

HEISENBERG METODU
İLE
SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMLERİ

125924

MESUT CANDARLI

YÜKSEK LİSANS TEZİ
(FİZİK)

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

Ocak 2002

ANKARA

125924

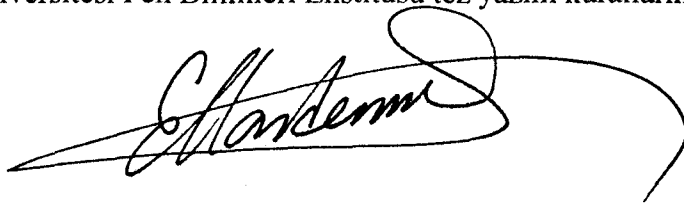
Mesut CANDARLI tarafından hazırlanan HEISENBERG METODU İLE SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMLERİ adlı bu tezin Yüksek Lisans Tezi olarak uygun olduğunu onaylarım .


Doç . Dr . Süleyman ÖZÇELİK
Tez Yöneticisi

Bu çalışma , jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir .

Başkan : Doç. Dr. Mehmet Gısi
Üye : Doç. Dr. Süleyman ÖZÇELİK
Üye : Doç. Dr. Ertuğrul Kasap
Üye :
Üye :

Bu tez , Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur .



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	iv
1 . GİRİŞ	1
2 . HEISENBERG METODU	3
2 . 1 . Whittaker Diferansiyel Denklemi	6
2 . 2 . Schrödinger Denklemi	9
2 . 3 . $b = 0$ ile Genelleme	13
2 . 3 . 1 . $\sigma = 0$ Hali	17
2 . 3 . 2 . $\sigma = 1$ Hali	18
3 . a^+a ÇARPIMI İLE OLUŞTURULAN SCHRÖDİNGER DENKLEMİ	29
3 . 1 . $b \neq 0$ ile Genelleme	31
3 . 1 . 1 . $\sigma = 0$ Hali	37
3 . 1 . 2 . $\sigma = 1$ Hali	37
3 . 1 . 3 . $\sigma = 1/2$ Hali	38
3 . 2 . Morse Potansiyeli	39
4 . SONUÇ	47
KAYNAKLAR	52
ÖZGEÇMİŞ	56

HEISENBERG METODU
İLE
SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMLERİ
(Yüksek Lisans Tezi)

Mesut CANDARLI

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Ocak 2002

ÖZET

Bu çalışmada , Heisenberg Metodu ile ortaya çıkarılan çözülebilir potansiyellerin enerji özdeğerleri incelenmiştir. Heisenberg Metodunu gerçekleştiren a ve a^+ operatörleri Harmonik Osilatörden farklı potansiyellere sahip özdeğer problemlerinin çözümünde kullanılmış, sabit Schrödinger Denklemini , Whittaker Denklemine indirgeyerek (veya hipergeometrik denkleme) ve daha sonra a^+ ile kıyaslamak suretiyle bir , çözülebilir potansiyel takımı elde edilmiştir . Yeni potansiyellere sahip izafi özdeğer problemi $(H(E_n)\Psi_n=E_n\Psi_n)$ çözümleri verilmiştir . Aynı zamanda Whittaker fonksiyonu ile ilişkili öz fonksiyonlu bu tip izafi özdeğer eşitliklerinin nasıl oluşturulacağını da göstererek sonuçları a^+ a çarpımı ile ifade edilen Hamiltonların oluşturulmasında kullanılmıştır .

Bilim Kodu : 404. 03. 01

Anahtar Kelimeler :Heisenberg Metodu, potansiyeller, Schrödinger Denklemi,
Tam çözümler

Sayfa Adedi : 56

Tez Yöneticisi : Doç. Dr. Süleyman ÖZÇELİK

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

SOLUTIONS OF THE SCHRODINGER EQUATION**BY****THE HEISENBERG METHOD****(M.Sc.Thesis)****Mesut CANDARLI****GAZI UNIVERSITY****INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY****Ocak 2002****ABSTRACT**

In this study, it was introduced the energy eigenvalues of solvable potentials appeared by the Heisenberg Method. The operators of a and a^+ were used for solving the eigenvalue of problems having different potentials from Harmonic Oscillator, and Schrödinger Equation was reduced to Whittaker Equation (or hypergeometric equation), and then these two results were argued due to get a solvable potential set by a^+a multiplication. As a result, it had been given the solution of the relativistic eigenvalue problem ($H(E_n)\Psi_n=E_n\Psi_n$) when has new potentials. In additional, it had been showed to have this kind of eigenvalue equations that is related the Whittaker function and then was used for generating the Hamiltonians were explained by a^+a multiplication.

Science Code : 404. 03. 01**Key Words : Heisenberg Algebra, potentials, Schrödinger Equation, Exact solutions****Page Number : 56****Adviser : Doç. Dr. Süleyman ÖZÇELİK**

TEŞEKKÜR

Bu çalışmayı hazırlamamda her türlü yardım ve desteğini esirgemeyen , eleştiri ve önerileri ile yol gösteren hocam ve danışmanım , Doç . Dr . Süleyman ÖZÇELİK'e bilimsel katkı ve desteklerinden dolayı ve ayrıca bu çalışmam esnasında her türlü maddi ve manevi desteğini benden esirgemeyen aileme desteklerinden dolayı teşekkür ederim .



ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge

Sayfa

Çizelge 2 . 1 . Çeşitli potansiyellerin yaklaşık enerji özdeğerleri24

Çizelge 2. 2. “k” nın farklı değerleri için kuantum durumları.....25

Çizelge 2. 3. Farklı “k” değerleri için $U(r) = Ar^k - C r^{(k-2)/2} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$

potansiyelinin enerji özdeğerleri ile kuantum durumları.....27-28

1. GİRİŞ

Relativistik olmayan Kuantum Mekaniğinde , merkezi $V(r)$ potansiyeli içindeki bir parçacığın veya indirgenmiş kütleli iki parçacıklı bir sistemin enerjileri Radyal Schrödinger Denkleminin çözümü ile belirlenir . Kuantum Mekanik problemlerin çözümünde ve fiziksel sistemlerin aydınlatılmasında , Schrödinger Deklemi başlangıçtan bu yana önemini kaybetmemiştir . Bu denklemin çözümü için çok sayıda çalışma yapılmış ve bir çok çözüm tekniği geliştirilmiştir . Bu çözüm teknikleri kısaca , yaklaşık ve tam çözümler veren metodlar olmak üzere iki grupta toplanabilir . Yaygın olarak kullanılan metodlardan bazıları ; Wentzel – Kremar – Brillouin (WKB) [1] , JWKB (Hipervirial Metodu) [2] , Süpersimetrik Kuantum Mekaniğinin kullanıldığı metodlar [3,4] , Rasyonel Fonksiyon (Pade) yaklaşımları [5] , Hellman – Feynman Teoremi ve Virial Teoremi yaklaşımları [6] , Grup Teorisi yaklaşımları [7,10] , Hill Determinantı Metodu [11] , Sürekli Kesirler Metodu [10,12] , $1/N$ Açılımları [13] , Kısmi Cebir Çözümleri [14-15] ve Path (yol) integrali hesabı [16] olarak verilebilir .

Schrödinger Denkleminin analitik çözümlerinin sadece bazı potansiyellerle sınırlı kaldığı bilinen bir gerçektir . Son zamanlarda , çözülebilir potansiyelleri çoğaltmak [3-5,11-20] ve bilinen sistemleri daha iyi tarif edebilmek için potansiyel türetme çalışmaları [21-23] alanlarında önemli adımlar atılmıştır .

Potansiyel çözüm tekniklerinde , teklif edilen metodun kolaylığı onu ön plana çıkarmaktadır . Bu yüzden diferansiyel denklemleri çözmeden , çözümün doğrudan cebirik olarak elde edilebildiği metodlar [4,10-12,14-15] daha çok tercih edilmektedir .

Bir potansiyel içindeki parçacığın karakteristik davranışını ve enerjisini belirleyebilmek için dalga fonksiyonunun tam olarak bilinmesi gerekir . Dalga fonksiyonu parçacığın konumunun ve zamanın tek değerli bir fonksiyonudur . Aynı zamanda sonlu , sürekli ve tüm uzay üzerinden integre edilebilir olmalıdır . Polinom şeklindeki potansiyeller için dalga fonksiyonları genellikle , exponansiyel bir kısım

ile seri şeklinde bir polinomun çarpımı olarak alınır [15] .

Bir sistemin tedirgin (perturbe) olmamış Hamiltoniyeni için Schrödinger Denkleminin herhangi bir yaklaşıklık kullanılmayan çözümü tam çözüm adını alır . Tam çözülebilen potansiyellere Coulomb , Harmonik Salıncı , Morse , Eckart ve Pöschl – Teller potansiyelleri örnek olarak verilebilir [16] . Schrödinger Denkleminin yaklaşık çözüm metodlarından bazıları pertürbasyon ve varyasyon metodlarının baz alınmasıyla elde edilen metodlardır . Bu metodlardan bazıları değişen parametrelere göre denge prensipleri [17] , renormalize pertürbasyon serileri [18] , hipervirial JWKB metodu [19] , faz integrali metodu [22] olarak sıralanabilir .

Bu çalışmada incelenen Heisenberg Metodu [8] , Schrödinger Denklemini , Whittaker Denklemine indirgeyerek artırma-eksiltme operatörlerinin çarpımı (a^+a) ile kıyaslamak suretiyle bir çözülebilir potansiyeller üretme yöntemini izlemektedir . Böylece bu yeni potansiyellere sahip özdeğer problemlerinin çözümleri elde edilmektedir . Metod 3-boyutlu Harmonik Osilatör, bir boyutlu Morse potansiyeli ile üç boyutlu Coulomb potansiyellerine uygulandı . Bu potansiyeller için tam enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlar , sadece basit cebirik işlemlerle elde edilebilmektedir .

İkinci bölümde Heisenberg Metodu anlatılıp , a ve a^+ operatörleri oluşturuldu. Whittaker Diferansiyel Denklemini , Schrödinger Denklemini çeşitli dönüşümlerle elde edildi ve $b=0$ için yapılan genelleme $\sigma=0,1$ halleri için incelenmiştir .

Üçüncü bölümde a^+a çarpımı ile oluşturulan Schrödinger Denklemini , $b \neq 0$ için yapılan genelleme , $\sigma=0,1,1/2$ halleri için incelenmiş olup , son olarak $\ell=0$ için Morse potansiyelinin enerji özdeğerleri bulunmuştur . Çalışma SONUÇ bölümü ile bitirilmiştir .

2 . HEISENBERG METODU

Bu bölümde Heisenberg Metodunun amaçlarımız için yararlı olan birkaç özelliği ile ilgileneceğiz . $\{\Psi_n\}$ 'nin

$$a^+ a \Psi_n(x) = \lambda \Psi_n(x) , \quad x \geq 0, \quad (2.1)$$

ifadesi ile tanımlanan bir fonksiyon olduğunu farz edelim. Ayrıca

$$(\Psi_n(x), \Psi_m(x)) = \int_0^\infty \Psi_n^*(x) \cdot \Psi_m(x) dx = \delta_{nm} , \quad n, m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

'dir. Burada lineer diferansiyel operatörler a, a^+

$$[a, a^+] = 1 , \quad (2.3)$$

$$a \Psi_0 = 0, \quad (2.4)$$

şartlarını sağlar.

$$x = f(q) , \quad q \in [q_0, q_1] , \quad (2.5)$$

Değişken değişimi yapılırsa ;(burada f, q 'nın verilen bir fonksiyonudur) skaler çarpım

$$(\Psi_n(x), \Psi_m(x)) = \int_{q_0}^{q_1} \Psi_n^*(x) \cdot \Psi_m(x) f'(q) dq , \quad (2.6)$$

formuna dönüşür. Burada $'$ ise q 'ya göre diferansiyeli ifade eder. Operatör a için genel form

$$a = g(q) \frac{d}{dq} + W(q) , \quad (2.7)$$

olarak alınır. Burada g ve W , q 'nın iki rastgele fonksiyonudur. Bu yüzden , Denk(2.6) tarafından belirlenen operatör a^+

$$a^+ = -g(q) \frac{d}{dq} - \frac{[f'(q)g(q)]'}{f'} + W(q) , \quad (2.8)$$

şekline dönüşür. Burada

$$f'(q) g(q) \Psi_n^*(q) \Psi_m(q) \Big|_{q=q_0}^{q=q_1} = 0, \quad (2.9)$$

koşulu sağlanmalıdır. Denk(2.3) ile verilen komitasyon bağıntısına bir Ψ fonksiyonu uygulayıp $W(q)$ ifadesini elde etmeye çalışalım

$$a = g(q) \frac{d}{dq} + W(q) ,$$

$$a^+ = -g(q) \frac{d}{dq} - \frac{[f'g]'}{f'} + W(q) ,$$

$a\Psi$ ve $a^+\Psi$

$$a\Psi = g \frac{d\Psi}{dq} + W\Psi ,$$

$$a^+\Psi = -g \frac{d\Psi}{dq} - \frac{[f'g]'}{f'} \Psi + W\Psi ,$$

olur. $[a, a^+]\Psi = a a^+\Psi - a^+ a\Psi$ ifadesine bakalım :

$$aa^+\Psi = \left\{ g \frac{d}{dq} + W \right\} \cdot \left\{ -g \frac{d\Psi}{dq} - \frac{[f'g]'}{f'} \Psi + W\Psi \right\}$$

Bu ifade açılırsa

$$a^+a\Psi = -g \left\{ g' \frac{d\Psi}{dq} + g \frac{d^2\Psi}{dq^2} \right\} - g \left\{ \frac{dW}{dq} \Psi + W \frac{d\Psi}{dq} \right\} - \frac{[f'g]'}{f'} \cdot g \frac{d\Psi}{dq}$$

$$- \frac{[f'g]'}{f'} W\Psi + Wg \frac{d\Psi}{dq} + W^2\Psi$$

ve gerekli sadeleştirmeler yapılırsa ;

$$aa^+\Psi - a^+a\Psi = -g \Psi \left(\frac{[f'g]'}{f'} \right)' + g \Psi \frac{dW}{dq} + g \Psi \frac{dW}{dq} = 1 \cdot \Psi ,$$

elde edilir. Denk(2.3) ile verilen sıradığıştirme özelliği kullanılırsa ;

$$2. \frac{dW}{dq} - [(f'g)'/f']' = 1/g$$

elde edilir. Her iki tarafı 1/2 ile çarpıp dq'ya göre integrali alınır ;

$$\int (dW/dq). dq = \int (dq/2g) + (1/2) \int (d/dq) [(f'g)'/f'] . dq$$

$$W(q) = \int^q (dz/2g(z)) + (1/2) [(f'g)'/f'] + b , \quad b \in \mathbb{R}, \quad (2.10)$$

bulunur. g ve W rastgele iki fonksiyondur.

$$W(q) = (1/2) [(\int dq/g(q)) + 2b] + (1/2)(f'g)'/f'$$

W(q)'yı a ve a⁺ da yerlerine yazarsak ;

$$a = g(q) \frac{d}{dq} + (1/2) [(\int dq/g(q)) + 2b] + (1/2)(f'g)'/f' , \quad (2.11)$$

$$a^+ = - g(q) \frac{d}{dq} + (1/2) [(\int dq/g(q)) + 2b] - (1/2)(f'g)'/f' , \quad (2.12)$$

a ve a⁺ operatörlerinin son hali bu şekilde olur. Denk(2.4), Denk(2.9), Denk(2.11), Denk(2.12)'yi Denk(2.1) ile birleştirerek

$$\Psi_{2n+1} = (f'g)^{-1/2} \cdot H_{2n+1} \left[(1/2)^{1/2} [(\int dq/g(q)) + 2b] \right] \text{Exp} \left[(-1/4) [(\int dq/g(q)) + 2b]^2 \right]_{n=0,1,2,3,\dots}, \quad (2.13)$$

Burada

$$[(\int dq/g(q)) + 2b] \geq 0, \quad (2.14)$$

ve

$$\lambda = 2n+1, \quad (2.15)$$

çözümleri elde edilir (Normalizasyon sabiti olmaksızın). Çift özdeğerler , çift dereceli Hermit polinomları H_{2n} , Denk(2.9)'dan dolayı dahil edilmemiştir. Denk(2.10) ve Denk(2.15)'ten yararlanarak Denk(2.1)'in genel formu :

$$a^+ a \Psi_{2n+1} = \left\{ -g \frac{d}{dq} + (1/2) [(\int dq/g) + 2b] - (1/2) (f'g)'/f' \right\} \left\{ g \frac{d\Psi_{2n+1}}{dq} + (1/2) [(\int dq/g) + 2b] \cdot \Psi_{2n+1} + (1/2) (f'g)'/f' \cdot \Psi_{2n+1} \right\}$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifade düzenlenir ve Denk(2.14) dikkate alınarak

$$\left\{ -g^2 \frac{d^2}{dq^2} - g [g' + (f'g)'/f'] \frac{d}{dq} + (1/4) [(\int dq/g) + 2b]^2 - (1/4) [(f'g)'/f']^2 - (g/2) [(f'g)'/f'] \right\} \cdot \Psi_{2n+1} = (2n+1) \Psi_{2n+1}, \quad (2.16)$$

elde edilir. Buda Whittaker Denklemi ile ilgili olarak önemli bir rol oynar.

2. 1. Whittaker Diferansiyel Denklemi

Şu anda bu çalışmanın merkezi problemine gelmiş bulunmaktayız. Denk(2.1) yukarıda belirtilen tüm sonuçlar ile bir model form olan Denk(2.16) halinde yazılmıştır. Bu modelin diğer çözülebilir diferansiyel denklemlerle kıyaslanabileceğini farz ederiz. Sorun : hangi diferansiyel denklemleri seçmemiz

gerektiği ve kıyaslamanın ne tip bir bağımlılık doğuracağıdır. Bu bölümde göreceğimiz gibi , bu karşılaştırma Whittaker Diferansiyel Denklemi ile en kolay bir şekilde yapılabilir. Bu yüzden Whittaker Denklemi ile başlarız.

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\lambda}{x} + \frac{(1/4)-\mu^2}{x^2} - \frac{1}{4} \right\} \cdot y(x) = 0, \quad (2.17)$$

Burada iki lineer bağımsız çözüm

$$M_{\lambda, \mu}(x) = x^{\mu+1/2} \cdot \text{Exp}(-x/2) \cdot {}_1F_1(\mu-\lambda+(1/2), 2\mu+1; x), \quad (2.18)$$

$$M_{\lambda, -\mu}(x) = x^{-\mu+1/2} \cdot \text{Exp}(-x/2) \cdot {}_1F_1(-\mu-\lambda+(1/2), -2\mu+1; x), \quad (2.19)$$

ifadeleri ile verilir ve ${}_1F_1$ hipergeometrik fonksiyondur.

$$x = 2\mu \left[\left(\int dq/g(q) \right) + 2b \right]^2, \quad q \in [q_0, q_1], \quad \mu > 0, \quad (2.20)$$

Değişkenin değişimi altında

$$y(q) = (f'g)^{1/2} \left[\left(\int dq/g(q) \right) + 2b \right]^{1/2} \cdot \Phi(q), \quad (2.21)$$

denklemi dikkate alınarak Whittaker Denklemini elde etmeye çalışalım. $y(x)$ 'in ikinci türevi hesaplanıp , Denk(2.17)'de yerine yazılırsa :

$$\frac{g \cdot g'}{32\mu^2} (f'g)^{-1/2} (f'g)' \cdot \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right]^{-3/2} \Phi(q) - \frac{g^2}{64\mu^2} (f'g)^{-3/2} \cdot [(f'g)']^2 \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right]^{-3/2} \Phi(q) +$$

$$\frac{g^2}{32\mu^2} (f'g)^{-1/2} [(f'g)']' \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right]^{-3/2} \Phi(q) + \frac{g^2}{16\mu^2} (f'g)^{-1/2} (f'g)' \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right]^{-3/2} (d\Phi/dq) +$$

$$+ \frac{(f'g)^{1/2}}{64\mu^2} \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right]^{-7/2} \Phi(q) + \frac{g \cdot g'}{16\mu^2} (f'g)^{1/2} \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right]^{-3/2} (d\Phi/dq) +$$

$$\frac{g^2}{16\mu^2} (f'g)^{1/2} [(\int dq/g)+2b]^{-3/2} \frac{d^2\Phi}{dq^2} + \frac{\lambda}{2\mu} (f'g)^{1/2} [(\int dq/g)+2b]^{-3/2} \Phi(q) -$$

$$(1/4)(f'g)^{1/2} [(\int dq/g)+2b]^{-7/2} \Phi(q) - (1/4)(f'g)^{1/2} [(\int dq/g)+2b]^{1/2} \Phi(q) = 0,$$

elde edilir. Şimdi bu diferansiyel denklemin her iki tarafını

$$2\mu (f'g)^{-1/2} [(\int dq/g)+2b]^{3/2}$$

ile çarpıp, denklemin her iki tarafına $\mu\Phi$ ilave edip sonrada $(1/2)$, parantezine alırsak;

$$(1/2) \left\{ (1/4\mu) g^2 \frac{d^2}{dq^2} + (g/4\mu) [g' + (f'g)'/f'] \frac{d}{dq} - \mu [(\int dq/g)+2b]^2 - (1/4)[4\mu-1/4\mu] \cdot \right.$$

$$\left. [(\int dq/g)+2b]^{-2} - (1/4)(1/4\mu) [(f'g)'/f']^2 + (1/2)(1/4\mu) \{ [g(f'g)']'/f' \} + 2\mu \right\} \cdot \Phi(q)$$

$$= -(\lambda-\mu) \Phi(q)$$

şeklinde olur. Son olarak denklemin sol tarafına

$(2/4)(1/4\mu) [(f'g)'/f']^2 \cdot \Phi(q)$, terimi eklenip çıkartılırsa ve eksi ile çarparsak ;

$$(1/2) \left\{ (-1/4\mu) g^2 \frac{d^2}{dq^2} - (1/4\mu) g [g' + (f'g)'/f'] \frac{d}{dq} + \mu [(\int dq/g)+2b]^2 + (1/4)(4\mu-1/4\mu) \cdot \right.$$

$$\left. [(\int dq/g)+2b]^{-2} - (1/4)(1/4\mu) [(f'g)'/f']^2 - (1/2)(1/4\mu) g \cdot [(f'g)'/f']' - 2\mu \right\} \Phi(q) = (\lambda-\mu) \Phi(q),$$

(2.22)

şekline dönüşür. Sembolik olarak şu ifade yazılabilir.

$$l.h.s (\mu) = r.h.s (\lambda-\mu) , \quad (2.23)$$

sol taraftaki (μ) = sağ taraftaki $(\lambda-\mu)$,

parametrelerin yerdeğiştirmesi ile

$$\mu \rightarrow \mu - \kappa = 1/4, \quad \lambda \rightarrow \lambda - \kappa, \quad (2.24)$$

$$\lambda - \mu \rightarrow \lambda - \kappa - \mu + \kappa = \lambda - \mu, \quad (2.25)$$

yazılabilir. $\mu=1/4$ seçilerek Denk(2.22), Denk(2.16) ile karşılaştırılırsa

$$\lambda - \mu = (1/2)(2n+1) = n + (1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.26)$$

olur. Bu ise Denk(2.16)'nın Whittaker Denkleminin çözümünde kullanılabileceği fikri doğrulanmış olur. Denk(2.18)'de

$$M_{\lambda, \mu}(x) \rightarrow y(q) = (f'g)^{1/2} [(\int dq/g) + 2b]^{1/2} \cdot \Phi(q),$$

$$x \rightarrow [(\int dq/g) + 2b]^2$$

alınıp yerlerine yazılırsa ;

$$\Phi(q) = (f'g)^{-1/2} [(\int dq/g) + 2b]^{2\mu+1/2} \cdot \text{Exp}\{-\mu[(\int dq/g) + 2b]^2\} {}_1F_1(-n, 2\mu+1, 2\mu[(\int dq/g) + 2b]^2) \quad (2.27)$$

olur. Bu bölümde elde edilen sonuçlar çeşitli potansiyeller için Schrödinger Denkleminin çözümlerinin araştırılmasında kullanılabilir.

2. 2. Schrödinger Denklemi

$U(r)$ potansiyeli içerisinde hareket eden Kuantum Mekaniksel bir parçacık için Schrödinger Denklemi

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + U(r) - E \right\} \cdot \Psi(r) = 0, \quad (2.28)$$

formunda yazılabilir. Bu denklem

$$r = \bar{f}(q), \quad \Psi(q) = (\bar{f}' \cdot f' \cdot g^2)^{1/2} \cdot \Phi(q), \quad (2.29)$$

değişken ve fonksiyon değişimleri dikkate alınarak :

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{1}{(\bar{f}')^2} \left\{ \frac{d^2}{dq^2} - \frac{\bar{f}''}{\bar{f}'} \frac{d}{dq} \right\}$$

olmak üzere $\frac{\bar{f}''}{\bar{f}'}$ $\frac{d\Psi}{dq}$ ile $\frac{d^2\Psi}{dq^2}$ terimlerini hesaplayalım:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\bar{f}''}{\bar{f}'} \right) \frac{d\Psi}{dq} &= (g/2) (\bar{f}'')^2 [f'/(f')]^3]^{1/2} \Phi + (g/2) \bar{f}'' \cdot f'' \cdot [1/\bar{f}' \cdot f']^{1/2} \cdot \Phi + g' \cdot \bar{f}'' \cdot (f'/\bar{f}')^{1/2} \Phi \\ &+ g \cdot \bar{f}'' \cdot (f'/\bar{f}')^{1/2} \cdot \frac{d\Phi}{dq} \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi}{dq^2} &= g \cdot (\bar{f}' f')^{1/2} \cdot \frac{d^2\Phi}{dq^2} + [2g' \cdot (\bar{f}' f')^{1/2} + (g/2) \bar{f}'' (f'/\bar{f}')^{1/2} + (g/2) f'' \cdot (f'/\bar{f}')^{1/2} + \\ & (g/2) (\bar{f}' f')^{-1/2} (\bar{f}' f')'] \frac{d\Phi}{dq} + [(g'/2) \cdot \bar{f}'' (f'/\bar{f}')^{1/2} + (g/2) \bar{f}''' \cdot (f'/\bar{f}')^{1/2} + \\ & (g/4) \bar{f}'' \cdot (f'/\bar{f}')^{-1/2} \cdot (f'/\bar{f}')' + (g/2) \cdot f'' \cdot (f'/\bar{f}')^{1/2} + (g/2) f''' \cdot (f'/\bar{f}')^{1/2} + \\ & (g/4) \cdot f'' \cdot (f'/\bar{f}')^{-1/2} \cdot (f'/\bar{f}')' + g'' \cdot (\bar{f}' f')^{1/2} + (g'/2) (\bar{f}' f')^{-1/2} \cdot (f' f')'] \Phi \end{aligned}$$

Bu iki terimi Denk(2.28)'de yerine yazar , daha sonrada düzenlenirse , Schrödinger Denkleminin yeni formu:

$$\begin{aligned} -g^2 \cdot \frac{d^2\Phi}{dq^2} - g \{ g(f'''/f') + 2g' \} \cdot \frac{d\Phi}{dq} + \{ (3g^2/4)(\bar{f}''/\bar{f}')^2 - g g' \cdot (f'''/f') - (g^2/2)(\bar{f}'''/\bar{f}') - \\ (g^2/2)(f'''/f') + (g^2/4) (f'''/f')^2 - g g'' \} \cdot \Phi(q) + (\bar{f}' \cdot g)^2 \cdot (U-E) \cdot \Phi(q) = 0 , \end{aligned}$$

olarak elde edilir. Buradaki terimleri

$$2 \cdot g' + g (f'''/f') = g' + [(f'g)'/f'] ,$$

$$-g g'' = -(1/2)g g'' - (1/2)g g'' ,$$

$$-g g' (f'''/f') = -(1/2)g g' (f'''/f') - (1/2)g g' (f'''/f') ,$$

şeklinde yazar ve

$$(g^2/4)(f'''/f')^2 - (g^2/4)(f'''/f')^2 - (1/4)(g')^2 + (1/4)(g')^2 ,$$

terimini ilave edersek ;

$$\begin{aligned} & -g^2 \frac{d^2 \Phi}{dq^2} - g \{ g' + [(f' g)'/f'] \} \cdot \frac{d\Phi}{dq} - (1/2)g g'' \Phi + (1/4)(g')^2 \Phi - (1/2)g[(f' g)'/f'] \Phi \\ & + \{ (3g^2/4)(\bar{f}''/\bar{f}')^2 - (1/2)g^2(\bar{f}'''/\bar{f}') - (1/4)g^2(\bar{f}''/\bar{f}')^2 - (1/4)(g')^2 - (1/2)g g'(\bar{f}'''/\bar{f}') \} \Phi + \\ & + (\bar{f}' \cdot g)^2 \cdot (U-E) \cdot \Phi = 0 \text{ olur .} \end{aligned}$$

Diferansiyel Denklemdaki bazı terimleri yeniden düzenlersek :

$$-(1/4)g^2(\bar{f}''/\bar{f}')^2 - (1/4)(g')^2 - (1/2)g g'(\bar{f}'''/\bar{f}') = -(1/4)[(f' g)'/f']^2 ,$$

$$(3g^2/4)(\bar{f}''/\bar{f}')^2 = (1/4)g^2(\bar{f}''/\bar{f}')^2 + (2/4)g^2(\bar{f}''/\bar{f}')^2 ,$$

$$-(1/2)g^2(\bar{f}'''/\bar{f}') + (2/4)g^2(\bar{f}''/\bar{f}')^2 = -(1/2)g^2(\bar{f}''/\bar{f}')' ,$$

şeklinde yazar ve denklemin son halini aşağıdaki gibi elde ederiz .

$$\left\{ -g^2 \frac{d^2}{dq^2} - g \{ g' + [(f' g)'/f'] \} \cdot \frac{d}{dq} - (1/2)g g'' + (1/4)(g')^2 - (1/2)g[(f' g)'/f']' - \right. \\ \left. (1/4)[(f' g)'/f']^2 + (1/4)g^2[\bar{f}''/\bar{f}']^2 - (1/2)g^2(\bar{f}''/\bar{f}')' + (\bar{f}' \cdot g)^2(U-E) \right\} \cdot \Phi(q) = 0 , \quad (2.30)$$

Hesaplamaları basitleştirmek için ;

$$\frac{(f' \cdot g)'}{f'} = -g' , \quad (2.31)$$

$$\bar{f}''/\bar{f}' = \text{const.} , \quad (2.32)$$

$$(g')^2 = g g'', \quad (2.33)$$

şeklinde alabiliriz. Bunları kullanarak da Denk(2.30) ve Denk(2.22)'nin daha basit formunu elde edebiliriz, bunları yerlerine yazarsak ;

$\Phi(q) \neq 0$, olacağından

$$(\bar{f}'g)^2 \cdot [U(\bar{f}(q)) - E] = g^2 \frac{d^2}{dq^2} - (1/4) g^2 (\text{const.})^2,$$

olur. Denk(2.31), Denk(2.32) ve Denk(2.33) ifadelerini Denk(2.22) ile verilen Whittaker Denkleminde yerine koyup sonrada 8μ ile her iki tarafı çarparsak ;

$$-g^2 \cdot \frac{d^2}{dq^2} = -4\mu^2 [(\int dq/g) + 2b]^2 - \mu [4\mu - (1/4)\mu] \cdot [(\int dq/g) + 2b]^{-2} + 8\lambda\mu - (1/4)(g')^2,$$

olur. Bu terimi yukarıdaki ifadede yerine yazarsak

$$(\bar{f}'g)^2 \cdot [U(\bar{f}(q)) - E] = (\dots\dots\dots)[(\int dq/g) + 2b]^2 + (\dots\dots\dots)[(\int dq/g) + 2b]^{-2} + (\text{sabit}),$$

$$(\bar{f}'g)^2 \cdot [U(\bar{f}(q)) - E] = [(\int dq/g) + 2b]^2 + [(\int dq/g) + 2b]^{-2} + \text{const.}, \quad (2.34)$$

ifadesi yaklaşık olarak elde edilir. Denk(2.27), Denk(2.29)'da yerine yazılırsa dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi olur.

$$\Psi(q) = (f'g)^{1/2} [(\int dq/g) + 2b]^{2\mu + (1/2)} \text{Exp}\{-\mu[(\int dq/g) + 2b]^2\} {}_1F_1(-n, 2\mu + 1, 2\mu[(\int dq/g) + 2b]^2) \quad (2.35)$$

olur. Denk(2.34)'de $(\bar{f}'g)^2$ katsayısının ;

$$(\bar{f}'g)^2 = \text{const.}, \quad (2.36)$$

$$(\bar{f}'g)^2 = \text{const.} [(\int dq/g) + 2b]^2, \quad (2.37)$$

$$(\bar{f}'g)^2 = \text{const.} [(\int dq/g) + 2b]^{-2}, \quad (2.38)$$

şeklindeki seçimleri sırasıyla , 3- boyutlu Harmonik Osilatör ,Coulomb ve 1- boyutlu Morse potansiyelleri için Schrödinger Denklemine dönüşür .

2. 3. $b = 0$ ile Genelleme

Denk(2.34)'den çıkan tartışmayı genelleştirmek amacıyla

$$E = 0 , \quad (2.39)$$

seçelim. Bu durum sıfır enerjili Schrödinger Denklemini anlamına gelir. Bununla birlikte Denk(2.26) dikkate alınarak , bir özdeğere sahip Schrödinger Denkleminin çözümleri Denk(2.35) formunda ise potansiyel parametreleri arasında bağımlılık elde edebiliriz. Bu genelleme özel durumlar olarak Denk(2.36) , Denk(2.38)'ide içermelidir. Bu ve sonraki bölümde hesaplamaları basitleştirmek için

$$b = 0 , \quad (2.40)$$

alınabilir. Genellemeyi şu formda seçmek

$$(f'.g)^2 \sim (\int dq/g)^{2\sigma} , \quad \sigma \neq -1 , \quad (2.41)$$

Denk(2.38)'in dikkate aldığımız konuların dışında bırakıldığı anlamına gelir (Bu durum ayrı bir bölümde ele alınacaktır). Denk(2.14), Denk(2.34), Denk(2.39), Denk(2.40) ve Denk(2.41) birlikte değerlendirilerek aşağıdaki ifadeyi elde ederiz.

$$\bar{f} = (\int dq/g)^{\sigma+1} , \quad \bar{f} \geq 0 , \quad (2.42)$$

$b = 0$, $E = 0$ alıp Denk(2.42)'yi Denk(2.34)'de yerine yazarsak

$$U(\bar{f}) = (\int dq/g)^{2-2\sigma} + (\int dq/g)^{-2-2\sigma} + (\int dq/g)^{-2\sigma} ,$$

buluruz. Denk(2.42) dikkate alınırsa

$$U(\bar{f}) = (\bar{f})^{2(1-\sigma)/1+\sigma} + (\bar{f})^{-2} + (\bar{f})^{-2\sigma/\sigma+1} , \quad (2.43)$$

olur ve böylece

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A \cdot r^{2(1-\sigma)/1+\sigma} + B r^{-2} - C r^{-2\sigma/1+\sigma} \right\} \Psi(r) = 0, \quad (2.44)$$

şeklindeki Schrödinger Denklemine dönüşür. Bu denklem ise

$$r = \alpha \text{Exp}[(\sigma+1)q], \Psi(q) = \text{Exp}[(1/2)(\sigma+1)q] \cdot \Phi(q), \quad (2.45)$$

$\alpha = \text{const.}$, alınarak Denk(2.22) ile verilen Whittaker Denklemine indirgenebilir. $A>0, B\geq 0, C>0$ ve

$$B = \frac{\hbar^2}{2m} \ell(\ell+1), \quad (2.46)$$

olmak üzere α katsayısını hesaplayalım :

$$-\frac{2mA}{\hbar^2} = a_1, \quad -\frac{2mB}{\hbar^2} = a_2, \quad \frac{2mC}{\hbar^2} = a_3,$$

alınırsa Denk(2.44)

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} + a_1 r^{2(1-\sigma)/1+\sigma} \cdot \Psi(r) + a_2 r^{-2} \cdot \Psi(r) + a_3 \cdot r^{-2\sigma/1+\sigma} \cdot \Psi(r) = 0, \quad (2.47)$$

şeklinde yazılabilir. Denk(2.45)'deki değişken değişirmesi yapılırsa ;

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} = \frac{\text{Exp}[(-3/2)(\sigma+1)q]}{\alpha^2} \left\{ (-1/4) \cdot \Phi + \frac{1}{(\sigma+1)^2} \frac{d^2\Phi}{dq^2} \right\}$$

bulunur, diğer terimlerde yeniden düzenlenir ve her iki tarafı

$(\sigma+1)^2 \cdot \alpha^2 \cdot \text{Exp}[(3/2)(\sigma+1)q]$ ile çarparsak ve a_2 yerine $-\ell(\ell+1)$ yazılırsa

$$\Phi''(q) + \{-(\sigma+1)^2[\ell+(1/2)]^2 + a_1\alpha^{4/1+\sigma}(\sigma+1)^2\text{Exp}(4q) + a_3\alpha^{2/1+\sigma}(\sigma+1)^2\text{Exp}(2q)\} \Phi(q) = 0,$$

(2.48)

olur. Burada

$$(\sigma+1)^2.[\ell+(1/2)]^2 = 4\mu^2$$

ve

$$-\frac{2mA}{\hbar^2} \alpha^{4/1+\sigma} .(\sigma+1)^2 = \varepsilon_1, \quad \frac{2mC}{\hbar^2} \alpha^{2/1+\sigma} .(\sigma+1)^2 = \varepsilon_2, \quad (2.49)$$

olmak üzere diferansiyel denklem yeniden düzenlenirse

$$\Phi''(q) + \{ -4\mu^2 + \varepsilon_1 \text{Exp}(4q) + \varepsilon_2 \text{Exp}(2q) \} \Phi(q) = 0, \quad (2.50)$$

şekline dönüşür. Önce ;

$$S = \text{Exp}(2q), \quad (2.51)$$

sonra

$$z = 2.d.S, \quad (2.52)$$

dönüşümleri uygulanırsa ve

$$d^2 = -\frac{\varepsilon_1}{4}, \quad b^2 = 4\mu^2, \quad N = \frac{\varepsilon_2}{4}, \quad (2.52)$$

alınırsa denklem daha sade olarak

$$\Phi''(z) + (1/z) \Phi'(z) + \{ (-b^2/4z^2) - (1/4) + (N/2.d.z) \} .\Phi(z) = 0, \quad (2.53)$$

şekline dönüşür. Bu denklemi $\lim_{z \rightarrow \infty}$ da incelersek

$$\Phi''(z) - (1/4) \Phi(z) = 0,$$

olur. Bu diferansiyel denklemin çözümü

$$\Phi(z) = \text{Exp}[\pm z/2] \text{ dir.}$$

Geçerli çözüm:

$$\Phi(z) = \text{Exp}[-z/2] \text{ olarak alınabilir.}$$

$\Phi(z) = \text{Exp}(-z/2). L(z)$, şeklinde seçersek diferansiyel denklem

$$L''(z) + L'(z). [(1/z) - 1] + [(N/2.d.z) - (1/2z) - (b^2/4z^2)].L(z) = 0, \quad (2.54)$$

şeklinde yazılabilir.

$$L(z) = z^S \cdot F(z) , \text{ alınır}$$

$$z^{S+2} \cdot F''(z) + \{ (2s+1) \cdot z^{S+1} - z^{S+2} \} \cdot F'(z) + z^{S+1} \cdot \{ (N/2d) - s - (1/2) \} \cdot F(z) + z^S \{ s(s-1) + s - (b^2/4) \} F(z) = 0 ,$$

olur.

$$s(s-1) + s - (b^2/4) = 0 \rightarrow s_{1,2} = \pm b/2 \text{ 'dir.}$$

Geçerli çözüm ;

$$+ b/2 \text{ 'dir.}$$

Burada denklemin özfonksiyonu ise

$$\Phi(z) = \text{Exp}(-z/2) \cdot z^{b/2} \cdot F(z) \text{ olur.}$$

$\Phi(z)$, fonksiyonunun türevleri alınıp , denklem düzenlenirse ;

$$F''(z) + [(b+1/z) - 1] \cdot F'(z) + V/z \cdot F(z) = 0 , \quad (2.55)$$

diferansiyel denkleminde ulaşırız, burada

$$V = (N/2d) - [(b+1)/2] ,$$

olarak alınmıştır. ε_1 , ifadesi “d “ de yerine yazılırsa

$$2d = (2mA/h^2)^{1/2} \cdot \alpha^{2/1+\sigma} \cdot (\sigma+1) \text{ olur.}$$

ε_2 ifadesi yerine yazılırsa N terimi hesaplanır.

$$N = (mC/2h^2) \cdot \alpha^{2/1+\sigma} \cdot (\sigma+1)^2 , \quad (2.56)$$

2d, N ve b terimleri kullanılarak V hesaplanırsa ve $V=n$ için denklem

$$n + (1/2) + \mu = [(2m)^{1/2} / h] \cdot (C / A^{1/2}) \cdot [(\sigma+1)/4] , \quad (2.57)$$

haline dönüşür.

$$\mu = d \text{ için}$$

$$b = 2d \text{ olur.}$$

$$2d = (\sigma+1) \cdot [\ell + (1/2)] \text{ buradan}$$

$$\alpha^{4/1+\sigma} = (h^2 / 2m) \cdot [\ell + (1/2)]^2 / A , \quad (2.58)$$

eşitliğini elde ederiz. Denk(2.26)'yı takiben

$$n + (1/2) + \mu = (2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) \cdot [(\sigma+1)/4] , \quad (2.59)$$

kuantum koşulu bulunur. Daha önceki hesaplamamızda

$$b = \pm 2\mu = (\sigma+1) \cdot [\ell+(1/2)] ,$$

olarak bulmuştuk. $(\sigma+1) > 0$ ve $(\sigma+1) < 0$ için farklı iki koşulumuz mevcuttur.

$$\sigma+1 > 0 \text{ için } \mu = \frac{(\sigma+1) \cdot [\ell+(1/2)]}{2} , \quad (2.60)$$

$$\sigma+1 < 0 \text{ için } \mu = - \frac{(\sigma+1) \cdot [\ell+(1/2)]}{2} , \quad (2.61)$$

Bunların her biri bizi farklı tipte potansiyellere götürür. Denk(2.59)'un formu şu ifade ile verilir. Denk(2.60)'ı Denk(2.59)'da yerine yazarsak ;

$$\sigma+1 > 0 , [(\sigma+1)/4] \cdot (2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot C/A^{1/2} = n+(1/2) + \{(\sigma+1) \cdot [\ell+(1/2)]/2\} , \quad (2.62)$$

elde edilir. Burada $\sigma = 0$ ve $\sigma = 1$ özel durumlarını irdelemek özel potansiyel formlarını tarif edebilmeleri açısından yararlı olacaktır.

2. 3. 1. $\sigma = 0$ Hali

$$\hbar^2$$

Denk(2.44)'de $\sigma = 0$ ve $B = \frac{\hbar^2}{2m} \ell(\ell+1)$, alınırsa Schrödinger Denklemini

$$\left\{ - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A r^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - C \right\} \Psi(r) = 0 , \quad (2.63)$$

olur. $A = (1/2)m\omega^2$ için Denk(2.62)'yi de kullanarak "C" sabitini aşağıdaki gibi buluruz.

$$C = E = h \omega [2n + \ell + (3/2)], \quad (2.64)$$

$$A = (1/2) m \omega^2, \quad (2.65)$$

Görüldüğü gibi Denk(2.44) $\sigma = 0$ için 3- boyutlu Harmonik Osilatör potansiyelinin çözüleceği diferansiyel denkleme dönüşür. Enerji özdeğerleri Denk(2.64) 'de verilmiştir. Enerji özdeğerleri $3/2 \hbar \omega$ sıfır durumu ($\ell = 0$ için) enerjisiyle başlamakta ve iki birim artmaktadır. Diğer metodlarla çözülen enerji değerleri ile karşılaştırılırsa aynı olduğu görülür.

2. 3. 2. $\sigma = 1$ Hali

$\sigma = 0$ halinde yaptığımız gibi , $\sigma = 1$ Denk(2.44)'de yazılırsa diferansiyel denklem 3- boyutlu Coulomb potansiyelinin çözülmesi gereken diferansiyel denkleme dönüşür.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{C}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + A \right\} \cdot \Psi(r) = 0, \quad (2.66)$$

ve enerji özdeğerleri Denk(2.62) kullanılarak hesaplanabilir. Gerekli hesaplamalar yapılırsa ;

$$-A = E = -\frac{mC^2}{2\hbar^2 \cdot (n+\ell+1)^2}, \quad (2.67)$$

şeklinde yazılabilir. Enerji özdeğerleri beklenen sonuçtur, diğer metodlarla çözülen enerji özdeğerleri ile uyum içerisindedir. Gördüğümüz gibi Denk(2.44)'deki sabitin ayrılması enerji spektrumunu vermektedir. Aynı durum σ 'nın diğer değerleri içinde ortaya çıkar buda bizi izafi-özdeğer problemlerine götürür.

$$-\frac{2\sigma}{\sigma+1} = k, k \in \mathbb{N}, \sigma+1 > 0, \quad (2.68)$$

şeklinde k 'yı seçer ve diğer terimleride “ k ” cinsinden Denk(2.44)'de yerine yazalım, önce potansiyel ifadesini düzenleyelim.

$$\frac{1-\sigma}{1+\sigma} = k+1, \text{ olur.}$$

$$U(r) = A r^{2(k+1)} - C r^k + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}, \quad (2.69)$$

$$r \rightarrow \hat{r} - \gamma, \quad \hat{r} \geq \gamma, \quad \gamma : \text{yerdeğiştirme parametresi}, \quad (2.70)$$

şeklinde değişken değişmesini potansiyel ifadesinde yazarsak , potansiyel ifadesinin yeni şekli

$$U(\hat{r}) = A (\hat{r} - \gamma)^{2(k+1)} - C (\hat{r} - \gamma)^k + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{(\hat{r} - \gamma)^2}, \quad (2.71)$$

olur. Şimdi $(\hat{r} - \gamma)^k$ ifadesini Σ sembolü cinsinden yazalım. Önce ispatını yapalım :

$$(\hat{r} - \gamma)^k = [(-1)^k \cdot (\gamma - \hat{r})^k] = (-1)^k \cdot \gamma^k \cdot [1 - (\hat{r} / \gamma)]^k, \quad (2.72)$$

olur. Binom açılımından yararlanarak $[1 - (\hat{r} / \gamma)]^k$ ifadesi

$$(\hat{r} - \gamma)^k = (-1)^k \cdot \gamma^k + (-1)^{k-1} \cdot (k/1!) \cdot \gamma^{k-1} \cdot \hat{r} + (-1)^{k-2} \cdot [k(k-1)/2!] \cdot \gamma^{k-2} \cdot \hat{r}^2 + (-1)^{k-3} \cdot [k(k-1)(k-2)/3!] \cdot \gamma^{k-3} \cdot \hat{r}^3 + \dots$$

$$\text{ve böylece} \quad (\hat{r} - \gamma)^k = \sum_{i=0}^k (-1)^{k-i} \cdot (k/i!) \cdot \gamma^{k-i} \cdot \hat{r}^i, \quad (2.73)$$

şeklinde yazılabilir. Şimdi Schrödinger Denklemini toplam sembolü cinsinden yazalım ($\hat{r}$ üzerindeki işareti atarak) :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A \left[\sum_{j=1}^{2(k+1)} (-1)^{2(k+1)-j} \cdot \binom{2(k+1)}{j} \cdot \gamma^{2(k+1)-j} \cdot r^j \right] - C \left[\sum_{i=1}^k (-1)^{k-i} \cdot \binom{k}{i} \cdot \gamma^{k-i} \cdot r^i \right] + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{(r-\gamma)^2} \right\} \cdot \Psi(r) = E \Psi(r), \quad (2.74)$$

$i, j = 0$ olsun.

$$r - \gamma = \rho$$

dönüşümü uygulanırsa :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\rho^2} + A (-1)^{2(k+1)} \cdot \gamma^{2(k+1)} - C (-1)^k \cdot \gamma^k + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right\} \cdot \Psi(\rho) = E \Psi(\rho)$$

şekline döner. Dalga fonksiyonunun

$$\Psi(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^{m+s},$$

şeklindeki çözümünü araştıralım.

$$m = 0 \text{ için } s_{1,2} = \ell + 1, \quad (2.75)$$

bulunur.

$$\Psi(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^{m+\ell+1}$$

türevleri alınıp Schrödinger Denkleminde yerleştirilirse ;

$$\sum_{m=0}^{\infty} (m+\ell+1)(m+\ell) c_m \rho^{m+\ell-1} - (2mA/\hbar^2) (-1)^{2(k+1)} \cdot \gamma^{2(k+1)} \cdot \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^{m+\ell+1} +$$

$$+ (2mC/\hbar^2) (-1)^k \gamma^k \cdot \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^{m+\ell+1} - \ell(\ell+1) \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^{m+\ell-1} = (-2mE/\hbar^2) \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^{m+\ell+1},$$

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} \Psi(\rho) = 0$$

olduğundan , dalga fonksiyonunun sonlu ve sürekli olması için $\varepsilon = 0$ olmalıdır.

$$c_{m+2} = \frac{[(-2mC/\hbar^2)(-1)^k \gamma^k + (2mA/\hbar^2) (-1)^{2(k+1)} \gamma^{2(k+1)} - (2mE/\hbar^2)]}{(m+\ell+2)(m+\ell+3) - \ell(\ell+1)} c_m$$

$$c_{m+2} = \frac{\varepsilon}{(m+\ell+2)(m+\ell+3) - \ell(\ell+1)} c_m$$

gerekli hesaplamalar yapılırsa enerji özdeğerleri

$$A (-1)^{2(k+1)} \gamma^{2(k+1)} - C (-1)^k \gamma^k = E = -E', \quad (2.76)$$

olarak bulunur. Kuantum koşulu Denk(2.62)'nin “k” cinsinden gösterimi

$$\frac{\sigma+1}{4} = \frac{1}{2(k+2)}, \quad (1/2)(\sigma+1) = \frac{1}{k+2} \quad \text{dir.}$$

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{k+2} (2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot \frac{C}{A^{1/2}} = n + (1/2) + \frac{1}{k+2} [\ell + (1/2)] , \quad (2.77)$$

Yerdeğiştirme parametresi potansiyel katsayıları ile ifade edilebilir.

$$\gamma = \delta \left[\frac{C}{A} \right]^{1/(k+2)}, \quad (2.78)$$

Burada δ boyutsuz bir parametredir. Denk(2.76) ile Denk(2.78) birleştirilirse enerji ifadesi

$$E' = [-\delta^{2(k+1)} + (-1)^k \delta^k] \cdot A^{-k/k+2} \cdot C^{2(k+1)/k+2}, \quad (2.79)$$

olur. Denk(2.77) kullanılarak

$$C \approx A^{1/2} \left[n + \frac{1}{2} \right]$$

bulunur. Bu “C” ifadesini Denk(2.79)’da yerine yazıp E' ’nün “n” ye bağlı gösterimi

$$E' \sim \left[n + \frac{1}{2} \right]^{2(k+1)/k+2} \cdot A^{1/(k+2)}, \quad (2.80)$$

olur. Aynı sonuçlar virial teorem ve WKB metodunu kullanarak da potansiyelin ; $(p=2(k+1))$ ’dir .

$$V(r) = A r^{2(k+1)} + \dots (\text{ihmal})...$$

$$V(r) \sim A r^p \text{ olur.} \quad (2.81)$$

ifadesi ile verildiğini düşünerek de elde edilebilir. $p = 2(k+1)$ alınarak enerji özdeğerinin “p” ye bağlı gösterimi Denk(2.80)’i kullanarak

$$E' \sim A^{2/(p+2)} \cdot [n + (1/2)]^{2p/(p+2)}, \quad (2.82)$$

şeklinde bulunur. Buradan enerji spektrumu ile kuantum sayısı arasındaki bağımlılığı elde etmiş oluruz.

Bu metod çerçevesinde çözülebilen farklı izafi- özdeğer problemini oluşturmak için

$$2 \frac{1 - \sigma}{1 + \sigma} = k, \quad k \in \mathbb{N}, \quad (2.83)$$

almamız yeterlidir. Denk(2.83)’den

$$\sigma = - (k-2)/(k+2) \text{ 'dir.}$$

Bu σ değeri Denk(2.44)’de yerine konursa Schrödinger Denklemini yazmış oluruz.

Önce potansiyel ifadesini “k” cinsinden yazalım :

$$U(r) = A r^k - C r^{(k-2)/2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}, \quad (2.84)$$

Böylece bu potansiyele karşılık gelen özdeğer denklemi

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A \left[\sum_{i=1}^k (-1)^{k-i} \begin{pmatrix} k \\ i \end{pmatrix} \gamma^{k-i} r^i \right] - C (r-\gamma)^{(k-2)/2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m (r-\gamma)^2} \right\} \Psi(r) = E \Psi(r), \quad (2.85)$$

olur. Bir önceki durumun benzeri şekilde işlem yapılırsa $r \geq \gamma$ için enerji özdeğeri

$$-E = (-1)^k \cdot \gamma^k \cdot A, \quad (2.86)$$

bulunur.

$$\sigma = -\frac{k-2}{k+2} \quad \text{için}$$

yeni izafi-özdeğer probleminin kuantum koşulu oluşturulmuş olur.

$$\frac{1}{k+2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \cdot \frac{C}{A^{1/2}} = n + \frac{1}{2} + \frac{2}{k+2} \left(\ell + \frac{1}{2} \right), \quad (2.87)$$

γ 'yı potansiyel katsayıları cinsinden aşağıdaki formda seçersek

$$\gamma = \delta \left(\frac{C}{A} \right)^{2/(k+2)}, \quad (2.88)$$

Enerji ifadesi

$$E = (-1)^{k+1} \cdot \delta^k \cdot A^{2-k/2+k} \cdot C^{2k/k+2}, \quad (2.89)$$

olur. Buda virial teorem ve WKB metodu ile elde edilen sonuçlar ile uyumludur.

Yukarıdaki ifadelerden de anlaşılacağı gibi “k” parametresinin çeşitli değerlerine karşılık gelen farklı potansiyeller için özdeğerler ve bunlara karşılık gelen özfonksiyonlar elde edilebilir. Denk(2.69) formundaki potansiyel fonksiyonundan “k”nın uygun seçimi ile elde edilebilen çeşitli potansiyeller ve bunlar için elde edilen enerji özdeğerleri Çizelge 2.1’de görülmektedir. “k”nın her bir değeri için kuantum şartları ise Çizelge 2.2’de verilmiştir. Çizelge 2.1 incelendiğinde ; $k=0$ durumunun Harmonik Osilatör potansiyeline diğer durumlarda iki terimli kuvvet ($k>0$) ve iki terimli ters kuvvet ($k<0$) potansiyellerine karşılık geldiği görülmektedir.

Çizelge 2.1. Çeşitli potansiyellerin yaklaşık enerji özdeğerleri (Burada $p=2(k+1)$ 'dir)

k	p	$U(r)=Ar^{2(k+1)}-Cr^k+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{2p/p+2} A^{2/p+2}$
0	2	$U(r)=Ar^2-Cr^0+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)] A^{1/2}$
1	4	$U(r)=Ar^4-Cr^1+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{4/3} A^{1/3}$
2	6	$U(r)=Ar^6-Cr^2+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{3/2} A^{1/4}$
3	8	$U(r)=Ar^8-Cr^3+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{8/5} A^{1/5}$
4	10	$U(r)=Ar^{10}-Cr^4+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{5/3} A^{1/6}$
5	12	$U(r)=Ar^{12}-Cr^5+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{12/7} A^{1/7}$
6	14	$U(r)=Ar^{14}-Cr^6+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{7/4} A^{1/8}$
7	16	$U(r)=Ar^{16}-Cr^7+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{16/9} A^{1/9}$
8	18	$U(r)=Ar^{18}-Cr^8+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{9/5} A^{1/10}$
9	20	$U(r)=Ar^{20}-Cr^9+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{20/11} A^{1/11}$
10	22	$U(r)=Ar^{22}-Cr^{10}+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{11/6} A^{1/12}$
11	24	$U(r)=Ar^{24}-Cr^{11}+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{24/13} A^{1/13}$
12	26	$U(r)=Ar^{26}-Cr^{12}+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{13/7} A^{1/14}$
13	28	$U(r)=Ar^{28}-Cr^{13}+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{28/15} A^{1/15}$
14	30	$U(r)=Ar^{30}-Cr^{14}+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{15/8} A^{1/16}$
15	32	$U(r)=Ar^{32}-Cr^{15}+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^{32/17} A^{1/17}$
-4	-6	$U(r)=Ar^{-6}-Cr^{-4}+(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$	$E \sim [n+(1/2)]^3 A^{-1/2}$

Çizelge 2.2. k'nın farklı değerleri için kuantum durumları

k	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = (k+2)(2n+1) + (2\ell+1)$
0	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 4n + 2\ell + 3$
1	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 6n + 2\ell + 4$
2	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 8n + 2\ell + 5$
3	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 10n + 2\ell + 6$
4	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 12n + 2\ell + 7$
5	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 14n + 2\ell + 8$
6	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 16n + 2\ell + 9$
7	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 18n + 2\ell + 10$
8	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 20n + 2\ell + 11$
9	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 22n + 2\ell + 12$
10	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 24n + 2\ell + 13$
11	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 26n + 2\ell + 14$
12	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = 28n + 2\ell + 15$
-4	$(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot (C/A^{1/2}) = -4n + 2\ell - 1$

Denk(2.84) ile verilen potansiyel fonksiyonunda ve bu potansiyele ait Denk(2.86) ile verilen enerji özdeğerlerinden k 'nın çeşitli değerleri için elde edilen sonuçlar Çizelge 2.3'de verildi. k 'nın negatif değerleri için iki terimli ters kuvvet ve pozitif değerleri için iki terimli kuvvet potansiyelleri elde edilmektedir. $k=0$ durumunun Coulomb potansiyeline karşılık geldiği görülmektedir. Ayrıca Denk(2.84)'den elde edilen potansiyeller r 'nin kesirli kuvvetlerinide içermektedir.



Çizelge 2.3. Farklı k değerleri için $U(r) = A r^k - C r^{(k-2)/2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$,

potansiyelinin enerji özdeğerleri ile kuantum durumları (δ birimsiz bir sabit, $(2m/\hbar^2)^2 \cdot (C/A^{1/2}) = \beta$ olarak gösterilmiştir, $k \neq -2$ dir.)

k	$U(r) = A r^k - C r^{(k-2)/2} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$(2m/\hbar^2)^2 (C/A^{1/2}) = (k+2)[n+(1/2)] + (2\ell+1)$	$E = (-1)^{k+1} \delta^k \cdot A^{2-k/k+2} C^{2k/k+2}$
-10	$U(r) = A r^{-10} - C r^{-6} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = -8n + 2\ell - 3$	$E = (-1)^{-9} \delta^{-10} \cdot A^{-3/2} C^{5/2}$
-9	$U(r) = A r^{-9} - C r^{-11/2} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = -7n + 2\ell - (5/2)$	$E = (-1)^{-8} \delta^{-9} \cdot A^{-11/7} C^{18/7}$
-8	$U(r) = A r^{-8} - C r^{-5} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = -6n + 2\ell - 2$	$E = (-1)^{-7} \delta^{-8} \cdot A^{-5/3} C^{8/3}$
-7	$U(r) = A r^{-7} - C r^{-9/2} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = -5n + 2\ell - (3/2)$	$E = (-1)^{-6} \delta^{-7} \cdot A^{-9/5} C^{14/5}$
-6	$U(r) = A r^{-6} - C r^{-4} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = -4n + 2\ell - 1$	$E = (-1)^{-5} \delta^{-6} \cdot A^{-2} C^3$
-5	$U(r) = A r^{-5} - C r^{-7/2} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = -3n + 2\ell - (1/2)$	$E = (-1)^{-4} \delta^{-5} \cdot A^{-7/3} C^{10/3}$
-4	$U(r) = A r^{-4} - C r^{-3} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = -2n + 2\ell$	$E = (-1)^{-3} \delta^{-4} \cdot A^{-3} C^4$
-3	$U(r) = A r^{-3} - C r^{-5/2} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = -n + 2\ell + (1/2)$	$E = (-1)^{-2} \delta^{-3} \cdot A^{-5} C^6$
-1	$U(r) = A r^{-1} - C r^{-3/2} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = n + 2\ell + (3/2)$	$E = \delta^{-1} \cdot A^3 C^{-2}$
0	$U(r) = A r^{-1} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = 2n + 2\ell + 2$	$E = (-1)^1 \delta^0 \cdot A C^0$
1	$U(r) = A r^{-1/2} + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = 3n + 2\ell + (5/2)$	$E = (-1)^2 \delta^1 \cdot A^{1/3} C^{2/3}$
2	$U(r) = A r^2 - C r^0 + (\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta = 4n + 2\ell + 3$	$E = (-1)^3 \delta^2 A^0 C^1$

Çizelge 2.3. (Devam) Farklı k değerleri için $U(r) = A r^k - C r^{(k-2)/2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$,

potansiyelinin enerji özdeğerleri ile kuantum durumları (δ birimsiz bir sabit , $(2m/\hbar^2)^2 \cdot (C/A^{1/2}) = \beta$ olarak gösterilmiştir , $k \neq -2$ dir.)

3	$U(r)=Ar^3-Cr^{1/2}+(\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta= 5n + 2\ell + (7/2)$	$E=(-1)^4 \delta^3$ $\cdot A^{-1/5} C^{6/5}$
4	$U(r)=Ar^4-Cr+(\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta= 6n + 2\ell + 4$	$E=(-1)^5 \delta^4$ $\cdot A^{-1/3} C^{4/3}$
5	$U(r)=Ar^5-Cr^{3/2}+(\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta= 7n + 2\ell + (9/2)$	$E=(-1)^6 \delta^5$ $\cdot A^{-3/7} C^{10/7}$
6	$U(r)=Ar^6-Cr^2+(\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta= 8n + 2\ell + 5$	$E=(-1)^7 \delta^6$ $\cdot A^{-1/2} C^{3/2}$
7	$U(r)=Ar^7-Cr^{5/2}+(\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta= 9n + 2\ell + (11/2)$	$E=(-1)^8 \delta^7$ $\cdot A^{-5/9} C^{14/9}$
8	$U(r)=Ar^8-Cr^3+(\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta= 10n + 2\ell + 6$	$E=(-1)^9 \delta^8$ $\cdot A^{-3/5} C^{8/5}$
9	$U(r)=Ar^9-Cr^{7/2}+(\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta= 11n + 2\ell + (13/2)$	$E=(-1)^{10} \delta^9$ $\cdot A^{-7/11} C^{18/11}$
10	$U(r)=Ar^{10}-Cr^4+(\hbar^2/2mr^2)\ell(\ell+1)$	$\beta= 12n + 2\ell + 7$	$E=(-1)^{11} \delta^{10}$ $\cdot A^{-2/3} C^{5/3}$

3. a^+a ÇARPIMI İLE OLUŞTURULAN SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Bölüm 2'de incelendiği gibi $a^+a \Psi_{2n+1}$, (2.16) denkleminde

$$\mu = 1/4, \quad (3.1)$$

seçilmesiyle Denk(2.22) formundaki indirgenmiş Whittaker Denklemi elde edilebilir.

$$\mu = 1/4 \text{ için } \mu = (1/2)(\sigma+1)[\ell+(1/2)] \text{ idi.}$$

$$\sigma = -\frac{2\ell}{2\ell+1}, \sigma+1 > 0 \text{ ve } \ell \geq 0, \quad (3.2)$$

bulunur. Bu “ σ ” değeri Denk(2.44)'de yazılırsa Schrödinger Denklemi

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A r^{2(4\ell+1)} - C r^{4\ell} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} \cdot \Psi(r) = 0, \quad (3.3)$$

halini alır. Burada Denk(2.45) ile verilen dönüşümler ve

$$r = \alpha \cdot \text{Exp}(q / 2\ell+1), \quad \Psi(q) = \text{Exp}[q / 2(2\ell+1)] \cdot \Phi(q),$$

$$(-2mA/\hbar^2) = a_1, \quad (-2mB/\hbar^2) = a_2, \quad (2mC/\hbar^2) = a_3, \quad B = (\hbar^2/2m) \cdot \ell(\ell+1),$$

tanımları yapılırsa (3.3) denklemi

$$\Phi''(q) + \left\{ -\frac{[\ell+(1/2)]^2}{(2\ell+1)^2} + a_1 \cdot \frac{\alpha^{4(2\ell+1)} \cdot \text{Exp}(4q)}{(2\ell+1)^2} + a_3 \cdot \frac{\alpha^{2(2\ell+1)} \cdot \text{Exp}(2q)}{(2\ell+1)^2} \right\} \cdot \Phi(q) = 0, \quad (3.4)$$

şekline dönüşür.

$$\frac{[\ell+(1/2)]^2}{(2\ell+1)^2} = 4\mu^2, (-2mA/\hbar^2) \cdot \frac{\alpha^{4(2\ell+1)}}{(2\ell+1)^2} = \varepsilon_1, (2mC/\hbar^2) \cdot \frac{\alpha^{2(2\ell+1)}}{(2\ell+1)^2} = \varepsilon_2, \\ d^2 = -\varepsilon_1/4, \quad b^2 = 4\mu^2, \quad N = \varepsilon_2/4, \quad (3.5)$$

olarak alınır ve Denk(2.51)'deki dönüşümler yapılarak Denk(2.52), Denk(2.55)'de verilen yöntem takip edilirse :

$$2d = \left[\frac{2mA}{\hbar^2} \right]^{1/2} \alpha^{2(2\ell+1)} [1/(2\ell+1)], \quad N = (mC/2\hbar^2) \cdot \alpha^{2(2\ell+1)} [1/(2\ell+1)]^2,$$

$$b = 2\mu = [\ell+(1/2)]/[2\ell+1], \quad (3.6)$$

elde edilir. $V=n$ için $2d$, N ve b terimleri “V” ifadesinde yerine yazılırsa kuantum koşulu aşağıdaki gibi olur:

$$\frac{C}{A^{1/2}} = (\hbar^2/2m)^{1/2} \cdot (2\ell+1) \cdot (4n+3), \quad (3.7)$$

Bu form bizi özel bir duruma götürür :

$$\ell = 0, \quad A = (1/2)m\omega^2, \quad (3.8)$$

ve böylece

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - C \right\} \Psi(r) = 0, \quad (3.9)$$

elde edilir.

$\ell = 0$, $A = (1/2)m\omega^2$ için Denk(3.7) ile verilen kuantum koşulundan “C” (yani E) ifadesi bulunmuş olur.

$$C = E = \hbar\omega[2n+(3/2)], \quad (3.10)$$

Denk(3.3)'deki değişkenin yerdeğiştirmesini yaparak (Denk(2.74)'deki forma benzer olarak)

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A \left[\sum_{i=1}^{2(4\ell+1)} \binom{2(4\ell+1)}{i} (-\gamma)^{2(4\ell+1)-i} r^i \right] - C \left[\sum_{j=1}^{4\ell} \binom{4\ell}{j} (-\gamma)^{4\ell-j} r^j \right] + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{(r-\gamma)^2} \right\} \cdot \Psi(r) = E \Psi(r) , \quad (3.11)$$

Schrödinger Denklemini elde ederiz. Burada ;

$$r \geq \gamma ; \quad E = -A \gamma^{2(4\ell+1)} + C \gamma^{4\ell} , \quad (3.12)$$

Yerdeğiştirme parametresi γ 'yı

$$\gamma = \delta (C/A)^{1/4\ell+2} , \quad (3.13)$$

şeklinde alır ve Denk(3.12) ile verilen enerji özdeğerinde yazarsak , enerji özdeğerinin yeni şekli

$$E = \left(\hbar^2/2m \right)^{[2\ell+(1/2)]/[2\ell+1]} \cdot A^{1/2(2\ell+1)} \cdot (4\ell+3)^{(4\ell+1)/(2\ell+1)} \cdot (2\ell+1)^{(4\ell+1)/(2\ell+1)} \cdot (-\delta^{2(4\ell+1)} + \delta^{4\ell}) , \quad (3.14)$$

olur. Burada “ δ ” birimsiz bir katsayıdır. Denk(3.14) ile verilen enerji ifadesi virial teorem ve WKB metodu ile verilen sonuçlar ile benzerdir.

3. 1. $b \neq 0$ ile Genelleme

İkinci bölümde yapılan $b = 0$ için çözümler , $b \neq 0$ alınarak kolaylıkla genellenebilir. Buda Denk(2.34)'de bir fazla terimi daha dikkate almamız anlamına gelir ve hesaplama metodu önceki ile aynı olmasına rağmen bu bizi yeni çözülebilir problemlere götürür. Şu ifade ile başlayalım :

$$E = 0 \quad , \quad \bar{f} \geq 0, \quad (3.15)$$

ve

$$(\bar{f}' \cdot g)^2 \sim (\int dq/g)^{2\sigma} \quad , \quad (3.16)$$

burada

$$\sigma \neq -1 \quad , \quad [(\int dq/g) + 2b] \geq 0, \quad (3.17)$$

şimdi

$\int (dq/g)$ integralinin $\bar{f}$ cinsinden eşitini yazalım.

$$[(\int dq/g) + 2b] \geq 0 \quad ,$$

$$(\int dq/g) \geq -2b \quad ,$$

Her iki tarafın $(\sigma+1)$ 'inci kuvveti alınırsa :

$$(\int dq/g)^{\sigma+1} - (-2b)^{\sigma+1} \geq 0 \quad ,$$

olur. Denk(3.15)'de $\bar{f} \geq 0$ idi .

$$(\int dq/g)^{\sigma+1} - (-2b)^{\sigma+1} = 0 \quad ,$$

$$\bar{f} = 0 \quad ,$$

Bu iki denklem birleştirilirse :

$$(\int dq/g)^{\sigma+1} - (-2b)^{\sigma+1} = \bar{f} \quad ,$$

$$(\int dq/g)^{\sigma+1} = \bar{f} + (-2b)^{\sigma+1} \quad ,$$

$$b < 0 \quad \text{için} \quad (\int dq/g) = [\bar{f} + (-2b)^{\sigma+1}]^{1/(\sigma+1)} \quad , \quad (3.18)$$

olur.

$$(\bar{f'.g})^{-2} \sim (\int dq/g)^{-2\sigma} \text{ olarak yazılabilir.}$$

Buradan

$$(\bar{f'.g})^{-2} = [\bar{f} + (-2b)^{\sigma+1}]^{-2\sigma/\sigma+1} \text{ olur.}$$

Şimdi bu ifadeler Denk(2.34)'de kullanılırsa ;

$$(U(\bar{f}) - E) = (\bar{f'.g})^{-2} \cdot [(\int dq/g) + 2b]^2 + (\bar{f'.g})^{-2} [(\int dq/g) + 2b]^2 + (\bar{f'.g})^{-2} (\text{const.}),$$

elde edilir ve Denk(3.15) dikkate alınır

$$U(\bar{f}) = \left\{ [\bar{f} + (-2b)^{\sigma+1}]^{1/\sigma+1} + 2b \right\}^{-2} \cdot [\bar{f} + (-2b)^{\sigma+1}]^{-2\sigma/\sigma+1} + [\bar{f} + (-2b)^{\sigma+1}]^{2(1-\sigma)/(1+\sigma)} + \\ [\bar{f} + (-2b)^{\sigma+1}]^{(1-2\sigma)/(1+\sigma)} + [\bar{f} + (-2b)^{\sigma+1}]^{-2} + [\bar{f} + (-2b)^{\sigma+1}]^{-2\sigma/\sigma+1}, \quad (3.19)$$

şekline dönüşmüş olur. Bu yüzden Denk(2.22) 'den ortaya çıkan Schrödinger

Denkleminin tam formu : (Burada $\bar{f} \rightarrow r$, $-2b \rightarrow B/2A$, alınmıştır.)

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A [r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{2(1-\sigma)/(1+\sigma)} - B [r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{(1-2\sigma)/(1+\sigma)} - \right. \\ \left. C [r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{-2\sigma/\sigma+1} + V(B/2A, \sigma; r) \right\} \Psi(r) = 0, \quad (3.20)$$

$$r \geq 0, A > 0, B \geq 0, C > 0,$$

olur . Burada

$$V(B/2A, \sigma; r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{\{ [r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{1/\sigma+1} - (B/2A) \}^2 \cdot [r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{2\sigma/\sigma+1}} + \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{4} - \frac{1}{4(\sigma+1)^2} \right] \cdot \left\{ \frac{1}{\{ [r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{1/\sigma+1} - (B/2A) \}^2 \cdot [r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{2\sigma/\sigma+1}} - \right.$$

$$\left. \frac{1}{[r + (B/2A)^{\sigma+1}]^2} \right\} , \quad (3.21)$$

ve

$$V(B/2A, 0; r) = V(0, \sigma; r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} , \quad (3.22)$$

$$V(B/2A, -2\ell/2\ell+1; r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{[r + (B/2A)^{1/(2\ell+1)}]^2} , \quad (3.23)$$

'dir. Denk(3.20), $(B/2A) \rightarrow 0$ için incelenirse ve

$$-\frac{2mA}{\hbar^2} = a_1 , \quad -\ell(\ell+1) = a_2 , \quad \frac{2mC}{\hbar^2} = a_3 ,$$

alınırsa yeni Schrödinger Denkleminin şekli ;

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + a_1 \cdot r^{2(1-\sigma)/(1+\sigma)} + a_2 r^{-2} + a_3 r^{-2\sigma/\sigma+1} + \frac{2mB}{\hbar^2} r^{(1-2\sigma)/(1+\sigma)} \right\} \cdot \Psi(r) = 0 ,$$

olur.

$$r = \alpha \cdot \text{Exp}[(\sigma+1)q] , \quad \Psi(q) = \text{Exp}[(\sigma+1)q/2] \cdot \Phi$$

değişken değişiminden sonra ortaya çıkan diferansiyel denklemin her iki tarafını

$\alpha^2 \cdot (\sigma+1)^2 \cdot \text{Exp}[(3/2)(\sigma+1)q]$ ile çarpılır ve a_1, a_2 ve a_3 terimleri yerlerine yazılırsa

$$\Phi''(q) + \{ -4\mu^2 - (2mA/\hbar^2) \cdot \alpha^{4/(1+\sigma)} \cdot (\sigma+1)^2 \cdot \text{Exp}(4q) + (2mC/\hbar^2) \cdot \alpha^{2/(1+\sigma)} \cdot (\sigma+1)^2 \cdot \text{Exp}(2q) + (2mB/\hbar^2) \cdot \alpha^{3/(1+\sigma)} (\sigma+1)^2 \cdot \text{Exp}(3q) \} \cdot \Phi(q) = 0 , \quad (3.24)$$

şekline dönüşür. Burada

$$\begin{aligned} 4\mu^2 &= (\sigma+1)^2 \cdot [\ell + (1/2)]^2, \\ \varepsilon_1 &= -(2mA/\hbar^2) \cdot \alpha^{4/(1+\sigma)} \cdot (\sigma+1)^2, \\ \varepsilon_2 &= (2mC/\hbar^2) \alpha^{2/(1+\sigma)} \cdot (\sigma+1)^2, \\ \varepsilon_3 &= (2mB/\hbar^2) \cdot \alpha^{3/(1+\sigma)} \cdot (\sigma+1)^2, \end{aligned} \quad (3.25)$$

tanımları yapılırsa

$$\Phi''(q) + \{ -4\mu^2 + \varepsilon_1 \cdot \text{Exp}(4q) + \varepsilon_2 \cdot \text{Exp}(2q) + \varepsilon_3 \cdot \text{Exp}(3q) \} \cdot \Phi(q) = 0, \quad (3.26)$$

elde edilir. Önce

$$s = \text{Exp}(q),$$

sonra

$$z = 2.d.s$$

dönüşümleri uygulanır ve

$$b^2 = 16\mu^2, \varepsilon_2/d^2 = -1, \varepsilon_1/16d^4 = A, \varepsilon_3/8d^3 = B'$$

alınırsa

$$\Phi''(z) + (1/z) \Phi'(z) + \{ (-b^2/4z^2) - (1/4) + A z^2 + B' z \} \cdot \Phi(z) = 0 \text{ olur.}$$

$\lim_{z \rightarrow \infty}$ 'da incelenirse ;

$$\Phi''(z) + \{ -(1/4) + A z^2 + B' z \} \cdot \Phi(z) = 0 \text{ olur.}$$

$$A^{1/2} \cdot z + (B' / 2 A^{1/2}) = y, \quad \varepsilon = (1/A) \cdot \{ (1/4) + [(B')^2 / 4A] \},$$

$$\Phi''(y) + \{ (y^2/A) - \varepsilon \} \Phi(y) = 0 \text{ olur.}$$

$$\Phi(y) = \text{Exp} \{ i \alpha y^2 / 2 \} \cdot f$$

$$\alpha = \pm (1/A^{1/2}), (i/A^{1/2}) - \varepsilon = g \text{ dersek;}$$

$$f''_y + (2i/A^{1/2}) y f'_y + g \cdot f_y = 0,$$

şekline dönüşür. Son olarak

$$y = y_0 \cdot x$$

dönüşümü uygulanırsa

$$f''_x - 2x f'_x + g \cdot y_0^2 \cdot f_x = 0, \quad (3.27)$$

Hermit Diferansiyel Denklemini elde ederiz.

$$2n = g \cdot y_0^2 \text{ ise}$$

g ve y_0 yerlerine yazılırsa

$$(1/4) + [(B')^2/4A] = 2iA^{1/2} \cdot [n + (1/2)]$$

bulunur.

$$A = -A_1, A_1 > 0$$

alınırsa ve

$$\alpha = - (1/A^{1/2})$$

seçilirse (dalga fonksiyonunun sonsuza ıraksamaması için)

$$\Phi(y) = \text{Exp}[-y^2/2A_1^{1/2}] \cdot H_n[y/(iA^{1/2})^{1/2}], \quad (3.28)$$

ve kuantum koşulu

$$(1/8)(2m/\hbar^2)^{1/2}(\sigma+1)(B^2/A^{3/2}) + (1/2)(2m/\hbar^2)^{1/2}(\sigma+1)(C/A^{1/2}) = n + (1/2), \quad (3.29)$$

sonucu ortaya çıkar. “ μ ” ye bağlı kuantum koşulunda;

$$(1/16)(2m/\hbar^2)^{1/2}(\sigma+1)(B^2/A^{3/2}) + (1/4)(2m/\hbar^2)^{1/2}(\sigma+1)(C/A^{1/2}) = n + (1/2) + \mu, \quad (3.30)$$

formunda elde ederiz. Burada

$$\mu = (1/2)(\sigma+1)[\ell + (1/2)], \quad (3.31)$$

dir ve sıfırdan büyüktür, bu ise

$$\sigma+1 > 0, \quad (3.32)$$

olması anlamına gelir. Şimdi ise Denk(3.32) şartını sağlayan enerji spektrumunun üç durumunu inceleme imkanımız vardır.

3. 1. 1. $\sigma = 0$ Hali

Önce Denk(3.20) 'deki potansiyel ifadesini yazalım:

$$U(r) = A[r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{2(1-\sigma)/(1+\sigma)} - B[r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{(1-2\sigma)/(1+\sigma)} - C[r + (B/2A)^{\sigma+1}]^{-2\sigma/\sigma+1} + V(B/2A, \sigma; r), \quad (3.33)$$

$$V(B/2A, 0; r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$$

$\sigma = 0$ için bu potansiyel ifadesi

$$U(r) = A r^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{B^2}{4A} - C, \quad (3.34)$$

olur. Bu ise 3- boyutlu Harmonik Osilatör potansiyelidir. Denk(3.30)'da

$$A = (1/2) m \omega^2, \quad \mu = (1/2)[\ell + (1/2)],$$

alınırsa enerji ifadesi

$$\frac{B^2}{4A} + C = E = \hbar \omega [2n + \ell + (3/2)] \quad (3.35)$$

olur.

3. 1. 2. $\sigma = 1$ Hali

Potansiyel ve enerji ifadesini $\sigma = 1$ için yazalım.

$$U(r) = A - B[r + (B/2A)^2]^{-1/2} - C[r + (B/2A)^2]^{-1} + V(B/2A, 1, r), \quad (3.36)$$

Burada

$$A = -E, \mu = \ell + (1/2), \quad (3.37)$$

$$(1/8)(2m/\hbar^2)^{1/2} (B^2/A^{3/2}) + (1/2)(2m/\hbar^2)^{1/2} (C/A^{1/2}) = n + \ell + 1; \quad (3.38)$$

olur.

3. 1. 3. $\sigma = 1/2$ Hali

Aynı şekilde işlem tekrar edilirse potansiyel ifadesi ;

$$U(r) = A [r + (B/2A)^{3/2}]^{2/3} - C [r + (B/2A)^{3/2}]^{-2/3} + V(B/2A, 1/2; r) - B, \quad (3.39)$$

olur. Denk(3.30)' dan enerji değeri

$$B = E = \{ -4AC + (32/3)(\hbar^2/2m)^{1/2} \cdot A^{3/2} [n + (1/2) + (3/4)[\ell + (1/2)]] \}^{1/2}, \quad (3.40)$$

$$n + (3/4)[\ell + (1/2)] > (3/8)(2m/\hbar^2)^{1/2} \cdot A^{-1/2} \cdot C - (1/2), \quad (3.41)$$

olarak elde edilir. Doğal olarak değişkenlerdeki bir yerdeğiştirmeyi kullanarak özdeğer problemlerini oluşturabiliriz , fakat bu metod daha önce ($b=0$) anlatılmıştı. Burada ise sadece a^+ a çarpımı ile yapılandırılan denklemlerden bahsedeceğiz.

$$\mu = (1/2)(\sigma+1)[\ell + (1/2)] \text{ 'idi.}$$

üçüncü bölümde olduğu gibi

$$\mu = 1/4, \quad (3.42)$$

seçelim.

$$\sigma = -(2\ell)/(2\ell+1) \text{ ve } \sigma+1 > 0 \text{ olur.}$$

“ σ ” ifadesini Denk(3.20) 'de yerine yazarsak Schrödinger Denklemi

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A [r + (B/2A)^{1/(2\ell+1)}]^{2(4\ell+1)} - [r + (B/2A)^{1/(2\ell+1)}]^{6\ell+1} - C [r + (B/2A)^{1/(2\ell+1)}]^{4\ell} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{[r + (B/2A)^{1/(2\ell+1)}]^2} \right\} \cdot \Psi(r) = 0, \quad (3.43)$$

olur.

$$\ell = 0, \quad (3.44)$$

durumu dikkate alınırsa

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A r^2 - \frac{B^2}{4A} - C \right\} \cdot \Psi(r) = 0, \quad (3.45)$$

olur. $\ell = 0$ için Denk(3.34) ile verilen 3-boyutlu Harmonik Osilatör potansiyel ifadesi, Denk(3.45)'deki 1-boyutlu Harmonik Osilatör potansiyel ifadesine dönüşür. Dolayısıyla enerji ifadesi Denk(3.35)'de $\ell=0$ alınarak bulunabilir.

$$\frac{B^2}{4A} + C = E = \hbar\omega [2n + (3/2)], \quad (3.46)$$

Buda beklenen sonuçtur. Bu ise $b \neq 0$ için yapılan genellemenin doğruluğunu ifade eder.

3. 2. Morse Potansiyeli

Denk(2.38)'e göre düşünülmesi gereken bir durum daha vardır. Bu ayrı işlem

$$\overline{f} \quad \text{ve} \quad \int dq / g$$

arasındaki bağımlılığın Denk(2.41)'ten elde edilen farkıyla ilişkilidir, buda bizi

oldukça yeni tiplerde çözülebilir özdeğer problemlerine götürür. Doğal olarak potansiyelleri elde etme metodu değişmez, buda Denk(2.34)'ü kullanarak Denk(2.22)'deki forma indirgenebilen Schrödinger Denklemini aradığımız anlamına gelir. Şu ifade ile başlayalım :

$$E = 0 , b \neq 0 , \quad (3.47)$$

Şimdi Denk(2.38)'i kullanarak $\bar{f}$ 'yi bulalım.

$$(\bar{f}' \cdot g)^2 = \text{const.} \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right]^2 ,$$

$$A = (\text{const.})^{1/2} \text{ olsun.}$$

$$(\bar{f}' \cdot g) = \frac{A}{\left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right]} , \quad (3.48)$$

$$x = \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right]$$

dönüşümü uygulanırsa;

$$\bar{f} = \int A \cdot (dx / x) = A \left\{ \ln \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right] + \ln C \right\} ,$$

$$\bar{f} = \ln \{ C \cdot \left[\left(\int dq/g \right) + 2b \right] \}^A ,$$

$$\text{Exp}(\bar{f}/A) = C \left(\int dq/g \right) + 2bC , \quad 2bC = \alpha \text{ olsun.}$$

$$\alpha , b , C , A \in \mathbb{R}$$

$$\alpha \cdot C = 1 \text{ seçilirse}$$

$$\bar{f} = A \ln(\alpha C) + A \ln \left(\int dq/g \right) \quad (3.49)$$

$$\bar{f} \sim \ln \left(\int dq/g \right) \text{ olur.} \quad (3.50)$$

Burada

$$(\int dq / g) + 2b \geq 0, \quad (3.51)$$

Genellemeyi Denk(3.50)'nin logaritmik karakteristiğini muhafaza edecek şekilde yapmalıyız.

$$\bar{f}^\sigma = \ln \left(\int dq / g \right), \quad \sigma = \text{const.}, \quad (3.52)$$

olarak ve ilave olarak hesaplamaları basitleştirmek için $g = e^{-q}$ alalım. Denk(2.34) ifadesinden $U(f)$ 'yi bulalım. Daha önce Denk(3.52)'den

$$\text{Exp}(\bar{f}^\sigma) = \int (dq / g),$$

bulunur. Denk(3.50)'den

$$\text{Exp}(\bar{f}) = \int (dq / g) \text{ dir.}$$

Bu iki ifadeyi birbirine eşitler ve “g” yerine e^{-q} konursa

$$\bar{f}' = \frac{e^q}{e^q + c},$$

ve

$$(\bar{f}' \cdot g) = \frac{1}{e^q + c} = \text{Exp}(-\bar{f}^\sigma),$$

$$(\bar{f}' \cdot g)^2 = \text{Exp}(-2\bar{f}^\sigma), \quad (3.53)$$

olur. Denk(2.34)'de $E = 0$ alınıp $(\bar{f}' \cdot g)^2$ yerine yazılırsa potansiyel ifadesi

$$U(\bar{f}) = [\text{Exp}(4\bar{f}^\sigma) + 4b\text{Exp}(3\bar{f}^\sigma) + 4b^2\text{Exp}(2\bar{f}^\sigma)] + \text{Exp}(2\bar{f}^\sigma) \cdot [\text{Exp}(\bar{f}^\sigma) + 2b]^2 \\ + \text{Exp}(2\bar{f}^\sigma) \cdot \text{const.}$$

şekline dönüşür.

$$\bar{f}^{2(\sigma-1)} = 1 \text{ alınırsa ;}$$

$$U(\bar{f}) \sim \bar{f}^{2(\sigma-1)} + \bar{f}^{2(\sigma-1)} \text{Exp}(2\bar{f}^\sigma) \cdot [\text{Exp}(\bar{f}^\sigma) + 2b]^{-2} + \bar{f}^{2(\sigma-1)} \cdot [\text{Exp}(4\bar{f}^\sigma) + \text{Exp}(3\bar{f}^\sigma) + \text{Exp}(2\bar{f}^\sigma)] , \quad (3.54)$$

Burada

$$\bar{f} \geq [\ln(-2b) + \text{const.}]^{1/\sigma} , \quad b < 0 , \quad (3.55)$$

$$\bar{f}^\sigma \geq \ln(-2b) + \text{const.} ,$$

$$-2b \rightarrow B/2A , \quad \text{const.} \rightarrow 0 , \quad \text{seçilirse}$$

$$\bar{f}^\sigma = \ln(B/2A)$$

$$(r/a) \geq [\ln(B/2A)]^{1/\sigma} ,$$

$$(r/a)^\sigma = \ln(B/2A)$$

$$(r/a)^\sigma = \ln(B/2A) = \bar{f}^\sigma , \quad (3.56)$$

elde edilir.

$$f = (r/a) \text{ alınabilir.}$$

Denk(3.54) ile verilen potansiyel ifadesi için Schrödinger Denklemini yazarsak :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + A (r/a)^{4\ell} \cdot \text{Exp}[4(r/a)^{2\ell+1}] - B (r/a)^{4\ell} \cdot \text{Exp}[3(r/a)^{2\ell+1}] - C (r/a)^{4\ell} \cdot \right.$$

$$\left. \text{Exp}[2(r/a)^{2\ell+1}] + D (r/a)^{4\ell} \cdot \text{Exp}[2(r/a)^{2\ell+1}] \cdot [\text{Exp}(r/a)^{2\ell+1} - (B/2A)]^{-2} + \right.$$

$$\left. \frac{\hbar^2}{8ma^2} (2\ell+1)^2 \cdot (r/a)^{4\ell} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} \cdot \Psi(r) = 0 , \quad (3.57)$$

$$\text{olur. Burada } A > 0 , B \geq 0 , C > 0 , D \geq 0 \quad (3.58)$$

ve

$$(r/a) \geq [\ln(B/2A)]^{1/\sigma}, \quad \sigma = 2\ell+1, \quad (3.59)$$

“ σ ”nın teksayı olarak seçimi değişkeni sınırlamaz. Denk(2.26)’dan kaynaklanan kuantum koşulunda şu formda elde ederiz :

$$(1/4)(2ma^2/\hbar^2)^{1/2} \{1/(2\ell+1)\} [(C/A^{1/2}) + (B^2/4A^{3/2})] = n + (1/2) + \mu, \quad (3.60)$$

Burada “ μ ” ise şu ifade ile verilir.

$$\mu = [(1/16) + (1/4).(2m/\hbar^2).[a/(2\ell+1)]^2 \cdot D]^{1/2}, \quad (3.61)$$

Denk(3.50) , Denk(3.52) , Denk(3.57)’den de gördüğümüz gibi aşağıdaki değerleri koyarak Morse Potansiyeli ile Schrödinger Denklemine geri dönebiliriz.

$$\ell = 0, \quad B=0, A=V_0, C=2V_0, a \rightarrow -2a, \quad (3.62)$$

Schrödinger Denklemini ;

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_0 \cdot e^{-2r/a} - 2V_0 \cdot e^{-r/a} + D + \frac{1}{16} \frac{\hbar^2}{2ma^2} \right\} \cdot \Psi(r) = 0, \quad (3.63)$$

olur. Burada

$$r \in \mathbb{R}, \quad D \rightarrow D_e, \quad a \rightarrow a' \quad \text{alındı.}$$

Schrödinger Denklemine V_0 ekleyip çıkaralım.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) - W \right\} \cdot \Psi(r) = 0, \quad V_0 = D$$

$$U(r) = D(1 - e^{-r/a'})^2$$

$$-W = -V_o + D_e + (1/16) (h^2 / 2ma'^2)$$

işlem kolaylığı için

$$- (r / a') = - a r$$

$$U(r) = D(1 - e^{-ar})^2$$

olur. Schrödinger Denklemini iki atomlu bir molekül için çözüleceğinden, matematiksel olarak bir kolaylık sağlaması için iki atomun kütle merkezinin hareketi incelenir ve indirgenmiş kütle “ μ ” alınır.

$$\left\{ -\frac{h^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) - W \right\} \cdot \Psi(r) = 0, \quad (3.64)$$

$$h = 2\pi\hbar, \Psi(r) = S(r), y = e^{-ar}$$

alınır ve denkleme yerleştirilirse

$$\frac{d^2S}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dS}{dy} + \frac{8\pi^2\mu}{a^2h^2} \left[\frac{W-D}{y^2} - D + \frac{2D}{y} \right] \cdot S = 0, \quad (3.65)$$

Burada
$$d^2 = \frac{8\pi^2\mu}{a^2h^2} \cdot D, \quad b^2 = -\frac{32\pi^2\mu}{a^2h^2} (W-D)$$

$$z = 2dy$$

dönüşümü uygulanır ve $N = 2d^2$ alınırsa ;

$$\frac{d^2S}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dS}{dz} + \left[-\frac{b^2}{4z^2} - \frac{1}{4} + \frac{N}{2d \cdot z} \right] \cdot S = 0,$$

ve $\lim_{z \rightarrow \infty}$ 'da incelenirse geçerli çözüm;

$$S = e^{-z/2} \text{ 'dir.}$$

$$S(z) = e^{-z/2} \cdot z^S F(z) , \quad (3.66)$$

şeklinde seçer ve gerekli işlemler yapılırsa :

$$F''(z) \cdot z^{S+2} + [2sz^{S+1} + z^{S+1} - z^{S+2}] F'(z) + z^{S+1} [(N/2d) - (1/2) - s] F(z) + z^S [s(s-1) + s - (b^2/4)] F(z) = 0 ,$$

$$s(s-1) + s - (b^2/4) = 0 ,$$

$$s_{1,2} = \pm b/2 ,$$

Geçerli çözüm $+ b/2$ 'dir.

$$S(z) = e^{-z/2} \cdot z^{b/2} \cdot F(z)$$

Türevleri alınıp düzenlemesi yapılırsa :

$$F''(z) + \left[\frac{b+1}{z} - 1 \right] F'(z) + (V/z) F(z) = 0 , \quad (3.67)$$

$$V = - \frac{1}{2} (b+1) + d , \quad V = 0, 1, 2, \dots$$

$V = n$ için b ve d terimleri yerlerine yazılırsa enerji özdeğerleri

$$\mu \rightarrow m , a' \rightarrow a ,$$

$$-\left[D + \frac{1}{16} \frac{\hbar^2}{2ma^2} \right] = E = - \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[(2ma^2 V_0 / \hbar^2)^{1/2} - [n + (1/2)] \right]^2 , \quad (3.68)$$

olarak bulunmuş olur . $\mu > 0$ olduğunu hatırlayarak

$$n + \frac{1}{2} < \left(\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (3.69)$$

elde ederiz , buda bağlı durumların sayısını sınırlar.



4. SONUÇ

Bu çalışmada Heisenberg Metodu detaylı bir şekilde incelenmiş ve bazı potansiyeller için Schrödinger Denkleminin çözümünde kullanımı araştırılmıştır.

Hem fiziksel hemde matematiksel bir bakış açısından en basit kuantum sistemi olmasından dolayı , Harmonik Osilatör metodun testi açısından önemli bir rol oynar.

Bu tanımlama Heisenberg Metodunu sağlayan lineer diferansiyel operatörler ile tamamen çözülebilir olması gerçeğine dayanmaktadır. Bu metodun kullanımında faydalanılan Harmonik Osilatörün hamiltonu ve yok edici operatörler diğer çözülmüş diferansiyel denklemler (Whittaker Denklemi ve Hipergeometrik Denklem) için bir yapı olarak işlem görebilir. Bunları eşit hale getirebilmek için Doğal sayıları ile eşitliklerin parametreleri arasındaki bağımlılığı kabul etmek gerekir. Bu koşullar altında sonraki aşama , açık bir şekilde görülmektedirki , sabit Schrödinger Denklemindeki (Denk(2.28)) değişkenin uygun bir değişimi bunun formu bilinen denkleme indirger ve kıyaslama ile çözülebilir potansiyeller topluluğu elde edilir. Bu problemin genelleştirilmesi aynı zamanda başlangıçtaki Schrödinger Denklemini sıfıra eşit sabit enerji ile almaklada mümkündür. Buda tam çözümü bilinen Schrödinger Denkleminden daha genel bir formda olan potansiyellere sahip özdeğer problemi ($H(E_n)\Psi_n=E_n\Psi_n$) , (Hamiltona enerjinin parametre olarak girmesi anlamına gelir) çözüme yeteneğini ortaya çıkarır.

Heisenberg Metodu , Schrödinger Denklemini Whittaker Denklemine indirgeyerek , artırma- eksiltme operatörlerinin a^+ a çarpımı ile kıyaslamak suretiyle bir çözülebilir potansiyeller üretme yöntemini izlemektedir. Böylece bu yeni potansiyellere sahip özdeğer probleminin çözümleri elde edilmektedir.

Schrödinger Denkleminin tam çözümleri için şimdiye kadar Hill-Determinantı Metodu , S.S.K.M'nin kullanıldığı metodlar , Sürekli Kesirler Metodu gibi metodlar geliştirilmesine rağmen , daha basit işlemlere dayalı çözüm metodlarına ihtiyaç duyulmaktadır. Metodların , tam sonuçlar vermesi ve sadece basit cebirik işlemlere

bağlı olması önemlerini artırmaktadır. Heisenberg Metodu bu açıdan dezavantajlı bir konuma sahiptir.

Yapılan çalışmada da görülmektedirki çözülen potansiyeller yada daha genel bir forma dönüştürülen potansiyeller için potansiyel parametreleri arasındaki çeşitli sınırlamalar vardır.

$\sigma+1>0$ için Denk(3.3)'deki potansiyelin A ve C parametreleri arasında her "n" ve "l" değeri için Denk(3.7) ile verilen sadece bir sınırlama mevcuttur. Metodların dezavantajı olarak değerlendirilen bu ve benzeri tüm sınırlamalar potansiyel parametrelerinin serbest olarak ele alınmasını zorlaştırmaktadır.

S.S.K.M'ne dayalı çözüm tekniği , sadece şekil değişmezliği özelliğine sahip potansiyeller için kesin analitik sonuçlar (tam değerler)vermesi ve genellikle alt seviyeler için az işlem gerektirmesi açılarından tercih edilmektedir. Fakat şekil değişmezliği özelliğine sahip olmayan potansiyeller için tam sonuçlar verememektedir. Bu tür potansiyeller için yüksek mertebeden düzeltme terimlerinin hesaplanmasıyla sadece yaklaşık sonuçlar verebilmektedir [4] .Bu metod da ise Coulomb potansiyeli olsun , Harmonik Osilatör potansiyeli olsun tam sonuçlar verebilmektedir [8].S.S.K.M'nin kullanıldığı metodlarla yapılan çözümlerde de diğer metodlarda olduğu gibi potansiyel parametreleri arasında bazı sınırlamalar ortaya çıkmaktadır [25].

Yapılan genellemelerin daha önceden kestirilememesi bu metod için bir dezavantaj olmuştur. Yol integrali metodunda bazı potansiyeller için üretici fonksiyonu belirlemedeki zorluk gibi. Bu durumda yol integrali için bir dezavantaj olmuştur.

Bu çalışmada kullanılan method, $(f' \cdot \bar{g})^2$ 'nin uygun seçimi ile Morse, Hulthen, Pöschl-Teller potansiyelleri gibi üstel , trigonometrik olarak ifade edilen potansiyellerde uygulanabilir. Sonuçlar Schrödinger Denkleminde indirgenen ifadelerde kullanılır.

İkinci bölümde Heisenberg Metodunun temelini oluşturan $a^+a\Psi_n(x) = \lambda \Psi_n(x)$ çarpımının özdeğeri olan λ 'nın tesbit edilmesi ile a ve a^+ lineer diferansiyel operatörlerinin çarpımının oluşturduğu Denk(2.16) ifadesi türetildi. Denk(2.16) indirgeme zincirinin en alt halkasını oluşturmaktadır. “a” operatörü için yapılan genelleme Denk(2.7)'de verilmiş olup , Denk(2.16)'nın oluşturulmasında kullanılmıştır. Dalga fonksiyonu Denk(2.13) normalizasyon sabiti olmaksızın verilmiştir. Denk(2.16) ifadesi Whittaker Denklemi ile ilgili olarak önemli bir rol oynar.

Heisenberg Metodu indirgemeler zinciri ve kıyas yoluyla sonuca gitmeyi hedefleyen bir metoddur, bu zincirin halkalarından biride Whittaker Denklemidir.

Çalışmamızda yeni potansiyeller türetmek için kullandığımız Denk(2.34) ifadesi , bu ifadedeki yapılan değişiklikler sonucu yeni potansiyeller oluşturduğu yapılan çalışmada görülmektedir. Denk(2.36)'nın 3-boyutlu Harmonik Osilatör potansiyeline (İzotropik salıncı) , Denk(2.37)'nin 3-boyutlu Coulomb potansiyeline , Denk(2.38)'in bir boyutlu Morse potansiyeline götürdüğü görülmektedir.

$b=0$, $E=0$ seçilmesiyle ve Denk(2.41)'deki genellemenin kullanılmasıyla $\sigma+1>0$ için Denk(2.62) ile verilen kuantum koşulunu oluşturmak mümkündür, buda bizi sırasıyla $\sigma=0$ için Harmonik Osilatör , $\sigma=1$ için Coulomb potansiyeline götürür.

Bu metodu kullanırken unutulmaması gereken bir durumda $E=0$ seçilmesi bizi serbest parçacık problemine götürür gibi düşünülse de bu metodun kendine has bir özelliğinden dolayı seçilmektedir. $E=0$ seçimi ile oluşturulan Schrödinger Denklemine sabitin ayrılması bize enerji ifadesini verir.

$b=0$ için Harmonik Osilatörün enerjisi Denk(2.64) ile verilirken , $b\neq 0$ için Denk(3.35) 'de verilmektedir. Harmonik Osilatörün enerjisini her iki durum için de

bulmamız mümkündür. Problemin daha genel bir forma indirgenmesi Schrödinger Denklemine sıfıra eşit enerji ile almaklada mümkündür.

σ 'nın farklı değerleri için potansiyel parametreleri arasındaki bağımlılık Denk(2.77)'de verilmiştir. Gördüğümüz gibi Denk(2.44)'deki sabitin ayrılması enerji spektrumunu verir. Denk(2.76) ve Denk(2.89) ile verilen enerji değerlerinin virial teorem ve WKB metodu ile elde edilen sonuçlar ile uyumlu olduğu görülmektedir [8].

Üçüncü bölümde ise $\mu = 1/4$ seçilmesi, Whittaker Denklemine Denk(2.22)'yi Denk(2.16) formundaki a^+ çarpımı ile oluşturulan ifadeye indirger. Denk(3.2)'deki " σ "nın kullanılmasıyla Denk(3.7)'deki kuantum koşulu oluşturulur. Denk(3.8) ile verilen ifade için ($\ell=0$, $A=(1/2)m\omega^2$) enerjiyi Denk(3.10)'da bulabiliriz. Denk(3.3)'deki potansiyel ile Denk(2.44)'deki potansiyelin birbiri ile uyumlu olduğu görülebilir. Enerji özdeğerlerinin karşılaştırılması yapılırsa ve buna örnek vermek gerekirse Denk(2.64) ile Denk(3.10) birbirinin aynısı olduğu görülmektedir. Denk(3.14) ile verilen enerji ifadesi virial teorem ve WKB metodu ile verilen sonuçlarla benzerdir.

Denk(2.34)'deki ifadede $b \neq 0$ için farklı potansiyellerin türetilmesi söz konusudur. Buda Denk(2.34)'de bir fazla terimi daha dikkate almamız anlamına gelir ve hesaplama metodu önceki ile aynı olmasına rağmen bu bizi yeni çözülebilir problemlere götürür. $b \neq 0$ için potansiyel ifadesini Denk(3.19)'da bulmak mümkündür.

Üç boyutlu Harmonik Osilatör potansiyeli ister $b=0$ için, ister $b \neq 0$ için çözülsün enerji özdeğerlerinde herhangi bir değişiklik olmadığı görülmektedir. Aynı enerji ifadesini Denk(3.10) ile verilen a^+ çarpımı ile oluşturulan Schrödinger Denklemine kullanarak da bulabiliriz.

Son olarak da Morse potansiyeli incelenmiş potansiyel ifadesi Denk(3.54), enerji ifadesi Denk(3.68)'de verilmiştir. Denk(3.62) ile verilen parametrelerin vasıtasıyla enerji özdeğerlerine ulaşılmıştır.

Bu metod çok sayıda potansiyele uygulanabilmesi , enerji özdeğerlerinin “tam” olarak elde edilebilmesi ve normalize dalga fonksiyonlarının belirlenebilmesi açılarından tercih edilebilir fakat yapılacak genellemelerin daha önceden kestirilememesi bu metodun zorluklarından biridir. Ayrıca bu metodun uygulandığı Kuantum Mekanik sistemlerin enerji özdeğerlerinin bulunmasında karmaşık ve uzun matematiksel işlemler içermesi bir diğer zorluk olarak dikkate alınabilir.



KAYNAKLAR

1. Powell, J.L. and Creasemann, B. , 1962, Quantum Mechanics, **Addison Wesley Company**, 140, London.
2. Seefharman, M. , Vasan, S. S. , 1984, "Higher-Order JWKB approximations for radial problems : I. Modification of the effective potential" ,**J. Phys. A: Math. Gen.** , 17 , 2485 .
3. Dutt , R. , Khare, A ., Sukhatme, U. P . , 1986, "Exactness of supersymmetric WKB spectra for shape-invariant potentials", **Phys. Lett. B** , 181, 295 .
Adhikari, R. , Dutt , R . , Khare, A ., Sukhatme, U. P . ,1988, "Higher Order WKB appromations in supersymmetric quantum mechanics" , **Phys. Rev. A** , 38, 1679 .
4. Cooper, F. , Ginocchio, J. N. , 1987, "Relationship between supersymmetric and solvable potentials" , **Phys. Rev. D**, 36 , 2458 .
Fernandez, F. M. ,Ma, Q. , Tipping , R. H. ,1989, "Tight upper and lower bounds for energy eigenvalues of the Schrödinger Equation", **Phys. Rev. A** , 39 ,1605 .
6. Merzbacher , E. , 1970 , Quantum Mechanics , **Wiley International Edition** , New York .
7. Roychoudhury , R. K. and Roy , B. , 1986 , "An algebra approach to the exponential cosine screened Coulomb Potential" , **J. Math. Phys.** , 27, 229 .
Jatkar , D. P. , Kumar, C. N. and Khare , A. , 1989, "A quasi-exactly solvable problem without $SI(2)$ symmetry" , **Phys. Lett. A**, 142 , 200 .
8. Rajchel , K. , 1997, "Solvable potentials generated by the Heisenberg Algebra" , **Acta Physica Polonica B**, 28 , 1553 .

9. Turbiner, A. V. , 1988, "Quasi-exactly solvable problems and $SI(2)$ algebra",
Commun. Math. Phys. , 118 , 467 .
10. Vrscaj , E. R. , 1985, "Algebraic methods, Bender-Wu formulas, and continued fractions at large order for charmonium", **Phys. Rev. A**, 31 , 2054 .
11. Biswas , S. N., Datta , K. , Saxena , R. P. , Srivastava , P. K. , and Varma , V. S. ,1971, "The Hill-Determinant: An application to the anharmonic oscillator",
Phys. Rev. D, 4, 3617.

Hautod , A. , 1986 , "On the Hill-Determinant Method", **Phys. Rev. D** , 33 , 437 .

Chaudhuri , R. N. and Mondal , M. , 1989 , "Hill-Determinant Method with a variational parameter" , **Phys. Rev. A**, 40 , 6080 .
12. Singh, V. , Biswas , S. N. and Datta , K. , 1978, "Anharmonic oscillator and analytic theory of Continued fractions" ,**Phys. Rev. D**, 18 , 1901 .
13. a) Mladinow , L.D. , Shatz, M. P. , 1984 , "Solving the Schrödinger Equation with use of $1/N$ perturbation theory" , **J. Math. Phys.** , 25 , 943 .

b) Imbo , T. , Pagnamenta, A. , Sukhatme, U. , 1984 , "Energy eigen states of spherically symmetric potentials using the shifted $1/N$ expansion", **Phys. Rev.D**, 29 , 1669 .

c) Roy , B. , 1986 , " Shifted $1/N$ expansion for enegy eigenvalues of the exponential cosine screened Coulomb potential",. **Phys. Rev. A**, 34 , 5108 .

d) Christiasen , H. , Epele, L. N. , Fanchiotti , H. , Carcia Canal , C. A. , 1989, "Improved shifted $1/N$ expansion" , **Phys. Rev. A**, 40 , 1760 .
14. Roy , P. , Roy , B. and Roychoudhury , J. , 1989 , "Partial Algebraization of spectral problems and supersymmetry" , **Phys. Lett. A**, 139 , 427 .

15. Özçelik , S. and Şimşek , M. , 1991 , “Exact Solutions of the Schrödinger Equation for Inverse-Power potentials” , **Phys. Lett. A**, 152 , 145 .
Şimşek , M. , Özçelik, S. , Musakhanov, M. M. and Usmanov, M. S. H. , 1999 , “Bound state solutions of the Schrödinger Equation for Central – Symmetric Confining potentials” , **Il. Nuovo Cimento B** , 114 , 983 .
16. Feynman , R. P. and Hibbs , A. R. , 1965 , Quantum Mechanics and path Integrals, **M c. Graw- Hill** , New York .
17. Dutt , R. , Khare, A. and Sukhatme , U. P. , 1988, “Supersymmetry , Shape invariance and exactly solvable potentials” , **Ann. J. Phys.** , 56 , 163 .
18. Chen , G. F. , 1994, “Principles of the First and Second Kind of Balance in a Varying Parameters Method for Eigenvalue Problems in Quantum Mechanics” , **Phys. Rev. A**, 49 , 3234.
19. Killingbeck , J. , 1981, “Renormalised Perturbation Series” , **J. Phys. A: Math. Gen.** , 14 , 1005 .
20. Killingbeck , J. , 1987 , “A Hypervirial JWKB Calculation” , **J. Phys. A: Math. Gen.** , 20 , 601 .
21. Flügge , S. , 1971 , “Practical Quantum Mechanics”, **Springer –Verlag** , Berlin .
22. Znojil , M. , 1983 , “Continued fractions and the potential models of confinemet-reply to a commet” , **J. Phys. A: Math. Gen.** , 16 , 213 .
23. Yuste , S. B. , Sanchez , A . M . , 1993 , “Energy Levels of the Quartic Double Well Using a Phase- Integral Method” , **Phys. Rev. A**, 48 , 3478 .
24. Maitland , G. C. , Rigby , M. , Smith, E. B. and Wakeham, W. A. , 1980 , “Intermolecular Forces” , **Clarendon Press** , 420 , 531, Oxford .

25. Roychoudhury, R. and Varshni, Y. P. , 1990 , “Family exact solutions for the Coulomb potential perturbed by a polynomial in r ” , **Phys. Rev. A**, 42 , 184 .
26. Turbiner, A. V. and Ushveridze, A. G. , 1987 , “Spectral Singularities and quasi- exactly solvable quantal problem” , **Phys. Lett. A**, 126 , 181 .
27. Singh , C. N. , Singh , S. B. and Singh , K. D. , 1990, “Quantum Mechanical sextic oscillator : Normalisability of wave functions and some exact eigenvalues” , **Phys. Lett. A**, 148 , 389 .
28. Dineykhon , M. , Efimov , G. V. , Gandbold , G. , Nedelko , S. N. 1995 , “Oscillator Representation in quantum physics” , **Springer** .
29. Shifman , M. A. , 1989, **Inter. J. Mod. Phys. A**, 4, 2897 .
30. Ushveridze , A. G. , 1988 , **Kratk. Soob. Po. Fiz.** , 37 , 44 .
31. Turbiner , A. V. , 1988 , **Zh. Eksp. Teor. Fiz.** , 94 , 33 .
32. Abramowitz , M. , I. 1972 , **A Handbook of Math. Func.** , Dover .
33. Andrianov , A. A. , Borisov, N. V. , Eides , M. I. , Ioffe , M. V. , 1985, **Phys. Lett. A**, 109, 143 .
34. Sukumar , C. V. , 1985 , **J. Phys. A: Math. Gen.** , 18 , 2917 , 2937 .
35. Sukumar , C. V. , 1985 , **J. Phys. A: Math. Gen.** , 18, L57 , L697 .
36. Levai , G. , 1989 , **J. Phys. A : Math. Gen.** , 22 , 689 .
37. Gendenshtein , L. , 1983 , **JETP. Lett.** , 38 , 356 .
38. Witten , E. , 1981 , **Nucl. Phys. B**, 185 , 513 .

ÖZGEÇMİŞ

1973 yılında Ankara'da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Ankara'da tamamladı. 1992 yılında girmiş olduğu Gazi Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünden 1996 yılında mezun oldu. Aynı yıl Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans programına girdi. Şu an Ankara ilinde öğretmen olarak çalışmaktadır.

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ