


## RbH Molekülünün $X^1\Sigma^+$ Durumu için Dönme-Titreşim Enerji Seviyeleri

Hilmi Yanar

Girne Amerikan Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Temel Tıp Bilimleri Bölümü, Biyofizik Anabilim Dalı, Girne, KKTC

hilmiyanar@gau.edu.tr 

Makale gönderme tarihi:31.03.2023, Makale kabul tarihi:04.05.2023

### Öz

Bu çalışmada genel moleküler (GM) potansiyel ve geliştirilmiş genelleştirilmiş Pöschl–Teller (GGPT) potansiyeli için elde edilmiş enerji özdeğer denklemleri kullanılarak,  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün deneysel (gözlenen) titreşim enerji seviyelerini modelleyebilecek en iyi potansiyel enerji fonksiyonu belirlenmiştir. Ayrıca, bu potansiyel enerji fonksiyonu ve bağlı durumların tartışılmasında merkezci terime uygulanabilecek en uygun yaklaşım olan Pekeris tipi yaklaşım ele alınarak  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün en olası dönme-titreşim enerjileri elde edilmiştir.

**Anahtar Kelimeler:** İki atomlu moleküller, titreşim enerjileri, genel moleküler potansiyel, RbH molekülü, Pöschl–Teller potansiyeli

## Rotational-Vibrational Energy Levels for the $X^1\Sigma^+$ State of RbH Molecule

### Abstract

In this study, the more suitable potential energy function to model the experimental (observed) vibrational energy levels of the  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molecule has been determined by using the energy eigenvalue equations obtained for the general molecular (GM) potential and the improved generalized Pöschl–Teller (IGPT) potential. In addition, by considering suitable potential energy function and the Pekeris-type approximation, which is the most appropriate approach to the centrifugal term in the discussion of bound states, the more accurate rotational-vibration energies of the  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molecule have been found.

**Keywords:** Diatomic molecules, vibrational energies, general molecular potential, RbH molecule, Pöschl–Teller potential

### GİRİŞ

İki atomlu moleküllerin dönme ve titreşim enerjilerini teorik olarak hesaplayabilmek için kuantum mekaniğinin parçacık denklemleri olan Schrödinger, Klein-Gordon ve Dirac denklemlerinden birinin bir potansiyel enerji fonksiyonu ve merkezci terim varlığında çözümlerinin elde edilmesi gerekmektedir. Teorik olarak elde edilen titreşim enerji seviyelerinin deneysel verilerle uyumlu olabilmesi için kullanılan potansiyel enerji fonksiyonunun ve merkezci terime uygulanan yaklaşımın seçimi büyük önem taşımaktadır. Potansiyel enerji fonksiyonlarının iki atomlu molekülleri modellemedeki başarıları ele alınan moleküle bağlı olarak değişmektedir (Zhang, Liu, Zhang, Zhou ve Jia, 2012; Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016). Örneğin,  $ScI(X^1\Sigma^+)$  molekülünü en iyi Morse potansiyeli açıklayabilirken (Yanar, Aydoğdu

ve Saltı, 2016; Du, Guo ve Jia, 2014),  $Na_2(5^1\Delta_g)$  molekülünü değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyeli (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016; Ocak, Yanar, Saltı ve Aydoğdu, 2018; Kisoglu, Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2019),  $^7Li_2(a^3\Sigma_u^+)$  molekülünü ise geliştirilmiş Manning-Rosen potansiyeli (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016; Liu, Zhang ve Jia, 2013) iyi biçimde modelleyebilmektedir. Kullanılan potansiyel enerji fonksiyonunun öneminin yansira, parçacık denklemlerinin çözülebilmesi için merkezci terime uygulanan yaklaşımın biçimi de kritik öneme sahiptir. Literatürde iki atomlu moleküllerin dönme-titreşim enerjilerini elde edebilmek için merkezci terime yaygın olarak Greene-Aldrich (Greene ve Aldrich, 1976) ve Pekeris (Pekeris, 1934) yaklaşımları uygulanmıştır. Ancak son yıllarda yapılan çalışmalar, moleküllerin bağlı durumlarının

açıklanmasında Pekeris-tipi yaklaşımların Greene-Aldrich yaklaşımından daha uygun olduğunu göstermiştir (Mustafa, 2015a; Mustafa, 2015b; Yanar, Taş, Saltı ve Aydoğdu, 2020; Yanar, 2022a).

$RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün titreşim enerjileri daha önce farklı çalışmalarda Morse potansiyeli (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020), değiştirilmiş hiperbolik tip potansiyel (Eyube, Notani ve Dikko, 2022), değiştirilmiş hiperbolik engel potansiyeli (Ezzine, Hachama ve Diaf, 2021), geliştirilmiş Tietz potansiyeli ile aynı olan geliştirilmiş genelleştirilmiş Mobius kare potansiyeli (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020), geliştirilmiş Pöschl-Teller potansiyeli (Eyube, Bitrus ve Jabil, 2021) ve GGPT potansiyeli (Yanar, 2022b) kullanılarak elde edilmiştir. Yapılan bu çalışmalardan Morse, geliştirilmiş Pöschl-Teller, değiştirilmiş hiperbolik tip ve GGPT potansiyellerinin  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün titreşim enerjilerini modellemede benzer başarılar gösterdikleri görülmüştür. Ayrıca, değiştirilmiş hiperbolik engel potansiyeli ile iki atomlu moleküller için geliştirilmiş Tietz potansiyeliyle aynı olan geliştirilmiş genelleştirilmiş Mobius kare potansiyelinin  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünü açıklamada benzer başarı oranları sergiledikleri bulunmuştur (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020; Eyube, Notani ve Dikko, 2022; Ezzine, Hachama ve Diaf, 2021; Eyube, Bitrus ve Jabil, 2021; Yanar, 2022b). Ancak, bildiğimiz kadarıyla geliştirilmiş Rosen-Morse, geliştirilmiş Manning-Rosen ve değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyelleri bu molekül için ele alınmamış; dolayısıyla  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünü en iyi modelleyebilecek potansiyel enerji fonksiyonu henüz belirlenmemiştir. Ayrıca, yapılan bu çalışmalarda yalnızca geliştirilmiş genelleştirilmiş Mobius kare potansiyeli kullanılarak molekülün dönme enerjileri tartışılmıştır; fakat  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülü için en uygun potansiyel enerji fonksiyonu kullanılmadığından (Okorie, Ikot, & Chukwuocha, 2020)'de bulunan dönme-titreşim enerjileri  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün en olası dönme-titreşim enerjileri değildir. Bu değerlendirmeler ışığında, sunulan çalışmada  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünü modelleyebilecek en uygun potansiyel enerji fonksiyonunu tespit etmek ve bu potansiyel ile Pekeris-tipi yaklaşım altında elde edilen enerji özdeğer denklemini kullanarak ilgili molekülün en olası dönme-titreşim enerjilerini teorik olarak hesaplamak amaçlanmıştır.

Dört kesimden oluşan bu çalışmada; Kesim 2'de dönme-titreşim enerjilerinin hesaplanması için kullanılacak enerji özdeğer denklemleri verilmiştir. Kesim 3'te  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün titreşim enerji seviyeleri farklı potansiyel enerjilerin varlığında elde edilip deneysel verilerle ve literatürde daha önceden elde edilmiş teorik verilerle karşılaştırılmıştır. Ayrıca, tespit edilen en uygun potansiyel ile Pekeris-tipi yaklaşım varlığında elde edilmiş enerji özdeğer denklemleri kullanılarak  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün en olası titreşim-dönme enerji seviyeleri bulunmuştur. Son kesimde ise elde edilen bulguların değerlendirilmesi yapılmıştır.

## MATERYAL VE METOT

$RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün titreşim enerjilerini bulmak için GM (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016) ve GGPT (Yanar, Taş, Saltı ve Aydoğdu, 2020) potansiyelleri kullanılarak elde edilen enerji özdeğer denklemleri kullanılmıştır. GM potansiyelinin kullanılmasının nedeni iki atomlu molekülleri iyi biçimde modelleyebildiği bilinen Morse (Morse, 1929), geliştirilmiş Rosen-Morse (Wang, Liu, Zhang, Cao ve Jia, 2012), geliştirilmiş Tietz (Jia, ve diğerleri, 2012), geliştirilmiş Manning-Rosen (Wang, Zhang, Jia ve Liu, 2012) ve değiştirilmiş Rosen-Morse (Zhang, Liu, Zhang, Zhou ve Jia, 2012) olmak üzere birçok potansiyel indirgenememesidir. Bu sayede her bir potansiyel enerji fonksiyonun iki atomlu bir molekülü modellemedeki başarısını bulmak için ayrı ayrı diferansiyel denklemler çözülmesine gerek kalmamaktadır. GM potansiyeli kullanılarak iyi bilinen diğer potansiyel enerji fonksiyonlarının modelleme başarısı kolayca bulunabilmektedir. Diğer taraftan GM potansiyeli, GGPT potansiyeline indirgenememektedir, bu nedenle daha önceki bir çalışmada (Yanar, Taş, Saltı ve Aydoğdu, 2020) GGPT için elde ettiğimiz enerji özdeğer denklemleri de bu çalışmada GGPT potansiyelinin  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün titreşim enerjisini açıklamadaki başarı oranını tespit etmek için ele alınmıştır.

GM potansiyeli aşağıdaki biçimde verilmektedir (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016):

$$V_{GM}(r) = \frac{A - Be^{-\alpha(r-r_e)} + \tilde{q}[C - De^{-\alpha(r-r_e)}]^2}{[1 - qe^{-\alpha(r-r_e)}]^2} \quad (1)$$

Research article/Araştırma makalesi  
DOI:10.29132/ijpas.1274351

Burada  $A, B, C, D, \alpha, \tilde{q}$  ve  $q$  incelenen moleküle bağlı olarak ayarlanabilen potansiyel parametrelerdir.  $r_e$  ise iki atom arasındaki denge bağ uzunluğudur. İki atomlu moleküllerin çalışılabilmesi için GM potansiyelinin parametrelerinin moleküler sabitler cinsinden yazılması gerekmektedir. Bu nedenle aşağıdaki koşullar dikkate alınmaktadır (Varshni, 1957):

$$\left. \frac{dV(r)}{dr} \right|_{r=r_e} = 0,$$

$$V(r \rightarrow \infty) - V(r_e) = D_e, \quad (2)$$

$$\left. \frac{d^2V(r)}{dr^2} \right|_{r=r_e} = 4\pi^2\mu c^2\omega_e^2.$$

Burada  $c$  ışık hızının büyüklüğü iken,  $\mu$  iki atomlu bir moleküler sistemin indirgenmiş kütlesidir.  $D_e$  ve  $\omega_e$  ise sırasıyla ayrışma enerjisini ve harmonik titreşim dalga boyunun tersini ifade etmektedir. Bu koşulların kullanılması, GM potansiyelinin parametreleri ile moleküler sabitler arasında aşağıdaki ilişkileri verir (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016)

$$A + \tilde{q}C^2 = \tilde{q}D^2 = (B + 2\tilde{q}CD)/2 = D_e \quad (3)$$

$$\alpha = \pm\pi c(1 - q) \sqrt{\frac{2\mu\omega_e^2}{D_e}} \quad (4)$$

GM potansiyeli  $q$  parametresinin alacağı değere bağlı olarak literatürde yer alan birçok potansiyele indirgenebilmekte böylece birçok iki atomlu molekülü başarıyla modelleyebilmektedir. Örneğin,  $q = -de^{-\alpha r_e}$  için geliştirilmiş Tietz potansiyeline,  $q \rightarrow 0$  limitinde Morse potansiyeline,  $q = -e^{-\alpha r_e}$  için geliştirilmiş Rosen-Morse potansiyeline,  $q = e^{-\alpha r_e}$  için geliştirilmiş Manning-Rosen potansiyeline,  $q = -e^{\alpha(r_{ij}-r_e)}$  olması durumunda ise değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyeline indirgenmektedir (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016). Burada  $r_{ij}$  iki atomun iç kabuk yarıçaplarının bir ölçüsüdür ve  $r_{ij} = r_e - \sqrt{\frac{KD_e}{4\pi^2\mu c^2\omega_e^2}}$  biçiminde verilmektedir.  $K$  parametresi bir sabit olup değeri yaklaşık olarak  $K = 4$  alınmaktadır (Frost & Musulin, 1954).  $q$  parametresinin  $q = -de^{-\alpha r_e}$ ,  $q =$

$-e^{-\alpha r_e}$ ,  $q = e^{-\alpha r_e}$  veya  $q = -e^{\alpha(r_{ij}-r_e)}$  eşitliklerinden biri olması durumunda Denklem (4)'deki  $\alpha$  parametresi  $z = W(z)e^{W(z)}$  bağıntısını sağlayan Lambert fonksiyonu  $W$  cinsinden elde edilir (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016; Ocak, Yanar, Saltı ve Aydoğdu, 2018; Zhang, Liu, Zhang, Zhou ve Jia, 2012).

GM potansiyeli varlığında ve merkezci terime Pekeris-tipi yaklaşımın uygulanması durumunda Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen enerji özdeğer denklemi aşağıdaki biçimde bulunur (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016; Ocak, Yanar, Saltı ve Aydoğdu, 2018):

$$E_{nj} = \frac{j(j+1)\hbar^2 C_0}{2\mu} + \frac{D_e}{q^2} - \alpha^2 \hbar^2 \left[ \frac{\frac{2\mu D_e(1-\frac{1}{q^2}) + j(j+1)(C_1+C_2)}{\alpha^2 \hbar^2}}{2 \left( \frac{2n+1}{2} \pm \sqrt{\frac{2\mu D_e(1-\frac{1}{q^2})^2}{\alpha^2 \hbar^2} + \frac{j(j+1)C_2 + \frac{1}{4}}{\alpha^2}} \right)} - \frac{1}{2} \left( \frac{2n+1}{2} \pm \sqrt{\frac{2\mu D_e(1-\frac{1}{q^2})^2}{\alpha^2 \hbar^2} + \frac{j(j+1)C_2 + \frac{1}{4}}{\alpha^2}} \right)^2 \right] \quad (5)$$

Burada  $C_0, C_1$  ve  $C_2$ , Schrödinger denklemini çözebilmek için merkezci terime uygulanan ve Denklem (6)'da verilen Pekeris-tipi yaklaşımın (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016) katsayılarıdır:

$$\frac{1}{r^2} \approx C_0 + \frac{C_1}{1 - qe^{-\alpha(r-r_e)}} + \frac{C_2}{[1 - qe^{-\alpha(r-r_e)}]^2} \quad (6)$$

Bu katsayılar, Denklem (6)'da verilen eşitliğin her iki tarafındaki terimlerin  $r = r_e$  civarında seriye açılmasıyla aşağıdaki biçimde elde edilirler (Yanar, Aydoğdu ve Saltı, 2016):

$$C_0 = \frac{(3-\alpha r_e) - 2(3+\alpha r_e)q + (3+3\alpha r_e + \alpha^2 r_e^2)q^2}{\alpha^2 r_e^4 q^2},$$

$$C_1 = \frac{2(q-1)^2(-3+\alpha r_e + 3q + 2\alpha q r_e)}{\alpha^2 r_e^4 q^2}, \quad (7)$$

$$C_2 = \frac{(q-1)^3[3(q-1) + (q+1)\alpha r_e]}{\alpha^2 r_e^4 q^2}.$$

Research article/Araştırma makalesi  
 DOI:10.29132/ijpas.1274351

RbH( $X^1\Sigma^+$ ) molekülünü tartışmak için kullanılacak bir diğer enerji özdeğer denklemi ise GGPT potansiyeli varlığında Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen özdeğer denklemdir. GGPT

potansiyeli ve bu potansiyel varlığında Schrödinger denkleminde elde edilen enerji özdeğer bağıntısı sırasıyla Denklem (8) ve (9)'da verilmiştir (Yanar, Taş, Saltı, & Aydogdu, 2020):

$$V_{GGPT}(r) = D_e + D_e \frac{[1 + \cosh^2(ar_e) - 2\cosh(ar_e)\cosh(ar)]}{\sinh^2(ar)} \quad (8)$$

$$E_{nj} = \frac{j(j+1)\hbar^2(\widetilde{C}_0 + \widetilde{C}_2)}{2\mu} + D_e - \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{2n+1}{2} - \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{j(j+1)(\widetilde{C}_2 - \widetilde{C}_1)}{4\alpha^2} + \frac{\mu D_e[1 + \cosh^2(ar_e) + 2\cosh(ar_e)]}{2\alpha^2\hbar^2}} \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{j(j+1)(\widetilde{C}_2 + \widetilde{C}_1)}{4\alpha^2} - \frac{\mu D_e[-1 - \cosh^2(ar_e) + 2\cosh(ar_e)]}{2\alpha^2\hbar^2}} \right]^2 \quad (9)$$

Burada  $\alpha = \pi c \sqrt{\frac{2\mu\omega_e^2}{D_e}}$  olup,  $\widetilde{C}_0$ ,  $\widetilde{C}_1$  ve  $\widetilde{C}_2$  katsayıları GGPT potansiyeli varlığındaki Schrödinger denklemini çözebilmek için merkezci terime uygulanan

$$\frac{1}{r^2} \approx \widetilde{C}_0 + \widetilde{C}_1 \frac{\cosh ar}{\sinh^2 ar} + \widetilde{C}_2 \frac{\cosh^2 ar}{\sinh^2 ar} \quad (10)$$

biçimindeki Pekeris-tipi yaklaşımın katsayılarıdır. Bu katsayıların açık ifadeleri eşitliğin her iki tarafındaki terimlerin  $r = r_e$  civarında seriye açılmasıyla aşağıdaki biçimde bulunmuştur (Yanar, Taş, Saltı ve Aydogdu, 2020):

$$\widetilde{C}_0 = \frac{-3+2\alpha^2 r_e^2 - 3 \cosh 2ar_e + ar_e(6 \coth ar_e + \sinh 2ar_e)}{2\alpha^2 r_e^4} \\ \widetilde{C}_1 = \frac{-6 \cosh ar_e + 2ar_e \operatorname{csch} ar_e(2 + \cosh 2ar_e)}{\alpha^2 r_e^4} \quad (11) \\ \widetilde{C}_2 = \frac{9+3 \cosh 2ar_e - 12ar_e \coth ar_e \cosh^2 ar_e + 5ar_e \sinh 2ar_e}{2\alpha^2 r_e^4}$$

Denklem (8)'de verilen GGPT potansiyelinin iki atomlu moleküler yapıların titreşim-dönme enerjilerini açıklayabilme başarısının geliştirilmiş Pöschl-Teller potansiyeli ile aynı olduğu daha önceki

bir çalışmada gösterilmiştir (Yanar, Taş, Saltı ve Aydogdu, 2020). Bu durumda Denklem (1) ile birlikte Denklem (8) iki atomlu moleküler yapıları açıklayabilen literatürdeki birçok potansiyel enerji fonksiyonunu içermektedir. Bir sonraki kesimde, bu potansiyellerin varlığında elde edilen enerji özdeğer denklemleri (5) ve (9), RbH( $X^1\Sigma^+$ ) molekülünü en iyi modelleyebilen potansiyel enerji fonksiyonunun belirlenmesi için kullanılmıştır.

## BULGULAR

GM ve GGPT potansiyelleri varlığında bulunan enerji özdeğer denklemleri (5) ve (9) ayrı ayrı kullanılarak RbH( $X^1\Sigma^+$ ) molekülünün titreşim enerji seviyeleri hesaplanmış ve Tablo 1'de verilmiştir. RbH( $X^1\Sigma^+$ ) molekülü için hesaplamada kullanılan deneysel moleküler sabitler şu biçimdedir (Hsieh, Yang, Tam, Verma, & Stwalley, 1980):  $D_e = 14\,580 \text{ cm}^{-1}$ ,  $r_e = 2.3673 \text{ \AA}$ ,  $\mu = 0.9961 \text{ akb}$  ve  $\omega_e = 937.188 \text{ cm}^{-1}$ . Molekülü en iyi modelleyebilecek potansiyel enerji fonksiyonunu belirlemek için ortalama mutlak yüzde sapma (OMYS) hesabı yapılmıştır:

$$OMYS = \frac{100}{N} \sum_{n=0}^N \left| \frac{E_n^{\text{gözlenen}} - E_n}{E_n^{\text{gözlenen}}} \right| \quad (12)$$

Morse, geliştirilmiş Rosen-Morse, değiştirilmiş Rosen-Morse, geliştirilmiş Manning-Rosen,

**Tablo 1.**  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün titreşim enerjileri ( $\text{cm}^{-1}$ )

$n$	Gözlenen <sup>a</sup>	$E_n^b$	$E_n^c$	$E_n^d$	$E_n^e$	$E_n^f$	$E_n^g$	$E_n^h$
0	465.32	464.88	464.80	464.70	464.75	464.83	465.00	464.87
1	1374.39	1371.91	1374.19	1376.17	1366.92	1371.75	1372.07	1371.93
2	2255.74	2248.84	2255.54	2261.54	2234.63	2248.40	2249.01	2248.88
3	3109.79	3095.75	3108.66	3120.43	3068.43	3094.81	3095.84	3095.70
4	3936.95	3912.41	3933.31	3952.44	3868.85	3911.00	3912.54	3912.41
5	4737.66	4699.03	4729.27	4757.18	4636.41	4696.97	4699.12	4698.99
6	5512.31	5455.50	5496.30	5534.23	5371.64	5452.74	5455.58	5455.45
7	6261.34	6181.81	6234.19	6283.15	6075.01	6178.33	6181.92	6181.79
8	6985.17	6878.06	6942.70	7003.50	6747.03	6873.76	6878.14	6878.01
9	7684.20	7544.16	7621.57	7694.82	7388.16	7539.03	7544.23	7544.11
10	8358.85	8180.13	8270.58	8356.64	7998.88	8174.17	8180.21	8180.09
11	9009.56	8785.97	8889.48	8988.46	8579.63	8779.19	8786.06	8785.95
12	9636.73	9361.75	9478.02	9589.80	9130.86	9354.11	9361.80	9361.69

<sup>a</sup> (Hsieh, Yang, Tam, Verma, & Stwalley, 1980)<sup>b</sup>  $\lim_{q \rightarrow 0} V_{GMP} = V_{Morse}$  durumunda elde edilen enerjiler<sup>c</sup> GM potansiyelinin  $q = -e^{-\alpha r_e}$  değeri için (Geliştirilmiş Rosen-Morse potansiyeli) Denklem (5) kullanılarak elde edilen enerjiler<sup>d</sup> GM potansiyelinin  $q = -e^{\alpha(r_{ij}-r_e)}$  değeri için (Değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyeli) Denklem (5) kullanılarak elde edilen enerjiler<sup>e</sup> GM potansiyelinin  $q = e^{-\alpha r_e}$  değeri için (Geliştirilmiş Manning-Rosen potansiyeli) Denklem (5) kullanılarak elde edilen enerjiler<sup>f</sup> GM potansiyelinin  $q = -de^{-\alpha r_e}$  değeri için (Geliştirilmiş Tietz potansiyeli) Denklem (5) kullanılarak elde edilen enerjiler<sup>g</sup> Denklem (9) kullanılarak elde edilen enerjiler<sup>h</sup> (Eyube, Bitrus ve Jabil, 2021; Eyube, Notani ve Dikko, 2022)

geliştirilmiş Tietz, GGPT ve geliştirilmiş Pöschl-Teller potansiyelleri varlığında Denklem (5) ile Denklem (9) kullanılarak elde edilen ve Tablo 1'de verilen enerji özdeğerlerinin gözlenen verilerden ortalama mutlak yüzde sapmaları sırasıyla 1.20, 0.51, 0.27, 2.61, 1.25, 1.19 ve 1.20 olarak hesaplanmıştır. Bu bulgular değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyelinin  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünü diğer potansiyel enerji fonksiyonlarına göre çok daha iyi açıklayabildiğini göstermektedir. Bu nedenle  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün daha doğru dönme-titreşim enerji değerlerini elde edebilmek için Denklem (5)'de  $q = -e^{\alpha(r_{ij}-r_e)}$  seçimi ele alınmıştır. Bu durumda Denklem (5), değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyeli varlığındaki enerji özdeğer denkleminde indirgenmektedir.  $q = -e^{\alpha(r_{ij}-r_e)}$  için Denklem (5) kullanılarak elde edilen dönme-titreşim enerjileri Tablo 2'de verilmiştir.

$l \neq 0$  durumu için bu çalışmada elde edilen dönme-titreşim enerjileri ile Okorie ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmada (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020) geliştirilmiş genelleştirilmiş Mobius kare potansiyeli altında bulunan dönme-titreşim enerjileri arasında oldukça büyük farklılıklar olduğu Tablo 2'den görülebilmektedir. Bunun nedeni yalnızca kullanılan potansiyel enerji fonksiyonlarının farklı olmasından kaynaklanmamaktadır. Bu büyük

farklılığın sebebi Okorie ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmada (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020) enerji özdeğer denkleminin hatalı elde edilmesidir. (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020)'de Denklem (33) ile verilen enerji özdeğer

$$\text{denklemindeki } \sqrt{1 + \frac{8\mu D_e}{\alpha^2 \hbar^2 \xi^2} [(\xi + e^{\alpha r_e})^2 + \gamma h_2]}$$

$$\text{ifadesi } \sqrt{1 + \frac{8\mu}{\alpha^2 \hbar^2 \xi^2} [D_e (\xi + e^{\alpha r_e})^2 + \gamma h_2]}$$

biçiminde olmalıdır. Dolayısıyla  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülü için (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020) referansında elde edilen dönme-titreşim enerjileri yanlıştır. İlgili molekül için doğru dönme-titreşim enerjileri Tablo 2'de  $E_{nl}^b$  ile verildiği biçimdedir.

## SONUÇLAR

Bu çalışmada GGPT potansiyeli varlığında bulunan titreşim enerjileri ile GM potansiyelinin özel durumları olan Morse, geliştirilmiş Rosen-Morse, değiştirilmiş Rosen-Morse, geliştirilmiş Manning-Rosen ve geliştirilmiş Tietz potansiyelleri için elde edilen titreşim enerjileri literatürdeki verilerle ve deneysel (gözlenen) verilerle karşılaştırılarak  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünü en doğru biçimde modelleyebilecek potansiyel enerji fonksiyonu belirlenmiştir. Değiştirilmiş Rosen-Morse

Research article/Araştırma makalesi  
 DOI:10.29132/ijpas.1274351

potansiyelinin  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünü modellemede daha başarılı olduğu gösterilmiştir.

**Tablo 2.**  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün dönme-titreşim enerjileri ( $cm^{-1}$ )

$n$	$l$	Gözlenen <sup>a</sup>	$E_{nl}^b$	$E_{nl}^c$	$n$	$l$	Gözlenen <sup>a</sup>	$E_{nl}^b$	$n$	$l$	Gözlenen <sup>a</sup>	$E_{nl}^b$
0	0	465.32	464.70	464.85	9	0	7684.20	7694.82	12	7		9719.18
1	0	1374.39	1376.17	1372.23		1		7699.83		8		9756.01
2	0	2255.74	2261.54	2249.76		2		7709.85		9		9797.37
	1		2267.33	$-1.751 \times 10^7$		3		7724.88		10		9843.22
3	0	3109.79	3120.43	3097.39		4		7744.90		11		9893.56
	1		3126.12	$-1.749 \times 10^7$		5		7769.90				
	2		3137.49	$-7.768 \times 10^7$		6		7799.88				
4	0	3936.95	3952.44	3915.09		7		7834.80				
	1		3958.03	$-1.746 \times 10^7$		8		7874.65				
	2		3969.19	$-7.763 \times 10^7$	10	0	8358.85	8356.64				
	3		3985.93	$-1.772 \times 10^8$		1		8361.53				
5	0	4737.66	4757.18	4702.86		2		8371.30				
	1		4762.66	$-1.744 \times 10^7$		3		8385.96				
	2		4773.61	$-7.759 \times 10^7$		4		8405.49				
	3		4790.02	$-1.771 \times 10^8$		5		8429.88				
	4		4811.89	$-3.132 \times 10^8$		6		8459.11				
6	0	5512.31	5534.23	5460.64		7		8493.17				
	1		5539.59	-		8		8532.04				
	2		5550.32	-		9		8575.69				
	3		5566.40	-	11	0	9009.56	8988.46				
	4		5587.83	-		1		8993.23				
	5		5614.59	-		2		9002.75				
7	0	6261.34	6283.15	6188.41		3		9017.03				
	1		6288.40	-		4		9036.05				
	2		6298.90	-		5		9059.81				
	3		6314.63	-		6		9088.29				
	4		6335.60	-		7		9121.47				
	5		6361.79	-		8		9159.33				
	6		6393.19	-		9		9201.85				
8	0	6985.17	7003.50	-		10		9248.99				
	1		7008.63	-	12	0	9636.73	9589.80				
	2		7018.89	-		1		9594.43				
	3		7034.28	-		2		9603.70				
	4		7054.78	-		3		9617.59				
	5		7080.38	-		4		9636.09				
	6		7111.08	-		5		9659.21				
	7		7146.84	-		6		9686.91				

<sup>a</sup> (Hsieh, Yang, Tam, Verma, & Stwalley, 1980)

<sup>b</sup> GM potansiyelinin  $q = -e^{\alpha(r_{ij}-r_e)}$  değeri için (Değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyeli) Denklem (5) kullanılarak elde edilen enerjiler

<sup>c</sup> (Okorie, Ikot, & Chukwuocha, 2020)

Değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyeli varlığında elde edilen titreşim enerjilerinin gözlenen verilerden ortalama mutlak yüzde sapması 0.27 olarak hesaplanmıştır. Morse, geliştirilmiş Rosen-Morse, geliştirilmiş Manning-Rosen, geliştirilmiş Tietz, GGPT ve geliştirilmiş Pöschl-Teller potansiyelleri varlığında elde edilen enerjilerin gözlenen verilerden ortalama mutlak yüzde sapmaları ise sırasıyla 1.20, 0.51, 2.61, 1.25, 1.19 ve 1.20 olarak bulunmuştur. Ayrıca, değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyeli ve merkezci terim için Pekeris-tipi yaklaşım kullanılarak  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün dönme-

titreşim enerjileri elde edilmiş ve literatürdeki verilerle karşılaştırılmıştır. (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020)'de geliştirilmiş genelleştirilmiş Mobius kare potansiyeli (ki bu iki atomlu moleküller için geliştirilmiş Tietz potansiyeli ile aynıdır) kullanılarak elde edilen dönme-titreşim enerjilerinin bu çalışmada bulunan dönme-titreşim enerjilerinden oldukça farklı olduğu; bu farklılığın yalnızca kullanılan potansiyel enerji fonksiyonundan kaynaklanmadığı, (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020) referansındaki enerji özdeğer denkleminin hatalı elde edilmesinden kaynaklandığı gösterilmiştir.

Research article/Araştırma makalesi  
 DOI:10.29132/ijpas.1274351

Dolayısıyla,  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülü için (Okorie, Ikot ve Chukwuocha, 2020)'de verilen dönme-titreşim enerjilerinin yanlış olduğu tespit edilmiştir.

Değiştirilmiş Rosen-Morse potansiyeli  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülü için ilk kez bu çalışmada ele alınmış ve bu potansiyel ile elde edilen titreşim enerjilerinin deneysel verileri açıklamada literatürdekilerden daha başarılı olduğu yine ilk defa bu çalışmada gösterilmiştir. Ayrıca  $RbH(X^1\Sigma^+)$  molekülünün en olası teorik dönme-titreşim enerjileri bildiğimiz kadarıyla ilk kez bu çalışmada hesaplanmıştır. Moleküller için en doğru potansiyel enerjinin ve buna bağlı olarak en doğru dönme-titreşim enerjilerinin bulunması moleküllerin termodinamik ve optik özelliklerinin daha doğru bir biçimde incelenmesini sağlamaktadır.

#### ÇIKAR ÇATIŞMASI BEYANI

Yazar bu makale ile ilgili herhangi bir çıkar çatışması bildirmemektedir.

#### ARAŞTIRMA VE YAYIN ETİĞİ BEYANI

Yazar bu çalışmanın araştırma ve yayın etiğine uygun olduğunu beyan eder.

#### KAYNAKLAR

- Du, J. F., Guo, P. ve Jia, C. S. (2014). D-dimensional energies for scandium monoiodide. *Journal of Mathematical Chemistry*, 52, 2559-2569.
- Eyube, E. S., Bitrus, B. M. ve Jabil, Y. Y. (2021). Thermodynamic relations and ro-vibrational energy levels of the improved Pöschl-Teller oscillator for diatomic molecules. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 54(15), 155102.
- Eyube, E. S., Notani, P. P. ve Dikko, A. B. (2022). Modeling of diatomic molecules with modified hyperbolic-type potential. *The European Physical Journal Plus*, 137(3), 329.
- Ezzine, M. M., Hachama, M. ve Diaf, A. (2021). Feynman kernel analytical solutions for the deformed hyperbolic barrier potential with application to some diatomic molecules. *Physica Scripta*, 96(12), 125260.
- Frost, A. A. ve Musulin, B. (1954). The Possible Existence of a Reduced Potential Energy Function for Diatomic Molecules. *Journal of the American Chemical Society*, 76(8), 2045-2048.
- Greene, R. L. ve Aldrich, C. (1976). Variational wave functions for a screened Coulomb potential. *Physical Review A*, 14(6), 2363.

- Hsieh, Y. K., Yang, S. C., Tam, A. C., Verma, K. K. ve Stwalley, W. C. (1980). The RKR potential energy curves for the  $X^1\Sigma^+$  and  $A^1\Sigma^+$  states of RbH. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 83(2), 311-316.
- Jia, C. S., Diao, Y. F., Liu, X. J., Wang, P. Q., Liu, J. Y. ve Zhang, G. D. (2012). Equivalence of the Wei potential model and Tietz potential model for diatomic molecules. *The Journal of chemical physics*, 137(1), 014101.
- Kisoglu, H. F., Yanar, H., Aydogdu, O. ve Salti, M. (2019). Relativistic spectral bounds for the general molecular potential: application to a diatomic molecule. *Journal of molecular modeling*, 25, 1-11.
- Liu, J. Y., Zhang, G. D. ve Jia, C. S. (2013). Calculation of the interaction potential energy curve and vibrational levels for the  $a^3\Sigma^+$  state of Li<sub>2</sub> molecule. *Physics Letters A*, 377(21-22), 1444-1447.
- Morse, P. M. (1929). Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels. *Physical review*, 34(1), 57.
- Mustafa, O. (2015a). On the ro-vibrational energies for the lithium dimer; maximum-possible rotational levels. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 48(6), 065101.
- Mustafa, O. (2015b). A new deformed Schiöberg-type potential and ro-vibrational energies for some diatomic molecules. *Physica Scripta*, 90(6), 065002.
- Ocak, Z., Yanar, H., Salti, M. ve Aydogdu, O. (2018). Relativistic spinless energies and thermodynamic properties of sodium dimer molecule. *Chemical Physics*, 513, 252-257.
- Okorie, U. S., Ikot, A. N. ve Chukwuocha, E. O. (2020). Approximate energy spectra of improved generalized Mobius square potential (IGMSP) for some diatomic hydride molecules. *Journal of Molecular Modeling*, 26, 1-9.
- Pekeris, C. L. (1934). The rotation-vibration coupling in diatomic molecules. *Physical Review*, 45(2), 98.
- Varshni, Y. P. (1957). Comparative study of potential energy functions for diatomic molecules. *Reviews of Modern Physics*, 29(4), 664.
- Wang, P. Q., Liu, J. Y., Zhang, L. H., Cao, S. Y. ve Jia, C. S. (2012). Improved expressions for the Schiöberg potential energy models for diatomic molecules. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 278, 23-26.
- Wang, P. Q., Zhang, L. H., Jia, C. S. ve Liu, J. Y. (2012). Equivalence of the three empirical potential energy models for diatomic molecules. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 274, 5-8.

Research article/Araştırma makalesi  
DOI:10.29132/ijpas.1274351

- Yanar, H. (2022a). More accurate ro-vibrational energies for SiF+(X  $1\Sigma^+$ ) molecule. *Physica Scripta*, 97(4), 045404.
- Yanar, H. (2022b). Comment on ‘Thermodynamic relations and ro-vibrational energy levels of the improved Pöschl–Teller oscillator for diatomic molecules’. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 55(17), 178001.
- Yanar, H., Aydoğdu, O. ve Saltı, M. (2016). Modelling of diatomic molecules. *Molecular Physics*, 114(21), 3134-3142.
- Yanar, H., Taş, A., Saltı, M. ve Aydogdu, O. (2020). Ro-vibrational energies of CO molecule via improved generalized Pöschl–Teller potential and Pekeris-type approximation. *The European Physical Journal plus*, 135(3), 292.
- Zhang, G. D., Liu, J. Y., Zhang, L. H., Zhou, W. ve Jia, C. S. (2012). Modified Rosen-Morse potential-energy model for diatomic molecules. *Physical Review A*, 86(6), 062510.