

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

ÜÇ BOYUTTA SAÇILMA

Emre ÖZTÜMER

F.B.E. Fizik Anabilim Dalı Fizik Programında Hazırlanan

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı Prof.Dr. İdris GÜMÜŞ

**T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ**

İSTANBUL, 2000

Prof. Dr. İdris GÜMÜŞ

Doç. Dr. Mehmet SİRİN

Prof. Dr. Ömer OĞUZ

Ömer Oğuz

M. Sirin

İdris Gümüş

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ŞEKİL LİSTESİ	iii
ÇİZELGE LİSTESİ	iv
ÖNSÖZ	v
ÖZET	vi
ABSTRACT	vii
1. GİRİŞ	1
2. FOX-GOODWIN YÖNTEMİ İLE RADYAL SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMÜ	2
2.1 Problemin Formülasyonu	2
2.2 Nümerik Çözüm Metodu	8
2.3 Program Yapma	10
3. KÜRESEL HARMONİKLER	22
3.1 Problemin Formülasyonu	22
3.2 Nümerik Çözüm Metodu	26
3.3 Program Yapma	28
4. KÜRESEL BESSEL FONKSİYONLARI	34
4.1 Problemin Formülasyonu	34
4.2 Nümerik Çözüm Metodu	38
4.3 Program Yapma	39
5. KÜRESEL ŞEKİLDE SİMETRİK BİR POTANSİYELDEN YÜKSÜZ BİR PARÇACIĞIN SAÇILMASI	44
5.1 Problemin Formülasyonu	44
5.2 Nümerik Çözüm Metodu	48
5.3 Program Yapma	53
6. SONUÇ	61
KAYNAKLAR	65
EK.1	61
ÖZGEÇMİŞ	66

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2.1	$l=0$ ve $E=1$ MeV enerji için 10, 20, 40, 80, 160, 500, 1000 ve 2000 integrasyon adımlarında normalize olmamış radyal dalga fonksiyonunun grafik formu	(15-16)
Şekil 2.2	$l=0$ ve $E=10$ MeV enerji için 10, 20, 40, 80, 160, 500, 1000 ve 2000 integrasyon adımlarında normalize olmamış radyal dalga fonksiyonunun grafik formu	(16-17)
Şekil 2.3	$l=0$ ve $E=30$ MeV enerji için 10, 20, 40, 80, 160, 500, 1000 ve 2000 integrasyon adımlarında normalize olmamış radyal dalga fonksiyonunun grafik formu	(17-18)
Şekil 2.4	$E= -76,9036145$ MeV enerjide normalize olmamış radyal dalga fonksiyonunun grafik formu	19
Şekil 2.5	$E= -29,00048$ MeV enerjide normalize olmamış radyal dalga fonksiyonunun grafik formu	19
Şekil 2.6	$l=0$ ve $E=1$ MeV enerji için dalga fonksiyonunun grafik formu	20
Şekil 2.7	$l=0$ ve $E=20$ MeV enerji için dalga fonksiyonunun grafik formu	20
Şekil 2.8	$l=4$ ve $E=5$ MeV enerji için dalga fonksiyonunun grafik formu	20
Şekil 3.1	$l=2, 6$ ve 10 değerleri için $Y_l(\theta, \phi)$ grafiği	32
Şekil 3.2	$l=10$ ve $m=0$ değerleri için $Y_{lm}(\theta, \phi)$ grafiği	32
Şekil 3.3	$l \neq 0$ ve $m \neq 1$ değerleri için $Y_{lm}(\theta, \phi)$ grafiği	32
Şekil 4.1	$l=0$ değeri için düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel fonksiyonlarının grafik formu	42
Şekil 4.2	$l=1$ değeri için düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel fonksiyonlarının grafik formu	42
Şekil 4.3	$l=2$ değeri için düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel fonksiyonlarının grafik formu	43
Şekil 4.4	$l=10$ değeri için düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel fonksiyonlarının grafik formu	43
Şekil 5.1	Bir saçılma deneyinin şematik düzenlenişi	44
Şekil 5.2	Woods-Saxon potansiyel formu	46
Şekil 5.3	Saçılma çözümünün asimptotik formu	47
Şekil 5.4	$l_p=5, E=10$ Mev enerji için Fe_{26}^{56} çekirdeğinin nötron Saçılmasının diferansiyel ve logaritmik tesir kesiti	59
Şekil 5.5	$l_p=16, E=50$ Mev enerji için U_{92}^{238} çekirdeğinin nötron Saçılmasının diferansiyel ve logaritmik tesir kesiti	59

ÇİZELGE LİSTESİ

	Sayfa
Çizelge 2.1 Fox alt programında kullanılan gösterim	11
Çizelge 2.2 Fox alt programı	12
Çizelge 2.3 V fonksiyon alt programında kullanılan gösterim	12
Çizelge 2.4 V fonksiyon alt programı	12
Çizelge 2.5 P1 ana programında kullanılan gösterim	13
Çizelge 2.6 P1 ana programının nümerik kısmı	14
Çizelge 3.1 PLM alt programında kullanılan gösterim	28
Çizelge 3.2 PLM alt programı	29
Çizelge 3.3 P2 ana programında kullanılan gösterim	30
Çizelge 3.4 P2 ana programının nümerik kısmı	30
Çizelge 4.1 BESJ fonksiyon alt programında kullanılan gösterim	39
Çizelge 4.2 BESJ fonksiyon alt programı	40
Çizelge 4.3 BESN fonksiyon alt programında kullanılan gösterim	40
Çizelge 4.4 BESN fonksiyon alt programı	40
Çizelge 4.5 P3 ana programında kullanılan gösterim	41
Çizelge 4.6 P3 ana programının nümerik kısmı	41
Çizelge 5.1 V fonksiyon alt programında kullanılan gösterim	54
Çizelge 5.2 V fonksiyon alt programı	54
Çizelge 5.3 P4 ana programında kullanılan gösterim	55
Çizelge 5.4 P4 ana programının nümerik kısmı	(56-57)
Çizelge 5.5 Rezonans durumunu gösteren sayısal değerler	60

ÖNSÖZ

Tezimin danışmanlığını üstlenen ve çalışmam boyunca beni yönlendiren ve yardımlarını sakınmayan sayın hocam Prof. Dr. İdris GÜMÜŞ'e teşekkür ederim.

Ayrıca bu çalışmam esnasında hiçbir yardımını esirgemeyen Yrd.Doç.Dr. Mehmet YILMAZ, Yrd. Doç. Dr. Birtan KAVANOZ sözlüm Araş. Gör. Cenk DENKTAŞ'a ve aileme teşekkür ederim.

Emre ÖZTÜMER
Haziran, 2000



ÖZET

Bu çalışmanın amacı, küresel şekilde simetrik bir potansiyelden yüksüz bir parçacığın saçılmasını incelemektedir.

Kuantum mekaniksel yaklaşımda, bu zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözülmesi anlamına gelir. Bu denklemin analitik çözümleri sadece potansiyelin birkaç özel şekli için bilinirler. Genelde denklemin nümerik olarak çözülmesi gerekir.

Bu denklemin küresel şekilde simetrik bir potansiyel için nümerik olarak çözmek nispeten kolaydır. Küresel şekilde simetrik potansiyellere sınırlama Schrödinger denkleminin küresel koordinatlarda ifade edilmesine ve adi diferansiyel denklemlere ayrılmasına götürür. Bu ayrılma işlem yolu 3. Bölüm'de tartışılmıştır. Adi diferansiyel denklemlerden biri, radyal harekete ait olan diferansiyel denklemdir. Bu radyal denklem ve nümerik çözümü 2. Bölüm'de ele alınmıştır ve çözümün $(0, \infty)$ aralığında elde edilmesi 4. Bölüm'de incelenmiştir.

İlk üç bölümde göz önüne alınan yöntemlerle saçılma probleminin incelemesi ve saçılmanın karakteristik büyüklüklerinin hesaplanması 5.Bölüm'de tartışılmıştır.



ABSTRACT

The purpose of this study is to examine the dispersion of a neutral particle from a sphericallysymmetric potential in spherical manner.

In quantum mechanical approach, this means the solving of time indepentant Schrödinger equation. Analytic solutions of this equation are only known for a few specific from of potential. In general the equation must be solved in numeric.

The solving of this equation in numeric for spherically formed symmetric potential is partly simple. The limitation to spherical formed symmetric potentials leads Schödinger equation to express though spherical coordinates and to split into ordinary differential equations. This splitting process is discussed in Section 3. One of the ordinary differential equations belongs to differential equation having radial action. This radial equation and numerical solution is dealed in Section 2 and obtaining of $(0, \infty)$ range of the solution is examined in Section 4.

Study over the dispersion problem through the methods reviewed in first three section and the calculation of characteristic magnitudes are discussed in Section 5.

1. GİRİŞ

Schrödinger Dalga Denklemini Çözme, görelili olmayan kuantum mekaniğinin temel problemidir. Bazı karmaşık problemler tek-parçacık Schrödinger denklemini çözmeğe indirgenebilir. Buna uygun olarak tek-parçacık Schrödinger denkleminin çözümleri atom ve nükleer fizikte kabuk modellerinin durumlarını teşkil ederler.

İki parçacığın karşılıklı saçılması da tek-parçacık Schrödinger denkleminin çözümünü gerektirir. Bu denklemin çözümü analitik olarak sadece potansiyelin birkaç özel biçimi için yapılabilir. Diğer haller için bu denklem nümerik olarak çözülür. Bu tezin birinci bölümünde seçilen özel bir $V(r)$ potansiyeli için Schrödinger denkleminin radyal kısmı nümerik olarak çözülmüştür.

Schrödinger denkleminin (r, θ, φ) küresel koordinatlarda ayrılabilir bir kısmı diferansiyel denklem olmasından dolayı (θ, φ) 'ye bağlı çözümler veya küresel harmonikler ikinci bölümde incelenmiştir.

İlk iki bölümde Schrödinger denkleminin sonlu aralıkta çözümleri tartışılır. Sonsuz aralıkta çözümlerin tartışması üçüncü bölümde verilmiştir.

Tezin dördüncü bölümünde esas problem yani nötronların ağır atom çekirdeklerinden esnek saçılması ele alınmıştır. Bir nötron bir hedef çekirdeğe çarptığında saçılma açısı ile yansıtılmıştır. Diferansiyel saçılma tesir kesiti saçılma açısının bir fonksiyonudur ve saçılma olayı Schrödinger denkleminin çözümünü gerektirir. Küresel simetrik potansiyel için Woods-Saxon potansiyeli seçilmiştir.

$\Psi(r)$ çözüm dalga fonksiyonunun asimptotik formundan diferansiyel saçılma tesir kesiti ve toplam saçılma tesir kesiti hesaplanmıştır.

2. FOX- GOODWIN YÖNTEMİ İLE RADYAL SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMÜ

2.1. Problemin Formülasyonu:

Schrödinger denklemini çözme, göreceli olmayan kuantum mekaniğinin merkezi problemidir. Bir basit hal, bir dış potansiyel içinde spinsiz bir parçacığın hareketinin incelenmesidir. Bu halde zamandan bağımsız Schrödinger denklemi,

$$H\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (2.1a)$$

ve beraberinde Hamilton operatörü

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \quad (2.1b)$$

yazılır.

Şayet parçacık potansiyel tarafından saçılırsa, E enerjisine herhangi bir pozitif değer verilebilir. Şayet parçacık potansiyel tarafından bağlanırsa, E negatif olur ve sadece kesikli değerler alabilir.

Bazı karmaşık problemler tek-parçacık Schrödinger denklemini çözmeye indirgenebilir. Buna uygun olarak tek- parçacık Schrödinger denkleminin çözümleri atom fizikinde ve nükleer fizikte kabuk modellerinin durumlarının esasını teşkil ederler. İki parçacığın karşılıklı saçılması da (2.1) tipindeki bir Schrödinger denklemine götürür. Bu halde $\vec{r}$ iki parçacık arasındaki mesafe vektörüdür, m indirgenmiş kütledir ve E kütle merkezli sistemde, yani içinde iki parçacığın kütle merkezinin durgun olduğu eylemsizlik sisteminde enerjidir.

(2.1)'in analitik çözümleri sadece potansiyelin birkaç özel formu için bilinirler. Genelde denklemin nümerik olarak çözülmesi gerekir. Bunu küresel olarak simetrik bir potansiyel için, yani

$$V(\vec{r}) = V(r) \quad (2.2)$$

olduğu zaman çözmek oldukça kolaydır. Aşağıda bu koşulun yerine getirildiğini kabul edeceğiz.

Merkezi potansiyellere kısıtlama (r, θ, φ) küresel koordinatların dahil edilmesini uygun kılar. O zaman Schrödinger denklemi ayrılabilir, yani radyal hareket için bir denklem ve açısal hareket için bir denklem elde edilir. Ayrılma işlem yolunu 3. bölümde ayrıntılı olarak ele alacağız.

Açısal hareket için diferansiyel denklem $V(r)$ potansiyelini içermez. Çözümleri $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ küresel harmoniklerdir. Radyal hareket için diferansiyel denklem

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_l(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) + V(r)u_l(r) = Eu_l(r) \quad (2.3)$$

şeklindedir. $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ küresel harmonikleri ve $u_l(r)$ radyal fonksiyonları kullanarak, (2.1) Schrödinger denkleminin $\Psi(\vec{r})$ genel çözümü kısmi dalgaların bir süperpozisyonu olarak ifade edilebilir:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{l,m} \frac{1}{r} u_l(r) C_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (2.4)$$

(2.1) Schrödinger denklemi her bir kısmi dalga ile ve bunun sonucu olarak onların toplamı ile sağlanır.

(2.3) ve (2.4)'de ortaya çıkan l niceliği, açısal momentum kuantum sayısıdır. m sembolü genel olarak kuantum mekaniğinde hem kütle için ve hem de magnetik kuantum sayısı (açısal momentumun z bileşeninin kuantum sayısı) için kullanılır. (2.4)'de m magnetik kuantum sayısıdır.

Toplam dalga fonksiyonunun açısal momentum kısmi dalgalarına ayrılması belirli avantajlar getirir. Bağlı haller sadece bir kısmi dalga ihtiva eder. Saçılma halleri için birden çok kısmi dalga hesaba alınmalıdır, ama ekseriya sadece az sayıda kısmi dalga hesaba alınır. Bunun sebebi şudur: Coulomb potansiyeli hariç, çoğu fiziksel potansiyel kısa menzillidir. Sonlu enerjili ve büyük açısal momentumlu parçacıklar etkileşme bölgesine giremezler. (2.3) radyal

denklemde bu durum, $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ merkezkaç engelini ihtiva eden, ikinci terimle ifade edilir. Merkezkaç engel, $V(r)$ 'nin ihmal edilebilir olduğu l 'nin büyük değerleri için kuvvetli olan bir potansiyel gibi etki eder. $V(r)$ ihmal edildiği takdirde (2.3) denklemi, analitik çözümleri bilinen serbest Schrödinger denklemi olur. Bu çözümler 4. bölümde ele alınırlar. O halde (2.3) radyal denklemine sadece l 'nin birkaç değeri için çözmeliyiz.

(2.3) radyal Schrödinger denklemi ikinci mertebeden bir diferansiyel denklemdir. Bunun uygun şekilde tek bir çözümünü elde etmek için iki sınır koşuluna ihtiyaç duyulur.

Koşulların biri, $|\psi(\vec{r})|^2$ olasılık yoğunluğunun koordinatların orjinde sonlu kalmaya mecbur olmasından elde edilir. Olasılık yoğunluğu

$$|\psi(\vec{r})|^2 = \left| \sum_{l,m} \frac{u_l(r)}{r} C_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \phi) \right|^2 \quad (2.5)$$

ile verilir. Olasılık yoğunluğu, ancak

$$u_l(0) = 0 \quad (2.6)$$

ise, $C_{l,m}$ keyfi açılım katsayıları için orjinde sonlu olabilir. Bu birinci sınır koşulumuzdur.

İkinci sınır koşulu, $u_l(r)$ dalga fonksiyonlarının normalizasyonu münasebetiyle ortaya çıkar. Burada bağlı durum çözümleri ($E < 0$) ve saçılma çözümleri ($E > 0$) arasında ayırım yapmalıyız.

Bağlı durumlarda parçacığın hareketi (veya iki parçacığın bağlı hareketi) sonlu bir uzaya kısıtlıdır, yani dalga fonksiyonu bire normalize edilebilir olmalıdır. İkinci sınır koşulu olarak dalga fonksiyonunu deneme bakımından keyfi şekilde seçilen bir $r_0 (\neq 0)$ mesafesinde herhangi seçilen sayıya, örneğin 1'e, eşit alabiliriz:

$$u_l(r_0) = 1 \quad (2.7)$$

Radyal denklemin çözümü buna uygun olarak tayin edilir. Çözümü nümerik olarak bulacağız ve potansiyelin menziline daha büyük r değerleri için çözümün,

$$u_l(r) \rightarrow a_l e^{-Kr} + b_l e^{+Kr} \quad (2.8)$$

formuna sahip olduğunu göreceğiz; burada

$$K = \left(\frac{2m(-E)}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.9)$$

dir. Yine de normalize edilebilirlik için koşul,

$$\int_0^{\infty} |u_l(r)|^2 dr = \text{sonlu}, \quad (2.10)$$

ancak b_l sıfır olursa yerine getirilir, zira aksi halde $u_l(r)$ fonksiyonu r 'nin büyük değerleri için sınırsız artabilecektir. b_l 'nin, radyal denkleme tarafımızdan dahil edilen bir E enerjisinin fonksiyonu olduğunu göreceğiz. E_l bir bağlanma enerjisi için, b_l E 'nin bir fonksiyonu olarak sıfırdan geçecektir:

$$b_l(E_l) = 0 \quad (2.11)$$

Bu sıfırı şu keyfiyetten tanıyacağız: r 'nin büyük değerleri için $u_l(E, r)$ dalga fonksiyonu, E enerjisindeki önemsiz değişimler için büyük negatif değerler ve büyük pozitif değerler arasında hafif etkilenir. Değişmenin meydana geldiği enerji E_l bağlanma enerjilerinden biridir. $E = E_l$ için $u_l(E, r)$ dalga fonksiyonu normalize edilebilir olur. Pratik hesaplama için (2.10) integralinde üst integrasyon limiti yerine fazla büyük olmayan bir R değeri yerleştirmeliyiz, zira çözümümüz nümerik olarak büyük r değerleri için kararsız olabilir. (2.7) keyfi ikinci sınır koşulundan dolayı elde edilen $u_l(E_l, r)$ bağlı durum fonksiyonu normalizedir ama bire normalize değildir. Yine de,

$$\int_0^R |u_l(E_i, r)|^2 dr = N^2 \quad (2.12)$$

integralini hesap edebiliriz ve sonra

$$\hat{u}_l(E_i, r) = \frac{1}{N} u_l(E_i, r) \quad (2.13)$$

ile bire normalize edilen bir bağılı durum fonksiyonu elde ederiz. Schrödinger denkleminin lineer olmasından dolayı da $\hat{u}_l(E_i, r)$ denklemi sağlar.

Saçılma çözümleri için E enerjisi, bir hızlandırıcı tarafından verilen enerjinin fiziksel önemine sahiptir ve herhangi bir pozitif değer alabilir. (2.6) ve (2.7) sınır koşulları ile ama artık asimptotik olarak sıfır olmayan yegane tanımlı bir $u_l(E, r)$ çözümünü yine elde ederiz. Şayet $V(r)$ potansiyeli uzun menzilli bileşene sahip değilse, o zaman $u_l(E, r)$ şu asimptotik şekle sahiptir:

$$u_l(E, r) \rightarrow N \sin\left(Kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (2.14)$$

burada

$$K = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.15)$$

(2.7) ikinci sınır koşulu bize N için bir değer verecektir. İstersek, $u_l(E, r)$ 'yi $1/N$ ile çarparak normalize edebiliriz. Normalizasyon bu halde şu anlama gelir: Dalga bire eşit bir asimptotik genliğe sahiptir. δ_l niceliğine saçılma fazı adı verilir. Saçılma fazı E enerjisinin bir fonksiyonudur ve 3. ve 4. bölümlerde daha ayrıntılı tartışılacaktır. $l\pi/2$ niceliği, açısal momentum engeli tarafından hasıl edilen bir faz kaymasıdır.

Bir fiziksel örnek olarak, Coulomb etkileşmesi ile iki α parçacığının karşılıklı saçılmasını göz önüne alacağız. α - α saçılması oldukça ilginçtir, zira α parçacıkları gerçekte nokta kütleler değildir, ama helyum atomlarının çekirdekleridir. α parçacıkları her biri iki proton ve iki nötrondan oluşurlar. Şayet iki α parçacığı, birbirlerine nüfuz edecek şekilde yakın iseler, o zaman Pauli ilkesi etkileşme üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Bununla beraber iki α parçacığının karşılıklı saçılması bir basit potansiyel vasıtasıyla çok iyi şekilde tasvir edilebilir. Potansiyel için

$$V(r) = -V_0 \exp(-\beta r^2) \quad (2.16a)$$

ifadesini kullanırız; burada

$$V_0 = 122,694 \text{ MeV} \quad \text{ve} \quad \beta = 0.22 \text{ fm}^{-2} \quad (2.16b)$$

Gerçeğe uygun bir hesaplama için ayrıca Coulomb potansiyelinin hesaba alınması gerekli olacaktır.

(2.3) radyal Schrödinger denklemini (2.16) potansiyeli ile çözeceğiz ve çözümleri ayrıntılı olarak inceleyeceğiz. Açısal momentum kuantum sayıları olarak $l = 0, 2, 4$ ve 6 seçeceğiz. Tek açısal momentum kuantum sayıları Pauli ilkesine göre iki α parçacığı için yasaklanırlar. Enerji birimimiz için 1 MeV ve uzunluk birimimiz 1 fm 'dir.

Negatif enerjiler bölgesinde dört bağlı durum, şöyleki $l = 0$ için üç bağlı durum ve $l = 2$ için bir bağlı durum, bulacağız. $l = 0$ için iki en düşük bağlı durum ve $l = 2$ için bir bağlı durum fiziksel değildir. Bu üç bağlı durum Pauli - yasak durumlarıdır ve onlar 8 nükleonun çok yoğun paketlenmesine karşılık olurlar. Ancak bu fiziksel olmayan bağlı durumlardan dolayı (2.16) potansiyeli saçılma dalga fonksiyonlarını pekala yeniden hasıl eder, zira bu dalga fonksiyonları bağlı durum fonksiyonlarına ortogonaldirler. $l = 0$ için üçüncü bağlı durum da farklı bir sebepten dolayı fiziksel değildir. Coulomb etkileşmesini ihmal etmiştik ve buna göre iki α parçacığının zayıf olarak bağlı bir durumu ortaya çıkar. Coulomb potansiyeli dahil edildiği takdirde bu bağlı durum $0,092 \text{ MeV}$ 'de iyi bilinen keskin rezonans durumu olur; bu rezonans durumuna ^8Be çekirdeğinin kısa ömürlü temel durumu olarak da bakılabilir.

Bağıl bir hareket ile ilgilendiğimizden, (2.3) radyal denklemde ve (2.9) ve (2.15)'de α parçacıklarından birinin kütlesi yerine iki α parçacığının indirgenmiş kütlesini kullanmalıyız.

O sadece $\hbar^2/2m$ kombinasyonu içinde meydana gelir.

$$\frac{\hbar^2}{2m} = 10,375 \text{ MeVfm}^2 \quad (2.17)$$

2.2 Nümerik Çözüm Metodu

(2.3) radyal Schrödinger denklemi

$$u''(r) + w(r)u(r) = 0 \quad (2.18)$$

denklemine eşdeğerlidir; burada

$$w(r) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (2.19)$$

kısaltmasını kullandık. l indisi bu andan itibaren unutulacaktır.

(2.18)'in nümerik işleme alınması için, $u''(r)$ türevi yerine bir sonlu fark ifade yerleştirilecektir. Ek 1.1'deki üç nokta formülünü kullanarak, $O(h^2)$ hata terimini ihmal ederek en basit yaklaşıklığı elde ederiz:

$$u''(r) = \frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} \quad (2.20)$$

o zaman (2.18) denklemi

$$\frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} + w(r)u(r) = 0 \quad (2.21)$$

veya

$$u(r+h) = 2u(r) - u(r-h) - h^2 w(r)u(r) \quad (2.22)$$

olur. Örneğin, şimdi

$$u(0) = 0 \quad (2.23)$$

ve

$$u(h) = 1 \quad (1.24)$$

ispatı kabul edilirse, o zaman (2.22)'yi kullanarak öncelikle $u(2h)$ tayin edilebilir. $u(h)$ ve $u(2h)$ 'dan $u(3h)$ tayin edilebilir ve böyle devam eder. Böylece h genişlikli göze sahip eşmesafeli noktaların bir şebekesi elde edilir. (2.22) yaklaşma denklemi, Ek 1.1'de meydana gelen hata terimini uygun bir tarzda hesaba alarak, iyileştirilebilir. Ek 1.1 ve Ek 1.2'den

$$\frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} = u''(r) + \frac{h^2}{12} u^{(4)}(r) + O(h^4) \quad (2.25)$$

elde ederiz. Şayet (2.18)'de $u''(r)$ 'nin yerine yerleştirmek üzere (2.25)'i kullanırsak, düzeltme terimleri sağ tarafta görünür:

$$\frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} + w(r)u(r) = \frac{h^2}{12} u^{(4)}(r) + O(h^4) \quad (2.26)$$

Üç nokta formülünü terketmeksizin, h^2 mertebeli düzeltme teriminin sıfır olmasını sağlayan bir yöntem vardır. Bu yöntem Fox-Goodwin, Noumerov veya Cowell yöntemi adı verilir. Biz ona Fox – Goodwin yöntemi diyeceğiz.

Yöntemin püf noktası şudur: (2.18)'e

$$1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2} \quad (2.27)$$

operatörü uygulanır ve böylece

$$\left(1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2}\right) u''(r) + w(r)u(r) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2} [w(r)u(r)] = 0 \quad (2.28)$$

elde edilir. Sonra birinci teriminin yerine konmak üzere (2.25) denklemini kullanılır ve

$$\frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} + O(h^4) + w(r)u(r) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2} [w(r)u(r)] = 0 \quad (2.29)$$

ele geçer.

Sonra h^4 ve daha yüksek mertebeli bütün terimler ihmal edilir. Şimdi $[u(r)w(r)]$ 'nin ikinci türevi yerine (2.20) tipli bir yaklaşıklık yerleştirilebilir, çünkü (1.29)'da ortaya çıkan $h^2/12$ çarpanı şimdi h^4 mertebeli birinci düzeltme terimini meydana getirir. Bundan dolayı

$$\frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} + w(r)u(r) + \frac{w(r+h)u(r+h) + w(r-h)u(r-h) - 2w(r)u(r)}{12} = 0 \quad (2.30)$$

veya

$$u(r+h) = \frac{2u(r) - u(r-h) - \frac{h^2}{12} [10w(r)u(r) + w(r-h)u(r-h)]}{1 + \frac{h^2}{12} w(r+h)} \quad (2.31)$$

elde ederiz. Artık bu denklem (2.22)'nin yerini alır ve yine h genişlikli göze sahip olan bir eş mesafeli noktalar şebekesi üzerinde $u(r)$ fonksiyonunu hesaplamamıza imkan verir. (2.31)'de ihmal edilen terimler (2.22)'de ihmal edilen terimlerden h 'nın iki mertebesi daha küçüktürler.

2.3. Program Yapma

(2.31) Fox-Goodwin tekrarlamasını kullanarak (2.3)'ü çözmek için (2.18) diferansiyel denklemini çözen, Fox adı verilen bir alt program yazarız. (r_i) , (u_i) ve (w_i) dizilerini

$$r_i = ih, \quad u_i = u(r_i), \quad w_i = w(r_i) \quad i = 0, 1, \dots, i_b \quad (2.32)$$

ile birlikte dahil ederiz. Radyal dalga fonksiyonu $[0, b]$ aralığında hesaplanacaktır, yani aralığın alt sınırı $r = 0$ 'da ve aralığın üst sınırı $r = b$ 'de bulunur. $[0, b]$ aralığı

$$h = \frac{b}{i_b} \quad (2.33)$$

uzunluklu i_b sayıda alt aralıklara bölünür. Bundan dolayı göz noktalarının sayısı i_{b+1} 'e eşittir.

(2.32) ve (2.33)'deki gösterimle, (2.31) aşağıdaki formda yeniden yazılabilir:

$$u_{i+1} = \frac{2u_i - u_{i-1} - \frac{h^2}{12} [10w_i u_i + w_{i-1} u_{i-1}]}{1 + \frac{h^2}{12} w_{i+1}} \quad (2.34)$$

ÇİZELGE 2.1. Fox alt programında kullanılan gösterim (Schmid, 1988)

<i>Fiziksel Ad</i>	<i>Fortran Ad</i>
i_b	<i>IB</i>
b	<i>B</i>
h	<i>H</i>
u_I	<i>U(I)</i>
w_I	<i>W(I)</i>

Çizelge 2.2, Fox altprogramını gösterir; kullanılan gösterim Çizelge 2.1'de bulunacaktır. Program, b integrasyon aralığının üst sınırını $u(r)$ çözüm fonksiyonunun u_i değerlerini Fox'dan geri alır (100. satırdaki parametre listesine bakınız). 104. ve 105. Satırlarda (2.23) ve (2.24) sınır koşulları belirtilirler.

ÇİZELGE 2.2 Fox alt programı (Schmid, 1988)

SUBROUTINE FOX (IB,B,W,U)	100
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)	101
DIMENSION W(0:IB),U(0:IB)	102
H=B/IB	103
U(0)=0.D0	104
U(1)=1.D0	105
DO 10 I=1, IB-1	106
U(I+1)= (2.DO* U(I) - U(I-1)-H*H / 12.DO* (10.DO*W(I)*U(I)+W(I-1)	107
*U(I-1)))/(1.DO+H*H/12.DO*W(I-1))	108
10 CONTINUE	109
END	110

(2.34) tekrarlamaşı 106. satırından DO- döngüsüyle başarılır.

Potansiyel fonksiyonunu kolayca değıştirebilmek için, V fonksiyon alt programını dahil ederiz; Çizelge 2.3 ve Çizelge 2.4'e bakınız.

ÇİZELGE 2.3. V fonksiyon alt programında kullanılan gösterim (Schmid, 1988)

<i>Fiziksel Ad</i>	<i>Fortran Ad</i>
V_0	VO
β	BETA
r	R

ÇİZELGE 2.4. V Fonksiyon alt programı (Schmid, 1988)

DOUBLE PRECISION FUNCTION V(R)	200
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)	201
PARAMETER (V0=122.694 D0, BETA=0.22 D0)	202
PARAMETER (EXPMAX=50. D0)	203
IF (BETA*R*R.LE.EXPMAX) THEN	204
V= V0*EXP(-BETA*R*R)	205
ELSE	206
V0=0.D0	207
END IF	208
END	209

Bu halde V , r ayrılma mesafesi için $\alpha - \alpha$ etkileşme potansiyelini (2.16)'dan hesap eder (205. satır). Potansiyel parametreleri sabit kullanılır (202. satır). 204 ve 208. satırlarındaki IF bloğu mümkün olabilir bir üssü aşmasını temin eder ve ayrıca üstel fonksiyonun ekseriya gereksiz şekilde hesap edilmemesini sağlar.

Çizelge 2.6, P1 ana programının nümerik kısmını gösterir; kullanılan gösterim Çizelge 2.5'de listelenir. 307. satırından itibaren DO- döngüsünde r_i göz noktaları (1.32)'den ve $w(r_i) = w_i$ fonksiyon değerleri (2.19)'dan hesap edilirler. 306. satırında $w_0 = 0$ alırlır. Bu, haklı bir sebebe ihtiyaç duyar, zira sıfır olmayan açılal momentum için, $w(r)$ $r \rightarrow 0$ iken ıraksar. (2.18) denkleminde $w(r)$ sadece w, u , çarpımında görünür ve (2.23) sınır koşuluna göre $u(0)$ 'ı sıfıra eşit almalıyız.

Bununla beraber, "sonsuz kere sıfır" tanımsızdır. $w_0 = 0$ seçimimizle keyfi olarak $w(0)u(0)$ ' sıfıra eşit alırlır. Bunun için haklı sebep nümerik olarak elde edilecektir: Ne zaman açılal momentum engeli $V(r)$ 'ye üstün gelir, ozaman $u_l(r)$ çözümümüz serbest Schrödinger denkleminin bilinen analitik çözümüne dönüşür (3. bölüme bakınız). Bu ayrıca $l \neq 0$ ve r 'nin küçük değerleri için (2.29) denklemindeki h^4 mertebeli düzeltme terimlerinin ihmalinin müsaade edilebilir olup olmadığı sorusuna cevap verir. P1'in nümerik kısmı Fox alt programının çağırılmasıyla sona erer.

ÇİZELGE 2.5. P1 ana programında kullanılan gösterim. (Schmid, 1988)

Fiziksel Ad	Fortran Ad
i_b	IB
b	B
h	H
r_i	R(I)
$\hbar^2/2m$	H2M
l	L
E	E
u_i	U(I)
w_i	W(I)

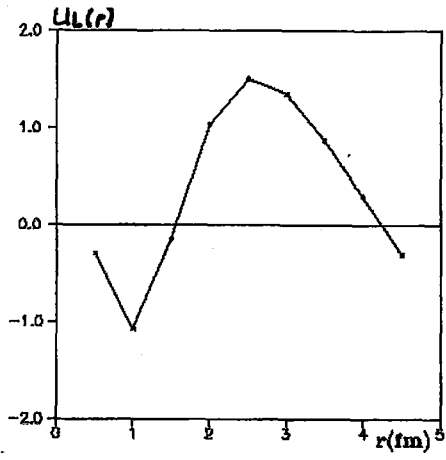
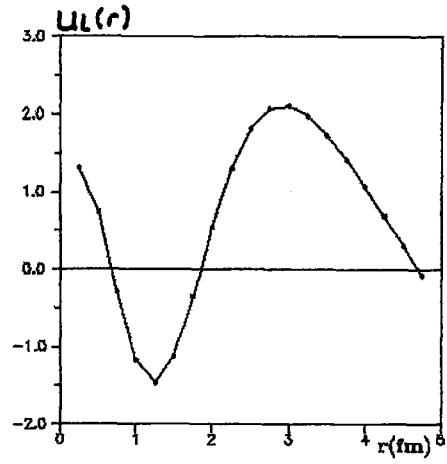
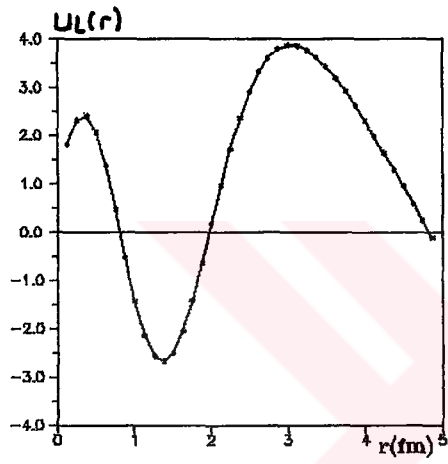
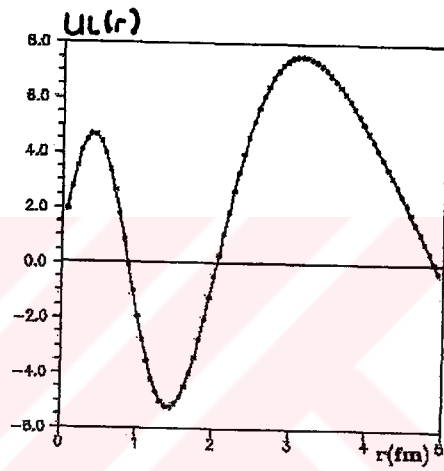
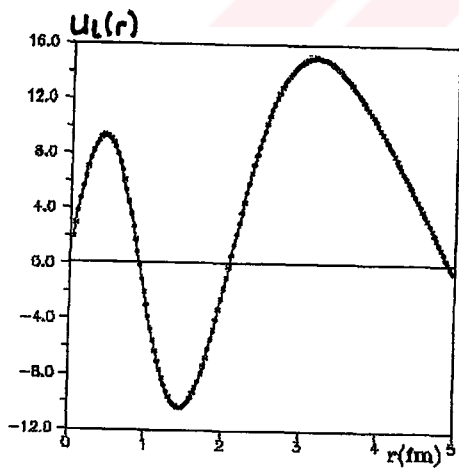
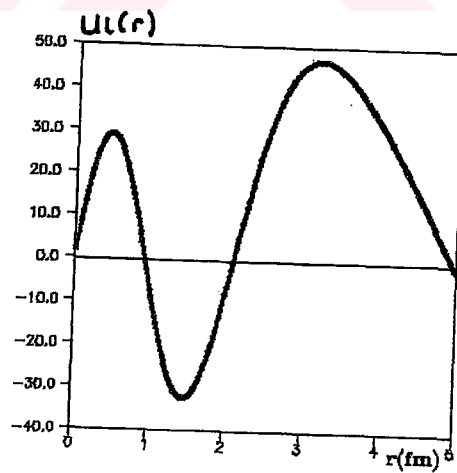
ÇİZELGE 2.6. P1 ana programın nümerik kısmı (Schmid, 1988)

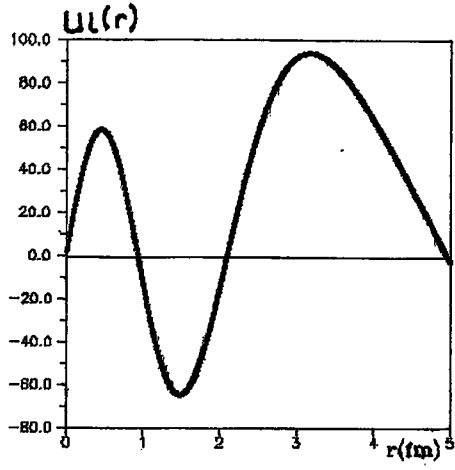
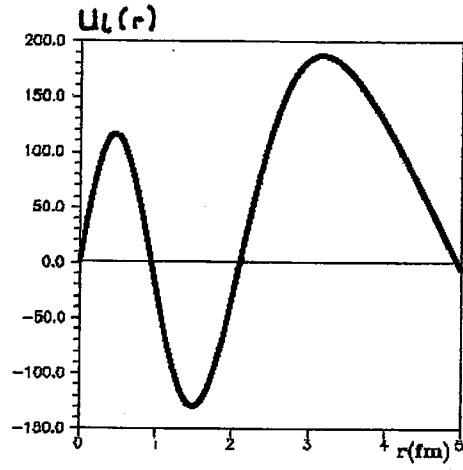
PROGRAM P1	300
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z)	301
PARAMETER (IMAX = 2000, H2M = 10.375 D0, BMAX = 30.D0)	302
DIMENSION R(0: IMAX), U(0: IMAX), W(0: IMAX)	303
• (INPUT: E, L, B, IB)	304
H = B / IB	305
R(0) = 0.D0	306
W(0) = 0.D0	307
DO 10 I=1, IB	308
W(I) = (E - V(R(I))) / H2M - L * (L+1) / (R(I) * R(I))	309
10 CONTINUE	310
CALL FOX (IB, B, W, U)	311
• (OUTPUT: U)	
END	312

$\hbar^2/2m$ için değer (2.17) ile sabit olur (302. satır), halbuki E enerjisi, l açısal momentum kuantum sayısı, arzu edilen $[0, b]$ integrasyon aralığının b üst sınırı ve integrasyon adımlarının i_b sayısı giriş bilgileridir. Çıkış bilgileri olarak grafik formda ve istenirse de nümerik formda $u_l(r)$ radyal dalga fonksiyonu elde edilir.

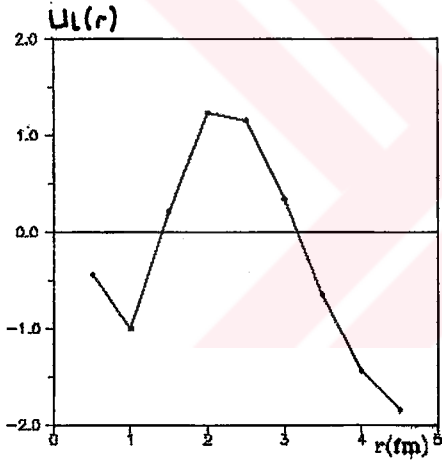
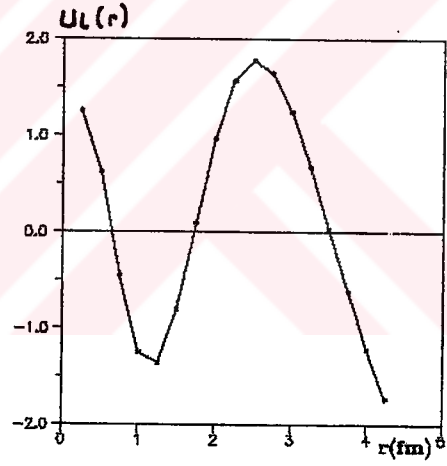
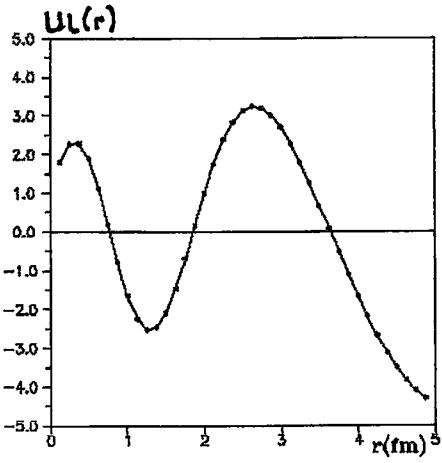
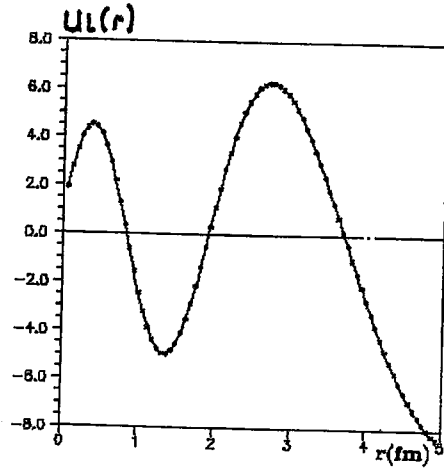
İlk önce Fox- Goodwin yönteminin doğruluğunu test etmek isteriz. Bunun için şu yolları uyguluyoruz:

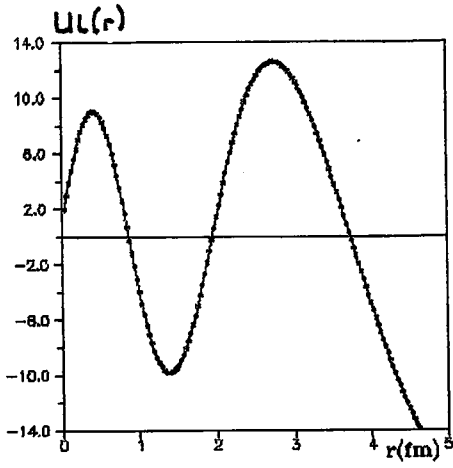
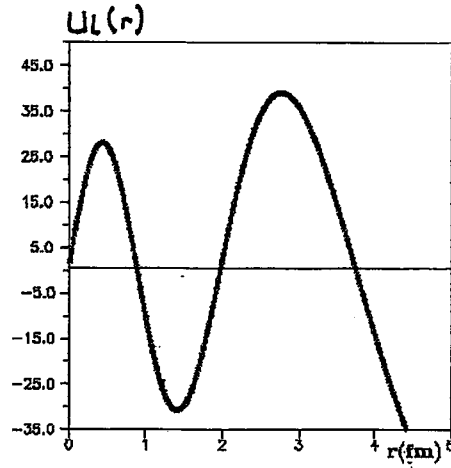
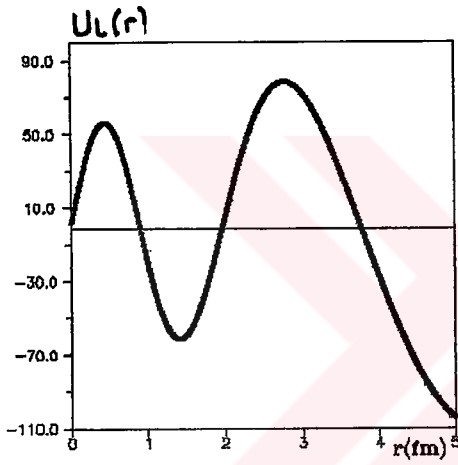
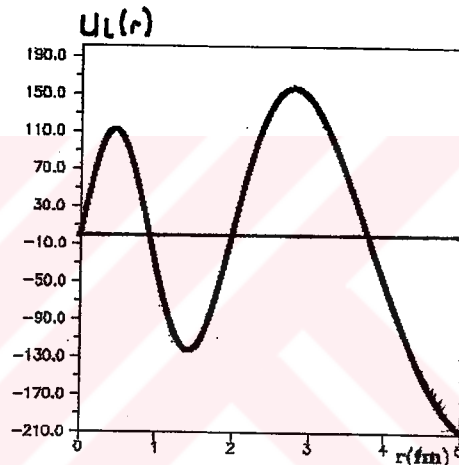
(i) $l = 0$ için 10, 20, 40, 80, 160, 500, 1000 ve 2000 integrasyon adımlarını seçerek ve 1 MeV, 10 MeV ve 30 MeV enerjilerle normalize olmamış radyal dalga fonksiyonları grafik formda elde edilerek, Şekil 2.1 – Şekil 2.3’de gösterilmiştir.

 $i_b=10$  $i_b=20$  $i_b=40$  $i_b=80$  $i_b=160$  $i_b=500$

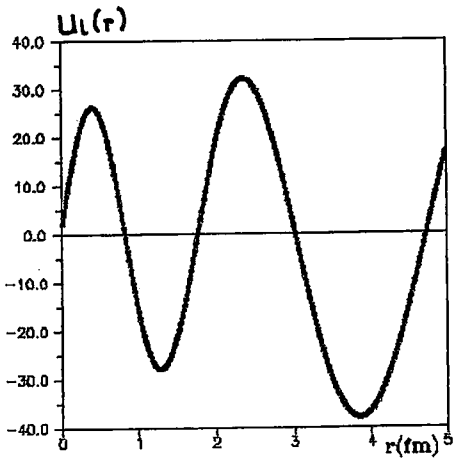
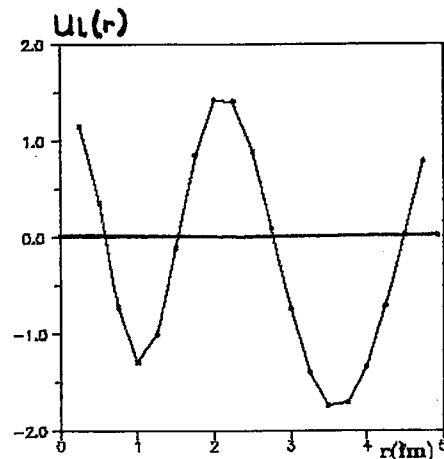

 $i_b=1000$

 $i_b=2000$

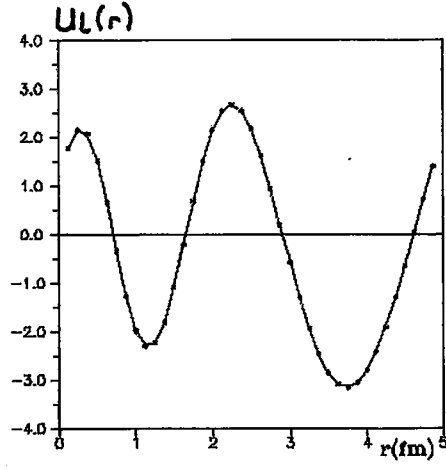
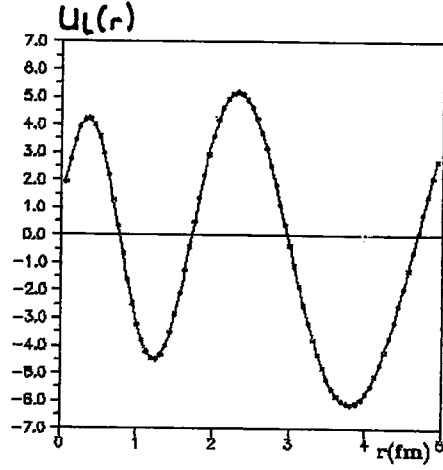
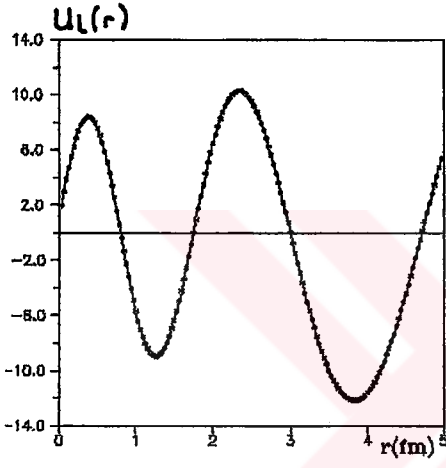
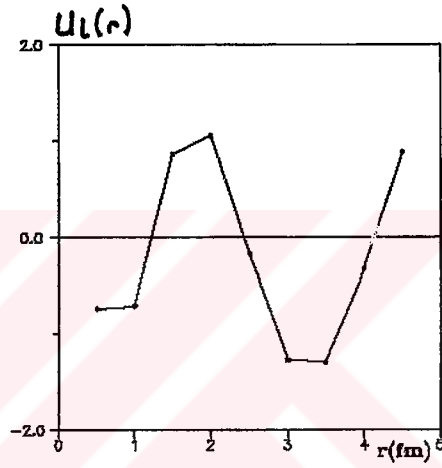
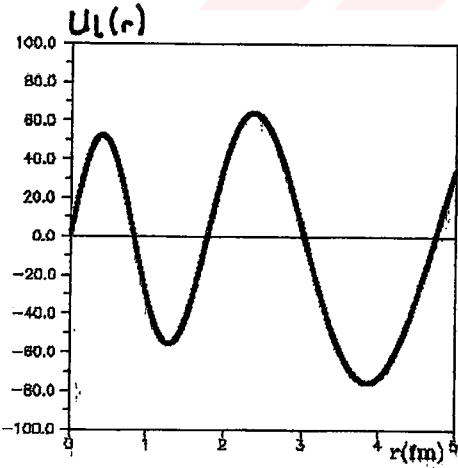
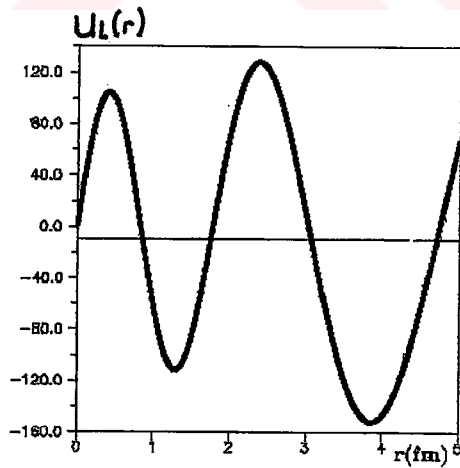
Şekil 2.1 $l=0$ ve $E=1$ MeV enerji için 10, 20, 40, 80, 160, 500, 1000 ve 2000 integrasyon adımlarında normalize olmamış radyal dalga fonksiyonun grafik formları (Schmid, 1988)


 $i_b=10$

 $i_b=20$

 $i_b=40$

 $i_b=80$


 $i_b=160$

 $i_b=500$

 $i_b=1000$

 $i_b=2000$

Şekil 2.2 $l=0$ ve $E=10$ MeV enerji için 10, 20, 40, 80, 160, 500, 1000 ve 2000 integrasyon adımlarında normalize olmamış radyal dalga fonksiyonun grafik formları (Schmid, 1988)

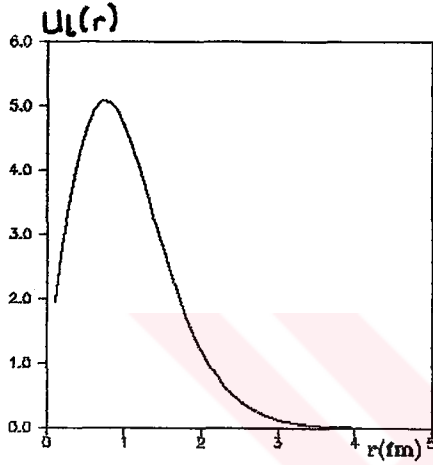

 $i_b=10$

 $i_b=20$

 $i_b=40$  $i_b=80$  $i_b=160$  $i_b=500$  $i_b=1000$  $i_b=2000$

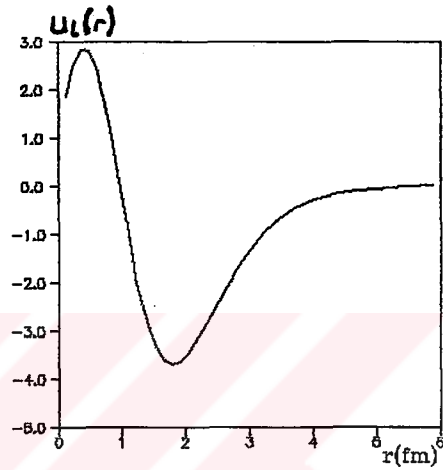
Şekil 2.3 $l=0$ ve $E=30$ MeV enerji için 10, 20, 40, 80, 160, 500, 1000 ve 2000 integrasyon adımlarında normalize olmamış radyal dalga fonksiyonun grafik formları (Schmid, 1988)

Bu şekillerin dikkatli incelenmesi dalga fonksiyonlarının sıfırlarının kararlılığını işaret eder.

İkinci olarak, büyük mesafelerdeki radyal dalga fonksiyonunun işaret değiştirmesinden dolayı enerjileri tayin ederek Kısım 2.1'deki sözü edilen bağlı durumları bulacağız ve üç Pauli – Yasak durumunun kısa menzilinı tayin edeceğiz. Bunun için, $l = 0$ ve -76.9036145 MeV, -29.00048 MeV enerjilerle normalize olmamış radyal dalga fonksiyonları grafik formda elde edilerek, Şekil 2.4 ve Şekil 2.5'de gösterilmiştir.



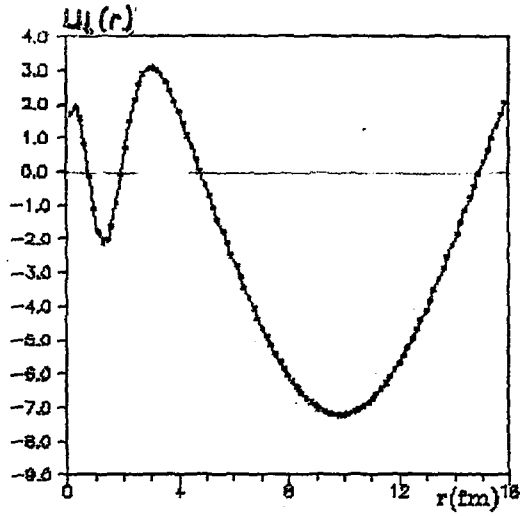
Şekil 2.4 $E = -76,9036145$ MeV enerjide normalize olmamış radyal dalga fonksiyonunun grafik formu (Schmid, 1988)



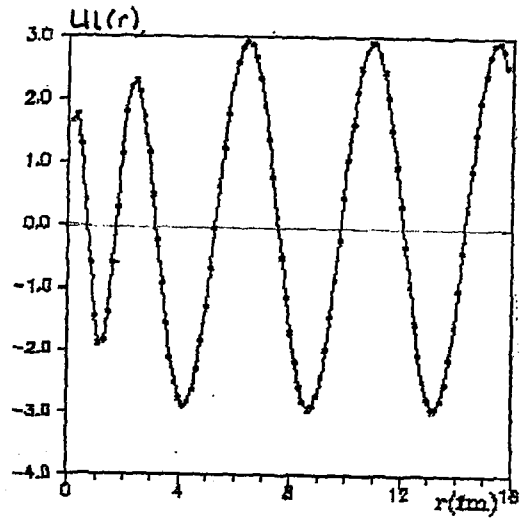
Şekil 2.5 $E = -29,00048$ MeV enerjide normalize olmamış radyal dalga fonksiyonunun grafik formu (Schmid, 1988)

Şekil 2.4 için maksimum takriben $0,84 \text{ fm}$ 'de yer alır. α parçacığının deneysel yarıçapı takriben $1,6 \text{ fm}$ kadardır ve iki α parçacığı hemen hemen birbirlerini örtebilecek derecede yakın olurlar. Açıkta ki burada nötronlara ve protonlara ait Pauli ilkesi çok önemli bir rol oynamaktadır. Kısım 2.1'de ifade edildiği gibi, durum Pauli-yasaklı durumdur. Şekil 2.5'deki dalga fonksiyonu bir sıfıra sahiptir.

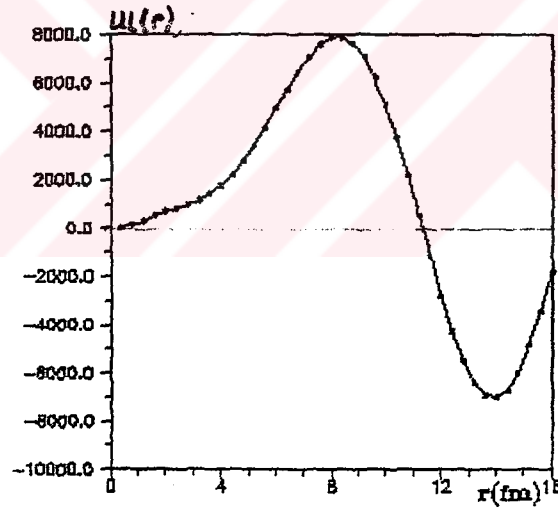
Son olarak, $l = 0$ ve $E=1 \text{ MeV}$, $l = 0$ ve $E=20 \text{ MeV}$, $l = 4$ ve $E=5 \text{ MeV}$ için dalga fonksiyonları hesaplanmış ve bunlar Şekil 2.6 – Şekil 2.8'de gösterilmiştir.



Şekil 2.6 $l=0$ ve $E=1$ MeV enerji için dalga fonksiyonunun grafik formu (Schmid, 1988)



Şekil 2.7 $l=0$ ve $E=20$ MeV enerji için dalga fonksiyonunun grafik formu (Schmid, 1988)



Şekil 2.8 $l=4$ ve $E=5$ MeV enerji için dalga fonksiyonunun grafik formu [Schmid, 1988]

Şekil 2.6 ve Şekil 2.7'den küçük mesafelerde dalga fonksiyonunun E enerjisinin değişimine biraz duyarlı olduğu görülür. Diğer bir ifade ile, dalga fonksiyonunun ilk iki sıfırı E enerjisinin değişimine şöyle böyle duyarlıdır. Bunun sebebi, küçük mesafelerde $V(r)$ potansiyeli öyle derindir ki (1.3)'teki $E u(r)$ teriminin $V(r)u(r)$ terimine kıyasla hemen hemen hiç önemli olmamasıdır. Bir başka uygun açıklama şudur: Saçılma dalga fonksiyonları bağlı durum dalga fonksiyonlarına ortogonal olmalıdır ve bu koşul kısa mesafelerde saçılma dalga fonksiyonlarının şekli üzerinde hakim bir etkiye sahiptir.

Bu sonuç, orijin civarındaki hata terimlerinin çok büyük olmasından dolayı, küçük r değerleri için dalga fonksiyonunun görünür şekilde sıradışı davranışını sergiler.



3. KÜRESEL HARMONİKLER

3.1. Problemin Formülasyonu

2. bölümde küresel simetrik bir $V(r)$ potansiyelinin etkisi altında m kütleli bir parçacığın hareketini inceledik. Böyle bir potansiyel ile kuvvetler sadece koordinatların orijininden parçacığın konumuna olan çizginin doğrultusunda etki ederler, yani bir (r, θ, φ) polar küresel koordinatlar sisteminde kuvvetler sadece r koordinatın doğrultusunda etki ederler. Parçacığın θ ve φ açısal serbestlik derecelerindeki hareketi kuvvetten bağımsız bir harekettir. Göreceğimiz gibi, bu halde sadece bu açısal koordinatları ihtiva eden ve bu yüzden r cinsinden bir diferansiyel denklemle eşlenmemiş olan bir diferansiyel denklem Schrödinger denkleminin ayrılabilir. θ ve φ cinsinden bu diferansiyel denklemin çözümleri birim küre üzerinde dalga fonksiyonları olarak yorumlanabilirler. Dalga fonksiyonlarının birim kürenin her bir çevrimi üzerinde kapanmaları, yani dalga fonksiyonlarının θ ve φ 'nin tek- değerli fonksiyonları olma koşulu yüklenirse kesikli bir özçözümler kümesi elde edilir. Normalizasyon koşulu olarak küresel yüzey üzerinden integrali alınan dalga fonksiyonunun mutlak değerinin karesinin bir eşi olacağı belirtilir. Bu normalize edilen özçözümlere küresel harmonikler adı verilir ve $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ ile gösterilir. Şimdi bu fonksiyonları daha ayrıntılı olarak göz önüne alacağız.

Kuantum mekaniğinde çeşitli yollar küresel harmoniklere ait diferansiyel denkleme götürür. Yollardan biri Schrödinger denkleminin ayrılması yoluyla götürür. 1. Bölümde söz konusu edildiği gibi, bir küresel simetrik potansiyelin etkisi altında bir nokta kütlenin hareketine ait Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (3.1)$$

şeklindedir. (r, θ, φ) küresel koordinatları dahil ederek deneme olarak $\psi(\vec{r})$ dalga fonksiyonunu şu formda ifade ederiz.

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (3.2)$$

Küresel koordinatlarda Laplace operatörü

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (3.3)$$

ile verilir. (3.2) ve (3.3)'ü (3.1)'de yerine koyarak, denklemin ayrıldığı görülür. Sadece r koordinatına bağlı olan terimler ve sadece θ ve φ 'ye bağlı olan terimler vardır. Sonuncu terimler sağ tarafa getirildikleri takdirde

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] = -\frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] \quad (3.4)$$

elde ederiz. Denklemin iki tarafı farklı koordinatlara bağlı olduklarından, her bir taraf λ diyeceğimiz bir sabite eşit olmalıdır. Buna uygun olarak iki denklem elde ederiz:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] = \lambda \quad (3.5)$$

$$-\frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] = \lambda \quad (3.6)$$

$u(r)$ dalga fonksiyonunu

$$R(r) = \frac{1}{r} u(r) \quad (3.7)$$

ile tanımlarsak, (3.5) denklemini basitleştir.

(3.7)'nin (3.5)'de yerine konulması, az bir işlemden sonra, 2. Bölümde gözönüne almış olduğumuz radyal Schrödinger denklemine götürür.

(3.6)'nın çözümleri matematikte kesin bilinirler. Fonksiyonların birim kürenin herbir çevrimi üzerine kapanmaları koşulu ancak

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.8)$$

ile sağlanabilir.

$\sin^2 \theta$ ile çarpmadan sonra (3.6)'daki diferansiyel operatör biri sadece θ 'ya bağlı olan ve diğeri de sadece φ 'ye bağlı olan iki terime ayrılır.

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (3.9)$$

deneme formülü ile (3.6) iki denkleme ayrılır:

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = \nu \quad (3.10)$$

$$\frac{1}{\Theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2 \theta = \nu \quad (3.11)$$

(3.10)'dan ν sabitinin bir m tam sayısının karesine eşit olmaya mecbur olduğu çıkarılır,

$$\nu = m^2, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.12)$$

çünkü sadece o zaman $\Phi(\varphi)$, φ açısının tek-değerli bir fonksiyonu olacaktır. (2.10)'nun (normalize edilen) çözümleri

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{2\pi} e^{im\varphi} \quad (3.13)$$

ile verilirler.

(3.11)'i çözmeye başlamadan önce denklemi biraz değiştirmek faydalıdır. (3.11), $\frac{\Theta}{\sin^2 \theta}$ ile çarpılır, θ değişkeninden $w = \cos \theta$ değişkenine dönüştürülür ve sonra

$$P(w) = P(\cos \theta) = \Theta(\theta) \quad (3.14)$$

gösterimi ile $P(w)$ çözümleri aranır. $P(w)$ için diferansiyel denklem

$$\frac{d}{dw} \left[(1-w^2) \frac{d}{dw} P_l^m(w) \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-w^2} \right] P_l^m(w) = 0 \quad (3.15)$$

dir. Daha önce diferansiyel denklem çözümlerinin tek-değerli olmalarını temin eden (3.8) ve (3.12) koşullarını uygulamıştık ve buna uygun olarak çözümlere $P_l^m(w)$ dedik. $P_l^m(w)$ fonksiyonlarına Birleşik Legendre Fonksiyonları adı verilir. Buna göre küresel harmonikler

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = N_{l,m} P_l^m(\cos \theta) \Phi_m(\varphi) \quad (3.16)$$

olur; burada $N_{l,m}$ bir normal yapma sabitidir.

l, m kuantum sayıları ve fiziksel nicelikler arasındaki bağıntı, küresel harmoniklerin diferansiyel denklemini elde etmek için ikinci yolu göz önüne alırsak, belli olur.

$$\vec{L} = (L_x, L_y, L_z) \quad (3.17)$$

açısal momentum için operatörü göz önüne alıyoruz; burada

$$L_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad L_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (3.18)$$

dir. (r, θ, φ) küresel koordinatlara dönüştürme

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.19)$$

ve

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (3.20)$$

verir.

(3.20) operatörü ile kurulan özdeğer denklemi (3.6) denklemi ile özdeştir. (3.6)'nın çözümlerinin, $\hbar^2 \lambda = \hbar^2 l(l+1)$ özdeğerlerine sahip açısal momentum operatörünün karesinin öz durumları oldukları çıkar. O halde l 'ye açısal momentum sayısı denir. (3.19) operatörü ile kurulan özdeğer denklemi çözümler olarak (2.13) fonksiyonlarına sahip olur. Onların özdeğerleri $\hbar m$ 'dirler. O halde m 'ye açısal momentumun z bileşeninin kuantum sayısı veya magnetik kuantum sayısı denir.

3.2 NÜMERİK METOD

$P_l^m(w)$ Birleşik Legendre Fonksiyonları $P_l(w)$ Legendre polinomlarından $l \geq m \geq 0$ ve $|w| \leq 1$ için türetilebilir.

$$P_l^m(w) = (1-w^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dw^m} P_l(w) \quad (3.21)$$

sahip oluruz. $P_l(w)$ Legendre polinomları

$$P_l(w) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dw^l} (w^2 - 1)^l \quad (3.22)$$

Rodrigues formülünden elde edilebilirler. m (2.15) denkleminde kuadratik olarak girdiğinden, $m < 0$ için $P_l^m(w)$ çözümleri elde edilirler. Böylece (3.21) tanımımızda m 'nin pozitif olduğunu kabul edebiliriz. (3.21)'den

$$P_l^m(w) = 0, \quad 0 \leq l < m \quad \text{ için } \quad (3.23)$$

olduğu da çıkar, zira bu halde $2.l$ dereceden bir polinomun $2.l$ kereden daha fazla türevi alınır.

$l = m$ hali özellikle basittir, zira o zaman türev alma sadece

$$P_l^m(w) = (1-w^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dw^m} P_m(w) = \frac{(2m)!}{2^m m!} w^m \quad (3.24)$$

terimine izin verir; burada

$$\bar{w} = (1 - w^2)^{\frac{1}{2}} \quad (3.25)$$

dedik.

Birleşik Legendre fonksiyonları

$$P_{l+1}^m(w) = \frac{1}{l-m+1} [(2l+1)wP_l^m(w) - (l+m)P_{l-1}^m(w)] \quad (3.26)$$

tekrarlanma formülüyle hesaplanabilirler. $P_l^m(w)$ 'den başlayarak, l 'nin istenilen değerine sahip polinoma kadar $P_{m+1}^m, P_{m+2}^m, \dots$ polinomları elde edilir. Tekrarlanma için başlama fonksiyonları olarak (3.24)'den P_m^m 'e ve

$$P_{m+1}^m(w) = (2m+1)wP_m^m(w) \quad (3.27)$$

formülünden

P_{m+1}^m 'e sahip oluruz; (3.27) formülü (3.26) ve (3.23)'den çıkar. Basitliğinden başka, (3.26) iyi nümerik kararlılık avantajına sahiptir.

(3.16)'da görülen $N_{l,m}$ çarpanı, birim modüllü bir faz çarpanından ayrı olarak,

$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\varphi = 1 \quad (3.28)$$

normalizasyon koşulu ile tayin edilir. Faz çarpanının alışlagelmiş seçimi ile küresel harmonikler şunlardır:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = c_m \left[\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (3.29)$$

Burada $m \geq 0$ için $c_m = (-1)^m$ ve $m < 0$ için $c_m = 1$ 'dir. Ne yazık ki c_m faz çarpanı bütün ders kitaplarında aynı seçilmez.

İlk dört küresel harmonik şunlardır:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}, \quad Y_{1,1} = -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{i\varphi}, \quad (3.30)$$

$$Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta, \quad Y_{1,-1} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

3.3 Program Yapma

Birleşik Legendre fonksiyonlarını PLM FONKSİYON alt programında hesaplarız [Çizelge 3.1 ve Çizelge 3.2]. Radyan cinsinden θ açısı, l açısal momentum kuantum sayısı ve m magnetik kuantum sayısı bu fonksiyona dönüştürülmelidir. $P_l^m(\cos \theta)$ fonksiyon değerleri elde edilir. $m < 0$ için program durur.

$w = \cos \theta$ ve $\bar{w} = \sin \theta$ 'nın (104. ve 108. Satırları) hesaplanmasından sonra, P_m^m (3.24)'den hesaplanır (109. Satır). Faktoriyel'in hesabı için FAK FONKSİYON alt programını kullanırız. $m = 0$ hali özel bir hal (105. Satır) olarak işleme alınır, çünkü $\bar{w} = 0^0$ terimi tanımlı değildir. $P_0^0(w) = 1$ (106. satır) sahip oluruz. 112. satırda (3.27) kullanılır ve 114. satırdan DO çevrimi içinde geriye kalan bütün polinomlar (3.26) tekrarlanmasından hesap edilirler.

Çizelge 3.1 PLM FONKSİYON alt programında kullanılan gösterim (Schmid, 1988)

Matematiksel Ad	Fortran Ad	Matematiksel Ad	Fortran Ad
l	L	w	W
m	M	$\bar{w}$	$WBAR$
$m!$	$FAK(M)$	θ	$THETA$
		$P_l^m(w)$	PLM

Çizelge 3.2 PLM Fonksiyon alt programı (Schmid, 1988)

DOUBLE PRECISION FUNCTION PLM(THETA, L, M)	100
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z)	101
IF (M. LT. 0)	102
* STOP' ERROR IN FUNCTION PLM: 0 ≤ M ≤ L VIOLATED'	103
W = COS (THETA)	104
IF (M. EQ. 0) THEN	105
P0 = 1.D0	106
ELSE	107
WBAR = SIN (THETA)	108
P0 = FAK (2*M) / (2.D0**M*FAK(M))*WBAR**M	109
ENDIF	110
IF (M. LE. L-1) THEN	111
P1= (2*M+1)*W*P0	112
IF (M. LE. L-2) THEN	113
DO 10 I = M+1, L-1	114
P2 = 1.D0 / (I-M+1)*((2*I+1)*W*P1-(I+M)*P0)	115
P0 = P1	116
P1 = P2	117
10 CONTINUE	118
END IF	119
PLM = P1	120
ELSE IF (M . EQ. L) THEN	121
PLM = P0	122
ELSE	123
PLM = 0	124
ENDIF	125
END	126

Çizelge 3.4 P2 ana programını gösterir. Kullanılan gösterim Çizelge 3.3'de bulunacaktır.

θ 'nın açısal aralığı için $[0, \pi]$ aralığını alırsak; bu aralığı

$$h = \frac{\pi}{i_\pi} \quad (3.31)$$

boyutlu i_π aralıklara böleriz. Ağ noktaları şunlardır:

$$\theta_i = ih, \quad 0 \leq i \leq i_\pi \quad (3.32)$$

209. satır ile 215. satır arasındaki DO çevriminde ağ noktaları tayin edilirler ve $Y_{i,m}(\theta_i, \varphi)$ 'nin reel ve sanal kısımları (3.29)'dan hesap edilirler; burada

$$e^{im\varphi} = \cos(m\varphi) + i\sin(m\varphi) \quad (3.33)$$

bağıntısından faydalanılır.

Çizelge 3.3. P2 ana programında kullanılan gösterim (Schmid, 1988)

Fiziksel Ad	Fortran Ad	Fiziksel Ad	Fortran Ad
π	PI	l	L
i_π	IPI	m	M
h	H	$ m $	$MABS$
c_m	CM	$l!$	$FAK(L)$
φ	PHI	$P_l^m(\cos\theta_i)$	$PLM[THETA(I), L, M]$
θ_i	$THETA(I)$	$\text{Re}[Y_{l,m}(\theta_i, \varphi)]$	$REY(I)$
		$I_m[Y_{l,m}(\theta_i, \varphi)]$	$IMY(I)$

Çizelge 3.4. P2 ana programın nümerik kısmı (Schmid, 1988)

PROGRAM P2	200
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z)	201
DOUBLE PRECISION IMY	202
PARAMETER (IPI = 180, PI = 3.1415926535 D0)	203
DIMENSION THETA(0:IPI), REY(0:IPI), IMY(0:IPI)	204
* INPUT OF L, M, PHI	
H = PI / IPI	205
MABS = ABS (M)	206
CM = 1.D0	207
IF (M.GE.0) CM = -(1.D0)**M	208
DO 10 I = 0,IPI	209
THETA(I) = I*H	210
REY(I) = CM*SQRT((2.D0*L+1.D0)*FAK(L-MABS) / (4.D0*PI*FAK(L	211
& +MABS)))*PLM(THETA(I), L, MABS)*COS(M*PHI)	212
IMY(I) = CM*SQRT((2.D0*L+1.D0)*FAK(L-MABS) / (4.D0*PI*FAK(L	213
& +MABS)))*PLM(THETA(I), L, MABS)*SIN(M*PHI)	214
10 CONTINUE	215
* OUTPUT OF REY, IMY	
END	216

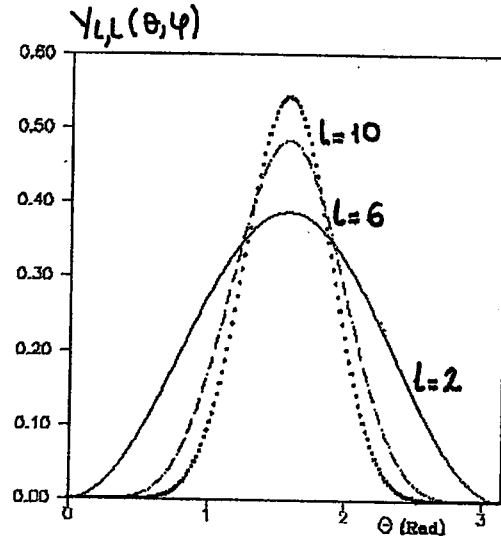
π ve π_i için değerler bir parametre yönergesi içinde belirtilirler (203. satır). l açısal momentum kuantum sayısı, m magnetik kuantum sayısı ve φ azimut açısı giriş değerleridir.

Çıkış olarak $0 \leq \theta \leq \pi$ bölgesinde karşılık gelen küresel harmoniğin $\text{Re}[Y_{l,m}(\theta, \varphi)]$ reel kısmını ve $\text{Im}[Y_{l,m}(\theta, \varphi)]$ sanal kısmını elde ederiz. Çıkış grafik formda ve istenirse nümerik formda verilir.

Küresel Harmonikler, L^2 ve L_z 'nin sabit özdeğerleri için kuantum mekaniksel dalga fonksiyonlarının açısal kısımlarıdır. Böyle dalga fonksiyonları ile hesap edilen olasılık yoğunluğu θ polar açısının bir fonksiyonudur, ama φ azimutal açuya bağlı değildir. L^2 ve L_z için özel değerlerle kuantum mekaniksel harekete benzer klasik mekaniksel hareket birim küre üzerinde bir dairesel yörüngedir. Klasik ve kuantum mekaniksel olasılık yoğunlukları arasındaki münasebeti ekvator ile aynı menzillere sahip olan klasik yörüngelerin hepsi üzerinden ortalama olarak kurabiliriz. Kanıtlama olarak yapay bir dünya uydusunu alabiliriz. Dünya yörüngesinde eksenini etrafında dönerken, bir ortalama konum olasılığı vardır. Aynı enlem derecesindeki bütün yerler için uydunun tepeden geçmesinin eşit olasılığı vardır.

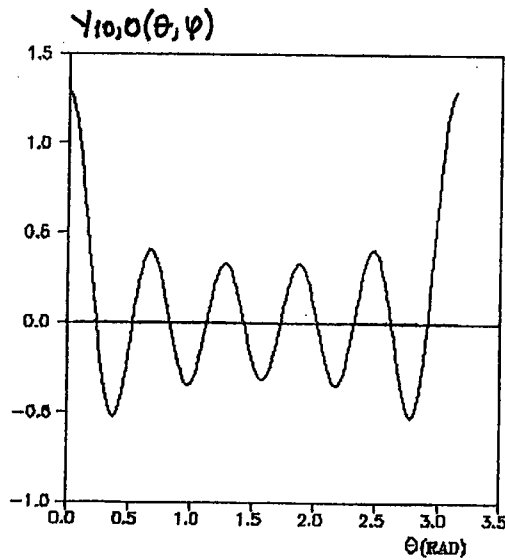
Aşağıdaki hallerde klasik hareket ve kuantum mekaniksel dalga fonksiyonları arasındaki münasebeti inceleyelim:

a) Ekvator boyunca klasik yörünge, $l = m(\neq 0)$ sahip küresel harmoniklerdir. Bu olayı görmek için Şekil 3.1'de $l = 2, 6$ ve 10 değerlerinde $Y_{ll}(\theta, \varphi)$ grafiklerini inceleyelim. Burada φ açısı, bütün küresel harmonikler için aynı basit $\exp(i m \varphi)$ davranışına sahiptirler.



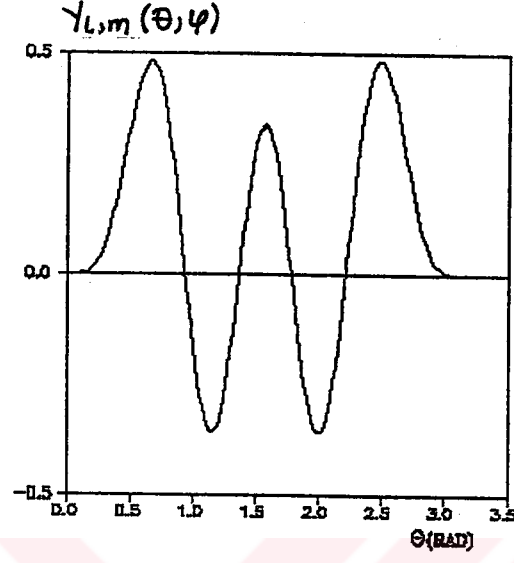
Şekil 3.1 $l=2, 6$ ve 10 değerleri için $Y_{ll}(\theta, \varphi)$ grafiği (Schmid, 1988)

b) Kutuplar üzerinde klasik yörünge, $l \neq 0, m = 0$ sahip küresel harmoniklerdir. θ açısına gelince kutuplardaki en büyük genliklere sahip olan dalga fonksiyonları elde edilir. Daha büyük l değerleri ile açık şekilde ekvatora doğru genliğin bir azalışı görülür (Şekil 3.2). Bu davranış şu hususa karşılık gelir: Kutup civarında yerleşme olasılığı ekvatorun civarında aynı alanda yerleşme olasılığından daha büyük olmak üzere (kutup yörüngesinde) bir uydu ile karşılaşılır. Küresel harmoniklerin mutlak değer karesinde meydana gelen minimumlar hiç bir klasik benzere sahip değildirler.



Şekil 3.2 $l=10$ ve $m=0$ değerleri için $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ grafiği (Schmid, 1988)

c) İki enlem dairesi arasındaki klasik yörünge, $l \neq 0$, $m \neq l$ küresel harmoniklerdir. Küresel harmonikler, klasik yörünge'nin ekvatora doğru geri dönmeden önce değdiği enlem dairelerinin civarında en büyük genliklere sahiptirler (Şekil 3.3).



Şekil 3.3 $l \neq 0$, $m \neq l$ değerlerinde $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ grafiği (Schmid, 1988)

4. KÜRESEL BESSEL FONKSİYONLARI

4.1 Problemin Formülasyonu

Daha önce

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + V(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (4.1)$$

tek-parçacık Schrödinger denkleminin çözümlerini incelemiştik. Bildiğimiz gibi, denklem iki parçacığın bağıl hareketi için de geçerlidir. Bu halde $\vec{r}$ iki parçacığın birbirine göre bağıl vektörü ve m indirgenmiş kütesidir. Küresel olarak simetrik bir potansiyel için (4.1) nispeten kolay şekilde çözülebilir. (r, θ, φ) küresel koordinatlar dahil edilir ve dalga fonksiyonu açısal momentum kısmi dalgalarına ayrılır (3. Bölüm):

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} \frac{1}{r} C_{l,m} u_l(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (4.2)$$

$u_l(r)$ radyal dalga fonksiyonları 2. Bölümde verilen yöntemle ve $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ küresel fonksiyonlar 3. Bölümde verilen yöntemle hesap edilebilirler.

Yine de birşey eksiktir. 2. Bölümde $u_l(r)$ radyal dalga fonksiyonunu sadece $[0, b]$ sonlu aralıkta hesapladık. Şayet tüm uzayda $\psi(r)$ çözümünü tayin etmek istersek, o zaman radyal dalga fonksiyonlarını $[b, \infty]$ aralığında devam ettirmeliyiz.

$V(r)$ potansiyelinin r 'nin büyük değerleri için kuvvetli şekilde azaldığını ve b 'yi, $V(r)$ $r > b$ için ihmal edilebilir olacak kadar büyük seçtiğimizi kabul ederiz. O zaman (2.3) radyal Schrödinger denklemi $[b, \infty]$ aralığında

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \bar{u}_l(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \bar{u}_l(r) = E \bar{u}_l(r) \quad (4.3)$$

serbest radyal denkleme değişir. Bu denklemin çözümleri bilinen analitik fonksiyonlardır. Bu fonksiyonları, Fox-Goodwin yöntemi ile $[0, b]$ aralığında hesaplanmış $u_l(r)$ çözümlerini $[b, \infty]$ aralığında devam etmek üzere kullanabiliriz.

Çözümlerin devam etmesi en basit olarak $l = 0$ halinde gösterilebilir. $l = 0$ için $[b, \infty]$ aralığında (4.3)'ün genel çözümü şudur:

$$\bar{u}_0(r) = a_0 \sin(kr + \delta_0) = a_0 [\cos(\delta_0) \sin(kr) + \sin(\delta_0) \cos(kr)] \quad (4.4)$$

burada

$$k = \frac{(2mE)^{1/2}}{\hbar} \quad (4.5)$$

dalga sayısıdır.

$r = b$ aralık sınırında (2.3) radyal denklemin $u_0(r)$ çözümü sürekli birinci türev ile $\bar{u}_0(r)$ serbest çözüme değişir. Bununla beraber, $u_0(r)$ fonksiyonunun birinci türevi bizce bilinmez. Onu $[0, b]$ aralığında çizelge haline getirilen fonksiyondan hesaplamalıyız. Mamafih, bunun yerine, türevin hesabından kaçınabiliriz ve basit olarak $[0, b]$ aralığının son iki $b - h$ ve b ağ noktasındaki $u_0(r)$ ve $\bar{u}_0(r)$ fonksiyonlarını eşitleyebiliriz:

$$\bar{u}_0(b - h) = a_0 \{ \cos(\delta_0) \sin[k(b - h)] + \sin(\delta_0) \cos[k(b - h)] \}$$

$$u_0(b) = a_0 \{ \cos(\delta_0) \sin[kb] + \sin(\delta_0) \cos[kb] \} \quad (4.6)$$

Bu iki denklemden a_0 ve δ_0 hesaplanabilir. Önce

$$\tan(\delta_0) = \frac{\sin[k(b - h)]u_0(b) - \sin(kb)u_0(b - h)}{-\cos[k(b - h)]u_0(b) + \cos(kb)u_0(b - h)} \quad (4.7)$$

elde edilir ve böylece δ_0 bulunur. δ_0 'a $l = 0$ açısal momentumun saçılma faz kayması adı verilir ve şu öneme sahiptir: $l = 0$ için (4.3) serbest radyal denklemin çözümü, orjindeki fiziksel sınır koşulu ile, $a_0 \sin(kr)$ 'dir ve δ_0 asimptotik bölgede serbest çözüme göre saçılma çözümünün faz kaymasıdır. Şayet δ_0 faz kaymasına sahip olunursa, o zaman $\sin(\delta_0)$ ve

$\cos(\delta_0)$ işaret dışında bilinirler ve işareti belirledikten sonra, a_0 genliği (4.6) denkleminde hesap edilebilir. a_0 genliği $u_0(r)$ 'nin normalizasyonuna bağlıdır.

Şimdi işlem yolunu $l \neq 0$ haline genişletmeliyiz. (4.3) denkleminin genel çözümü şudur:

$$\bar{u}_l(r) = a_l k r [\cos(\delta_l) j_l(kr) - \sin(\delta_l) n_l(kr)] \quad (4.8)$$

$j_l(kr)$ ve $n_l(kr)$ fonksiyonlarına düzenli ve düzensiz Küresel Bessel Fonksiyonları adı verilir. (4.8)'de kr çarpanının görünmesi bir gelenektir ve Küresel Bessel Fonksiyonlarının tanımının parçasıdır. Küresel Bessel fonksiyonları

$$R_l(r) = \frac{1}{r} \bar{u}_l(r)$$

tipli radyal fonksiyonlardır [(3.5) ve (3.7)'ye bakınız]. Düzenli, $j_l(kr)$ fonksiyonlarının koordinatların orijinindeki bir fiziksel koşulu sağladıkları anlamına gelir, halbuki $n_l(kr)$ fonksiyonları orjinde ıraksak olurlar ve asimptotik olarak düzenli fonksiyonlara göre $-\pi/2$ faz kaymasına sahip olurlar.

Küresel Bessel fonksiyonları analitik olarak iyi bilinen fonksiyonlardır. Onları hesaplayacağız ve inceleyeceğiz. Hesaplama için, onları türetmeksizin, tekrarlama formülünü kullanacağız.

Şayet (4.4) denklemi yerine (4.8) denklemini alırsak, $l = 0$ için olduğu gibi aynı yolla $l \neq 0$ için $r > b$ bölgesinde $u_l(r)$ radyal çözümlere devam edebiliriz. δ_l ve a_l 'yi tayin etmek için o zaman sadece (4.6) ve (4.7)'deki $\sin kr$ ve $\cos kr$ fonksiyonları yerine $kr j_l(kr)$ ve $-kr n_l(kr)$ fonksiyonlarını almalıyız. Şu denklemleri elde ederiz

$$\begin{aligned} u_l(b-h) &= a_l k(b-h) \{ \cos(\delta_l) j_l[k(b-h)] - \sin(\delta_l) n_l[k(b-h)] \} \\ u_l(b) &= a_l k b \{ \cos(\delta_l) j_l[kb] - \sin(\delta_l) n_l[kb] \} \end{aligned} \quad (4.9)$$

ve

$$\tan(\delta_l) = \frac{(b-h)j_l[k(b-h)]u_l(b) - b j_l(kb)u_l(b-h)}{(b-h)[k(b-h)]u_l(b) - b n_l(kb)u_l(b-h)} \quad (4.10)$$

$l = 0$ için bu denklemler (4.6) ve (4.7) olur.

Bizi ilgilendiren de Küresel Bessel fonksiyonlarının asimptotik formudur. $r \rightarrow \infty$ için şunlara sahip oluruz:

$$krj_l(kr) \rightarrow \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \quad (4.11)$$

ve

$$krn_l(kr) \rightarrow -\cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \quad (4.12)$$

Daha önce (4.8) denkleminde ifade edildiği gibi, hem $krj_l(kr)$ hem de $krn_l(kr)$ serbest hareketin (4.3) radyal denklemini sağlar. Merkezkaç potansiyelin sıfır olduğu, asimptotik rejimde, $krj_l(kr)$ ve $krn_l(kr)$ fonksiyonları (4.4) formu olmalıdırlar. Anlaşılır ki $-l\frac{\pi}{2}$ faz kayması merkezkaç kuvvetten kaynaklanır.

(4.9)'daki b uyuşma değerini çok büyük seçersek, o zaman Küresel Bessel fonksiyonları yerine (4.11) ve (4.12) asimptotik formlarını alabiliriz. (4.4)'ü uygulayarak o zaman asimptotik çözümümüzün

$$\bar{u}_l(r) \rightarrow a_l \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (4.13)$$

formuna sahip olduğunu görürüz. Bu, $l \neq 0$ için δ_l niceliğinin anlamını aydınlatır. δ_l , $V(r)$ potansiyeli ve merkezkaç potansiyele sahip Schrödinger radyal denkleminin fiziksel çözümü ile sadece merkezkaç kuvvete sahip Schrödinger radyal denkleminin çözümü arasındaki asimptotik faz farkıdır.

4.2 Matematiksel Yöntem

Önceki bölümde küresel harmonikler için olduğu gibi, Bessel fonksiyonlarının hesaplanmasını bir tekrarlama formülü ile başaracağız. Küresel Bessel fonksiyonları sadece kr çarpımına bağlı olduğundan, şunu yazacağız:

$$x = kr \quad (4.14)$$

(4.8)'in (4.4) ile karşılaştırmasıyla $l = 0$ için aşağıdaki bağıntıların geçerli oldukları görülür:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x} \quad (4.15)$$

$l = 1$ için

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x} \quad (4.16)$$

sahip oluruz. Birbirini izleyen Küresel Bessel fonksiyonları şu tekrarlama formülünden hesaplanabilirler:

$$f_{l+1}(x) = \frac{2l+1}{x} f_l(x) - f_{l-1}(x) \quad (4.17)$$

Burada $f_l(x)$, ya $j_l(x)$ 'ı ya da $n_l(x)$ 'ı gösterir.

Bu formül ile düzenli Küresel Bessel fonksiyonlarının hesaplanması l 'nin büyük değerleri için orjin yakınında nümerik olarak kararlı değildir. Tekrarlanmanın her bir adımında yuvarlanan hataları biriktiren ve büyüten, hemen hemen aynı miktarların çıkarmasını dahil eder. Onun için grafiksel taktimde $0 \leq x \leq 0,2$ aralığını ihmal edeceğiz. Nümerik çıkış kararsızlığı gösterecektir. Fonksiyonun orjin civarındaki gerçek profili gayet basittir. Kuvvet seri açılımını tekrarlama formülünde yerine koyarak görülebildiği gibi, $x \rightarrow 0$ için

$$j_l(x) \rightarrow \frac{x^l}{1.3.5 \dots (2l+1)} \quad (4.18a)$$

$$n_l(x) \rightarrow \frac{1.3.5...(2l-1)}{x^{l+1}} \quad (4.18b)$$

sahip olunur.

Matematiksel literatürde, J_l Küresel Bessel fonksiyonlarının yerine ekseriya J_{ν} Bessel fonksiyonları bulunur; aralarındaki bağıntı şudur:

$$J_l(x) = \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(x) \quad (4.19)$$

(4.3)'de yerine koyma ve izleyen işlemler ile gösterilebildiği gibi, J_{ν} şu diferansiyel denklemi sağlar:

$$x^2 J_{\nu}''(x) + x J_{\nu}'(x) + (x^2 - \nu^2) J_{\nu}(x) = 0 \quad (4.20)$$

Bu denklem, Bessel Diferansiyel Denklemi olarak bilinir.

4.3 Program Oluşturma

Düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel fonksiyonlarının hesaplanması için iki fonksiyon alt programını oluştururuz. Birinci alt programa BESJ, ikinci alt programa BESN deriz (Çizelge 4.1, Çizelge 4.2, Çizelge 4.3, Çizelge 4.4). Her iki program aynı formal kurguya sahip olduklarından ve ayrıca oldukça açık olduklarından, onları birlikte tartışabiliriz.

Çizelge 4.1 BESJ FONKSİYON alt programında kullanılan gösterim.

Fiziksel Ad	Fortran Ad	Fiziksel Ad	Fortran Ad
X	X	l	L
		$j_l(x)$	$BESJ$

Çizelge 4.2 BESJ FONKSİYON alt programı

DOUBLE PRECISION FUNCTION BESJ(X,L)	100
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z)	101
IF (X.LE.0.D0) STOP	102
& 'ERROR IN SUBROUTINE BESJ: X > 0 NOT SATISFIED'	103
B0 = SİN(X) / X	104
BESJ = B0	105
IF (L. GE. 1) THEN	106
B1 = SİN(X) / (X*X) – COS(X) / X	107
BESJ = B1	108
IF (L. GE. 2) THEN	109
DO 10 I = 1, L-1	110
BESJ = (2*I+1) / X*B1 – B0	111
B0 = B1	112
B1 = BESJ	113
10 CONTINUE	114
ENDIF	115
ENDIF	116
END	117

Çizelge 4.3 BESN FONKSİYON alt programında kullanılan gösterim.

Fiziksel Ad	Fortran Ad	Fiziksel Ad	Fortran Ad
X	X	l	L
		$n_l(x)$	$BESN$

Çizelge 4.4 BESN FONKSİYON alt programı

DOUBLE PRECISION FUNCTION BESN(X,L)	200
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z)	201
IF (X.LE.0.D0) STOP	202
& 'ERROR IN SUBROUTINE BESN: X > 0 NOT SATISFIED'	203
B0 = - COS(X) / X	204
BESN = B0	205
IF (L. GE. 1) THEN	206
B1 = - COS(X) / (X*X) – SİN(X) / X	207
BESN = B1	208
IF (L. GE. 2) THEN	209
DO 10 I = 1, L-1	210
BESN = (2*I+1) / X*B1 – B0	211
B0 = B1	212
B1 = BESN	213

10	CONTINUE	214
	ENDIF	215
	ENDIF	216
	END	217

$l = 0$ ve $l = 1$ için Küresel Bessel Fonksiyonları (4.15) ve (4.16)'dan hesap edilirler [104. ve 107., 204. ve 207. satırlar]. l 'nin daha büyük değerleri için (4.17) tekrarlama formülü uygulanır [111. ve 211. satır]. P3 ana programda (Çizelge 4.5 ve Çizelge 4.6) [0, b] aralığını i_b sayıda alt aralıklara böleriz, böylece ağ genişliği

$$h = \frac{b}{i_b} \quad (4.21)$$

olur (305.satır). Ağ noktalarını

$$x_i = ih, \quad 1 \leq i \leq i_b \quad (4.22)$$

tain ederiz (307. satır).

Çizelge 4.5 P3 ana programında kullanılan gösterim

Fiziksel Ad	Fortran Ad	Fiziksel Ad	Fortran Ad
i_b	<i>IB</i>	L	<i>L</i>
b	<i>B</i>	$J_l(x_l)$	<i>BESJ(L)</i>
h	<i>H</i>	$N_l(x_l)$	<i>BESN(L)</i>
x_l	<i>X(I)</i>		

Çizelge 4.6 P3 ana programının nümerik kısmı

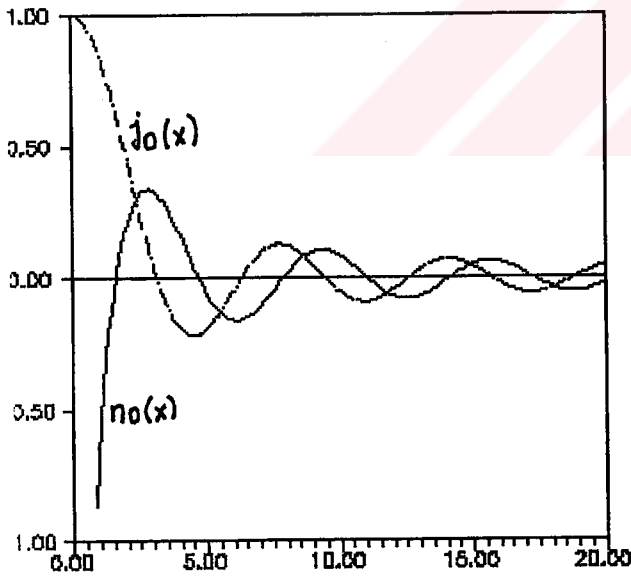
PROGRAM P3	300
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z)	301
DOUBLE PRECISION JL, NL	302
PARAMETER (IB = 200, B = 20.D0)	303
DIMENSION JL(IB), NL(IB), X(IB)	304
• (INPUT: L)	
H = B / IB	305
DO 20 I = 1, IB	306

$X(I) = I * H$	307
$H1 = X(I)$	308
$JL(I) = BESJ(H1, L)$	309
$NL(I) = BESN(H1, L)$	310
20 CONTINUE	311
• (OUTPUT: JL, NL)	
END	312

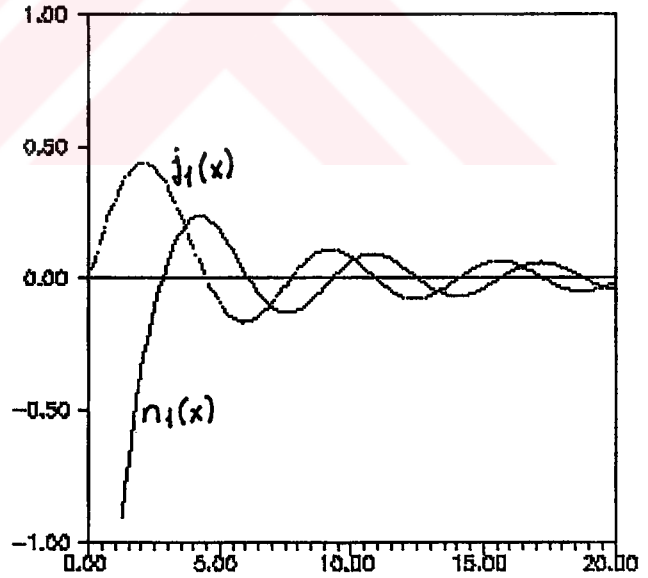
Sonra ağ noktalarındaki Küresel Bessel Fonksiyonlarının fonksiyon değerlerinin hesaplanması BESJ ve BESN FONKSİYON alt programlarını çağırarak elde edilir [309. ve 310. satırlar].

$b = 20$ ve $i_b = 200$ değerleri parametre satırı içinde belirtilirler (303. satır). Tek giriş, l açısai momentum kuantum sayısıdır. Çıkış olarak l 'nin bu değerine ait olan $j_l(x)$ ve $n_l(x)$ Küresel Bessel Fonksiyonları elde edilir.

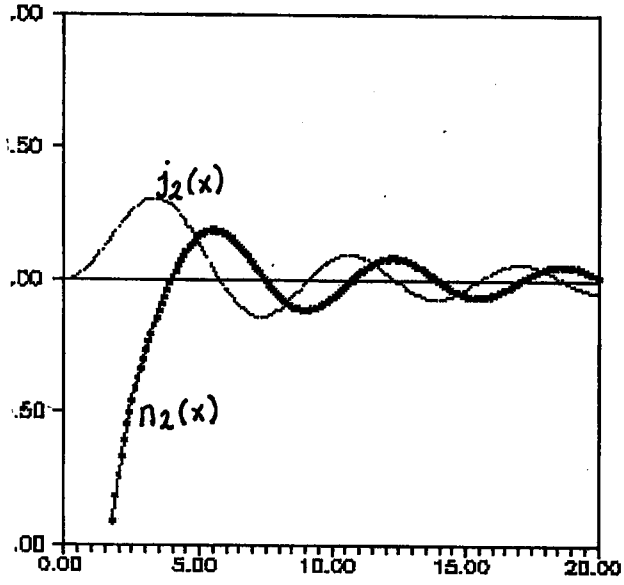
Bu bölümün uygulaması olarak, sırasıyla $l = 0, 1, 2$ ve 10 için düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel Fonksiyonları Şekil 4.1 - Şekil 4.4' de gösterilir.



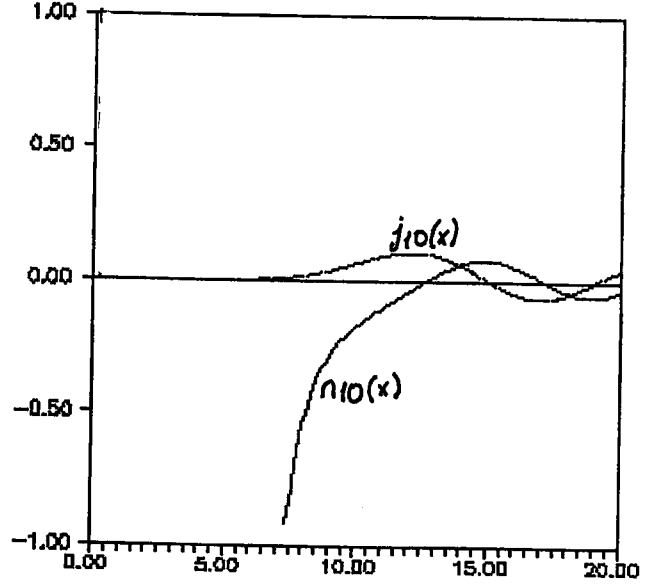
Şekil 4.1: $l=0$ değeri için düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel fonksiyonlarının grafik formu



Şekil 4.2: $l=1$ değeri için düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel fonksiyonlarının grafik formu



Şekil 4.3: $l=2$ değeri için düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel fonksiyonlarının grafik formu

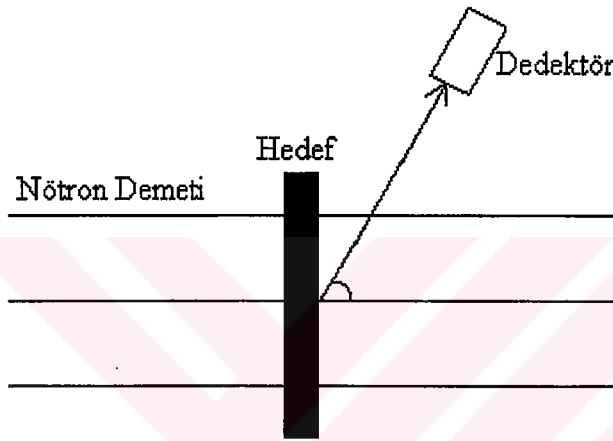


Şekil 4.4: $l=10$ değeri için düzenli ve düzenli olmayan Küresel Bessel fonksiyonlarının grafik formu

5. KÜRESEL ŞEKİLDE SİMETRİK BİR POTANSİYELDEN YÜKSÜZ BİR PARÇACIĞIN SAÇILMASI

5.1 Problemin Formülleştirilmesi

2, 3 ve 4'üncü bölümlerde gözönüne alınan yöntemlerle şimdi bir diferansiyel saçılma tesir kesitini hesaplamak durumundayız. Nötronların ortam veya ağır atom çekirdekleri tarafından esnek saçılması için basit bir optik modeli gözönüne alacağız.



Şekil 5.1 Bir saçılma deneyinin şematik düzenlenişi (Schmid, 1988)

Fiziksel durumun taslağı Şekil 5.1'de çizilir. Bir parçacık hızlandırıcısı ve ilk nükleer reaksiyon ile tek enerjili nötron demeti hasıl edilir. Bir hedef odası içinde nötron demeti hedef çekirdeklerini ihtiva eden ince bir yaprak üzerine düşer. Bir nötron bir hedef çekirdeğe çarptığı zaman, nötron ilk doğrultusundan θ saçılma açısı ile yansıtılır. Bir nötron sayıcısı saçılan nötronları saymak üzere bir mil kolu üzerine monte edilir. Belirli bir zaman aralığında ölçülen sayı θ saçılma açısına, nötron demetinin şiddetine, yaprak üzerindeki hedef çekirdeklerin yoğunluğuna ve saçılma merkezine göre sayıcı deliğinin $d\Omega$ katı açısına bağlıdır. Ne nötronlar ne de hedef çekirdekleri kutuplanmamış ise, o zaman saçılma işlemi demetin eksenine etrafında dönmesine göre simetrik, yani ϕ azimutal açıdan bağımsızdır.

Bizi ilgilendiren bir nötronun bir θ açısı ile yansıtılması olasılığıdır. Bu olasılığın bir ölçüsü olarak kavramsal bir nicelik, (diferansiyel saçılma tesir kesiti adı verilen) dahil edilmektedir. $d\sigma$ delikli küçük bir diagram, gelen nötron demeti içine yerleştirilir. Bu diagram tam olarak

$d\Omega$ katı açılı bir deliğe sahip sayıcı içine bir hedef çekirdek tarafından saçılan bir çok nötronu, kestiği takdirde, o zaman

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{diferansiyel saçılma tesir kesitine} \quad (5.1)$$

sahip oluruz.

Diferansiyel saçılma tesir kesiti θ saçılma açısının bir fonksiyonudur ve ayrıca gelen nötronların enerjisine ve hedef çekirdeklerin doğasına bağlıdır. Hafif çekirdeklerle diferansiyel saçılma tesir kesiti ayrıca referans sistemi olarak laboratuvar sisteminin veya kütle merkezi sisteminin seçilip seçilmemesine bağlıdır; laboratuvar sisteminde hedef çekirdekler durgun haldedirler ve kütle merkezi sisteminde nötron – çekirdek sisteminin kütle merkezi durgun haldedir. Ortamı veya ağır hedef çekirdeklerini gözönüne aldığımızdan, bu ayrım mesele değildir.

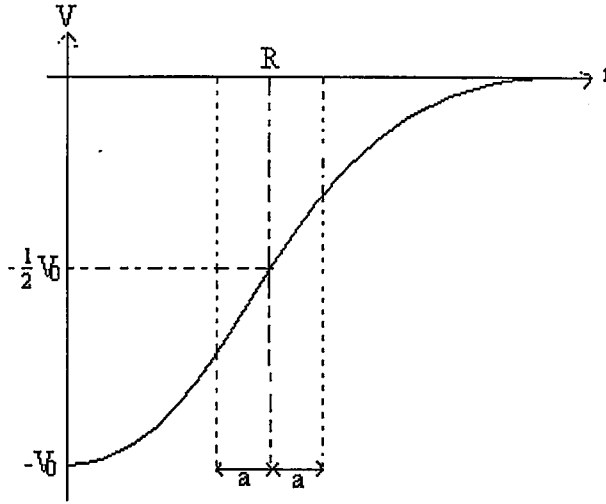
Saçılma işlemi kuramsal olarak Shrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) + V(r) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (5.2)$$

ile tasvir edilebilir. $\vec{r}$ vektörü nötronun hedef çekirdeğe göre konumunu gösterir. $V(r)$ küresel şekilde simetrik potansiyel çekirdeğin nötron üzerindeki etkisini temsil eder. $V(r)$ için Woods – Saxon potansiyelini,

$$V(r) = \frac{-V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R}{a}\right)} \quad (5.3)$$

seçeriz; bu potansiyelin formu Şekil 5.2’de gösterilir.

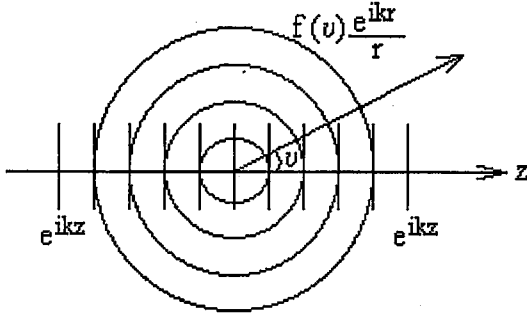


Şekil 5.2 Woods – Saxon potansiyel formu (Schmid, 1988)

Ölçülmüş bir diferansiyel tesir kesitinin gerçekçi bir analizi için potansiyel ayrıca bir spin – orbital terim olduğu gibi bir sanal kısma sahip olmalıdır. Bununla birlikte, kendimizi (5.3) potansiyeline sınırlarız ve bu nedenle de tam olarak makul bir diferansiyel saçılma tesir kesiti elde edeceğiz.

Evvelce bir kaç kez ifade edildiği gibi, (5.2) Shrödinger denkleminin çözümünü tayin etmek için sınır koşullarına ihtiyaç duyulur. Bununla birlikte, sınır koşullarının teminine eşdeğerli olan $\Psi(r)$ dalga fonksiyonunun asimptotik formunun belirlenmesidir. Bu alternatif olarak matematiksel tasvir içine deneysel kurgu hakkında bilgiler dahil etmemizi sağlar.

Şekil 5.3’de taslağı çizildiği gibi, nötron demetini bir $\exp(ikz)$ düzlem dalga ile tasvir elde ederiz. Bu düzlem dalga, momentum vektörünün z eksenine doğrultusunda olduğu, momentumun bir özhalidir. Potansiyel sadece bir saçılan dalga hasıl ederek düzlem dalgayı biraz değiştirebilir. Saçılan dalga giden bir nötronu tasvir etmelidir, yani r ’ye göre $\exp(ikr) / r$



Şekil 5.3 Saçılma çözümünün asimptotik formu (Schmid, 1988)

formuna sahip olmalıdır. Saçılan dalganın f genliği θ saçılma açısına bağlı olabilir. O halde $\Psi(r)$ dalga fonksiyonunun şu asimptotik forma sahip olmasını isteriz:

$$r \rightarrow \infty \text{ için } \Psi(\vec{r}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (5.4)$$

Burada k , (4.5)'de dahil edilen dalga sayısıdır. Bu, her bir gelen nötronun nötron kaynağından gelmesini ve her bir giden nötronun ya saçılmış olmasını ya da hedefi sapmaksızın geçmiş olmasını temin eder. φ açısı saçılma genliğinde görünmez, çünkü küresel olarak simetrik $V(r)$ potansiyeli nötrona z eksenini etrafında hiçbir momentum veremez.

$\Psi(r)$ dalga fonksiyonunun (5.4) asimptotik formundan, diferansiyel saçılma kesiti çıkarılabilir. Dalga fonksiyonunun mutlak değerinin karesi nötron olasılık yoğunluğu ile orantılı olduğundan,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (5.5)$$

elde edilir. Burada bilinen şu kabulü yaparız: asimptotik bölgede saçılan dalga ve düzlem dalga arasındaki girişim terimleri ihmal edilebilir, zira bu terimler nötron demetinin sonsuza uzanan bir düzlem dalga ile idealleştirilmesinden ortaya çıkarlar. O halde (5.4) asimptotik

forma sahip olan, (5.2)'nin bir $\Psi(r)$ çözümünü bulmayı başarabilirsek, diferansiyel saçılma tesir kesitini elde ederiz.

Önceki bölümlerde bir $V(r)$ potansiyeli ile ve o olmaksızın (r, θ, φ) küresel koordinatlarda (5.2) Shrödinger denkleminin kısmi çözümlerinin nasıl hesaplanacağını öğrenmiştik. Şimdi (5.4) asimptotik formu ile bir bileşke çözüm elde etmek üzere kısmi çözümleri üstüste bindirmeliyiz.

5.2 Saçılma Probleminin Matematiksel İşleme Alınması

$\Psi(r)$ dalga fonksiyonunun (4.2) kısmi dalga ayrılmasından yola çıkacağız ve $u_l(r)$ radyal fonksiyonları için (4.13) asimptotik formu yerine koyacağız. Böylece asimptotik bölgede geçerli olan şu açılımı elde edeceğiz:

$$\Psi(\vec{r}) \rightarrow \sum_{l,m} c_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)}{kr} \quad (5.6)$$

$c_{l,m}$ açılım katsayıları sınır koşulları ile tayin edilirler. Saçılma sistemimiz için geçerli sınır koşulları (5.4)'de ihtiva edilirler, yani $c_{l,m}$ katsayılarını (5.4) ve (5.6)'dan dalga fonksiyonları asimptotik olarak çıkışacak şekilde seçmeliyiz. Bunu (5.4)'deki $\Psi(\vec{r})$ 'yi kısmi dalgalara açarak ve katsayıları eşitleyerek başarırız.

Herşeyden önce $m \neq 0$ olmak üzere $c_{l,m}$ 'lerin hepsinin sıfır oldukları görülür, çünkü (5.4)'deki $\Psi(\vec{r})$ sadece r ve θ 'ya bağlıdır, ama φ 'den bağımsızdır. O halde sadece c_{l0} katsayılarını hesaplamalıyız.

(5.4)'deki düzlem dalganın küresel dalgalara açılımı şudur:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (5.7)$$

(4.11)'den, $r \rightarrow \infty$ için şuna sahip oluruz:

$$krj_l(kr) \rightarrow \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2ikr} \left(e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)} \right) = \frac{1}{2ikr} \left((-i)^l e^{ikr} - i^l e^{-ikr} \right) \quad (5.8)$$

O halde $r \rightarrow \infty$ için

$$e^{ikz} = \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right) P_l(\cos \theta) \quad (5.9)$$

yazabiliriz. (5.4)'teki saçılan dalga da, $f(\theta)$ 'yı Legendre polinomlarına açarak, kısmi dalgalara ayrılabilir ve

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) b_l P_l(\cos \theta) \quad (5.10)$$

yazarız; burada, izleyen hesabı kolaylaştırmak için, $\frac{2l+1}{2ik}$ çarpanını b_l katsayılarının dışına aldık. Bunlarla birlikte, $r \rightarrow \infty$ için

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left((1+b_l) e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right) P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (5.11)$$

elde ederiz.

Şimdi büyük parantez içindeki ifade saçılma faz kaymasına doğrudan ilişkili olur. (4.13)'e uygun olarak $r \rightarrow \infty$ için radyal Schrödinger denkleminin çözümü şu forma sahiptir:

$$\begin{aligned}
u_l(r) &\rightarrow a_l \sin\left(kr - l\pi/2 + \delta_l\right) = a_l \frac{1}{2i} \left[(-i)^l e^{ikr} e^{i\delta_l} - i^l e^{-ikr} e^{-i\delta_l} \right] \\
&= a_l \frac{(-i)^l}{2i} e^{-i\delta_l} \left[e^{ikr} e^{2i\delta_l} - (-1)^l e^{-ikr} \right]
\end{aligned} \tag{5.12}$$

a_l sabitleri keyfi olarak seçilebildiklerinden, büyük parantezin önündeki çarpan hakkında problem yoktur. (5.11) ve (5.12)'nin büyük parantezleri içindeki ifadeleri doğrudan doğruya karşılaştırabiliriz ve saçılma genliğinin b_l açılım katsayıları ve δ_l saçılma faz kayması arasındaki şu bağıntıyı elde edebiliriz:

$$b_l = e^{2i\delta_l} - 1 \tag{5.13}$$

(5.10)'dan şunu çıkarırız:

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos\theta) \\
&= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) P_l(\cos\theta) \\
&= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (\cos(\delta_l) \sin(\delta_l) + i \sin^2(\delta_l)) P_l(\cos\theta) \\
&= \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin(2\delta_l) P_l(\cos\theta) = \frac{i}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l) P_l(\cos\theta)
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Sonra (5.5)'e göre diferansiyel saçılma tesir kesitini

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) P_l(\cos\theta) \right|^2 \tag{5.15}$$

olarak elde ederiz veya ayrıntılı olarak

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (\text{Re}[f(\theta)])^2 + (\text{Im}[f(\theta)])^2 \quad (5.16)$$

yazarız; burada

$$\text{Re}[f(\theta)] = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin(2\delta_l) P_l(\cos \theta) \quad (5.17a)$$

ve

$$\text{Im}[f(\theta)] = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l) P_l(\cos \theta) \quad (5.17b)$$

demektir.

Fiziksel olarak ilginç olan bundan sonraki bir büyüklük, diferansiyel saçılma tesir kesitini katı açı üzerinden integre ederek, elde edilen toplam saçılma tesir kesitidir. Toplam tesir kesiti, hedef çekirdeğin gelen demetten kestiği alan olarak anlaşılabilir.

σ toplam saçılma tesir kesitinin hesabı için Legendre polinomlarının ortogonalite bağıntısına ihtiyaç duyarız:

$$\int_{-1}^1 P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (5.18)$$

O zaman (5.15)'den şunu elde ederiz:

$$\begin{aligned}
\sigma &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) d\Omega \\
&= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) d(\cos \theta) = 2\pi \int_{-1}^1 \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) d(\cos \theta) \\
&= \frac{2\pi}{k^2} \int_{-1}^1 \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) P_l(\cos \theta) \right|^2 d(\cos \theta) \\
&= \frac{2\pi}{k^2} \int_{-1}^1 \sum_{l,l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin(\delta_l) \sin(\delta_{l'}) \\
&\quad \times P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d(\cos \theta) \\
&= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l)
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Toplam tesir kesiti için tek tek kısmi dalgaların katkıları toplanırlar, halbuki diferansiyel tesir kesiti için girişim terimleri meydana gelir. Bunu şu şekilde yorumlayabiliriz: Her bir özel açı için tesir kesitine farklı kısmi dalgaların girişiminden doğan bir katkı vardır. Bu girişim terimleri katı açılar üzerinden ortalama almada sıfır olurlar, zira farklı açısal momentum kuantum sayılarına sahip kısmi dalgalar birbirlerine diktirler.

(5.19) ve (5.17b)'yi karşılaştırsak ve bütün $l \geq 0$ için

$$P_l(1) = 1 \tag{5.20}$$

olmasını hesaba alırsak, o zaman “Optik Teorem” olarak bilinen bir bağıntıyı gerçekleştiririz:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}[f(0)] \quad (5.21)$$

5.3 Program Yapma

Saçılma tesir kesitini hesaplama için programımızda önceki bölümlerde kurulmuş olan muhtelif altprogramları kullanabiliriz.

4. bölümden BESJ ve BESN alt programlarından ve 3. bölümden PLM alt programından faydalanacağız.

(5.3)'den potansiyeli hesaplamak için V FONKSİYON altprogramını yazarız (Çizelge 5.2). Aşağıdaki potansiyel parametrelerini kullanırız:

$$V_0 = V_1 - V_2 E - \left(1 - \frac{2Z}{A}\right) V_3 \quad (5.22a)$$

$$V_1 = 56.3 \text{ MeV}, V_2 = 0.32 \text{ MeV}, V_3 = 24.0 \text{ MeV} \quad (5.22b)$$

$$R = r_0 A^{1/3}, r_0 = 1.17 \text{ fm} \quad (5.22c)$$

$$a = 0.75 \text{ fm} \quad (5.22d)$$

Burada A hedef çekirdeğin kütle numarası ve Z yük numarasıdır ve E gelen nötronun kinetik enerjisidir. Parametre değerleri $E \leq 50 \text{ MeV}$ ve $A \geq 40$ bölgesinde geçerlidirler.

V FONKSİYON altprogramı Çizelge 5.1 ve Çizelge 5.2'de görülürler. Sabit tutulan parametre değerleri PARAMETRE satırında belirtilirler (103. Satır). IF bloğu (107 –111 satırları) mümkün olabilecek üs aşmasını önler.

Çizelge 5.1 V Fonksiyon alt programında kullanılan gösterim (Schmid, 1988)

Fiziksel Ad	Fortran Ad	Fiziksel Ad	Fortran Ad
V ₁	V1	E	E
V ₂	V2	A	A
V ₃	V3	Z	Z
A	A0	R	R
r ₀	R0	R	R1
V ₀	V0		

Çizelge 5.2 V Fonksiyon alt programı (Schmid, 1988)

DOUBLE PRECISION FUNCTION V(R, E, A, Z)	100
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z)	101
INTEGER A, Z	102
PARAMETER (V1= 56.3D0, V2= 0.32D0, V3= 24.D0, R0= 1.17D0, AO= 0.75D0)	103
PARAMETER (EXPMAX= 700.D0)	104
V0 = V1-V2*E-V3*(1.D0-(2.D0*Z)/A)	105
R1 = R0*A**(1.D0/3.D0)	106
IF ((R-R1)/AO.LE.EXPMAX) THEN	107
V= -V0/(1.D0+EXP((R-R1)/AO))	108
ELSE	109
V = 0.D0	110
ENDIF	111
END	112

Çizelge 5.4, ana programın sayısal kısmını gösterir; kullanılan gösterim Çizelge 5.3'de gösterilir. Daha önce ifade edildiği gibi, nötronun bir ortam veya ağır atom çekirdeği tarafından saçılmasını gözönüne alıyoruz. Bu halde m indirgenmiş kütle m_N nötron kütesinden çok farklı değildir. Yine de

$$m = \frac{m_N m_K}{m_N + m_K} \quad (5.23)$$

indirgenmiş kütle ile hesaplayacağız. Çekirdeğin m_K kütesi için $m_K = A[u]$ yaklaşıklığını kullanacağız (u atomik kütle birimidir). Atomik birim cinsinden m_N nötron kütesi ve ($\text{MeV } u$)^{1/2} birimlerinde $\hbar$ PARAMETRE satırında belirtilir. Buna uygun olarak 208. satırda $\frac{\hbar^2}{2m}$ sabitini ve 209. satırda (4.5)'den dalga sayısını elde ederiz. Radyal Schrödinger denkleminin çözümü için 2. Bölümde ortaya konulan

yöntemi kullanırız. $[0, b]$ aralığında h_b genişlikli i_b sayıda göz noktası dahil ederiz (212. Satır). Fox – Goodwin yöntemi ile radyal Schrödinger denkleminin integrasyonu 220. – 227: satırlarda takip eder. Sadece son iki b ve $(b - h_b)$ göz noktasında $u_l(r)$ çözümüne ihtiyaç duyduğumuzdan, bütün göz noktalarındaki fonksiyon değerlerini hesap edebilecek olan Fox altprogramını kullanmalıyız. Hesaplama süresinde tasarruf yapmak için göz noktalarındaki potansiyel değerlerini sadece bir kez hesaplarız ve onları $VV(I)$ düzeninde depolarız (213. Satır).

Çizelge 5.3 Ana programda kullanılan gösterim (Schmid, 1988)

<i>Fiziksel Ad</i>	<i>Fortran Ad</i>	<i>Fiziksel Ad</i>	<i>Fortran Ad</i>
h_b	HB	r_i	RR(I)
b	B	$v(r_i)$	VV(RR(I))
i_b	IB	$W(r_i+1)$	W2
h_π	HPI	$U(r_i+1)$	U2
π	PI	$w(r_i), u(r_i)$	W1, U1
l_π	IPI	$w(r_i-1), u(r_i-1)$	W0, U0
$\hbar$	HBAR	$j_l(x)$	BESJ(L, X)
$\hbar^2/2m$	H2M	$n_l(x)$	BESN(L, X)
m_n	MN	δ_l	DELTA(L)
A	A	$P_l(\cos x)$	PLM(X, L, O)
Z	Z	θ_i	THETA(I)
k	K	$P_l(\cos \theta_i)$	PLTH
E	E	$Re[f(\theta_i)]$	REF
l	L	$Im[f(\theta_i)]$	IMF
l_p	LP	$d\sigma/d\Omega(\theta_i)$	DSIGMA(I)
l_{max}	LMAX	σ	SIGMA

Fox – Goodwin tekrarlamasının yapılmasından sonra, $u_l(b - h_b)$ ve $u_l(b)$ fonksiyon değerleri elde edilebilirler ve $U0$ ve $U1$ ile gösterilir. Bu değerlerden δ_l saçılma faz kayması BESJ ve BESN Fonksiyon altprogramları kullanılarak (229 – 231. satırlar), (4.10)'a uygun olarak hesaplanır. Saçılma faz kaymasının hesabı olduğu gibi radyal dalga fonksiyonunun hesabı da $l = 0$ 'dan $l = l_p$ 'ye kadar bütün açısal momentum kuantum sayıları için bir DO döngüsü içerisinde (215. – 232. satırlar) başarılırlar.

Çizelge 5.4 ana programın sayısal kısmı (Schmid, 1988)

PROGRAM	200
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z)	201
DOUBLE PRECISION IMF, K, MN	202
INTEGER A, Z	203
PARAMETER (LMAX= 18, IPI= 90, PI= 3.1415926535D0, IB= 500, B=20.D0)	204
PARAMETER(HBAR=6.4655D0, MN=1.008665D0)	205
DIMENSION VV(IB), RR8IB)	206
DIMENSION HETA(0:IPI), DSIGMA(0:IPI), DELTA(0: LMAX)	207
• (INPUT: A, Z, E, LP)	
H2M = HBAR*HBAR*(MN+A) / (2.D0*MN*A)	208
K = SQRT (E / H2M)	209
HB = B / IB	210
DO 10 I = 1, IB	211
RR(I) = I*HB	212
VV(I) = V(RR(I), E, A, Z)	213
10 CONTINUE	214
DO 30 L = 0, LP	215
W0 = 0.D0	216
W1 0 (E-VV(1)) / H2M-L*(L+1) / (HB*HB)	217
U0 = 0.D0	218
U1 = 1.D0	219
DO 20 I= 1, IB-1	220
W2 = (E-VV(I+1) / H2M-L*(L+1) / (RR(I+1)*RR(I+1))	221
U2 = (2.0*U1-U0-HB*HB / 12.D0* (10.D0*W1*U1+W0*U0))	222
& / (1.D0+HB*HB / 12.D0*W2)	223
W0 = W1	224
W1 = W2	225
U0 = U1	226
U1 = U2	227
20 CONTINUE	228
A1 = (B-HB)*BESJ(K*(B-HB),L)*U1-B*BESJ(K*B,L)*U0	229
A2 = (B-HB)*BESN(K*(B-HB),L)*U1-B*BESN(K*B,L)*U0	230
DELTA(L) = ATAN(A1 / A2)	231
30 CONTINUE	232
HPI = PI / IPI	233
DO 50 I = 0, IPI	234
THETA(I) = I* HPI	235
REF = 0.D0	236
IMY = 0.D0	237
DO 40 L =0, LP	238
PLH = PLM(THETA(I), L, 0)	239
REF = REF+0.5D0 / K* (2.D0*L+1.D0)*SIN(2.D0*DELTA(L))*PLTH	240
IMF = IMF+0.5D0 / K* (2.D0*L+1.D0)*(SIN(DELTA(L)))**2**PLTH	241
40 CONTINUE	242
DSIGMA(I) = (REF*REF+IMF*IMF)	243
IF (I.EQ.0) SIGMA = 4.D0*PI / K*IMF	244
50 CONTINUE	245

• (OUTPUT: DSIGMA, SIGMA)
END

246

$f(\theta)$ saçılma genliğinin reel ve sanal kısımlarının (4.17)'den hesaplanması 240. ve 241. satırlarda yer alır. θ saçılma açısı $[0, \pi]$ aralığında i_π göz noktası ile bölünür.

$h_\pi = \frac{\pi}{i_\pi}$ göz genişliği 233. satırda hesaplanır. (5.17)'deki Legendre polinomları PLM

Fonksiyon altprogramı (239. satır) çağrılarak hesap edilirler. PLM programı sadece $P_l^m(\cos\theta)$ birleşik Legendre fonksiyonlarını değil aynı zamanda $P_l(\cos\theta) \equiv P_l^0(\cos\theta)$ Legendre polinomlarını da hesaplamak için uygundur. (5.17)'deki sonsuz toplam $l = l_p$ 'de budanır; burada l_p sıraları boyutlandırmada kullanılan l_{max} maksimum açısal momentum kuantum sayısından daha büyük olmayabilir.

(5.16) ve (5.21)'i kullanarak, saçılma genliğinden son olarak $d\sigma/d\Omega$ diferansiyel saçılma tesir kesiti ve σ toplam kesit elde edilir (243. ve 244. satırlar).

204. ve 205. satırlardaki parametre ile şu nicelikler belirlenirler: üst aralık sınırı $b = 20 \text{ fm}$, $[0, b]$ aralığındaki alt aralıkların sayısı $i_b = 500$, $[0, \pi]$ aralığındaki alt aralıkların sayısı $i_\pi = 90$, maksimum açısal momentum kuantum sayısı $l_{max} = 18$, $\hbar = 6.4655 \text{ fm (MeV)}^{1/2}$ sabiti ve $m_N = 1.008665$ u nötron kütlesi. Giriş olarak eklenenler şunlardır: A hedef çekirdeğin kütle numarası ve Z nükleer yük sayısı, E nötronun enerjisi ve l_p açısal momentum kuantum sayısı; buradaki l_p , açısal momentum kısmi dalgaları üzerinden toplam almanın budandığı sayıdır. Çıkış olarak $d\sigma/d\Omega$ diferansiyel tesir kesit ve σ toplam tesir kesit elde edilir. θ saçılma açısının bir fonksiyonu olarak $d\sigma/d\Omega$ çıkışı grafik formda ve tercihen nümerik formda da elde edilir. İki diagram grafik çıkışta gösterilirler: Birincide $d\sigma/d\Omega$ lineer olarak, ikincide logaritmik olarak çizilir. Bütün açılar radyandan cinsindendir ve kesitler fm^2 den milibarn birimlerine (mb) çevrilirler. $1mb = 0,1 \text{ fm}^2$.

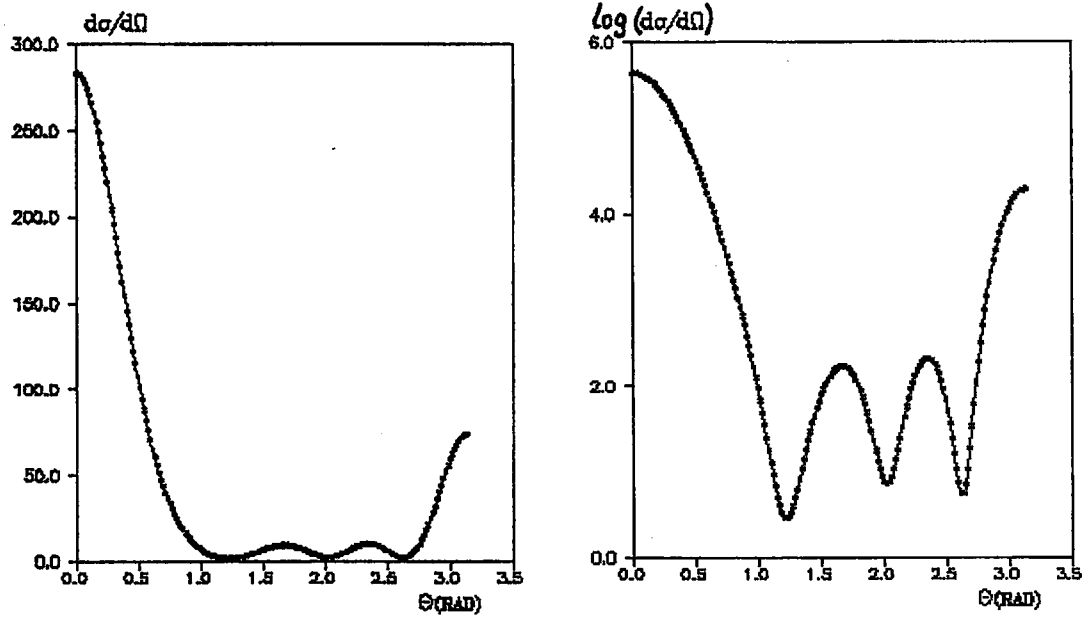
Değişik atomik çekirdekler alarak ve değişik nötron enerjileri için l_p 'nin artan değerleri ile toplam tesir kesitinin değerinin değiştiği ve sonunda sabit kaldığı

gözlenir; artık bu durumda diferansiyel tesir kesitinin biçimini değiştirmedeği görülür ve karşılık gelen l_p değeri bulunur. Buna göre, ağır çekirdek için 10 MeV altındaki enerjilerde $l_p=5$ ve 50 MeV enerjide $l_p=16$ olduğu bulunur. Şekil 5.1'de Fe_{26}^{56} çekirdeğinden 10 MeV enerjili nötronların saçılmasına ait diferansiyel ve toplam tesir kesiti sonuçları ve şekil 5.2'de U_{92}^{238} çekirdeğinden 50 MeV enerjili nötronların saçılmasına ait diferansiyel ve toplam tesir kesiti sonuçları gösterilir.

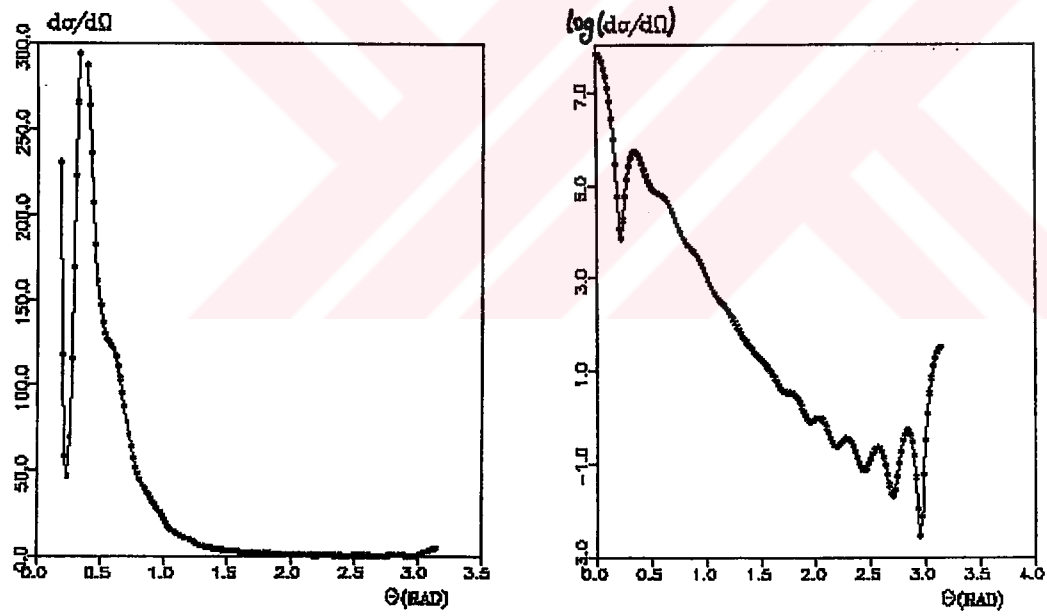
Şekil 5.4'den, düşük enerjiler için diferansiyel tesir kesiti sadece birkaç maksimum ve minimuma sahip olduğu görülür. Bunun sebebi, sadece birkaç kısmi dalganın saçılma tesir kesitine katkıda bulunmasıdır.

Artan enerji ile önce maksimum ve minimumların sayısı artar ve sonra yüksek enerjilerde diferansiyel tesir kesiti tekrar basit bir biçimi alır. Bu diferansiyel tesir kesitleri, saçılma açısı arttıkça önce bir maksimum ve sonra hızlı bir azalış gösterirler. Hedef çekirdek daha ağır oldukça yukarıda sözü edilen davranış daha da belirginleşir. Bu hal, şekil 5.5'den görülebilir.

Rezonanslar, uyarılma fonksiyonunun, yani enerjinin bir fonksiyonu olarak toplam tesir kesitinin eğrisini çizerek bulunurlar. Örnek olarak, nötronların Fe_{26}^{56} tarafından saçılmasına ait hesaplanan toplam tesir kesiti 2,776 MeV'de keskin bir maksimuma sahiptir. Burada takriben 0,05 MeV genişlikte bir rezonans vardır. Bu durumu çizelge 5.5'deki değerlere bakarak görebiliriz.



Şekil 5.4: $l_p=5$, $E=10$ MeV için Fe_{26}^{56} çekirdeğinin nötron saçılmasının diferansiyel ve logaritmik tesir kesit (Schmid, 1988)



Şekil 5.5: $l_p=16$, $E=50$ MeV için U_{92}^{238} çekirdeğinin nötron saçılmasının diferansiyel ve logaritmik tesir kesiti (Schmid, 1988)

Çizelge 5.5 Rezonans durumunu gösteren sayısal değerler

E (MeV)	σ
2.70	195.80
2.71	224.90
2.72	271.71
2.73	347.61
2.74	470.55
2.75	663.15
2.76	933.03
2.77	1219.55
2.78	1380.21
2.79	1342.52
2.80	1187.91

6. SONUÇ

Bu tezde, özgün olmayan, ama fiziğin temel olaylarından biri olan saçılma olayının kuantum mekaniksel bakımdan incelenmesi ele alınmıştır.

Çok az sayıda potansiyel için analitik olarak çözülebilen Schrödinger dalga denkleminin nümerik çözümü gerçekleştirilmiştir. Bu kapsamda nümerik yöntemleri kullanma ve program yapma gibi nitelikler dahil olmuştur.

Bu tezin kapsamında uygun olarak seçilebilecek potansiyeller için benzer çalışmalar yapılabilecektir.



KAYNAKLAR

Dereli, T., (1999), Kuantum Fiziği, O.D.T.Ü. Yayınları, Ankara

Dicke, R. H., ve Wittke, J. P., (1961), Introduction to Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company

Erbil, H., (1989), Kuantum Fiziği, Ege Üniversitesi Fen Fakültesi Yayını, İzmir

Hook, J. R. ve Hall, H. E., (1999), Katıhal Fiziği (Çev., F. Köksal, M. Dinçer, M. Altunbaş ve E. Başaran) Literatür Yayınları, İstanbul

Karaoğlu, B., (1994), Kuantum Mekaniğine Giriş, Bilgi Tek Yayıncılık, İstanbul

Schmid, E. W., Spitz, G. ve Lösch, W., (1988), Theoretical Physics on the Personal Computer, Springer-Verlog, Berlin Heidelberg



EK1.

Bir fonksiyonun birinci türevinin sayısal olarak hesaplanması için basit bir yaklaşıklık formülü,

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (\text{Ek1.1})$$

türevin tanımından elde edilebilir.

$h \rightarrow 0$ limitine geçiş bilgisayarda başarısızdır. Onun yerine, h için küçük, ama sonlu, bir değer kullanabiliriz. Böylece şu formülü

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h) \quad (\text{Ek1.2})$$

elde ederiz. Yine de bu türetme $O(h)$ hata terimi için bize hiçbir kestirim vermez. Bununla birlikte, hata terimi için basit bir şekilde analitik bir ifade elde edebiliriz. Bu amaçla $f(x)$ fonksiyonu Taylor serisine açarız; bundan sonra daima $f(x)$ fonksiyonunun yeterli sayıda alınabilir olduğunu kabul edeceğiz. x noktası civarında $f(x)$ 'in Taylor serisi

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f^{(3)}(x) + \dots \quad (\text{Ek1.3})$$

elde edilir.

Bu serinin (Ek1.2)'de yerine yazılması

$$O(h) = -\frac{h^2}{2} f''(x) + \dots \quad (\text{Ek1.4})$$

verir. $O(h)$ hatası, yeter derecede küçük h değerleri için onun h ile orantılı olduğunu ifade eden, " h mertebeden", gösterimi ile belirli bir sınırın altında yuvarlama hataları sonucundan daha büyük olacağından, bilgisayarda h ağ genişliği çok küçük seçilmemelidir. Bu sebeple, h 'nın yüksek mertebeleriyle hataların sıfıra gittiği bir yaklaşıklık formülü aranır. Elimizdeki durumda bu kolayca başarılabilir. $f(x+h)$ için (Ek1.3) Taylor serisinden $f(x-h)$ için

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6} f^{(3)}(x) + \dots \quad (\text{Ek1.5})$$

Taylor serisini çıkarır ve farkı $2h$ 'ya böleriz.

Yeni yaklaşıklık formülü olarak

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \quad (\text{Ek1.6})$$

beraberinde

$$O(h) = -\frac{h^2}{6} f^{(3)}(x) + \dots \quad (\text{Ek1.7})$$

hata terimini elde ederiz. Görülebileceği gibi, şimdi hata sıfıra h^2 gibi gider. Hata terimini ihmal ederek, birinci türevin iki fonksiyon değerinden tayin edilmesinden dolayı, (Ek1.6) denkleminde birinci türev için iki - nokta formülü denir.

Bu formül birçok uygulama için yeterlidir. $f(x+h)$, $f(x+2h)$, $f(x-h)$ ve $f(x-2h)$ için Taylor serilerinin karşılaştırılmasıyla, hatası h^4 mertebeli olan dört nokta formülü de geliştirilebilir. Fonksiyonun yalnızca kapalı bir aralıkta bilindiği durum için, özel formüller uç noktaları için elde edilebilir; örneğin, aralığın alt sınırı için, h^2 mertebeli olan ve x , $x+h$ ve $x+2h$ noktalarındaki fonksiyon değerlerini kullanan "üç - nokta" formülü. Bununla birlikte, bu formüller, kararsızlığa yol açtıklarından dolayı, diferansiyel denklemlerin çözümü için uygun değildir.

Şimdi ikinci türev için bir yaklaşıklık formülü ele geçirmek üzere, bir kez daha (Ek1.3) ve (Ek1.5)'de verilen $f(x+h)$ ve $f(x-h)$ için Taylor serilerine bakalım. Bunlardan, ikinci türev için aşağıdaki üç - nokta formülü elde edilir:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} + O(h^2) \quad (\text{Ek1.8})$$

burada hata terimi

$$O(h^2) = -\frac{h^2}{12} f^{(4)}(x) + \dots \quad (\text{Ek1.9})$$

Birinci türev için (Ek1.6)'da verilen iki - nokta formülünde olduğu gibi, burada da h^2 mertebelidir.

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi	31.01.1974	
Doğum yeri	İstanbul	
Lise	1988-1991	Beşiktaş Kız Lisesi
Lisans	1992-1996	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen-Ede. Fak. Fizik Bölümü
Yüksek Lisans	1997-2000	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Çalıştığı Kurum	1998-Devam ediyor	Metehan İlköğretim Okulu Kağıthane-Sanayi Mah.

