

**T.C.**  
**KİLİS 7 ARALIK ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**DÖRT BOYUTLU UZAYDA HARMONİK OSİLATÖR PROBLEMİ**

**Mustafa KIRŞAN**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**Danışman: Doç. Dr. Abdurahman ÇETİN**

**KİLİS**  
**2016**

**Her Hakkı Saklıdır**

## ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

### Dört Boyutlu Uzayda Harmonik Osilatör Problemi

Mustafa KIRŞAN

Kilis 7 Aralık Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Abdurahman ÇETİN

Yıl:2016

Sayfa:41

Bu çalışmada, dört boyutlu uzayda harmonik osilatörün çözümleri araştırılmıştır. Bu çerçevede teorik bir çalışma yapılmıştır. Denklemin çözümü için öncelikle dört boyutlu kartezyen koordinat sisteminden küresel koordinat sistemine dönüşümü yapılmıştır ve bu dönüşüm genel harmonik osilatör denkleminde yerine yazılmış elde edilen 4 değişkenli kısmi diferansiyel denklem farklı özel fonksiyon ve polinomlar aracılığıyla çözülmüştür. Bu anlamda kullanılan özel fonksiyonlarla alakalı kısaca bilgiler verilmiştir. Sonuç olarak, dört boyutta enerji seviyeleri  $n$  ve  $p$  kuantum sayılarına bağlı olarak değiştiği görülmüştür. Bunun yanısıra, dört boyutlu harmonik osilatörde enerji özdeğerlerinin sadece  $n$  ve  $p$  kuantum sayılarına bağlı olmasından ötürü dejenerelikler söz konusudur ve bu çalışmanın sonunda bu dejenere durumları tartışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Harmonik osilatör, Dört boyutlu harmonik osilatör, Chebyshev Polinomları, Asosye Chebyshev Polinomları

## ABSTRACT

MSc. Thesis

The Problem Of The Harmonic Oscillator In Four Dimensions

Mustafa KIRŞAN

Kilis 7 Aralık University

Institute of Science and Technology

Department of Physics

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Abdurahman ÇETİN

Year: 2016

Page:41

In this paper, the solution of the harmonic oscillator has been investigated in four dimensional space. In this sense, a theoretical study was carried out. First of all, the main equation is transformed from cartesian coordinate system into the spherical coordinate system and consequently there have been found a quadrivariant equation. This quadrivariant partial differential equations are solved through various special functions and polynomials. In this context, a brief information was given about these functions and polynoms. According to the result, energy eigenvalue of harmonic oscillator in four dimensions has been found to depend on quantum numbers  $n$  and  $p$ . Therefore, degeneracies have been seen in energy eigenvalues of four dimensional harmonic oscillator which has depend on quantum number  $n$  and quantum number  $p$ . End of the study, the quantum degeneracy states have been discussed.

**Key Words:** Harmonic oscillator, four dimensional harmonic oscillator, Chebyshev Polinomials, Associated Chebyshev Polinomials

## TEŐEKKÜR

Tezimin konusunun belirlenmesinde, arařtırma ařamasında, yön tayininde ve tamamlanmasında destek olan deęerli hocam ve tez danıřmanım sayın Doç. Dr. Abdurahman ÇETİN' e ve eęitim süresince gösterdikleri sabır ve verdikleri her türlü destek için sevgili aileme ve deęerli arkadaşlarıma teşekkürlerimi sunarım.

Mustafa KIRŐAN

Kilis, Mayıs, 2016



## İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT .....	ii
TEŞEKKÜR .....	iii
İÇİNDEKİLER .....	iv
SİMGELER VE KISALTMALAR .....	v
ŞEKİLLER DİZİNİ .....	vi
TABLolar DİZİNİ .....	vii
<b>1.GİRİŞ .....</b>	<b>1</b>
1.1 Harmonik Osilatör .....	2
1.2 Bir Boyutlu Harmonik Osilatör .....	2
1.2.1 Kuantum mekaniğinde harmonik osilatör .....	3
1.2.2 Diferansiyel denklemin çözümü .....	3
<b>2. KÜRESEL SİMETRİK POTANSİYELLER.....</b>	<b>9</b>
2.1 Üç Boyutlu Harmonik Salıncı Problemi .....	9
2.1.1 Açısal momentum özfonksiyonları.....	11
2.1.2 Radyal Schrödinger denklemi .....	17
<b>3. DÖRT BOYUTLU HARMONİK OSİLATÖR PROBLEMİNİN DÖRT BOYUTLU KÜREYE TRANSFERİ.....</b>	<b>21</b>
3.2 Uzamsal Denklemin Çözümü.....	29
<b>4. SONUÇ.....</b>	<b>34</b>
<b>KAYNAKLAR .....</b>	<b>38</b>
<b>EKLER.....</b>	<b>39</b>
<b>ÖZGEÇMİŞ.....</b>	<b>41</b>

## SİMGELER VE KISALTMALAR

$E_n$ : Enerji Özdeğeri

$m$ : kütle

$\hbar = h / 2\pi$

$h$ : Plank sabiti

$\psi$  = Dalga fonksiyonu

$\ell$  : Yörünge kuantum sayısı

$m$ : Manyetik kuantum sayısı

$\pi$ : Sabit sayı

$\varphi$  : Azimutal açı

$H$ : Hamiltonyen

$R_{n\ell}$  : Dalga fonksiyonun radyal kısmı

$Y_\ell^m$  : Dalga fonksiyonun açısal kısmı

$n$  : Temel kuantum sayısı

$Z$  : Atom numarası

$\rho$  : Boyutsuz konum değişkeni

$V$  : Potansiyel Enerji

$N_{\ell m}$  : Normalizasyon sabiti

$P_\ell^m(\cos\theta)$  : Asosye legendre polinomları

$H_n(\rho)$  : Hermite polinomları

$L(\rho)$  : Laguerre polinomları

$U_n^\ell$  : Asosye ikinci tip Chebyshev Polinomları

${}_1F_1$  : Konfluent Hipergeometrik Fonksiyonlar

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1 Harmonik osilatörün potansiyel enerji ve enerji özdeğerlerinin grafiği .....	8
Şekil 1.2 Harmonik osilatör için ilk dört enerji özdeğeri ve olasılık yoğunlukları.....	8
Şekil 2.1 Kutupsal koordinatlar .....	10
Şekil 2.2 Legendre Polinomları.....	13
Şekil 3.1 <i>ikinci tip Chebyshev polinomlarının</i> Mathematica programı vasıtasıyla çizilen grafikleri.....	28



## TABLULAR DİZİNİ

Tablo 1.1 Bir boyutlu harmonik osilatör için normalize edilmiş ilk dört dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerleri.....	7
Tablo 2.1 Legendre Polinomlarının ilk bir kaç değeri.....	13
Tablo 2.2 Asosye ( bağlı) Legendre Polinomları.....	14
Tablo 2.3 Küresel harmonik dalga fonksiyonlarının ilk birkaç değeri .....	15
Tablo 3.3 Asosye Legendre Polinomları.....	26
Tablo 3.1 İkinci tip Chebyshev Polinomları .....	28
Tablo 4.1 de taban durumu enerji seviye durumu için enerji özdeğeri ve dejenere durum sayısı .....	34
Tablo 4.2 de $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 0$ için dejenere durumu.....	34
Tablo 4.3 de birinci enerji seviye durumu için enerji özdeğeri ve dejenere durum sayısı .....	34
Tablo 4.4 $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 1$ için dejenere durumu gösterilmiştir. ....	34
Tablo 4.5 de ikinci enerji seviye durumu için enerji özdeğeri ve dejenere durum sayısı.....	35
Tablo 4.6 $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 2$ için dejenere durumu .....	35
Tablo 4.7 de üçüncü enerji seviye durumu için enerji özdeğeri ve dejenere durum sayısı .....	35
Tablo 4.8 $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 3$ için dejenere durumu. ....	36
Tablo 4.9 Genel dejenere durum sayıları .....	37



## 1.GİRİŞ

Bir parçacığın, bir denge konumu etrafında salınımlar yapması hareketi, fiziğin en temel problemlerinden birini temsil eder. Kuantum mekaniğinde, temel olması, kuantumlanmış enerji düzeylerinin çok bariz bir şekilde ortaya çıkması, deneysel verilerle örtüşmesi sebebiyle harmonik osilatör problemi ilk incelenen problemlerdendir. Hemen hemen her sistemin, dengeye yaklaşırken bir harmonik osilatör gibi davranabilme olasılığı, yeni teorilerin ilk uygulandığı problemlerden birinin harmonik osilatör problemi olmasında etkili olmuştur (Merzbacher, 1998) (Sakurai, 1994) (Gasiorowicz, 1974). Birçok fiziksel sistemin (diatomik moleküllerin titreşimi, kristal örgülerde atomların veya çekirdek içinde nükleonların salınımları, ... vs.) temel yapısı bir harmonik salınıcı problemidir. Tüm bu sistemlerin fiziksel davranışlarını doğru olarak tanımlayabilmek adına harmonik osilatörün kuantal incelenmesi önemli yer tutmaktadır. Bunun yanısıra, elektromanyetik alanların kuantum teorisini açıklamada, harmonik osilatörün örnekleri etkili olmaktadır (Kuantumlu Alanlar Teorisi). Harmonik osilatörü önemli kılan bir başka yönü de enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları açısından net sonuçlar ortaya koymasıdır. Günümüze kadar harmonik osilatörle ilgili pek çok teorik ve deneysel araştırmalar yapılmıştır. Mesela, zaman bağlı harmonik osilatör, delta fonksiyonlu harmonik osilatör, basit harmonik osilatör ve spiked harmonik osilatör gibi (Aguilera-Navarro, Estévez, & Gua, 1990). Ayrıca son yıllarda harmonik osilatör sayesinde, hapisli kuantum sistemlerine olan ilgi yenilenmiştir. Bu ilgi, teknolojinin hızla ilerlemesi ile bazı konulara olan motivasyonu artırmıştır. Örnek olarak yarıiletken kuantum noktaları alanında, bazı sistemlerin elektronik yapılarının hesaplanmasında ve etkilerini incelemeye önemli yer etmiştir. Geçen yıllarda, teorik ve matematiksel fizikte ki önemli gelişmeler, üç boyutlu kuantum probleminin genellemesi daha büyük boyutlarda harmonik osilatörün incelenmesine kapı açmıştır. Örnek olarak, hidrojen atomunun N- boyut benzetmesi üzerine yıllarca geniş kapsamlı çalışma yapılmıştır (Al-Jaber, 2008).

Bu tezde birinci bölümde harmonik osilatörden kısaca bahsedip, bir boyutlu harmonik osilatörün kuantal çözümüne bakılacaktır. İkinci bölümde ise, küresel simetrik bir sistem olan 3 boyutlu uzayda harmonik osilatörün çözümüne bakılacaktır. Bu tez çalışmasında üzerinde en çok durulan üçüncü bölüm ise dört boyutlu uzayda harmonik

osilatör probleminin çözümlerinin araştırılmasına ayrılmıştır. Bu bölümde elde edilen kısmi diferansiyel denklem değişken ayrışımı yöntemi ile değişkenlerine ayrılmış, dört adet diferansiyel denklem elde edilmiş, tek tek ele alınarak çözülmüş, dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri bulunmuştur. Son bölüm ise hesaplanan enerji düzeylerinin dejenere durumlarının kontrol edilmesi ve tablo halinde sunulmasına ayrılmıştır.

### 1.1 Harmonik Osilatör

Harmonik osilatör, kütlesi  $m$  olan bir cisme tesir eden geri çağırıcı bir kuvvetin tesiriyle ortaya çıkar ve bu kuvvet ilk konumundan itibaren yerdeğiştirme ile orantılıdır. Bu problemin çözümü, sistemi temsil eden dalga fonksiyonunun sisteme ait tüm bilgileri içermesi ve özdeğerlerin tespit edilmesine örnek olması açısından ilginçtir. Kuantum mekaniğinde karşılaşılan durumlardan bazıları, örneğin kapalı bir kaptan elektromanyetik dalganın ışıması, katı ve sıvılarda ses dalgalarının yayılması gibi olaylar bir harmonik salıncıyla eşdeğer olup, bunların ele alınması burada geliştirilen kavramlarla çözülebilir (Vuletic, 2015).

### 1.2 Bir Boyutlu Harmonik Osilatör

Salıncı problemi, Schrödinger diferansiyel denklemini doğrudan çözmek veya salıncı hamiltonyenini çeşitli operatörler kullanarak yazmak ve operatör cebri yardımıyla çözmek gibi farklı yollarla çözülebilir. Burada izleyeceğimiz yol ise, diferansiyel denklemin çözümü metodudur.

Klasik olarak, bir denge konumundan  $x$  mesafesinde bulunan  $m$  kütleli bir parçacığın  $F = -kx$  gibi bir kuvvetin etkisinde hareket durumunu ele alalım. Bu parçacığın toplam enerjisi

$$E = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (1.1)$$

olarak yazılabilir. Burada  $\omega = \sqrt{k/m}$  ifadesi açısal frekansı temsil etmektedir.

Klasik mekanik kısmında, verilen bir  $E$  toplam enerjisi için parçacığın  $x$  konumu,  $x = A \cos \omega t$  şeklinde periyodik olarak  $[-A, +A]$  değerleri arasında değişir. Burada  $A$  genliği,  $E = \frac{1}{2}kA^2$  bağıntısı ile sınırlı olup,  $E$  enerjisi her değeri alabilir.

### 1.2.1 Kuantum mekaniğinde harmonik osilatör

Kuantum mekaniğinde harmonik osilatör problemini çözmek için Schrödinger Denklemi yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.2)$$

Denklem  $-\frac{2m}{\hbar^2}$  ile çarpılırsa diferansiyel denklem

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 \right) \psi(x) = 0 \quad (1.3)$$

şekline dönüşür, burada  $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$  olmak üzere, basit  $\rho = \alpha x$  değişken değişimi ile

Denklem (1.3)

$$\frac{d^2\psi(\rho)}{d\rho^2} + \left[ \frac{2E}{\hbar\omega} - \rho^2 \right] \psi(\rho) = 0$$

şeklinde daha basit bir diferansiyel denkleme dönüşür. Burada  $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$  kısaltması

kullanılırsa

$$\frac{d^2\psi(\rho)}{d\rho^2} + (\lambda - \rho^2)\psi(\rho) = 0 \quad (1.4)$$

diferansiyel denklem daha da basit bir forma indirgenir.

### 1.2.2 Diferansiyel denklemin çözümü

Diferansiyel denklemin çözmek için önce asimptotik limitinde fonksiyonun davranışına bakalım ( $\rho \rightarrow \pm\infty$ ). Bu limit değerinde inceleme yaparken  $\lambda$ 'lı terim küçük kalacağından ihmal edilebilir. Yaklaşık olarak elde edilen denklem;

$$\frac{d^2\psi(\rho)}{d\rho^2} + \rho^2 \psi(\rho) = 0 \quad (1.5)$$

olur. Bu diferansiyel denklemin çözümünü sağlayan dalga fonksiyonu;  $\psi(\rho) = e^{-\rho^2/2}$  şeklindedir. Bu asimptotik değeri bulduktan sonra, tüm bölgede geçerli olan bir çözümü bu asimptotik değeri de içerecek şekilde

$$\psi(\rho) = U(\rho)e^{-\rho^2/2} \quad (1.6)$$

çözümler aranır. Burada dikkat edilmesi gereken bir hususta; sonsuzda sınırlı kalabilmek için negatif üslü çözümün alınmasıdır. Schrödinger denkleminde kullanılmak üzere,

$$\frac{d\psi(\rho)}{d\rho} = (u' - \rho u)e^{-\rho^2/2}$$

$$\frac{d^2\psi(\rho)}{d\rho^2} = [u'' - 2\rho u' + (\rho^2 - 1)u]e^{-\rho^2/2}$$

ifadeleri yerine yazılırsa, yeni  $u(\rho)$  fonksiyonunun sağlayacağı denklem,

$$u'' - 2\rho u' + (\lambda - 1)u = 0$$

olur. Bu denklem *kuvvet serisine açılarak* veya *Frobenius yöntemi* kullanılarak çözülebilir. Bunun için  $u(\rho)$  fonksiyonu bir kuvvet serisi şeklinde açılarak bir üstteki denklemde yerine yazılır.

$$u(\rho) = c_0 + c_1\rho + c_2\rho^2 + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^m \quad (1.7)$$

Burada  $c_m$  katsayıları bulunursa  $u(\rho)$  fonksiyonları bulunmuş olur. Bu seri cinsinden  $u''(\rho)$  ve  $u'(\rho)$  ifadeleri hesaplanarak (1.5) denkleminde yerine yazılırsa;

$$\sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2)c_{m+2}\rho^m - 2\rho \sum_{m=0}^{\infty} mc_m\rho^{m-1} + (\lambda-1)\sum_{m=0}^{\infty} c_m\rho^m = 0$$

şeklinde bir denklem elde edilir. Bu denklemde gerekli ara işlemler yapıldığında aşağıdaki şekle indirgenir.

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

Buradan hareketle  $c_m$  katsayıları arasında bir tekrarlıma (rekürans) bağıntısı elde edilir.

$$c_{m+2} = \frac{2m+1-\lambda}{(m+1)(m+2)} c_m$$

Kuvvet serisinin ilk iki katsayıları olan  $c_0$  ve  $c_1$  biliniyorsa, serinin diğer katsayıları da bu bağıntı sayesinde türetilir. Bu katsayılardan meydana gelen sonsuz terimli seri, çözmeye çalıştığımız  $u(\rho)$  fonksiyonu olacaktır.

Yalnız burada yeni bir sorunla karşılaşmaktadır. Karşılaşılan sorun ise, bu sonsuz terimli seri çözümü yakınsak mıdır? Eğer yakınsak değilse dalga fonksiyonu olarak kabul edilemez. Bu sorunun cevabını bulmak üzere dolaylı bir yol izleyerek ardışık katsayılar oranı olan  $c_{m+2}/c_m$  ifadesinin  $m$  indisinin büyümesiyle nasıl değiştiğine bakılırsa:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{c_{m+2}}{c_m} = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{2m+1-\lambda}{(m+1)(m+2)} \rightarrow \frac{2}{m}$$

Bu serinin davranışının  $e^{\rho^2}$  fonksiyonun davranışı şeklinde olduğu açıktır. Yani yine  $u(\rho)$  fonksiyonunun davranışı gibidir.

$$e^{\rho^2} = 1 + \rho^2 + \frac{\rho^4}{2!} + \dots = \sum_{m \text{ çift}} \frac{\rho^m}{(m/2)!}$$

olduğu göz önüne alınırsa bu serinin katsayılarının asimptotik davranışı,

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{c_{m+2}}{c_m} = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{(m/2)!}{(m/2+1)!} = \frac{1}{(m/2+1)} \rightarrow \frac{2}{m}$$

Buradan da anlaşılacağı üzere serinin başlangıç terimleri farklı olabilir fakat  $\rho^m$  kuvvetleri yükseldikçe iki seride aynı davranışı sergiler. Bu durumda  $\psi$  dalga fonksiyonu

$$\psi = e^{-\rho^2/2} u(\rho) \rightarrow e^{-\rho^2/2} \times e^{+\rho^2} \rightarrow e^{+\rho^2/2} \quad (1.8)$$

gibi davranacak, yani sonsuzda ıraksak olacaktır. O halde sonsuz terimli bir seri çözümü kabul edilemez. Bu sorunu aşmanın bir yolu vardır:  $c_m$  katsayılarını veren ifadeye tekrar bakılacak olursa  $m$  indisinin bir  $m = n$  değerine geldiğimizde payın sıfır olması

gerekir. Burada  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$  şeklinde ilerlemektedir. Seri bu  $\rho^n$  değerinde biter, çünkü bu  $c_n$  değerinden itibaren  $c_{n+2} = c_{n+4} = \dots = 0$  olacak demektir. Böylece  $u(\rho)$  çözümleri birer polinom olurlar. Bu durumda;

$$c_{m+2} = \frac{2m+1-\lambda}{(m+1)(m+2)} c_m \quad 2n+1-\lambda = 0$$

olmalıdır. Burada daha önce tanımladığımız  $\lambda$  katsayısının ne olduğu hatırlanırsa;

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} \lambda$$

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} (2n+1) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (1.9)$$

olur. Böylece seri çözümlerinin dalga fonksiyonu olabilme koşulunu sağlamasını isteyerek kuantumlu enerji öz değerlerini  $n$  nin değişen değerleriyle bulmuş oluruz. Şimdi dalga fonksiyonlarını bulmaya çalışalım.

$$c_{m+2} = \frac{2(m-n)}{(m+1)(m+2)} c_m \quad (\text{burada } 2n+1-\lambda = 0 \text{ 'dır})$$

Bu katsayıları hesaplariken  $c_0$  ve  $c_1$  katsayıları keyfi seçilebilir. Özel olarak  $c_0 = 1$  ve  $c_1 = 0$  değerleri seçilirse *çift çözümler*,  $c_0 = 0$  ve  $c_1 = 2$  değerleri seçilirse *tek çözümler* olmak üzere, matematikte bilinen özel polinomlar ailesinden Hermite polinomları  $H_n(\rho)$  elde edilir.

$$u_n(\rho) = H_n(\rho)$$

Başlangıçta dalga fonksiyonunu  $\psi(\rho) = e^{-\rho^2/2} u(\rho)$  seçtiğimiz hatırlanırsa, harmonik salıncı fonksiyonları da  $n$  kuantum sayısına bağlı olarak

$$\psi(\rho) = A_n e^{-\rho^2/2} H_n(\rho) \quad (\rho = \alpha x \quad \text{ve} \quad \alpha = \sqrt{m\omega / \hbar})$$

elde edilir.  $A_n$  sabitini elde etmek için dalga fonksiyonunun normlanması gerekmektedir.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = \frac{|A_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho e^{-\rho^2/2} H_n(\rho) e^{-\rho^2/2} H_n(\rho)$$

$$= \frac{|A_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho e^{-\rho^2/2} H_n(\rho) e^{-\rho^2/2} H_n(\rho)$$

Bu denklemin Hermite polinomlarındaki diklik bağıntısı ile benzer olduğu net olarak görülmektedir ( $m=n$ ). Bunun değeri yazılırsa

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} \quad (1.10)$$

bulunur. Özetle harmonik salıncı dalga fonksiyonlarının değişimi aşağıdaki gibi değişim göstermektedir.

$$\psi(\rho) = A_n e^{-(\alpha x)^2/2} H_n(\alpha x) \quad \text{ve} \quad (1.11)$$

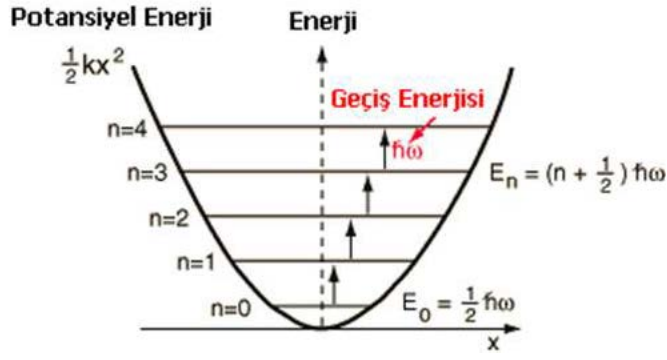
$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (1.12)$$

Tablo 1.1 Bir boyutlu harmonik osilatör için normalize edilmiş ilk dört dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerleri

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

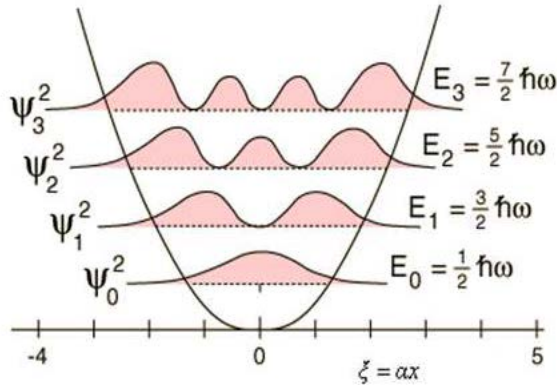
Sonuçları irdelenirse;

- $E_n$  özdeğerlerinin kuantize olduğunu ve eşit  $\hbar \omega$  aralıklarla değiştiğini görebilirsiniz. Gerçektende diatomik moleküllerin titreşim yoluyla uyarılması sonucu elde edilen spektrumlarda her bir radyasyonun frekansı, doğal frekans denilen bir  $\nu_0$  değerinin tam katları şeklinde değişim sergilemektedir.



Şekil 1.1 Harmonik osilatörün potansiyel enerji ve enerji özdeğerlerinin grafiği

- Taban durumu ( $n = 0$ ) enerjisinin sıfırdan farklı oluşu tamamen bir kuantal etkidir. Eğer  $E_0 = 0$  olsaydı parçacık hem durgun ( $p = 0$ ) ve hem de denge konumunda ( $x = 0$ ) olurdu. Bu da momentum ve konumun birlikte kesin olarak bilinmesi anlamına gelir ki bu durumda *belirsizlik ilkesine* aykırı olurdu. Taban durumu enerjisine *sıfır-noktası enerjisi* denir.
- Her bir  $\psi_n$  dalga fonksiyonunun tam  $n$  tane reel kökü veya düğüm noktası vardır. Bu özellik çok geneldir: *Enerji arttıkça dalga fonksiyonunun düğüm noktalarının sayısı da artar.*



Şekil 1.2 Harmonik osilatör için ilk dört enerji özdeğeri ve olasılık yoğunlukları

Yine aynı metotla üç boyutta harmonik osilatörün enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları için bir çözüm üretilecektir. Bir önceki bölümün çözümünde teferruatıyla anlatıldığından ötürü üç boyutta bu işlemler tekrar gösterilmeyecektir (Vuletic, 2015).



## 2. KÜRESEL SİMETRİK POTANSİYELLER

Kuantum mekaniğinde karşılaşılan sistemler genelde üç boyutlu, çok parçacıklı sistemlerdir. Üç boyutlu izotropik harmonik salıncının  $kr^2/2$  potansiyeli küresel simetrik potansiyeldir. Bu bölüm de üç boyutlu harmonik salıncı probleminin çözümü incelenecektir.

### 2.1 Üç Boyutlu Harmonik Salıncı Problemi

3 boyutlu uzayda bir  $V(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2r^2$  potansiyelinde hareket eden bir parçacığın toplam enerjisinin

$$E = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \quad (2.1)$$

ve buna karşılık gelen Schrödinger Denklemini

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r}) + \left(\frac{1}{2}m\omega^2r^2\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.2)$$

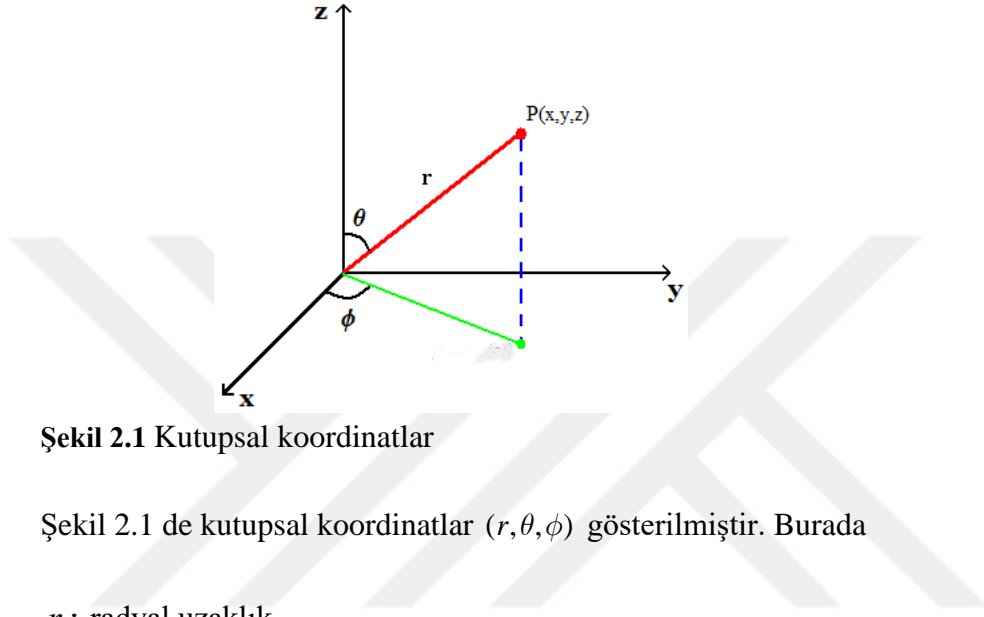
şeklinde olur. Verilen bir potansiyel fonksiyonu için bu, üç değişkenli bir kısmi diferansiyel denklem olur ki çözümü, tek boyutlu problemlere kıyasla, oldukça zordur.

Ancak, fiziksel sistemlerde çok sık karşılaşılan bir durumda, potansiyel fonksiyonu küresel simetriye sahipse, yani

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

şeklinde sadece orijinden  $r$  uzaklığına bağlı ise, problemin çözümü biraz kolaylaşır. Mesela, bir atomda  $+Ze$  yüküyle yüklenmiş çekirdek çevresinde dönen bir elektron için  $V(r) = Ze^2/r$  Coulomb potansiyeli küresel simetri özelliği gösterir. Bir çekirdekteki nükleonlar için arasıra kullanılan  $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2r^2$  harmonik salıncı potansiyeli veya küresel kuyu potansiyeli yine küresel simetriye sahiptirler. Magnetik etkileşme haricindeki, bilinen bütün potansiyeller küresel simetri özelliği gösterir.

Klasik mekanikten de bilindiđi gibi, küresel simetrik bir potansiyelin uyguladıđı kuvvet merkezlidir. Merkezsel bir kuvvetin en önemli özelliđi ise, *açısal momentumun korunumudur*. Kuantum mekaniđinde de görüleceđi üzere, açısal momentum operatörü hamiltonyenle sıra deđiştirme özelliđine sahip olur ve ortak özvektörleri bünyesinde barındırır. Küresel simetriyi tanımlayabileceđimiz en uygun koordinat sistemi *kutupsal koordinatlar*dır.



Şekil 2.1 Kutupsal koordinatlar

Şekil 2.1 de kutupsal koordinatlar  $(r, \theta, \phi)$  gösterilmiştir. Burada

$r$  : radyal uzaklık

$\theta$  : kutup açısı

$\phi$  : azimut veya boylam açısı

olup,  $(x, y, z)$  kartezyen koordinatlarıyla ilişkileri şöyledir.

$$x = r \sin \theta \cos \theta$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

Yukarıdaki Schrödinger Denkleminin kutupsal koordinatlarda çözümünü yapabilmemiz için, öncelikle kısmi türevler  $(r, \theta, \phi)$  deđişkenlerine bađlı olarak bulunmalıdır. Gerekli işlemler yapıldıktan sonra kutupsal koordinatlarda Schrödinger Denkleminin ifadesi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \psi = E \psi \quad (2.3)$$

olarak yazılabilir.  $\psi$  dalga fonksiyonu  $(r, \theta, \phi)$  koordinatlarının bir fonksiyonu olur.

Potansiyelin sadece  $r$  değişkenine bağlı oluşu nedeniyle, değişken ayrımı yöntemi burada uygulanabilir. Bu amaçla

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

şeklinde bir çözüm aranır. Kısmi türevler alındıktan sonra, eşitliğin iki tarafı  $(RY)$  ile bölünür. Daha sonra  $r$  ye bağlı terimler bir taraf ayrılır ve her iki taraf  $\lambda$  gibi bir sabite eşitlenirse

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[ E - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right] R - \lambda R = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \lambda Y = 0 \quad (2.5)$$

denklemleri bulunur.

Bu denklemlerden birincisi sadece  $r$  koordinatına bağlı olup *Radyal Schrödinger denklemi* adını alır. İkinci denklemde ise  $V(r)$  potansiyeli yoktur. O halde, *tüm küresel simetrik potansiyeller* için dalga fonksiyonunun açısallığı aynı  $Y(\theta, \phi)$  fonksiyonu ile belirlenmiş olacaktır.

### 2.1.1 Açısallık momentüm özfonksiyonları

Yukarıda  $Y(\theta, \phi)$  fonksiyonunun sağladığı denklem (2.5)

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \lambda Y = 0$$

şeklinde dir. Denklem (2.5)'e bakıldığında iki farklı değişkene sahip olduğu görülmektedir. Yeniden değişken ayrımı tekniğine başvurup bu iki açısallık değişken de ayrıştırılabilir.

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Kısmi türevler alınıp her bir terim  $\Theta(\theta)$   $\Phi(\phi)$  faktörüne bölünür ve sadece  $\phi$  ye bağlı terimler eşitliğin diğer tarafına geçirilirse

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2}$$

denklemin her iki tarafıda aynı bir sabite eşit olmalıdır. Bu sabit  $m^2$  olarak alınırsa elde edilen iki denklem

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m^2 \Phi = 0 \quad (2.6)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left( \lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0 \quad (2.7)$$

olur.

Birinci denklemin çözümü doğrudan yazılabilir:

$$\Phi(\phi) = A e^{im\phi} \quad (2.8)$$

Bu bulunan kısım denklemin *azimut kısmı* olarak bilinir ve  $\phi$  açısı  $[0, 2\pi]$  arasında değişmektedir. Çözümün geri kalan kısmında sadece  $\theta$  'ya bağlı kısım yani *açısal kısım* bulunmaktadır. Yani

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left( \lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0$$

şeklindedir. Bu denklem yeni bir ( $\mu = \cos \theta$ ) değişkeni cinsinden yazıldığında

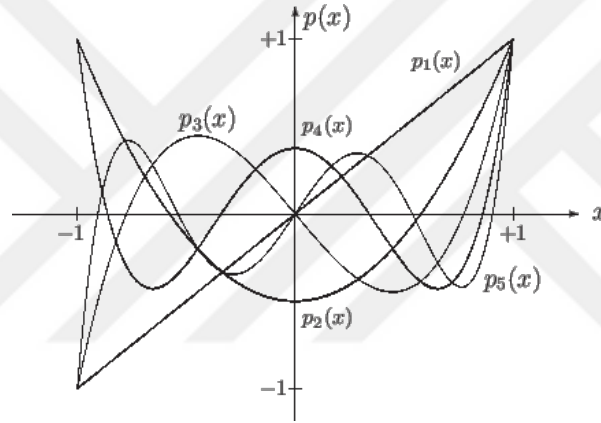
$$(1 - \mu^2) \frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} - 2\mu \frac{d\Theta}{d\theta} + \left( \lambda - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right) \Theta = 0 \quad (2.9)$$

olur.  $\theta$  açısı  $[0, \pi]$  aralığında değiştiği için,  $\mu$  değişkeni  $[-1, 1]$  aralığında tanımlıdır.

Bu denklemde ( $m = 0$ ) için çözümler *Legendre polinomlarıdır*.

Tablo 2.1 Legendre Polinomlarının ilk bir kaç değeri

Legendre Polinomları	$(\mu = \cos \theta)$
$P_0(\mu) = 1$	
$P_1(\mu) = \mu$	
$P_2(\mu) = \frac{1}{2}(3\mu^2 - 1)$	
$P_3(\mu) = \frac{1}{2}(5\mu^3 - 3\mu)$	
$P_4(\mu) = \frac{1}{8}(35\mu^4 - 30\mu^2 + 3)$	



Şekil 2.2 Legendre Polinomları

Şekil 2.2 de Legendre Polinomlarından bir kaçını gösterilmiştir.

Açısal denklemde ( $m \neq 0$ ) olduğunda çözümler farklı, ancak yine *Legendre polinomları* ailesinden olurlar.

Önce, *bağlı (asosye) Legendre polinomlarını* tanımlayalım.

$$P_\ell^m(\mu) = (1 - \mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_\ell(\mu) \quad (m \geq 0) \quad (2.10)$$

$$P_\ell^m(\mu) = (-1)^m \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!} P_\ell^{|m|}(\mu) \quad (m < 0) \quad (2.11)$$

$\ell$  ve  $m$  gibi iki indisle tanımlanan bu polinomlarda ( $m > \ell$ ) olduğunda türevler sıfır olacağından,  $m$  indisi doğal olarak  $[-\ell, +\ell]$  aralığında değerler alabilir. İlk birkaç bağlı Legendre polinomunu yazalım ( $P_\ell^0$  lar bildiğimiz Legendre polinomlarıdır):

Tablo 2.2 Asosye ( bağı) Legendre Polinomları

$$\begin{aligned} P^0 &= 1 \\ P_1^1 &= -\sin \theta \\ P_2^2 &= 3 \sin^2 \theta \\ P_2^{-2} &= \frac{1}{8} \sin^2 \theta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_1^{-1} &= \frac{1}{2} \sin \theta \\ P_2^1 &= -3 \sin \theta \cos \theta \\ P_2^{-1} &= \frac{3}{2} \sin \theta \cos \theta \end{aligned}$$

Denklem (2.8) ile verilen Legendre diferansiyel denklemin  $m$  defa türevini alalım gerektiği yerde  $P_\ell^m$  ifadesi kullanıldığında

$$(1 - \mu^2) \frac{d^2 P_\ell^m}{d\mu^2} - 2\mu \frac{dP_\ell^m}{d\mu} + \left[ \ell(\ell + 1) - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] P_\ell^m = 0 \quad (2.12)$$

bulunur. Bu denklem, çözmeye çalıştığımız  $\Theta(\theta)$  denkleminin  $\lambda = \ell(\ell + 1)$  konulmuş hali olduğundan çözüm bulunmuş olur.

$$\Theta(\theta) = P_\ell^m(\cos \theta)$$

Nihayet, başlangıçta yola çıktığımız açısız denklem  $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$  denklemlerini yazabiliriz.

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = N_{\ell m} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad \left\{ \begin{array}{l} \ell=0,1,2,\dots \\ m=-\ell,\dots,-1,0,1,\dots,\ell \end{array} \right\} \quad (2.13)$$

$N_{\ell m}$  ise normlama sabiti olup aşağıda eşitlikle hesaplanır.

$$N_{\ell m} = (-1)^m \left[ \frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.14)$$

$Y_\ell^m$  fonksiyonları ise *Küresel Harmonikler* adıyla bilinirler. Küresel Harmoniklerden ilk bir kaçını şöyle sıralanabilir.

Tablo 2.3 Küresel harmonik dalga fonksiyonlarının ilk birkaç değeri

$$\begin{array}{ll}
 Y_0^0 = \left[ \frac{1}{4\pi} \right]^{1/2} & Y_1^0 = \left[ \frac{3}{4\pi} \right]^{1/2} \cos \theta \\
 Y_1^1 = - \left[ \frac{3}{8\pi} \right]^{1/2} \sin \theta e^{i\phi} & Y_1^{-1} = \left[ \frac{3}{8\pi} \right]^{1/2} \sin \theta e^{-i\phi} \\
 Y_2^0 = \left[ \frac{5}{16\pi} \right]^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1) & Y_2^{-1} = - \left[ \frac{15}{16\pi} \right]^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi} \\
 Y_2^1 = - \left[ \frac{15}{16\pi} \right]^{1/2} \sin \theta & Y_2^{-2} = \left[ \frac{15}{32\pi} \right]^{1/2} \sin^2 \theta e^{-2i\phi} \\
 Y_2^2 = \left[ \frac{15}{32\pi} \right]^{1/2} \sin^2 \theta e^{2i\phi} &
 \end{array}$$

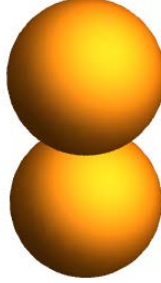
Özel olarak,  $m = 0$  için, Legendre polinomları bulunur.

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta) \quad (2.14)$$

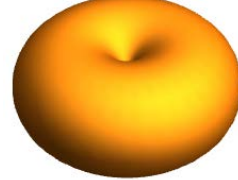
Sabit bir  $r$  uzaklığında olasılık yoğunluğu  $|Y_\ell^m(\theta, \phi)|^2$  ile verilir. ( Şekil 2.2 )



Şekil 2.2.a  $|Y_0^0|^2$

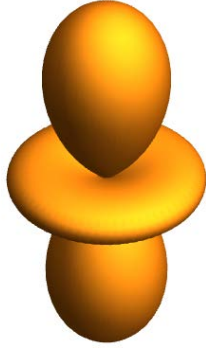


Şekil 2.2.b  $|Y_1^0|^2$

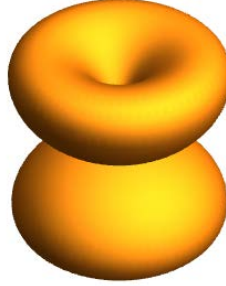


Şekil 2.2.c  $|Y_1^1|^2$

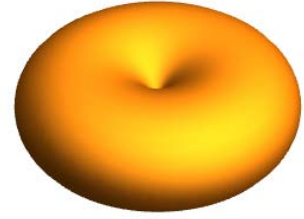
Şekil 2.2.d  $|Y_2^0|^2$



Şekil 2.2.e  $|Y_2^1|^2$



Şekil 2.2.f  $|Y_2^2|^2$



Şekil 2.3 Küresel Harmoniklerde sabit bir  $r$  uzaklığında olasılık yoğunlukları

Küresel harmonikler atom ve molekül fiziğinde önemli bir yer tutarlar. Potansiyel fonksiyonu ne olursa olsun, parçacığın açısal konumu ve olasılığı hep bu fonksiyonlarla verilecektir. Küresel harmoniklerin özelliklerinden çıkarılacak başlıca sonuçları şöyle sıralayabiliriz.

- $\ell$  indisine *yörünge kuantum sayısı* ve  $m$  indisine *magnetik kuantum sayısı* denir. Atomik fizikte kullanılan notasyona göre,  $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$  kuantum sayılı durumlara  $s, p, d, f, \dots$  yörüngeleri adı verilir.
- $|Y_\ell^m|^2$  olasılık yoğunluğu  $\emptyset$  açısından bağımsızdır. Buna göre, verilen bir  $z$  eksenini etrafında dönme simetrisi her yörünge için vardır.
- $s$  yörüngelerinde ( $\ell = 0$ ), parçacığın açısal olasılığı ( $\theta$  ve  $\phi$ ) den bağımsız olup her yönde aynıdır.  $S$  yörüngeleri gerçekten küresel simetrik veya izotropiktirler.
- Belirli bir  $\ell$  değeri için  $\pm m$  durumlarında bulunma olasılıkları aynıdır (Karaoğlu, 2008).



### 2.1.2 Radyal Schrödinger denklemi

Tüm küresel simetrik potansiyeller için, dalga fonksiyonunun açısıl kısmının  $Y_l^m(\theta, \phi)$  olduğunu bildikten sonra, radyal Schrödinger Denkleminde  $\lambda = \ell(\ell + 1)$  özdeğerini yerine koyarsak

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[ E - \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R(r) = 0 \quad (2.15)$$

şeklinde olur.  $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$  olmak üzere  $R_{nl}(r) = \frac{U_{nl}}{r}$  dersek bu denklem

$$\frac{d^2 U_{nl}}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \right] U_{nl}(r) = 0$$

(2.16)

şeklini alır.

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \text{ olduğundan}$$

$$-\frac{2m}{\hbar^2}V(r) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 = -\frac{m^2\omega^2 r^2}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2 U_{nl}}{dr^2} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} r^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{nl}(r) = 0 \quad (2.17)$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar} E, \quad \frac{m\omega}{\hbar} = \lambda \text{ tanımları yapılırsa (2.17) denklemi,}$$

$$\frac{d^2 U_{nl}}{dr^2} + \left[ k^2 - \lambda^2 r^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{nl}(r) = 0 \quad (2.18)$$

olarak ifade edilir. Bu denklemde

$$U_{nl} = r^{\ell+1} e^{-\frac{\lambda}{2}r^2} V_{nl} \quad (2.19)$$

Olarak yerleştirilirse,

$$t \frac{d^2 V_{n\ell}}{dt^2} + \left[ \left( \ell + \frac{3}{2} \right) - t \right] \frac{dV_{n\ell}}{dt} - \left[ \frac{1}{2} \left( \ell + \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{2} \mu \right] V_{n\ell} = 0 \quad (2.20)$$

bulunur (Powell & Crasemann, 1961). Burada  $t = \lambda r^2$  ve  $\mu = \frac{k^2}{2\lambda}$  olarak tanımlandı.

Denklem (2.20) Kummer denklemidir ve ( $r = 0$ ) da regüler olan çözüm

$$V_{n\ell} = {}_1F_1 \left[ \frac{1}{2} \left( \ell + \frac{3}{2} - \mu \right), \ell + \frac{3}{2}, \lambda r^2 \right] \quad (2.21)$$

şeklindedir. Kummer fonksiyonları;

$${}_1F(\alpha, \beta, x) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha + r)}{\Gamma(\alpha)} \frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\beta + r)} \frac{x^r}{r!} \quad (2.22)$$

formülü ile tanımlanır. Ancak bu fonksiyonlar

$${}_1F(\alpha, \beta, x) \quad x \rightarrow \infty \quad \frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)} e^x x^{\alpha-\beta}$$

davranışına sahiptirler. Yani  $r$  büyük iken

$$U_{n\ell} \rightarrow r^{\ell+1} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} \cdot e^{\lambda r^2} (\lambda r^2)^{\frac{1}{2}(\ell + \frac{3}{2} - \mu) - (\ell + \frac{3}{2})} \quad (2.23)$$

$$= r^{\ell+1} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} \cdot e^{\lambda r^2} (\lambda r^2)^{\left[ \frac{\ell + \frac{3}{2}}{2} + \mu \right]} \quad (2.24)$$

Ancak bu sonsuza gider. Dalga fonksiyonu sonlu kalmalıdır. Eğer (2.24) denkleminde  $\alpha = -n_r$  gibi bir tam sayı ise  $\alpha + r = (-n_r + r)$  tam sayıdır. ( $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) tam sayı olmak üzere,

$$\frac{\Gamma(\alpha + r)}{\Gamma(\alpha)} = \frac{(\alpha + r - 1)!}{(\alpha - 1)!}$$

$\Gamma(n) = (n-1)!$  tam sayılar için

$$\Gamma(1) = 0! = 1$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

olduğu biliniyor. Eğer  $r = 0$  ise

$$\frac{\Gamma(\alpha + r)}{\Gamma(\alpha)} = 1$$

Yani katsayı her  $\alpha, \beta$  değeri için 1'dir.

$r \geq 1$  ise

$$\frac{(\alpha + r - 1)(\alpha + r - 2) \dots (\alpha + r - [r - 1])(\alpha + r - r)(\alpha - 1)!}{(\alpha - 1)!}$$

faktörlerinden birini sıfır yapar.

$n_r = 0$  için,

$$\frac{\Gamma(\alpha + r)}{\Gamma(\alpha)} \rightarrow \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(0)} \rightarrow 0$$

(tüm katsayılar sıfır,  $r = 0$  hariç)

${}_1F_1(\alpha, \beta, x) = 1$  olur. Bizim ifademizde  $\alpha$  yerinde  $\frac{1}{2}(\ell + \frac{3}{2} - \mu)$  var. Dolayısıyla,

$$\frac{1}{2}(\ell + \frac{3}{2} - \mu) = -n_r$$

$$\mu = \frac{E}{\hbar\omega} \text{ ve } \frac{1}{2}\mu_r = \frac{1}{2}(\ell + \frac{3}{2}) + n_r \text{ idi.}$$

$$E_{nr} = \hbar\omega\mu_r$$

$$E_{nr} = \hbar\omega(2n_r + \ell + \frac{3}{2}) \quad (2.25)$$

$n_r = 0, \ell = 0$  için

$$E_{00} = \hbar\omega(\frac{3}{2})$$

Bunları  $V\ell$  ifadesinde yerlerine yazarsak,

$$V_{n\ell} = {}_1F_1(-n_r, \ell + \frac{3}{2}, \lambda r^2)$$

$$\psi_{n\ell m} = cr^\ell e^{-\frac{\lambda r^2}{2}} {}_1F_1(-n_r, \ell + \frac{3}{2}, \lambda r^2) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (2.26)$$

şeklinde bulunur. Elde edilen denkleme göre, enerji özdeğerleri  $n=0$  durumu için  $(3/2)\hbar\omega$  enerjisine eşittir (Aydoğdu, 1997).

Bu işlemin akabinde, Dört Boyutlu Harmonik Salınıcı Problemi'nin çözümleri ele alınacaktır. Bu problemlerin çözümünün verilmesinin amacı, ilerleyen aşamalarda karşılaşılabilecek zorlukların çözülmesi adına fikir edinmektir. Bir harmonik salınıcı probleminin bir, iki ve üç boyuttaki çözümleri bilinmeden dört boyutlu harmonik salınıcı problemini genel anlamda çözümleri kavramak güçtür. Bu problemlerden yola çıkarak dört boyutlu harmonik salınıcı problemini çözerek enerji özdeğerlerinin ve özfonksiyonlarının bulunabilmesi daha da kolaylaşır. Çünkü bu problemler ileri ki aşamalarda çıkmamız gereken merdivenin alt basamaklarını oluşturmaktadırlar.

### 3. DÖRT BOYUTLU HARMONİK OSİLATÖR PROBLEMİNİN DÖRT BOYUTLU KÜREYE TRANSFERİ

Dört boyutlu izotropik harmonik osilatör için Schrödinger denklemi yazılırsa;

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2\psi}{dx_1^2} + \frac{d^2\psi}{dx_2^2} + \frac{d^2\psi}{dx_3^2} + \frac{d^2\psi}{dx_4^2} \right) + \frac{1}{2} m\omega^2 (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2) \psi = E\psi \quad (3.1)$$

bu denklemin çözümleri ise

$$\psi = N_{n,m,\ell,k} e^{-(x_1^2+x_2^2+x_3^2+x_4^2)/2} H_n(x_1)H_m(x_2)H_\ell(x_3)H_k(x_4) \quad (3.2)$$

olur ve enerji özdeğerleri ise;

$$E = (n + m + \ell + k + 2)\hbar\omega \quad n, m, \ell, k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.3)$$

$E = 2\hbar\omega$  taban durumu enerjisidir.

Burada her eksen boyunca  $\omega$  elastik sabiti aynı alındığından, burada da *izotropik salıncı* özelliği vardır ve buradaki potansiyel de küresel simetrik potansiyeldir, çünkü

$$r = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2)^{1/2}$$

olur ve potansiyel açıdan bağımsızdır.

Bir önceki bölümde de ifade ettiğimiz üzere bu tip denklemlerin çözümleri için en uygun sistem küresel koordinat sistemidir.

$$r \rightarrow [0, \infty]$$

$$\theta_1, \theta_2 \rightarrow [0, \pi]$$

$$\phi \rightarrow [0, 2\pi] \text{ aralığında tanımlı olmak üzere}$$

$$\psi(x_1, x_2, x_3, x_4) \rightarrow \psi(r, \theta_1, \theta_2, \phi)$$

şeklinde olacaktır.

Aralarında ki bağlantı ise şu şekildedir:

$$\begin{aligned}
x_1 &= r \cdot \cos \theta_1 \\
x_2 &= r \cdot \sin \theta_1 \cdot \cos \theta_2 \\
x_3 &= r \cdot \sin \theta_1 \cdot \sin \theta_2 \cos \phi \\
x_4 &= r \cdot \sin \theta_1 \cdot \sin \theta_2 \cdot \sin \phi
\end{aligned}$$

Yukarıda verilen Schrödinger Denkleminin kutupsal koordinatlarda çözümünün yapılabilmesi için, Denklem (3.1)'de  $(r, \theta_1, \theta_2, \phi)$  değişkenlerine geçiş yapılmalıdır.

Denklem (3.1)'de gerekli kısmi türevler

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial r}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta_1}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} + \frac{\partial \theta_2}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial \theta_2} + \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

hesaplanır ve yerine yazılırsa

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \cos \theta_1 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta_1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta_1}$$

olarak bulunur. Bu bağıntıdan yararlanılarak

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \cos^2 \theta_1 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\sin^2 \theta_1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_1^2} + \frac{2 \cos \theta_1 \sin \theta_1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta_1} - \frac{2 \cos \theta_1 \sin \theta_1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta_1} + \frac{\sin^2 \theta_1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$$

olarak hesaplanır. Aynı hesabı diğerleri için de yaptığımızda, aradığımız denklem;

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_4^2}$$

olduğuna göre gerekli işlemler yapıldıktan sonra  $\nabla^2$  ifadesi aşağıdaki şekilde bulunur.

$$\begin{aligned}
\nabla^2 &= \frac{1}{r^3} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^3 \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left[ \sin^2 \theta_1 \frac{\partial}{\partial \theta_1} \right] \\
&+ \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta_1 \sin \theta_2} \frac{\partial}{\partial \theta_2} \left[ \sin \theta_2 \frac{\partial}{\partial \theta_2} \right] + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Açısal kısım işlemleri kolaylaştırmak için  $-\frac{L}{\hbar^2}$  olarak tanımlanırsa,

$$\begin{aligned}
-\frac{L^2}{\hbar^2} &= \frac{1}{\sin^2 \theta_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left[ \sin^2 \theta_1 \frac{\partial}{\partial \theta_1} \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta_1 \sin \theta_2} \frac{\partial}{\partial \theta_2} \left[ \sin \theta_2 \frac{\partial}{\partial \theta_2} \right] \\
&+ \frac{1}{\sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Şeklinde olur. Kutupsal koordinatlarda Schrödinger denkleminin ifadesi yazılırsa,

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right) \psi = 0 \tag{3.5}$$

ve  $\nabla^2$  operatörü

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^3} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^3 \frac{\partial}{\partial r} \right] - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

yani

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{r^3} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^3 \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left[ \sin^2 \theta_1 \frac{\partial}{\partial \theta_1} \right] \psi + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta_1 \sin \theta_2} \frac{\partial}{\partial \theta_2} \left[ \sin \theta_2 \frac{\partial}{\partial \theta_2} \right] \psi \\
&+ \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right) \psi = 0
\end{aligned} \tag{3.6}$$

şeklinde olur. Bu denklemden birden fazla değişken olduğundan dolayı öncelikle denkleminizi *değişken ayırma metodu* ile ayırırsak, yani;

$\psi(r, \theta_1, \theta_2, \phi) = R(r)Y(\theta_1, \theta_2, \phi)$  şeklinde alınırsa,

$$Y \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{3}{r} Y \frac{dR}{dr} - R \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right) R Y = 0 \tag{3.7}$$

$$\frac{r^2}{R} \left( \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{3}{r} \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right) = \frac{L^2 Y}{\hbar^2 Y} \tag{3.8}$$

yukarıdaki eşitliğin her iki tarafını  $\lambda$  sabitine eşitlersek,

$$r^2 \left[ \frac{1}{R} \left( \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{3}{r} \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right) \right] = \lambda \quad (3.9)$$

olur.

$$\begin{aligned} -\frac{L^2 Y}{\hbar^2} = \frac{1}{\sin^2 \theta_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left[ \sin^2 \theta_1 \frac{\partial}{\partial \theta_1} \right] Y + \frac{1}{\sin^2 \theta_1 \sin \theta_2} \frac{\partial}{\partial \theta_2} \left[ \sin \theta_2 \frac{\partial}{\partial \theta_2} \right] Y \\ + \frac{1}{\sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y = \lambda Y \end{aligned} \quad (3.10)$$

$r$ 'ye bağılı kısım ayrıldıktan sonra açılal kısım içerisinde tekrar bir *değişken ayırma metodu* uygulanırsa,

$$Y(\theta_1, \theta_2, \phi) = \Theta_1(\theta_1) \Theta_2(\theta_2) \Phi(\phi)$$

$$\left[ \frac{\sin^2 \theta_2}{\Theta_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left( \sin^2 \theta_1 \frac{\partial \Theta_1}{\partial \theta_1} \right) + \frac{\sin \theta_2}{\Theta_2} \frac{\partial}{\partial \theta_2} \left( \sin \theta_2 \frac{\partial \Theta_2}{\partial \theta_2} \right) + \lambda \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 \right] = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = m^2$$

şeklini alır. bu denklemin iki tarafında  $m^2$  yani *magnetik kuantum sayısının* karesine eşitlersek. Değişkenlerden birini daha ayırmış oluruz.

$$\frac{\sin^2 \theta_2}{\Theta_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left( \sin^2 \theta_1 \frac{\partial \Theta_1}{\partial \theta_1} \right) + \frac{\sin \theta_2}{\Theta_2} \frac{\partial}{\partial \theta_2} \left( \sin \theta_2 \frac{\partial \Theta_2}{\partial \theta_2} \right) + \lambda \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 = m^2 \quad (3.11)$$

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = m^2 \quad (3.12)$$

(3.12) denkleminin çözümü oldukça basit şekilde hesaplanabilir.

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m^2 \Phi = 0$$

$$\Phi(\phi) = A e^{im\phi} \quad (3.13)$$

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (3.14)$$



Bu çözümden sonra denklemimizin kalan kısmına devam edebiliriz. Burada kalan iki değişkenimiz de açılmal kısımla alakalıdır. Burada da aynı metod uygulanırsa Denklem (3.11) iki ayrı diferansiyel denklem haline getirilmiştir olur.

Denklem (3.11) üzerinde değişken ayrımı yapılarak, elde edilen denklemler de  $\ell(\ell+1)$  sabitine eşitlenirse, elde edilecek iki diferansiyel denklem

$$\frac{1}{\sin \theta_2} \frac{d}{d\theta_2} \left( \sin \theta_2 \frac{d\Theta_2}{d\theta_2} \right) + \left[ \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta_2} \right] \Theta_2 = 0 \quad (3.15)$$

$$\frac{1}{\sin^2 \theta_1} \frac{d}{d\theta_1} \left( \sin^2 \theta_1 \frac{d\Theta_1}{d\theta_1} \right) + \left[ \lambda - \frac{\ell(\ell+1)}{\sin^2 \theta_1} \right] \Theta_1 = 0 \quad (3.16)$$

şeklinde olur. Schrödinger Denklemindeki dört değişkenli kısmi diferansiyel denklem, dört adet değişkenleri ayrıştırılmış diferansiyel denklem haline getirilmiştir. Çözümlere öncelikle  $\theta_2$  değişkeni ile başlanacaktır çünkü bu diferansiyel denklem daha önceki bölümden bilinen Asosye Legendre Diferansiyel Denklemine aynısıdır.

$$\frac{1}{\sin \theta_2} \frac{d}{d\theta_2} \left( \sin \theta_2 \frac{d\Theta_2}{d\theta_2} \right) + \left[ \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta_2} \right] \Theta_2 = 0$$

Bu denklemin çözümü ise;

$$\Theta_2(\theta_2) = P_\ell^m(\cos \theta_2)$$

dir. Ve yine bir önceki bölümde yapıldığı gibi,  $\ell$  ve  $m$  gibi iki indisle tanımlanan bu polinomlarda ( $m > \ell$ ) olduğunda türevler sıfır olacağından,  $m$  indisi doğal olarak  $[-\ell, +\ell]$  aralığında tamsayı değerler alabilir. İlk birkaç bağlı Legendre polinomunu yazılırsa ( $P_\ell^0$  lar bildiğimiz Legendre polinomlarıdır):

Tablo 3.3 Asosye Legendre Polinomları

$$\begin{array}{ll}
 P^0 = 1 & P_1^{-1} = \frac{1}{2} \sin \theta \\
 P_1^1 = -\sin \theta & P_2^1 = -3 \sin \theta \cos \theta \\
 P_2^2 = 3 \sin^2 \theta & P_2^{-1} = \frac{3}{2} \sin \theta \cos \theta \\
 P_2^{-2} = \frac{1}{8} \sin^2 \theta &
 \end{array}$$

Birinci açısıl kısmın çözümü için önceki bölümlerde uygulandığı gibi diferansiyel denklemin çözümünü kolaylaştırma adına yeni bir değişken tanımı oluşturulursa;

$$\cos \theta_1 = \xi \rightarrow \cos^2 \theta_1 = \xi^2$$

$$1 - \cos^2 \theta_1 = 1 - \xi^2 = \sin^2 \theta_1$$

$$\frac{d}{d\theta_1} = \frac{\partial \xi}{\partial \theta_1} \frac{\partial}{\partial \xi} = -\sin \theta_1 \frac{d}{d\xi} = -\sqrt{1-\xi^2} \frac{d}{d\xi} \quad (3.17)$$

Elde edilen bu ifade denklem (3.17) de yerine yazılırsa. Denklem (3.16) ;

$$(1-\xi^2) \frac{d^2 \Theta_1}{d\xi^2} - 3\xi \frac{d\Theta_1}{d\xi} + \left[ \lambda - \frac{\ell(\ell+1)}{1-\xi^2} \right] \Theta_1 = 0 \quad (3.18)$$

Şeklini alır. Bu diferansiyel denklemi çözmek için  $\ell = 0$  özel durumunu göz önüne alınırsa.

$$(1-\xi^2) \frac{d^2 \Theta_1}{d\xi^2} - 3\xi \frac{d\Theta_1}{d\xi} + \lambda \Theta_1 = 0 \quad (3.19)$$

Bu denklemin çözümü için

$$\Theta_1 = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^{k+s}$$

şeklinde bir kuvvet serisi önerilerek gerekli türevler alınabilir.

$$\frac{d\Theta_1}{d\xi} = \sum_k (k+s) a_k \xi^{k+s-1}$$

$$\frac{d^2\Theta_1}{d\xi^2} = \sum_k (k+s)(k+s-1)a_k \xi^{k+s-2}$$

ve bu ifadeler denklem (3.19) yazılırsa, denklem (3.20) elde edilir.

$$(1-\xi^2)\sum_k a_k (s+k)(s+k-1)\xi^{s+k-2} - 3\xi\sum_k a_k (s+k)\xi^{s+k-1} + \lambda\sum_k a_k \xi^{s+k} = 0 \quad (3.20)$$

yukarıdaki denklemi bir toplam altında toplanırca;

$$\sum_k \left\{ (s+k)(s+k-1)a_{k+2} - [(s+k)(s+k-1) + 3(s+k) - \lambda]a_k \right\} \xi^k = 0 \quad (3.21)$$

elde edilir. Denklem (3.21)'de  $k$  ve  $s$  ifadelerine değerler vererek  $a_0$  ve  $a_1$  bulunabilir. Ve daha sonra serinin diğer katsayıları da bulunabilir.

$$k = -2 \text{ için } s(s-1) a_0 = 0 \text{ olmalıdır} \rightarrow s = 0 \text{ veya } s = 1$$

$$k = -1 \text{ için } s(s+1) a_0 = 0 \text{ olmalıdır} \rightarrow s = 0 \text{ veya } s = -1$$

buna göre  $a_1$  için  $s = 0$  olmalıdır. Bu katsayıların oluşturduğu sonsuz terimli seri, aradığımız fonksiyonun çözümü olacaktır fakat burada yeni bir sorun karşımıza çıkmaktadır. Acaba bu sonsuz terimli seri yakınsak mıdır? Aksi halde dalga denklemi olarak kabul edilemez. Bunu anlamak için ardışık katsayıların birbirine oranı olan  $\frac{a_{k+2}}{a_k}$

ifadenin  $k$  indisi ile nasıl değiştiğine bakılır.

$$a_{k+2} = \frac{k(k+2) - \lambda}{(k+1)(k+2)} a_k$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_{k+2}}{a_k} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{k(k+2) - \lambda}{(k+1)(k+2)} \cong 1$$

olur, yani bu seri iraksaktır. Bu sorunu çözmek için bir yolu vardır.  $a_k$  katsayılarını elde ettiğimiz ifadeye yeniden bakıldığında  $k$  indisinin bir  $k = n$  değerine ulaşıldığında pay

sıfır olmalıdır. Burada  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  şeklinde değişmektedir. Aynı zamanda fonksiyonun çözümleri birer polinom olurlar. Bu durumda;

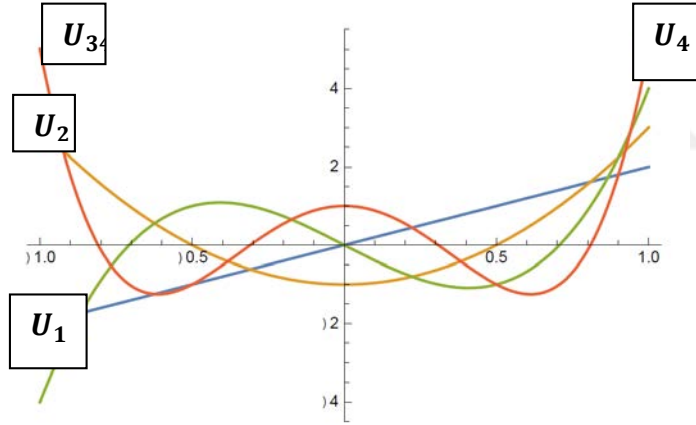
$$n(n+2) - \lambda = 0 \Rightarrow \lambda = n(n+2)$$

yani ,

Tablo 3.1 İkinci tip Chebyshev Polinomları

$$a_{k+2} = \frac{k(k+2) - \lambda}{(k+1)(k+2)} a_k \rightarrow \begin{aligned} U_0 &= 1 \\ U_1 &= 2\xi \\ U_2 &= (4\xi^2 - 1) \\ U_3 &= (8\xi^3 - 4\xi) \\ U_4 &= (16\xi^4 - 12\xi^2 + 1) \end{aligned}$$

olur. Bu da özel polinomlar ailesinden *ikinci tip Chebyshev polinomlarıdır*.



Şekil 3.1 *ikinci tip Chebyshev polinomlarının* Mathematica programı vasıtasıyla çizilen grafikleridir.

Denklem (3.19) de  $\lambda$  yerine  $\lambda = n(n+2)$  yazarsak.  $\ell = 0$  için denklemimiz,

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2 U_n}{d\xi^2} - 3\xi \frac{dU_n}{d\xi} + n(n+2)U_n = 0 \quad (3.22)$$

haline gelir.

Eğer U ikinci tip chebyshev diferansiyel denkleminin bir çözümü ise;

$$(1-\xi^2)\frac{d^2U}{d\xi^2}-3\xi\frac{dU}{d\xi}+n(n+2)Z=0$$

şeklindedir. bu denklemin  $\ell$  defa türevi alınırsa elde edilen yeni diferansiyel denklem

$$(1-\xi^2)\frac{d^2U}{d\xi^2}-3\xi\frac{dU}{d\xi}+\left[n(n+2)-\frac{\ell(\ell+1)}{1-\xi^2}\right]U=0 \quad (3.23)$$

şeklinde olacaktır ki bu aynı zamanda *asosye (bağlı) ikinci tip Chebyshev diferansiyel denklemini* olur.

(3.23) denkleminin çözümü ise ispatı ekte verilen  $(1-\xi^2)^{\ell/2}\frac{d^\ell U}{d\xi^\ell}$  dir.

$n$  ve  $\ell$  gibi iki tamsayı ile tanımlanan bu polinomlarda ( $\ell > n$ ) olduğunda türevler sıfır olacağından,  $\ell$  tamsayısı doğal olarak  $[0, +n]$  aralığında tamsayı değerler alabilir.

Tablo 3.2 Asosye İkinci tip Chebyshev Polinomlarından bazıları

$U_0^0(\xi) = 1$
$U_1^0(\xi) = 2\xi$
$U_1^1(\xi) = 2(1-\xi^2)^{1/2}$
$U_2^0(\xi) = (4\xi^2-1)$
$U_2^1(\xi) = 8\xi(1-\xi^2)^{1/2}$
$U_2^2(\xi) = 8(1-\xi^2)$

Asosye (bağlı) ikinci tip Chebyshev Polinomları

### 3.2 Uzamsal Denklemin Çözümü

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{3}{r}\frac{dR}{dr}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}r^2\right)R-\frac{n(n+2)}{r^2}R=0 \quad (3.24)$$

Öncelikle diferansiyel denklemi basitleştirmek için  $R$  yerine bir  $T$  fonksiyonu tanımlayım.

$$R(r)=r^{-3/2}T(r)$$

$$\frac{d}{dr}(r^{-3/2} T) = r^{-3/2} \frac{dT}{dr} - \frac{3}{2} r^{-5/2} T$$

$$\frac{d^2}{dr^2}(r^{-3/2} T) = r^{-3/2} \frac{d^2 T}{dr^2} - 3r^{-5/2} \frac{dT}{dr} + \frac{15}{4} r^{-7/2} T$$

Bu  $T$  fonksiyonu cinsinden uzamsal denklem yazılırsa

$$\frac{d^2 T}{dr^2} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 - \frac{(n + \frac{1}{2})(n + \frac{3}{2})}{r^2} \right) T = 0 \quad (3.25)$$

(3.25) Denkleminin asimptotik davranışına bakılırsa

$$r \rightarrow 0 \quad \frac{d^2 T}{dr^2} - \frac{(n + \frac{1}{2})(n + \frac{3}{2})}{r^2} T = 0 \rightarrow T \sim r^{n + \frac{3}{2}}$$

$$r \rightarrow \infty \quad \frac{d^2 T}{dr^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 T = 0 \rightarrow T \sim e^{-\frac{m^2 \omega^2}{2\hbar^2} r^2} \cong e^{-\frac{qr^2}{2}}$$

$\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} = q$  olmak koşulu ile asimptotik davranışı yukarıdaki şekilde olur. Her yerde

geçerli olan  $T$  fonksiyonunu şu şekilde tanımlanır;

$$T(r) = r^{n + \frac{3}{2}} e^{-\frac{qr^2}{2}} M(r) \quad (3.26)$$

gerekli türevler alınır,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 T}{dr^2} = & r^{n + \frac{3}{2}} e^{-\frac{qr^2}{2}} \frac{d^2 M}{dr^2} + r^{n + \frac{3}{2}} e^{-\frac{qr^2}{2}} \left[ \frac{n + \frac{3}{2}}{r} - qr + \frac{n + \frac{3}{2}}{r} - qr \right] \frac{dM}{dr} \\ & + r^{n + \frac{3}{2}} e^{-qr^2} \left[ \frac{(n + \frac{3}{2})(n + \frac{1}{2})}{r^2} - q(n + \frac{3}{2}) - q(n + \frac{5}{2}) + q^2 r^2 \right] M \end{aligned}$$

türevleri alınan kısımlar denklem (3.25) de yerine yazılırsa,  $M(r)$  fonksiyonuna ait diferansiyel denklem

$$\frac{d^2 M}{dr^2} + 2 \left[ \frac{n + \frac{3}{2}}{r} - qr \right] \frac{dM}{dr} + [b^2 - q(2n + 4)]M = 0 \quad (3.27)$$

burada  $b^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  olarak tanımlanmıştır. İşlemleri kolaylaştırmak için boyutsuzlaştırma yapılırsa,  $x = qr^2$  olarak yeni bir değişken tanımlanır. Buradan gerekli türevler alınır,

$$\frac{d}{dr} = \frac{dx}{dr} \frac{d}{dx} = 2qr \frac{d}{dx} = 2q^{1/2} x^{1/2} \frac{d}{dx}$$

$$\frac{d^2}{dr^2} = 4qx \frac{d^2}{dx^2} + 2q \frac{d}{dx}$$

ve denklem 3.27 de yerine yazılırsa

$$x \frac{d^2 M}{dx^2} + [n + 2 - x] \frac{dM}{dx} + \left[ \frac{b^2}{4q} - \frac{1}{2}(n + 2) \right] M = 0 \quad (3.28)$$

(3.28) denkleminde bazı değişiklikler yapılırsa

$$K = \frac{b^2}{2q} = \frac{2mE}{2\hbar^2} \frac{\hbar}{m\omega} = \frac{E}{\hbar\omega}$$

$$x \frac{d^2 M}{dx^2} + [n + 2 - x] \frac{dM}{dx} - \left[ \frac{1}{2}(n + 2) - \frac{K}{2} \right] M = 0 \quad (3.29)$$

elde edilen (3.29) denklemin çözümü Kummer-Laplace diferansiyel denklemi

$$x \frac{d^2 M}{dx^2} + (b - x) \frac{dM}{dx} - aM = 0$$

cinsinden ifade edilebilir. Bu tarz hipergeometrik fonksiyonlar  $M(x) = A_1 F_1[a, b, x]$  olarak tanımlanır. Bu çözüm, (3.29) denklemi için yazılırsa.

$$M = C_1 F_1 \left[ \frac{1}{2}(n+2-K); n+2; q r^2 \right] \quad (3.30)$$

$$a = \frac{1}{2}[n+2-K], \quad b = n+2, \quad x = q r^2$$

şeklinde olur. Veya Laguerre polinomları cinsinden ifade edilirse

$$M = N L_{\frac{K-n-2}{2}}^{n+1}(x) = N L_{\frac{K-n-2}{2}}^{n+1}(q r^2) \quad (3.31)$$

şeklini alır. Bu diferansiyel denklemin seri çözümüne bakılırsa,

$$M = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad \frac{dM}{dx} = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k x^{k-1} \quad \text{ve} \quad \frac{d^2 M}{dx^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k x^{k-2}$$

Yukarıda ki değerler denklem (3.29) yerine yazılırsa;

$$\sum_k k(k-1) a_k x^{k-1} + \sum_k (n+2) k a_k x^{k-1} - \sum_k k a_k x^k - \sum_k \left( \frac{n+2-K}{2} \right) a_k x^k$$

seri açılım bu şekilde olur. Bu seri de aynı toplam altında toplanırsa ,

$$\sum_k (k+1) k a_{k+1} x^k + \sum_k (n+2)(k+1) a_{k+1} x^k = \sum_k \frac{2k+n+2-K}{2} a_k x^k$$

$$(k+1)(k+n+2) a_{k+1} = \left[ k - \left( \frac{K-n-2}{2} \right) \right] a_k$$

$$a_{k+1} = \frac{k - \left( \frac{K-n-2}{2} \right)}{(k+1)(k+n+2)} a_k \quad (3.32)$$

bu bir polinom olmalı ve k değeri bir p tamsayısında son buluyorsa;

$$\frac{K-n-2}{2} = p \quad \text{veya} \quad K = 2p + n + 2$$

şeklinde oluyorsa, *Enerji özdeğerlerini* veren denklemi yazılabilir.

$$E = \hbar \omega (2p + n + 2) \quad (p = 0, 1, 2, \dots) \quad \text{ve} \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (3.33)$$

Bu kısmın başında çözülmeye çalışılan denklem olan *uzamsal dalga fonksiyonu*  $R(r)$  de yazılabilir,



$$R(r) = Ar^n e^{-\frac{qr^2}{2}} {}_1F_1 \left[ \frac{1}{2}(n+2-K); n+2; qr^2 \right] \quad (3.34)$$

burada  $A$  sabiti normalizasyon sabitidir. Dört boyutlu kürede harmonik osilatörün dalga denklemi Laguerre Polinomları cinsinden ifade edilir ise;

$$\psi(r, \theta_1, \theta_2, \phi) = NL_p^{n+1}(qr^2) r^n e^{-\frac{qr^2}{2}} U_n^\ell(\cos \theta_1) P_\ell^m(\cos \theta_2) e^{im\phi} \quad (3.35)$$

şeklinde olur.

#### 4. SONUÇ

Bu bölümde, dört boyutlu uzayda  $\frac{1}{2}m\omega^2 r^2$  izotropik harmonik osilatör potansiyelinde hareket eden  $m$  kütleli bir parçacığın, çözümünden elde edilen enerji özdeğerleri ve her bir enerji değerindeki dejenerelikler bir tablo halinde incelenecektir.

Öncelikle belirtmelidir ki, enerji özdeğerleri  $p, n$  kuantum sayılarına bağlı olarak Denklem 4.1 de verilmiştir.

$$E = \hbar\omega(2p + n + 2) \quad (p = 0, 1, 2, \dots) \text{ ve } (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (4.1)$$

Her bir  $n$  ve  $p$  kuantum sayısına göre tablo oluşturulursa;

**Tablo 4.1** de taban durumu enerji seviye durumu için enerji özdeğeri ve dejenere durum sayısı belirtilmiştir.

$n_1 + n_2 + n_3 + n_4$	$p$	$n$	$\ell$	Enerji	Dejenere durum sayısı
0	0	0	0	$2\hbar\omega$	1

**Tablo 4.2** de  $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 0$  için dejenere durumu gösterilmiştir.

$n_1$	$n_2$	$n_3$	$n_4$
0	0	0	0

**Tablo 4.3** de birinci enerji seviye durumu için enerji özdeğeri ve dejenere durum sayısı belirtilmiştir.

$n_1 + n_2 + n_3 + n_4$	$p$	$n$	$\ell$	Dejenere durum sayısı	Enerji
1	0	1	0	1	$3\hbar\omega$
		1	1	3	
				4	

**Tablo 4.4**  $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 1$  için dejenere durumu gösterilmiştir.

$n_1$	$n_2$	$n_3$	$n_4$
0	0	0	1
1	0	0	0
0	1	0	0
0	0	1	0

**Tablo 4.5** de ikinci enerji seviye durumu için enerji özdeğeri ve dejenere durum sayısı belirtilmiştir.

$n_1 + n_2 + n_3 + n_4$	$p$	$n$	$\ell$	Dejenere durum sayısı		Enerji
2	1	0	0	1	10	$4\hbar\omega$
	0	2	0	1		
		2	1	3		
		2	2	5		

**Tablo 4.6**  $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 2$  için dejenere durumu gösterilmiştir.

$n_1$	$n_2$	$n_3$	$n_4$
0	0	0	2
0	0	2	0
0	2	0	0
2	0	0	0
1	1	0	0
1	0	1	0
1	0	0	1
0	1	1	0
0	1	0	1
0	0	1	1

**Tablo 4.7** de üçüncü enerji seviye durumu için enerji özdeğeri ve dejenere durum sayısı belirtilmiştir.

$n_1 + n_2 + n_3 + n_4$	$p$	$n$	$\ell$	Dejenere durum sayısı		Enerji
3	1	1	0	1	20	$5\hbar\omega$
		1	1	3		
	0	3	0	1		
		3	1	3		
		3	2	5		
		3	3	7		

**Tablo 4.8**  $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 3$  için dejenere durumu gösterilmiştir.

$n_1$	$n_2$	$n_3$	$n_4$
3	0	0	0
2	1	0	0
2	0	1	0
2	0	0	1
1	1	1	0
1	1	0	1
1	0	1	1
1	2	0	0
1	0	2	0
1	0	1	1
0	1	1	2
0	0	2	1
0	0	2	1
0	1	0	2
0	2	0	1
0	1	2	0
0	2	1	0
0	3	0	0
0	0	3	0
0	0	0	3

Bu tez çalışmasının ilk bölümünde harmonik osilatörün Kuantum mekaniğindeki yeri hakkında kısa bilgi verilmiştir ve bunun yanında bir boyutlu harmonik salıncının kuantal çözümü yapılmıştır.

İkinci bölümde ise daha yüksek boyutlarda harmonik osilatörün davranışını incelemek üzere 3 boyutlu harmonik salıncı probleminin çözümü iki parça olarak incelenmiştir. Öncelikle 3 boyutlu harmonik osilatör probleminin çözümünün, aynı zamanda 3 boyutlu schrödinger dalga denkleminin çözümü demek olduğundan bunun üzerinden devam edilmiştir. Çözümde karşımıza üç farklı değişken çıkmıştır. Açısal kısım, azimut kısmı ve radyal kısım. Bu kısımların her biri ayrı ayrı çözümlenerek enerji özdeğerleri ve özdalga fonksiyonları hesaplanmıştır.

Üçüncü bölümde ise, tezimizin ana konusu olan dört boyutlu uzayda harmonik salıncı probleminin çözümüne yer verilmiştir. Bu problemin çözümü yapılırken yöntem olarak üç boyutlu harmonik salıncı probleminde olduğu gibi öncelikle kartezyen koordinat sisteminde olan denklemimizi küresel koordinat sistemine geçişi yapılmıştır ve neticede

dört farklı denklem elde edilmiş olup, bunlar uzamsal kısım, açısalsal kısım 1, açısalsal kısım 2 ve azimut kısımıdır.

Bu denklemlerden öncelikle azimut kısmı yani  $(\phi)$  ye bağılı olan kısmın çözümlü basit olarak çözülmüştür. Aynı zamanda ikinci açısalsal kısım yani  $(\theta_2)$  ye bağılı olan kısımda daha önce 2. bölümde çözümlü yapılmış olup, bu denklemin çözümlünün asosye Legendre polinomları olduđu görülmüştür. Bu iki denklemin çözümlünden sonra birinci açısalsal kısım  $(\theta_1)$  e bağılı olan kısmın çözümlü ise yapılan işlemler sonucunda ikinci tip asosye Chebyshev polinomları ile yapılmıştır. Son denklemimiz olan Uzamsal kısım yani  $(r)$  ye bağılı kısmın çözümlü ise hipergeometrik fonksiyonlarla hesaplanmıştır.

Böylece en başta dört bölüme ayırdığımız ana denklemimizin çözümlü bulunmuştur. Bulunan çözümlere göre 4 boyutlu harmonik salınıcı için enerji özdeğerleri ve öz dalga fonksiyonu yazılmıştır.

Çalışmanın son bölümünde ise farklı birkaç kuantum durumu için enerji özdeğerleri yazılmış ve dejenere durumları incelenmiştir. Bu inceleme neticesinde

**Tablo 4.9** Genel dejenere durum sayıları

N	Dejenere durum sayısı
0	1
1	4
2	10
3	20

Şeklinde bir tablo elde edilir. Ve dejenere durum sayılarına bakıldığında her bir  $n$  durumu için  $2n^2 + 2$  adet dejenere durumu söz konusu olduđu görülmür.

## KAYNAKLAR

- Aguilera-Navarro, V. C., Estévez, G. A., & Gua, R. (1990). Variational and Perturbative Schemes for a Spiked Harmonic Oscillator. *Journal of Mathematical Physics* Vol. 31, s. 99.
- Al-Jaber, S. M. (2008, Temmuz). A Confined N-Dimensional Harmonic Oscillator. *International Journal of Theoretical Physics* Vol. 47, pp. 1853-1864.
- Aydođdu, Y. (1997). Yüksek Lisans Tezi. *Üç Boyutlu İzotropik Harmonik Osilatör Potansiyeli için Radyoaktif Geçiş Hesapları*. Ankara, Türkiye: Gazi Üniversitesi.
- Gasiorowicz, S. (1974). *Quantum Physics*. New York: John Wiley & Sons.
- Karaođlu, B. (2008). *Kuantum Mekaniđine Giriş*. Ankara: Seçkin Yayıncılık.
- Massachusetts Institute of Technology. (2016, 11 12). [www.acikders.org.tr](http://www.acikders.org.tr).  
<http://www.acikders.org.tr/file.php/18/LectureNotes/ders18.pdf> adresinden alınmıştır
- Merzbacher, E. (1998). *Quantum Mechanics*. New York: John Wiley & Sons Inc.
- Powell, J. L., & Crasemann, B. (1961). *Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Pub.
- Sakurai, J. J. (1994). *Modern Quantum Mechanics*. Los Angeles: Addison-Wesley Publishing Company.

## EKLER

### EK -1

#### Asosye (Bağı) İkinci Tip Chebyshev Fonksiyonları

Ispat: U Chebyshev diferansiyel denkleminin çözümü olduğundan

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2 U}{d\xi^2} - 3\xi \frac{dU}{d\xi} + n(n+2)U = 0$$

dir. Şimdi bu denklemin  $x$ 'e göre  $\ell$  kere türevi alınırsa.

$$\begin{aligned} \frac{d^\ell}{d\xi^\ell} \left[ (1 - \xi^2) \frac{d^2 U}{d\xi^2} \right] - 3 \frac{d^\ell}{d\xi^\ell} \left[ \xi \frac{dU}{d\xi} \right] + n(n+2) \frac{d^\ell U}{d\xi^\ell} &= 0 \\ (1 - \xi^2) \frac{d^{\ell+2} U}{d\xi^{\ell+2}} + \ell \frac{d}{d\xi} (1 - \xi^2) \frac{d^{\ell+1} U}{d\xi^{\ell+1}} + \frac{\ell(\ell-1)}{2} \frac{d^2(1 - \xi^2)}{d\xi^2} \frac{d^\ell U}{d\xi^\ell} \\ - 3 \left[ \xi \frac{d^{\ell+1} U}{d\xi^{\ell+1}} + \ell \frac{d^\ell U}{d\xi^\ell} \right] + n(n+2) \frac{d^\ell U}{d\xi^\ell} &= 0 \end{aligned}$$

Burada  $\frac{d^{\ell+2} U}{d\xi^{\ell+2}}$ ,  $\frac{d^{\ell+1} U}{d\xi^{\ell+1}}$  ve  $\frac{d^\ell U}{d\xi^\ell}$  terimleri toplanırsa,

$$(1 - \xi^2) \frac{d^{\ell+2} U}{d\xi^{\ell+2}} - 2\ell\xi \frac{d^{\ell+1} U}{d\xi^{\ell+1}} - 3\xi \frac{d^{\ell+1} U}{d\xi^{\ell+1}} - \ell(\ell-1) \frac{d^\ell U}{d\xi^\ell} - 3\ell \frac{d^\ell U}{d\xi^\ell} + n(n+2) \frac{d^\ell U}{d\xi^\ell} = 0$$

bu denklem düzenlenirse,

$$(1 - \xi^2) \frac{d^{\ell+2} U}{d\xi^{\ell+2}} - (2\ell + 3)\xi \frac{d^{\ell+1} U}{d\xi^{\ell+1}} + [n(n+2) - \ell(\ell+2)] \frac{d^\ell U}{d\xi^\ell} = 0$$

olur. Eğer  $\frac{d^\ell U}{d\xi^\ell} = U_1$  olarak gösterilirse. Yukarıda ki denklem

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2 U_1}{d\xi^2} - (2\ell + 3)\xi \frac{d^1 U_1}{d\xi^1} + [n(n+2) - \ell(\ell+2)] U_1 = 0$$

şeklinde olur. Eğer  $U_2 = (1 - \xi^2)^{\ell/2} U_1$  yani  $U_1 = (1 - \xi^2)^{-\ell/2} U_2$  olarak tanımlanırsa;

## EK -1

(Devam)

$$(1-\xi^2)\frac{d^2}{d\xi^2}[(1-\xi^2)^{-\ell/2}U_2]-(2\ell+3)\xi\frac{d}{d\xi}[(1-\xi^2)^{-\ell/2}U_2] \\ +[n(n+2)-\ell(\ell+2)](1-\xi^2)^{-\ell/2}U_2=0$$

gerekli türevler alınıp daha sonrasında bu denklemi  $(1-\xi^2)^{\ell/2}$  ile çarpıldığından da;

$$(1-\xi^2)\frac{d^2U_2}{d\xi^2}-3\xi\frac{dU_2}{d\xi}+\left[n(n+2)-\frac{\ell(\ell+2)}{1-\xi^2}\right]U_2=0$$

şekline indirilmiş olur. Görüldüğü üzere elde edilen denklem çözümü aranan denkleminin aynısıdır. Yani;

$$U_n^\ell(\xi)=(1-\xi^2)^{\ell/2}\frac{d^\ell U_n}{d\xi^\ell}$$

şeklinde olur.  $U_n$ ,  $n$  dereceden polinom olduğu için  $\ell \leq n$  olmalıdır. Aşağıdaki birkaç asosye (bağlı) ikinci tip chebyshev polinomlarının verilmiştir.

Tablo 1.1 Asosye İkinci tip Chebyshev Polinomları

$U_0^0(\xi) = 1$
$U_1^0(\xi) = 2\xi$
$U_1^1(\xi) = 2(1-\xi^2)^{1/2}$
$U_2^0(\xi) = (4\xi^2 - 1)$
$U_2^1(\xi) = 8\xi(1-\xi^2)^{1/2}$
$U_2^2(\xi) = 8(1-\xi^2)$

Asosye (bağlı) ikinci tip Chebyshev Polinomları



## **ÖZGEÇMİŞ**

Mustafa Kırşan, 1987 Kilis doğumludur.İlköğretimini ve orta öğrenimini Sakarya’da tamamladıktan sonra, 2008 yılında Gaziantep Üniversitesi Kilis Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünü başarıyla tamamlamıştır. 2012 yılında Kilis 7 Aralık Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda Yüksek Lisansına başlamıştır.

