

T.C
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GENELLEŞTİRİLMİŞ MORSE POTANSİYELİ İÇİN
UYUMLU DURUMLARIN KURULMASI

132991

Mustafa DERNEK

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

132991

2002

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**GENELLEŐTİRİLMİŐ MORSE POTANSİYELİ İÇİN
UYUMLU DURUMLARIN KURULMASI**

Mustafa DERNEK

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

2002

T.C
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GENELLEŞTİRİLMİŞ MORSE POTANSİYELİ İÇİN
UYUMLU DURUMLARIN KURULMASI

Mustafa DERNEK

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 01/07/ 2002 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından ..Doksan..... (...90....)
takdir edilerek oy birliği /~~oy çokluğu~~ ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Nuri ÜNAL (Danışman)

Prof. Dr. Zeki ASLAN

Doç. Dr. Varol KESKİN

ÖZET

GENELLEŞTİRİLMİŞ MORSE POTANSİYELİ İÇİN UYUMLU DURUMLARIN KURULMASI

Mustafa DERNEK

Yüksek Lisans Tezi Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Nuri ÜNAL

2002, 30 Sayfa

Bu çalışmada, genelleştirilmiş Morse potansiyeli için, dalga fonksiyonları ve enerji spektrumu, Feynman path integral yöntemi kullanılarak elde edildi. Sonuçların daha önce Schrödinger denklemini çözerek ve grup kuramı tekniğiyle elde edilen çözümlerle karşılaştırıldığında tutarlı oldukları gözlemlendi.

Genelleştirilmiş Morse potansiyeli için propagatör elde edilirken, problemin dinamik simetrisinden faydalanıldı. Böylece problem, dört boyutlu hiperboloid üzerindeki serbest parçacık problemine dönüştürüldü. Rijit rotator, iki atomlu moleküllerin hareketini betimlemek için iyi bir yaklaşıklık sunmaktadır. Böylece parçacığın, dört boyutlu küre üzerine hapsedildiği çözümler alınıp, hiperboloid çözümlerine dönüştürülmüştür.

Ayrıca, bu çözümlerden elde edilen dalga fonksiyonlarının limit durumunda Morse potansiyeli için verilen dalga fonksiyonlarına indirgendiği gösterildi.

ANAHTAR SÖZCÜKLER: Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli, Morse Potansiyeli, Uyumlu Durumlar, Propagatör.

JÜRİ: Prof. Dr. Nuri ÜNAL

Prof. Dr. Zeki ASLAN

Doç. Dr. Varol KESKİN

ABSTRACT

CONSTRUCTION OF COHERENT STATES FOR GENERALIZED MORSE POTENTIAL

Mustafa DERNEK

M.Sc. in Physics

Adviser: Prof. Dr. Nuri ÜNAL

2002, 30 Pages

In this study, the wave function and energy spectrum are obtained for the generalized Morse potential by using Feynman path integral method. It is seen that our results are in agreement with results obtained from Schrödinger equation and the group theory techniques.

The dynamic symmetry of the problem has been used to obtain the propagator. Thus the problem has been converted to a free particle problem on the surface of a four-dimensional hyperboloid. The rigid rotator offers a good approach to describe the motion of diatomic molecules, hence the particles motion constrained on the surface of the four-dimensional sphere, are transformed to hyperbolic solutions.

Furthermore, it has been shown that in the limiting case, the wave functions of the generalized Morse potential could be reduced to those given for the Morse potential.

KEY WORDS : Generalized Morse Potential, Morse Potential, Coherent States, Propagator.

COMMITTEE : Prof. Dr. Nuri ÜNAL

Prof. Dr. Zeki ASLAN

Assoc.Prof.. Dr. Varol KESKİN

TEŞEKKÜR

Tez konusunun belirlenmesi ve çalışmanın gerçekleşmesinde yardım ve uyarılarını esirgemeyen değerli hocam Prof. Dr. Nuri ÜNAL'a, ayrıca Lisans ve Yüksek Lisans öğrenimim boyunca içten dostluğuyla her zaman yanımda olan Arş. Gör. Yusuf SUCU'ya teşekkür ederim.



İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
İÇİNDEKİLER.....	iv
1. GİRİŞ.....	1
2. MATERYAL ve METOD.....	3
2. 1. Feynman Path İntegrali Formülasyonu.....	3
2. 2. Feynman Path İntegrali Formülasyonunun Kuantum Mekaniğinin Diğer Betimlemeleriyle İlişkisi.....	6
2. 3. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli.....	8
3. BULGULAR.....	12
3. 1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyelinin Geometrik Potansiyel olarak Belirlenmesi.....	12
3. 2. Geometrik Potansiyelin Rijit Rotatora Dönüştürülmesi.....	15
3. 3. Dört Boyutlu Hiperboloid Üzerindeki Serbest Parçacık İçin Propagatörün Hesaplanması.....	17
4. TARTIŞMA.....	27
5. SONUÇ.....	28
6. KAYNAKLAR.....	29
7. ÖZGEÇMİŞ.....	30

1 . GİRİŞ

Kuantum mekaniğinin standart gösterimleri 1920'lerde geliştirilen ve cebire dayanan Heisenberg-Dirac formülasyonu, diferansiyel yaklaşımı temel alan Schrödinger formülasyonudur. Her iki yöntemde klasik mekaniğin Hamiltonyen gösterimine dayanmaktadır. Dirac 1930'larda klasik mekanikte, Lagranjiyen gösteriminin Hamiltonyen gösteriminden daha temel olduğunu görerek, eylemin oldukça önemli bir yeri olduğunu gözlemiştir. Oysa o yıllarda eylem kuantum mekaniği formülasyonunda hiç kullanılmamaktaydı. Dirac bu eksikliğin giderilmesi için kuantum mekaniğinde propagatörü (yayıcıyı) $e^{\frac{i}{\hbar}S}$ olarak önerdi. Burada S klasik bir yol boyunca klasik eylemdir.

Sonraki yıllarda Dirac'ın bu önerisi Feynman (1948) tarafından geliştirilerek kuantum mekaniğinin "Path İntegrali" adıyla anılan ve integral bir yaklaşım olan üçüncü formülasyonu kuruldu. Bu yöntemle, fiziksel süreçlerin kuantum mekaniksel betimlemeleri yapılırken, t' anında x' noktasında bulunan bir parçacığın, t'' anında x'' noktasında bulunan olasılık genlikleri ($e^{\frac{i}{\hbar}S(x'',t'';x',t')}$) hesaplanmakta ve bu olasılık genlikleri tüm olası yollar üzerinden toplanmaktadır.

Feynman path integrali formülasyonunun Lagranjiyen içermesi nedeniyle verdiği sonuçlar klasik fiziğe daha yakındır. Ayrıca Hamiltonyeni açık bir biçimde yazılamayan sistemlerin çözülmesi bu yöntem sayesinde mümkün olmaktadır (Feynman 1962). Bu üstünlüklerinden ötürü path integrali yöntemi kuramsal fiziğin en önemli başarılarından bir tanesi olmuş ve 50 yıl boyunca evren biliminde, molekül fiziğinde ve polimer fiziğinde vazgeçilemez bir araç haline gelmiştir (Khandekar vd 1993).

Otuzlu yıllarda moleküllerin titreşim spektrumlarını harmonik osilatörden daha incelikli betimlemek için ortaya atılan Morse potansiyelinin (Morse 1929) bazı eksiklikleri bulunmaktaydı. Bu eksikliğin giderilmesi için "Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli" (G.M.P) önerilmiş ve potansiyel için Schrödinger denklemi çözülmüştür (Deng ve Fan 1957). Doksanlı yıllarda G.M.P için grup kuramı tekniğiyle bağlı durum spektrumu elde edilmiştir (Mesa vd 1997).

Bu çalışmanın amacı path integrali yöntemini kullanarak GMP problemini tekrar ele almak, enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını türetmektir. Ayrıca bu çözümlerin limit durumunda Morse potansiyelinin çözümlerini verdiği gösterilecektir.

Çalışmanın Materyal ve Metod kısmında path integrali yöntemi ve genelleştirilmiş Morse potansiyeli için Schrödinger denkleminin çözümleri verilmiştir. Bulgular kısmında ise problemin dinamik simetrisinden faydalanarak eylem, Euler açılarıyla ifade edilen dönme matrisleri cinsinden kurulmuş, dört boyutlu küre üzerinde serbest parçacık olarak propagatör, bu eylem ifadesini için türetilmiştir.



2. MATERYAL ve METOD

2.1. Feynman Path İntegreli Formülasyonu

Standart kuantum mekaniği gösteriminde t anında x noktasında bulunan bir parçacığın dalga fonksiyonu $\psi (x , t)$ olarak gösterilir. Bu parçacığın t anında x noktasında bulunma olasılık yoğunluğu ise $|\psi (x , t)|^2$ ile verilir. Feynman ise zamanın bir fonksiyonu olarak parçacığın hareketini, parçacığın yörüngesi $x (t)$ yada gittiği yolla olasılık genliğini ilişkilendirdi.

Klasik olarak verilen bir b olayında meydana gelen bir a olayının koşullu olasılığı $P (a | b)$ olarak gösterilirse, benzer olarak $P (a | c)$ ve $P (b | c)$ ise o zaman aşağıdaki kural geçerlidir.

$$P (a | c) = \sum_b P (a | b) P (b | c) \quad (2.1.1)$$

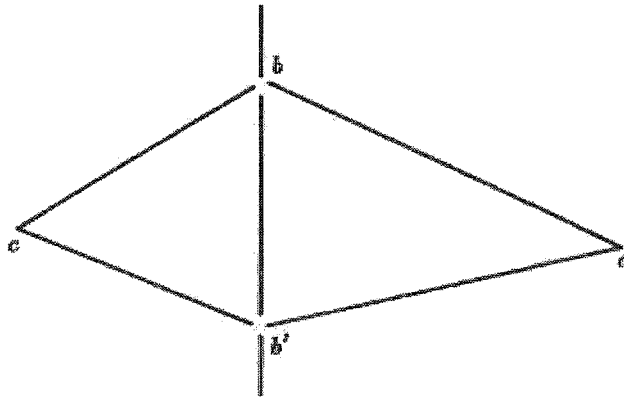
a ile c arasında meydana gelebilecek bütün olaylar (yada durumlar) üzerinden toplama yapılır.

Oysa kuantum mekaniksel kural ise ;

$$\phi_{ac} = \sum_b \phi_{ab} \phi_{bc} \quad (2.1.2)$$

biçiminde verilir. Burada bütün olası b durumları üzerinden toplama yapılmaktadır.

(2.1.2) denklemi kuantum mekaniksel üst üste gelme ilkesinin yollara genellemesidir ve Şekil 1’de çift yarık deneyi için çizilmiştir.



Şekil 1. Çift yarık deneyi

Şekil 1'de c noktasındaki elektron cba yolunu yada cba yolunu izleyerek ekrandaki a noktasına ulaşabilir. cba yolu için genlik;

$$\phi_{abc} = \phi_{ab} \cdot \phi_{bc}, \quad cba \text{ yolu için ise};$$

$$\phi_{ab'c} = \phi_{ab'} \cdot \phi_{b'c} \text{ dir. Toplam genlik ise};$$

$$\phi_{ac} = \phi_{abc} + \phi_{ab'c} = \phi_{ab} \cdot \phi_{bc} + \phi_{ab'} \cdot \phi_{b'c} \text{ olur.}$$

Kendi yolundan ekrana giden elektron iki yarığın birisinden (yada ikisinden de) geçer. Üst üste gelme ilkesi ekranda bir girişim deseni oluşacağını söyler. Eğer elektronun hangi yoldan geçtiği belirlenmeye kalkılırsa bu girişim deseni yok olur. Feynman bunu ϕ_{ab} 'yi b den a'ya elektronun yolu için genlik olarak "tüm yollar üzerinden toplama" deyişiyle ifade etmiştir ve "Path İntegrali Formülasyonunu" türetmek için denklem (2.1.2)'yi postülat olarak kullanılmıştır. Burada parçacığın hangi yoldan gittiğine dair bir kesinlik yoktur. Bu yüzden toplam genliği bulmak için değişik yollar için olasılık genlikleri elde edilmeli ve bunlar toplanmalıdır.

Çift yarık girişim deneyi ile bir benzeşim yapılırsa Feynman formülasyonunda temel nicelik (x', t') uzay-zaman noktasından (x'', t'') 'ne giden bir parçacık için olasılık genliği $K(x'', t''; x', t')$ 'dir. Tüm ara olasılıklar toplanır ve bu toplam, (x', t') 'nü (x'', t'') 'ne bağlayan her bir yolun katkısını içerir. $\phi[x(t)]$ $x(t)$ yolu için olasılık genliğini göstermek üzere toplam genlik :

$$K(x'', t''; x', t') = \sum_{x(t)} \phi[x(t)] \quad (2.1.3)$$

olur.

Dirac, propagatör olarak bilinen, bir parçacığın (x', t') 'den (x'', t'') 'ye geçiş genliği ile, S Hamilton-Jacobi denkleminin çözümü olmak üzere $e^{\frac{i}{\hbar}S}$ 'in aynı şeyler olduğunu gördü. Kütleşi m olan ve $V(x)$ potansiyelinde hareket eden bir parçacığın Langranjiyeni ;

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) \quad (2.1.4)$$

olarak verilir. Böylece Dirac propagatörü ε sonsuz küçük olmak üzere ;

$N \rightarrow \infty$ limit durumunda

$$K = \lim_{N \rightarrow \infty} K_N \quad (2.1.9)$$

olur. Böylece (2.1.5) ifadesinde $K (x_i, x_{i-1}, \varepsilon)$ yerine konulursa, propagatör;

$$K (x'', t''; x', t) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0 \\ (N \varepsilon = t'' - t')}} \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N S (x_k, x_{k-1}; \varepsilon) \right] \prod_{k=1}^{N-1} \frac{dx_k}{A} \quad (2.1.10)$$

olarak elde edilir. Burada $S (x_k, x_{k-1}; \varepsilon)$, sonsuz küçük zaman aralığı $\varepsilon = t_k - t_{k-1}$ üzerinden eylemdir. Feynman bunu kapalı biçimde yollar yada zamanlar üzerinden toplam olarak şu şekilde yazmıştır ;

$$K (x'', t''; x', t) = N \sum_{(x(t))} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S [x(t)] \right\} \quad (2.1.11)$$

Burada N normalizasyon sabitidir. Path integralinin sürekli durumdaki ifadesi;

$$K (x'', t''; x', t) = \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S [x(t)] \right\} D [x(t)] \quad (2.1.12)$$

biçiminde verilir.

$D [x(t)]$ ifadesi $x (t') = x'$ den başlayıp $x (t'') = x''$ ne uzanan bütün yollar üzerinde toplamı gösteren path diferansiyel ölçüsüdür. Ayrıca

$$S = \int_{t'}^{t''} L dt$$

İki uç nokta arasında elde edilen klasik eylemdir.

2.2. Feynman Path İntegrali Formülasyonunun Kuantum Mekanizmasının Diğer Betimlemeleriyle İlişkisi

Propagatör, iki konum durumu arasında alınan evrim işlemcisinin matris elemanlarına eşit olan veya Heisenberg –Dirac cebirsel yaklaşımının dönüşüm matrisidir.

$$K (x'', t''; x', t) = \langle x'', t'' | x', t \rangle = \langle x'' | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (t'' - t) \hat{H} \right] | x' \rangle \quad (2.2.1)$$

Burada $\exp \left[-\frac{i}{\hbar} (t'' - t) \hat{H} \right]$ evrim işlemcisi $\hat{H}$ ise hamiltoniyendir.

Böylece K sistemin tüm dinamiğini içerir. Eğer propagatörün belirlenmesi için denklem (2.2.1) kullanılacak olsaydı K'nın elde edilmesi için Heisenberg hareket denkleminin çözülmesi gerekecekti. Oysa path integrali ile doğrudan K elde edilebilmektedir. (Denklem (2.1.12))

Schrödinger denklemi $i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$ olmak üzere Ψ dalga fonksiyonu bu denklemle belirlenir ve propagatör kullanılarak aşağıdaki şekilde üretilir.

$$\Psi (x'', t'') = \int K (x'', t''; x', t') \Psi (x', t') dx' \quad t'' > t' \quad (2.2.2)$$

Buradan propagatörün Schrödinger denkleminin Green fonksiyonu olduğu ve Feynman'ın geometrik yaklaşımı ile Schrödinger'in analitik yaklaşımının bir bütün olduğu görülür.

Green fonksiyonunun işlemci biçimi $\hat{H}$ zamandan bağımsız ve $\theta (t)$ basamak fonksiyonu olmak üzere şu şekilde verilir.

$$\hat{G} = \theta (t'' - t') \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (t'' - t') \hat{H} \right] \quad (2.2.4)$$

$\hat{G}$ 'nin $|x'\rangle$ ve $|x''\rangle$ durumları arasında matris elemanı alındığında

$$G (x'', t''; x', t') = \langle x'' | \hat{G} | x' \rangle = K (x'', t''; x', t') \theta (t'' - t') \quad (2.2.5)$$

olur. Bu ifadenin

$$\left[i \hbar \frac{\partial}{\partial t''} - \hat{H} (x'') \right] G (x'', t''; x', t') = i \hbar \delta (t'' - t') \quad (2.2.6)$$

denklemini sağladığı görülür.

Hamiltonyen yada Lanranjiyen açık olarak zamana bağlı değilse propagatör ;

$$K (x'', t''; x', t') = K (x'', t'' - t'; x', 0) \quad (2.2.7)$$

biçiminde yazılabilir. Üst üste gelme ilkesinin diğer bir sonucu ise ;

$$K (x'', t''; x', t') = \int K (x'', t''; x, t) K (x, t; x', t') dx, \quad t' < t < t'' \quad (2.2.8)$$

bağıntısıdır.

Sonuç olarak propagatör

$$K(x'', t''; x', t') = \sum_n \Psi_n(x'') \Psi_n^*(x') \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (t'' - t') E_n \right], \quad t'' > t' \quad (2.2.9)$$

olmak üzere Hamiltoniyen işlemcisinin $\Psi_n(x)$ enerji özfonksiyonlarının bir tam kümesi cinsinden yazılabilir. Spektrum sürekli olursa bu toplam integral haline gelir. $T = t'' - t'$ yazılıp denklem (2.2.5)'in T 'ye göre Fourier dönüşümü alınırsa enerjiye bağlı Green fonksiyonu ;

$$\begin{aligned} \tilde{G}(x'', x'; E) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dT \exp \left[\frac{iET}{\hbar} \right] G(x'', T; x; 0) \\ &= \sum_n \frac{\Psi_n(x'') \Psi_n^*(x')}{(E - E_n)} \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

biçimine dönüşür. Burada $\text{Im } E > 0$ dır. $\text{Im } E = 0$ olduğunda $\hat{H}$ 'ın spektrumu gerçel olduğundan Green fonksiyonunun tekil noktaları vardır. Bu kutup noktalarından sistemi temsil eden bağlı durum dalga fonksiyonları ve enerji spektrumu elde edilebilir.

2.3. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli

1957'de iki atomlu moleküllerin enerji spektrumlarını ve elektromanyetik geçişlerini betimlemek için (Deng ve Fan 1957) tarafından önerilen genelleştirilmiş Morse potansiyelinin ifadesi

$$V = D \left[1 - \frac{b}{e^{ar} - 1} \right]^2 \quad (2.3.1)$$

biçimindedir. Burada $b = e^{ar_e} - 1$ ve $0 \leq r < \infty$ olmak üzere D derinliği, b en küçük r_e 'nin konumu ve a ise potansiyelin yarıçapını gösterir.

P. M. Morse'un 1929'da önerdiği Morse potansiyeli ise

$$V(x) = D \left[1 - e^{-a(x-x_e)} \right]^2 \quad (2.3.2)$$

biçimindedir (Morse 1929). Morse potansiyelinin tam analitik çözümleri yapılabildiği için farklı moleküler karakteristikler kolayca hesaplanabilmektedir. Fakat bu potansiyelin üç tane iyi bilinen eksikliği vardır. Bunlar:

(i) $-\infty < x < \infty$ aralığında tanımlı olması yani, $x < 0$ fiziksel olmayan bölgeyi de içermesi

(ii) çekirdek içi etkileşmelerin aksine $x = 0$ 'da sonlu, yani tanımlı olması

(iii) bazı iki atomlu moleküllerin titreşimsel düzeylerinin iyi bir şekilde

betimlenmesi için $\left(n + \frac{1}{2}\right)$ 'li terimin daha yüksek dereceden ifadesine gerek

duyulduğu halde, Morse potansiyelinin enerji özdeğeri E_n sadece birinci ve ikinci basamaktan terimleri içermektedir. Bunlar

$$E_n = \sqrt{\frac{2D}{\mu}} a \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{a^2 \hbar^2}{2\mu} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (2.3.3)$$

dır. Genelleştirilmiş Morse potansiyeli, Morse potansiyelinin bu eksiklerini gideren iyi bir yaklaşım olmuştur.

Denklem (2.3.1)'de verilen G.M.P için $x = ar$ $0 \leq x < \infty$ olmak üzere Schrödinger denklemi ;

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \quad (2.3.4)$$

şeklinde yazılabilir. Burada

$$V(x) \equiv k \left(1 - \frac{b}{e^x - 1}\right)^2$$

$$\Psi(r) = \sqrt{a} \psi(x)$$

$$k = \frac{2\mu D}{a^2 \hbar^2}$$

ve

$$\varepsilon = \frac{2\mu E}{a^2 \hbar^2}$$

biçiminde tanımlanmıştır. Yeni bir y değişkeni $y = (e^x - 1)^{-1}$ ve $F(y)$ fonksiyonu

$$\psi(x) = \Phi(y) = \frac{y^\alpha}{(1+y)^\beta} F(y) \text{ olmak üzere (2.3.4) Schrödinger denklemi:}$$

$$y(1+y)\frac{d^2 F}{dy^2} + [2(\alpha - \beta + 1)y + (2\alpha + 1)]\frac{dF}{dy} + [(\alpha - \beta)^2 + (\alpha - \beta) + c]F(y) = 0 \quad (2.3.5)$$

biçiminde bir hipergeometrik diferansiyel denkleme dönüşür, burada

$$\alpha = \sqrt{k - \varepsilon} = \sqrt{\frac{2\mu(D - E)}{a^2 \hbar^2}} \quad (2.3.6)$$

$$\beta = \sqrt{\alpha^2 + kb(b+2)} = \sqrt{k(b+1)^2 - \varepsilon} = \sqrt{\frac{2\mu}{a^2\hbar^2} [D(b+1)^2 - E]} \quad (2.3.7)$$

$$C = -kb^2 = -\frac{2\mu}{a^2\hbar^2} b^2 D \quad (2.3.8)$$

olarak seçilmiştir. Denklem (2.3.5)'in çözümü

$$F(y) = {}_2F_1(d, e; 2\alpha + 1; -y) \quad (2.3.9)$$

dır, burada

$$d = \alpha - \beta + l, \quad e = \alpha - \beta + 1 - l, \quad l = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 - 4C}) = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 4kb^2}) \quad (2.3.10)$$

olmak üzere bir hipergeometrik fonksiyon verir. n pozitif bir tam sayı olmak üzere $F(y)$ fonksiyonunun bir polinoma indirgenebilmesi, yani sonlu kalabilmesi için d yada e 'nin (yada her ikisinin de) negatif bir tamsayı $(-n)$ olması gerekir. Böylece α ve β n 'ye bağlıdır. Yani denklem (2.3.7) ve denklem (2.3.10)'dan

$$\beta_n - \alpha_n = n + l \quad (2.3.11)$$

$$\beta_n^2 - \alpha_n^2 = kb(b+2) \quad (2.3.12)$$

elde edilir. Böylece α_n ve β_n ifadesi :

$$\alpha_n = \frac{1}{2} \left(\frac{kb(b+2)}{n+l} - n - l \right) \quad \beta_n = \frac{1}{2} \left(\frac{kb(b+2)}{n+l} + n + l \right) \quad (2.3.13)$$

eşitlikleriyle belirlenir. Denklem (2.3.6)'dan ε_n ; α_n cinsinden

$$\varepsilon_n = k - \alpha_n^2 \text{ olur ve enerji özdeğerleri}$$

$$E_n = D - \frac{a^2\hbar^2}{8\mu} \left(n + l - \frac{b(b+2)k}{n+l} \right)^2 \quad (2.3.14)$$

biçiminde elde edilir ve buna karşılık gelen öz fonksiyon ise

$$\Psi_n(r) = N_n y^{\alpha_n} (1+y)^{-\beta_n} {}_2F_1(-n, -n+1-2l; 2\alpha_n+1; -y) \quad (2.3.15)$$

$$y = (e^{ar} - 1)^{-1}$$

olarak bulunur. Buradaki N_n normalizasyon katsayısı ;

$$\int_0^\infty dr |\Psi_n(r)|^2 = \int_0^\infty dx |\Psi_n(x)|^2 = \int_0^\infty dy [y(1+y)]^{-1} |\Phi_n(y)|^2 = 1 \quad (2.3.16)$$

koşuluyla belirlenir. Denklem (2.3.14) ve denklem (2.3.15)'de n kuantum sayısı sonlu bir değer alır. Böylece

$$n = 0, 1, 2, \dots, n_{\max} \quad n_{\max} \leq \sqrt{kb(b+2)} - l \quad (2.3.17)$$

biçiminde sınırlandırılır.

N_n normalizasyon katsayısı süper simetrik kuantum mekaniği tekniği ile ;

$$N_n = \left(\frac{a(\alpha_n + n + l) \Gamma(2\alpha_n + n + 1) \Gamma(2\alpha_n + n + 2l)}{n! (n + l) \Gamma(2\alpha_n) \Gamma(2\alpha_n + 1) \Gamma(n + 2l)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.3.18)$$

olarak bulunur.

Ayrıca hipergeometrik fonksiyon ${}_2F_1$ ve confluent hipergeometrik fonksiyon ${}_1F_1$ arasındaki limit ilişkisi kullanılarak ;

$${}_2F_1\left(a, b; c; \frac{z}{b}\right) \rightarrow {}_1F_1(a; c; z)$$

(burada $b \rightarrow \infty$ (yada $r_e \gg 1$) ve $r \gg 1$ bölgesi için) genelleştirilmiş Morse potansiyeli için bulunan dalga fonksiyonları denklem (2.3.15)Morse potansiyeli için bulunan dalga fonksiyonlarına indirgenir (Mesa vd 1997).

3. BULGULAR

3.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyelinin Geometrik Potansiyel Olarak Belirlenmesi

Denklem (2.3.1)'de verilen genelleştirilmiş Morse potansiyeli içindeki μ kütleli bir parçacığın eylem ifadesi

$$S = \int dt \left\{ \frac{\mu}{2} \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 - D \left[1 - \frac{b}{e^{ar} - 1} \right]^2 \right\} \quad (3.1.1)$$

biçiminde yazılır. Burada $0 \leq r < \infty$ olmak üzere $x = ar$ boyutsuz değişken tanımlandığında $0 \leq x < \infty$ ve

$p_x = \frac{1}{a} p_r$ olur. Böylece

$$S = \int dt \left\{ P_x \frac{dx}{dt} - \frac{1}{2\mu} a^2 P_x^2 - D \left[1 - \frac{b}{e^x - 1} \right]^2 \right\} \quad (3.1.2)$$

olur.

$$u = \frac{1}{e^x - 1}$$

değişken değiştirmesi yapıldığında

$$\frac{du}{dx} = -u(u+1)$$

Buradan $P_x = -u(u+1) P_u$ elde edilir. Böylece eylem ifadesi

$$S = \int dt \left[P_u \frac{du}{dt} - \frac{a^2}{2\mu} u^2 (1+u)^2 P_u^2 - D(1-bu)^2 \right] \quad (3.1.3)$$

biçimine dönüştür. Denklem (3.1.3)'de $u(u+1)$ terimini elimine etmek için yeni bir zaman λ (parametrik zaman) tanımlayalım ve bunu ifade etmek için

$$\frac{dt}{d\lambda} = \frac{1}{u(1+u)} \frac{\mu}{a^2} \quad (3.1.4)$$

yazalım. Böylece parametrik zaman cinsinden (1 + 1) boyutlu eylem

$$S = \int d\lambda \left[P_u \frac{du}{d\lambda} + P_o \frac{dt}{d\lambda} - P_o \frac{\mu}{a^2} \frac{1}{u(1+u)} - u(1+u) \frac{P_u^2}{2} + \frac{\mu}{a^2} \frac{D(1-bu)^2}{u(1+u)} \right]$$

biçimine dönüştür.

$$\frac{2\mu D}{a^2} = k \text{ olarak alındığında}$$

$$S = \int d\lambda \left[P_u \frac{du}{d\lambda} + P_o \frac{dt}{d\lambda} - \frac{P_o k}{2D} \frac{1}{u(u+1)} - u(1+u) \frac{P_u^2}{2} + \frac{k}{2} \frac{(1-bu)^2}{u(u+1)} \right] \quad (3.1.5)$$

elde edilir. Bu ifade düzenlendiğinde

$$S = \int d\lambda \left[P_u \frac{du}{d\lambda} + P_o \frac{dt}{d\lambda} - u(1+u) \frac{P_u^2}{2} - \frac{1}{2u} \left(\frac{P_o k}{D} + k \right) + \frac{1}{2(1+u)} \left(\frac{P_o k}{D} + k(b+1)^2 \right) + \frac{kb^2}{2} \right] \quad (3.1.6)$$

halini alır.

$$u = \sinh^2 \theta$$

biçiminde bir değişken değiştirmesi yapıldığında

$$P_u = \frac{1}{2 \sinh \theta \cosh \theta} P_\theta \text{ olur. Buradan } u(1+u) \frac{P_u^2}{2} = \frac{1}{8} P_\theta^2 \text{ elde edilir.}$$

Bu ifadeler denklem (3.1.6)'da yerine konulursa eylem

$$S = \int d\lambda \left\{ P_\theta \frac{d\theta}{d\lambda} + P_o \frac{dt}{d\lambda} - \frac{1}{8} P_\theta^2 - \frac{1}{2 \sinh^2 \theta} \left(\frac{P_o k}{D} + k \right) + \frac{1}{2 \cosh^2 \theta} \left(\frac{P_o k}{D} + k(b+1)^2 \right) + \frac{kb^2}{2} \right\} \quad (3.1.7)$$

olarak elde edilir

Problemi hiperbolik koordinatlara dönüştürmek için φ ve ψ geçici değişkenleri

$$\text{ile } P_\varphi = \sqrt{4 \left(\frac{P_o k}{D} + k + 2kb + kb^2 \right)} \text{ ve } P_\psi = \sqrt{4 \left(\frac{P_o k}{D} + k \right)} \text{ momentumları biçiminde}$$

tanımlayıp, bu momentum ifadeleri için eyleme Lagrange çarpanları eklendiğinde denklem (3.1.7)

$$S = \int d\lambda \left[-\frac{d\varphi}{d\lambda} \sqrt{4 \left(\frac{P_o k}{D} + k + 2kb + kb^2 \right)} - \frac{d\psi}{d\lambda} \sqrt{4 \left(\frac{P_o k}{D} + k \right)} \right] - kb^2 (\lambda_b - \lambda_a) + S' \quad (3.1.8)$$

biçimine dönüştür. Burada S'

$$S' = \int d\lambda \left[P_\theta \frac{d\theta}{d\lambda} + P_o \frac{dt}{d\lambda} + P_\varphi \frac{d\varphi}{d\lambda} + P_\psi \frac{d\psi}{d\lambda} - H \right] \quad (3.1.9)$$

ifadesi ile tanımlanır. Bu eylem için Hamiltoniyen ise

$$H = \frac{1}{8} \left(P_\theta^2 + \frac{P_\varphi^2}{\cosh^2 \theta} - \frac{P_\psi^2}{\sinh^2 \theta} \right) \quad (3.1.10)$$

olur. Denklem (3.1.9)'da elde edilen S' ifadesi (2 + 2) boyutta üç boyutlu hiperboloid yüzeyinde hareket eden parçacığı tanımlamaktadır.

(2 + 2) boyutlu kartezyen koordinatların ifadesi

$$\begin{aligned} x_1 &= \rho \cosh \theta \cos \varphi \\ x_2 &= \rho \cos h \theta \sin \varphi \\ x_3 &= \rho \sinh \theta \cos \psi \\ x_4 &= \rho \sinh \theta \sin \psi \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

olmak üzere bu koordinatlar için uzunluk

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad \text{burada } g_{\mu\nu} \text{ metrik tensördür ve bu koordinatlar için } g_{\mu\nu} = (1, 1, -1, -1) \text{ olarak elde edilir.}$$

Hamiltoniyen ifadesi ise

$$H = \frac{1}{2\mu} P_A P^A \quad (3.1.12)$$

biçiminde verilir. Burada P_A dört boyutta momentum ifadesidir. Bu Hamiltoniyen ifadesi (2 + 2) boyutlu uzaydaki serbest parçacığın enerji fonksiyoneliidir.

Denklem (3.1.11)'de verilen (2 + 2) boyutta kartezyen koordinatlar için Hamiltoniyen hesaplandığında

$$H = \frac{\mu}{2} \left(P_\rho^2 + \frac{P_\theta^2}{\rho^2} - \frac{P_\psi^2}{\rho^2 \sinh^2 \theta} + \frac{P_\varphi^2}{\rho^2 \cosh^2 \theta} \right) \quad (3.1.13)$$

biçiminde elde edilir. Böylece denklem (3.1.10)'da elde edilen Hamiltoniye $\frac{1}{4}$ kütleli (2 + 2) boyutta üç boyutlu hiperboloid yüzeyinde hareket eden parçacığı tanımlamaktadır. Bu dört boyutlu uzayda sabit $R = 1$ yarıçaplı küre üzerinde hareket eden parçacığın hiperboloid yüzeyinde hareket eden karşılığıdır. Dört boyutlu serbest parçacığın Lagranjiyenini

$$L = P_R \cdot \dot{R} + P_{\hat{n}} \cdot \dot{\hat{n}} - \frac{1}{2\mu} \left(P_R^2 + \frac{P_{\hat{n}}^2}{R^2} \right) \quad (3.1.14)$$

şeklinde küresel biçimde yazarak tanımlayabiliriz. Burada $\hat{n}$ küre yüzeyini tanımlayan üç açıdan oluşan vektör ve $P_{\hat{n}}$ momentumdur. Bu parçacığın hareketinin sabit $R = 1$ yarıçaplı rotator olarak betimleyebiliriz. Rotatoru dinamik olarak betimlemek için dört boyutlu uzayda serbest hareket eden parçacığın kinetik enerjisinde ışınsal (R) yönde hareketin olmadığını $R = \text{sbt}$ olduğunu yada eşdeğeri $P_R = 0$ olduğunu varsayacağız.

Ardından bu ifadenin $\mu \rightarrow \infty$ ve $\mu R^2 \rightarrow \text{sonlu}$ limitini alırsak $\frac{P_R^2}{\mu}$ terimi sıfıra gider ve

$P_R = 0$ koşulunda Lagranjiyen

$$L = P_R \cdot \dot{R} + P_{\hat{n}} \cdot \dot{\hat{n}} - \frac{1}{2\mu R^2} P_{\hat{n}}^2 \quad (3.1.15)$$

olur. Bu ifade sabit R yarıçaplı küre yüzeyinde hareket eden parçacığın Lagranjiyenidir.

3.2. Geometrik Potansiyelin Rijit Rotatora Dönüştürülmesi

Denklem (3.1.8)'de verilen eylem ifadesini yeniden yazalım.

$$S = - \int d\lambda \left[\frac{d\varphi}{d\lambda} \sqrt{4 \left(\frac{P_0}{D} k + k(b+1)^2 \right)} + \frac{d\psi}{d\lambda} \sqrt{4 \left(\frac{P_0}{D} k + k \right)} - \frac{kb^2}{2} (\lambda_b - \lambda_a) + S' \right] \quad (3.2.1)$$

Burada S' (2 + 2) boyutlu düz uzayda hareket eden parçacığın eylemidir ve ifadesi dört vektör biçiminde yazılırsa

$$S' = \int_{\lambda_a}^{\lambda_b} d\lambda \left[P_A \frac{dx^A}{d\lambda} + P_0 \frac{dt}{d\lambda} - H \right] \quad (3.2.2)$$

$\hbar = 1$ birim sisteminde önce S' eylemi ile betimlenen $(2 + 2)$ boyutlu sistemin geçiş olasılıklarını veren propagatörü tanımlayalım.

$$K'(x_b, \lambda_b; x_a, \lambda_a) = \int Dx_A \frac{Dp_A}{(2\pi)^4} e^{i \int_{\lambda_a}^{\lambda_b} d\lambda \left[P_A \frac{dx^A}{d\lambda} - \frac{1}{2\mu} P_i P_j g^{ij} \right]} \quad (3.2.3)$$

Bu propagatör $[\lambda_b, \lambda_a]$ zaman aralığını N eşit parçaya bölerek ve aralığı $\varepsilon = \frac{\lambda_b - \lambda_a}{N}$ seçerek örgü yaklaşıklığında

$$K'(x_b, \lambda_b; x_a, \lambda_a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{k=1}^N \frac{Dp_{A_k}}{(2\pi)^4} e^{i \sum_{l=1}^N \left[P_{A_l} (x_l - x_{l-1})^4 - \frac{1}{2\mu} P_{A_l} P_{A_l} \right]} \quad (3.2.4)$$

biçiminde hesaplanabilir. Burada önce dx_j integralleri hesaplanırsa $\delta^4(P_j - P_{j-1})$ sonucu bulunur. Bu serbest parçacık sistemi için momentum korunumunu ifade eder. Ardından

$N-1$ tane dp_j integrali hesaplanarak

$$K' = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{i \left[P_A (x^b - x^a)^4 - \frac{1}{2\mu} P_A P^A \right]} \quad (3.2.5)$$

elde edilir. Benzer şekilde dt_j ve dP_{0j} integralleri yapılır ve

$$\int Dt \frac{Dp_0}{2\pi} K'_{P_0}(x_b, \lambda_b; x_a, \lambda_a) e^{i \int_{P_0} dt} = \int \frac{dP_0}{2\pi} K'_{P_0}(x_b, \lambda_b; x_a, \lambda_a) e^{i P_0 (t_b - t_a)} \quad (3.2.6)$$

elde edilir.

Denklem (3.2.6) $(2 + 3)$ boyutlu uzayda tanımlanan serbest parçacığın propagatörüdür. Bu ifadeden başlangıçtaki problemin propagatörünü türetmek için önce P_A momentumlarını ve $X_A(a)$ ve $X_A(b)$ koordinatlarını hiperboloidi tanımlayan koordinatlar cinsinden yazalım:

$(2 + 2)$ boyutlu uzayda hiperboloid yüzeyini açılar cinsinden ifade etmeden önce dört boyutlu uzayda küre yüzeyinin (φ, θ, ψ) Euler açıları cinsinden ifadesini bulalım. Bunun için Öklidyen uzaydaki (x_1, x_2, x_3, x_4) koordinatlarını şöyle ifade ederiz:

$$\begin{aligned}x_1 + ix_2 &= R \sin \theta e^{i\varphi} \\x_3 + ix_4 &= R \cos \theta e^{i\psi}\end{aligned}\quad (3.2.7)$$

O zaman ds^2 uzunluğu

$$\begin{aligned}ds^2 &= (dx_1)^2 + (dx_2)^2 + (dx_3)^2 + (dx_4)^2 \\&= (dR)^2 + R^2 \left((d\theta)^2 + \sin^2 \theta (d\varphi)^2 + \cos^2 \theta (d\psi)^2 \right)\end{aligned}\quad (3.2.8)$$

olur. R = sabit olan küre yüzeyinde ds^2 şöyle yazılabilir :

$$ds^2 \Big|_{R=sbt} = R^2 \left((d\theta)^2 + \sin^2 \theta (d\varphi)^2 + \cos^2 \theta (d\psi)^2 \right) \quad (3.2.9)$$

Kompleks (R, θ) düzleminde (R, θ) yerine $i(R, \theta)$ koymak olarak tanımlanan Wick dönme işlemi yapılırsa , o zaman

$$ds^2 \Big|_{R=sbt} = R^2 \left((d\theta)^2 - \sinh^2 \theta (d\varphi)^2 + \cosh^2 \theta (d\psi)^2 \right) \quad (3.2.10)$$

olur. Bu $(2 + 2)$ boyutlu uzayda R = sabit yüzeyleri olan hiperboloidler üzerinde iki nokta arasındaki uzaklıktır. O zaman $(2 + 2)$ boyutlu uzaydaki (x_1, x_2, x_3, x_4) koordinatları ile hiperboloid yüzeyini temsil eden (φ, θ, ψ) koordinatları arasındaki ilişki şöyle yazılabilir:

$$\begin{aligned}x_1 + ix_2 &= R \sinh \theta e^{i\varphi} \\x_3 + ix_4 &= R \cosh \theta e^{i\psi}\end{aligned}\quad (3.2.11)$$

Bu nedenle hiperboloid üzerindeki parçacığın dinamiğini incelemek için önce bütün işlemlerimizi iyi bilinen dört boyutlu küre üzerindeki parçacığın dinamiği için yapacağız. Daha sonra yukarıda betimlenen yöntemle küreden hiperboloide geçeceğiz.

3.3. Dört Boyutlu Hiperboloid Üzerindeki Serbest Parçacık İçin Propagatörün Hesaplanması

Simetri cebiri $SO(2, 2)$ olan dört boyutlu hiperboloid denklemi

$$x_1^2 + x_2^2 - x_3^2 - x_4^2 = \rho^2 > 0 \quad (3.3.1)$$

olmak üzere kurulduğu koordinatlar

$$\begin{aligned}
x_1 &= \rho \cosh \theta \cos \varphi \\
x_2 &= \rho \cos \theta \sin \varphi \\
x_3 &= \rho \sinh \theta \cos \psi \\
x_4 &= \rho \sinh \theta \sin \psi
\end{aligned} \tag{3.3.2}$$

ifadesiyle verilir. Burada $\rho \geq 0$, $0 \leq \theta < \infty$, $0 \leq \varphi < 2\pi$ ve $0 \leq \psi < 2\pi$ 'dir.

Bu koordinatlar için Laplace-Beltrami işlemcisi

$$\begin{aligned}
\Delta_{\Omega} &= -\frac{1}{\sinh \theta \cosh \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\cosh \theta \sinh \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\cosh^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{\sinh^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \psi} \\
&= -\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - (\tanh \theta + \coth \theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\cosh^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{\sinh^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2}
\end{aligned} \tag{3.3.3}$$

biçiminde elde edilir(Barut ve Racka 1977). Denklem (3.3.3) $-\hbar^2$ ile çarpılırsa bu ifade L toplam açısal momentum olmak üzere L^2 olur. Dört boyutlu Öklidiyen uzay için $g_{ij} = \delta_{ij}$ dır ve denklem (3.2.4)'de verilen K' propagatörünü $(r, \theta, \varphi, \psi)$ küresel koordinatlar cinsinden ifade edebiliriz. Kuantum mekaniğinde rijit rotator iki atomlu moleküllerin hareketini temsil eden yaklaşık bir model olarak kullanılır. Üç boyutlu uzayda küre üzerindeki parçacığın dalga fonksiyonları açısal momentum vektörü, $\vec{L}$ 'nin seçilen z eksenine yönündeki bileşeni L_z ve açısal momentumun karesi, $\vec{L}^2$ 'nin öz durumları, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ cinsinden ifade edilir. Burada θ , enlem açısı φ , boylam açısıdır.

Üç boyutta $x - y$ düzleminde dönen parçacığın Hamiltoniyeni ise

$$H = \frac{L_z^2}{2I} \tag{3.3.4}$$

ile verilir. Burada I eylemsizlik momentidir. Böylece dört boyutlu hiperboloid için Hamiltoniyen

$$H = \frac{1}{2mr^2} \left(P_{\theta}^2 + \frac{P_{\varphi}^2}{\cosh^2 \theta} - \frac{P_{\psi}^2}{\sinh^2 \theta} \right) \tag{3.3.5}$$

olarak bulunur. Hamiltonyenle Lagrangian arasındaki ilişki ;

$$L = \vec{P} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} - H(\vec{r}, \vec{p}, t) \tag{3.3.6}$$

olmak üzere (3.3.5) denkleminde verilen hamiltonyen için dört boyutlu hiperboloid üzerindeki serbest parçacığın propagatör ifadesi ;

$$K(r_b, t_b; r_a, t_a) = \int_{r_a, t_a}^{r_b, t_b} \frac{D^4 r}{(2\pi)^4} dp e^{\frac{i}{\hbar} p(r_b - r_a)}$$

$$\int_{r_a, t_a}^{r_b, t_b} \frac{D^4 r}{(2\pi)^4} dp e^{\frac{i}{\hbar} \int dt \frac{1}{2mr^2} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\cosh^2 \theta} - \frac{p_\psi^2}{\sinh^2 \theta} \right)} \quad (3.3.7)$$

olarak elde edilir.

α, β, γ Euler açıları olmak üzere koordinat sisteminin z eksenini etrafında α açısı kadar döndürüldüğünde buna karşılık gelen matris :

$$Q_\alpha = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}$$

olur. Aynı şekilde x eksenini etrafında β açısı kadar bir dönme için

$$Q_\beta = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & i \sin \frac{\beta}{2} \\ i \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

elde edilir. Son olarak yeni z eksenini etrafında koordinat sistemi γ açısı kadar döndürülürse ;

$$Q_\gamma = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\gamma}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\gamma}{2}} \end{pmatrix}$$

matrisi elde edilir. Toplam dönüşüm için ortogonal matris her üç matrisin çarpımıyla elde edilir. Şöyleki

$$D_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\alpha, \beta, \gamma) = Q_\gamma Q_\beta Q_\alpha$$

$$D_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i\frac{\gamma}{2}} & -e^{-i\frac{\alpha}{2}} \sin \frac{\beta}{2} e^{i\frac{\gamma}{2}} \\ e^{i\frac{\alpha}{2}} \sin \frac{\beta}{2} e^{-i\frac{\gamma}{2}} & e^{i\frac{\alpha}{2}} \cos \frac{\beta}{2} e^{i\frac{\gamma}{2}} \end{pmatrix} \quad (3.3.8)$$

(Goldstein 1980). Bu ifade Pauli spin matrisleri $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ cinsinden

$$D_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\left(\frac{i}{2}\right)\alpha\sigma_z} e^{-\left(\frac{i}{2}\right)\beta\sigma_y} e^{-\left(\frac{i}{2}\right)\gamma\sigma_z} \text{ biçiminde verilir. Ayrıca dönme}$$

matrislerinin indirgenmiş dönme matrisleri ($d_{m'm'}^l(\beta)$) cinsinden ifadesi

$$D_{m'm'}^l(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-im\alpha} d_{m'm'}^l(\beta) e^{-im'\gamma} \quad (3.3.9)$$

olarak elde edilir.

$$\begin{aligned}
& + D_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) D_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}*}(\alpha_{r_b}, \beta_{r_b}, \gamma_{r_b}) \\
& + D_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha_{r_b}, \beta_{r_b}, \gamma_{r_b}) D_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}*}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) \Big] \quad (3.3.11)
\end{aligned}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $D_{m,m'}^{1/2}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p)$ sabit momentumlu parçacığın, momentum uzayındaki küre üzerindeki konumunu gösteren fonksiyonlar ve $D_{m,m'}^{1/2}(\alpha_b, \beta_b, \gamma_b)$ b noktasındaki parçacığın küre üzerindeki konumunu gösteren fonksiyonlardır. m ve $m' \mp \frac{1}{2}$ değerlerini alabilir. Denklem (3.3.11)'de elde edilen $\vec{p} \cdot \vec{r}_b$ terimi gibi $\vec{p} \cdot \vec{r}_a$ terimi için de işlemler yapıp $\vec{p} \cdot (\vec{r}_b - \vec{r}_a)$ terimi üstel biçimde yazıldığında

$$\begin{aligned}
e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r}_b - \vec{r}_a)} &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}_b}{2} \right)^{n_1} \frac{1}{\Gamma(n_1+1)} D_{\frac{n_1}{2} \frac{n_1}{2}}^{\frac{n_1}{2}}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) D_{\frac{n_1}{2} \frac{n_1}{2}}^{\frac{n_1}{2}*}(\alpha_{r_b}, \beta_{r_b}, \gamma_{r_b}) \\
& \sum_{n_2=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}_b}{2} \right)^{n_2} \frac{1}{\Gamma(n_2+1)} D_{\frac{n_2}{2} \frac{n_2}{2}}^{\frac{n_2}{2}}(\alpha_{r_b}, \beta_{r_b}, \gamma_{r_b}) D_{\frac{n_2}{2} \frac{n_2}{2}}^{\frac{n_2}{2}*}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) \\
& \sum_{n_3=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}_b}{2} \right)^{n_3} \frac{1}{\Gamma(n_3+1)} D_{\frac{n_3}{2} - \frac{n_3}{2}}^{\frac{n_3}{2}}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) D_{\frac{n_3}{2} - \frac{n_3}{2}}^{\frac{n_3}{2}*}(\alpha_{r_b}, \beta_{r_b}, \gamma_{r_b}) \\
& \sum_{n_4=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}_b}{2} \right)^{n_4} \frac{1}{\Gamma(n_4+1)} D_{\frac{n_4}{2} - \frac{n_4}{2}}^{\frac{n_4}{2}}(\alpha_{r_b}, \beta_{r_b}, \gamma_{r_b}) D_{\frac{n_4}{2} - \frac{n_4}{2}}^{\frac{n_4}{2}*}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) \\
& \sum_{n_5=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}_a}{2} \right)^{n_5} \frac{1}{\Gamma(n_5+1)} D_{\frac{n_5}{2} \frac{n_5}{2}}^{\frac{n_5}{2}*}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) D_{\frac{n_5}{2} \frac{n_5}{2}}^{\frac{n_5}{2}}(\alpha_{r_a}, \beta_{r_a}, \gamma_{r_a}) \\
& \sum_{n_6=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}_a}{2} \right)^{n_6} \frac{1}{\Gamma(n_6+1)} D_{\frac{n_6}{2} \frac{n_6}{2}}^{\frac{n_6}{2}*}(\alpha_{r_a}, \beta_{r_a}, \gamma_{r_a}) D_{\frac{n_6}{2} \frac{n_6}{2}}^{\frac{n_6}{2}}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) \\
& \sum_{n_7=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}_a}{2} \right)^{n_7} \frac{1}{\Gamma(n_7+1)} D_{\frac{n_7}{2} - \frac{n_7}{2}}^{\frac{n_7}{2}*}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) D_{\frac{n_7}{2} - \frac{n_7}{2}}^{\frac{n_7}{2}}(\alpha_{r_a}, \beta_{r_a}, \gamma_{r_a}) \\
& \sum_{n_8=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}_a}{2} \right)^{n_8} \frac{1}{\Gamma(n_8+1)} D_{\frac{n_8}{2} - \frac{n_8}{2}}^{\frac{n_8}{2}*}(\alpha_{r_a}, \beta_{r_a}, \gamma_{r_a}) D_{\frac{n_8}{2} - \frac{n_8}{2}}^{\frac{n_8}{2}}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) \quad (3.3.12)
\end{aligned}$$

elde edilir. Bu ifade

$$\varphi = \frac{\alpha + \gamma}{2} \quad \theta = \frac{\beta}{2} \quad \psi = \frac{\alpha - \gamma}{2} \quad \text{için denklem (3.3.7)'de yerine konulup}$$

düzenlenirse ;

Dört boyutlu kürede üç boyutlu kürenin benzeri olarak küre üzerindeki parçacığın dalga fonksiyonları, açısal momentumun L_{12} ile gösterilen, (x_1, x_2) koordinatlarını birbirine döndüren bileşeni ve L_{34} ile gösterilen (x_3, x_4) koordinatlarını birbirine döndüren bileşen ve açısal momentumun karesi $\vec{L}^2$ 'nin öz durumları olan, $D_{mm}^l(\alpha \beta \gamma)$ cinsinden ifade edilir.

Denklem (3.3.7)'de elde edilen propagatör ifadesindeki $e^{\frac{i}{\hbar}P(r_b - r_a)}$ terimini denklem (3.3.8)'de verilen dönme matrisleri $(D_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha, \beta, \gamma))$ kullanılarak şu biçimde türetilir. Dört boyutlu kürenin koordinatları

$$\begin{aligned} x_1 &= r \cos \theta_r \cos \varphi_r \\ x_2 &= r \cos \theta_r \sin \varphi_r \\ x_3 &= r \sin \theta_r \cos \psi_r \\ x_4 &= r \sin \theta_r \sin \psi_r \end{aligned} \quad (3.3.10)$$

olmak üzere

$$\begin{aligned} x_1 + i x_2 &= r \cos \theta_r e^{i\varphi_r} \\ x_3 + i x_4 &= r \sin \theta_r e^{i\psi_r} \\ p_1 + i p_2 &= p \cos \theta_p e^{i\varphi_p} \\ p_3 + i p_4 &= p \sin \theta_p e^{i\psi_p} \end{aligned}$$

biçiminde yazılır. Böylece momentum vektörü ile konum vektörünün skaler çarpımı

$$\vec{p} \cdot \vec{x} = \frac{1}{2} [(p_1 - i p_2)(x_1 + i x_2) + c \cdot c + (p_3 - i p_4)(x_3 + i x_4) + c \cdot c] \text{ olarak bulunur.}$$

α, β ve γ Euler açıları ile dört boyutlu küre üzerindeki noktaları tanımlamak için kullanılan koordinatlar φ, θ ve ψ arasındaki ilişki şöyledir.

$$\varphi = \frac{\alpha + \gamma}{2}, \quad \theta = \frac{\beta}{2} \quad \text{ve} \quad \psi = \frac{\alpha - \gamma}{2}$$

O zaman propagatördeki $\vec{p} \cdot \vec{r}_b$ terimi

$$\begin{aligned} \vec{p} \cdot \vec{r}_b &= \frac{p r_b}{2} \left[D_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) D_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha_b, \beta_b, \gamma_b) \right. \\ &\quad \left. + D_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha_b, \beta_b, \gamma_b) D_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha_p, \beta_p, \gamma_p) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K(r_b, t_b; r_a, t_a) = & \int_{r_a, t_a}^{r_b, t_b} \frac{D^4 r}{(2\pi)^2} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} dp \sin \theta_p \cos \theta_p d\theta_p d\varphi_p d\psi_p \\
& e^{-\frac{i}{\hbar} \int \frac{1}{2m r_j r_{j-1}} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\cos^2 \theta} + \frac{p_\psi^2}{\sin^2 \theta} \right) dt} \\
& \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_5=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{pr_b}{2} \right)^{n_1} \left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{pr_a}{2} \right)^{n_5} \frac{1}{\Gamma(n_1+1) \cdot \Gamma(n_5+1)} \\
& D_{n_1/2, n_1/2}^{n_1/2}(\varphi_p + \psi_p, 2\theta_p, \varphi_p - \psi_p) D_{-n_5/2, -n_5/2}^{n_5/2}(\varphi_p + \psi_p, 2\theta_p, \varphi_p - \psi_p) \\
& D_{n_1/2, n_1/2}^{n_1/2}(\varphi_{r_b} + \psi_{r_b}, 2\theta_{r_b}, \varphi_{r_b} - \psi_{r_b}) D_{-n_5/2, -n_5/2}^{n_5/2}(\varphi_{r_a} + \psi_{r_a}, 2\theta_{r_a}, \varphi_{r_a} - \psi_{r_a}) \\
& \sum_{n_2=0}^{\infty} \sum_{n_6=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{pr_b}{2} \right)^{n_2} \left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{pr_a}{2} \right)^{n_6/2} \frac{1}{\Gamma(n_2+1) \cdot \Gamma(n_6+1)} \\
& D_{n_2/2, n_2/2}^{n_2/2}(\varphi_p + \psi_p, 2\theta_p, \varphi_p - \psi_p) D_{-n_6/2, -n_6/2}^{n_6/2}(\varphi_p + \psi_p, 2\theta_p, \varphi_p - \psi_p) \\
& D_{n_2/2, n_2/2}^{n_2/2}(\varphi_{r_b} + \psi_{r_b}, 2\theta_{r_b}, \varphi_{r_b} - \psi_{r_b}) D_{-n_6/2, -n_6/2}^{n_6/2}(\varphi_{r_a} + \psi_{r_a}, 2\theta_{r_a}, \varphi_{r_a} - \psi_{r_a}) \\
& \sum_{n_3=0}^{\infty} \sum_{n_7=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{pr_b}{2} \right)^{n_3} \left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{pr_a}{2} \right)^{n_7} \frac{1}{\Gamma(n_3+1) \cdot \Gamma(n_7+1)} \\
& D_{n_3/2, n_3/2}^{n_3/2}(\varphi_p + \psi_p, 2\theta_p, \varphi_p - \psi_p) D_{-n_7/2, n_7/2}^{n_7/2}(\varphi_p + \psi_p, 2\theta_p, \varphi_p - \psi_p) \\
& D_{n_3/2, -n_3/2}^{n_3/2}(\varphi_{r_b} + \psi_{r_b}, 2\theta_{r_b}, \varphi_{r_b} - \psi_{r_b}) D_{-n_7/2, n_7/2}^{n_7/2}(\varphi_{r_a} + \psi_{r_a}, 2\theta_{r_a}, \varphi_{r_a} - \psi_{r_a}) \\
& \sum_{n_4=0}^{\infty} \sum_{n_8=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{pr_b}{2} \right)^{n_4} \left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{pr_a}{2} \right)^{n_8} \frac{1}{\Gamma(n_4+1) \cdot \Gamma(n_8+1)} \\
& D_{n_4/2, -n_4/2}^{n_4/2}(\varphi_p + \psi_p, 2\theta_p, \varphi_p - \psi_p) D_{-n_8/2, n_8/2}^{n_8/2}(\varphi_p + \psi_p, 2\theta_p, \varphi_p - \psi_p) \\
& D_{n_4/2, -n_4/2}^{n_4/2}(\varphi_{r_b} + \psi_{r_b}, 2\theta_{r_b}, \varphi_{r_b} - \psi_{r_b}) D_{-n_8/2, n_8/2}^{n_8/2}(\varphi_{r_a} + \psi_{r_a}, 2\theta_{r_a}, \varphi_{r_a} - \psi_{r_a})
\end{aligned} \tag{3.3.13}$$

elde edilir. Denklem (3.3.13) $\theta_p, \varphi_p, \psi_p$ açıları üzerinden integre edildiğinde

$D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ 'lı terimlerin diklik bağıntısından $n_1 = n_5, n_2 = n_6, n_3 = n_7, n_4 = n_8$ olur.

Böylece bu ifade dört toplamın çarpımı biçimine dönüşür.

$$\begin{aligned}
K(r_b, t_b; r_a, t_a) &= \int_{r_a, t_a}^{r_b, t_b} \frac{D^4 r}{(2\pi)^4} \int d p e^{\frac{i}{\hbar} p(r_b - r_a)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{2m r_j r_{j-1}} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\cos^2 \theta} + \frac{p_\psi^2}{\sin^2 \theta} \right) dt} \\
&\sum_{n_1=0}^{\infty} D_{n_1/2, n_1/2}^{n_1/2}(\varphi_{r_b} + \psi_{r_b}, 2\theta_{r_b}, \varphi_{r_b} - \psi_{r_b}) D_{-n_1/2, -n_1/2}^{n_1/2}(\varphi_{r_a} + \psi_{r_a}, 2\theta_{r_a}, \varphi_{r_a} - \psi_{r_a}) \\
&\sum_{n_2=0}^{\infty} D_{n_2/2, n_2/2}^{n_2/2}(\varphi_{r_b} + \psi_{r_b}, 2\theta_{r_b}, \varphi_{r_b} - \psi_{r_b}) D_{-n_2/2, -n_2/2}^{n_2/2}(\varphi_{r_a} + \psi_{r_a}, 2\theta_{r_a}, \varphi_{r_a} - \psi_{r_a}) \\
&\sum_{n_3=0}^{\infty} D_{n_3/2, -n_3/2}^{n_3/2}(\varphi_{r_b} + \psi_{r_b}, 2\theta_{r_b}, \varphi_{r_b} - \psi_{r_b}) D_{-n_3/2, n_3/2}^{n_3/2}(\varphi_{r_a} + \psi_{r_a}, 2\theta_{r_a}, \varphi_{r_a} - \psi_{r_a}) \\
&\sum_{n_4=0}^{\infty} D_{n_4/2, -n_4/2}^{n_4/2}(\varphi_{r_b} + \psi_{r_b}, 2\theta_{r_b}, \varphi_{r_b} - \psi_{r_b}) D_{-n_4/2, n_4/2}^{n_4/2}(\varphi_{r_a} + \psi_{r_a}, 2\theta_{r_a}, \varphi_{r_a} - \psi_{r_a})
\end{aligned} \tag{3.3.14}$$

Denklem (3.3.14)'de dönüş matrisleri denklem (3.3.9)'daki indirgenmiş dönüş matrisleri $(d_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma))$ cinsinden yazılıp düzenlendiğinde :

$$\begin{aligned}
K(r_b, t_b; r_a, t_a) &= \int_{r_a, t_a}^{r_b, t_b} \frac{D^4 r}{(2\pi)^4} \int d p e^{\frac{i}{\hbar} p(r_b - r_a)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{2m r_j r_{j-1}} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\cos^2 \theta} + \frac{p_\psi^2}{\sin^2 \theta} \right) dt} \\
&\sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} e^{-i(n_1 - n_2)(\varphi_{r_b} - \varphi_{r_a})} d_{n_1/2, n_1/2}^{n_1/2}(2\theta_{r_b}) d_{n_2/2, n_2/2}^{n_2/2}(2\theta_{r_b}) \\
&\quad d_{-n_1/2, -n_1/2}^{n_1/2}(2\theta_{r_a}) d_{-n_2/2, n_2/2}^{n_2/2}(2\theta_{r_a}) \\
&\sum_{n_3=0}^{\infty} \sum_{n_4=0}^{\infty} e^{-i(n_3 - n_4)(\psi_{r_b} - \psi_{r_a})} d_{n_3/2, -n_3/2}^{n_3/2}(2\theta_{r_b}) d_{n_4/2, -n_4/2}^{n_4/2}(2\theta_{r_b}) \\
&\quad d_{-n_3/2, -n_3/2}^{n_3/2}(2\theta_{r_a}) d_{-n_4/2, n_4/2}^{n_4/2}(2\theta_{r_a})
\end{aligned} \tag{3.3.15}$$

elde edilir. $d_{mm'}^l(2\theta)$ terimleri çarpıldığında propagatör :

$$\begin{aligned}
K(r_b, t_b; r_a, t_a) &= \int_{r_a, t_a}^{r_b, t_b} \frac{D^4 r}{(2\pi)^4} \int d p e^{\frac{i}{\hbar} p(r_b - r_a)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2m r_j r_{j-1}} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\cos^2 \theta} + \frac{p_\psi^2}{\sin^2 \theta} \right) dt} \\
&\sum_{n_1 - n_2} \sum_{n_3 - n_4} e^{-i(n_1 - n_2)(\varphi_{r_b} - \varphi_{r_a})} e^{-i(n_3 - n_4)(\psi_{r_b} - \psi_{r_a})} \\
&d_{\frac{n_2 - n_1 + n_4 - n_3}{2}, \frac{n_2 - n_1}{2} - \frac{n_4 - n_3}{2}}^{\frac{n_1 + n_2 + n_3 + n_4}{2}}(2\theta r_b) d_{\frac{n_2 - n_1 + n_4 - n_3}{2}, \frac{n_2 - n_1}{2} - \frac{n_4 - n_3}{2}}^{\frac{n_1 + n_2 + n_3 + n_4}{2}}(2\theta r_a) \quad (3.3.16)
\end{aligned}$$

haline gelir. Burada $m_1 = n_2 - n_1$ $m_2 = n_4 - n_3$ olmak üzere ve $m = \frac{m_1 + m_2}{2}$

$m' = \frac{m_1 - m_2}{2}$ ve $l = \frac{n_1 + n_2 + n_3 + n_4}{2}$ biçiminde tanımlanırsa propagatör :

$$\begin{aligned}
K(r_b, t_b; r_a, t_a) &= \int_{r_a, t_a}^{r_b, t_b} \frac{D^4 r}{(2\pi)^4} \int d p e^{\frac{i}{\hbar} p(r_b - r_a)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2m r_j r_{j-1}} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\cos^2 \theta} + \frac{p_\psi^2}{\sin^2 \theta} \right) dt} \\
&\sum_{m+m'} \sum_{m-m'} e^{i(m+m')(\varphi_{r_b} - \varphi_{r_a})} e^{i(m-m')(\psi_{r_b} - \psi_{r_a})} d_{mm'}^l(2\theta r_b) d_{mm'}^l(2\theta r_a) \quad (3.3.17)
\end{aligned}$$

olur. Burada $d_{mm'}^l(2\theta r_b)$ ve $d_{mm'}^l(2\theta r_a)$ terimlerini ;

$$\begin{aligned}
d_{mm'}^l(\beta) &= \frac{(-1)^{l-m'}}{(m+m')!} \sqrt{\frac{(l+m)!(l+m')!}{(l-m)!(l-m')!}} \left(\sin \frac{1}{2} \beta \right)^{2l} \left(\cot \frac{1}{2} \beta \right)^{m+m'} \\
&{}_2F_1 \left(m-l, m'-l; m+m'+1; -\cot^2 \frac{1}{2} \beta \right) \quad (3.3.18)
\end{aligned}$$

biçiminde yazıp (Gottfried 1966) buradaki hipergeometrik fonksiyon içinde

$${}_2F_1(2\alpha, 2\alpha+1-\gamma; \gamma; z) = (1+z)^{-2\alpha} {}_2F_1\left(\alpha, \alpha+\frac{1}{2}; \gamma; \frac{4z}{(1+z)^2}\right)$$

$${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z) = (1-z)^{-\alpha} {}_2F_1\left(\alpha, \gamma-\beta; \gamma; \frac{z}{(z-1)}\right)$$

$${}_2F_1\left(\alpha, \beta; \alpha+\beta+\frac{1}{2}; \sin^2 \varphi\right) = {}_2F_1\left(2\alpha, 2\beta; \alpha+\beta+\frac{1}{2}; \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right)$$

(Gradshteyn ve Ryzhik 1958) eşitlikleri ard arda kullanıldığında

$$\begin{aligned}
d_{mm'}^l(2\theta) &= \frac{(-1)^{l-m'}}{(m+m')!} \sqrt{\frac{(l+m)!(l+m')!}{(l-m)!(l-m')!}} (\sin \theta)^{2l} (\cot \theta)^{m+m'} \\
&\quad {}_2F_1\left(m-l, m'-l; m+m'+1; -\cot^2 \theta\right) \\
&= \frac{(-1)^{l-m'}}{(m+m')!} \sqrt{\frac{(l+m)!(l+m')!}{(l-m)!(l-m')!}} (\sin \theta)^{2l} (\cot \theta)^{m+m'} \\
&\quad \left(-\frac{\sin^2 \theta}{\cos^2 \theta}\right)^{m-l} {}_2F_1\left(\frac{m-l}{2}, \frac{m+m'}{2}-l; m+m'+1; \tan^2 2\theta\right) \\
&= \frac{(-1)^{l-m'}}{(m+m')!} \sqrt{\frac{(l+m)!(l+m')!}{(l-m)!(l-m')!}} (\sin \theta)^{2l} (\cot \theta)^{m+m'} \\
&\quad (\sin^2 \theta)^{m-l} {}_2F_1\left(\frac{m-l}{2}, \frac{m+m'}{2}+l; m+m'+1; \sin^2 2\theta\right) \\
&= \frac{(-1)^{l-m'}}{(m+m')!} \sqrt{\frac{(l+m)!(l+m')!}{(l-m)!(l-m')!}} (\sin \theta)^{m-m'} (\cot \theta)^{m+m'}
\end{aligned}$$

${}_2F_1(m-l, m+m'+2l+2; m+m'+1; -\sin^2 \theta)$ şekline dönüşür. Böylece (3.3.17) propagatör ifadesi hipergeometrik fonksiyonlar cinsinden yazıldığında

$$\begin{aligned}
K(r_b, t_b; r_a, t_a) &= \int_{r_a, t_a}^{r_b, t_b} \frac{D^4 r}{(2\pi)^4} \int d p e^{i p(r_b - r_a)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2m r_l r_{l-1}} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\cos^2 \theta} + \frac{p_\psi^2}{\sin^2 \theta} \right) dt} \\
&\quad \sum_{m+m'} \sum_{m-m'} e^{i(m+m')(\varphi_b - \varphi_a)} e^{i(m-m')(\psi_b - \psi_a)} \frac{1}{(m+m')!} \left(\frac{(l+m)!(l+m')!}{(l-m)!(l-m')!} \right) (\sin \theta_b \sin \theta_a)^{m-m'} \\
&\quad (\cos \theta_b \cos \theta_a)^{m+m'} {}_2F_1(m-l, m+m'+2l+2; m+m'+1; -\sin^2 \theta_b) \\
&\quad {}_2F_1(m-l, m+m'+2l+2; m+m'+1; -\sin^2 \theta_a) \quad (3.3.19)
\end{aligned}$$

halini alır. Ayrıca $d_{mm'}^l(2\theta)$ ifadesi Jacobi polinomları cinsinden yazılırsa

$$P_n^{\alpha, \beta}(x) = \frac{\Gamma(n+\beta+1)}{n! \Gamma(\beta+1)} \left(\frac{x-1}{2} \right)^n {}_2F_1\left(-n, -n-\alpha; \beta+1; \frac{x+1}{x-1}\right) \quad (3.3.20)$$

(Gradshteyn ve Ryzhik 1958) eşitliğinde $x = \cos 2\theta$ için

$$P_n^{\alpha, \beta}(\cos 2\theta) = \frac{\Gamma(n+\beta+1)}{n! \Gamma(\beta+1)} (-1)^n (\sin^2 \theta)^n {}_2F_1(-n, -n-\alpha; \beta+1; -\cot^2 \theta) \quad (3.3.21)$$

olur. İndirgenmiş dönme matrisleri $d_{mm'}^l(\beta)$ için $\beta = 2\theta$ alınarak denklem (3.3.18) kullanılırsa ve denklem (3.3.20)'de

$$\left. \begin{array}{l} -n = m - l \\ -n - \alpha = m' - l \\ \beta + 1 = m + m' + 1 \end{array} \right\} \text{ için } \left. \begin{array}{l} \alpha = m - m' \\ \beta = m + m' \\ n = l - m \end{array} \right\} \text{ elde edilip yerine konulduğunda}$$

$$d_{mm'}^l(\beta) = (-1)^{\alpha} \sqrt{\frac{n! \Gamma(n + \alpha + \beta + 1)}{\Gamma(n + \beta + 1) \Gamma(n + \alpha + 1)}} (\cos \theta)^{\beta} (\sin \theta)^{\alpha} P_n^{\alpha, \beta}(\cos 2\theta) \quad (3.3.22)$$

elde edilir. Böylece dört boyutlu küre üzerinde serbest parçacığın propagatörü Jacobi polinomları cinsinden yazıldığında denklem (3.3.17) ifadesi ;

$$K(r_b, t_b; r_a, t_a) = \int_{r_a, t_a}^{r_b, t_b} \frac{D^4 r}{(2\pi)^4} \int d p \, e^{\frac{i}{\hbar} p(r_b - r_a)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2m r_j r_{j-1}} \left(p_{\theta}^2 + \frac{p_{\varphi}^2}{\cos^2 \theta} + \frac{p_{\psi}^2}{\sin^2 \theta} \right) dt}$$

$$\sum_{\alpha=0}^{\infty} \sum_{\beta=0}^{\infty} e^{i\beta(\varphi_b - \varphi_a)} e^{i\alpha(\psi_b - \psi_a)} \sum_{n=0}^{\infty} 2(\alpha + \beta + 2n + 1) \frac{n! \Gamma(\alpha + \beta + n + 1)}{\Gamma(\alpha + n + 1) \Gamma(\beta + n + 1)}$$

$$(\sin \theta_{r_b} \sin \theta_{r_a})^{\alpha} (\cos \theta_{r_b} \cos \theta_{r_a})^{\beta} P_n^{\alpha, \beta}(\cos 2\theta_{r_b}) P_n^{\alpha, \beta}(\cos 2\theta_{r_a}) \quad (3.3.23)$$

biçimine dönüşür. $\theta \rightarrow i\theta$ dönüşümü yapılınc bu ifade dört boyutlu hiperboloid üzerindeki serbest parçacığın propagatörüne dönüşür.

4. TARTIŞMA

Bu çalışmada, iki atomlu moleküllerin enerji spektrumu ve elektromanyetik geçişlerini betimlemek için ortaya atılan G.M.P problemi path integrali yönteminin sunduğu yeni problem çözme tekniğiyle incelendi. G.M.P simetrisi $SO(2, 2)$ olarak gösterilen dört boyutlu hiperboloid üzerindeki serbest parçacık dinamiğini vermektedir. Bu nedenle, dört boyutlu küre üzerindeki serbest parçacığın propagatörü, rijit rotator için hesaplandı. Çünkü rijit rotator kuantum mekaniğinde iki atomlu moleküllerin hareketini temsil etmek için iyi bir yaklaşıklık sunmaktadır. Elde edilen bu propagatörden dört boyutlu hiperboloid üzerindeki serbest parçacığın propagatörüne geçildi. Burada hiperboloid üzerindeki parçacığın propagatöründe tek boyutlu problemi $(2 + 2)$ boyutlu sisteme çevirmek için kullanılan açısal değişkenlerin tüm değerleri üzerinden toplama işlemi yapılarak baştaki probleme dönülmüştür. Bu şekilde türetilen enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları, daha önce grup kuramsal yöntemle elde edilen sonuçlarla karşılaştırılarak tutarlı olduğu gösterildi.

SONUÇ

Bu çalışmada, iki atomlu moleküllerin dinamiğini betimlemek için önerilen genelleştirilmiş Morse potansiyeli etkisinde hareket eden parçacığın dinamiği önce uygun bir değişken değiştirmesi ile $(2 + 2)$ boyutlu hiperboloid üzerinde hareket eden serbest parçacığın açısal hareketine dönüştürülmüştür. Bu işlem sırasında parçacığa etkiyen potansiyeli geometrik olarak betimleyebilmek için iki yeni açısal koordinat ve bir radyal koordinat ortaya atılmıştır. $(2 + 2)$ boyutlu uzayda hareket eden parçacığın kuantum dinamiği path integralleri yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Bu işlem sonucunda bulunan $(2 + 2)$ boyutlu uzaydaki olasılık genliklerinden başlangıçtaki problemdeki olasılık genliklerini türetmek için son noktanın eklenen açısal koordinatlarının tüm değerleri üzerinden integrasyon işlemi yapılmıştır. Ayrıca eklenen ışınsal koordinat için $(2 + 2)$ boyutlu uzayda sabit ışınsal koordinat değerine sahip olan rotor (dönücü) sistemine geçiş incelenmiştir. Böylece bir boyutlu fiziksel genelleştirilmiş Morse potansiyeli etkisinde hareket eden parçacığın dinamiği $(2 + 2)$ boyutlu uzayda sabit radyal yer değiştirmeye sahip parçacığın boylam açılarına bağlı olmayan dinamiğine çevrilerek problem çözülmüştür.

Bu çalışmada kullanılan tekniğin merkezi olmayan potansiyeller problemlerine uygulanabileceği düşünülmektedir. Ayrıca tezde elde edilen bulguların, molekül fiziğine olumlu katkılar sağlayacağına inanılmaktadır.

KAYNAKLAR

- BARUT, A.O and RACZKA, R. 1977. Theory of Group Representations and Applications, Polish Scientific Publishers, pp. 302 – 450, Warszawa.
- DENG, Z. H. and FAN, Y. P. 1957. *Shondong Uni. Jour.*, 7: 162 – 178.
- FEYNMAN, R. P. 1948. Space – time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.* , 20 : 367 – 87.
- FEYNMAN, R.P. 1962. Quantum Electrodynamics, W. A. Benjamin, pp. 125 – 214, New York.
- FEYNMAN, R. P. and HIBBS. A. R. 1965. Quantum Mechanics and Path Integrals, Mc-Graw Hill, p. 26, Massachusetts.
- GOLDSTEIN, H. 1980. Classical Mechanics, Addison-Wesley Pub. Co. , Reading . pp 148-155.
- GOTTFRIED, K. 1966. Quantum Mechanics Vol.1: Fundamentals. W. A. Benjamin Inc. , p. 278, New York.
- GRADSHTEYN, I. S. and RYZHIK, I. M. 1958. Table of Integrals, Series and Products, Academic Press., pp. 1035 – 1043, New York.
- KHANDEKAR, D. C. , LAWANDE, S. V. and BHAGWAT, K. V. 1993. Path Integrals Methods and Their Applications, World Scientific Publishing Co. , pp. 4 –104, Singapore.
- MESA, A. D. S., QUESNE, C. and SMIRNOW, Y. F. 1998. Generalized Morse potential: symmetry and satellite potentials, *J. Phys. A* , 31: 321 – 335.
- MORSE, P. M. 1929. Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels. *Phys. Rev.*, 34 : 57 – 70.

ÖZGEÇMİŞ

Mustafa DERNEK 1972 yılında Alanya’da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Alanya’da tamamladı. 1993 yılında girdiği Akdeniz Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü’nden 1998 yılında mezun oldu. Eylül 1999 – Temmuz 2002 yılları arasında Akdeniz Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı’nda Yüksek Lisans öğrenimini tamamladı. 1999 yılından beri aynı kurumda Araştırma Görevlisi olarak çalışmaktadır.

