T. C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEK ELEKTRONLU FARKLI POTANSİYELLİ SİSTEMLERİN NUMEROV METODUYLA İNCELENMESİ

İdris SIDAR

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

KONYA, 2006

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEK ELEKTRONLU FARKLI POTANSİYELLİ SİSTEMLERİN NUMEROV METODUYLA İNCELENMESİ

İdris SIDAR

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 07.07.2006 tarihinde aşağıdaki Jüri tarafından Oybirliği/ Oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
(Danışman)

Doç. Dr. Ayhan ÖZMEN
(Üye)

Doç. Dr. Hamdi Şükür KILIÇ
(Üye)

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

TEK ELEKTRONLU FARKLI POTANSİYELLİ SİSTEMLERİN NUMEROV METODUYLA İNCELENMESİ

İdris SIDAR
Selçuk Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
2006, 60 sayfa

Jüri: Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
Doç. Dr. Ayhan ÖZMEN
Doç. Dr. Hamdi Şükür KILIÇ

Bu çalışmada, tek elektronlu tek boyutlu bazı potansiyeller için karşımıza çıkan zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin hem analitik çözümler hem de Numerov metodu ile sayısal çözümleri yapılmıştır. Analitik çözümlerle elde edilen enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlar, Numerov metodu kullanılarak elde edilen özdeğerler ve özfonksiyonlarla karşılaştırılmıştır. Numerov metodu ile elde edilen sonuçların beklenenin ötesinde gerçek analitik sonuçlarla çok iyi uyum içersinde olduğu görülmüştür. Böylece bu çalışma Numerov metodunun oldukça kararlı ve doğru bir metod olduğunu ortaya koymuştur.

Anahtar Kelimeler: Numerov metodu, harmonik osilatör, sonsuz kuyu potansiyeli, sonlu kuyu potansiyeli hidrojen atomu.

ABSTRACT

MS Thesis

INVESTIGATION OF VARIOUS ONE ELECTRON SYSTEMS WHIT DIFFERENT POTENTIALS BY THE NUMEROV METHOD

İdris SIDAR

Selçuk University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
2006, 60 pages

Jury: Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
Assoc. Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Assoc. Prof. Dr. Hamdi Şükür KILIÇ

In this work, time independent Schrödinger equation was solved both analytically and numerically with Numerov method for one dimensional potentials containing one electron. Analytical results obtained for energy eigenvalues and eigen functions have been compared to that obtained by Numerov method. It has been seen that the results obtained by Numerov method has presented a good apreement the with analytical results. In this way, this work has demanstrected that Numerov method is really stable and true method to solve the problem.

Key Words: The Numerov method, harmonic oscillator, ınfinitive well potential, finite well potential, hydrogen atom.

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans Tezi olarak hazırlanmıştır.

Bu tez çalışmasında tek elektronlu tek boyutlu bazı potansiyeller için karşımıza çıkan zamandan bağımsız Schrödinger Denkleminin hem analitik çözümler hem de Numerov Metodu ile sayısal çözümleri yapılmıştır.

Bu çalışma boyunca beni destekleyen ve yönlendiren danışmanım sayın Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL'e programın yazımında ve tartışmalarda yardımlarını esirgemeyen Arş. Gör. A. Emre KAVRUK ve elbette ki bütün hayatım boyunca beni destekleyen aileme ve sevgili eşime teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

1. GİRİŞ	1
2. BİR BOYUTLU ZAMANDAN BAĞIMSIZ SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN NUMEROV METODU İLE ÇÖZÜMÜ	2
3. HARMONİK OSİLATÖR	7
3.1 Harmonik Osilatörün Analitik Çözümü	7
3.2 Harmonik Osilatörün Numerov Çözümü	18
4. SONSUZ KUYU POTANSİYELİ	20
4.1 Sonsuz Kuyu Potansiyelinin Analitik Çözümü	20
4.2 Sonsuz Kuyu Potansiyelinin Numerov Çözümü	31
5. SONLU KUYU POTANSİYELİ	35
5.1 Sonlu Kuyu Potansiyelinin Analitik Çözümü	35
5.2 Sonlu Kuyu Potansiyelinin Numerov Çözümü	43
6. HİDROJEN ATOMU	45
6.1 Hidrojen Atomunun Analitik Çözümü	45
6.2 Hidrojen Atomunun Numerov Çözümü	52
7. SONUÇ VE TARTIŞMALAR	56
KAYNAKLAR	60

1. GİRİŞ

Bir kutuda parçacık ve harmonik osilatör gibi birkaç potansiyel haricinde, fizikte karşılaşılan potansiyellerin birçoğu için Schrödinger denklemi tam olarak çözülememektedir. Bundan dolayı tek boyutlu Schrödinger denkleminin çözümü tam olarak yapılamamaktadır ve bunun için birçok nümerik yöntem ortaya atılmıştır (Levine 2000, Liboff 1998). Son yıllarda, Schrödinger denkleminin çözümü alanında ciddi bir bilimsel aktivite vardır. Schrödinger denklemini çözmek için en çok kullanılan yöntemlerden birisi de Numerov metodudur (Avdelas ve ark. 2000, Bieniasz 2002, Wang ve ark. 2004).

Numerov metodu 1920'li yıllarda Numerov isimli bir rus astronom tarafından bulunmuştur (levine 2000). O günden günümüze kadar özellikle son on yılda bu yöntem üzerine birçok çalışma yapılmıştır (Andrew 2000, Avdelas 2000, Killingbeck ve Jolicard 1999, Tselyaev 2004, Wang 2003). Bir yöntemin kalitesi yöntemin doğruluğu ve hesaplama etkinliğinden anlaşılır. Numerov metodunun bu alanlardaki gelişimi ise halen çalışılan aktif bir problemdir (Agarwal ve Wang 2001, Tsitouras 2002, Tsitouras 2003). Numerov metodundaki bu yeni çalışmalardan faydalanarak yapılacak faklı potansiyeller için çözümler ise ileri fizik konularına ışık tutacaktır. Çünkü Nükleer Fizik, Fiziksel Kimya, Kuantum Kimyası ve Moleküler Fizik gibi bir çok bilimsel alanda Schrödinger denklemi ile karşılaşılmaktadır. Karşılaşılan bu Schrödinger denklemlerinin çözümleri ise oldukça karmaşık ve çoğu zaman içinden çıkılamaz bir hal almaktadır. Ama genelde karşılaşılan Schrödinger denklemleri belli yaklaşımlar altında tek boyutlu tek elektronlu Schrödinger denklemine kadar indirgenebilmektedir. Fakat problem bu noktada da son bulmamaktadır. Tek boyutlu sonsuz potansiyel kuyusundaki bir parçacık veya harmonik osilatör gibi sadece birkaç potansiyel için Schrödinger denklemi analitik olarak çözülebilmektedir. Bunun haricindeki durumlar için ise değişik yaklaşımlar yapılmak zorundadır. Bu yaklaşımlar temel olarak varyasyonel yöntem ya da pertürbasyon yöntemi olabilir. Bu çalışmada ise numerik çözüm ortaya konacaktır. Numerik çözüm yöntemleri de kendi içinde ayrılmaktadır. Biz Schrödinger denklemi ile karşımıza çıkan ikinci dereceden differansiyel denklemi çözmek için Numerov metodunu kullanacağız.

2. BİR BOYUTLU ZAMANDAN BAĞIMSIZ SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN NUMEROV METODU İLE ÇÖZÜMÜ

Schrödinger denklemi bir kutudaki parçacık ve harmonik osilatör gibi çok az örnek için tam olarak analitik çözülebilmektedir. Bir çok potansiyel enerji fonksiyonu $V(x)$ için bir parçacıklı bir boyutlu Schrödinger denklemi tam olarak çözülememektedir. Biz bu tezde rast gele bir $V(x)$ potansiyeli için bir boyutlu bir parçacıklı Schrödinger denkleminin bağlı çözümleri olan özdeğer ve özfonksiyonları doğru bir şekilde veren sayısal bir çözüm sunacağız. Bu çözüm yöntemini ilk kez bulup kullanan Rus Astronom adı ile **Numerov Metodu** olarak bilinir (Levine, 2000).

Herhangi bir fonksiyonun $x=a$ noktası etrafında Taylor serisine açılımı

$$f(x)=f(a)+f'(a)(x-a)/1!+f''(a)(x-a)^2/2!+\cdots \tag{2.1}$$

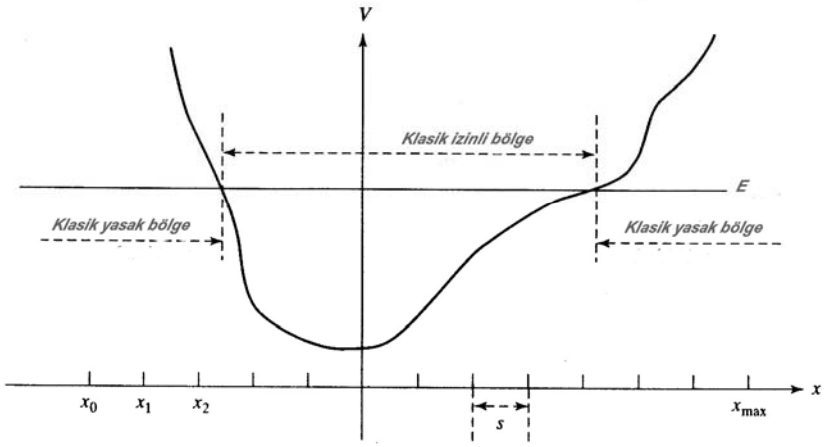
şeklindedir. Burada $x=a$'yı x_n $(x_n=a)$ olarak ve $x-a$'yı da s olarak adlandırırsak $s\equiv x-a\equiv x-x_n$ ve $x=x_n+s$ olur. Buna göre $f(x)$ fonksiyonunu bir $f(x_n+s)$ ve bir de $f(x_n-s)$ Taylor serisine açarsak sonuçlarını

$$f(x_n+s)=f(x_n)+f'(x_n)s+\frac{1}{2}f''(x_n)s^2+\frac{1}{6}f'''(x_n)s^3+\frac{1}{24}f^{(iv)}(x_n)s^4+\frac{1}{120}f^{(v)}(x_n)s^5+\cdots$$
$$f(x_n-s)=f(x_n)-f'(x_n)s+\frac{1}{2}f''(x_n)s^2-\frac{1}{6}f'''(x_n)s^3+\frac{1}{24}f^{(iv)}(x_n)s^4-\frac{1}{120}f^{(v)}(x_n)s^5+\cdots$$

elde ederiz. Bu son iki eşitliği taraf tarafa toplarsak ve s yeterince küçük olduğu için s^6 ve üstündeki ifadeleri ihmal edersek

$$f(x_n+s)+f(x_n-s)\approx 2f(x_n)+f''(x_n)s^2+\frac{1}{12}f^{(iv)}(x_n)s^4 \tag{2.2}$$

ifadesine ulaşırız. Şekil 2.1'de görüldüğü gibi Schrödinger denklemini sayısal olarak çözmek için x eksenini her birinin uzunluğu s kadar olan küçük parçalara böleriz.



Şekil 2.1 Bir boyutlu bir parçacıklı sistemin potansiyel enerjisinin x'e bağlı grafiği

$x_n - s$, x_n ve $x_n + s$ ardışık iki aralığın uç noktalarıdır. Bu noktalardaki f fonksiyonunun değerlerini ise

$$f_{n-1} \equiv f\left(x_n - s\right), \qquad f_n \equiv f\left(x_n\right), \qquad f_{n+1} \equiv f\left(x_n + s\right)$$

biçiminde etiketleyelim. Bu etiketlemeye göre Denklem 2.2

$$f_{n+1} \approx -f_{n-1} + 2f_n + f_n'' s^2 + \frac{1}{12} f_n^{(iv)} s^4 \tag{2.3}$$

halini alır. Bu noktada biz fonksiyon olarak dalga fonksiyonları ile ilgileneceğimiz için Denklem 2.3'de *f* yerine ψ yerleştirelim.

$$\psi_{n+1} \approx -\psi_{n-1} + 2\psi_n + \psi_n'' s^2 + \frac{1}{12} \psi_n^{(iv)} s^4 \tag{2.4}$$

Buradaki ψ dalga fonksiyonlarının altındaki indisler dalga fonksiyonunun ait olduğu seviyeyi değil, hangi *x* noktasındaki değeri taşıdığını vermektedir.

Denklem 2.4'ü kullanabilmek için ψ'' ve $\psi^{(iv)}$'ün değerlerini bilmemiz gerekiyor. Bunun için Schrödinger denklemini kullanırsak

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi=E\psi$$

$$\psi''=m\hbar^{-2}\left[2V\left(x\right)-2E\right]\psi$$

$$\psi''=G\psi \tag{2.5}$$

$$G\equiv m\hbar^{-2}\left[2V\left(x\right)-2E\right] \tag{2.6}$$

ifadelerini elde ederiz.

$\psi^{(iv)}s^4$ ifadesini elde edebilmek için Denklem 2.3'de *f* gördüğümüz yere ψ'' yazarız. Daha sonra eşitliğin her iki yanını s^2 ile çarparsak

$$\psi''_{n+1}s^2\approx-\psi''_{n-1}s^2+2\psi''_n s^2+\psi_n^{(iv)}s^4+\frac{1}{12}\psi_n^{(vi)}s^6 \tag{2.7}$$

ifadesine ulaşırız. Ayrıca son ifade de s^6'lı terimleri yine ihmal edersek ve $\psi^{(iv)}s^4$ terimini eşitliğin sol tarafına çekersek

$$\psi_n^{(iv)}s^4\approx\psi''_{n+1}s^2+\psi''_{n-1}s^2-2\psi''_n s^2 \tag{2.8}$$

sonucunu elde ederiz. Denklem 2.5 ile verilen ifadeyi burada kullanırsak eşitliğin son hali

$$\psi_n^{(iv)}s^4\approx G_{n+1}\psi_{n+1}s^2+G_{n-1}\psi_{n-1}s^2-2G_n\psi_n s^2 \tag{2.9}$$

olur.

Denklem 2.5 ve 2.9'da Denklem 2.4'de kullanırsak

$$\psi_{n+1}\approx-\psi_{n-1}+2\psi_n+G_n\psi_n s^2+\frac{1}{12}\left[G_{n+1}\psi_{n+1}s^2+G_{n-1}\psi_{n-1}s^2-2G_n\psi_n s^2\right] \tag{2.10}$$

denklemini elde ederiz. Bu son denklemde ψ_{n+1}'i çözersek

$$\psi_{n+1} \approx \frac{2\psi_n - \psi_{n-1} + 5G_n\psi_n s^2/6 + G_{n-1}\psi_{n-1}s^2/12}{1 - G_{n+1}s^2/12} \tag{2.11}$$

sonucunu buluruz. Denklem 2.11 bize, eğer ψ'nin bir noktadaki değerini bilmemiz durumunda sonraki bir noktada ψ'nin değerini hesaplayabilme yeteneği sağlamaktadır.

Denklem 2.11 kullanabilmek için ilk önce tahmini bir $E_{tah.}$ enerji değeri alırız. Bu değere göre gerekli G değerlerini hesaplarız. Daha sonra Şekil 2.1'de görüldüğü gibi başlangıç noktası olan x_0'ı klasik olarak yasak olan bölgenin yeterince derininde seçeriz. Klasik olarak yasak bölgede dalga fonksiyonunun azalarak sıfıra gittiğini biliyoruz. x_0'ı klasik olarak yasak bölgede yeterince içeride seçtiğimiz zaman bu noktadaki dalga fonksiyonu $\psi(x_0) = \psi_0 = 0$ olduğu yaklaşımını yapabiliriz. s aralıklarını da yeterince küçük seçeriz. Daha sonra x_1'deki dalga fonksiyonunun değeri de oldukça küçüktür. Bundan dolayı bu noktada $\psi(x_1) = \psi_1 = 0.0001$ yaklaşımı yapabiliriz. Burada ψ_1'in değeri için 0.001 yaklaşımı da yapabilirdik. Bu noktada hangi değerin kullanılacağı enerji özdeğerlerinin bulunmasında hiçbir etki yapmaz. Sadece ψ_1'in değeri için 0.0001 yerine 0.001 değerini kullanmak kolayca ispatlanacağı gibi bütün dalga fonksiyon değerlerini 10 ile çarpmak olur. Bu da, dalga fonksiyonunun normalize edilmesinden sonra tamamen ortadan kalkan bir sorundur. Sonuç itibariyle ψ_1'in değeri küçük seçildiği sürece ne seçildiği sonucu etkilemeyecektir. Tahmini enerji özdeğeri için ψ_0 ve ψ_1 değerleri Denklem 2.11'de kullanılarak ψ_2 bulunur. ψ_1 ve ψ_2 kullanılarak ψ_3 bulunur. Bu süreç Şekil 2.1'de görüldüğü gibi sol taraftaki klasik olarak yasak bölgeye kadar devam ettirilir. Yine bu yasak bölgenin içinde yeterince uzak bir nokta $x_{mak.}$ olarak seçilir. Bu noktada dalga fonksiyonunun yine sıfıra çok yakın bir değerde olmasını bekleriz. Eğer tahmini olarak öne sürdüğümüz enerji değeri enerji özdeğerlerinin birisine yeterince yakın değil ise böyle bir enerjiye ait dalga fonksiyonu karesi integrallenebilir olmayacağı için $x_{mak.}$ noktasında dalga

fonksiyonunun değeri küçük çıkması beklenmesine rağmen büyük çıkar. Bu da bize seçtiğimiz enerji değerinin yanlış olduğunu bir özdeğere ait değer olmadığını söyler. Biz de tahmini değeri değiştirerek yeni E değeri için bütün işlemleri tekrarlarız. $x_{mak.}$ noktasında dalga fonksiyonu sıfıra yakın bir değer verinceye kadar yeni E değerlerini deneriz. Bu noktada dalga fonksiyonu sıfıra yakın bir değer verdiği an tahmini enerji değerimizin bir özdeğere karşılık geldiğini anlarız. Hangi özdeğer olduğunu anlamak için ise dalga fonksiyonundaki düğüm sayısına bakarız. Eğer hiç düğüm yoksa bu enerji özdeğeri temel seviyenin enerji özdeğeridir. Bir düğüm varsa ilk uyarılmış seviyenin, iki düğüm varsa ikinci uyarılmış seviyenin enerji özdeğeri olduğunu anlarız. Bu böylelikle sürüp gider.

3. HARMONİK OSİLATÖR

3.1 Harmonik osilatörün analitik çözümü

Harmonik osilatörün Hamiltoniyen operatörü

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + 2\pi^2\nu^2 m x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} - \alpha^2 x^2\right) \tag{3.1}$$

dir. Burada yazımda kolaylık olması için

$$\alpha = 2\pi\nu m/\hbar \tag{3.2}$$

ifadesini tanımladık. Schrödinger denklemi, $\hat{H}\psi = E\psi$ için gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(2mE\hbar^{-2} - \alpha^2 x^2\right)\psi = 0 \tag{3.3}$$

şeklinde yazılabilir.

Eğer Denklem 3.3 üzerinde doğrudan kuvvet serisi çözümünü denersek ikili tekrarlama bağıntısı yerine üçlü bir tekrarlama bağıntısı elde ederiz. Üç terimli bir tekrarlama bağıntısı ile uğraşmak ikiliye göre çok daha zor olduğu için Denklem 3.3'de gerekli düzenlemeleri yaparak ikili bir tekrarlama bağıntısı elde edebiliriz. Bunun için $f(x) \equiv e^{\alpha x^2/2}\psi(x)$ fonksiyonunu tanımlayarak Denklem 3.3'de

$$\psi(x) = e^{-\alpha x^2/2} f(x) \tag{3.4}$$

dönüşümünü yaparız. Bu noktada gerekli diferansiyelleri alıp gerekli düzenlemeler yapıldıktan sonra Denklem 3.3'deki eşitlik yerine

$$f''(x) - 2\alpha x f'(x) + \left(2mE\hbar^{-2} - \alpha\right) f(x) = 0 \tag{3.5}$$

eşitliğine ulaşırız. Şimdi bu yeni eşitlikte

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n x^n \tag{3.6}$$

seri çözümünü deneyelim. Denklem 3.6'in bir kere diferansiyelini alırsak

$$f'(x)=\sum_{n=1}^{\infty}nc_n x^{n-1}=\sum_{n=0}^{\infty}nc_n x^{n-1} \tag{3.7}$$

sonucuna, ikinci kez diferansiyelini alırsak

$$f''(x)=\sum_{n=2}^{\infty}n(n-1)c_n x^{n-2}=\sum_{j=0}^{\infty}(j+2)(j+1)c_{j+2}x^j=\sum_{n=0}^{\infty}(n+2)(n+1)c_{n+2}x^n$$

sonucuna ulaşırız. Son ifadede $j=n-2$ ve son olarak j ve n indis değişiklikleri yapılmıştır. Bu indis değişiklikleri toplamın sonucunu hiçbir şekilde değiştirmediği için bu değişikliklerin yapılmasının hiçbir sakıncası yoktur. Tüm bu sonuçları Denklem 3.5'deki eşitlikte kullanırsak

$$\sum_{n=0}^{\infty}(n+2)(n+1)c_{n+2}x^n-2\alpha\sum_{n=0}^{\infty}nc_n x^n+\left(2mE\hbar^{-2}-\alpha\right)\sum_{n=0}^{\infty}c_n x^n=0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[(n+2)(n+1)c_{n+2}-2\alpha nc_n+\left(2mE\hbar^{-2}-\alpha\right)c_n\right]x^n=0 \tag{3.8}$$

eşitliklerini elde ederiz. Her x değeri için bu son eşitliğin sağlanabilmesi x'in her kuvvetinin önündeki katsayısının ayrı ayrı sıfıra eşit olmasına bağlıdır. Buna göre

$$c_{n+2}=\frac{\alpha+2\alpha n-2mE\hbar^{-2}}{(n+1)(n+2)}c_n \tag{3.9}$$

iki terimli tekrarlama bağıntısı elde edilir. Denklem 3.9'deki tekrarlama bağıntısı sayesinde c_n katsayısını bilirsek c_{n+2}'yi hesaplayabiliriz. Fakat bu noktada karşımıza c_0 ve c_1 olmak üzere iki keyfi sabit çıkar. Eğer c_1'i sıfıra eşitlersek sadece x'in çift kuvvetlerini taşıyan

$$\psi(x) = e^{-\alpha x^2/2} f(x) = e^{-\alpha x^2/2} \sum_{n=0,2,4,\ldots}^{\infty} c_n x^n = e^{-\alpha x^2/2} \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l} x^{2l} \tag{3.10}$$

lineer bağımsız çözümü, eğer c_0'ı sıfıra eşitlersek bu sefer x'in sadece tek kuvvetlerini taşıyan

$$\psi(x) = e^{-\alpha x^2/2} f(x) = e^{-\alpha x^2/2} \sum_{n=1,3,5,\ldots}^{\infty} c_n x^n = e^{-\alpha x^2/2} \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l+1} x^{2l+1} \tag{3.11}$$

lineer bağımsız çözümü elde ederiz. En genel çözüm ise bu iki lineer bağımsız çözümün

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2/2} \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l+1} x^{2l+1} + Be^{-\alpha x^2/2} \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l} x^{2l} \tag{3.12}$$

lineer kombinasyonları olacaktır. Buradaki A ve B keyfi sabitlerdir.

Şimdi sınır koşullarının çözümümüz üzerinde her hangi bir sınırlama yapıp yapmadığına bakalım. Bunun için bu iki sonsuz toplamın büyük x serilerinde nasıl davrandığına bakalım. Önce ardışık x kuvvetlerinin katsayılarının oranı ile ilgilenelim. Denklem 3.12'deki ikinci toplamdaki x^{2l+2} ile x^{2l} terimlerinin katsayılarını oranlayalım. Bunun için Denklem 3.9'de $n = 2l$ yazarsak

$$\frac{c_{2l+2}}{c_{2l}} = \frac{\alpha + 4\alpha l - 2mE\hbar^{-2}}{(2l+1)(2l+2)} \tag{3.13}$$

oranına ulaşırız. Büyük x değerleri için üst dereceden kuvvetli x terimlerinin daha baskın olacağını kabul etmek bu noktada hiç de yanlış olmaz. Bu durumda x'in büyük değerleri için büyük l değerli oranlar bizi daha çok ilgilendirir. Büyük l değerleri için bu oran yaklaşık olarak

$$\frac{c_{2l+2}}{c_{2l}} \sim \frac{4\alpha l}{(2l)(2l)} = \frac{\alpha}{l} \tag{3.14}$$

halini alır. Tek kuvvetli x katsayıları arasındaki orana da aynı şekilde bakacak olursak. Denklem 3.9'de $n = 2l + 1$ yazmamız yeterli olacaktır. Büyük *l* değerleri için bu oranın, α / l olduğunu kolayca gösterebiliriz. Şimdi $e^{\alpha x^2}$ kuvvet serisi açılımı ile ilgilenelim.

$$e^z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \cdots \tag{3.15}$$

ise

$$e^{\alpha x^2} = 1 + \alpha x^2 + \cdots + \frac{\alpha^l x^{2l}}{l!} + \frac{\alpha^{l+1} x^{2l+2}}{(l+1)!} + \cdots \tag{3.16}$$

olur. Burada x^{2l+2} ile x^{2l} terimlerinin katsayılarını oranlarsak büyük *l* değerleri için

$$\frac{\alpha^{l+1}}{(l+1)!} \div \frac{\alpha^l}{l!} = \frac{\alpha}{l+1} \sim \frac{\alpha}{l} \tag{3.17}$$

sonucuna ulaşırız. Büyük *l* değerleri için Denklem 3.12'deki her iki seride $e^{\alpha x^2}$ serisi ile aynı davranış içersindedir. Bundan dolayı, büyük x değerleri için her iki serinin de $e^{\alpha x^2}$ fonksiyonu gibi davrandığını söyleyebiliriz. Elbette ki bu tam bir ispat değil. Daha doğru matematiksel türetimlerle yapılmış ispatlar literatürde mevcuttur (Bowen ve Coster 1980, Buchdahl 1974).

Büyük x değerleri için her iki seride $e^{\alpha x^2}$ şeklinde davranıyorsa, dalga fonksiyonu büyük x değerleri için $e^{\alpha x^2/2}$ şeklinde davranır. Böylece x sonsuza giderken dalga fonksiyonu da sonsuza gitmekte olduğu kolayca görülür. Bu durumda dalga fonksiyonu karesi integrallenebilir bir fonksiyon olmamaktadır. Eğer serileri belli bir yerde kesmeyi başarırsak dalga fonksiyonundaki $e^{-\alpha x^2/2}$ terimi x sonsuza giderken dalga fonksiyonunun sıfıra gitmesini sağlayacaktır. Şimdi bunun için serilerden birini belli bir noktada kesmemiz gerekir. Bunun sağlanması için bir c_n katsayısının sıfır olması gerekir. Bu sıfırıncı katsayıya $n = v + 2$ dersek c_{v+2} olur.

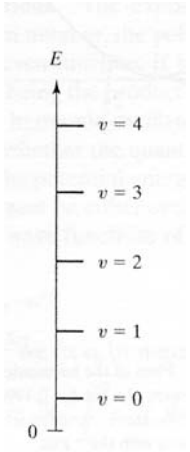
c_{v+2}'nin sıfır olması Denklem 3.9 ile verilen tekrarlama bağıntısı sayesinde $c_{v+2}, c_{v+4}, \ldots$ kalan katsayıların sıfır olmasını gerektirir. Böylelikle seri bir noktada kesilmiş olur. Şimdi Denklem 3.9'de değerini bilmediğimiz diğer bir nicelik olan E enerjisi ile ilgilenelim. c_{v+2}'nün sıfır olma şartını Denklem 3.9'de kullanırsak ve 3.2'den α'nın ifadesini kullanırsak

$$\alpha + 2\alpha v - 2mE\hbar^{-2} = 0 \tag{3.18}$$

$$2mE\hbar^{-2} = (2v+1)2\pi\nu m\hbar^{-1} \tag{3.19}$$

$$E = \left(v + \frac{1}{2}\right)h\nu\,, \qquad v = 0,1,2,3,\ldots \tag{3.20}$$

enerji ifadesine ulaşmış oluruz. Şekil 3.1'de görüldüğü gibi harmonik osilatör için kararlı durum enerji seviyeleri eşit aralıklarla birbirlerini takip etmektedirler.



Şekil 3.1 Harmonik osilatörün en düşük beş enerji seviyesi

Denklem 3.20'yi Denklem 3.9 ile verilen tekrarlama bağıntısında kullanırsak

$$c_{n+2} = \frac{2\alpha(n-v)}{(n+1)(n+2)}c_n \tag{3.21}$$

tekrarlama bağıntısını elde ederiz.

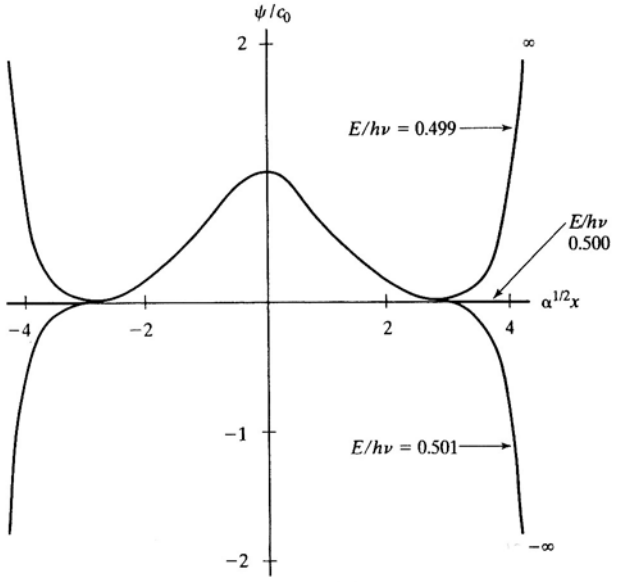
Denklem 3.20'deki enerjinin kuantumlanması serilerden birini belli sayıda terimden sonra kesilmesini sağlamaktadır. Fakat Denklem 3.12'deki diğer sonsuz serinin bertaraf edilebilmesi için tek yapılacak şey serinin başındaki keyfi sabiti doğrudan sıfıra eşitlemektir. Böylece serilerden biri bir yerde kesilirken ikinci seri tamamen ortadan kalkmaktadır. Sonuç dalga fonksiyonu ise $e^{-\alpha x^2/2}$ fonksiyonu ile v'nün tek ya da çift olmasına bağlı olarak sınırlı sayıda sadece tek ya da sadece çift kuvvetli x terimlerinin çarpımından ibarettir. Bu kuvvet serisindeki en yüksek dereceden x'in kuvveti *v* dür. Çünkü E enerji değeri $c_{v+2}, c_{v+4}, \ldots$ katsayılarının sıfır olmasını sağlayan değerdir. Bütün bunlara göre harmonik osilatörün kararlı dalga fonksiyonları

$$\psi_v = \begin{cases} e^{-\alpha x^2/2}\left(c_0 + c_2 x^2 + \cdots + c_v x^v\right) & v'nün \text{ çift değerleri için} \\ e^{-\alpha x^2/2}\left(c_1 x + c_3 x^3 + \cdots + c_v x^v\right) & v'nün \text{ tek değerleri için} \end{cases} \tag{3.22}$$

şeklinde olur. Denklem 3.12'deki A ve B keyfi sabitleri sırasıyla c_1 ve c_0 değerleri içinde saklıdır. Bu nedenle Denklem 3.22'da ayrıca A ve B keyfi sabitlerinin yazılmasından kaçınılmıştır. c_0 ve c_1'den sonra gelen sabitler ise Denklem 3.21 ile verilen tekrarlama bağıntısı ile hesaplanabilir. Denklem 3.21'deki tekrarlama bağıntısında *v* olduğu için *v*'nün her farklı değeri için farklı c_i seti elde edilecektir. Örneğin ψ_4'deki c_2 katsayısı ile ψ_2'deki c_2 katsayısı bir birlerinden farklı katsayılardır.

Bir kutudaki parçacık olayında olduğu gibi sınır koşulları bizi enerjinin kuantumlanmasına götürmektedir. Denklem 3.20'yi sağlamayan enerji değerlerine ait olan dalga fonksiyonları karesi integrallenebilir fonksiyonlar değillerdir. Örneğin Şekil 3.2'de $E/h\nu$'nün 0.499, 0.500 ve 0.501 değerleri için Denklem 3.9'deki tekrarlama bağıntısı kullanılarak bu enerji değerlerine karşılık gelen dalga fonksiyonları çizilmiştir. Şekil 3.2' de görüldüğü gibi Denklem 3.20'yi sağlamayan enerjinin 0.499 ve 0.501 değerleri için dalga fonksiyonları sınır şartlarını sağlamamakta ve bu nedenle kareleri integrallenebilir dalga fonksiyonları

olmamaktadır. Bu tip dalga fonksiyonları bizim fiziksel sistemimizin çözümünü oluşturmamaktadır.



Şekil 3.2 *E=0.499hν, E=0.500hν* ve *E=0.501hν* enerjilerine karşılık gelen *x*'in sadece çift kuvvetlerini içeren dalga fonksiyonları

Harmonik osilatörün temel seviye enerjisi sıfır değil $\frac{1}{2}h\nu$'dür. Bu enerji **sıfır-nokta enerjisi** olarak adlandırılmaktadır. Yani mutlak sıfır sıcaklıkta bile harmonik osilatörün bir enerjisi vardır ve titreşmektedir. Bu belirsizlik ilkesi açısından beklenen bir sonuçtur. Çünkü temel seviye enerjisinin sıfır olması hem kinetik enerjiyi hem de potansiyel enerjiyi aynı anda sıfır yapacaktır. Kinetik enerjinin sıfır olması demek momentumun sıfır olması, bu da, momentumdaki ΔP_x belirsizliğinin sıfır olması demektir. Aynı şekilde potansiyel enerjinin sıfır olması da parçacığın orijinde durduğunu yani konumdaki belirsizlik olan Δx'in sıfır olduğunu söyler. Halbuki belirsizlik ilkesi ise momentum ve konumun aynı anda ölçülemeyeceğini yani aynı anda her iki belirsizliğin sıfır olamayacağını söylemektedir. Tüm bunlara göre temel enerji seviyesinin sıfır olması belirsizlik ilkesine aykırıdır.

Denklem 3.22'da $e^{-\alpha x^2/2}$ fonksiyonu çift fonksiyondur. Eğer *v* çift sayı ise polinom x'in sadece çift kuvvetlerini içereceği için çift fonksiyondur. Böylelikle dalga fonksiyonu iki çift fonksiyonun çarpımı olduğu için çift fonksiyon olur. Eğer *v* tek sayı ise polinom x'in sadece tek kuvvetlerini içerdiği için tek fonksiyon olacaktır. Sonuç dalga fonksiyonu ise bir çift fonksiyon ile bir tek fonksiyonun çarpımı olduğu için tek fonksiyon olacaktır. Yani *v*'nün tek ya da çift olmasına bağlı olarak harmonik osilatörün kararlı durum dalga fonksiyonları sırasıyla tek ya da çift fonksiyon olmaktadır.

Şimdi harmonik osilatörün en düşük üç enerji seviyesi için dalga fonksiyonlarının açık ifadesini elde edelim. $v = 0$ olan temel seviyenin dalga fonksiyonu Denklem 3.22'dan

$$\psi_0 = c_0 e^{-\alpha x^2/2} \tag{3.23}$$

şeklinde verilir. Burada dalga fonksiyonunun alt indisi *v* değerini vermektedir. Denklem 3.23'deki c_0 katsayısını belirlemek için dalga fonksiyonunu normalize etmemiz gerekir. Buna göre

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |c_0|^2 e^{-\alpha x^2} dx = 2|c_0|^2 \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = |c_0|^2 \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \tag{3.24}$$

$$|c_0| = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \tag{3.25}$$

olur. Burada c_0'ın kompleks fazını sıfır seçersek temel seviye dalga fonksiyonumuzun açık ifadesi

$$\psi_0 = (\alpha/\pi)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \tag{3.26}$$

bulunur.

$v = 1$ durumunda Denklem 3.22'dan dalga fonksiyonu

$$\psi_1 = c_1 x e^{-\alpha x^2/2} \tag{3.27}$$

dir. Burada c_1'i tespit etmek için dalga fonksiyonunu normalize ederiz. Bütün gerekli işlemlerden sonra dalga fonksiyonunun açık ifadesi

$$\psi_1 = \left(4\alpha^3/\pi\right)^{1/4} x e^{-\alpha x^2/2} \tag{3.28}$$

şeklinde elde edilir.

$v = 2$ durumu için Denklem 3.22'dan dalga fonksiyonu

$$\psi_2 = \left(c_0 + c_2 x^2\right) e^{-\alpha x^2/2} \tag{3.29}$$

olur. Burada Denklem 3.21'deki tekrarlama bağıntısından c_2'nin değerini

$$c_2 = \frac{2\alpha(-2)}{1.2} c_0 = -2\alpha c_0 \tag{3.30}$$

buluruz. Buna göre dalga fonksiyonu

$$\psi_2 = c_0 \left(1 - 2\alpha x^2\right) e^{-\alpha x^2/2} \tag{3.31}$$

ifadesi ile verilebilir. Burada c_0 dalga fonksiyonu normalize edilerek bulunur. Gerekli bütün işlemlerden sonra dalga fonksiyonunun açık ifadesi

$$\psi_2 = \left(\alpha/4\pi\right)^{1/4} \left(2\alpha x^2 - 1\right) e^{-\alpha x^2/2} \tag{3.32}$$

şeklinde elde edilir. Dikkat edilecek önemli bir husus ψ_2'deki c_0 katsayısı ile ψ_0'daki c_0 katsayısının birbirine eşit olmamasıdır.

Dalga fonksiyonundaki düğüm sayısı *v* sayısına eşittir. Bir boyutlu bağlı sistemlerde sınırlar içersinde dalga fonksiyonunun sıfır olduğu noktaların sayısı temel seviye için sıfır ve her bir üst seviyeye çıktıkça bir artar olduğu ispatlanabilir (Messiah 1963). Harmonik osilatör için bu sınır noktaları $\pm\infty$ dur.

Şimdi daha kolay hesap yapabilmek için boyutsuz

$$E_r = \frac{E}{h\nu}, \qquad x_r = \alpha^{1/2} x \qquad \psi_r = \frac{\psi}{\alpha^{1/4}} \tag{3.33}$$

dönüşümlerini kullanarak geçelim. Boyutsuz nicelikler cinsinden Denklem 3.20'yi tekrar yazarsak

$$E_r = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \qquad \nu = 0,1,2,3,\ldots \tag{3.34}$$

sonucunu elde ederiz. Boyutsuz nicelikler cinsinden analitik dalga fonksiyonları ise Denklem 3.26'dan

$$\psi_{0r} = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} e^{-x_r^2/2} \qquad \nu = 0 \text{ için} \tag{3.35}$$

elde edilir. Denklem 3.28'den

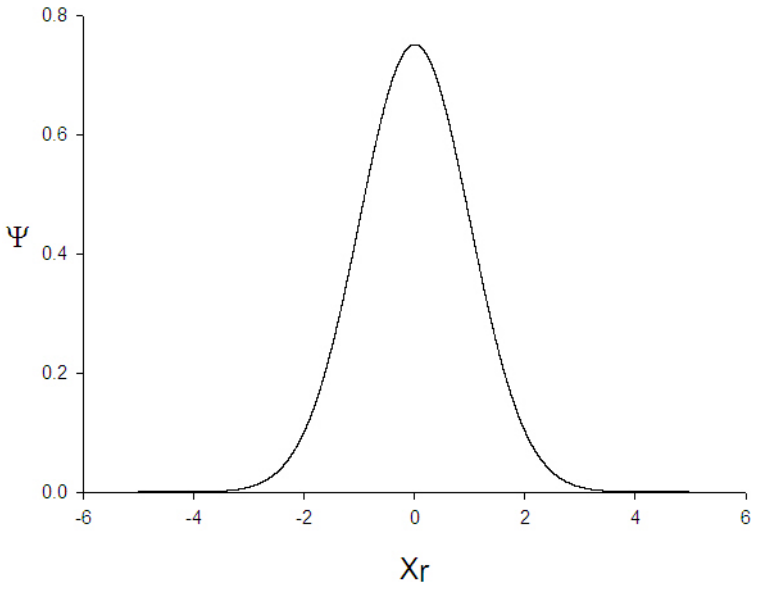
$$\psi_{1r} = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/4} x_r e^{-x_r^2/2} \qquad \nu = 1 \text{ için} \tag{3.36}$$

elde edilir. Son olarak Denklem 3.32'den

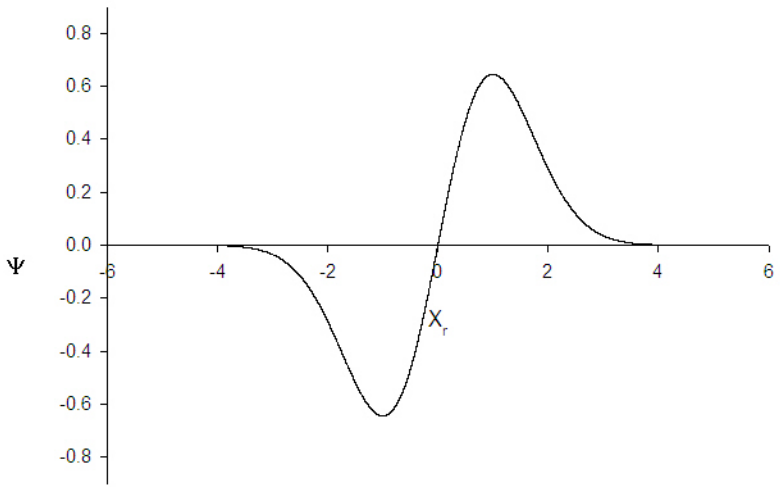
$$\psi_{2r} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/4} \left(2x_r^2 - 1\right) e^{-x_r^2/2} \qquad \nu = 2 \text{ için} \tag{3.37}$$

elde edilir.

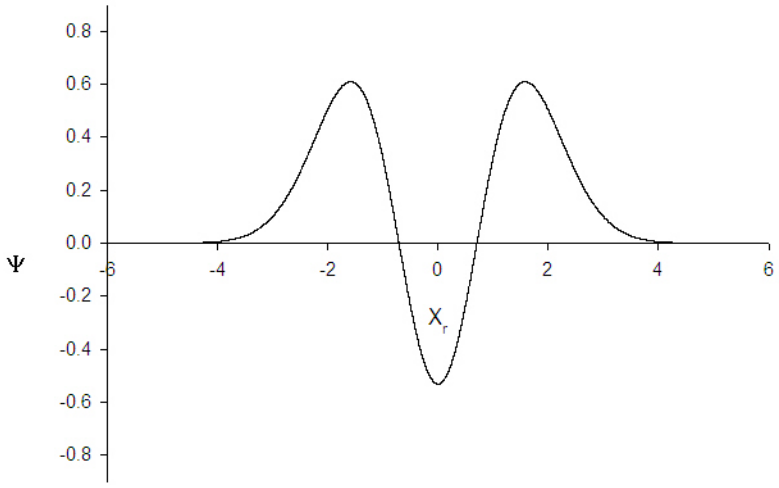
Şekil 3.3'de harmonik osilatörün boyutsuz değişkenler cinsinden temel enerji seviyesi için analitik dalga fonksiyonunun grafiği verilmektedir. Şekil 3.4'de ise harmonik osilatörün boyutsuz değişkenler cinsinden birinci uyarılmış enerji seviyesi için analitik dalga fonksiyonunun grafiği verilmektedir. En son olarak ise Şekil 3.5'de harmonik osilatörün ikinci uyarılmış enerji seviyesinin analitik dalga fonksiyonu verilmektedir.



Şekil 3.3 E_r=0.5 enerjili temel seviyenin analitik dalga fonksiyonu



Şekil 3.4 E_r=1.5 enerjili birinci uyarılmış seviyenin analitik dalga fonksiyonu.



Şekil 3.5 E_r=2.5 enerjili birinci uyarılmış seviyenin analitik dalga fonksiyonu

3.2 Harmonik Osilatörün Numerov Çözümü

Denklem 2.11 ile verilen Numerov çözümü Denklem 3.33 ile geçiş yaptığımız boyutsuz nicelikler cinsinden

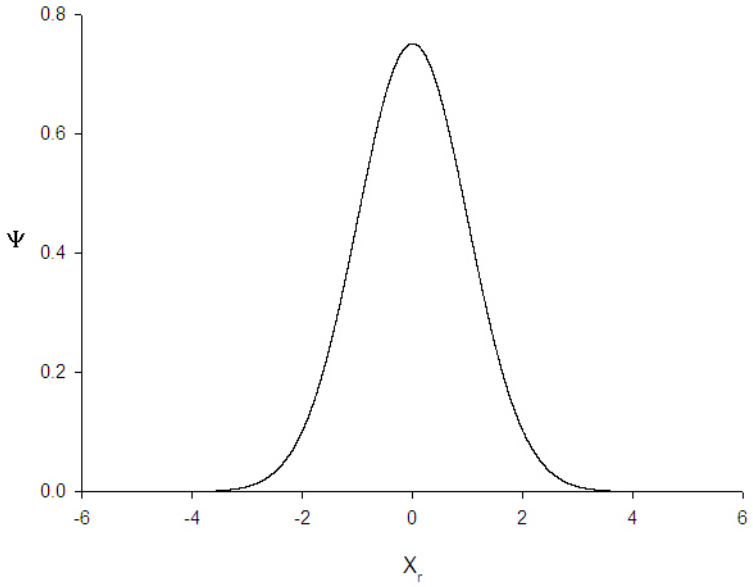
$$\psi_r^{n+1} \approx \frac{2\psi_r^n - \psi_r^{n-1} + 5G_r^n\psi_r^n s_r^2/6 + G_r^{n-1}\psi_r^{n-1}s_r^2/12}{1 - G_r^{n+1}s_r^2/12} \tag{3.38}$$

Şeklin de yazılır. Daha önce Denklem 2.6 ile verilen G niceliği ise boyutsuz nicelikler cinsinden

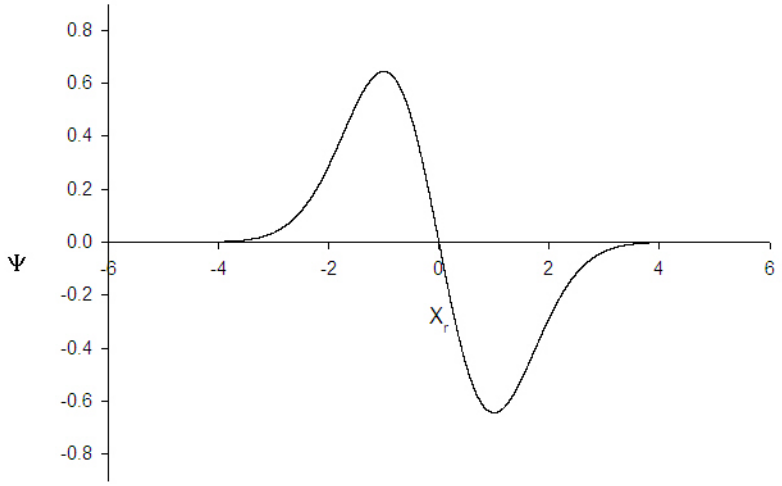
$$G_r \equiv x_r^2 - 2E_r \tag{3.39}$$

ifadesi ile verilir.

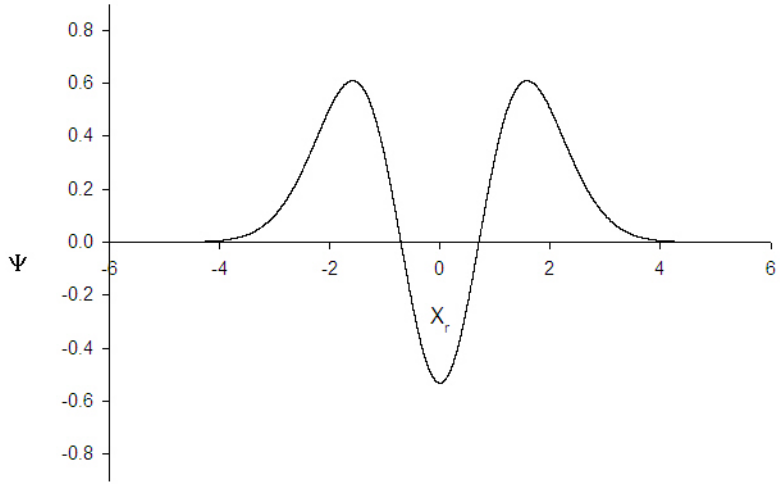
Denklem 3.38 ve Denklem 3.39'u kullanarak C-programlama dilinde harmonik osilatörün Numerov metodu ile çözümünü yapan program yazdık. Bu programla elde ettiğimiz ilk üç enerji özdeğeri ve onlara karşılık gelen dalga fonksiyonları grafiklerini sırası ile Şekil 3.6, 3.7 ve 3.8'de verilmektedir.



Şekil 3.6 Numerov metodu ile bulunan ilk özdeğer olan $E_r=0.500$ özdeğerine karşılık gelen temel seviyenin sayısal dalga fonksiyonunu.



Şekil 3.7 Numerov metodu ile bulunan ikincisi özdeğer olan $E_r=1.500$ özdeğerine karşılık gelen birinci uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonunu.

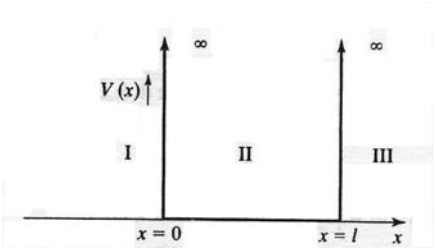


Şekil 3.8 Numerov metodu ile bulunan üçüncü özdeğer olan $E_r=2.500$ özdeğerine karşılık gelen ikinci uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.

4. SONSUZ KUYU POTANSİYELİ

4.1 Sonsuz Kuyu Potansiyelinin Analitik Çözümü

Bir boyutlu kutudaki parçacıkla ilgileniyoruz. Bir boyutlu kutu demek x ekseni boyunca belli *l* uzunluktaki bir aralıkta parçacığa etki eden potansiyel enerjinin sıfır, x ekseninin geri kalan her yerinde sonsuz olduğu durum demektir. Şekil 4.1'de gösterdiğimiz gibi aralığın sol kenarını x ekseninin orijinine yerleştirdik.



Şekil 4.1 Bir boyutlu kutudaki parçacık için potansiyel enerji fonksiyonu $V(x)$.

Şekil 4.1'de görüldüğü gibi zamandan bağımsız Schrödinger denklemini üç farklı bölgede çözmemiz gerekmektedir. Çünkü bu üç bölgede parçacığa etki eden potansiyel farklıdır. I. ve III. Bölgelerde parçacığa etki eden potansiyel enerji sonsuz olduğu için zamana bağlı Schrödinger denklemi bu bölgelerde

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E-\infty)\psi \tag{4.1}$$

şeklinde yazılır. E enerjisi sonsuzun yanında ihmal edilebileceğinden denklemin son hali

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \infty\psi\,, \qquad \psi = \frac{1}{\infty}\frac{d^2\psi}{dx^2} \tag{4.2}$$

olur. Son ifadeden kutunun dışında dalga fonksiyonunun sıfır olduğu sonucuna varırız.

$$\psi_I = 0\,, \qquad \psi_{III} = 0 \tag{4.3}$$

Sıfır ile *l* arasında kalan ikinci bölge için parçacığa etki eden potansiyel enerji sıfır olduğu için bu bölgedeki zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{II}=0 \tag{4.4}$$

şeklinde yazılır. Denklem 4.4 ikinci dereceden homojen sabit katsayılı lineer bir diferansiyel denklemdir. Denklem 4.4 ile verilen ikinci dereceden sabit katsayılı denklemlerin çözümünün de

$$y''+py'+qy=0 \tag{4.5}$$

karşımıza

$$\begin{aligned} s^2e^{sx}+pse^{sx}+qe^{sx}&=0\\ s^2+ps+q&=0 \end{aligned} \tag{4.6}$$

yardımcı denklemi çıkmaktadır. Bu denklem iki kökü olan bir ikinci dereceden tek bilinmeyenli bir denklemdir. Burada köklerden birisi s_1 ise diğer kök s_2 dir. s_1 ve s_2 birbirinden farklı olduğu sürece bu iki bağımsız çözümü gösterir. Buna göre Denklem 4.5'in en genel çözümü

$$y=c_1e^{s_1x}+c_2e^{s_2x} \tag{4.7}$$

şeklinde olacaktır.

Denklem 4.4 ile verilen denklemin yardımcı denklemi

$$s^2+2mE\hbar^{-2}=0 \tag{4.8}$$

şekilde olur. Bu denklemin kökleri ise

$$\begin{aligned} s&=\pm\left(-2mE\right)^{1/2}\hbar^{-1}\\ s&=\pm i\left(2mE\right)^{1/2}/\hbar \end{aligned} \tag{4.9}$$

dir. Denklem 4.7'i kullanarak Denklem 4.4'un çözümünün

$$\psi_{II} = c_1 e^{i(2mE)^{1/2} x/\hbar} + c_2 e^{-i(2mE)^{1/2} x/\hbar} \tag{4.10}$$

olduğu direk olarak görülür. Geçici olarak,

$$\theta = (2mE)^{1/2} x/\hbar \tag{4.11}$$

değişken dönüşümü yapılarak (4.10) ifadesi tekrar

$$\psi_{II} = c_1 e^{i\theta} + c_2 e^{-i\theta} \tag{4.12}$$

biçiminde düzenlenir. Ayrıca,

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \quad \text{ve} \quad e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta \tag{4.13}$$

Euler açılımı kullanılarak

$$\begin{aligned} \psi_{II} &= c_1\cos\theta + ic_1\sin\theta + c_2\cos\theta - ic_2\sin\theta \\ &= (c_1 + c_2)\cos\theta + i(c_1 - c_2)\sin\theta \\ &= A\cos\theta + B\sin\theta \end{aligned} \tag{4.14}$$

olduğu kolayca gösterilebilir. Burada A ve B keyfi sabitlerdir. Değişken değiştirmesini geri alırsak

$$\psi_{II} = A\cos\left[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2} x\right] + B\sin\left[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2} x\right] \tag{4.15}$$

sonucunu elde ederiz.

Şimdi A ve B keyfi sabitlerini belirlemek için sınır koşullarını kullanalım. Dalga fonksiyonunun sürekli olduğu kabulünden yola çıkalım. Bu durumda dalga fonksiyonu değerlerinde ani sıçramalar olmaması gerekmektedir. Buna göre $x = 0$ noktasında ψ_I ve ψ_{II} dalga fonksiyonlarının değerlerinin bir birlerine yaklaşmaları gerekir. Buna göre

$$\lim_{x\to 0}\psi_I = \lim_{x\to 0}\psi_{II}$$
$$0 = \lim_{x\to 0}\left\{A\cos\left[\hbar^{-1}\left(2mE\right)^{1/2}x\right] + B\sin\left[\hbar^{-1}\left(2mE\right)^{1/2}x\right]\right\} \qquad (4.16)$$
$$0 = A$$

olur. $A=0$ için Denklem 4.15

$$\psi_{II} = B\sin\left[\left(2\pi/h\right)\left(2mE\right)^{1/2}x\right] \qquad (4.17)$$

halini alır. Süreklilik şartını $x=l$ içinde uyguladığımızda

$$B\sin\left[\left(2\pi/h\right)\left(2mE\right)^{1/2}l\right] = 0 \qquad (4.18)$$

ifadesini elde ederiz. Burada $B=0$ olamaz. Çünkü B'nin de sıfır olması demek ψ_{II} dalga fonksiyonun her yerde sıfır olması demektir. Buda içi boş kutuya karşılık gelir. Bizim kutuda bir parçacık olduğu için bu çözümü dışlarız. Geriye tek bir seçenek kalıyor oda sinüsün sıfir olması.

$$\sin\left[\left(2\pi/h\right)\left(2mE\right)^{1/2}l\right] = 0 \qquad (4.19)$$

Sinüs $0,\pm\pi,\pm 2\pi,\pm 3\pi,\ldots$ açılarında sıfır olduğundan

$$\left(2\pi/h\right)\left(2mE\right)^{1/2}l = \pm n\pi \qquad (4.20)$$

eşitliğine ulaşırız. Burada $n=0,1,2,\ldots$ dır. Fakat $n=0$ $E=0$ özel bir durum olduğu için dikkatle incelenmesi gerekir. Eğer $E=0$ ise Denklem 4.9'deki yardımcı denklemin bir tek kökü vardır. Bundan dolayı da Denklem 4.4'nun genel çözümü Denklem 4.10 olmayacaktır. Eğer $E=0$ için Denklem 4.4'e geri dönersek, denklem $d^2\psi_{II}/dx^2 = 0$ olur. Bir kere integral alırsak $d\psi_{II}/dx = c$ ve ikinci kez integral alırsak $\psi_{II} = cx + d$ çözümüne ulaşırız. Bu noktadan sonra sınır koşullarını kullanırsak, $x=0$ 'da $\psi_{II}=0$ olacağından $d=0$ olur. Ayrıca $x=l$ 'de ψ_{II} gene sıfır olacağından $c=0$ olur. Bu da yine her yerde ψ_{II} dalga fonksiyonunun sıfır olmasını

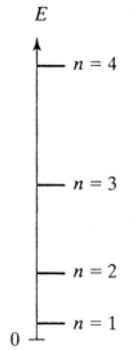
gerektirir. Bu çözüm yine kutunun içinde parçacık hatta tüm uzayda parçacık olmadığını söyler ki, bu durum bizim fiziksel problemimizle taban tabana zıttır. Bu nedenden ötürü $n=0$ olamaz ve $E=0$ izinli bir enerji seviyesi değildir. Yani sonsuz kuyudaki bir parçacığın taban enerji seviyesi sıfır olamaz.

Tüm bunlara göre kutudaki parçacığımızın izinli enerji seviyeleri Denklem 4.20'nin çözümünden

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ml^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.21}$$

olduğu görülür.

Sadece Denklem 4.21 ile verilen izinli enerji seviyeleri $x = l$'de ψ_{II} dalga fonksiyonunun sürekli olması gerekliliğinden ileri gelen sınır şartını sağlamaktadır. Şekil 4.2'de görüldüğü gibi sınır koşulları bizi enerji seviyelerinin kesikli olması sonucuna götürmüştür. Bu durum bir boyutlu kutudaki parçacık olayına klasik mekanik açısından bakıldığı zaman negatif enerji değerleri haricinde bütün enerji değerlerini alabilen ve sıfır enerji değerinin üzerinde bir minimum enerji seviyesi olmayan parçacık olayı ile taban tabana zıttır. En düşük enerji seviyesine sahip durum **taban durumu**, bu seviyenin üstünde kalan daha yüksek enerjili durumlara ise **uyarılmış durumlar** denir.



Şekil 4.2 Bir boyutlu sonsuz kuyudaki parçacığın en düşük dört enerji seviyesi.

Denklem 4.20'u Denklem 4.17'de yerine yazarak dalga fonksiyonu için

$$\psi_{II} = B\sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.22}$$

ifadesini türetiriz. Burada n'nin önündeki negatif işareti kullanmak bize yeni lineer bağımsız çözüm sunmamaktadır. $\sin(-\theta) = -\sin\theta$ olduğu için negatif çözümler pozitif çözümlerin sadece -1 ile çarpılmış halidir.

Denklem 4.22'deki B sabitinin değerini halen bilmiyoruz. B sabitinin değerini belirlemek için dalga fonksiyonlarının normalize olma şartından yararlanabiliriz. Böylece

$$\begin{gathered}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dx = 1 \\ \int_{-\infty}^{0} |\psi_I|^2 \, dx + \int_{0}^{l} |\psi_{II}|^2 \, dx + \int_{l}^{\infty} |\psi_{III}|^2 \, dx = 1 \\ |B|^2 \int_{0}^{l} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = 1 = |B|^2 \frac{l}{2}\end{gathered} \tag{4.23}$$

bağıntısını elde ederiz. Buna göre

$$|B| = (2/l)^{1/2} \tag{4.24}$$

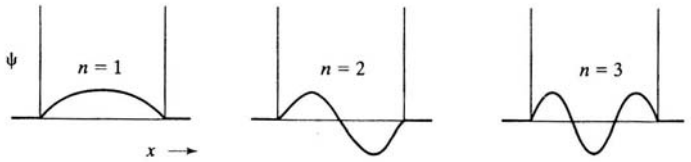
olur. Burada sadece B'nin mutlak değeri tanımlanabilmektedir. B'nin kendisi $-(2/l)^{1/2}$ olabileceği gibi aynı zamanda $(2/l)^{1/2}$'de olabilir. Hatta mutlak değeri $(2/l)^{1/2}$ olan herhangi bir kompleks sayıda olabilir. Yani $B = (2/l)^{1/2} e^{i\alpha}$ ile gösterilen ve α ise 0 ile 2π arasında herhangi bir fazı alabilen herhangi bir kompleks sayı olabilir. Eğer fazı sıfır alırsak, bir boyutlu kutudaki bir parçacık için kararlı durum dalga fonksiyonları

$$\psi_{II} = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.25}$$

şeklinde olur.

Şekil 4.3 ve 4.4'de sırasıyla dalga fonksiyonlarının ve olasılık yoğunluklarının grafikleri verilmektedir.

Enerji seviyelerini veren (Denk. 4.21) ve dalga fonksiyonlarını veren (Denk. 4.25) ifadelerinin içersinde yer alan n **kuantum sayısı** olarak adlandırılır. Bu sayının her farklı değerinde farklı bir enerji seviyesi ve ona karşılık farklı bir dalga fonksiyonu verilir.

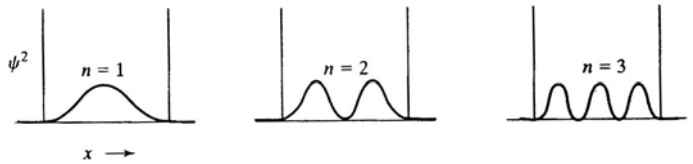


Şekil 4.3 Bir boyutlu sonsuz kuyudaki parçacık için en düşük üç enerji seviyesine karşılık gelen dalga fonksiyonları.

Dalga fonksiyonu belli yerlerde sıfır olmaktadır. Bu yerlere **düğüm** denir. n kuantum sayısının her bir artışı için ψ dalga fonksiyonundaki düğüm sayısı da bir artmaktadır. ψ ve $|\psi|^2$' deki düğüm sayısı biraz sürpriz sayılabilir. Örneğin Şekil 4.4'de n=2 için $|\psi|^2$ olasılık yoğunluğuna bakacak olursak, parçacığın kuyunun orta noktasında yani $x = l/2$'de bulunma olasılığı sıfırdır. Klasik açıdan olayı ele aldığımızda parçacık nasıl olurda kutunun ortasında hiç bulunmadan kutunun bir yanından diğer yanına geçebilir. Burada da görüldüğü gibi, mikroskobik dünyayı makroskobik dünyadan elde ettiğimiz tecrübelere dayanarak ortaya çıkardığımız klasik mekanik ile açıklamaya çalıştığımızda bir çok paradoks ile karşı karşıya kalıyoruz. Daha önce bahsettiğimiz üzere mikroskobik parçacıkların hareketleri klasik mekanik ile tam olarak açıklanamaz.

Şekil 4.4'de görüldüğü gibi kuantum mekaniksel olarak parçacığın kutu içersinde değişik yerlerde bulunma olasılığı klasik olarak parçacığın kutu içersinde bulunma olasılığından çok farklıdır. Klasik olarak sabit enerjili ve sabit bir hızla kutu içersinde duvarlardan esnek çarpışma yaparak sağa ve sola doğru giden bir parçacığın kutu içinde herhangi bir yerde bulunma olasılığı kutu içindeki her noktada

bir birine eşittir. Kuantum mekaniğinde ise bulunma olasılığının maksimum ve minimum olduğu noktalar vardır. Örneğin temel enerji düzeyi için parçacık kutunun ortasında maksimum bulunma olasılığına sahiptir. n kuantum sayısı artıkça düğüm sayısı artmakta ve buna bağlı olarak maksimum ve minimumların sayısı artmaktadır. Maksimum ve minimumların sayısı artıkça ve yukarıdaki n kuantum sayılarına çıktıkça maksimum ve minimumların arasındaki mesafede giderek daralmaktadır. En sonunda olasılık yoğunluğundaki bu maksimum ve minimum olma olayı artık fark edilemez hale gelir. Böylelikle çok yüksek n kuantum sayıları için klasik olasılık dağılımına yaklaşılmış olur.



Şekil 4.4 Bir boyutlu kutudaki parçacığın en düşük üç enerji seviyesine ait olasılık yoğunluğu.

Kuantum mekaniğin yüksek n kuantum sınırında klasik mekaniğin sonuçlarını vermesi olayına Bohr'un karşılama ilkesi denir. Klasik mekanik rölativistik olmayan makroskobik parçacıkların hareketlerini açıkladığına göre rölativistik olmayan kuantum mekaniği de makroskobik objeler için klasik mekanikle aynı sonuçları vermelidir. Denklem 4.21'deki kütle ve kutunun uzunluğunun karesi ifadeleri paydada kaldığından ve bir h Planck sabitinin çok küçük olmasından dolayı makroskobik parçacıklarda enerjinin kuantumlanması fark edilemez. Bir de bunun üzerine parçacığın hissedilebilir bir enerjisinin olması için n'nin çok yüksek değerlerine gitmek gerekir. Tüm bunlar birleşince Bohr'un karşılama ilkesinde belirttiği gibi kuantum mekaniği tamamen klasik mekaniğe dönüşmektedir.

Şu anda her biri farklı n kuantum sayısına ve enerjisine ait olmak üzere tam bir dalga fonksiyonları setine sahibiz. Kuantum sayısı n_i olan dalga fonksiyonunu i alt indisi ile gösterelim. Buna göre i. dalga fonksiyonu

$$\psi_i = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_i \pi x}{l}\right), \qquad 0 < x < l \tag{4.26a}$$

$$\psi = 0 \qquad \text{diğer yerlerde} \tag{4.26b}$$

şeklinde olur. Daha önceden ortaya koyduğumuz gibi dalga fonksiyonları normalize olduğu için

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = 1 \qquad \text{i=j için} \tag{4.27}$$

olduğunu zaten biliyoruz. Şimdi farklı enerji seviyelerine ait dalga fonksiyonları ile bu integralin sonucunun ne olacağına bakalım.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \int_0^l \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_i \pi x}{l}\right) \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_j \pi x}{l}\right) dx, \quad n_i \neq n_j \tag{4.28}$$

Burada $t = \pi x / l$ dönüşümü yaparsak

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \frac{2}{l} \int_0^{\pi} \sin\left(n_i t\right) \sin\left(n_j t\right) dt . \frac{l}{\pi} \tag{4.29}$$

olur. Bu integral

$$\sin\left(n_i t\right) \sin\left(n_j t\right) = \frac{1}{2} \cos\left[\left(n_i - n_j\right) t\right] - \frac{1}{2} \cos\left[\left(n_i + n_j\right) t\right] \tag{4.30}$$

eşitliği kullanılarak çözülebilir. Böylelikle integralin sonucu

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{2} \cos\left[\left(n_i - n_j\right) t\right] dt - \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{2} \cos\left[\left(n_i + n_j\right) t\right] dt = 0 \tag{4.31}$$

bulunur. Burada m tam sayı olmak üzere $\sin m\pi = 0$ eşitliğinden faydalanılmıştır. Böylece

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = 0, \qquad i \neq j \text{ için} \tag{4.32}$$

sonucuna sahip oluruz. Denklem 4.32'yı sağlayan dalga fonksiyonlarının bir birlerine **dik (ortogonal) olduklarını** söyleriz. Denklem 4.27 ile 4.32'yı birleştirirsek

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \delta_{ij} \tag{4.33}$$

sonucunu elde ederiz. Buradaki δ kronecker deltası olarak adlandırılan

$$\delta_{ij} = \begin{cases} o & i \neq j \text{ için} \\ 1 & i = j \text{ için} \end{cases} \tag{4.34}$$

ifadesidir. Denklem 4.33'deki ifadeyi sağlayan fonksiyonlar **ortonormal** olarak adlandırılır. Burada bir boyutlu kutudaki tek bir parçacık için dalga fonksiyonlarının ortonormal olduklarını ispatlamış olduk.

Şimdi daha kolay hesap yapabilmek için boyutsuz nicelikler için

$$E_r = \frac{ml^2}{\hbar^2} E\,, \qquad x_r = x/l \qquad \psi_r = l^{1/2}\psi \tag{4.35}$$

dönüşümlerini kullanarak geçelim. Boyutsuz nicelikler cinsinden Denklem 4.21'i tekrar yazarsak

$$E_r = \frac{n^2\pi^2}{2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.36}$$

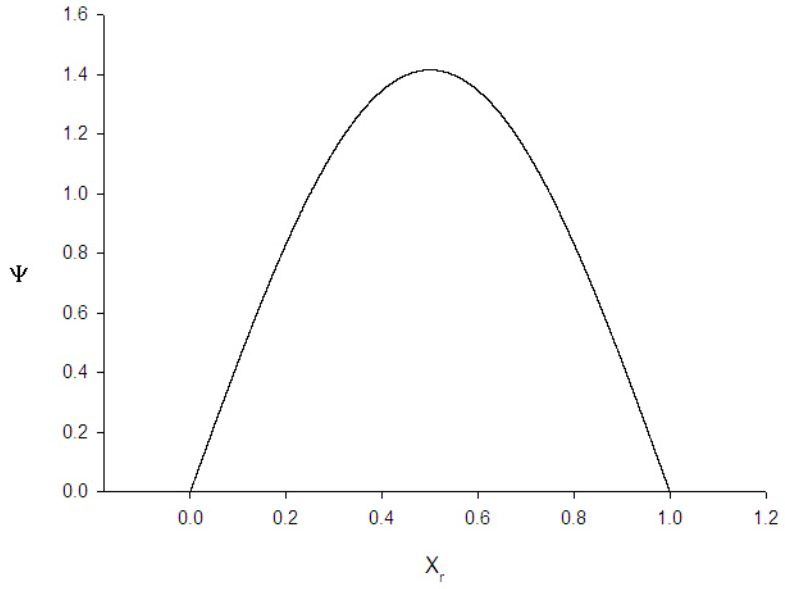
sonucunu elde ederiz. Boyutsuz nicelikler cinsinden analitik dalga fonksiyonları ise Denklem 4.26'dan

$$\psi_{ir} = \sqrt{2}\sin\left(n_i \pi x_r\right) \qquad 0 < x_r < 1 \quad \text{için} \tag{4.37a}$$

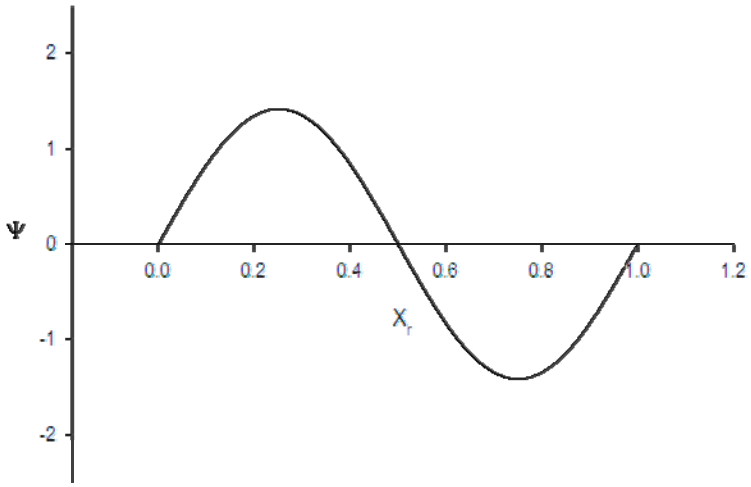
$$\psi = 0 \qquad \text{diğer yerlerde} \tag{4.37b}$$

elde edilir. Burada dikkat edilmesi gereken husus ise boyutsuz uzunluk olan x_r'nin 0 ile 1 arasında değiştiğidir.

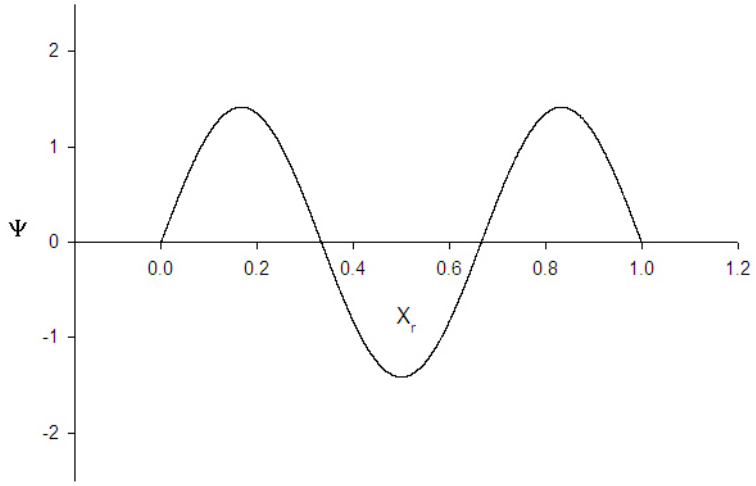
Şekil 4.5'de sonsuz kuyu potansiyelinin temel enerji seviyesi için analitik dalga fonksiyonunun boyutsuz değişken cinsinden grafiği verilmektedir. Şekil 4.6'da ise sonsuz kuyu potansiyelinin boyutsuz değişkenler cinsinden birinci uyarılmış enerji seviyesi için analitik dalga fonksiyonunun grafiği verilmektedir. En son olarak ise Şekil 4.7'de sonsuz kuyu potansiyelinin ikinci uyarılmış enerji seviyesinin analitik dalga fonksiyonu verilmektedir.



Şekil 4.5 E_r=*4.9348022* enerjili temel seviyesinin analitik dalga fonksiyonu.



Şekil 4.6 E_r=*19.7392088* enerjili birinci uyarılmış seviyesinin analitik dalga fonksiyonu



Şekil 4.7 E_r=*44.4132198* enerjili ikinci uyarılmış seviyesinin analitik dalga fonksiyonu

4.2 Sonsuz Kuyu Potansiyelinin Numerov Çözümü

Denklem 2.11 ile verilen Numerov çözümü Denklem 4.35 ile geçiş yaptığımız boyutsuz nicelikler cinsinden

$$\psi_r^{n+1} \approx \frac{2\psi_r^n - \psi_r^{n-1} + 5G_r^n\psi_r^n s_r^2/6 + G_r^{n-1}\psi_r^{n-1}s_r^2/12}{1 - G_r^{n+1}s_r^2/12} \tag{4.38}$$

şeklide yazılır. Daha önce Denklem 2.6 ile verilen G niceliği ise boyutsuz nicelikler cinsinden

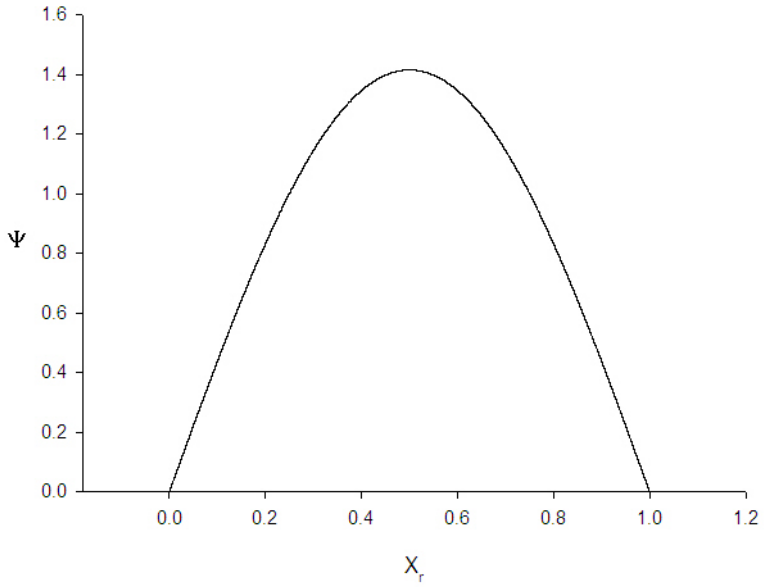
$$G_r \equiv -2E_r \tag{4.39}$$

ifadesi ile verilir.

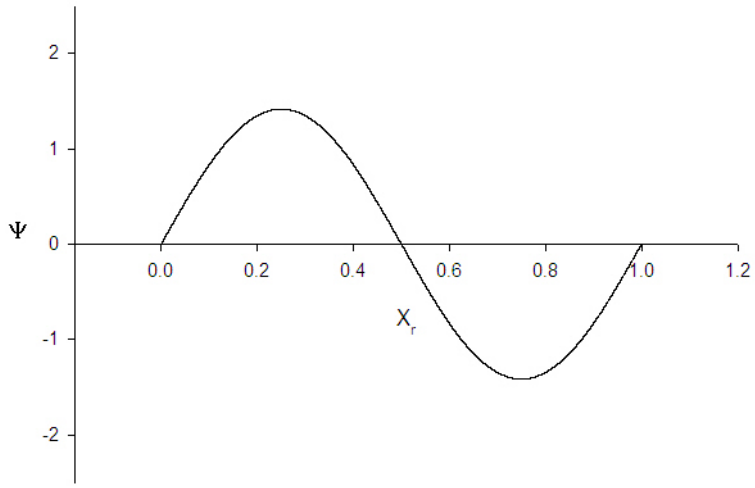
Burada dikkat edilmesi gereken en önemli nokta x_r'nin 0 ile 1 arasında değiştiğidir.

Bu çalışmada denklem 4.38 ve denklem 4.39'u baz alan ve C-programlama dilini kullanan sonsuz kuyu potansiyeli için Numerov metodu ile çözüm yapan bir program

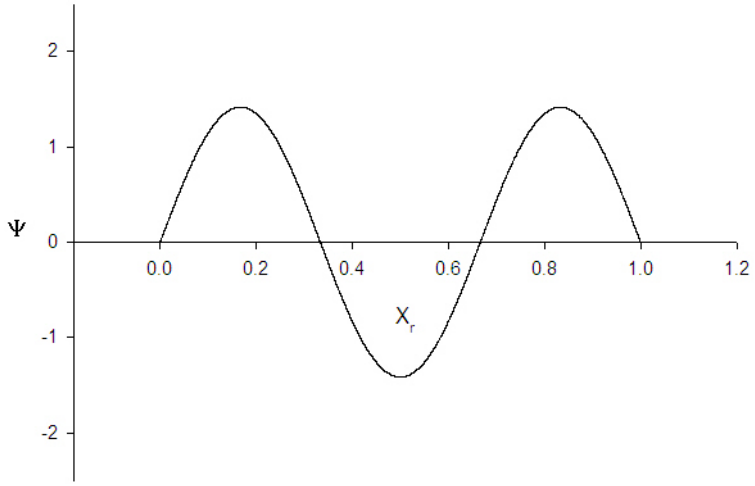
yazdık. Bu programla elde ettiğimiz ilk üç enerji özdeğeri ve onlara karşılık gelen dalga fonksiyonlarının grafiklerini sırası ile Şekil 4.8, 4.9 ve 4.10'da verilmektedir.



Şekil 4.8 Numerov metodu ile bulunan ilk özdeğer olan E_r*=4.9348020* enerjisine karşılık gelen temel seviyenin sayısal dalga fonksiyonunu.



Şekil 4.9 Numerov metodu ile bulunan ikinci özdeğer olan E_r*= 19.7392080 enerjisine* karşılık gelen ilk uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonunu.



Şekil 4.10 Numerov metodu ile bulunan üçüncü özdeğer olan $E_r = 44.4132190$ özdeğerine karşılık gelen ilk uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonunu.

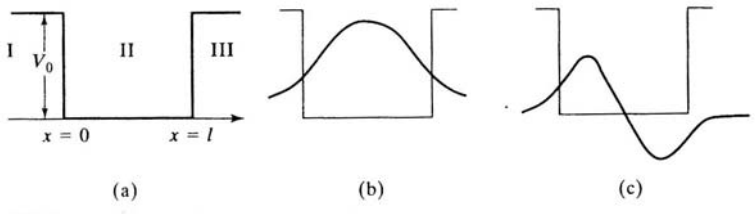
5. SONLU KUYU POTANSİYELİ

5.1 Sonlu Kuyu Potansiyelinin Analitik Çözümü

Şimdi Şekil 5.1'de görüldüğü gibi sınırlı bir potansiyel kuyusundaki parçacık ile ilgilenelim. Bu parçacık için potansiyel enerji fonksiyonu

$$\begin{aligned} V &= V_0 \quad x < 0 \text{ için} \\ V &= 0 \quad 0 \le x \le l \text{ için} \\ V &= V_0 \quad x > l \text{ için} \end{aligned} \tag{5.1}$$

biçimindedir. Burada parçacığın enerjisi E'nin V_0 potansiyel enerjisinden büyük yada küçük olmasına göre incelenmesi gereken iki ayrı durum mevcuttur.



Şekil 5.1 a) Bir boyutlu sınırlı kuyudaki parçacığın potansiyel enerji fonksiyonu b) Bu potansiyele ait temel seviye dalga fonksiyonu c) İlk uyarılmış seviye dalga fonksiyonu

Biz ilk olarak $E < V_0$ durumu ile ilgileneceğiz. Zamandan bağımsız Schrödinger denklemi I. ve III. bölgelerde

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)(E - V_0)\psi = 0 \tag{5.2}$$

şeklinde olur. Bu denklem sabit katsayılı lineer homojen bir diferansiyel denklem olduğu için Denklem 2.7 ile verilen yardımcı denklemi

$$s^2 + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)(E - V_0) = 0 \tag{5.3}$$

şeklinde olur ve bu denklemin kökleri ise

$$s = \pm\left(2m/\hbar^2\right)^{1/2}\left(V_0 - E\right)^{1/2} \tag{5.4}$$

şeklindedir. Bütün bunlara göre bölge I ve III deki diferansiyel denklemlerin genel çözümleri C, D, F ve G keyfi sabitler olmak üzere

$$\begin{aligned}\psi_I &= C\exp\left[\left(2m/\hbar^2\right)^{1/2}\left(V_0 - E\right)^{1/2}x\right] + D\exp\left[-\left(2m/\hbar^2\right)^{1/2}\left(V_0 - E\right)^{1/2}x\right]\\ \psi_{III} &= F\exp\left[\left(2m/\hbar^2\right)^{1/2}\left(V_0 - E\right)^{1/2}x\right] + G\exp\left[-\left(2m/\hbar^2\right)^{1/2}\left(V_0 - E\right)^{1/2}x\right]\end{aligned} \tag{5.5}$$

ifadeleri olur.

Serbest bir parçacık da olduğu gibi $x \to -\infty$ giderken ψ_I'in sonsuza gitmesini engellememiz gerekir. $E < V_0$ olduğu için $\left(V_0 - E\right)^{1/2}$ hem reel hem de pozitif bir sayıdır. $x \to -\infty$ giderken ψ_I'in sonsuza gitmemesi için $D = 0$ olması şarttır. Benzer şekilde $x \to \infty$ giderken ψ_{III}'ün de sonsuz olmaması için $F = 0$ olması gerekir. Böylelikle

$$\psi_I = C\exp\left[\left(2m/\hbar^2\right)^{1/2}\left(V_0 - E\right)^{1/2}x\right] \tag{5.6a}$$

$$\psi_{III} = G\exp\left[-\left(2m/\hbar^2\right)^{1/2}\left(V_0 - E\right)^{1/2}x\right] \tag{5.6b}$$

olur.

Bölge II'de ise $V = 0$ olduğundan bu bölgedeki zamandan bağımsız Schrödinger denklemi Denklem 4.10 ile verilen denklemin aynısı olur ve genel çözümü ise Denklem 4.15 ile verilen

$$\psi_{II} = A\cos\left[\left(2m/\hbar^2\right)^{1/2}E^{1/2}x\right] + B\sin\left[\left(2m/\hbar^2\right)^{1/2}E^{1/2}x\right] \tag{5.7}$$

ifade olur.

Problemi tamamlamak için sınır koşullarını kullanmamız gerekiyor. Daha önce sonsuz kuyu potansiyeli probleminde olduğu gibi dalga fonksiyonunun sürekli

olma şartını kullanırsak. $x=0$ ve $x=l$ 'de $\psi_I(0)=\psi_{II}(0)$ ve $\psi_{II}(l)=\psi_{III}(l)$ olur. Dalga fonksiyonları dört adet keyfi sabit içerdiklerinden bu iki sınır koşulundan daha fazlasına ihtiyacımız var. ψ dalga fonksiyonunun sürekli olması gerekliliğini ortaya attığımız gibi dalga fonksiyonunun $d\psi/dx$ yazılan x'e göre türevinin de sürekli olması gerektiğini ortaya atabiliriz. Çünkü $d\psi/dx$ 'in süreksiz olduğu bir nokta mevcut ise $d^2\psi/dx^2$ bu noktada sonsuz olduğu anlamına gelir. Fakat sınırlı kuyu potansiyeli probleminde zamandan bağımsız Schrödinger denklemi $d^2\psi/dx^2=\left(2m/\hbar^2\right)(V-E)\psi$ şeklindedir. Bu denklemin sağ tarafında hiçbir sonsuzluk söz konusu değildir. Bundan dolayı da $d^2\psi/dx^2$ sonsuz olamaz ve $d\psi/dx$ süreksiz bir noktaya sahip değildir sonucuna ulaşabiliriz (Branson 1979). Sonuç olarak $x=0$ 'da $d\psi_I/dx=d\psi_{II}/dx$ ve $x=l$ 'de $d\psi_{II}/dx=d\psi_{III}/dx$ sınır şartlarına ulaşırız.

$\psi_I(0)=\psi_{II}(0)$ sınır şartından $C=A$ buluruz. $\psi_I'(0)=\psi_{II}'(0)$ sınır şartından $B=(V_0-E)^{1/2}A/E^{1/2}$ buluruz. $\psi_{II}(l)=\psi_{III}(l)$ sınır koşulundan ise G'yi A'ya bağlayan

$$G=\frac{\left\{A.\cos\left[\left(2mE/\hbar^2\right)^{1/2}l\right]+B.\sin\left[\left(2mE/\hbar^2\right)^{1/2}l\right]\right\}}{\exp\left[-\left(2m(V_0-E)/\hbar^2\right)^{1/2}l\right]} \qquad (5.8)$$

ifadesini elde ederiz. A'yı ise normalizasyon şartından belirleyebiliriz.

$\psi_{II}'(l)=\psi_{III}'(l)$ denkleminin $\psi_{II}(l)=\psi_{III}(l)$ denklemine bölünmesi ve gerekli düzenlemelerin yapılması sonucunda enerji ifadesi için aşağıdaki ifade

$$(2E-V_0)\sin\left[(2mE)^{1/2}l/\hbar\right]=2\left(V_0E-E^2\right)^{1/2}\cos\left[(2mE)^{1/2}l/\hbar\right] \qquad (5.9)$$

elde edilir. $E=0$ Denklem 2.33 sağlamasına rağmen bu değer için $\psi=0$ olduğundan dolayı izinli bir enerji seviyesi değildir.

$$\varepsilon \equiv E/V_0 \text{ ve } b \equiv \left(2mV_0\right)^{1/2} l/\hbar \tag{5.10}$$

şeklindeki boyutsuz sabitleri tanımlarsak ve Denklem 5.9'un V_0'a bölersek ve gerekli düzenlemeleri yaparsak

$$\left(2\varepsilon-1\right)\sin\left(b\varepsilon^{1/2}\right)-2\left(\varepsilon-\varepsilon^2\right)^{1/2}\cos\left(b\varepsilon^{1/2}\right)=0 \tag{5.11}$$

sonucuna ulaşırız. Sadece Denklem 5.9'u sağlayan özel E değerlerinde dalga fonksiyonunun kendisi ve birinci türevi sürekli olur. Yani $E<V_0$ için enerji seviyeleri kuantumlanmıştır. İzinli enerji seviyelerini bulabilmek için Denklem 5.11'in sol tarafının ε'na göre grafiğini $0<\varepsilon<1$ aralığında çizersek yatay ekseni kesen noktalar izinli enerji seviyeleri olacaktır. Daha detaylı bir çalışma (Merzbacher, 1998) $E<V_0$ aralığındaki izinli enerji seviyelerinin sayısını (N;)

$$N-1<b/\pi\le N \text{ burada } b\equiv\left(2mV_0\right)^{1/2} l/\hbar \tag{5.12}$$

şeklinde bir eşitsizliğine bağlı olduğunu gösterebilir. Örneğin, eğer $V_0=h^2/ml^2$ ise $b/\pi=2\left(2^{1/2}\right)=2.83$ yani $N=3$ bulunur.

Şekil 5.1'de en düşük iki enerji seviyesine ait olan ψ dalga fonksiyonları gösterilmektedir. Şekilden de görüldüğü gibi dalga fonksiyonu kutu içersinde dalgalanmakta kutu dışında ise üstel olarak sönmektedir. Ayrıca düğüm sayısının her bir üst enerji seviyesiyle birlikte bir artığı da görülmektedir.

Şimdiye kadar hep $E<V_0$ enerji durumları ile ilgilendik. $E>V_0$ için ise $\left(V_0-E\right)^{1/2}$ büyüklüğü artık reel değil sanal bir büyüklük olur. Bundan dolayı kuyu dışarısındaki dalga fonksiyonları x $\pm\infty$ giderken sıfıra gitmek yerine tıpkı serbest parçacıkta olduğu gibi salınırlar. Böylece ψ_I'de D'yi ve ψ_{II}'de F'yi sıfıra eşitlemek

için hiçbir nedenimiz kalmamıştır. Sonuç itibariyle dalga fonksiyonuna ekstra iki keyfi sabit daha girmiş olup bu sabitler ψ ve ψ' için olan sınır şartlarını sağlamaları gerekir. Daha fazlası E enerjisinin doğru davranışlı dalga fonksiyonları elde etmek için sınırlanamayacağı ortaya çıkar. Yani tıpkı serbest parçacık probleminde olduğu gibi V_0'ın üstünde bütün enerji seviyeleri izinlidir.

Dalga fonksiyonu ψ $x \to \infty$ ve $x \to -\infty$ giderken sıfıra gidiyorsa bu durumlara **bağlı** durumlar deriz. Bağlı seviyelerde parçacığın bulunma olasılığının önemli bir kısmı uzayın belli bir bölgesinde sınırlıdır. $x \to \pm\infty$ giderken sıfıra gitmeyen dalga fonksiyonlu seviyeler **bağlı olmayan** seviyelerdir. Ayrıca bu tip dalga fonksiyonları normalize edilemez. Sınırlı kuyu potansiyelindeki parçacığın $E < V_0$ enerjili seviyeleri bağlı, $E > V_0$ enerjili seviyeleri bağsız seviyelerdir. Sonsuz kuyu potansiyeli içindeki parçacık için tüm seviyeler bağlı, serbest parçacık için ise bütün seviyeler bağsızdır

A sabitinin değerini belirlemek için dalga fonksiyonlarının normalize olma şartından yararlanabiliriz. Bu durumda

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dx = 1 \\ &\int_{-\infty}^{0} |\psi_I|^2 \, dx + \int_{0}^{l} |\psi_{II}|^2 \, dx + \int_{l}^{\infty} |\psi_{III}|^2 \, dx = 1 \end{aligned} \tag{5.13}$$

ifadesinin sağlanması gerekir. Son eşitlikte dalga fonksiyonlarını yerine yazarsak

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{0} C \exp\left[\left(2m(V_0 - E) \big/ \hbar^2 \right)^{1/2} x \right] dx \\ &+ \int_{0}^{l} \left\{ A \cos\left[\left(2mE \big/ \hbar^2 \right)^{1/2} x \right] + B \sin\left[\left(2mE \big/ \hbar^2 \right)^{1/2} x \right] \right\} dx \\ &+ \int_{l}^{\infty} G \exp\left[\left(2m\left(V_0 - E\right) \big/ \hbar^2 \right)^{1/2} x \right] = 1 \end{aligned} \tag{5.14}$$

denklemini elde ederiz. Bu integralleri çözdüğümüzde

$$A=\left\{\frac{1}{4}\frac{\hbar^2}{Em\left[E\left(V-E\right)\right]^{1/2}}\left\{\begin{array}{l}\left[\left(4E-V\right)\sqrt{2}\left(m\left(V-E\right)/\hbar^2\right)^{1/2}\right]\cos\left[\sqrt{2}\left(mE/\hbar^2\right)^{1/2}l\right]\sin\left[\sqrt{2}\left(mE/\hbar^2\right)^{1/2}l\right]\\ +\dfrac{2mVl}{\hbar^2}\left[E\left(V-E\right)\right]^{1/2}+\left(3V-2E\right)\sqrt{2}\left(mE/\hbar^2\right)^{1/2}\\ +\left(4E-3V\right)\sqrt{2}\left(mE/\hbar^2\right)^{1/2}\cos\left[\sqrt{2}\left(mE/\hbar^2\right)^{1/2}l\right]^2\end{array}\right\}^{-1/2}\right\} \tag{5.15}$$

sonucunu elde ederiz. Buna göre normalize olmuş dalga fonksiyonları

$$\psi_I = A\exp\left[\left(2m\left(V-E\right)/\hbar^2\right)^{1/2}x\right] \tag{5.16a}$$

$$\psi_{II} = A\cos\left[\left(2mE/\hbar^2\right)^{1/2}x\right]+B\sin\left[\left(2mE/\hbar^2\right)^{1/2}x\right] \tag{5.16b}$$

$$\psi_{III} = G\exp\left[-\left(2m\left(V-E\right)/\hbar^2\right)^{1/2}x\right] \tag{5.16c}$$

olur. Şimdi daha kolay hesap yapabilmek için boyutsuz nicelik

$$\varepsilon=\frac{E}{V},\quad x_r=\frac{x}{B},\quad \psi_r=\psi B^{1/2},\quad B=\frac{\hbar}{\left(mV\right)^{1/2}},\quad b=\frac{\left(mV\right)^{1/2}l}{\hbar} \tag{5.17}$$

dönüşümlerini kullanalım. Boyutsuz nicelikler cinsinden analitik dalga fonksiyonları

$$\psi_{Ir}=\frac{\exp\left[\left(2\left(1-\varepsilon\right)\right)^{1/2}x_r\right]}{L} \tag{5.18a}$$

$$\psi_{IIr}=\frac{\cos\left[\left(2\varepsilon\right)^{1/2}x_r\right]+\left(\dfrac{1-\varepsilon}{\varepsilon}\right)^{1/2}\sin\left[\left(2\varepsilon\right)^{1/2}x_r\right]}{L} \tag{5.19b}$$

$$\psi_{IIIr} = \frac{\cos\left[(2\varepsilon)^{1/2} b\right] + \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}\right)^{1/2} \sin\left[(2\varepsilon)^{1/2} b\right]}{L \exp\left[-\left(2(1-\varepsilon)\right)^{1/2} b\right]} \tag{5.19c}$$

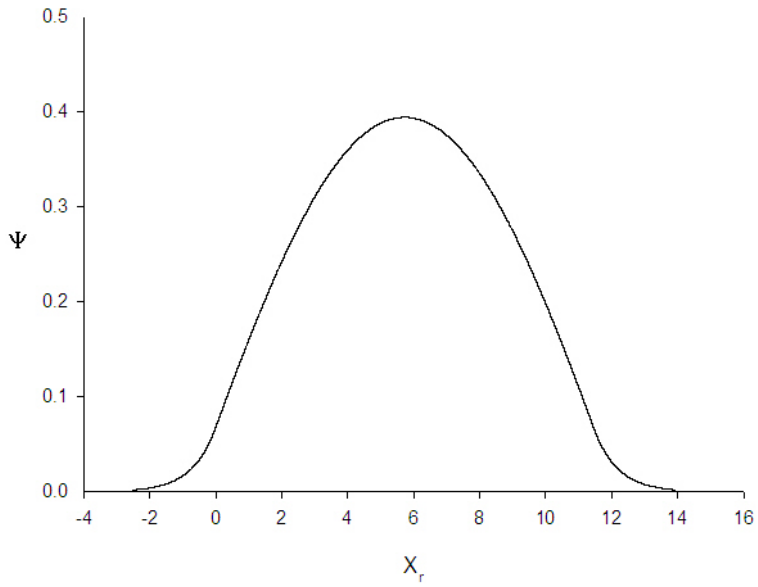
elde edilir. Burada L,

$$L = \frac{1}{2}\left\{\frac{1}{\varepsilon\sqrt{\varepsilon(1-\varepsilon)}}\left[\begin{array}{l}(4\varepsilon-1)\sqrt{2-2\varepsilon}\cos\left(\sqrt{2\varepsilon}b\right)\sin\left(\sqrt{2\varepsilon}b\right)+2b\sqrt{\varepsilon(1-\varepsilon)} \\ +(3-2\varepsilon)\sqrt{2\varepsilon}+(4\varepsilon-3)\sqrt{2\varepsilon}\cos\left(\sqrt{2\varepsilon}b\right)^2\end{array}\right]\right\}^{1/2}$$

şeklindedir.

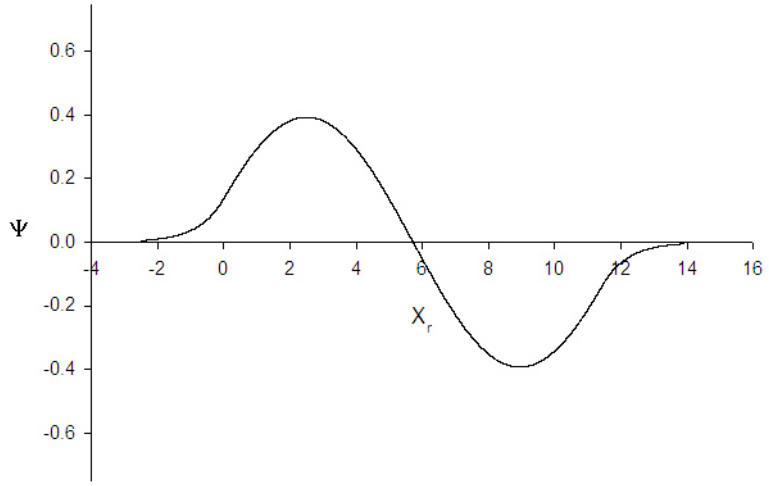
Bu konuda yapılan hesaplamalarda kuyunun derinliği 100 meV alınmıştır. Kuyunun genişliği ise 10 nm alınmıştır. Buna göre tüm hesaplamalar ve enerji düzeyleri çıkarılmıştır.

Şekil 5.2'de sonlu kuyu potansiyelinin boyutsuz değişkenler cinsinden temel enerji seviyesi için analitik dalga fonksiyonunun grafiği verilmektedir. Şekil 5.3'de ise sonlu kuyu potansiyelinin boyutsuz değişkenler cinsinden birinci uyarılmış enerji

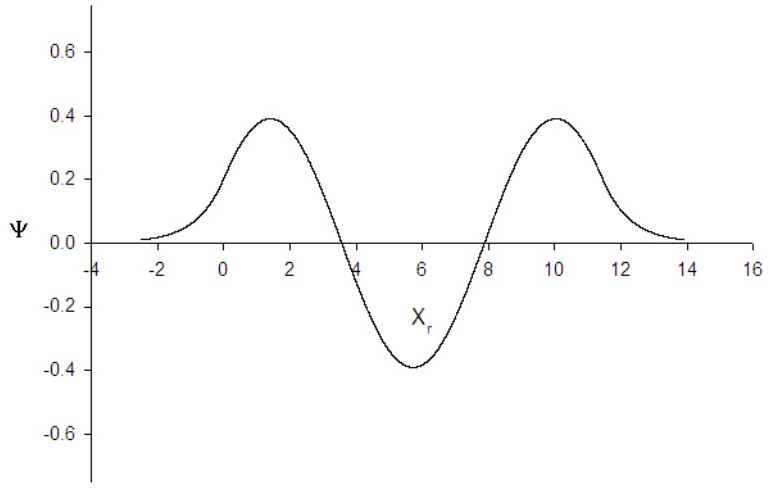


Şekil 5.2 E_r=0.0297937885 enerjili temel enerji seviyesinin analitik dalga fonksiyonu

seviyesi için analitik dalga fonksiyonunun grafiği verilmektedir. En son olarak ise Şekil 5.4'de sonlu kuyu potansiyelinin ikinci uyarılmış enerji seviyesinin analitik dalga fonksiyonu verilmektedir.



Şekil 5.3 E_r=0.1187598235 enerjili ilk uyarılmış enerji seviyesinin analitik dalga fonksiyonu.



Şekil 5.4 E_r=0.2654813927 enerjili ikinci uyarılmış enerji seviyesinin analitik dalga fonksiyonu.

5.2 Sonlu Kuyu Potansiyelinin Numerov Çözümü

Denklem 2.11 ile verilen Numerov çözümü Denklem 5.17 ile geçiş yaptığımız boyutsuz nicelikler cinsinden

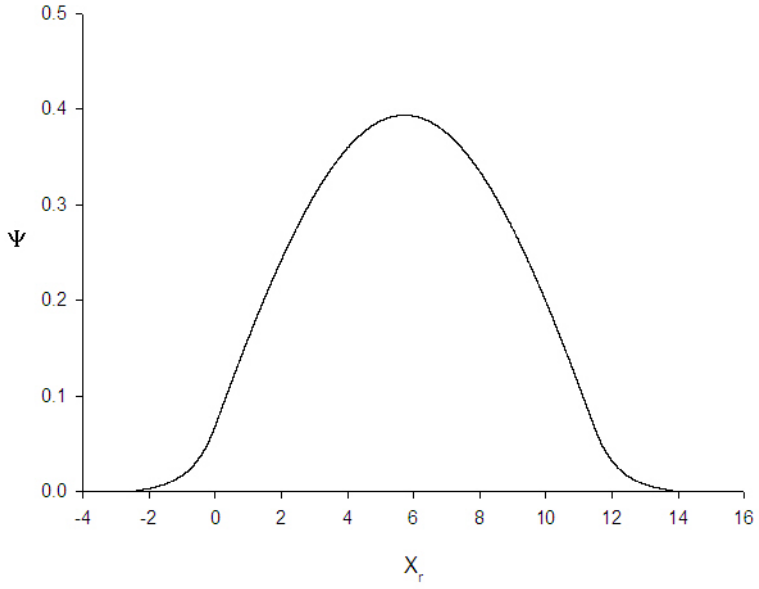
$$\psi_r^{n+1} \approx \frac{2\psi_r^n - \psi_r^{n-1} + 5G_r^n\psi_r^n s_r^2/6 + G_r^{n-1}\psi_r^{n-1}s_r^2/12}{1 - G_r^{n+1}s_r^2/12} \tag{5.20}$$

şeklinde yazılır. Daha önce Denklem 2.6 ile verilen G niceliği ise boyutsuz nicelikler cinsinden

$$G_r = \begin{cases} x < 0 \text{ için } G_r \equiv 2 - 2E_r \\ 0 \le x \le b \text{ için } G_r \equiv -2E_r \\ x > b \text{ için } G_r \equiv 2 - 2E_r \end{cases} \tag{5.21}$$

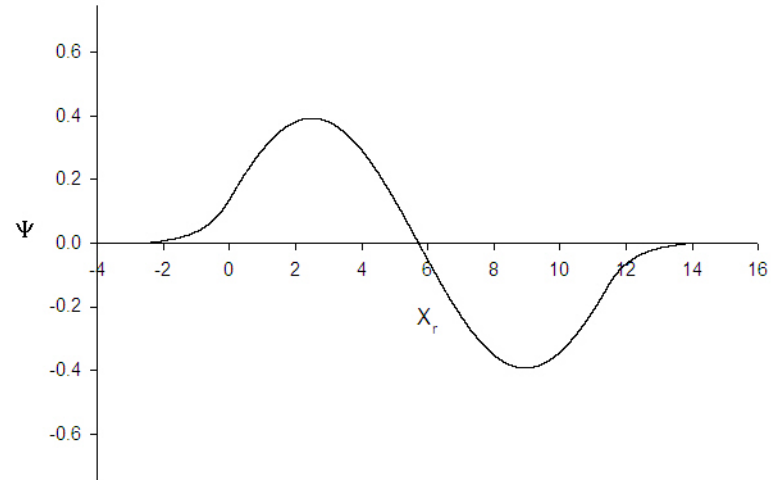
ifadesi ile verilir.

Burada dikkat edilmesi gereken en önemli nokta E_r'nin 0 ile 1 arasında değiştiğidir.

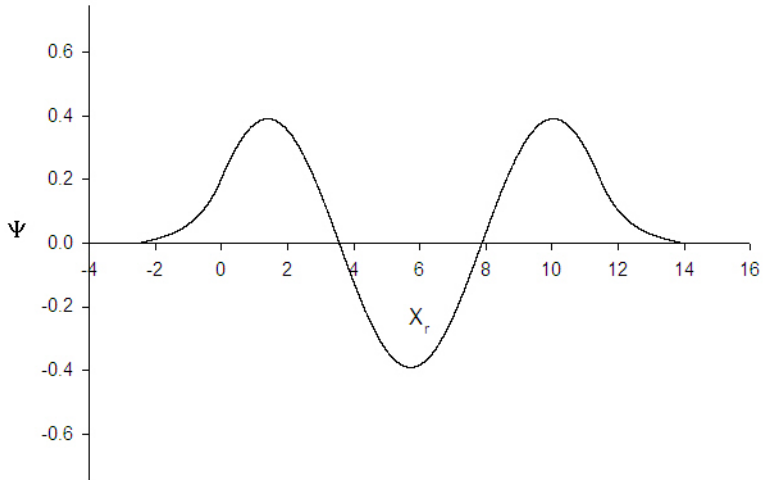


Şekil 5.5 Numerov Metodu ile bulunan sonlu kuyuda ilk özdeğer olan E_r= 0.0297315 enerji seviyesine karşılık gelen temel seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.

Denklem 5.20 ve Denklem 5.21'i kullanarak C-programlama dilinde sonlu kuyu potansiyelinin Numerov metodu ile çözümünü yapan program yazdık. Bu programla elde ettiğimiz ilk üç enerji özdeğeri ve onlara karşılık gelen dalga fonksiyonlarının grafiklerini sırası ile Şekil 5.5, 5.6 ve 5.7'de verilmektedir.



Şekil 5.6 Numerov Metodu ile bulunan sonlu kuyuda ikinci özdeğer olan E_r= 0.1185286 enerji seviyesine karşılık gelen ilk uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.



Şekil 5.7 Numerov Metodu ile sonlu kuyuda bulunan üçüncü özdeğer olan E_r= 0.2650598 enerji seviyesine karşılık gelen ikinci uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.

6. HİDROJEN ATOMU

6.1 Hidrojen Atomunun Analitik Çözümü

Hidrojen atomunun Hamiltoniyeni

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze'^2}{r} \tag{6.1}$$

şeklindedir. Burada

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2\hbar^2}\hat{L}^2 \tag{6.2}$$

nabla kare operatörü,

$$\mu = \frac{m_e m_N}{m_e + m_N} \tag{6.3}$$

indirgenmiş kütle ve

$$e' = e \Big/ \sqrt{4\pi\varepsilon_0} \tag{6.4}$$

dir. Hidrojen atomunun zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{6.5}$$

üç boyutlu bir diferansiyel denklemdir. Fakat bu denklem kolayca çarpanlarına ayrılabilir. Bu denklemin açısal kısmının çözümü küresel harmonikler olarak adlandırılan fonksiyonlardır. Denklem 6.5 ile verilen Schrödinger denkleminin çözümü olan

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_l^m(\theta,\phi) \quad , \qquad l = 0,1,2,3,.....|m| \le l \tag{6.6}$$

dalga fonksiyonu radyal ve açısal kısımların çarpımı şeklinde yazılabilir. Bu dalga fonksiyonunu Denklem 6.5 yerine yazarsak ve gerekli düzenlemeleri yaparsak

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right]+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}R(r)-\frac{Ze'^2}{r}R(r)=ER(r) \qquad (6.7)$$

radyal denklemine ulaşırız. Yazımda kolaylık sağlamak için

$$a\equiv\frac{\hbar^2}{\mu e'^2} \qquad (6.8)$$

değişken dönüştürmesini yaparsak, hidrojen atomu için

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[\frac{2E}{ae'^2}+\frac{2Z}{ar}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0 \qquad (6.9)$$

denklemini elde etmiş oluruz. Bu denklemi çözmek için önce büyük *r* değerleri için denklemin ne hale geldiğine bakalım.

$$R''+\frac{2E}{ae'^2}R=0 \qquad (6.10)$$

Büyük *r* değerleri için geçerli olan yukarıdaki diferansiyel denklemin çözümü oldukça basittir ve $r\to\infty$ gittiğinde $R(r)\to 0$ gitmesi gerektiği için

$$E<0 \text{ için } R(r)\sim\exp\left[-\sqrt{-2\mu E}\,\frac{r}{\hbar}\right] \qquad (6.11)$$

fonksiyonu elimizdeki denklemin çözümüdür. Sonuç olarak Denklem 6.9 ile verilen genel denklemimizin çözümleri olan radyal dalga fonksiyonlarının yapısı şeklinde

$$R(r)=e^{-cr}K(r) \qquad c=\left(-\frac{2E}{ae'^2}\right)^{1/2} \qquad (6.12)$$

olmalıdır. $K(r)$'yi bulmak için bu ifadeyi Denklem 6.9'da yerine yazarsak

$$r^2K''(r)+\left(2r-2cr^2\right)K'(r)+\left[\left(2Za^{-1}-2c\right)r-l(l+1)\right]K(r)=0 \qquad (6.13)$$

denklemine ulaşırız. Burada

$$K(r) = r^s M(r) \tag{6.14}$$

şeklinde tanımlar ve

$$M(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j, \quad b_0 \neq 0 \tag{6.15}$$

şeklinde seri çözümünü Denklem 6.13'de denersek gerekli bütün işlemlerden sonra

$$R(r) = e^{-cr} r^l M(r) \tag{6.16}$$

$$b_{j+1} = \frac{\left(2c + 2cl + 2cj - 2Za^{-1}\right)}{j(j+1) + 2(l+1)(j+1)} b_j \tag{6.17}$$

fonksiyonu ve tekrarlama bağıntısı elde edilir. Denklem 6.16 ile verilen radyal dalga fonksiyonunun $r \to \infty$ giderken patlamaması için Denklem 6.17 ile verilen tekrarlama bağıntısının bir yerde kesilmesi gerekir bunun içinde tekrarlama bağıntısında belli bir j değerinden sonraki katsayıların tümünün sıfır olması gerekir. Böylelikle

$$2c + 2cl + 2ck - 2Za^{-1} = 0 \tag{6.18}$$

eşitliği elde edilir. Gerekli düzenlemelerle

$$2c(k + l + 1) = 2Za^{-1} \tag{6.19}$$

$$n \equiv k + l + 1 \quad \Rightarrow \quad n = 1, 2, 3, ... \tag{6.21}$$

$$l \leq n - 1 \quad \Rightarrow \quad n - k - 1 \equiv l \tag{6.20}$$

sonucuna ulaşılır. Buradan

$$cn = Za^{-1} \quad \Rightarrow \quad E = -\frac{Z^2 \mu e'^4}{2n^2 \hbar^2} \tag{6.21}$$

enerji özdeğerlerine,

$$b_{j+1} = \frac{2Z}{an}\frac{\left(j+l+1-n\right)}{\left(j+1\right)\left(j+2l+2\right)}b_j \tag{6.22}$$

tekrarlama bağıntısına ve

$$R_{nl}\left(r\right) = r^l e^{-Zr/na}\sum_{j=0}^{n-l-1} b_j r^j \tag{6.23}$$

radyal dalga fonksiyonlarına ulaşılır.

Bundan sonraki adım boyutsuz niceliklere geçmek olacaktır. Boyutsuz nicelikler

$$E_r = \frac{E}{\mu e'^4 \hbar^{-2}}, \quad r_r = \frac{r}{\mu^{-1} e'^{-2} \hbar^2} \quad \text{ve} \quad \psi_r = \left(\mu^{-1}\hbar^2 e'^2\right)^{3/2}\psi \tag{6.24}$$

yardımıyla geçersek denklem 6.21 ile verilen enerji ifadesi

$$E_r = -\frac{1}{2n^2} \tag{6.25}$$

olur. Burada bazı radyal dalga fonksiyonlarının da birimsiz nicelikler cinsinden değerlerini verelim.

$$R_{10}\left(r_r\right) = 2e^{-r_r} \tag{6.26}$$

$$R_{20}\left(r_r\right) = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)e^{-e'r_r/2}\left(1-\frac{r_r}{2}\right) \tag{6.27}$$

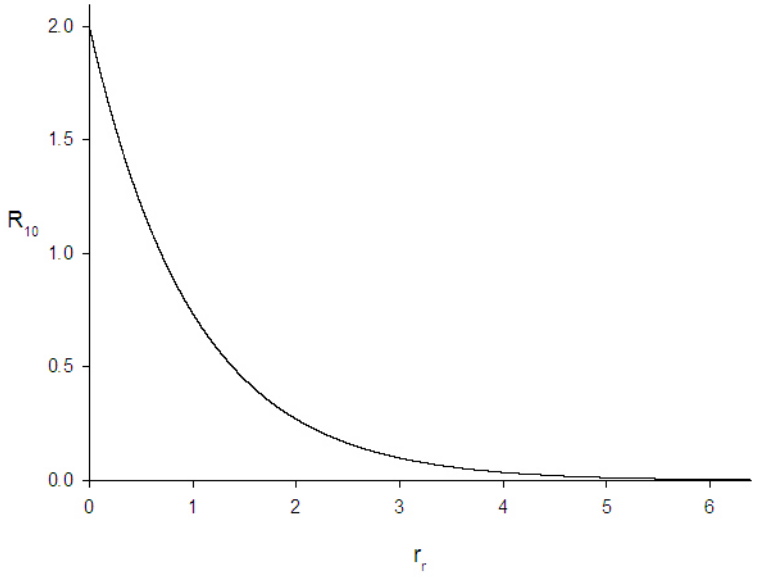
$$R_{21}\left(r_r\right) = \left(\frac{1}{2\sqrt{6}}\right)r_r e^{-r_r/2} \tag{6.28}$$

$$R_{30}\left(r_r\right) = \left(\frac{2}{3\sqrt{3}}\right)e^{-r_r/3}\left[1-\frac{2}{3}r_r+\frac{2}{27}r_r^{\,2}\right] \tag{6.29}$$

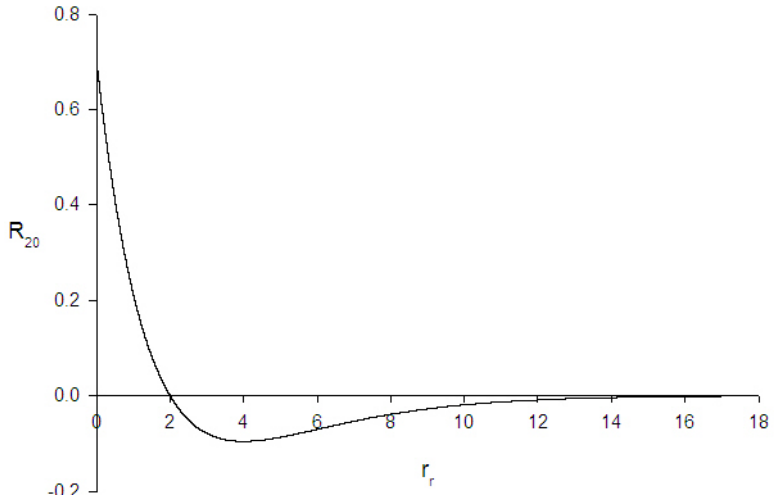
$$R_{31}(r_r) = \left(\frac{8}{27\sqrt{6}}\right) r_r e^{-r_r/3} \left(1 - \frac{r_r}{6}\right) \tag{6.30}$$

$$R_{32}(r_r) = \left(\frac{4}{81\sqrt{30}}\right) r_r^2 e^{-r_r/3} \tag{6.31}$$

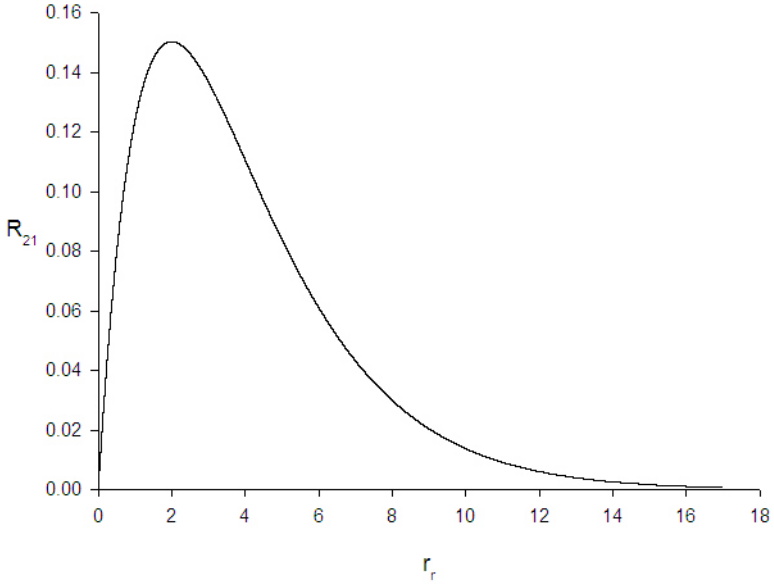
Şekil 6.1'de hidrojen atomunun temel seviyesine ait R_{10} analitik radyal dalga fonksiyonu görülmektedir. Daha önce incelediğimiz problemlerden farklı olarak hidrojen atomunun enerji seviyeleri temel seviye hariç dejeneredirler. Yani bir enerji seviyesine birden fazla bağımsız dalga fonksiyonu karşılık gelmektedir. Bu nedenle birinci uyarılmış seviyeye ait dejenere R_{20} ve R_{21} iki radyal dalga fonksiyonundan biri Şekil 6.2a'da diğeri de Şekil 6.2b'de verilmektedir. İkinci uyarılmış seviyeye ait üç dejenere radyal dalga fonksiyonları olan R_{30}, R_{31} ve R_{32} ise sırasıyla Şekil 6.3a, 6.3b ve 6.3c'de verilmektedir.



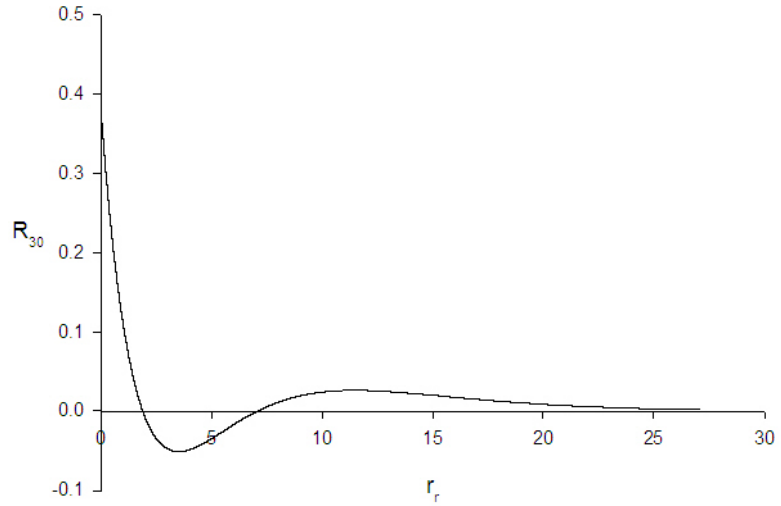
Şekil 6.1 H-atomunun E_r=-0.500 enerjili temel seviyenin analitik dalga fonksiyonu, R_{10}.



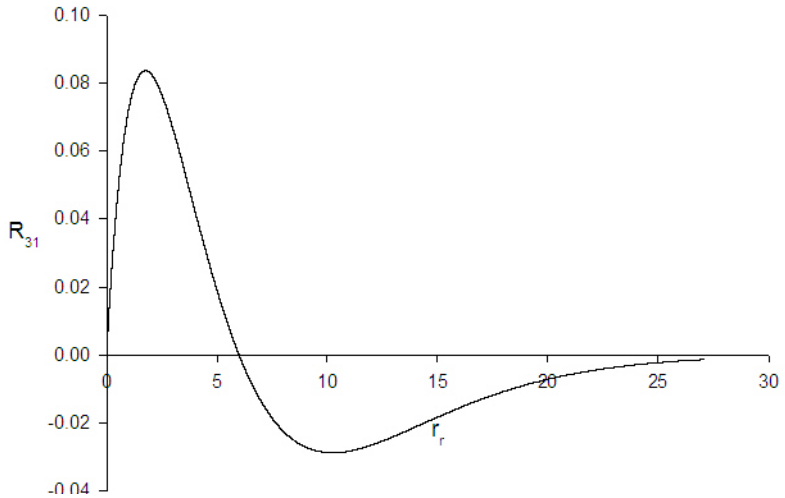
Şekil 6.2a H-atomunun E_r=-0.125 enerjili ilk uyarılmış seviyesinin analitik dalga fonksiyonu. R_{20} .



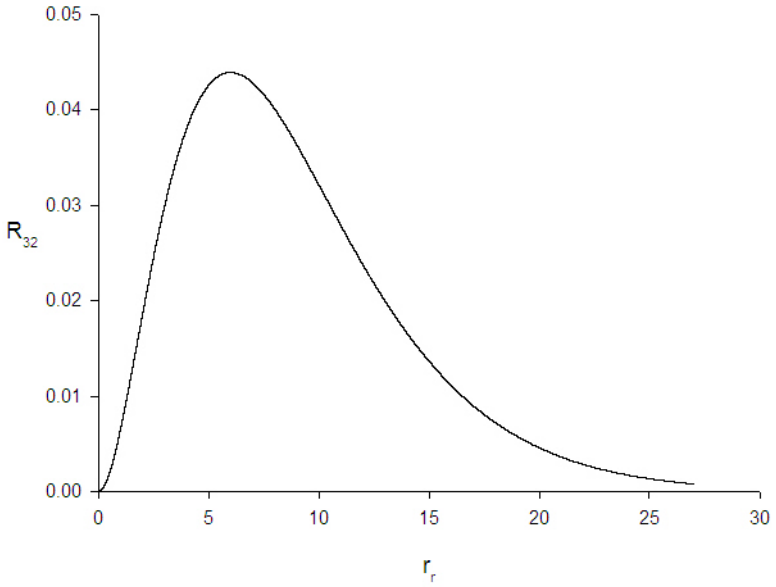
Şekil 6.2b H-atomunun E_r=-0.125 enerjili ilk uyarılmış seviyesinin analitik dalga fonksiyonu. R_{21} .



Şekil 6.3a H-atomunun E_r=-0.055 enerjili ikinci uyarılmış seviyesinin analitik dalga fonksiyonu, R_{30}.



Şekil 6.3b H-atomunun E_r=-0.055 enerjili ikinci uyarılmış seviyesinin analitik dalga fonksiyonu, R_{31}.



Şekil 6.3c H-atomunun E_r=-0.055 enerjili ikinci uyarılmış seviyesinin analitik dalga fonksiyonu, R_{32} .

6.2 Hidrojen Atomunun Numerov Çözümü

Denklem 2.11 ile verilen Numerov çözümü Denklem 6.24 ile geçiş yaptığımız boyutsuz nicelikler cinsinden

$$\psi_r^{n+1} \approx \frac{2\psi_r^n - \psi_r^{n-1} + 5G_r^n\psi_r^n s_r^2/6 + G_r^{n-1}\psi_r^{n-1}s_r^2/12}{1 - G_r^{n+1}s_r^2/12} \tag{6.32}$$

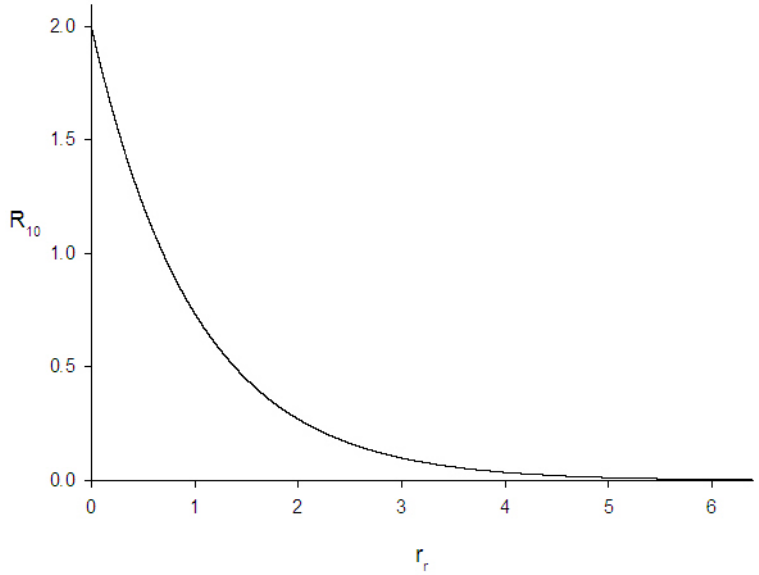
şeklide yazılır. Daha önce Denklem 2.6 ile verilen G niceliği ise boyutsuz nicelikler cinsinden

$$G_r = \frac{l(l+1)}{r_r^2} - \frac{2}{r_r} - 2E_r \tag{6.33}$$

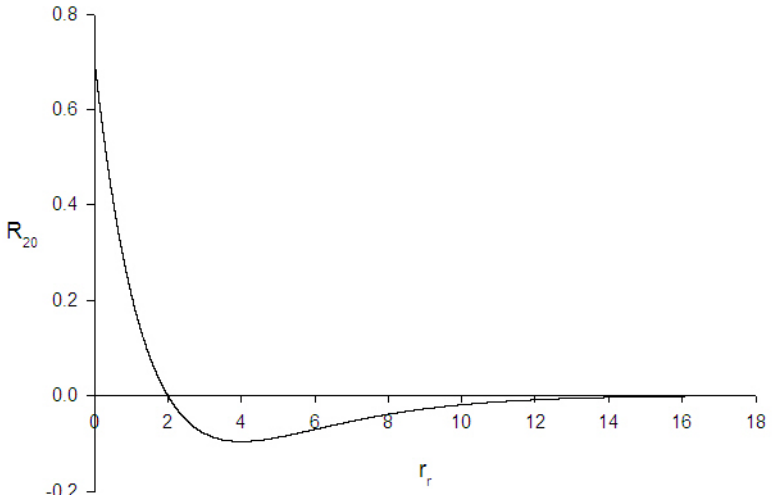
ifadesi ile verilir.

Burada dikkat edilmesi gereken en önemli nokta r_r'nin 0 ile ∞ arasında değiştiğidir.

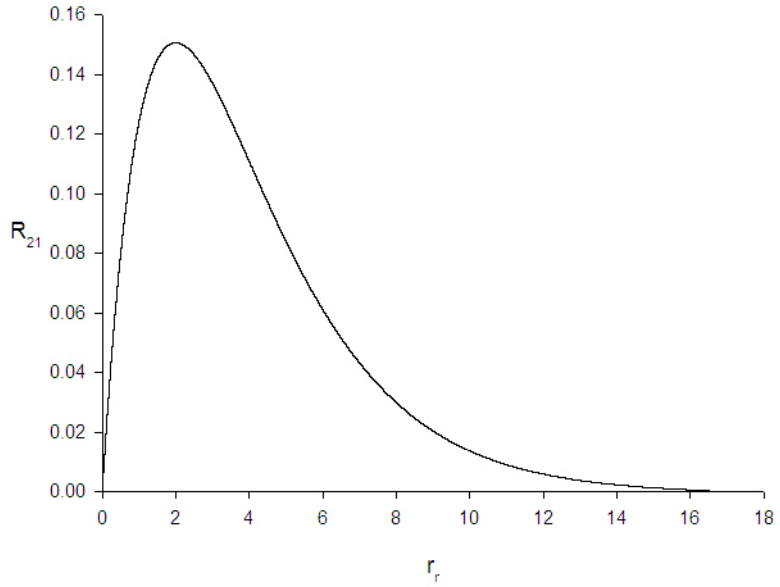
Denklem 6.32 ve Denklem 6.33'ü kullanarak C-programlama dilinde hidrojen atomu için Numerov metodu ile çözümünü yapan program yazdık. Bu programla elde ettiğimiz ilk üç enerji özdeğeri ve onlara karşılık gelen dalga fonksiyonlarının grafiklerini sırası ile Şekil 6.4, 6.5a, 6.5b, 6.6a, 6.6b ve 6.6c'de verilmektedir.



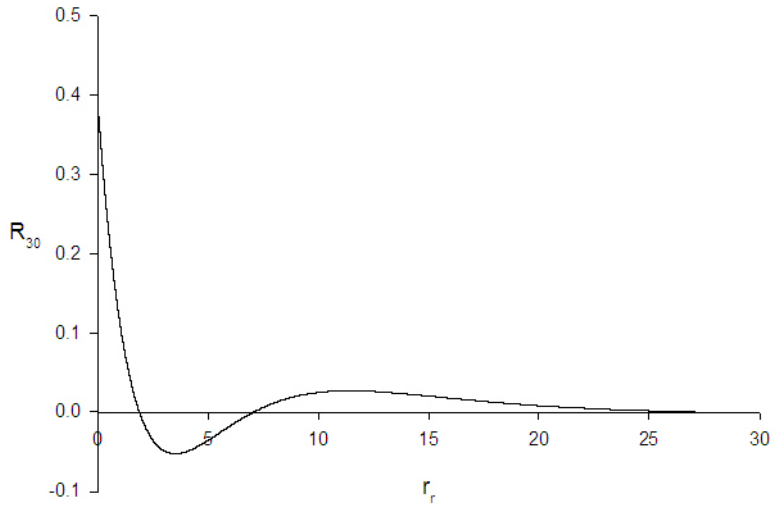
Şekil 6.4 Numerov Metodu ile bulunan ilk özdeğer olan E_r= -0.4999975 enerji seviyesine karşılık gelen temel seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.



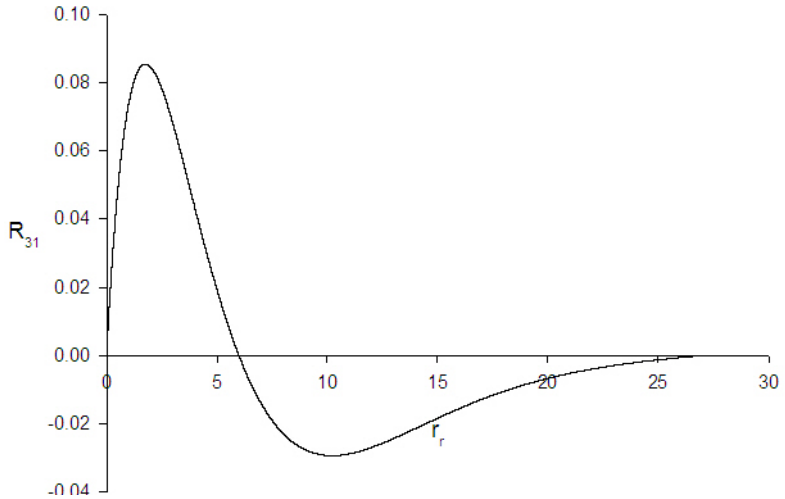
Şekil 6.5a Numerov Metodu ile bulunan ikinci özdeğer olan E_r= -0.1248783 enerji seviyesine karşılık gelen ilk uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.



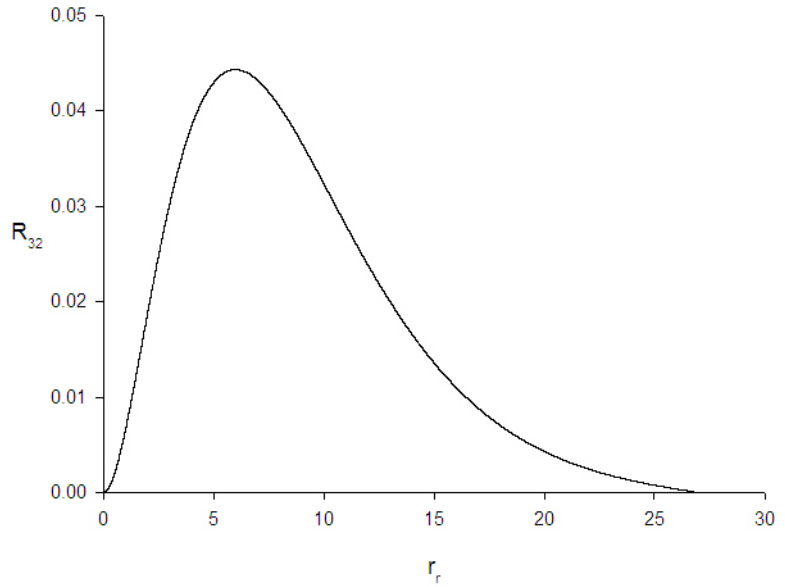
Şekil 6.5b Numerov Metodu ile bulunan ikinci özdeğer olan E_r= -0.1249466 enerji seviyesine karşılık gelen ilk uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.



Şekil 6.6a Numerov Metodu ile bulunan üçüncü özdeğer olan E_r= -0.0551318 enerji seviyesine karşılık gelen ikinci uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.



Şekil 6.6b Numerov Metodu ile bulunan üçüncü özdeğer olan E_r=-0.0552720 enerji seviyesine karşılık gelen ikinci uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.



Şekil 6.6b Numerov Metodu ile bulunan üçüncü özdeğer olan E_r= -0.0554550 enerji seviyesine karşılık gelen ikinci uyarılmış seviyenin sayısal dalga fonksiyonu.

7. SONUÇ VE TARTIŞMALAR

Harmonik osilatör için yaptığımız tam analitik çözümler ile Numerov metodu ile yaptığımız çözümler çok iyi uyum göstermektedir. Numerov metodu harmonik osilatörün ilk üç enerji özdeğerini Tablo 6.1'de görüldüğü gibi tam olarak bulmasının yanı sıra, temel seviyenin dalga fonksiyonu için Şekil 3.3 ve Şekil 3.6'nın, ilk uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu için Şekil 3.4 ve Şekil 3.7'nin ve son olarak ikinci uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu için Şekil 3.5 ve Şekil 3.8'in karşılaştırmaları Numerov metodunun tam analitik dalga fonksiyonuna beklenenin çok üstünde tam bir uyum gösterdiğini gözler önüne sermektedir. Burada dalga fonksiyonlarının üst üste çizdirilerek karşılaştırmalarının konmamasının nedeni dalga fonksiyonlarının tam üst üste denk gelmesidir.

Tablo 7.1 Harmonik osilatör, Sonsuz kuyu potansiyeli ve Sonlu kuyu potansiyeli için analitik ve Numerov Metodu ile bulunan yaklaşık enerji özdeğerlerinin karşılaştırılması.

Enerji Özdeğerleri	Harmonik Osilatör		Sonsuz Kuyu Potansiyeli		Sonlu Kuyu Potansiyeli	
	Analitik Değer	NMD*	Analitik Değer	NMD*	Analitik Değer	NMD*
Temel Seviye	0.5000000	0.5000000	4.9348022	4.9348020	0.0297937	0.0297315
İlk Uyarılmış Seviye	1.5000000	1.5000000	19.7392088	19.7392080	0.1187598	0.1185286
İkinci Uyarılmış Seviye	2.5000000	2.5000000	44.4132198	44.4132190	0.2654813	0.2650598

***NMD:** Numerov Metodu Enerji Özdeğeri

Sonsuz kuyu potansiyeli için yaptığımız tam analitik çözümler ile Numerov metodu ile yaptığımız çözümler çok iyi uyum göstermektedir. Numerov metodu sonsuz kuyu potansiyelinin ilk üç enerji özdeğerini Tablo 7.1'de görüldüğü gibi çok yüksek bir hassasiyet ile yani noktadan sonra 7. basamağa kadar aynı sonucu bulmasının yanı sıra, temel seviyenin dalga fonksiyonu için Şekil 4.5 ve Şekil 4.8'in, ilk uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu için Şekil 4.6 ve Şekil 4.9'un ve son olarak ikinci uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu için Şekil 4.7 ve Şekil 4.10'un karşılaştırmaları Numerov metodunun tam analitik dalga fonksiyonuna beklenenin çok üstünde tam bir uyum gösterdiğini gözler önüne sermektedir.

Sonlu kuyu potansiyeli için yaptığımız tam analitik çözümler ile Numerov metodu ile yaptığımız çözümler çok iyi uyum göstermektedir. Numerov metodu sonlu kuyu potansiyelinin ilk üç enerji özdeğerini Tablo 7.1'de görüldüğü gibi noktadan sonra 4 veya 5. basamaklara varan hassasiyet ile bulmasının yanı sıra, temel seviyenin dalga fonksiyonu için Şekil 5.2 ve Şekil 5.5'in, ilk uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu için Şekil 5.3 ve Şekil 5.6'nın ve son olarak ikinci uyarılmış seviyenin dalga fonksiyonu için Şekil 5.4 ve Şekil 5.7'nin karşılaştırmaları Numerov metodunun tam analitik dalga fonksiyonuna tam bir uyum gösterdiğini gözler önüne sermektedir.

Hidrojen atomu diğer örnek problemlerden oldukça farklılık arz etmektedir. Hidrojen atomu diğer örneklerden farklı olarak tek boyutlu bir problem yerine üç boyutlu bir problemdir. Problem kürsel koordinatlarda ele alınarak açısal ve radyal kısımlarına ayrılmıştır. Açısal kısımların çözümleri bildiğimiz küresel harmonikler olarak adlandırdığımız fonksiyonlardır. Bizim ilgilendiğimiz ise radyal diferansiyel denklemdir. Bu denklemin kuvvet serisi yaklaşımı ile bir analitik çözümünü elde ettikten sonra Numerov metodu ile tekrar çözdük. Bu problemin diğer problemlerden en büyük farkı ise radyal diferansiyel denklemin dalga fonksiyonunun ikinci türevinin yanı sıra birinci türevini de içermesidir. Kullandığımız Numerov metodu ise böyle bir diferansiyel denklemi direk olarak çözemez. Bundan dolayı

$$R(r) = r^{-1}F(r) \tag{7.1}$$

dönüşümü yapılarak, diferansiyel denklem Numerov metodu ile çözülebilecek bir form olan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}F''(r) + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]F(r) = EF(r) \tag{7.2}$$

haline getirilmiştir. Daha sonra ise Numerov metodu ile asıl olarak $F(r)$ fonksiyonu bulunmuş ve program içersinde Denklem 7.1 ile verilen dönüşüm kullanılarak radyal dalga fonksiyonuna çevrilmiştir. Her bir l değeri ayrı bir diferansiyel denklem demektir. Üç l değeri için diferansiyel denklemler Numerov metodu ile ayrı ayrı

çözülmüştür. Önemli noktalardan bir tanesi ise diğer problemlerde karşımıza çıkmayan dejenere seviyelerdir. Aslında ilk *l* değeri ile tüm enerji seviyeleri ve bunlara karşılık gelen ilk dalga fonksiyonları bulunmaktadır. Diğer *l* değerleri ile ise aynı enerji seviyelerinin diğer dejenere dalga fonksiyonları bulunmaktadır. Tablo 7.2'de görüldüğü gibi her *l* değeri için yapılan çözümlerde dejenere seviyelerin enerji değerleri tam olarak bir birlerinin aynısı çıkmamaktadır. Bunun nedeni bilgisayar hesaplamalarında gelen hassasiyet bozulmalarıdır.

Tablo 7.2 Hidrojen atomunun ilk üç enerji seviyesinin analitik ve Numerov metodu ile elde edilen enerji özdeğerleri.

Kuantum Sayıları		Enerji Özdeğerleri		
		Analitik Değer	NMD*	Farklar**
$n=1$	$l=0$	-0.5000000	-0.4999975	0.0000025
$n=2$	$l=0$	-0.1250000	-0.1248783	0.0001217
$n=2$	$l=1$	-0.1250000	-0.1249466	0.0000534
$n=3$	$l=0$	-0.0555555	-0.0551318	0.0004237
$n=3$	$l=1$	-0.0555555	-0.0552720	0.0002835
$n=3$	$l=2$	-0.0555555	-0.0554550	0.0001005

***NMD:** Numerov metodu enerji özdeğeri.
** Analitik değer ile NMD arasındaki farklar.

Tablo 7.2'de Analitik değerler ve Numerov metodu ile elde edilen değerler arasındaki farklar kısmından açıkça görüldüğü gibi Numerov metodu Analitik enerji değerlerine noktadan sonra 5 ile 3 arasında hassasiyetle yaklaşmıştır. Aslında buradaki hassasiyet problemini daha iyi hale getirmek oldukça kolaydır. Biz bu tezde temel Numerov metodunu kullanarak davranışını inceledik. Numerov metodunun daha hassas hale getirilmiş gelişmiş formları mevcuttur (Agarwal ve Wang 2001, Avdelas 2000, Andrew 2000, Killigbeck ve Jolicard 1999, Tselyaev 2004, Wang 2003, Wang ve ark. 2004). Bu formlar kullanılarak sonuçlar daha hassas hale getirilebilir. Bunun yanı sıra bizim kullandığımız temel Numerov metodu ile hassasiyeti artırmanın iki yolu vardır. Bunlardan ilki programda taranan enerji aralığını daha sık bir hale getirmektir. Biz bu programda 1E-7 ile tarama yaptık. Diğer yöntem ise sayısal dalga fonksiyonunu elde ederken daha dar aralıklar kullanmak olacaktır. Bütün bunların yanı sıra Numerov metodunun tam olarak

düzgün çalışması için sınır noktalarının çok iyi seçilmesi gerekir. Bu seçim hem enerji özdeğerlerinin hassasiyetini hem de dalga fonksiyonlarının doğruluğunu direk olarak etkilemektedir. Biz bu programda dinamik olarak adlandırdığımız bir sınır noktası seçtik. Yani program taradığı her enerji değerine karşılık yeni bir sınır noktası tayin ederek hesaplamayı o sınır noktalarına göre yapmaktadır.

Burada Numerov metodunu kullanırken yazdığımız programda, en düşük başlangıç enerjisinden istenen hassasiyetteki aralıklar ile programa dışarıdan verilen üst enerji seviyesine kadar bütün enerji aralıkları taranarak doğru enerji özdeğerleri ve bunlara karşılık gelen dalga fonksiyonları elde edilmektedir. Varyasyonel yöntem bu çalışmada incelenmemiş ve varyasyonel yöntem ile bulunan literatürdeki sonuçlar ile Numerov metodu ile elde edilen sonuçlar karşılaştırılmamış olmasına rağmen varyasyonel yöntemin genel yapısı çok iyi bilindiği için burada şu sonuçlardan rahatça bahsedebiliriz. Varyasyonel yöntem minimizasyon mantığı ile çalıştığı için enerji özdeğerlerine yukarıdan yaklaşmaktadır. Bizim kullandığımız şekilde Numerov metodu enerji özdeğerlerine aşağıdan yaklaşmaktadır. Aslında Numerov metodunda enerji taramasını ne yönden yapacağınıza bağlı olarak isterseniz gerçek enerji değerine üsten yaklaşarak varyasyonel yöntemde olduğu gibi bulduğunuz yaklaşık enerji özdeğeri gerçek enerji özdeğerinin üstünde kalabilir. Varyasyonel yöntemin Numerov metodundan üstünlüğü sonuçta analitik bir dalga fonksiyonu vermesi gösterilebilir fakat varyasyonel yöntemde kullanılan analitik deneme dalga fonksiyonu gerçek dalga fonksiyonuna ulaşmakta çözümü kısıtlamaktadır. Numerov metodunda böyle bir kısıtlama olmadığı için varyasyonel yöntemde yaşanan bir sıkıntı olan yöntemin enerji seviyesine çok hızlı yaklaşmasının yanında dalga fonksiyonuna çok yavaş yaklaşması sıkıntısı yaşanmamaktadır.

Bu tez çalışmasında tam olarak çözülebilen harmonik osilatör, sonsuz kuyu potansiyeli, sonlu kuyu potansiyeli ve hidrojen atomu ile ilgilendik. Bu potansiyellerin analitik çözümleri ile Numerov metodu ile yapılan çözümlerini karşılaştırdık. Numerov metodu ile yapılan çözümlerin tam analitik çözümlerle beklenenin ötesinde uyum içersinde olduğunu gördük. Bu da bizi Numerov metodunun kararlılığı ve doğruluğu konusunda emin kılmaktadır.

KAYNAKLAR

Agarwal R. P., Y.- Wang M., An Int. J. Comp. & Math. with Appli. **0,** 561 (2001).

Andrew A. L., Journal of Computational and Applied Mathematics, **125,** 359 (2000).

Avdelas G., Konguetsof A., Simos T. E., Computers & Chemistry, **24,** 577 (2000).

Bieniasz L. K., Computers & Chemistry, **26,** 633 (2002).

Bowen M. and Coster J., Am. J. Phys., 48, 307 (1980).

Branson, D., Am. J. Phys., **47,** 1000 (1979).

Buchdahl, H. A., Am. J. Phys., **42**, 47 (1974).

Killingbeck J. P., Jolicard G., Phys. Lett. A, **261,** 40 (1999).

Levine Ira N., Quantum Chemistry, Prentice Hall, New Jersey, 2000.

Liboff R. L., Introductory Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company, New-York, 1998.

Merzbacher E., Quantum Mechanics, John Wiley & Sons, New York, 1998.

Messiah, A., Quantum Mechanics, vols. 1 and 2, Halsted, 1963.

Tselyaev V. I., J. Of Comp. And Appli. Math., **170,** 103 (2004).

Tsitouras Ch., An Int. J. Comp. & Math. with Appli. **43,** 943 (2002).

Tsitouras Ch., Appli. Math. And Comp., **135,** 169 (2003).

Wang Y.-M., An Int. J. Comp. & Math. with Appli. **45,** 759 (2003).

Wang Z., Ge Y., Dai Y., Zhao D., Computer Physics Communications, **160,** 23 (2004).