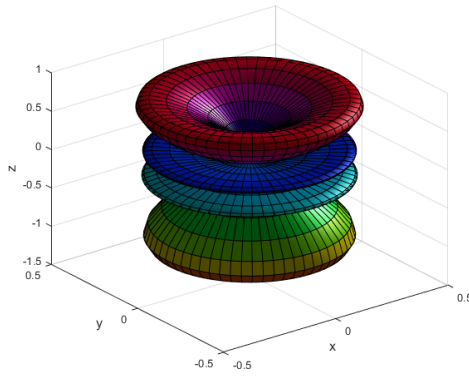




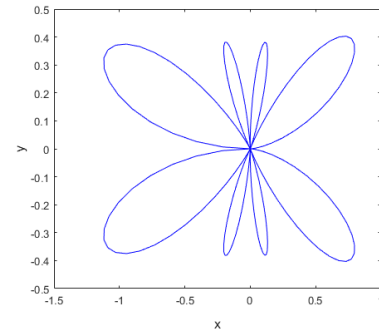
(e)



(f)

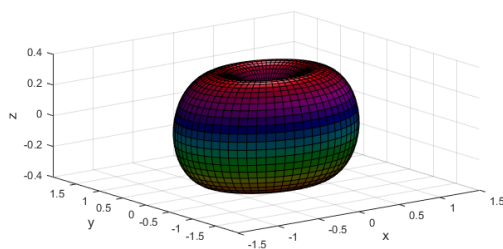


(g)

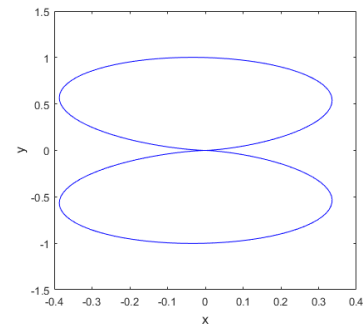


(h)

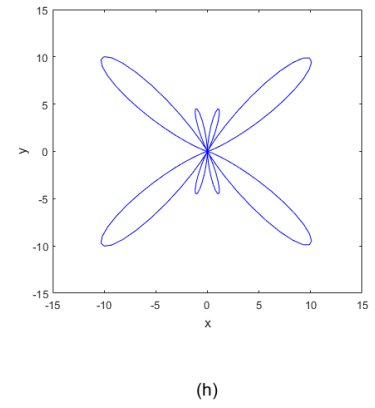
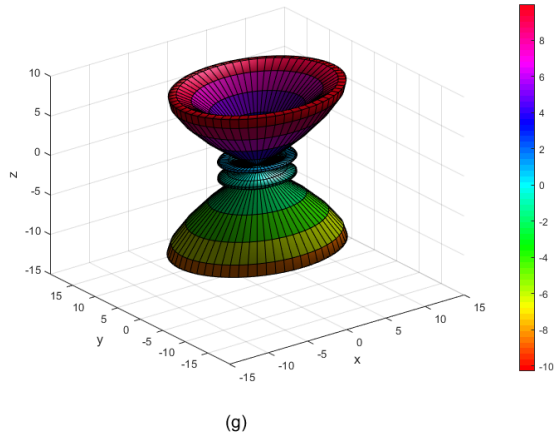
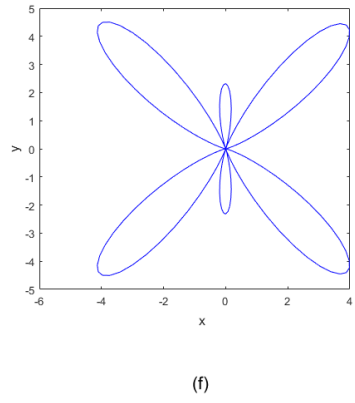
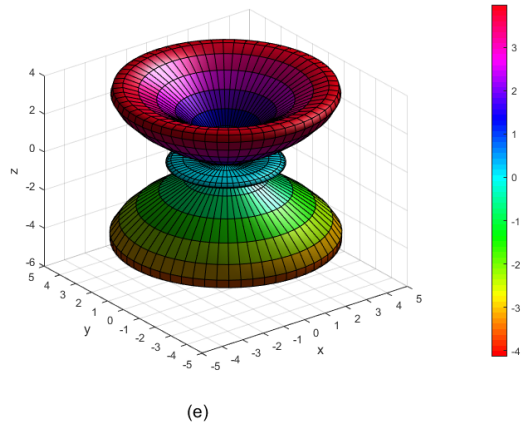
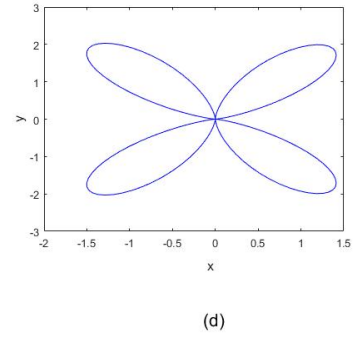
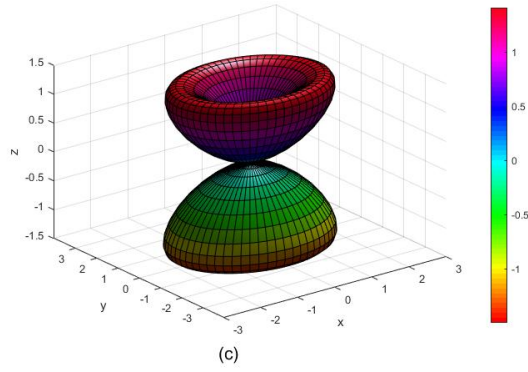
Şekil 3.11. (a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 3$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısıl dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları



(a)



(b)



Şekil 3.12. (a) ve (b) $n_\theta = 0$, (c) ve (d) $n_\theta = 1$, (e) ve (f) $n_\theta = 2$, (g) ve (h) $n_\theta = 3$ durumunda $N = 5$ için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısıl dalga fonksiyonlarının olasılık dağılımları

4. BÖLÜM

TARTIŞMA-SONUÇ ve ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, küresel simetrik olmayan kuantum sistemler ele alındı. Yüksek küresel koordinatlarda, Hartmann, merkezci olmayan Morse ve merkezci olmayan Manning-Rosen potansiyel alanlarında spin-0 parçacıkların etkileşimleri asimptotik iterasyon metodu ile araştırıldı. Diğer taraftan, N-boyutta spin-1/2 parçacığın relativistik davranışlarına double ring-shaped Kratzer ve Makarov potansiyelinin etkisi kuantum Hamilton-Jacobi formalizmiyle incelendi. İlk olarak, asimptotik iterasyon metodu ve kuantum Hamilton-Jacobi yöntemi anlatıldı. Yüksek küresel koordinatlarda gradyent operatörünün genelleştirilmesi verildi. Daha sonra, genelleştirilmiş açısal momentum operatörleri tanımlanarak N-boyutta Laplasyen elde edildi. Aynı zamanda, genelleştirilmiş açısal momentum operatörlerinin özdeğerleri ve özfonksiyonları Louck [10-12] ve Chatterjee [141]'nin çalışmaları temel alınarak bulundu. Bu çalışmanın ikinci bölümünde, yüksek küresel koordinatlarda skaler ve vektör potansiyellerinin eşit olduğu durumda Klein-Gordon denklemi elde edildi. Daha sonra, N-boyutta Hartmann potansiyeli için relativistik enerji spektrumu ve dalga fonksiyonu bulundu. Yüksek küresel koordinatlarda relativistik durumda Hartmann potansiyeli için tekrarlama bağıntıları elde edilerek radyal beklenen değerler ifade edildi. N-boyutlu sistemde boyutun etkisini analiz etmek amacıyla Hartmann potansiyeli alanındaki hidrojen molekülü için relativistik enerjinin değerleri iki, üç ve dört boyutta hesaplandı. Teorik ve deneysel olarak geniş ölçüde çalışılan taban durumunda hidrojen molekülü hesaplamaları kontrol etmek için kullanılan en temel sistemlerden biridir. Bundan dolayı, bu molekül için küresel ve kutupsal koordinatlarda açısal olasılık dağılımlarında boyutun etkisi araştırıldı. Bu araştırmanın sonucunda, $n = 1$ ve farklı n_θ durumlarında daha yüksek boyutların açısal dalga fonksiyonlarının genliğinde artışa neden olduğu belirlendi. Bunun anlamı, dört ve beş boyutlu sistemlerin $n_\theta = 2$ ve $n_\theta = 3$ için hidrojen molekülünün

açısallık olasılık dağılımlarında üç boyutlu sistemden önemli ölçüde farklı sonuçlar vermesidir. Diğer taraftan, yüksek küresel koordinatlarda merkezci olmayan Morse potansiyeli için $l \neq 0$ durumunda Klein-Gordon denkleminde Pekeris yaklaşımı kullanılarak çözümler araştırıldı. $Ca_2 X^1\Sigma^+$, $Sr_2 X^1\Sigma^+$, $Sr_2 A^1\Sigma^+$ ve $MgCaX^1\Sigma^+$ toprak alkali metal iki atomlu moleküllerin etkisinde merkezci olmayan Morse potansiyelinin yüzey grafikleri çizilerek bu moleküllere açısallık katkının etkisi kapsamlı olarak incelendi. Sonuç olarak, merkezci olmayan potansiyeldeki parametrelerin farklı değerler alması durumunda açının potansiyelin yüzey grafiğindeki etkisi gösterildi. Toprak alkali metal grubu iki atomlu molekülleri için elde edilen sonuçlardan Pekeris yaklaşımının atomlar arasındaki denge uzaklığında daha geçerli olduğu gözlemlendi. Bu moleküllerin relativistik titreşim frekansları hesaplandı. Teorik olarak elde edilen bu sonuçlar literatürdeki deneysel RKR değerleriyle tutarlılık gösterdi. RKR sonuçlarına en yakın değerlerle yaklaşan uyarılmış durumda strontiyum molekülüdür. İki atomlu moleküllerin titreşim hareketi molekül fiziğinde önemli olduğundan dolayı elde edilen sonuçlar bu alanda çalışan araştırmacılara katkı sağlayacaktır. İkinci bölümde son olarak ele alınan merkezci olmayan Manning-Rosen potansiyelidir. Bu potansiyel için yüksek küresel koordinatlarda çözümler Greene-Aldrich yaklaşıklığı kullanılarak asimptotik iterasyon yöntemiyle elde edildi. Hulthen potansiyeli, Manning-Rosen potansiyelinin özel durumudur. Bundan dolayı, Hulthen potansiyeli için N-boyutlu uzayda açısallık momentum katkılı yaklaşık çözümlerde bulundu. Manning-Rosen potansiyeli için elde edilen N boyutta relativistik enerji değeri $c \rightarrow \infty$ limitinde non-relativistik enerjiye indirgenerek 2p, 3p, 3d, 4p, 4d, 4f, 5p ve 5d durumlarında enerjinin atomik birimde değerleri hesaplandı. İki, üç ve dört boyut için bu enerji değerleri literatürdeki çalışmalarda farklı metodlarla elde edilen sonuçlarla uyum sağlamaktadır. Manning-Rosen potansiyeli için $\langle r^{-2} \rangle$ beklenen değeri Hellmann-Feynmann teoremiyle elde edildi ve bu beklenen değer farklı kuantum durumları için nümerik değerleri hesaplandı. Beklenen değerler, fiziksel nicelikleri hesaplarken kullanılmaktadır. Son yıllarda, kuantum mekanik sistemlerin bilgi teorisi üzerine yapılan çalışmalar artış göstermektedir. Bu sistem birçok teknolojik gelişmeler için temel oluşturmaktadır. Kuantum sisteminde özellikle Shannon entropisi ve Fisher bilgisi, her bir mesajı içeren bilginin beklenen değeri olarak görülür. Bu nedenle, bu çalışmada elde edilen beklenen değerler entropi hesabında kullanılabilir. Yüksek küresel koordinatlarda Klein-Gordon denkleminin çözümü için asimptotik iterasyon yöntemi etkin bir hesaplama metodudur. Aynı zamanda, merkezci olmayan

potansiyel etkisindeki görelî kuantum sistemini doğru olarak analiz etmemizi sağlayan sistematik bir yöntemdir. Tez çalışmasının üçüncü bölümünde ilk olarak kuantum Hamilton-Jacobi yönteminde incelenen N -boyutta spin simetri durumunda Dirac denklemleri elde edildi. Yüksek küresel koordinatlarda double ring-shaped Kratzer potansiyeli etkisindeki spin-1/2 parçacık için çözümler analitik olarak araştırıldı. Bu potansiyel için N -boyutta spin simetri durumunda enerji spektrumu $N = 3$ boyutta merkezî olmayan parametrelerinin farklı değerler alması durumunda spin-1/2 parçacık için relativistik dönme-titreşim enerji değerleri hesaplandı. Ayrıca, $C_s = 0$ için N -boyutta skaler ve vektör potansiyellerinin eşit olduğu durumda relativistik enerji spektrumu elde edildi. $N = 3$ ve $N = 5$ alınarak $\text{HI } a^3\Sigma^+$, $\text{NaH } X^1\Sigma^+$, $\text{MgH } X^2\Sigma^+$ molekülleri için relativistik enerji değerleri hesaplandı. Bu iki atomlu moleküller için $l_{N-1} = 0,1,2$ durumlarında radyal ve açısal dalga fonksiyonlarında boyutun etkisi gösterildi. N -boyutta Makarov potansiyeli için spin simetri durumunda Dirac denkleminin çözümleri kuantum Hamilton-Jacobi yöntemiyle elde edildi. Üzerinde çalıştığımız bu potansiyel için $N = 3, N = 5$ boyutta açısal dalga fonksiyonunun küresel ve kutupsal koordinatlarda olasılık dağılımlarının grafikleri çizildi. Olasılık dağılımları atom ve molekül, kuantum gibi fiziğin birçok alanında ilgilenilen bir konudur. Bu nedenle, Hartmann ve Makarov potansiyel alanlarında hareket eden spin-0 ve spin-1/2 parçacıklar için farklı boyutlarda olasılık dağılımlarının araştırılması önem arz etmektedir. İlk defa bu tez çalışmasında, yüksek küresel koordinatlarda tam olarak çözülebilen potansiyeller kuantum Hamilton-Jacobi yöntemiyle ele alındı. Bundan dolayı, bu çalışmamız N -boyutlu uzayda kuantum Hamilton-Jacobi yöntemi ile farklı potansiyel alanlarını incelemek için literatürde temel oluşturacaktır.

KAYNAKLAR

1. Schiff, L.I., 1968. Quantum Mechanics. McGraw-Hill, Tokyo, 544 pp.
2. Klein, O., 1926. Quantentheorie und fünfdimensionale relativitätstheorie. **Zeitschrift für Physik**, **37** (12): 895-906.
3. Fock, V.A., 1926. Zur Schrödingerschen wellenmechanik. **Zeitschrift für Physik**, **38** (3): 242-250.
4. Gordon, W., 1926. Der Comptoneffekt nach der Schrödingerschen theorie. **Zeitschrift für Physik**, **40** (2): 117-133.
5. Dirac, P.A.M., 1928. The quantum theory of the electron. **Proceedings of the Royal Society A**, **117** (778): 610-624.
6. Petiau, G., 1936. Contribution a la theori des equations d'ondes corpusculaires **Academie Royale De Belgique: Classe Des Sciences Memory Collections**, **16**(2): 1-115.
7. Duffin, R., J., 1938. On the characteristic matrices of covariant systems. **Physical Review**, **54** (12): 1114.
8. Kemmer, N., 1938. Quantum theory of Einstein-Bose particles and nuclear interaction. **Proceedings of the Royal Society A**, **166** (924): 127-153.
9. Kemmer, N., 1939. The particle aspect of meson theory. **Proceedings of the Royal Society A**, **173** (952): 91-116.
10. Louck, J.D., Shaffer W.H., 1960. Generalized orbital angular momentum and the n-fold degenerate quantum mechanical oscillator : Part I the twofold degenerate oscillator. **Journal of Molecular Spectroscopy**, **4** (1-6): 285-297.
11. Louck, J.D., 1960. Generalized orbital angular momentum and the n-fold degenerate quantum mechanical oscillator : Part II the n-fold degenerate oscillator. **Journal of Molecular Spectroscopy**, **4** (1-6): 298-333.
12. Louck, J.D., 1960. Generalized orbital angular momentum and the n-fold degenerate quantum mechanical oscillator : Part III radial integrals. **Journal of Molecular Spectroscopy**, **4** (1-6): 334-341.
13. Appel, P., Kampé de Fériet, J., 1926. Fonctions Hypergéométrique et Hypersphériques Polynomes d'Hermite. Gauthier Villars, Paris, 434 pp.
14. Sommerfeld, A., 1949. Partial Differential Equation in Physics. Academic Press, New York, 335 pp.

15. Fock, V., 1935. Zur theorie des wasserstoffatoms. **Zeitschrift für Physik**, **98** (3-4): 145-154.
16. Bargmann, V., 1936. Zur theorie des wasserstoffatoms bemerkungen zur gleichamigen Arbeit von V. Foch. **Zeitschrift für Physik**, **98** (7-8): 576-582.
17. de Broglie, L., Bohm, D., Hillion, P., Halbwachs, F., Takabayasi, T., Vigier, J.P., 1963. Rotator model of elementary particles considered as relativistic extended structures in Minkowski space. **Physical Review**, **129** (1): 438-450.
18. Granzow, K., 1964. N-dimensional total orbital angular-momentum operator II explicit representations. **Journal of Mathematical Physics**, **5** (10): 1474-1477.
19. Bergmann, D., Frishmann, Y., 1965. A relation between the hydrogen atom and multidimensional harmonic oscillators. **Journal of Mathematical Physics**, **6** (12) : 1855-1856.
20. Dong, S.H., 2011. Wave Equations in Higher Dimensions, Springer, 295 pp.
21. Hermann, H., 1983. Influence of directed chemical bonding on the structure of metallic glasses. **Physica Status Solidi (b)**, **117** (1): 185-195.
22. Hermann, H., 1981. Non-central potential for modelling the structure of metallic glasses. **Physica Status Solidi (b)**, **104** (1): K39-K43.
23. Denisov, V.Y., Pilipenko, N.A., 2007. Interaction of two deformed, arbitrarily oriented nuclei. **Physical Review C**, **76** (1): 014602-18.
24. Murat, M., Kontar, Y., 2006. Elasticity of a system with noncentral potentials. **Physical Review E**, **74** (3): 031124-12.
25. Kerimov, G.A., 2007. Quantum scattering from the Coulomb potential plus an angle-dependent potential: a group-theoretical study. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, **40** (26): 7297-7308.
26. Bharali, A., 2013. Systematic search of exactly solvable ring-shaped potential using the transformation method. **Physica Scripta**, **88** (3): 035009-7.
27. Hartmann, H., 1972. The motion of a body in a ring-shaped potential. **Theoretica Chimica Acta**, **24** (2-3): 201-206.
28. Chen, C.Y., Liu, C.L., Sun, D.S., 2002. The normalized wavefunctions of the Hartmann potential and explicit expressions for their radial average values. **Physics Letters A**, **305** (6): 341-348.
29. Sökmen, I., 1986. Exact path integral solution of the ring-shaped potential. **Physics Letters A**, **115** (6): 249-252.

30. Mandal, B.P., 2000. Path integral solution of noncentral potential. **International Journal of Modern Physics A**, **15** (8): 1225-1234.
31. Blado, G.G., 1996. Supersymmetric treatment of a particle subjected to a ring-shaped potential. **International Journal of Quantum Chemistry**, **58** (5): 431-439.
32. Qian, S.W., Huang, B.W., Wang, D.Y., Gu, Z.Y., 2002. Supersymmetry and shape invariance of Hartmann potential and ring-shaped oscillator in the r and θ dimensions of spherical polar coordinates. **Communications in Theoretical Physics**, **38** (2): 139-142.
33. Chen, G., 2004. The supersymmetric WKB approximation for Hartmann potential. **Chinese Physics**, **13** (2): 144- 146.
34. Chetouani, L., Guechi, L., Hamman, T.F., 1992. Algebraic treatment of a general noncentral potential. **Journal of Mathematical Physics**, **33** (10): 3410-3418.
35. Vaidya, A.N., Boschi-Filho, H., 1990. Algebraic calculation of the Green's function of the Hartmann potential. **Journal of Mathematical Physics**, **31** (8): 1951-1954.
36. Kibler, M., Negadi, T., 1984. On the use of nonbijective canonical transformations in chemical physics. **Croatica Chemica Acta**, **57** (6): 1509-1523.
37. Kibler, M., Winternitz, P., 1987. Dynamical invariance algebra of the Hartmann potential. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **20** (13): 4097-4108.
38. Granovskii, Y.I., Zhedanov, A.S., Lutzenko, I.M., 1991. Quadratic algebra as a hidden symmetry of the Hartmann potential. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **24** (16): 3887-3894.
39. Zhedanov, A.S., 1993. Hidden symmetry algebra and overlap coefficients for two ring-shaped potentials. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **26** (18): 4633-4641.
40. Chen, C.Y., Sun, D.S., Lu, F.L., 2006. The bound continuous transition matrix elements for the Hartmann potential. **Physics Letters A**, **348** (3): 153-159.
41. Chen, C.Y., 2005. Exact solutions of the Dirac equation with scalar and vector Hartmann potentials. **Physics Letters A**, **339** (3-5): 283-287.
42. Chen, C.Y., Sun, D.S., Lu, F.L., 2006. The relativistic bound states of the Hartmann potentials. **Physica Scripta**, **74** (4): 405-409.
43. Durmuş, A., Özfıdan, A., 2014. Analytical solutions of a generalized non-central potential in N dimensions. **Journal of Mathematical Physics**, **55** (10): 102105-13.

44. Hautot, A., 1973. Exact motion in noncentral electric fields. **Journal of Mathematical Physics**, **14** (10): 1320-1327.
45. Rajabi, A.A., Hamzavi, M., 2013. A new Coulomb ring-shaped potential via generalized parametric Nikiforov-Uvarov method. **Journal of Theoretical and Applied Physics**, **7** (7): 17-5.
46. Dutra, A., Hott, M., 2006. Dirac equation exact solutions for generalized asymmetrical Hartmann potentials. **Physics Letters A**, **356** (3): 215-219.
47. Falaye, B.J., 2012. The Klein-Gordon equation with ring-shaped potentials: Asymptotic iteration method. **Journal of Mathematical Physics**, **53** (8): 082107-11.
48. Falaye, B.J., 2012. Exact solutions of the Klein-Gordon equation for spherically asymmetrical singular oscillator. **Few-Body Systems**, **53** (3-4): 563-571.
49. Hassanabadi, H., Kamali, M., 2013. The spin-one Duffin-Kemmer-Petiau equation in the presence of pseudo-harmonic oscillatory ring-shaped potential. **Chinese Physics B**, **22** (10): 100304-5.
50. Zhang, M.C., Fu, G.H., 2011. Pseudospin symmetry for a new oscillatory ring-shaped non-central potential. **Journal of Mathematical Physics**, **52** (5): 053518-7.
51. Makarov, A.A., Smorodinsky, J.A., Valiev, K., Winternitz, P., 1967. A systematic search for nonrelativistic systems with dynamical symmetries. **Nuovo Cimento A**, **52** (4): 1061-1084.
52. Yaşuk, F., Berkdemir, C., Berkdemir, A., 2005. Exact solutions of the Schrödinger with noncentral potential by Nikiforov-Uvarov method. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **38** (29): 6579-6586.
53. Ikdhair, S.M., Sever, R., 2007. Polynomial solution of noncentral potentials. **International Journal of Theoretical Physics**, **46** (10): 2384-2395.
54. Gönül, B., Zorba, İ., 2000. Supersymmetric solutions of noncentral potentials. **Physics Letters A**, **269** (2-3): 83-88.
55. Arda, A., Sever, R., 2012. Non-central potentials, exact solutions and Laplace transform approach. **Journal of Mathematical Chemistry**, **50** (6): 1484-1494.
56. Bayrak, O., Karakoç, M., Boztosun, İ., 2008. Analytical solution of the Schrödinger equation for Makarov potential with any l angular momentum. **International Journal of Theoretical Physics**, **47** (11): 3005-3014.

57. Zhang, M.C., Wang, Z.B., 2007. Exact solutions of the Klein-Gordon equation with Makarov potential and a recurrence relation. **Chinese Physics B**, **16** (7): 1863-1867.
58. Zhang, M.C., Wang, Z.B., 2006. Bound state solutions of the Dirac equation with Makarov potentials. **Acta Physica Sinica**, **55** (12): 6229-6233.
59. Yaşuk, F., Durmuş, A., Boztosun, İ., 2006. Exact analytical solution to the relativistic Klein-Gordon equation with noncentral equal scalar and vector potentials. **Journal of Mathematical Physics**, **47** (8): 082302-8.
60. Eshghi, M., 2012. Makarov potential in relativistic equation via Laplace transformation approach. **Canadian Journal of Physics**, **91** (1): 71-74.
61. Touloum, S., Gharbi, A., Bouda, A., 2017. Exact solutions of the Dirac equation for Makarov potential by means of the quantum-Hamilton Jacobi formalism. **Indian Journal of Physics**, **91** (5): 521-526.
62. Kratzer, A., 1920. Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe. **Zeitschrift für Physik**, **3** (5): 289-307.
63. Durmuş, A., Yasuk, F., 2007. Relativistic and nonrelativistic solutions for diatomic molecules in the presence of double ring-shaped Kratzer potential. **The Journal of Chemical Physics**, **126** (7): 074108-10.
64. Saad, N., Hall, R.L., Ciftci, H., 2008. The Klein-Gordon equation with the Kratzer potential in d- dimensions. **Central European Journal of Physics**, **6** (3): 717-729.
65. Cheng, Y.F., Dai, T.Q., 2007. Exact solution of the Schrödinger equation for the modified Kratzer potential plus a ring-shaped potential by the Nikiforov-Uvarov method. **Physica Scripta**, **75** (3): 274-277.
66. Matamala, R.A., 2002. Discrete and continuum quantum states for the Kratzer oscillator. **International Journal of Quantum Chemistry**, **89** (3): 129-134.
67. Durmuş, A., 2011. Non-relativistic treatment of diatomic molecules interacting with a generalized Kratzer potential in hyperspherical coordinates. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, **44** (15): 155205-14.
68. Durmuş, A., 2015. Spectra generated by a non-central generalized Kratzer potential and explicit expressions for expectation values of r^s in N dimensions. **European Journal of Physics**, **36** (5): 055050-14.
69. Oyewumi, K.J., Falaye, B.J., Onate, C.A., Oluwadare, O.J., Yahya, W.A., 2014. K state solutions for the fermionic massive spin-1/2 particles interacting with

- double ring-shaped Kratzer and oscillator potentials. **International Journal of Modern Physics E**, **23** (2): 1450005-26.
70. Kasri, Y., Chetouani, L., 2011. Application of the exact quantization rule for some noncentral separable potentials. **Canadian Journal of Physics**, **86** (9): 1083-1089.
 71. Gharbi, A., Touloum, S., Bouda, A., 2015. Exact treatment of the relativistic double ring-shaped Kratzer potential using the quantum Hamilton-Jacobi formalism. **Modern Physics Letters A**, **30** (16): 1550082-16.
 72. Pauling, L., Wilson, E.B., 1985. Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry. Dover, New York, 496 pp.
 73. Jensen, P., 2000. An introduction to the theory of local mode vibrations. **Molecular Physics**, **98** (17): 1253-1285.
 74. Child, M.S., Halonen, L., 1984. Overtone frequencies and intensities in the local mode picture. **Advances in Chemical Physics**, **57** (1): 1-58.
 75. Haken, H., Wolf, H.C., 2003. Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry. Springer, Verlag Berlin Heidelberg, 592 pp.
 76. Micheal Hollas, J., 2004. Modern Spectroscopy. Wiley, Southern Gate, 452 pp.
 77. Morse, P.M., 1929. Diatomic molecules according to the wave mechanics II vibrational levels. **Physical Review**, **34** (1): 57-64.
 78. Fernández, F., Castro, A., 1996. Algebraic Methods in Quantum Chemistry and Physics. Mathematical Chemistry Series, CRC Press, 288 pp.
 79. Dabrowska, J.W., Khare, A., Sukhatme, U.P., 1988. Explicit wavefunctions for shape-invariant potentials by operator techniques. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **21** (4): L195-L200.
 80. Balantekin, A.B., 1998. Algebraic approach to shape invariance. **Physics Review A**, **57** (6): 4188-4191.
 81. Dong, S.H., Lemus, R., Frank, A., 2002. Ladder operators for Morse potential. **International Journal of Quantum Chemistry**, **86** (5): 433-439.
 82. Levai, G., 1994. Solvable potentials associated with $su(1,1)$ algebras: a systematic study. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **27** (11): 3809-3828.
 83. Benedict, G.M., Molnar, M., 1999. Algebraic construction of the coherent states of the Morse potential based on supersymmetric quantum mechanics. **Physics Review A**, **60** (3): R1737-R1740.

84. Chetouani, L., Guechi, L., Hamman, T.F., 1972. Algebraic treatment of the Morse potential. **Helvetica Physica Acta**, **65** (8): 1069-1076.
85. Flügge, S., 1974. Practical Quantum Mechanics, Springer, Berlin, 620 pp.
86. Ikdhair, S.M., Sever, R., 2012. Approximate bound states of the Dirac equation with some physical quantum potentials. **Applied Mathematics and Computations**, **218** (20): 10082-10093.
87. Pekeris, C.L., 1934. The rotation-vibration coupling in diatomic molecules. **Physical Review**, **45** (2): 98-103.
88. Dong, S.H., Sun, G.H., 2003. The series of the non-relativistic equation with the Morse potential. **Physics Letters A**, **314** (4): 261-266.
89. Miraboutalebi, S., Rajaei, L., 2014. Solutions of N-dimensional Schrödinger equation with Morse potential via Laplace transforms. **Journal of Mathematical Chemistry**, **52** (4): 1119-1128.
90. Xie, X.J., Jia, C.S., 2015. Solutions of the Klein-Gordon equation with the Morse potential Energy Model in higher spatial dimensions. **Physica Scripta**, **90** (3): 035207-6.
91. Bayrak, O., Boztosun, İ., 2007. Analytical solutions to the Hulthén and the Morse potentials by using the asymptotic iteration method. **Journal of Molecular Structure: THEOCHEM**, **802** (1-3): 17-21.
92. Bayrak, O., Boztosun, İ., 2007. The pseudospin symmetric solution of the Morse potential for any κ state. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, **40** (36): 11119-11127.
93. Bayrak, O., Boztosun, İ., 2006. Arbitrary l -state solutions of the rotating Morse potential by the asymptotic iteration method. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **39** (22): 6955-6963.
94. Bayrak, O., Soylu, A., Boztosun, İ., 2010. The relativistic treatment of spin-0 particles under the rotating Morse oscillator. **Journal of Mathematical Physics**, **51** (11): 112301-6.
95. Rosen, N., Morse, R.M., 1932. On the vibrations of polyatomic molecules. **Physical Review**, **42** (2): 210-218.
96. Manning, M.F., Rosen, N., 1933. A potential function for the vibrations of diatomic molecules. **Physical Review**, **44** (11): 951- 954.
97. Dong, S.H., Garcia-Ravelo, J., 2007. Exact solutions of the s-wave Schrödinger equation with Manning-Rosen potential. **Physica Scripta**, **75** (3): 307-309.

98. Asgarifar, S., Goudarzi, H., 2013. Exact solutions of the Manning-Rosen potential plus a ring-shaped like potential for the Dirac equation: spin and pseudospin symmetry. **Physica Scripta**, **87** (2): 025703-10.
99. Greene, R.L., Aldrich, C., 1976. Variational wave functions for a screened Coulomb potential. **Physical Review A**, **14** (6): 2363-2366.
100. Ikhdair, M.S., Sever, R., 2008. Approximate l-state solutions of the D-dimensional Schrödinger equation for Manning-Rosen potential. **Annalen der Physik**, **17** (11): 897-910.
101. Gu, X.Y., Dong, S.H., 2011. Energy spectrum of the Manning-Rosen potential including centrifugal term solved by exact and proper quantization rules. **Journal of Mathematical Chemistry**, **49** (9): 2053-2062.
102. Qiang, W.C., Dong, S.H., 2007. Analytical approximations to the solutions of the Manning-Rosen potential with centrifugal term. **Physics Letters A**, **368** (1-2): 13-17.
103. Qiang, W.C., Dong, S.H., 2009. The Manning-Rosen potential studied by a new approximate scheme to the centrifugal term. **Physica Scripta**, **79** (4): 045004-5.
104. Qiang, W.C., Li, K., Chen, W.L., 2009. New bound and scattering state solutions of the Manning-Rosen potential with the centrifugal term. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, **42** (20): 205306-12.
105. Ikhdair, S., 2011. On the bound-state solutions of the Manning-Rosen potential including an improved approximation to the orbital centrifugal term. **Physica Scripta**, **83** (1): 015010-10.
106. Ikhdair, S., Sever, R., 2008. An improved approximation to l-wave bound states of the Manning-Rosen potential by Nikiforov-Uvarov method. **arXiv:087.2085v1**, 1-14.
107. Ikhdair, S., Sever, R., 2009. Any l-state approximate solutions of the Manning-Rosen potential by the Nikiforov-Uvarov method. **arXiv:0909.0623v1**, 1-14.
108. Roy, A.K., 2014. Studies on bound-state spectra of Manning-Rosen potential. **Modern Physics Letters A**, **29** (9): 1-17, 2014.
109. Falaye, B.J., Oyewumi, K.J., Ibrahim, T.T, Punyasena, M.A., Onate, C.A., 2013. Bound state solutions of the Manning-Rosen potential. **Canadian Journal Of Physics**, **91** (1): 98-104.

110. Wei, G.F., Zhen, Z.Z., Dong, S.H., 2009. The relativistic bound and scattering states of the Manning-Rosen potential with an improved new approximate scheme to the centrifugal term. **Central European Journal of Physics**, **7** (1): 175-183.
111. Çiftçi, H., Hall, R.L., Saad, N., 2003. Asymptotic iteration method for eigenvalue problems. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **36** (47): 11807-11816.
112. Çiftçi, H., Hall, R. L., Saad, N., 2005. Construction of exact solutions to eigenvalue problems by the asymptotic iteration method. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **38** (5): 1147-1155.
113. Çiftçi, H., Hall, R. L., Saad, N., 2005. Iterative solutions to the Dirac equation. **Physical Review A**, **72** (2): 022101-7.
114. Champion, B., Hall, R. L., Saad, N., 2008. Asymptotic iteration method for singular potentials. **International Journal of Modern Physics A**, **23** (9): 1405-1415.
115. Leacock, R.A., Padgett, M.J., 1983. Hamilton-Jacobi theory and the quantum action variable. **Physical Review Letters**, **50** (1): 3-6.
116. Leacock, R.A., Padgett, M.J., 1983. Hamilton-Jacobi action-angle quantum mechanics. **Physical Review D**, **28** (10): 2491-2502.
117. Bhalla, R.S., Kapoor, A.K., Panigrahi, P.K., 1997. Quantum Hamilton-Jacobi formalism and the bound state spectra. **American Journal of Physics**, **65** (12): 1187-1194.
118. Bhalla, R.S., Kapoor, A.K., Panigrahi, P.K., 1997. Energy eigenvalues for a class of one-dimensional potentials via quantum Hamilton-Jacobi formalism. **Modern Physics Letters A**, **12** (5): 295-306.
119. Chen, G., Xuan, P., Wang, J.L., 2006. Quantum action-angle variable of the Hamilton-Jacobi theory in two dimensions. **Physica Scripta**, **73** (5): 443-446.
120. Gharbi, A., Bouda, A., 2013. Energy spectra of Hartmann and ring-shaped oscillator potentials using Quantum Hamilton-Jacobi formalism. **Physica Scripta**, **88** (4): 045007-6.
121. Kim, M.J., Choi, C.K., 1993. Hamilton-Jacobi theory and the relativistic action variable. **Physics Letters A**, **182** (2-3): 184-190.
122. Ranjani, S.S., Geojo, K.G., Kapoor, A.K., Panigrahi, P.K., 2004. Bound state wave functions through the quantum Hamilton-Jacobi formalism. **Modern Physics Letters A**, **19** (19): 1457-9.

123. Yeşiltaş, Ö., Bilge, Ocak S., 2008. The generalized PT-symmetric sinh-Gordon potential solvable within quantum Hamilton-Jacobi formalism. **International Journal of Theoretical Physics**, **47** (2): 415-420.
124. Yeşiltaş, Ö., Demircioğlu, B., 2008. Quantum Hamilton-Jacobi approach to two dimensional singular oscillator. **Chinese Physics Letters**, **25** (6): 1935-1938.
125. Kirkwood, J.G., 1932. Polarizabilities, susceptibilities and van der waals forces of atoms with several electrons. **Zeitschrift für Physik**, **33** : 57.
126. Buckingham, R.A., 1937. Quantum theory of atomic polarization. I. polarization by a uniform field. **Proceedings of the Royal Society of London, Series A**, **160** (900) : 94-113.
127. Suryanarayana, D., Weil, J.A., 1976. On the hyperfine splitting of the hydrogen atom in a spherical box. **The Journal of Chemical Physics**, **64** (2): 510-513.
128. Ley Koo, E., Rubinstein, S., 1979. The hydrogen atom within spherical boxes with penetrable walls. **The Journal of Chemical Physics**, **71** (1): 351-357.
129. Balfour, J.W., Whitlock R.F., 1975. The visible absorption spectrum of diatomic calcium. **Canadian Journal of Physics**, **53** (5): 472-485.
130. Sakurai, K., Broida, P., 1976. Laser photoluminescence of calcium molecules. **The Journal of Chemical Physics**, **65** (3): 1138-1145.
131. Vidal, C.R., 1980. The molecular constants and potential energy curves of the $Ca_2 A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system from laser induced fluorescence. **The Journal of Chemical Physics**, **72** (3): 1864-1874.
132. Hoffmann, R.T., Harris, D.O., 1984. The assignment of the low lying electronic states of Ca_2 . **The Journal of Chemical Physics**, **81** (2): 1047-1048.
133. Bergeman, T., Liao, P.F., 1980. Photoassociation, photoluminescence and collisional dissociation of the Sr_2 dimer. **The Journal of Chemical Physics**, **72** (2): 886- 898.
134. Gerber, G., Moller, R., Schneider, R, 1984. Laser induced bound-bound and bound-continuum emission of the $Sr_2 A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system. **The Journal of Chemical Physics**, **81** (4): 1538-1551.
135. Miller, J.C., Bruce, S.A., Andrews, L., 1977. Absorption spectra of matrix-isolated alkaline earth metal diatomic molecules. **The Journal of Chemical Physics**, **67** (6): 2478-2487.
136. Atmanspacher, H., Scheingraber, H., Vidal, R.C., 1985. Laser induced fluorescence of the MgCa molecule. **The Journal of Chemical Physics**, **82** (8): 3491-3501.

137. Feynman, R.P., 1939. Forces in molecules. **Physical Review**, **56** (4): 340-343.
138. Hellmann, H., 1936. A combined approximation method for the energy calculation in the many-electron problem. **Acta Physicochimica URSS**, **4** : 225-44.
139. Golden, S., 1976. Statistical thermodynamic generalization of the Hellmann-Feynman and quantum mechanical curvature theorems. **Chemical Physics Letters**, **31** (1): 195-197.
140. Visscher, L., Styszynski, J., Nieuwpoort, W.C., 1996. Relativistic and correlation effects on molecular properties. II. Hydrogen halides HF, HCl, HBr, HI and HAt. **The Journal of Chemical Physics**, **105** (5): 1987-1994.
141. Chatterjee, A., 1990. Large-N expansions in quantum mechanics, atomic physics and some O(N) invariant systems. **Physics Reports**, **186** (6): 249-370.
142. Alhaidari, A.D., Bahlouli, H., Al-Hasan, A., 2006. Dirac and Klein-Gordon equations with equal scalar and vector potentials. **Physics Letters A**, **349** (1-4): 87-97.
143. Gradshteyn, I.S., Ryzhik, I.M., 2000. Tables of Integrals, Series, and Products. 6th ed., Academic Press, New York, 1161 pp.
144. Szego, G., 1939. Orthogonal Polynomials. 4th ed., American Mathematical Society, RI, 425 pp.
145. Swainson, R. A., Drake, G. W. F., 2006. A unified treatment of the non-relativistic and relativistic hydrogen atom I: The wavefunctions. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, **24** (1): 79-94.
146. Drake, G. W. F., 2006. Handbook of Atomic, Molecular and Optical Physics. Springer, Berlin, 506 pp.
147. Landau, L.D., Lifshitz, E.M., 1979. Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory. Pergamon, New York, 677 pp.
148. Bockasten, K., 1974. Mean values of powers of the radius for hydrogenic electron orbits. **Physical Review A**, **42** (3): 1123-1126.
149. Qiang, W.C., Dong, S.H., 2007. Arbitrary l-state solutions of the rotating Morse potential through the exact quantization rule method. **Physics Letters A**, **363** (3): 169-176.
150. Varshini, Y.P., 1957. Comparative study of potential energy functions for diatomic molecules. **Reviews of Modern Physics**, **29** (4): 664-682.
151. Jia, C.S., Cao, S.Y., 2013. Molecular spinless energies of the Morse potential energy model. **Bulletin of the Korean Chemical Society**, **34** (11): 3425-3428.

152. Diaf, A., Chouchaoui, A., 2011. l-states of the Manning-Rosen potential with an improved approximate scheme and Feynman path integral formalism. **Physica Scripta**, **84** (1): 015004-7.
153. Lucha, W., Schöberl, F.F., 1999. Solving the Schrödinger equation for bound states with Mathematica 3.0. **International Journal of Modern Physics C**, **10** (4): 607-10.
154. Hajigeorgiou, P.G., 2010. An extended Lennard-Jones potential energy function for diatomic molecules : application to ground electronic states. **Journal of Molecular Spectroscopy**, **263** (1): 101-110.
155. Kaur, S., Mahajan, G.J., 2002. Universaal relation between spectroscopic constants. **Pramana Journal of Physics**, **59** (3): 479-486.
156. Abramowitz, M., Stegun, I.A., 1972. Handbook of Mathematical Functions. National Bureau of Standards, Dover, 1046 pp.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı: Aysel Özfidan
Uyruğu: Türkiye (T.C)
Doğum Tarihi ve Yeri: 20.01.1988 - TARSUS
Medeni Durum: Bekar
e-mail: ayselozfidan@gmail.com
Yazışma Adresi: Anıt mah. Atatürk Bulv. Gündoğdu Sitesi A Blok 1/1
 Tarsus-MERSİN

EĞİTİM

Derece	Kurum	Mezuniyet Tarihi
Yüksek Lisans	Erciyes Üniversitesi, Fizik Anabilim Dalı	2014
Lisans	Erciyes Üniversitesi, Fizik Bölümü	2012
Lise	Çağ Koleji, Mersin	2006

YABANCI DİL

İngilizce

YAYINLAR

1. Durmus, A., Özfidan, A., (2014). Analytical solutions of a generalized non-central potential in N dimensions. Journal of Mathematical Physics, 55(10): 102105.

BİLDİRİLER

1. Ozfidan A., Durmus A., “ Bound-state solutions of Klein-Gordon equation with the non-central Manning-Rosen potential including centrifugal term in N-dimensions”, International Conference on Applied Analysis and Mathematical Modeling, 3-7 July 2017, İstanbul, Türkiye.

2. Durmus A., Ozfidan A., “ Relativistic solutions for spinless particles with Hartmann potential in hyperspherical coordinates”, International Conference on Applied Analysis and Mathematical Modeling, 3-7 July 2017, İstanbul, Türkiye.
3. Ozfidan A., Durmus A., “Analytical solutions of N- dimensional Schrödinger equation in the presence of Makarov potential“, 9th International Physics Conference Of The Balkan Physical Union-BPU9, 24-27 Ağustos 2015, İstanbul , Türkiye.
4. Durmus A., Ozfidan A., “ Nonrelativistic solutions for Hartmann potential in N-dimensions“, 9th International Physics Conference Of The Balkan Physical Union-BPU9, 24-27 Ağustos 2015, İstanbul , Türkiye.

