

**T.C.**  
**TRAKYA ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**RADYAL SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN ÖZEL POTANSİYELLER İÇİN  
ASİMPOTİK İTERASYON YÖNTEMİ VE VARYASYONEL YÖNTEMLER  
ÇÖZÜMLERİ**

**Arzu GÜLEROĞLU**

**DOKTORA TEZİ**

**MATEMATİK ANABİLİM DALI**

**Tez Danışmanı: Doç. Dr. Cengiz DANE**  
**İkinci Tez Danışmanı: Prof. Dr. Hasan AKBAŞ**

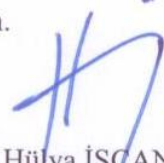
**EDİRNE-2016**

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü onayı



Prof. Dr. Murat YURTCAN  
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Bu tezin Doktora tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

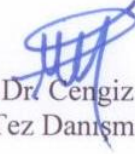


Prof. Dr. Hülya İŞCAN  
Anabilim Dalı Başkanı

Bu tez tarafımızca okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.



Prof. Dr. Hasan AKBAŞ  
İkinci Tez Danışmanı



Doç. Dr. Cengiz DANE  
Tez Danışmanı

Bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından Matematik Anabilim Dalında bir Doktora tezi olarak oy birliği ile kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Prof. Dr. Yusuf AVCI

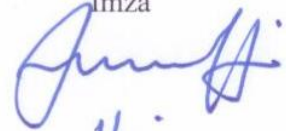
Prof. Dr. Hülya İŞCAN

Prof. Dr. İlhan ERDOĞAN

Doç. Dr. Fügen TORUNBALCI AYDIN

Doç. Dr. Cengiz DANE(Tez Danışmanı)

İmza



Tarih: 25/11/2016

**T.Ü. FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**MATEMATİK DOKTORA PROGRAMI**  
**DOĞRULUK BEYANI**

İlgili tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını ve kullanılan tüm literatür bilgilerinin kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını beyan ederim.

25/11/2016



Arzu GÜLEROĞLU

Doktora Tezi

Radyal Schrödinger Denkleminin Özel Potansiyeller İçin Asimptotik İterasyon Yöntemi

Ve Varyasyonel Yöntemle Çözümleri

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü

Matematik Anabilim Dalı

## ÖZET

II. Bölümde adi diferansiyel denklemlerin çözümlerinin bulunmasında kullanılan bazı nümerik çözüm yöntemleri hakkında bilgi verilmiştir.

III. Bölümde asimptotik iterasyon yöntemi tanıtılmıştır. Asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak radyal Schrödinger denklemi ile verilen özdeğer probleminin çözümleri  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} - \frac{d}{r^2}$  potansiyeli için belli kolşullar altında elde edilmiştir.

IV. Bölümde varyasyonel yöntem tanıtılmış, yöntem kullanılarak  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r}$  potansiyelli bir özdeğer probleminin çözümleri verilmiştir. Özel olarak  $V(r) = \frac{1}{32}r^2 + r - \frac{4}{r}$  potansiyeli için problemin çözümü varyasyonel yöntem ve asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak elde edilmiş ve elde edilen çözümler karşılaştırılmıştır.

V. Bölümde asimptotik iterasyon yöntemi ve varyasyonel yöntem kullanılarak önceki bölümde elde edilen çözümler karşılaştırılarak ulaşılan sonuçlar verilmiştir.

Yıl : 2016

Sayfa Sayısı : 89

Anahtar Kelimeler : Nümerik yöntem, asimptotik iterasyon yöntemi, varyasyonel yöntem, radyal Schrödinger denklemi.

Doctoral Thesis

The Solutions Of The Radial Schrödinger Equation By Using Asymptotic Iteration Method And Variational Method For Special Potentials

Trakya University Institute of Natural Sciences

Department of Mathematics

## ABSTRACT

In Chapter II, a brief information is given about some numerical solution methods determining the solutions of ordinary differential equations.

In Chapter III, the asymptotic iteration method is introduced. The solutions of eigenvalue problem which are given by radial Schrödinger equation for the potential  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} - \frac{d}{r^2}$  are obtained under certain conditions using asymptotic iteration method.

In Chapter IV, the variational method is introduced. The solutions of an eigenvalue problem with the potential  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r}$  are given by using this method. In particular, the solutions of the problem for the potential  $V(r) = \frac{1}{32}r^2 + r - \frac{4}{r}$  are obtained by using asymptotic iteration method and variational method. These solutions are compared.

In Chapter V, the solutions which are obtained in previous chapters by using asymptotic iteration method and variational method are compared and results are given.

Year : 2016

Number of Pages : 89

Keywords : Numerical method, asymptotic iteration method, variational method, radial Schrödinger equation.

## ÖNSÖZ

Bu çalışmada, radyal Schrödinger denklemi ile verilen özdeğer probleminin çözümü belli koşullar altında, asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} - \frac{d}{r^2}$  potansiyeli için 3.2.4. bölümde elde edilmiştir. Aynı problemin çözümü belli koşullar altında, varyasyonel yöntem kullanılarak  $V(r) = -\frac{c}{r}$  potansiyeli için 4.2.2. bölümde,  $V(r) = br - \frac{c}{r}$  potansiyeli için 4.2.3. bölümde,  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r}$  potansiyeli için 4.2.4. bölümde verilmiştir. Özel olarak, 4.2.5. bölümde  $a$ ,  $b$ ,  $c$  parametreleri ve sabitlerin özel değerleri için  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r}$  potansiyelli radyal Schrödinger denklemi ile verilen özdeğer probleminin çözümü, varyasyonel yöntem ve asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak elde edilmiş, elde edilen çözüm, farklı yöntemlerle elde edilen çözümler ile karşılaştırılmıştır.

Çalışmalarım boyunca bilgi ve tecrübeleriyle beni yönlendiren değerli danışman hocalarım Doç. Dr. Cengiz DANE'ye ve Prof. Dr. Hasan AKBAŞ'a tüm katkı ve emekleri için teşekkür ederim.

Bilgi ve yardımlarını esirgemeyen değerli hocam Prof. Dr. Hülya İŞCAN'a (Trakya Üniversitesi Fen Fakültesi Matematik Bölümü) ilgisi ve desteği için teşekkür ederim.

Çalışma arkadaşım Arş. Gör. Dr. Sema MİNEZ'e (Trakya Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü) yardımları için teşekkür ederim.

Her zaman yanımda olan sevgili anneme ve babama maddi manevi tüm destekleri için teşekkür ederim.

Bu çalışma, Trakya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi'nde yapılan TÜBAP-2010/127 numaralı doktora projesi ile desteklenmiştir.

Arzu GÜLEROĞLU

## İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
ÖNSÖZ.....	iii
İÇİNDEKİLER.....	iv
SİMGELER DİZİNİ.....	vi
TABLolar LİSTESİ.....	vii
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	viii
BÖLÜM 1 GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2 ADİ DİFERANSİYEL DENKLEMLERİN NÜMERİK ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ.....	4
2.1. Diferansiyel Denklemlerin Kısa Tarihçesi.....	4
2.2. Birinci ve İkinci Mertebeden Adi Diferansiyel Denklemlerin Çözümleri İçin Bazı Nümerik Yöntemler.....	6
2.2.1. Birinci Mertebeden Adi Diferansiyel Denklemlerin Çözümleri İçin Bazı Nümerik Yöntemler.....	7
2.2.1.1. Euler Yöntemi.....	7
2.2.1.2. Geri Euler Yöntemi.....	8
2.2.1.3. Yamuklar Yöntemi.....	10
2.2.1.4. Taylor ve Runge-Kutta Yöntemleri.....	11
2.2.1.4.1. Taylor Yöntemi.....	12
2.2.1.4.2. Runge-Kutta Yöntemi.....	13
2.2.1.5. Çok-Adımlı Yöntemler.....	15
2.2.1.5.1. Adams-Bashforth Yöntemi.....	16
2.2.1.5.2. Adams-Moulton Yöntemi.....	20
2.2.2. İkinci Mertebeden Adi Diferansiyel Denklemlerin Çözümleri İçin Bazı Nümerik Yöntemler.....	21
2.2.2.1. İki nokta sınır değer problemleri için sonlu fark yöntemi.....	21

2.2.2.2.	Galerkin Yöntemi.....	25
2.2.2.3.	Ritz Yöntemi.....	27
2.2.2.4.	Pertürbasyon Teorisi.....	29
BÖLÜM 3	RADYAL SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN ÖZEL POTANSİYELLER İÇİN ASİMPOTİK İTERASYON YÖNTEMİYLE ÇÖZÜMLERİ.....	34
3.1.	Asimptotik İterasyon Yöntemi.....	36
3.2.	Radyal Schrödinger Denkleminin Özel Potansiyeller İçin Asimptotik İterasyon Yöntemiyle Çözümleri.....	44
3.2.1.	Radyal Schrödinger Denklemi.....	44
3.2.2.	Morse Potansiyeli İçin Çözüm.....	47
3.2.3	$V(r) = \frac{a}{r^2} - \frac{b}{r} + cr^\kappa$ Potansiyeli İçin Çözüm.....	51
3.2.4.	$V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} - \frac{d}{r^2}$ Potansiyeli İçin Çözüm.....	55
BÖLÜM 4	RADYAL SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN ÖZEL POTANSİYELLER İÇİN VARYASYONEL YÖNTEMLE ÇÖZÜMLERİ.....	60
4.1.	Varyasyonel Yöntem.....	62
4.2.	Radyal Schrödinger Denkleminin Özel Potansiyeller İçin Varyasyonel Yöntemle Çözümleri.....	71
4.2.1.	$V(r) = 0$ İçin Çözüm.....	71
4.2.2.	$V(r) = -\frac{c}{r}$ İçin Çözüm.....	72
4.2.3	$V(r) = br - \frac{c}{r}$ İçin Çözüm.....	73
4.2.4.	$V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r}$ İçin Çözüm.....	73
4.2.5.	Radyal Schrödinger Denkleminin Belli Koşullar Altında Asimptotik İterasyon Yöntemi ve Varyasyonel Yöntem Kullanılarak Elde Edilen Çözümlerinin Karşılaştırılması.....	75
BÖLÜM 5	SONUÇLAR.....	81
	KAYNAKLAR.....	83
	ÖZGEÇMİŞ.....	88
	TEZ İLE İLGİLİ BİLİMSEL FAALİYETLER.....	89



## SİMGELER DİZİNİ

$(a)_k$	Pochhammer sembolü
$C^\infty$	Her mertebeden türevlenebilen ve sürekli fonksiyonların uzayı
$E$	Enerji
${}_2F_1$	Hipergeometrik fonksiyon
${}_1F_1$	Confluent hipergeometrik fonksiyon
$h$	Adım uzunluğu
$\hbar$	$6.63 \times 10^{-27} / (2\pi)$ erg.s
$H$	Hamiltonian operatörü
$H_\nu(x)$	Hermite polinomları
$J_0$	Sıfırıncı basamaktan birinci çeşit Bessel fonksiyonu
$L_2$	Karesi integrallenebilen fonksiyonların uzayı
$m$	Kütle
$\nabla^2$	Laplace operatörü
$O(h^n)$	Kalan terim
$P_n(x)$	Legendre polinomları
$\psi$	Dalga fonksiyonu
$V$	Potansiyel
$Y_0$	Sıfırıncı basamaktan ikinci çeşit Bessel fonksiyonu

### Kısaltmalar

AB	Adams-Bashforth
AM	Adams-Moulton

## TABLolar LİSTESİ

Tablo 2.2.1.5.1.1.	Adams-Bashforth yöntemi.....	19
Tablo 2.2.1.5.2.1.	Adams-Moulton yöntemi.....	21
Tablo 3.1.1.	İkinci mertebeden lineer homojen bazı diferansiyel denklemler ve bilinen çözümleri [51, 52].....	38
Tablo 3.1.2.	İkinci mertebeden bazı lineer homojen diferansiyel denklemlere asimptotik iterasyon yöntemi uygulandığında elde edilen değerler [13].....	40
Tablo 3.1.3.	İkinci mertebeden lineer homojen bazı diferansiyel denklemlere asimptotik iterasyon yönteminin önerdiği çözümler [13].....	41
Tablo 4.1.	$\hbar = 1, m = 1, l = 0, a, b, c, r_0 \in \mathbb{R}_+, 0 < r < r_0$ için $V(r)$ ve $H'$ 'nin özel hallerinde varyasyonel yöntem ile elde edilen özdeğerler ve çözüm fonksiyonları.....	75
Tablo 4.2.	$\hbar = 1, m = 1, l = 0, a = \frac{1}{32}, b = 1, c = 4, d = 0$ ve $r_0 = 22.6274$ için asimptotik iterasyon yöntemi, varyasyonel yöntem, tam analitik iterasyon yöntemi ve Hill determinant yöntemi ile elde edilen $E$ özdeğerleri.....	80

## ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.2.1.1.1.	Euler yönteminin geometrik gösterimi.....	8
Şekil 2.2.1.4.2.1.	Runge-Kutta yönteminin geometrik gösterimi.....	15
Şekil 4.1.	$c = 4$ ve $r_0 = 22.6274$ için $K_4[R_4(r, \mu)]$ fonksiyonelinin $\mu$ 'ye göre değişim grafiği.....	77
Şekil 4.2.	$b = 1$ , $c = 4$ , $\mu = 3.9980$ ve $r_0 = 22.6274$ için $K_{14}[R_{14}(r, \eta)]$ fonksiyonelinin $\eta$ 'ya göre değişim grafiği....	78
Şekil 4.3.	$a = \frac{1}{32}$ , $b = 1$ , $c = 4$ , $\mu = 3.9980$ , $\eta = 0.0890$ ve $r_0 = 22.6274$ için $K_{\frac{1}{32}14} \left[ R_{\frac{1}{32}14}(r, \xi) \right]$ fonksiyonelinin $\xi$ 'ye göre değişim grafiği.....	79

# BÖLÜM 1

## GİRİŞ

$$y'' = p(x)y' + q(x)y \quad (1.1)$$

tipinde ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklemler, fen ve mühendislik bilimlerinde birçok problemin uygulamasında en sık rastlanan adi diferansiyel denklemler arasında yer almaktadır. Bu denklemlerin tam çözümlerini bulmak çoğu zaman mümkün olmamaktadır. Böyle durumlarda, yaklaşık çözümleri araştırmak için çeşitli nümerik çözüm yöntemleri kullanılmaktadır [1-11].

$p(x) \neq 0, p, q \in C^\infty$  olmak üzere (1.1) tipindeki denklemlerin çözümlerinin bulunmasında kullanılan nümerik çözüm yöntemlerinden birisi asimptotik iterasyon yöntemidir. Bu yöntem, 2003'de Hakan Çiftçi, Richard L. Hall ve Nasser Saad tarafından geliştirilmiştir [12]. Asimptotik iterasyon yöntemi ile çözüm bulmada,  $\lambda_0(x) = p(x)$  ve  $s_0(x) = q(x)$  olmak üzere, (1.1) denkleminin iteratif olarak türevi alınır ve her adımda, bir önceki adımdaki  $y'$ 'nin en yüksek mertebeden türevi için elde edilen ifadenin kullanılması ile  $\lambda_k(x), s_k(x)$   $k = 1, 2, \dots$  için;  $p, q$  ve bunların türevlerine bağlı olacak şekilde iterasyon bağıntıları elde edilir. Bir  $k > 0$  sayısı için  $\frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)} = \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} = \alpha(x)$  olacak biçimde  $\alpha$  fonksiyonunun bulunması halinde, (1.1) denkleminin çözümleri için genel bir ifade önerilir.  $p(x) = 0$  olan denklemlerde, denklemin asimptotik iterasyon yönteminin uygulanabileceği hale gelmesi için denkleme, bir bilinmeyen fonksiyona bağlı olan bir çözüm önerilmesi gerekir. Bu çözüm,  $p(x) = 0$  olan denklemde kullanıldığında; çözümde yer alan bilinmeyen fonksiyon için, asimptotik iterasyon yönteminin uygulanabileceği bir diferansiyel denklem elde edilir. Elde edilen diferansiyel denkleme asimptotik iterasyon yöntemi uygulanarak bilinmeyen fonksiyon belirlenir. Böylece  $p(x) = 0$  olan denklemin çözümü de belirlenmiş olur. Asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak; matematik,

fizik ve mühendislikte bir çok problemin uygulamasında önemli olan Hermite, Laguerre, Legendre, Bessel, hipergeometrik ve confluent hipergeometrik denklemlere tam çözümler de verilmiştir [12, 13].

(1.1) tipindeki denklem çözümlerinin bulunmasında kullanılan nümerik çözüm yöntemlerinden birisi de varyasyonel yöntemdir. Varyasyonel yöntem, varyasyon hesabına dayanır. Varyasyon hesabı, Johann Bernoulli'nin 1696'da geliştirdiği brachistochrone eğri problemi olarak bilinen iki noktayı birleştiren en kısa zaman eğrisinin bulunması problemi ile başlar. Problem ilk olarak 1733'de Leonhard Euler tarafından ayrıntılı bir şekilde ele alınmış ve varyasyon hesabı kavramı bilime kazandırılmıştır [9, 14]. Varyasyon hesabı, fonksiyonlar ve bunların türevlerini içeren belirli integrallerle tanımlanan bir fonksiyonelin maksimum veya minimumlarının bulunması problemiyle ilgilidir. Bu problem, fonksiyoneli ekstremum yapan fonksiyonun sağladığı bir diferansiyel denkleme karşılık gelir. Varyasyon probleminin sonucu olarak ortaya çıkan diferansiyel denklemlerden birisi de

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.2)$$

şeklindeki bir boyutta zamandan bağımsız Schrödinger denklemdir [9, 10].

Schrödinger denklemi, fizik biliminde en önemli denklemlerden birisidir. Bu diferansiyel denklem, 1926'da Erwin Schrödinger tarafından önerilmiştir [15-18].

Varyasyonel yöntemle göre (1.2) denklemine, varyasyonel parametre denilen bir veya daha fazla bilinmeyen parametreye bağlı bir  $\psi$  çözüm fonksiyonu önerilir. Varyasyonel parametreler, varyasyon problemindeki fonksiyoneli minimum yapacak şekilde belirlenir. Fonksiyonelin minimum değeri en küçük  $E$  özdeğerini verir.  $E$  özdeğerini minimum yapan varyasyonel parametreler için, bu özdeğere karşılık gelen  $\psi$  fonksiyonu belirlenir [9, 10, 14, 18].

Literatürde yer alan birçok çalışmada, asimptotik iterasyon yöntemi (1.2)'de verilen Schrödinger denkleminin özel hallerine uygulanır [23-38]. Bu özel hallerin bazılarında, asimptotik iterasyon yöntemi ile denklemin tam çözümleri de bulunmuştur [24, 28-32, 35-38].

Bu çalışmada, (1.1) tipindeki diferansiyel denklemlerin asimptotik iterasyon ve varyasyonel yöntemle çözümlerinin incelenmesi amaçlanmıştır. Yöntemlerin bir uygulaması olarak bazı özel hallerde tek değişkenli radyal Schrödinger denkleminin çözümleri araştırılmış ve bu iki yöntemle bulunan sonuçlar karşılaştırılmıştır.

İkinci bölümde diferansiyel denklemlerin kısa bir tarihçesine yer verildikten sonra birinci ve ikinci mertebeden adi diferansiyel denklemlerin yaklaşık çözümlerinin belirlenmesinde kullanılan bazı temel nümerik çözüm yöntemleri hakkında özet bilgi verilmiştir [1-8, 43-48].

Üçüncü bölümde, asimptotik iterasyon yöntemi tanıtılmış; belli koşullar altında  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} - \frac{d}{r^2}$  potansiyeli için radyal Schrödinger denklemi ile verilen özdeğer probleminin asimptotik iterasyon yöntemi ile çözümleri elde edilmiştir.

Dördüncü bölümde, varyasyonel yöntem tanıtılmıştır. Belli koşullar altında,  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r}$  potansiyeli için radyal Schrödinger denklemi ile verilen özdeğer problemine, varyasyonel yöntem kullanılarak çözümler önerilmiştir.  $a$ ,  $b$ ,  $c$  parametreleri ve sabitlerin özel değerleri,  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r}$  potansiyelinde kullanılarak Schrödinger denklemi asimptotik iterasyon ve varyasyonel yöntemle çözülmüş ve bu iki farklı yöntemle bulunan çözümler birbiri ile karşılaştırılmıştır.

Son bölümde, asimptotik iterasyon yöntemi ve varyasyonel yöntem kullanılarak elde edilen sonuçlar farklı yöntemler kullanılarak bulunan sonuçlar ile karşılaştırıldığında ulaşılan sonuçlar verilmiştir.

## BÖLÜM 2

### ADİ DİFERANSİYEL DENKLEMLER İÇİN NÜMERİK ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ

#### 2.1. Diferansiyel Denklemlerin Kısa Tarihçesi

Matematiksel yöntemleri bir fizik problemine veya gerçek hayattaki bir probleme uygulayabilmek için problem matematiksel terimlerle formüle edilmelidir, yani problem için matematiksel bir model yapılmalıdır. Birçok fizik problemi, değişen nicelikler arasındaki ilişkilerle ilgilidir. Değişim oranı matematiksel olarak türevlerle gösterildiğinden matematiksel modeller genellikle, bir bilinmeyen fonksiyon ve onun bir veya daha fazla türevi arasında ilişki kuran diferansiyel denklemleri içerir [39].

Diferansiyel denklemlere ilk olarak Isaac Newton'un (1642-1727) 1671 yılında yazdığı "Flux metodu ve sonsuz seriler" adlı eserinde rastlanmıştır. Newton diferansiyel denklemleri çözmek için kuvvet serilerinden yararlanmıştır [40].

"Diferansiyel denklem" ifadesi ilk kez Gottfried Wilhelm von Leibniz'in (1646-1716) 1676 yılında Newton'a yazdığı bir mektupta geçmiştir. Leibniz diferansiyel denklemlerin kuvvet serilerinin yardımı ile çözümlerinin yanısıra, büyük ölçüde Bernoulli kardeşlerin katkıları ile bu türden olan denklemlerin sınıflandırılması ve çözümlerinin belirsiz integrale dönüştürülmesinin de temelini atmıştır. Diferansiyel ve integral hesabının keşfinden sonra, değişkenlerine ayrılabilir bir grup denklem ve bu denkleme dönüştürülebilen homojen, lineer ve Bernoulli denklemleri, Leibniz, Jacob Bernoulli (1654-1705) ve Johann Bernoulli (1667-1748) kardeşler tarafından çözülmüştür [40].

Onyedinci yüzyılın sonuna kadar, birinci mertebeden denklemlerin hemen hemen bugün bilinen tüm temel çözüm yöntemleri bulunmuştur [41].

Onsekizinci yüzyılda, diferansiyel denklemler teorisi hızla gelişmeye başlamıştır. Leonhard Euler (1707-1783) de yüksek mertebeden lineer homojen

denklemlerin mertebesini düşürmeyi başarmıştır. İlk kez 1715 yılında Brook Taylor'un (1685-1731) çalışmalarında "tekil çözüm"e rastlanmıştır. Bundan yirmi yıl sonra Alexis Claude Clairaut (1713-1765), bugün kendi adını taşıyan Clairaut denkleminin tekil çözümünü, Euler ise tekil çözümle integrasyon çarpanı arasındaki ilişkiyi bulmuştur. Fakat tekil çözümlerin sistematik incelenmesi Joseph Louis Lagrange'la (1736-1813) başlamıştır. İlk kez Lagrange tekil çözümlerin nasıl bulunabileceğine açıklık getirmiştir. Tekil çözümlerin, özel çözümlerin bir zarfı olabileceği de Lagrange tarafından gösterilmiştir [40].

Ondokuzuncu yüzyılda genel ve özel çözümlerin ve varlık teoremlerinin ortaya çıkışı ile genel teori zenginleşmiştir. Daha fazla denklem tipi ve bunların çözümleri, örneğin özel fonksiyonlar gibi kavramlar bu yüzyılda ortaya çıkmıştır [42]. Çözümün varlığı, tekliği, tekil nokta ve tekil çözüm gibi kavramlar ancak ondokuzuncu yüzyılda gelişmiştir. Ougustin Louis Cauchy'nin (1789-1857), başlangıç değer problemi gibi temel konulardaki çalışmaları, Rudolf Lipschitz (1832-1903), Charles Emile Picard (1856-1941), Giuseppe Peano (1858-1932) gibi matematikçilerin de katkıları ile diferansiyel denklemlerin klasik teorisi tamamlanma aşamasına gelmiştir [40]. Diferansiyel denklemler klasik fizik, ısı teorisi, optik, elektrik, manyetizma gibi fizik ve mühendisliğin pek çok alanına uygulanmaktadır [42].



## 2.2. Birinci ve İkinci Mertebeden Adi Diferansiyel Denklemlerin Çözümleri İçin Bazı Nümerik Yöntemler

Çoğu diferansiyel denklem analitik olarak çözülebilir ve bulunan genel çözümde denklemin mertebesine eşit sayıda keyfi sabit bulunur. Bu sabitlerin özel değerleri için elde edilen çözümler özel çözümlerdir. Uygulamalı bilimlerde diferansiyel denklemin genel çözümlerinin bulunması yerine onun bazı ek koşulları sağlayan özel çözümlerinin bulunması istenir.

Bütün koşulların bağımsız değişkenin aynı değeri için belirlenmesi halinde probleme “başlangıç değer problemi”, koşulların bağımsız değişkenin iki farklı değerinde, özellikle ilgilenilen bir bölgenin sınırlarında verildiği takdirde probleme “sınır değer problemi” denir.

Bir adi diferansiyel denklemin nümerik olarak çözümü için gerekli sayıda koşulun bilinmesi ve bu koşulların nümerik çözümde kullanılması gerekir.

Başlangıç değer probleminde nümerik çözüm bir başlangıç noktasında başlar, bu noktadan itibaren bağımsız değişkenin değeri artırılarak çözüme adım adım devam edilir. Sınır değer probleminde ise çözüm bir sınırdan başlatılarak iteratif olarak diğer sınıra doğru ilerletilir ve bu sınırdaki koşul sağlanır [43].

Yüksek mertebeden bir adi diferansiyel denklemin çözümü, uygun bir nümerik yöntem, doğrudan denkleme ya da bu denkleme denk olan birinci mertebeden adi diferansiyel denklemlerin oluşturduğu sisteme, uygulanarak araştırılabilir. Örneğin,

$$Y''(x) = f(x, Y(x), Y'(x)); \quad Y(x_0) = Y_0, \quad Y'(x_0) = Y'_0, \quad \left( Y' = \frac{dY}{dx} \right) \quad (2.2.1)$$

başlangıç değer problemi,

$$Y_1(x) = Y(x) \text{ ve } Y_2(x) = Y'(x) \quad (2.2.2)$$

olmak üzere,

$$Y_1'(x) = Y_2(x),$$

$$Y_2'(x) = f(x, Y_1(x), Y_2(x));$$

$$Y_1(x_0) = Y_0, \quad Y_2(x_0) = Y'_0 \quad (2.2.3)$$

şeklindeki denklem sistemi ile ifade edilebilir. Uygun bir nümerik yöntem, bu sistemdeki her bir denkleme uygulanarak çözümler araştırılırsa, (2.2.1) probleminin  $Y$  çözümü belirlenir [1, 2]. Bir ve ikinci mertebeden denklemlerin oluşturduğu sistemlere uygulanan bazı nümerik çözüm yöntemleri hakkında özet bilgi verelim.

## 2.2.1. Birinci Mertebeden Adi Diferansiyel Denklemlerin Çözümleri İçin Bazı Nümerik Yöntemler

### 2.2.1.1. Euler Yöntemi

Euler yöntemi, başlangıç değer problemlerinin çözümünde kullanılan en basit yöntemdir. Bu yöntemde,

$$Y'(x) = f(x, Y(x)); \quad x_0 \leq x \leq b, \quad Y(x_0) = Y_0 \quad (x_0, b \in \mathbb{R}) \quad (2.2.1.1.1)$$

şeklindeki başlangıç değer probleminin

$$x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N \leq b \quad (2.2.1.1.2)$$

düğüm noktalarının bir kümesinde bir  $y(x)$  yaklaşık çözümünü elde etmek için  $Y(x)$  gerçek çözümünün Taylor serisinin birinci dereceye kadar olan terimleri kullanılır [1, 2, 43].

Kolaylık olması için bu düğüm noktaları,  $N \in \mathbb{N}$ ,  $h = \frac{b-x_0}{N}$  adım uzunluğu olmak üzere,

$$x_n = x_0 + nh, \quad n = 0, 1, \dots, N \quad (2.2.1.1.3)$$

olarak alınır ve düğüm noktalarındaki yaklaşık çözümler

$$y(x_n) = y_h(x_n) = y_n, \quad n = 0, 1, \dots, N \quad (2.2.1.1.4)$$

gösterimlerinden herhangi biri ile belirtilir. İnterpolasyon formu kullanılarak,  $[x_0, b]$ 'de (2.2.1.1.2)'deki noktaların dışındaki noktalarda da bir  $y(x)$  yaklaşık çözümü elde edilebilir [1, 2].

Euler yönteminde

$$Y'(x) \approx \frac{1}{h} [Y(x+h) - Y(x)] \quad (2.2.1.1.5)$$

şeklindeki türev yaklaşımı göz önüne alınır. İleri fark yaklaşımı da denilen bu yaklaşım,  $x = x_n$  için

$$Y'(x_n) = f(x_n, Y(x_n)) \quad (2.2.1.1.6)$$

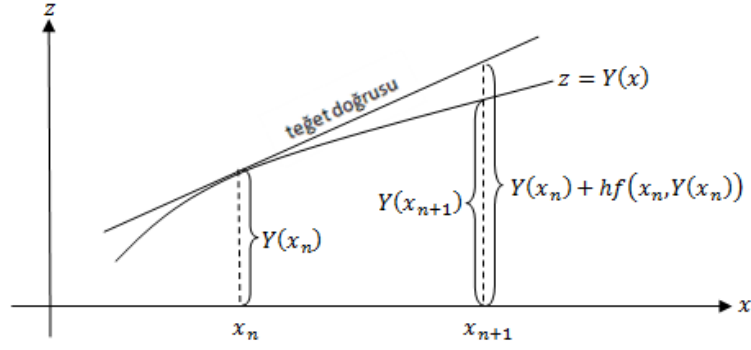
şeklinde ifade edilen (2.2.1.1.1) başlangıç değer problemine uygulanırsa

$$\frac{1}{h} [Y(x_{n+1}) - Y(x_n)] \approx f(x_n, Y(x_n))$$

$$Y(x_{n+1}) \approx Y(x_n) + hf(x_n, Y(x_n)) \quad (2.2.1.1.7)$$

elde edilir. Bu yaklaşım, Euler yöntemi ile

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad 0 \leq n \leq N - 1 \quad (2.2.1.1.8)$$



**Şekil 2.2.1.1.1.** Euler yönteminin geometrik gösterimi.

şeklinde tanımlanır [1-6]. Başlangıç tahmini için  $y_0 = Y_0$  veya  $Y_0$ 'ın birkaç yakın yaklaşımı kullanılır. Bazen  $Y_0$  değeri denenerek elde edilir ve yaklaşık olarak belirlenir. (2.2.1.1.8) formülü ile  $y_1, y_2, \dots, y_N$  ardışık olarak hesaplanır. Bu hesaplamada  $h$  adım uzunluğu yeterince küçük tutulursa nümerik çözümdeki hata da küçük olur [1, 2, 43].

Şekil 2.2.1.1.1'de görüldüğü gibi  $z = Y(x)$  eğrisinin grafiğinin  $x_n$ 'deki teğet doğrusu (2.2.1.1.6) eğimine sahiptir.  $(x_n, Y(x_n))$  noktasının yakınında eğriye yaklaşmak için teğet doğrusu kullanılırsa, teğet doğrusunun  $x = x_{n+1}$ 'deki değeri (2.2.1.1.7)'nin sağ tarafı ile verilir [1, 2].

### 2.2.1.2. Geri Euler Yöntemi

Gerçek Euler yöntemi,

$$Y'(x) = \lambda Y(x); \quad x > 0, \quad Y(0) = 1 \quad (\lambda < 0 \text{ sabit}) \quad (2.2.1.2.1)$$

şeklindeki bir başlangıç değer problemine uygulandığında, herhangi bir  $h$  adım uzunluğu için

$$x_n \rightarrow \infty \text{ iken } y_h(x_n) \rightarrow 0 \quad (2.2.1.2.2)$$

özelliği sağlanır. Bu nedenle bu yönteme “mutlak kararlıdır” denir [1, 2].

Euler yönteminde (2.2.1.1.5) ileri fark yaklaşımı kullanılır. İleri fark yaklaşımı yerine

$$Y'(x) \approx \frac{1}{h} [Y(x) - Y(x - h)] \quad (2.2.1.2.3)$$

şeklinde geri fark yaklaşımı kullanılırsa bu durumda,  $x = x_n$ 'de

$$Y'(x) = f(x, Y(x)) \quad (2.2.1.2.4)$$

diferansiyel denklemi

$$y_n = y_{n-1} + hf(x_n, y_n) \quad (2.2.1.2.5)$$

olarak ayrıştırılır. Burada  $n$  yerine  $n + 1$  alınırsa

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}), \quad 0 \leq n \leq N - 1, \quad y_0 = Y_0 \quad (2.2.1.2.6)$$

geri Euler yöntemi elde edilir. Geri Euler yöntemi, Euler yöntemi gibi birinci mertebeden doğruluktadır ve Euler yöntemi için geçerli olan

“ $Y(x)$ ,  $[x_0, b]$  aralığında ikinci mertebeye kadar sürekli türevlere sahip gerçek çözüm ve

$$K = \sup_{\substack{-\infty < z < \infty \\ x_0 \leq x \leq b}} \left| \frac{\partial f(x, z)}{\partial z} \right| < \infty \quad (2.2.1.2.7)$$

olmak üzere

$x_0 \leq x_n \leq b$  aralığındaki her  $x_n$  için  $y_h(x)$  Euler yöntemi çözümü

$$|Y(x_n) - y_h(x_n)| \leq e^{(b-x_0)K} |Y_0 - y_0| + h \left[ \frac{e^{(b-x_0)K} - 1}{2K} \right] \max_{x_0 \leq x \leq b} |Y''(x)| \quad (2.2.1.2.8)$$

hata sınırını sağlar”.

teoremine benzer bir yakınsak sonuç geçerlidir [1, 2]. Ayrıca

$$Y(x_n) - y_h(x_n) = hD(x_n) + O(h^2), \quad x_0 \leq x_n \leq b \quad (2.2.1.2.9)$$

biçiminde bir asimptotik hata açılımı geçerlidir. (2.2.1.2.9) ifadesindeki  $D(x)$ ,

$$g(x) = \left. \frac{\partial f(x, z)}{\partial z} \right|_{z=Y(x)} \quad (2.2.1.2.10)$$

olmak üzere

$$D'(x) = g(x)D(x) + \frac{1}{2}Y''(x); \quad D(x_0) = 0 \quad (2.2.1.2.11)$$

başlangıç değer problemini sağlayan fonksiyondur [1, 2].

(2.2.1.2.1) probleminde

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1} \quad (2.2.1.2.12)$$

$$y_{n+1} = (1 - h\lambda)^{-1} y_n, \quad n \geq 0, \quad y_0 = 1 \quad (2.2.1.2.13)$$

ve

$$y_n = (1 - h\lambda)^{-n} \quad (2.2.1.2.14)$$

dir. Herhangi bir  $h > 0$  adım uzunluğu için  $|1 - h\lambda| > 1$  ve bu yüzden  $n \rightarrow \infty$  iken  $y_n \rightarrow 0$  olur. Bu da Euler yönteminin (2.2.1.2.2) özelliğine sahip olduğunu gösterir.

(2.2.1.2.1) problemine geri Euler teoremi uygulandığında bu yöntemin Euler yönteminden daha uygun sonuçlar verdiği görülür.

İki yöntem arasındaki fark, geri Euler yönteminin, her bir adımında

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \quad (2.2.1.2.15)$$

şeklindeki nonlinear cebirsel denklemini çözmeye ihtiyaç duymasıdır.

Nümerik yöntemlerde,  $y_{n+1}$  kapalı olarak tanımlandığında  $y_{n+1}$ ; implicit yöntemler denilen bir kök bulma probleminin çözümü ile bulunur. Karşıt olarak,  $y_{n+1}$ 'i doğrudan veren yöntemler explicit yöntemler olarak adlandırılır. Geri Euler yöntemi bir implicit yöntem iken Euler yöntemi bir explicit yöntemdir [1, 2].

### 2.2.1.3. Yamuklar Yöntemi

Euler yöntemi ve geri Euler yönteminin dezavantajı, düşük yakınsaklık mertebesinde olmalarıdır. Daha yüksek bir yakınsaklık mertebesine sahip ve aynı zamanda (2.2.1.2.1) probleminin çözümünde herhangi bir  $h$  adım uzunluğu için kararlılık özelliği geçerli olan yöntemlerden biri de yamuklar yöntemidir. Bu yöntemde (2.2.1.2.4) diferansiyel denkleminin

$$Y(x_{n+1}) = Y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, Y(x)) dx \quad (2.2.1.3.1)$$

şeklinde integrali alınır ve integrali yaklaştırmak için de

$$Y(x_{n+1}) \approx Y(x_n) + \frac{h}{2} [f(x_n, Y(x_n)) + f(x_{n+1}, Y(x_{n+1}))] \quad (2.2.1.3.2)$$

şeklinde yamuk kuralı kullanılır.

$$Y'(x) = f(x, Y(x)); \quad x \geq x_0, \quad Y(x_0) = Y_0 \quad (2.2.1.3.3)$$

şeklindeki başlangıç değer problemini çözmek için (2.2.1.3.2) bir eşitlik olarak alınır

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})], \quad n \geq 0, \quad y_0 = Y_0 \quad (2.2.1.3.4)$$

yamuklar yöntemi denen yöntem elde edilir. Yöntem ikinci mertebeden doğruluktandır ve mutlak kararlıdır [1-3].

Yamuklar yöntemi implicit bir yöntemdir. Genel bir adımda,  $y_{n+1}$  değeri

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] \quad (2.2.1.3.5)$$

denkleminde bulunur ve yüzde mertebesinde bir hata ile hesaplanabilir. (2.2.1.2.15)

geri Euler denkleminin çözümü ile ilgili irdeleme, küçük bir varyasyon ile (2.2.1.3.5)

denkleminin çözümüne uygulanır. Uygulamada,  $y_{n+1}^{(0)} \approx y_{n+1}$  olmak üzere

$$y_{n+1}^{(j+1)} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(j)}), \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2.1.3.6)$$

iterasyon formülü

$$y_{n+1}^{(j+1)} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(j)})], \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2.1.3.7)$$

formülü ile yer değiştirir.  $h$  yeterince küçük ise  $y_{n+1}^{(j)}$  iterasyonu  $j \rightarrow \infty$  iken  $y_{n+1}$ 'e yakınsar. Bu durumda

$$\left| h \cdot \frac{\partial f(x_{n+1}, y_{n+1})}{\partial z} \right| < 1, \quad (2.2.1.3.8)$$

yakınsaklık koşulu

$$\left| \frac{h}{2} \cdot \frac{\partial f(x_{n+1}, y_{n+1})}{\partial z} \right| < 1, \quad (2.2.1.3.9)$$

koşulu ile yer değiştirir. (2.2.1.3.8) koşulu yerine (2.2.1.3.9) koşulunu kullanmak, yamuklar yöntemini kullanmanın geri Euler yöntemini kullanmaktan daha kolay olduğunu gösterir [1, 2].

(2.2.1.3.7) için  $y_{n+1}^{(0)}$  başlangıç tahmininin bir seçimi;

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \quad (2.2.1.3.10)$$

şeklinde Euler yöntemine veya

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + \frac{h}{2} [3f(x_n, y_n) - f(x_{n-1}, y_{n-1})] \quad (2.2.1.3.11)$$

ikinci mertebeden Adams-Bashforth yöntemine dayanır. Bunlar “tahmin formülleri” olarak adlandırılırlar. Bu iki durumda da (2.2.1.3.7)’den  $y_{n+1}^{(1)}$  hesaplanır ve hesaplanan değer  $y_{n+1}$  kökü olarak kabul edilir.  $y_{n+1}^{(0)}$  seçmekle her iki yöntem ile  $\{y_h(x_n)\}$  sonuç çözümündeki global hata  $O(h^2)$  olur. Eğer (2.2.1.3.10) Euler tahmini,  $y_{n+1}^{(0)}$ ’ı tanımlamak için kullanılırsa ve  $y_{n+1}^{(1)}$ ,  $y_{n+1}$ ’in değeri olarak kabul edilirse yeni gösterim olarak

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n))] \quad (2.2.1.3.12)$$

alınır. Bu yöntem Heun yöntemi olarak bilinmektedir. Heun yöntemi ikinci mertebeden doğruluktandır ve mutlak kararlı değildir [1, 2].

#### 2.2.1.4. Taylor ve Runge-Kutta Yöntemleri

Euler yönteminin yakınsaklık hızını geliştirmenin bir yolu;  $Y(x_{n+1})$  için,

$$Y(x_{n+1}) \approx Y(x_n) + hY'(x_n) \quad (2.2.1.4.1)$$

şeklindeki yaklaşımdan daha hassas yaklaşımlar aramaktan geçer. (2.2.4.1) yaklaşımı bir lineer Taylor polinom yaklaşımı olduğundan daha yüksek mertebeden Taylor yaklaşımlarının göz önüne alınması beklenir. Bu, kullanılan Taylor yaklaşımının mertebesine bağlı olan yöntemlerin bir ailesini verir [1, 2].

### 2.2.1.4.1. Taylor Yöntemi

(2.2.1.1.1) Başlangıç değer problemini, Taylor yöntemini kullanarak çözmek için Taylor yaklaşımının bir mertebesi seçilir. Herhangi bir  $p$ -inci mertebeden Taylor yaklaşımı için

$$T_{n+1} = \frac{h^{p+1}}{(p+1)!} Y^{(p+1)}(\xi_n), \quad x_n \leq \xi_n \leq x_{n+1}, \quad p = 0, 1, \dots \quad (2.2.1.4.1.1)$$

kesme hatası ile (2.2.4.1) yaklaşımı

$$Y(x_{n+1}) \approx Y(x_n) + hY'(x) + \dots + \frac{h^p}{p!} Y^{(p)}(x) \quad (2.2.1.4.1.2)$$

şeklinde yazılır. (2.2.1.1.1)'deki diferansiyel denklem art arda türevleri alınır ve elde edilen formüller kapalı olarak yalnız  $x_n$  ve  $Y(x_n)$  içerecek şekilde düzenlenirse  $Y''(x), \dots, Y^{(p)}(x)$  için formüller bulunur. Bu formüllerin ilk ikisi;  $z = Y(x)$ ,

$$f_x(x, z) = \frac{\partial f(x, z)}{\partial x}, \quad f_z(x, z) = \frac{\partial f(x, z)}{\partial z}, \quad f_{xz}(x, z) = \frac{\partial^2 f(x, z)}{\partial x \partial z}, \quad \text{v.b.}$$

olmak üzere

$$Y''(x) = f_x(x, z) + f_z(x, z)f(x, z)$$

$$Y^{(3)}(x) = f_{xx}(x, z) + 2f_{xz}(x, z)f(x, z) + f_{zz}(x, z)f^2(x, z) \\ + f_z(x, z)(f_x(x, z) + f_z(x, z)f(x, z))$$

şeklinindedir. Daha yüksek mertebeden türevlerin formülleri, türevin mertebesi arttıkça karmaşıklaşır. Bu formüller (2.2.1.4.1.2)'de yerine yazılır ve elde edilen ifade bir eşitlik olarak alınır

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2} y''_n + \dots + \frac{h^p}{p!} y_n^{(p)} \quad (2.2.1.4.1.3)$$

şeklinde bir nümerik yöntem elde edilir [1, 2]. (2.2.1.4.1.3) yöntemi; eğer  $Y(x)$  çözümü ve  $f(x, z)$  fonksiyonu yeterli mertebeden türeve sahip ise  $c$ , Geri Euler Yöntemi'nde ortaya çıkan sabite benzer bir sabit olmak üzere,

$$\max_{x_0 \leq x_n \leq b} |Y(x_n) - y_n(x_n)| \leq ch^p \cdot \max_{x_0 \leq x \leq b} |Y^{(p+1)}(x)| \quad (2.2.1.4.1.4)$$

eşitsizliğini sağlar. Bununla birlikte;  $D(x)$ , (2.2.1.2.11) başlangıç değer problemini sağlayan fonksiyon olmak üzere

$$Y(x_n) - y_n(x_n) = h^p D(x_n) + O(h^{p+1}) \quad (2.2.1.4.1.5)$$

şeklinde bir asimptotik hata formülü vardır. Bu iki sonuçtan (2.2.1.4.1.4), yüksek mertebeden Taylor yaklaşımlarının, yüksek mertebeden yakınsaklığa eşit bir sonuç verdiğini gösterir. (2.2.1.4.1.5) asimptotik sonucu, hatayı tahmin etmek ve yakınsaklığı hızlandırmak için

$$Y(x) - y_h(x) \approx y_h(x) - y_{2h}(x) \quad (2.2.1.4.1.6)$$

şeklinde verilen Richardson kestiriminin kullanılması gerektiğini gösterir [1, 2].

#### 2.2.1.4.2. Runge-Kutta Yöntemi

Taylor yöntemi çok işlem gerektiren bir yöntemdir. Yüksek mertebeden türevlerden kaçınmak için Runge-Kutta yöntemi kullanılır. Runge-Kutta yöntemi Taylor yöntemine göre kolaydır ve  $f(x, z)$ 'yi daha çok noktada hesaplar. Bu yöntem başlangıç değer problemlerinin çözümünde en çok tercih edilen yöntemler arasındadır [1-5].

İkinci mertebeden Runge-Kutta yöntemi

$$y_{n+1} = y_n + hF(x_n, y_n; h), \quad n \geq 0, \quad y_0 = Y_0 \quad (2.2.1.4.2.1)$$

genel formuna sahiptir. Burada  $F(x_n, y_n; h)$ ,  $[x_n, x_{n+1}]$  aralığında çözümün bir "ortalama eğim"i gibi düşünülebilir.

İkinci mertebeden yöntem için, genellikle

$$F(x, y; h) = \gamma_1 f(x, y) + \gamma_2 f(x + ah, y + \beta hf(x, y)) \quad (2.2.1.4.2.2)$$

seçilir ve  $\alpha, \beta, \gamma_1, \gamma_2$  sabitleri belirlenir. Böylece  $Y(x)$  gerçek çözümü (2.2.1.4.2.1)'de yerine konulduğunda

$$T_{n+1} \equiv Y(x_{n+1}) - [Y(x_n) + hF(x_n, Y(x_n); h)] \quad (2.2.1.4.2.3)$$

kesme hatası, ikinci mertebeden Taylor yöntemindeki gibi  $O(h^3)$  olur [1, 2].

Sabitleri belirlemek için gerekli olan denklemlerin bulunmasında ve  $T_{n+1}$  kesme hatasının hesabında Taylor açılımları kullanılır. Bunun için önce  $f(x + ah, y + \beta hf(x, y))$  terimi,  $y$  civarında  $z$ 'ye göre açılarak

$$f(x + ah, y + \beta hf(x, y)) = f(x + ah, y) + f_z(x + ah, y)\beta hf(x, y) + O(h^2) \quad (2.2.1.4.2.4)$$

şeklinde yazılır. Bu ifadedeki terimler  $x$  değişkenine göre açılır ve buradaki fonksiyonların hepsi  $(x, y)$ 'de hesaplanırsa

$$f(x + ah, y + \beta hf(x, y)) = f(x, y) + f_x(x, y)ah + f_z(x, y)\beta hf(x, y) + O(h^2) \quad (2.2.1.4.2.5)$$

elde edilir [1, 2].

$$Y''(x) = f_x(x, y) + f_z(x, y)f(x, y) \quad (2.2.1.4.2.6)$$

türevi,

$$Y(x + h) = Y(x) + hY'(x) + \frac{h^2}{2}Y''(x) + O(h^3) \quad (2.2.1.4.2.7)$$



Taylor açılımında kullanılarak

$$Y(x+h) = Y(x) + hf(x,y) + \frac{h^2}{2}(f_x(x,y) + f_z(x,y)f(x,y)) + O(h^3) \quad (2.2.1.4.2.8)$$

şeklinde yazılır. Daha sonra (2.2.1.4.2.5) ve (2.2.1.4.2.8) ifadeleri göz önüne alınarak

$$\begin{aligned} Y(x+h) - [Y(x) + hF(x, Y(x); h)] \\ &= Y(x) + hf(x,y) + \frac{h^2}{2}(f_x(x,y) + f_z(x,y)f(x,y)) - [Y(x) + h\gamma_1 f(x,y) \\ &\quad + \gamma_2 h(f(x,y) + \alpha hf_x(x,y) + \beta hf_z(x,y)f(x,y))] + O(h^3) \\ &= h(1 - \gamma_1 - \gamma_2)f(x,y) + \frac{h^2}{2}[(1 - 2\gamma_2\alpha)f_x(x,y) \\ &\quad + (1 - 2\gamma_2\beta)f_z(x,y)f(x,y)] + O(h^3) \end{aligned} \quad (2.2.1.4.2.9)$$

elde edilir. Buradan, (2.2.1.4.2.1) eşitliğinin sağlanması için (2.2.1.4.2.9) eşitliğinin sağ tarafındaki katsayıların

$$\begin{aligned} 1 - \gamma_1 - \gamma_2 &= 0 \\ 1 - 2\gamma_2\alpha &= 0 \\ 1 - 2\gamma_2\beta &= 0 \end{aligned} \quad (2.2.1.4.2.10)$$

sistemini sağlaması gerektiği görülür. Bunun için

$$\gamma_1 = 1 - \gamma_2, \quad \gamma_2 \neq 0, \quad \alpha = \beta = \frac{1}{2\gamma_2} \quad (2.2.1.4.2.11)$$

dir. Böylece,  $\gamma_2$ 'nin seçimine bağlı olarak ikinci mertebeden Runge-Kutta yönteminin bir ailesi bulunur. En çok tercih edilen üç  $\gamma_2$  seçimi  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{3}{4}$  ve 1'dir.  $\gamma_2 = \frac{1}{2}$  seçimi ile

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))], \quad n \geq 0 \quad (2.2.1.4.2.12)$$

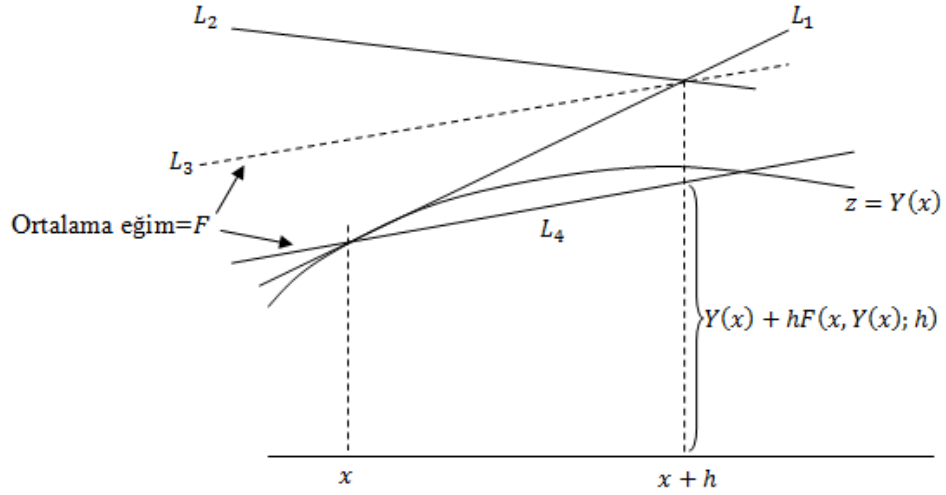
nümerik yöntemi elde edilir. Bu aynı zamanda yamuklar yönteminde ele alınan Heun yöntemi [1, 2].  $y_n + hf(x_n, y_n)$  sayısı  $x_{n+1}$ 'de Euler çözümüdür. Bu kullanılarak,  $x_{n+1}$ 'de türeve bir yaklaşım

$$f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n)), \quad (2.2.1.4.2.13)$$

şeklinde bulunur. Bu yaklaşım ve  $f(x_n, y_n)$  eğimi  $[x_n, x_{n+1}]$  aralığında

$$F(x_n, y_n; h) = \frac{1}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))], \quad (2.2.1.4.2.14)$$

şeklindeki çözümün bir ortalama eğimini verir. Bu, (2.2.1.4.2.12)'de  $y_n$ 'den  $y_{n+1}$ 'i belirlemek için kullanılır. Bu tanım  $[x, x+h]$  aralığında  $Y'$ 'nün ortalama bir eğimi olarak  $F(x, Y(x))$  için şekil 2.2.4.2.1'de örneklendirilmiştir [1, 2].



**Şekil 2.2.1.4.2.1.** Runge-Kutta yönteminin geometrik gösterimi.

Şekil 2.2.1.4.2.1’de;  $L_1$ ’in eğimi  $f(x, Y(x))$ ,  $L_2$ ’nin eğimi  $f(x+h, Y(x) + hf(x, Y(x)))$ ,  $L_3$  ve  $L_4$ ’ün eğimi  $F(x, Y(x); h)$ ’in ortalamasıdır.

Daha yüksek mertebeden Runge-Kutta yönteminin formülasyonu da ikinci mertebeden Runge-Kutta yöntemine benzer şekilde yapılabilir [1, 2].

### 2.2.1.5. Çok-Adımlı Yöntemler

Euler, Taylor ve Runge-Kutta yöntemleri, bir adımdaki integral değerini hesaplamak için sadece en son adımda bulunan değerleri kullandıklarından “tek-adımlı yöntemler” olarak nitelendirilirler [1, 2, 43]. Bu özelliklerinden dolayı bu yöntemlerde her bir adımdaki hesap farklı bir adım uzunluğu kullanarak yapabilmekte ve başlangıç koşullarının bir noktada verilmesi halinde çözümü başlatabilmektedirler [43].

Diferansiyel denklem çözümü bir noktada başlatılıp ilk adımlar atıldıktan sonra çözüm yapılmış olan noktalarda çözüm fonksiyonu ve türevleri hakkında bilgi edinilmiş olur. Bu bilgiler integrasyonun devamı için kullanılabilir. Bu şekilde önceki noktalarda elde edilen bilgileri sonraki noktalarda integrasyon için kullanan yöntemler “çok adımlı yöntemler” olarak adlandırılır.

Çok adımlı yöntemler, daha açık bir ifadeyle,  $y$  ve  $y'$ ’nün önceki değerlerini kullanarak türev fonksiyonuna bir polinom karşı getirip, bu polinomu sonraki adım için ekstrapole ederek integral alma esasına dayanırlar. Bu tipteki çoğu yöntemde polinomun

oluşturulmasını kolaylaştırmak açısından eşit adım uzunluğu kullanması tercih edilir. Kullanılan geçmiş noktaların sayısı polinomun derecesini ve dolayısıyla kesme hatasının mertebesini belirler. Yöntemin derecesi, global hata terimindeki  $h$  büyüklüğünün üssüne eşit olup polinomun derecesinden bir büyüktür [43].

Çok adımlı yöntemlerde  $y_{n+1}$  nümerik çözümü hesaplanırken önceki birkaç düğüm noktasındaki çözüm değerleri kullanılır. (2.2.1.2.4) diferansiyel denklemi,  $[x_n, x_{n+1}]$  aralığında integre edilerek çözüm (2.2.1.3.1) şeklinde yeniden formüle edilir [1-5].

(2.2.1.3.1)'deki integrali yakınlılaştırarak  $Y(x)$  çözümünü bulmak için kullanılan çok adımlı nümerik yöntemlerden en popüler olanları Adams-Bashforth(AB) ve Adams-Moulton(AM) yöntemleridir. Yüksek doğruluk derecesi olan bir çözüm bulunmak isteniyorsa veya  $f(x, z)$  türevinin değeri kolayca belirlenemiyor ise bu yöntemler genellikle Runge-Kutta yönteminden daha iyi sonuç verirler.

Bu yöntemlerde;  $Y(x_{n+1})$  çözümünün hesaplanmasında

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} g(x)dx, \quad g(x) = f(x, Y(x)) \quad (2.2.1.5.1)$$

integrali, interpolasyon polinomu kullanılarak  $g(x)$ 'e yaklaştırılır ve sonra interpolate olan polinom integre edilir [1, 2].

### 2.2.1.5.1. Adams-Bashforth Yöntemi

AB yöntemi  $q \geq 0$  ve  $q$  tamsayı olmak üzere  $\{x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-q}\}$  noktalarının kümesinde  $q$ .dereceden bir interpolasyon polinomu kullanır. AB yöntemi lineer interpolasyona dayanmaktadır [1, 2].

$\{x_n, x_{n-1}\}$ 'de  $g(x)$ 'in lineer interpolasyon polinomu

$$p_1(x) = \frac{1}{h} [(x_n - x)g(x_{n-1}) + (x - x_{n-1})g(x_n)] \quad (2.2.1.5.1.1)$$

şeklindedir ve  $[x_n, x_{n+1}]$  üzerinde  $p_1(x)$  integre edilerek

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} g(x)dx \approx \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_1(x)dx = \frac{3h}{2} g(x_n) - \frac{h}{2} g(x_{n-1}) \quad (2.2.1.5.1.2)$$

elde edilir. Buradan, (2.2.1.5.1.2) integrali  $x_{n-1} \leq \xi_n \leq x_{n+1}$  için

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} g(x)dx = \frac{h}{2} [3g(x_n) - g(x_{n-1})] + \frac{5}{12} h^3 g''(\xi_n) \quad (2.2.1.5.1.3)$$

şeklinde yazılabilir. Bunun (2.2.1.3.1) bağıntısına uygulanması ile

$$Y(x_{n+1}) = Y(x_n) + \frac{h}{2} [3f(x_n, Y(x_n)) - f(x_{n-1}, Y(x_{n-1}))] + \frac{5}{12} h^3 Y'''(\xi_n) \quad (2.2.1.5.1.4)$$

değeri bulunur. Buradan (2.2.1.5.1.3) eşitliğinde kesme hatası olan son terim göz önüne alınmazsa

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [3f(x_n, y_n) - f(x_{n-1}, y_{n-1})] \quad (2.2.1.5.1.5)$$

elde edilir [1, 2].

Görüldüğü gibi bu yöntemde  $n \geq 1$  almak gerekir, ayrıca  $y_2$ 'yi belirlerken hem  $y_0$  hem de  $y_1$ 'e ihtiyaç vardır ve  $y_1$  (2.2.1.5.1.5)'den bulunamaz.  $y_1$  değeri başka bir yöntemle bulunmalıdır.  $x_{n-1}$  ve  $x_n$ 'deki değerler  $x_{n+1}$ 'deki değeri bulmak için gerekli olduğundan, (2.2.1.5.1.5) bir iki-adımlı yöntemdir. Eğer  $y_1$ , bir  $O(h^2)$  doğruluğu ile belirlenebiliyorsa, (2.2.1.5.1.5) AB yöntemi ikinci mertebededir, yani kesme hatası  $O(h^3)$  ile sınırlandırıldığından, global hatası  $O(h^2)$  ile sınırlandırılabilir [1, 2].

AB yöntemi Runge-Kutta yönteminden daha az işlem gerektiren bir yöntemdir. Bunun temel nedeni (2.2.1.4.2.12) ikinci mertebeden Runge-Kutta yöntemi ile (2.2.1.5.1.5) karşılaştırılarak görülebilir. Her iki yöntemin temeli  $f(x, z)$  fonksiyonunun hesabına dayanır. İkinci mertebeden Runge-Kutta yöntemi ile  $x_n$ 'den  $x_{n+1}$ 'e her adım için,  $f$ 'nin iki değeri vardır. Tersine, (2.2.1.5.1.5) AB formülü,  $f$ 'nin geçmiş değerlerinin tekrar kullanılması koşulu ile adım başına yalnız bir değer kullanır. Bunun gibi bir nümerik yöntemin seçimini etkileyen başka faktörler de vardır, fakat AB ve AM yöntemleri verilen bir doğruluk değeri için gerek duyulan  $f$ 'lerin sayılarının hesaplanması için daha uygun yöntemlerdir [1, 2].

$n$ . mertebeden bir AB yöntemi için  $y_0, y_1, \dots, y_n$  başlangıç değerlerinin bulunması gerekir. Bu değerleri belirlerken Euler veya Runge-Kutta yöntemleri kullanılabilir. (2.2.1.5.1.5)'deki ikinci mertebeden AB yöntemi için  $y_1$ 'in bulunması gerekir.  $y_h(x_n)$ 'deki global hata  $O(h^2)$  mertebeden olacağından,  $Y(x_1) - y_h(x_1)$ 'in de  $O(h^2)$  mertebeden olması sağlanmalıdır.  $y_1$ 'i belirlemek için aşağıdaki iki yoldan biri izlenebilir [1, 2].

**i.Durum:**  $y_1$ , Euler yöntemindeki (2.2.1.8) yaklaşımı kullanılarak

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) \quad (2.2.1.5.1.6)$$

şeklinde alınabilir. Euler yöntemine göre  $x_{n+1}$  adımda tanımlanan  $y_{n+1}$ 'deki hata  $x_n \leq \xi_n \leq x_{n+1}$  için

$$Y(x_{n+1}) - y_{n+1} = Y(x_n) - y_n + h[f(x_n, Y(x_n)) - f(x_n, y_n)] + \frac{h^2}{2} Y''(\xi_n) \quad (2.2.1.5.1.7)$$

şeklindedir. (2.2.1.5.1.7)'de  $y_0 = Y_0$  varsayılarak,  $x_1$  adımında  $y_1$ 'in

$$Y(x_1) - y_1 = \frac{h^2}{2} Y''(\xi_1) \quad (2.2.1.5.1.8)$$

şeklinde bir hataya sahip olduğu belirlenir. Genelde, Euler yöntemi yalnız  $O(h)$  için doğrudur, fakat tek adımın hatası  $O(h^2)$ 'dir [1, 2].

**ii.Durum:**  $y_1$ 'i belirlemek için ikinci yol (2.2.1.4.2.12)'deki gibi ikinci mertebeden bir Runge-Kutta yöntemi kullanılmaktadır. Bu nedenle,  $x_1$  adımında  $y_1$ 'deki hata  $Y(x_1) - y_1 = O(h^3)$  olur [1, 2].

Yüksek mertebeden Adams-Bashforth yöntemi, (2.2.1.5.1)'deki integralin yaklaşımında yüksek dereceden interpolasyon polinomu kullanılarak elde edilir.

Örneğin,  $g(x)$ 'i  $x_n, x_{n-1}, x_{n-2}$  noktalarında interpolate eden kuadratik polinom

$$p_2(x) = \frac{(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})}{2h^2} g(x_n) - \frac{(x-x_n)(x-x_{n-2})}{h^2} g(x_{n-1}) + \frac{(x-x_n)(x-x_{n-1})}{2h^2} g(x_{n-2}) \quad (2.2.1.5.1.9)$$

şeklindedir. Bu durumda (2.2.1.5.1.2)'dekine benzer şekilde

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} g(x) dx \approx \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_2(x) dx \quad (2.2.1.5.1.10)$$

integrali kullanılır.

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} p_2(x) dx = \frac{h}{12} [23g(x_n) - 16g(x_{n-1}) + 5g(x_{n-2})] \quad (2.2.1.5.1.11)$$

olduğundan  $x_{n-2} \leq \xi_n \leq x_{n+1}$  için

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} g(x) dx = \frac{h}{12} [23g(x_n) - 16g(x_{n-1}) + 5g(x_{n-2})] + \frac{3}{8} h^4 g'''(\xi_n) \quad (2.2.1.5.1.12)$$

şeklinde yazılabilir. Bu integral de (2.2.1.3.1)'e uygulanarak

$$Y(x_{n+1}) = Y(x_n) + \frac{h}{12} [23f(x_n, Y(x_n)) - 16f(x_{n-1}, Y(x_{n-1})) + 5f(x_{n-2}, Y(x_{n-2}))] + \frac{3}{8} h^4 Y^{(4)}(\xi_n) \quad (2.2.1.5.1.13)$$

değeri elde edilir. Buradan kesme hatası olan son terim ihmal edilerek,  $k \geq 0$  için  $y'_k \equiv f(x_k, y_k)$  olmak üzere

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} [23y'_n - 16y'_{n-1} + y'_{n-2}], \quad n \geq 2 \quad (2.2.1.5.1.14)$$

üçüncü mertebeden AB yöntemi elde edilir. Bu,  $n \geq 2$  gerektiren üç adımlı bir yöntemdir. Burada,  $y_1, y_2$  değerleri başka yöntemlerle ayrı ayrı bulunmalıdır [1, 2].

Genel olarak,  $q$  dereceden interpolasyona dayanan AB yöntemi bir  $(q + 1)$ -adımli yöntemdir ve bu yöntemin kesme hatası bir  $x_{n-q} \leq \xi_n \leq x_{n+1}$  için

$$T_{n+1} = c_q h^{q+2} Y^{(q+2)}(\xi_n), \quad q \in \mathbb{N} \quad (2.2.1.5.1.15)$$

biçimindedir. Benzer şekilde  $y_1, \dots, y_q$  başlangıç değerleri başka yöntemlerle belirlenmelidir. Eğer başlangıç değerlerindeki hatalar

$$Y(x_n) - y_h(x_n) = O(h^{q+1}), \quad n = 1, 2, \dots, q \quad (2.2.1.5.1.16)$$

eşitliğini sağlarsa  $(q + 1)$ -adımli AB yöntemindeki global hata  $O(h^{q+1})$  olacaktır. Ek olarak,

$$Y(x_n) - y_h(x_n) = D(x_n)h^{q+1} + O(h^{q+1}) \quad (2.2.1.5.1.17)$$

asimptotik hata formülü, önceden tanımlanan Taylor ve Runge-Kutta yöntemleri için daha doğru olacaktır. (2.2.1.5.1.17) ifadesindeki  $D(x)$  fonksiyonu,  $g(x)$  (2.2.1.2.9)'daki gibi olmak üzere (2.2.1.2.11) başlangıç değer problemini sağlayan fonksiyondur. Bu durumda Richardson kestirimi, yöntemin yakınsaklığını hızlandırmak ve hatayı tahmin etmek için kullanılabilir.

$(q + 1)$ -adımli AB yöntemi için  $y_1, \dots, y_q$  başlangıç değerlerini elde etmek ve bunların hatalarının (2.2.1.5.1.16) eşitliğini sağlamaları için  $q$  mertebeden bir Runge-Kutta yöntemini kullanmak yeterlidir.

1-4 mertebeye kadar AB yöntemi tablo 2.2.1.5.1.1.'de verilmektedir. Burada 1 mertebeli formül basit Euler yöntemidir. Tabloda  $y'_k \equiv f(x_k, y_k)$  dır [1, 2].

**Tablo 2.2.1.5.1.1.** Adams-Bashforth yöntemi.

$q$	Mertebe	Yöntem	Kesme hatası
0	1	$y_{n+1} = y_n + hy'_n$	$\frac{1}{2}h^2Y''(\xi_n)$
1	2	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[3y'_n - y'_{n-1}]$	$\frac{5}{12}h^3Y'''(\xi_n)$
2	3	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[23y'_n - 16y'_{n-1} + 5y'_{n-2}]$	$\frac{3}{8}h^4Y^{(4)}(\xi_n)$
3	4	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[55y'_n - 59y'_{n-1} + 37y'_{n-2} - 9y'_{n-3}]$	$\frac{251}{720}h^5Y^{(5)}(\xi_n)$

### 2.2.1.5.2. Adams-Moulton Yöntemi

Adams-Moulton yöntemi, Adams-Bashford yönteminin iyileştirilmiş bir şeklidir [43]. AM yöntemi incelenirken, (2.2.1.5.1)'de verilen  $g(x)$ 'i  $x_n$  ve  $x_{n+1}$ 'de interpolate eden

$$p_1(x) = \frac{1}{h} [(x_{n+1} - x)g(x_n) + (x - x_n)g(x_{n+1})] \quad (2.2.1.5.2.1)$$

şeklinde lineer bir polinom göz önüne alınır. Bu polinomu (2.2.1.5.1)'deki integrale yaklaştırmak için basit yamuklar kuralı kullanılarak

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} g(x)dx \approx \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_1(x)dx = \frac{h}{2} [g(x_n) + g(x_{n+1})] \quad (2.2.1.5.2.2)$$

elde edilir. (2.2.1.5.2.2) integrali ve yamuklar kuralı için

$$\int_a^{a+h} f(x)dx - h \left[ \frac{f(a)+f(a+h)}{2} \right] = -\frac{h^3}{12} f''(c) \quad (2.2.1.5.2.3)$$

şeklindeki hata terimi kullanılarak (2.2.1.3.1) ifadesi

$$Y(x_{n+1}) = Y(x_n) + \frac{h}{2} [f(x_n, Y(x_n)) + f(x_{n+1}, Y(x_{n+1}))] - \frac{h^3}{12} Y'''(\xi_n) \quad (2.2.1.5.2.4)$$

şeklinde yazılır. Buradan da kesme hatası olan son terim ihmal edilerek

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})], \quad n \geq 0 \quad (2.2.1.5.2.5)$$

şeklindeki AM yöntemi elde edilir. Bu ise yamuklar yöntemi olarak bilinen yöntemdir.

Bu yöntem ikinci mertebeden bir yöntemdir ve global hatası  $O(h^2)$ 'dir [1, 2].

Benzer şekilde  $\{x_{n+1}, x_n, \dots, x_{n-q+1}\}$  düğüm noktalarında (2.2.1.5.1)'nin  $g(x)$  fonksiyonunu interpolate eden  $q$ . dereceden polinomu integre ederek  $(q + 1)$ . mertebeden AM yöntemi elde edilir. Bu, bir implicit yöntemdir, fakat diğer yönlerden, önceden tanımlanan AB yöntemi ile aynıdır. 1'den 4. mertebeye kadar olan AM yöntemi tablo 2.2.1.5.2.1.'de verilmiştir. Tabloda;  $y'_k \equiv f(x_k, y_k)$  ve 1.mertebeden AM yönteminin geri Euler yöntemi ve 2. mertebeden AM yönteminin yamuklar yöntemi olduğu görülür [1, 2].

1 ve 2. mertebeden AM yöntemi (2.2.1.2.2)'de verilen mutlak kararlılık özelliğine sahiptir ve  $\lambda$  negatif fakat mutlak değerce büyük olmak üzere

$$Y'(x) = \lambda Y(x) + g(x) \quad (2.2.1.5.2.6)$$

şeklindeki stiff diferansiyel denklemlerini çözmek için uygundur [1, 2].

**Tablo 2.2.1.5.2.1.** Adams-Moulton yöntemi.

$q$	Mertebe	Yöntem	Kesme hatası
0	1	$y_{n+1} = y_n + hy'_{n+1}$	$-\frac{1}{2}h^2Y'''(\xi_n)$
1	2	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[y'_{n+1} + y'_n]$	$-\frac{1}{12}h^3Y'''(\xi_n)$
2	3	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[5y'_{n+1} + 8y'_n - y'_{n-1}]$	$-\frac{1}{24}h^4Y^{(4)}(\xi_n)$
3	4	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[9y'_{n+1} - 19y'_n - 5y'_{n-1} + y'_{n-2}]$	$-\frac{19}{720}h^5Y^{(5)}(\xi_n)$

Eşit mertebeden AB ve AM yöntemleri için AM yöntemi mutlak kararlılığın daha geniş bölgesine sahiptir. Bu nedenle, Adams-Moulton yöntemi genellikle Adams-Bashforth yöntemine tercih edilebilir [1, 2].

## 2.2.2. İkinci Mertebeden Adi Diferansiyel Denklemlerin Çözümleri İçin Bazı Nümerik Yöntemler

### 2.2.2.1. İki nokta sınır değer problemleri için sonlu fark yöntemi

Sonlu fark yöntemi, lineer denklemler için kullanılan ve türevlerin sonlu fark yaklaşımlarını kullanarak denklemleri ayrıştırmak suretiyle çözen bir yöntemdir [43].

$$Y'' = f(x, Y, Y') \quad (2.2.2.1.1)$$

diferansiyel denkleminin bir başlangıç değer problemi, birinci mertebeden bir denklem sisteminin bir başlangıç değer problemi olarak tekrar formüle edilebilir. (2.2.2.1.1) diferansiyel denkleminin, farklı iki  $x$  değeri için  $Y$  çözümü üzerindeki koşullar ile verilen problemler iki nokta sınır değer problemleri olarak adlandırılırlar.

$$Y''(x) = p(x)Y'(x) + q(x)Y(x) + r(x); \quad a \leq x \leq b, \quad Y(a) = g_1, \quad Y(b) = g_2 \quad (2.2.2.1.2)$$

şeklindeki sınır değer problemi göz önüne alınsın. Burada  $Y(a) = g_1$  ve  $Y(b) = g_2$  koşulları sınır koşulları olarak adlandırılırlar [1, 2].

(2.2.2.1.2) sınır değer probleminde  $p(x), q(x)$  ve  $r(x)$ 'in  $[a, b]$  aralığında sürekli oldukları varsayılır. Bu da;  $x \in [a, b]$  için  $q(x) > 0$  ise (2.2.2.1.2) sınır değer probleminin bir tek çözüme sahip olduğunu ifade eder. Problemin tek düzgün çözümünün  $Y(x)$  olduğunu varsayalım.



Sonlu fark yönteminin temel özelliği,  $Y$ 'nin türevlerini, uygun sonlu bölünmüş farklar ile yer değiştirerek farklı denklemler elde etmektir. Üç adımda (2.2.2.1.2) sınır değer problemi için bir sonlu fark sistemi elde edilir [1, 2].

İlk adımda; problemin tanım kümesi, yani  $[a, b]$  aralığı ayrıştırılır.  $N$  bir pozitif tamsayı ve  $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = b$   $[a, b]$ 'de düğüm noktaları olmak üzere  $[a, b]$  aralığı

$$[a, b] = [x_0, x_1] \cup [x_1, x_2] \cup \dots \cup [x_{N-1}, x_N] \quad (2.2.2.1.3)$$

şeklinde  $N$  eşit parçaya bölünür.  $h = \frac{b-a}{N}$  adım uzunluğu olmak üzere düğüm noktaları

$$x_i = a + ih, \quad 0 \leq i \leq N \quad (2.2.2.1.4)$$

ile verilirler. Aralığın farklı biçimde bölüntüsünü bulmak da mümkündür. Eğer (2.2.2.1.2) sınır değer probleminin çözümü aralığın bazı kısımlarında, kalan kısmından daha hızla değişirse, bu bölüntü tercih edilir. Kolaylık için (2.2.2.1.4) biçimindeki bölüntü durumunu göz önüne alalım ve  $p_i = p(x_i), q_i = q(x_i), r_i = r(x_i)$ ,  $0 \leq i \leq N$  gösterimini kullanalım.  $0 \leq i \leq N$  için  $Y_i = Y(x_i)$  gerçek çözüm değerlerinin nümerik yaklaşımları olarak  $y_i$ 'yi alalım.

İkinci adımda;  $x_1, \dots, x_{N-1}$  iç düğüm noktalarında diferansiyel denklemi ayrıştıralım. Bunun için

$$Y'(x_i) = \frac{Y_{i+1} - Y_{i-1}}{2h} + O(h^2) \quad (2.2.2.1.5)$$

$$Y''(x_i) = \frac{Y_{i+1} - 2Y_i + Y_{i-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (2.2.2.1.6)$$

fark yaklaşım formüllerini göz önüne alalım. Bu durumda  $x = x_i$ 'de (2.2.2.1.2) diferansiyel denklemi

$$\frac{Y_{i+1} - 2Y_i + Y_{i-1}}{h^2} = p_i \frac{Y_{i+1} - Y_{i-1}}{2h} + q_i Y_i + r_i + O(h^2) \quad (2.2.2.1.7)$$

olur.  $O(h^2)$  kalan terimi ihmal edilerek ve  $Y_i, y_i$  ile yer değiştirilerek

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = p_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q_i y_i + r_i, \quad 0 \leq i \leq N - 1 \quad (2.2.2.1.8)$$

fark denklemleri elde edilir. Bu denklemler

$$-\left(1 + \frac{h}{2} p_i\right) y_{i-1} + (2 + h^2 q_i) y_i + \left(\frac{h}{2} p_i - 1\right) y_{i+1} = -h^2 r_i, \quad 0 \leq i \leq N - 1 \quad (2.2.2.1.9)$$

şeklinde tekrar düzenlenebilir [1, 2].

Üçüncü adımda; sınır koşulları ayrıştırılır. (2.2.2.1.9) fark denklemleri,  $(N + 1)$  tane  $y_0, y_1, \dots, y_N$  bilinmeyen için  $(N - 1)$  tane denklemden oluşurlar.  $y_0, y_1, \dots, y_N$

bilinmeyenleri belirlenirken gerekli olan  $N$  tane denklemi elde etmek için iki denkleme daha ihtiyaç vardır ve bu denklemler sınır koşullarının ayrıştırılması ile belirlenirler.

(2.2.2.1.2) probleminde sınır koşullarının ayrıştırılması için

$$y_0 = g_1, \quad y_N = g_2 \quad (2.2.2.1.10)$$

olsun.

(2.2.2.1.9) ve (2.2.2.1.10) denklemleri, birlikte bir sistem oluştururlar.  $y_0$  ve  $y_N$ 'nin değerleri (2.2.2.1.10)'da açık olarak verildiğinden  $y_0$  ve  $y_N$  lineer sistemden elenebilir.  $y_0 = g_1$  ile (2.2.2.1.9)'daki denklemi  $i = 1$  ile

$$(2 + h^2 q_1)y_1 + \left(\frac{h}{2}p_1 - 1\right)y_2 = -h^2 r_1 + \left(1 + \frac{h}{2}p_1\right)g_1 \quad (2.2.2.1.11)$$

şeklinde tekrar yazılabilir. Benzer şekilde, (2.2.2.1.7)'deki denklemden  $i = N - 1$  ile

$$-\left(1 + \frac{h}{2}p_{N-1}\right)y_{N-2} + (2 + h^2 q_{N-1})y_{N-1} = -h^2 r_{N-1} + \left(1 - \frac{h}{2}p_{N-1}\right)g_2 \quad (2.2.2.1.12)$$

elde edilir [1, 2].

Böylece, bilinmeyen nümerik çözüm vektörü  $y = [y_1 \quad \cdots \quad y_N]^T$  için sonlu fark sistemi;

$$A = \begin{bmatrix} 2 + h^2 q_1 & \frac{h}{2}p_1 - 1 & & & & & & & \\ -\left(1 + \frac{h}{2}p_2\right) & 2 + h^2 q_2 & & \frac{h}{2}p_2 - 1 & & & & & \\ & & \ddots & & \ddots & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & 2 + h^2 q_{N-2} & \frac{h}{2}p_{N-2} - 1 & \\ & & & & -\left(1 + \frac{h}{2}p_{N-2}\right) & & -\left(1 + \frac{h}{2}p_{N-1}\right) & 2 + h^2 q_{N-1} & \end{bmatrix} \quad (2.2.2.1.13)$$

katsayı matrisi ve

$$b = \left[ -h^2 r_1 + \left(1 + \frac{h}{2}p_1\right)g_1 \quad -h^2 r_2 \quad \cdots \quad -h^2 r_{N-2} \quad -h^2 r_{N-1} + \left(1 + \frac{h}{2}p_{N-1}\right)g_2 \right]^T \quad (2.2.2.1.14)$$

de sütun vektör olmak üzere

$$Ay = b \quad (2.2.2.1.15)$$

şeklinde yazılır [1, 2].

$Y(x)$  gerçek çözümü düzgün yani dördüncü mertebeye kadar sürekli türevlere sahip ise bu durumda (2.2.2.1.15) fark gösteriminin ikinci mertebeden bir yöntem yani

$$\max_{0 \leq i \leq N} |Y(x_i) - y_i| = O(h^2) \quad (2.2.2.1.16)$$

olur.

Bundan başka,  $D(x)$   $h$ 'dan bağımsız bir fonksiyon olmak üzere,

$$Y(x_i) - y_h(x_i) = h^2 D(x_i) + O(h^4), \quad 0 \leq i \leq N \quad (2.2.2.1.17)$$

asimptotik hata genişlemesi geçerlidir. (2.2.2.1.17) ifadesindeki  $D(x)$ ,  $g(x)$  (2.2.1.2.9)'daki gibi olmak üzere (2.2.1.2.10) başlangıç değer problemini sağlayan fonksiyondur. Bu durum için Richardson kestirim formülü

$$\tilde{y}_h(x_i) = \frac{4y_h(x_i) - y_{2h}(x_i)}{3} \quad (2.2.2.1.18)$$

dür ve buradan

$$Y(x_i) - \tilde{y}_h(x_i) = O(h^4) \quad (2.2.2.1.19)$$

elde edilir [1, 2].

(2.2.2.1.15) lineer sistemi tridiagonaldır.

Genel olarak, (2.2.2.1.1) genel denklemini çözmek için fark gösterimi benzer şekilde türetilir. Örneğin, (2.2.2.1.5) ve (2.2.2.1.6) formülleri kullanılırsa bir  $x_i$  iç düğüm noktasında (2.2.2.1.1) denklemi,

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = f\left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right) \quad (2.2.2.1.20)$$

fark denklemi ile yaklaşılabılır.

$Y$  fonksiyonunun türevini içeren sınır koşullarının davranışı biraz daha karışıktır.

$x = b$ 'de sınır koşulunun

$$Y'(b) + kY(b) = g_2 \quad (2.2.2.1.21)$$

ile yer değiştirdiği varsayılır. Belli bir olasılık  $Y'(b)$ 'ye  $(Y_N - Y_{N-1})/h$  ile yaklaşmaktır. Bununla birlikte

$$Y'(b) - \frac{Y_N - Y_{N-1}}{h} = O(h) \quad (2.2.2.1.22)$$

ve bu yaklaşımın doğruluğu (2.2.2.1.7)'deki  $O(h^2)$  kalan teriminden bir merteye daha azdır. Sonuç olarak,

$$\frac{y_N - y_{N-1}}{h} + ky_N = g_2 \quad (2.2.2.1.23)$$

şeklindeki ayrık sınır koşulu ile birlikte uygun fark çözümü  $O(h)$ 'ın bir doğruluğuna sahiptir. Fark çözümünün ikinci mertebeden yakınsaklığını elde etmek için (2.2.2.1.21) sınır koşulunun daha doğru bir şekilde yaklaştırılmasına ihtiyaç duyulur. Bu ise

$$Y'(b) = \frac{3y_N - 4y_{N-1} + y_{N-2}}{2h} + O(h^2) \quad (2.2.2.1.24)$$

formülüne dayanır. Bu durumda (2.2.2.1.21) sınır koşulu

$$\frac{3y_N - 4y_{N-1} + y_{N-2}}{2h} + ky_N = g_2 \quad (2.2.2.1.25)$$

ile yaklaştırılır. Sonuçta oluşan fark gösteriminin ikinci mertebeden doğruluğa sahip olduğu gösterilebilir. (2.2.2.1.21) sınır koşuluna yaklaşmak için başka olasılıklar da vardır, böylece genel fark gösteriminin ikinci mertebeden doğruluğu sağlanır [1, 2].

### 2.2.2.2. Galerkin Yöntemi

Genel olarak  $A$  bir operatör olmak üzere  $Au = f$  şeklinde ifade edilebilen denklemlerin yaklaşık çözümünde varyasyonel yöntemler geniş bir uygulama alanına sahiptirler. Özellikle  $A$ 'nın diferansiyel operatör olması durumunda Galerkin ve benzer yöntemlerin çok sayıda uygulaması vardır [7, 44].

Galerkin yöntemi sürekli operatör problemini bir ayrık probleme dönüştürmede kullanılan yöntemlerin bir sınıfıdır. Prensip olarak, denklemi bir zayıf formülasyona dönüştürerek uygulanan, parametrelerin varyasyonu yönteminin bir fonksiyon uzayına uygulanmasıdır [45].

Zayıf formülasyonlar matematiğin uygulandığı alanlarda ortaya çıkan matematiksel denklemlerin analizinde lineer cebirin kavramlarının kullanılmasına izin veren önemli bir araçtır. Zayıf formülasyonda bir denklemin tam çözümü yerine zayıf çözüm olarak adlandırılan “deneme vektörü” veya “deneme fonksiyonu” alınır. Düzenleme anlamında bu, çözümü aranan problemin formüle edilmesidir [46].

$V$  bir Banach uzayı,  $V'$  bu uzayın bir duali,  $A: V \rightarrow V'$  ve  $f \in V'$  olmak üzere

$$Au = f \quad (2.2.2.2.1)$$

denklemi verilsin. Varyasyonlar hesabına göre bu denklemi çözmek, deneme vektörü veya deneme fonksiyonu olarak adlandırılan her  $v \in V$  için

$$[Au](v) = f(v) \quad (2.2.2.2.2)$$

olacak şekilde  $u \in V'$ 'yi bulmak demektir.  $u \in V$  fonksiyonu, zayıf formülasyonun bilineer formu olan

$$a(u, v) = [Au](v) \quad (2.2.2.2.3)$$

yardımı ile

$$a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in V \quad (2.2.2.2.4)$$

şeklindeki zayıf formülasyonun genel formundan bulunur [46].

(2.2.2.2.1) eşitliği ile verilen denklemlerin yaklaşık çözümlerinin bulunmasında kullanılan Galerkin yöntemi “ $H$  ayrılabilir bir Hilbert uzayı ve  $M$  bu uzayda yoğun bir küme olsun. Eğer  $u \in H$  için her  $v \in M$  olmak üzere

$$(u, v) = 0 \quad (2.2.2.2.5)$$

ise bu takdirde  $u = 0$ 'dır." teoremi üzerine kurulmuştur [7, 44].

Gerçekten;  $M, H$ 'da yoğun bir küme olsun. Bu takdirde  $H$  kümesinde

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n(x) = u(x) \quad (2.2.2.2.6)$$

olacak şekilde bir  $u_n(x) \in M$  fonksiyonlar dizisi bulunabilir. Bu varsayıma göre bu dizinin her  $u_n(x)$  fonksiyonu için

$$(u_n, u) = 0 \quad (2.2.2.2.7)$$

olur ve " $H$ 'da  $u_n \rightarrow u$  ise  $v \in H$  olmak üzere  $(u_n, v) \rightarrow (u, v)$  dir." teoremi gereğince

$v(x) = u(x)$  alarak

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (u_n, u) = (u, u) = 0 \text{ dan } u = 0 \quad (2.2.2.2.8)$$

elde edilir [7].

$$\phi_1, \phi_2, \dots \quad (2.2.2.2.9)$$

$H$ 'da bir taban olsun. Eğer tüm  $k = 1, 2, \dots$  için  $(u, \phi_k) = 0$  ise  $H$ 'da  $u = 0$  dır. Kısaca

$$(u, \phi_k) = 0 \text{ ise } u = 0 \text{ (} k = 1, 2, \dots \text{)} \quad (2.2.2.2.10)$$

dır.

Yani  $\phi_1, \phi_2, \dots$   $H$ 'da bir taban,  $n$  keyfi pozitif bir tamsayı,  $a_k$ 'lar keyfi reel sayılar olmak üzere

$$\sum_{k=1}^n a_k \phi_k \quad (2.2.2.2.11)$$

şeklindeki elemanların oluşturduğu  $M$  kümesi  $H$ 'da yoğundur. Her  $k \in \mathbb{N}$  için  $(u, \phi_k) = 0$  olduğundan  $M$ 'nin (2.2.2.2.11) ile verilen her elemanı için de

$$\left( u, \sum_{k=1}^n a_k \phi_k \right) = 0 \quad (2.2.2.2.12)$$

dır [7].

Buna göre (2.2.2.2.1) denklemi,  $H$  Hilbert uzayında bir denklem olmak üzere her  $k \in \mathbb{N}$  için  $(Au_0 - f, \phi_k) = 0$  olacak şekilde bir  $u_0 \in D_A$  bulunabilirse  $u_0$  denklemin çözümü olur.

Galerkin yönteminde  $u_0$  elemanının bir yaklaşımı olarak

$$u_n = \sum_{k=1}^n a_k \phi_k \quad (2.2.2.2.13)$$

alınır.  $a_k$  sabitleri  $(Au_n - f, \phi_k) = 0$  koşulundan tanımlanır. Bu koşul  $a_k$  sabitleri için,  $n$  bilinmeyenli  $n$  denklemden oluşan bir sistem verir. Bu sistem açık olarak

$$\begin{aligned}
(A\phi_1, \phi_1)a_1 + (A\phi_2, \phi_1)a_2 + \dots + (A\phi_n, \phi_1)a_n &= (f, \phi_1) \\
(A\phi_1, \phi_2)a_1 + (A\phi_2, \phi_2)a_2 + \dots + (A\phi_n, \phi_2)a_n &= (f, \phi_2) \\
\vdots &\vdots \\
(A\phi_1, \phi_n)a_1 + (A\phi_2, \phi_n)a_2 + \dots + (A\phi_n, \phi_n)a_n &= (f, \phi_n)
\end{aligned} \tag{2.2.2.2.14}$$

şeklinde yazılır [44]. Bundan başka, eğer  $A$  pozitif tanımlı,  $(A\phi_i, \phi_j) = (A\phi_j, \phi_i)$  şeklinde simetrik ve  $(u, v)_A = (Au, v)$  iç çarpımı geçerli ise (2.2.2.2.14) sistemini,

$$\begin{aligned}
(\phi_1, \phi_1)_A a_1 + (\phi_1, \phi_2)_A a_2 + \dots + (\phi_1, \phi_n)_A a_n &= (f, \phi_1) , \\
(\phi_1, \phi_2)_A a_1 + (\phi_2, \phi_2)_A a_2 + \dots + (\phi_2, \phi_n)_A a_n &= (f, \phi_2) , \\
\text{.....}
\end{aligned}$$

$$(\phi_1, \phi_n)_A a_1 + (\phi_2, \phi_n)_A a_2 + \dots + (\phi_n, \phi_n)_A a_n = (f, \phi_n) \tag{2.2.2.2.15}$$

şeklinde yazmak mümkündür [7].  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$ 'ler lineer bağımsız olduklarından (2.2.2.2.14) sisteminin çözümü tekdir. Böylece (2.2.2.2.1) denkleminin çözümü olan  $u_0$  elemanın (2.2.2.2.13) ile verilen seri çözümü elde edilmiş olur [44]. (2.2.2.2.13) serisinin yakınsaklığı da “ $A, H$  ayrılabilir Hilbert uzayında yoğun olan bir lineer  $D_A$  kümesi üzerinde pozitif tanımlı bir operatör,  $f \in H$  ve  $\phi_1, \phi_2, \dots \in H_A$ ’da bir taban olsun. Bu durumda  $a_1, a_2, \dots, a_n$  (2.2.2.2.15) sistemi ile tek şekilde belirlenen sabitler olmak üzere  $\{u_n\}$  Ritz dizisi,  $H_A$ ’da (2.2.2.2.1) denkleminin genelleştirilmiş  $u_0$  çözümüne yakınsar.” teoremi ile verilir [7].

### 2.2.2.3. Ritz Yöntemi

Ritz yöntemi sonlu boyutlu alt uzaylar veya manifoldlar üzerinde bir fonksiyonelin optimizasyonuna dayanan, varyasyonel analizdeki problemler ile genel olarak sonlu boyutlu ekstremum problemlerini çözmede kullanılan bir yöntemdir [47].

$J$  alttan sınırlı bir fonksiyonel,  $U$  ayrılabilir Banach uzayı olmak üzere  $J: U \rightarrow \mathbb{R}$  fonksiyonelinin bir minimum noktasının bulunması problemini göz önüne alalım.

$U$ ’da tam olan,  $\{\phi_n\}_1^\infty \subset U$  elemanlarının, koordinat sistemi olarak da adlandırılan bir sistemi verilsin. Bu yöntemde; n-inci yaklaşımdaki minimize eleman,  $\phi_1, \dots, \phi_n$  koordinat elemanlarının lineer gereni içinde aranır. Yani,  $u_n = \sum_{j=1}^n c_j^{(n)} \phi_j$  yaklaşımının  $c_1^{(n)}, \dots, c_n^{(n)}$  katsayıları  $J(u_n)$ ’nin, belirlenmiş elemanlar arasında minimal olma koşulu ile tanımlanır. Bir koordinat sistemi yerine, iç içe olması gerekli olmayan,  $U_n \subset U$  altuzaylarının bir dizisi de alınabilir [47].

$H$ ,  $(u, v)$  skaler çarpımı ile tanımlı bir Hilbert uzayı olsun.  $A$ ,  $H$ 'de bir self-adjoint pozitif tanımlı yani, her  $u \in D_A$  için  $(Au, u) \geq \gamma \|u\|^2$  olacak şekilde bir  $\gamma > 0$  sayısının var olması özelliğini sağlayan, sınırlı olması gerekmeyen bir operatör ve  $H_A$ ,  $(u, v)_A = (Au, v)$ ,  $u, v \in D_A$  skaler çarpımı ile tanımlanan  $\|u\|_A$  normuna göre  $A$ 'nın  $D_A \subseteq H$  tanım kümesinin tamamlanması ile elde edilen bir Hilbert uzayı olsun. (2.2.2.2.1) denklemini göz önüne alalım. Bu denklemi çözmek  $\Phi(u) = (Au, u) - (u, f) - (f, u)$  kuadratik fonksiyonelinin bir minimum noktasını bulma problemine eşdeğerdir. Bu problem,  $u_0 = A^{-1}f$  (2.2.2.2.1) denkleminin bir çözümü olmak üzere  $\Phi(u) = \|u - u_0\|_A^2 - \|u_0\|_A^2$ ,  $u \in H_A$  (2.2.2.3.1) şeklinde yazılabilir.  $n = 1, 2, \dots$  olmak üzere  $H_n \subset H_A$ ,  $P_n$   $H_n$ 'i  $H_A$  içine izdüştüren ortogonal bir izdüşüm olmak üzere; her  $u \in H_A$  için  $n \rightarrow \infty$  iken  $\|u - P_n u\|_A \rightarrow 0$  olan kapalı bir alt uzay olsun.  $H_n$  içinde  $\Phi$ 'nin minimize edilmesi ile (2.2.2.2.1) denkleminin çözümüne bir  $u_n = P_n u_0$  Ritz yaklaşımı yapılmış olur. Burada  $n \rightarrow \infty$  iken  $\|u_n - u_0\|_A = \|u_0 - P_n u_0\|_A \rightarrow 0$  dır. Eğer  $H_n$ ,  $n$  boyutlu bir Hilbert uzayı ve  $\phi_1^{(n)}, \dots, \phi_n^{(n)}$  bu uzayda bir taban ise

$$u_n = \sum_{j=1}^n c_j^{(n)} \phi_j^{(n)} \quad (2.2.2.3.2)$$

nın katsayıları

$$\sum_{j=1}^n (\phi_j^{(n)}, \phi_i^{(n)})_A c_j^{(n)} = (f, \phi_i^{(n)}), \quad i = 1, \dots, n \quad (2.2.2.3.3)$$

lineer denklem sisteminden belirlenir [47].

Diğer taraftan (2.2.2.2.1) probleminin varyasyonel ifadesi kullanılmadan da bir Ritz yaklaşımına ulaşılabilir. Yani,

$$(Au_n - f, \phi_i^{(n)}) = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.2.2.3.4)$$

koşulundan (2.2.2.3.2) yaklaşımı tanımlanarak, aynı (2.2.2.3.3) denklem sistemine varılır. Bu nedenle (2.2.2.2.1) denklemi için Ritz yöntemi bazen Ritz-Galerkin yöntemi olarak da adlandırılır [47].

Ritz yöntemi genel olarak özdeğer problemleri, sınır değer problemleri ve operatör denklemlerinin çözümünde kullanılır.  $A$  ve  $B$ ,  $H$  içinde self-adjoint operatörler olsunlar. Ayrıca,  $A$  pozitif tanımlı,  $B$  pozitif,  $D_A \subseteq D_B$  ve  $A^{-1}B$  operatörü  $H_A$  içinde tamamen sürekli olsun. Bu durumda  $A^{-1}B$ ,  $H_A$  içinde self adjoint ve pozitifdir. Bu nedenle

$$Au = \lambda Bu \quad (2.2.2.3.5)$$

probleminin spektrumu pozitif özdeğerlerden oluşur ve

$$Au_k = \lambda_k Bu_k, \quad 0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots; \quad k \rightarrow \infty \text{ iken } \lambda_k \rightarrow \infty$$

dır. Görüldüğü gibi Ritz yöntemi, özdeğerlerin varyasyonel olarak belirlenmesine dayanır. Örneğin,

$$\lambda_1 = \inf_{u \in H_A} \frac{(Au, u)}{(Bu, u)} \quad (2.2.2.3.6)$$

minimizasyonu sadece  $H_n \subset H_A$  altuzayı üzerinde yapılarak  $\lambda_1, u_1$ 'in,  $\lambda_{1n}, u_{1n}$  Ritz yaklaşımları elde edilir. Eğer  $\phi_1^{(n)}, \dots, \phi_n^{(n)}$   $H_n$  içinde bir taban ise  $k = 1, \dots, n$  için

$$\lambda_k$$
'nın  $\lambda_{kn}$  Ritz yaklaşımları  $A_n = \left\{ \left( A\phi_j^{(n)}, \phi_i^{(n)} \right) \right\}_{i,j=1}^n$ ,  $B_n = \left\{ \left( B\phi_j^{(n)}, \phi_i^{(n)} \right) \right\}_{i,j=1}^n$

olmak üzere

$$\det(A_n - \lambda B_n) = 0 \quad (2.2.2.3.7)$$

denkleminde bulunur.  $u_k$ 'nın

$$u_{kn} = \sum_{j=1}^n c_{jk}^{(n)} \phi_j^{(n)} \quad (2.2.2.3.8)$$

yaklaşımının katsayılarının  $c_{k,n} = (c_{1k}^{(n)}, \dots, c_{nk}^{(n)})$  vektörü de  $(A_n - \lambda_{kn} B_n)c_{kn} = 0$

lineer homojen sisteminin bir aşık olmayan çözümü olarak belirlenir. Ritz yöntemi,

$k = 1, \dots, n$  olmak üzere  $\lambda_{kn} \geq \lambda_k$ 'dan bir yaklaşım verir. Eğer (2.2.2.3.5) probleminin

$k$ -ıncı özdeğeri  $\lambda_{k-1} < \lambda_k < \lambda_{k+1}$  özelliğine sahip ise Ritz yönteminin yakınsaklık

oranı  $n \rightarrow \infty$  iken  $\epsilon_{kn}; \epsilon'_{kn} \rightarrow \infty$  olmak üzere

$$\lambda_{kn} - \lambda_k = \lambda_k (1 + \epsilon_{kn}) \|u_k - P_k u_k\|_A^2, \quad (2.2.2.3.9)$$

$$\|u_k\|_A = 1, \quad \|u_{kn} - u_k\|_A = (1 + \epsilon'_{kn}) \|u_k - P_k u_k\|_A, \quad (2.2.2.3.10)$$

$$\|u_{kn}\|_A = \|u\|_A = 1 \quad (2.2.2.3.11)$$

bağıntıları ile karakterize edilir. Benzer bağıntılar, çok katlı  $\lambda_k$  durumuna da taşınabilir [47].

#### 2.2.2.4. Pertürbasyon Teorisi

Pertürbasyon teorisi diferansiyel ve fark denklemlerinin çözümlerinin genel davranışlarının analizi için uygulanan yöntemlerin bir derlemesidir [8]. Başka bir deyişle pertürbasyon teorisi; bir probleme, bu problemle bağlantılı olan diğer bir problemin tam çözümünden başlayarak yaklaşık bir çözüm bulmak için uygulanan



matematiksel yöntemleri içeren bir teoridir [48]. Bu teoride temel fikir karmaşık bir problemi daha basit problemlere ayırarak çözmektir.

Pertürbasyon teorisi, birinci mertebeden pertürbasyon teorisi veya ikinci mertebeden pertürbasyon teorisi şeklinde pertürbasyonun uygulandığı mertebeye göre ve pertürbe durumların dejenere olup olmamasına göre detaylandırılır [48].

Teorinin işleyişinde genellikle  $\varepsilon$  ile gösterilen küçük bir parametre,  $\varepsilon = 0$  olduğunda problem çözülebilir olacak şekilde tanımlanır. Verilen probleme genel çözüm bulunması  $\varepsilon = 0$  civarında bir analiz ile yapılır.

Örneğin

$$x^3 - 4.001x + 0.002 = 0 \quad (2.2.2.4.1)$$

denkleminin yaklaşık köklerini pertürbasyon teorisini kullanarak araştıralım [8]. Bu problem, denklemden  $\varepsilon$  parametresi bulunmadığı için bir pertürbasyon problemi değildir.

(2.2.2.4.1) denklemini yerine

$$x^3 - (4 + \varepsilon)x + 2\varepsilon = 0 \quad (2.2.2.4.2)$$

şeklindeki bir parametrelili polinom denklemlerinin bir ailesi göz önüne alınsın. Bu denklemin  $\varepsilon = 0.001$  için (2.2.2.4.1) denklemine dönüşür.

(2.2.2.4.2) denkleminin yaklaşık köklerini hesaplamak, (2.2.2.4.1) denklemini çözmekten daha kolaydır. Çünkü; eğer kökler  $\varepsilon$ 'un fonksiyonları olarak alınırsa,

$$x(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varepsilon^n \quad (2.2.2.4.3)$$

şeklinde  $\varepsilon$ 'un kuvvetlerine göre bir pertürbasyon serisinin olduğu varsayılabilir. Bu serideki ilk terimi belirlemek için (2.2.2.4.2)'de  $\varepsilon = 0$  konularak elde edilen

$$x^3 - 4x = 0 \quad (2.2.2.4.4)$$

denklemini çözülür ve sıfırinci mertebeden pertürbasyon yaklaşımı  $x(0) = a_0 = -2, 0, 2$  şeklinde elde edilir. Bu köklerin birincisine bir ikinci-mertebeden pertürbasyon yaklaşımı;

(2.2.2.4.3)'ün  $x_1 = -2 + a_1 \varepsilon + a_2 \varepsilon^2 + O(\varepsilon^3)$  ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ) şeklinde yazılması,

bu ifadenin (2.2.2.4.2)'de yerine konulması ve  $\varepsilon$ 'un  $\varepsilon^2$ 'den sonraki kuvvetlerinin ihmal edilmesinden oluşur. Bu durumda

$$\varepsilon \rightarrow 0 \text{ için } (8a_1 + 4)\varepsilon + (8a_2 - a_1 - 6a_1^2)\varepsilon^2 = O(\varepsilon^3) \quad (2.2.2.4.5)$$

olduğu görülür. Görüldüğü gibi orijinal problem  $\varepsilon$  parametresi ile (2.2.2.4.2) polinom denklemlerinin bir ailesine genelleştirilebilir. (2.2.2.4.5)'de  $\varepsilon$ 'un her kuvvetinin katsayısı ayrı ayrı sıfıra eşitlendiğinde  $a_1, a_2, \dots$  katsayıları için

$$\varepsilon^1 : 8a_1 + 4 = 0 ; \quad \varepsilon^2 : 8a_2 - a_1 - 6a_1^2 = 0 \quad (2.2.2.4.6)$$

şeklinde bir denklem dizisi elde edilir. Bu denklemler çözümlerse  $a_1 = \frac{1}{2}$ ,  $a_2 = \frac{1}{8}$ , ... bulunur. Böylece denklemin,  $x_1$  kökü için

$$x_1 = -2 + \frac{1}{2}\varepsilon + \frac{1}{8}\varepsilon^2 + \dots \quad (2.2.2.4.7)$$

şeklinde bir pertürbasyon açılımı bulunur.

Eğer (2.2.2.4.7)'da  $\varepsilon = 0.001$  konulursa  $x_1$ ,  $10^{-9}$  mertebeye yakın bir hassasiyette elde edilir. Aynı yöntemle

$$\varepsilon \rightarrow 0 \text{ için } x_2 = 0 + \frac{1}{2}\varepsilon + \frac{1}{8}\varepsilon^2 + O(\varepsilon^3), \quad x_3 = 2 + 0.\varepsilon + 0.\varepsilon^2 + O(\varepsilon^3) \quad (2.2.2.4.8)$$

değerleri elde edilir [8].

Bu örnekle

- 1) Küçük bir  $\varepsilon$  parametresi tanımlayarak çözümlenmesi istenen problemin bir pertürbasyon problemine dönüştürülebildiği,
- 2) Çözümün bir pertürbasyon serisi şeklinde olduğu kabul edilerek serinin katsayılarının hesaplanabildiği,
- 3)  $\varepsilon$ 'un uygun değeri için pertürbasyon serisinin terimlerini toplayarak çözümü istenen problemin istenen hassasiyette çözümü bulunabildiği

şeklindeki pertürbasyon analizinin adımları gerçekleşir.

Bir problem birkaç yolla bir pertürbasyon problemine indirgenebiliyorsa bu yollardan; pertürbasyon serisinin katsayılarının kolay hesaplanabileni ile hızlı yakınsayanı tercih edilir [8].

$f(x)$  sürekli bir fonksiyon olmak üzere,

$$y'' = f(x)y; \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 1 \quad (2.2.2.4.9)$$

şeklindeki başlangıç-değer problemi verilsin. Bu problem,  $f(x)$  için çok özel seçimlerin dışında kapalı-form çözüme sahip değildir. Bununla birlikte, pertürbatif olarak çözülebilir bir problemdir.

Birinci adımda,

$$y'' = \varepsilon f(x)y; \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 1 \quad (2.2.2.4.10)$$

şeklinde pertürbe olmayan problemin çözülebildiği bir  $\varepsilon$  tanımlansın. İkinci adımda,  $y_0(0) = 1, y_0'(0) = 1$  ve  $y_n(0) = 1, y_n'(0) = 0$  ( $n \geq 1$ ) olmak üzere  $y(x)$  için

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n y_n(x) \quad (2.2.2.4.11)$$

formunda bir pertürbasyon açılımı olduğu kabul edilsin.

Diğer taraftan sıfırıncı-mertebeden  $y'' = 0$  problemi, (2.2.2.4.10)'da  $\varepsilon = 0$  konularak elde edilir ve başlangıç koşullarını sağlayan çözüm  $y_0 = 1 + x$ 'dir.  $n \geq 1$  olmak üzere  $n$ . mertebeden problem, (2.2.2.4.11) serisi (2.2.2.4.10)'da konularak ve  $\varepsilon^n$ 'in katsayısı 0'a eşitlenerek elde edilir. Bu durumda problem

$$y_n'' = y_{n-1}f(x); \quad y_n(0) = y_n'(0) = 0 \quad (2.2.2.4.12)$$

şeklinde yazılır.

Pertürbasyon teorisi, (2.2.2.4.9) diferansiyel denklemini (2.2.2.4.12) homojen olmayan denklemlerinin bir dizisi ile değiştirir. Genel olarak, herhangi bir homojen olmayan diferansiyel denklem, ilgili homojen denklemin çözümü bilinirse, parametrelerin varyasyonu yöntemi ile çözülebilir.

(2.2.2.4.12) denkleminin çözümü

$$y_n = \int_0^x dt \int_0^t ds f(s) y_{n-1}(s), \quad n \geq 1 \quad (2.2.2.4.13)$$

şeklinindedir. (2.2.2.4.13) denklemini, (2.2.2.4.11) pertürbasyon serisindeki ardışık terimleri hesaplamak için

$$y(x) = 1 + x + \varepsilon \int_0^x dt \int_0^t ds (1+s)f(s) + \varepsilon^2 \int_0^x dt \int_0^t ds f(s) \int_0^s dv \int_0^v du (1+u)f(u) + \dots \quad (2.2.2.4.14)$$

şeklinde basit bir iteratif yöntem verir.

Üçüncü adımda, bu seri toplandığında büyük  $N$ 'ler için,  $0 \leq |t| \leq |x|$  aralığında  $K$ ,  $|f(t)|$ 'nin bir üst sınırı olmak üzere serinin  $N$ -inci terimi mutlak değerce  $\varepsilon^N x^{2N} K^N (1 + |x|)/(2N)!$  ile sınırlıdır. Bu durumda, (2.2.2.4.14) serisi her  $x$  değeri için yakınsaktır. Eğer  $x^2 K$  küçük ise pertürbasyon serisinin  $\varepsilon = 1$  için hızla yakınsadığı ve orjinal problemin çözümünün yalnız birkaç terim alınarak yapılabildiği sonucuna varılır.

Diferansiyel denklemler için pertürbasyon yöntemleri, seri yöntemleri ile karşılaştırılabilir. (2.2.2.4.7)'de  $f(x)$ 'in  $x = 0$  civarında

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n \quad (2.2.2.4.15)$$

şeklinde yakınsak bir Taylor seri açılımına sahip olduğu varsayalım. Bu durumda  $y(x)$ 'i belirlemek için diğer bir yol

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \quad a_0 = a_1 = 1 \quad (2.2.2.4.16)$$

seri çözümünü yardımcı ile ve  $a_n$  katsayılarını hesaplayarak  $x = 0$  civarında diferansiyel denklemin bir yerel analizini yapmaktır.

(2.2.2.4.11) pertürbasyon serisi,  $f(x)$ 'in yakınsaklık yarıçapı içindeki  $x$  değerlerinin yanısıra  $x$ 'in her sonlu değeri için de yakınsaktır. Ayrıca  $f(x)$ 'in Taylor serisi açılımı olmasa bile pertürbasyon serisi yakınsaktır.

Örneğin

$$y'' = -e^{-x}y; \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 1 \quad (2.2.2.4.17)$$

ile verilen diferansiyel denklem

$$y(x) = \frac{[Y_0(2)+Y_0'(2)]J_0(2e^{-x/2})-[J_0(2)+J_0'(2)]Y_0(2e^{-x/2})}{J_0(2)Y_0'(2)+J_0'(2)Y_0(2)} \quad (2.2.2.4.18)$$

şeklinde Bessel fonksiyonları cinsinden çözülebilir. Burada

$$J_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{2^{2n}(n!)^2} \quad (2.2.2.4.19)$$

sıfıncı basamaktan birinci çeşit Bessel fonksiyonu ve

$$Y_0(x) = \frac{1}{\pi} \left[ 2J_0(x) \left( \ln \frac{x}{2} + \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{k} - \ln n \right) \right) - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \left( \frac{x}{2} \right)^{2n} \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} \right] \quad (2.2.2.4.20)$$

sıfıncı basamaktan ikinci çeşit Bessel fonksiyonudur [49, 50]. (2.2.2.4.16) açılımı,  $e^{-x}$  sonlu tekilliğe sahip olmadığı için her yerde yakınsaktır. Bununla birlikte,  $x$ 'in büyük ve pozitif değerleri için (2.2.2.4.11) pertürbasyon serisinin sonlu sayıdaki terimi, (2.2.2.4.16) Taylor serisinin aynı sayıda teriminden daha iyi bir yaklaşım verir. Bu nedenle pertürbatif bir yaklaşım aynı koşullardaki Taylor serisi yaklaşımından daha yaklaşık bir çözüm verir [8].

## BÖLÜM 3

### RADYAL SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN ÖZEL POTANSİYELLER İÇİN ASİMPOTİK İTERASYON YÖNTEMİYLE ÇÖZÜMLERİ

Bu bölümde,  $\lambda_0(x) \neq 0$ ,  $\lambda_0, s_0 \in C^\infty$  olmak üzere,

$$y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y \quad (3.1)$$

şeklindeki denklemlerin çözümlerinin bulunmasında kullanılan nümerik çözüm yöntemlerinden birisi olan asimptotik iterasyon yöntemi tanıtılmıştır.

(3.1) denkleminin özel bir hali olan;

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) R(r) = 0, \quad 0 < r < \infty, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$
$$\left( \hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad h \text{ Planck sabiti} \right) \quad (3.2)$$

şeklindeki radyal Schrödinger denkleminin,

$$a, b, c \in \mathbb{R}_+, \quad d \in \mathbb{R}, \quad 0 < r < \frac{b}{a\sqrt{2}}, \quad c = \frac{\hbar b}{2\sqrt{2ma}} \left( 1 + \sqrt{(2l+1)^2 - \frac{8md}{\hbar^2}} \right) \text{ ve}$$
$$d \leq \frac{\hbar^2(2l+1)^2}{8m}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.3)$$

olmak üzere

$$V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} - \frac{d}{r^2} \quad (3.4)$$

potansiyeli için  $E \in \mathbb{R}$  özdeğerleri ve

$$\lim_{r \rightarrow r_0} rR(r) = 0 \quad (3.5)$$

koşulunu sağlayan  $R$  çözüm fonksiyonları asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak bulunmuştur. Bunun için;  $U, r$ 'nin bir fonksiyonu olmak üzere, (3.2) denkleminde

$$R(r) = \frac{U(r)}{r} \quad (3.6)$$

dönüşümü yapıldığında elde edilen

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) U(r) = 0, \quad 0 < r < \infty, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.7)$$

şeklindeki denklemin çözümü araştırılmış, örnek olarak Morse potansiyelli ve  $V(r) = \frac{a}{r^2} - \frac{b}{r} + cr^\kappa$  potansiyelli radyal Schrödinger denkleminin asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak elde edilen çözümleri incelenmiştir[28, 31]. Bu çözümlerden yararlanılarak 3.2.4. bölümde, (3.3)'deki değerler ve (3.4) potansiyeli için (3.7) denkleminde bir bilinmeyen  $f$  fonksiyonuna bağlı uygun bir  $U$  çözüm fonksiyonu önerilmiş ve önerilen çözüm, (3.7) denkleminde kullanıldığında,  $f$  fonksiyonu için bir diferansiyel denklem elde edilmiştir. Bu denkleme, asimptotik iterasyon yöntemi uygulandığında, çözümlerin genel ifadelerini elde edebilmek için önce  $f'(r)$ 'nin katsayısında yer alan  $1/r^2$ 'li terimi yok etmek için

$$r = -\sqrt{t + \frac{\beta^2}{4\alpha^2}} \quad (3.8)$$

dönüşümü yapılmış ve buradan gelecek olan  $\sqrt{t + \frac{\beta^2}{4\alpha^2}}$  teriminin seri açılımının ilk iki terimi alınmıştır. Bu işlemler sonunda elde edilen denklem, uygun bir değişken dönüşümü yapılarak (3.1) formuna getirildikten sonra asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak  $f(r)$  çözümleri elde edilmiştir. Böylece, (3.7) denkleminin  $U$  çözüm fonksiyonları da belirlenmiştir.  $U$  fonksiyonunun ifadesi (3.6) dönüşümünde kullanıldığında (3.2) radyal Schrödinger denkleminin çözümü de elde edilmiştir.

### 3.1. Asimptotik İterasyon Yöntemi

Asimptotik iterasyon yöntemi;  $\lambda_0(x) \neq 0$ ,  $\lambda_0, s_0 \in C^\infty$  olmak üzere,

$$y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y \quad (3.1.1)$$

şeklindeki ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklemlere çözümler öneren bir yöntemdir [12]. Bu çözümleri belirlemek için önce denklemin  $x$ 'e göre ardışık türevleri alınır. Buna göre, (3.1.1)'in türevi

$$\begin{cases} \lambda_1(x) = \lambda_0'(x) + s_0(x) + (\lambda_0(x))^2, \\ s_1(x) = s_0'(x) + s_0(x)\lambda_0(x) \end{cases} \quad (3.1.2)$$

olmak üzere

$$y''' = \lambda_1(x)y' + s_1(x)y \quad (3.1.3)$$

dir. (3.1.3)'ün türevi ise

$$\begin{cases} \lambda_2(x) = \lambda_1'(x) + s_1(x) + \lambda_0(x)\lambda_1(x), \\ s_2(x) = s_1'(x) + s_0(x)\lambda_1(x) \end{cases} \quad (3.1.4)$$

olmak üzere

$$y^{(4)} = \lambda_2(x)y' + s_2(x)y \quad (3.1.5)$$

dir. Bu şekilde türev alma işlemine devam edilirse,  $k = 1, 2, \dots$  olmak üzere  $(k + 1)$ . ve  $(k + 2)$ . mertebeden türevler sırasıyla

$$y^{(k+1)} = \lambda_{k-1}(x)y' + s_{k-1}(x)y \quad (3.1.6)$$

ve

$$y^{(k+2)} = \lambda_k(x)y' + s_k(x)y \quad (3.1.7)$$

olur. Buradan da

$$\begin{cases} \lambda_k(x) = \lambda_{k-1}'(x) + s_{k-1}(x) + \lambda_0(x)\lambda_{k-1}(x), \\ s_k(x) = s_{k-1}'(x) + s_0(x)\lambda_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (3.1.8)$$

şeklindeki iterasyon bağıntıları elde edilir. Daha sonra, (3.1.1) diferansiyel denkleminin mertebesini indirgemek için (3.1.6) ve (3.1.7) türevlerinin oranından elde edilen

$$\frac{d}{dx} \ln \left( y^{(k+1)}(x) \right) = \frac{y^{(k+2)}(x)}{y^{(k+1)}(x)} = \frac{\lambda_k(x) \left( y'(x) + \frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)} y(x) \right)}{\lambda_{k-1}(x) \left( y'(x) + \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} y(x) \right)} \quad (3.1.9)$$

eşitliği göz önüne alınır. Eğer; bir  $k > 0$  sayısı için,

$$\frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)} = \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} = \alpha(x) \quad (3.1.10)$$

olacak şekilde  $\alpha$  fonksiyonu varsa (3.1.9) ifadesi,

$$\frac{d}{dx} \ln \left( y^{(k+1)}(x) \right) = \frac{\lambda_k(x)}{\lambda_{k-1}(x)} \quad (3.1.11)$$

şeklinde yazılır. Bu ifadeden,  $c_1$  bir integrasyon sabiti olmak üzere,

$$y^{(k+1)}(x) = c_1 e^{\int \frac{\lambda_k(t)}{\lambda_{k-1}(t)} dt} \quad (3.1.12)$$

bulunur. Bu eşitliğin sağ yanındaki integral,  $\lambda_k(x)$  için (3.1.8)'de verilen iterasyon bağıntıları kullanıldığında

$$\int \frac{\lambda_k(t)}{\lambda_{k-1}(t)} dt = \ln(\lambda_{k-1}(x)) + \int \left( \frac{s_k(t)}{\lambda_{k-1}(t)} + \lambda_0(t) \right) dt \quad (3.1.13)$$

ve (3.1.10) koşulu göz önünde bulundurulduğunda

$$\int \frac{\lambda_k(t)}{\lambda_{k-1}(t)} dt = \ln(\lambda_{k-1}(x)) + \int (\alpha(t) + \lambda_0(t)) dt \quad (3.1.14)$$

şeklinde olur. (3.1.14) ifadesi (3.1.12) eşitliğinde kullanılırsa

$$y^{(k+1)}(x) = c_1 \lambda_{k-1}(x) e^{\int (\alpha(t) + \lambda_0(t)) dt} \quad (3.1.15)$$

elde edilir. (3.1.6) ve (3.1.15) ifadelerinin sağ tarafları eşitlenirse,  $\lambda_{k-1}(x) \neq 0$  olmak üzere

$$y' + \frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)} y = c_1 e^{\int (\alpha(t) + \lambda_0(t)) dt} \quad (3.1.16)$$

ve (3.1.10) koşulu kullanılırsa

$$y'(x) + \alpha(x)y(x) = c_1 e^{\int (\alpha(t) + \lambda_0(t)) dt} \quad (3.1.17)$$

şeklinde birinci mertebeden, ikinci taraflı, lineer bir diferansiyel denkleme ulaşılır. Bu denklemde, bilinen standart çözüm yöntemleri kullanıldığında,  $c_2$  bir integrasyon sabiti olmak üzere,

$$y(x) = e^{-\int \alpha(t) dt} \left[ c_2 + c_1 \int e^{\int (\lambda_0(\tau) + 2\alpha(\tau)) d\tau} dt \right] \quad (3.1.18)$$

çözümü elde edilir [12]. Bu çözüm, (3.1.1) denkleminin de çözümü olur.

**3.1.1. Örnek:** İkinci mertebeden sabit katsayılı lineer homojen

$$y'' - 4y' + 3y = 0 \quad (3.1.19)$$

diferansiyel denkleminin çözümünü inceleyelim [12].

Denklemin karakteristik denklem yardımı ile çözümü;  $c_1$  ve  $c_2$  keyfi sabitler olmak üzere,

$$y(x) = c_2 e^x + c_1 e^{3x} \quad (3.1.20)$$

dir.



Aynı denklemin çözümünü asimptotik iterasyon yöntemini kullanarak belirleyelim. Denklem,

$$y'' = 4y' - 3y \quad (3.1.21)$$

formunda yazılırsa bu denklem için

$$\lambda_0(x) = 4 \text{ ve } s_0(x) = -3 \quad (3.1.22)$$

dir. (3.1.8) iterasyon bağıntılarından

$$\lambda_k(x) = \frac{1}{2}(3^{k+2} - 1), \quad s_k(x) = -\frac{3}{2}(3^{k+1} - 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.1.23)$$

ve

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} = \alpha(x) = -1 \quad (3.1.24)$$

bulunur. Bu değerler kullanılırsa (3.1.18)'den

$$y(x) = e^{\int dx} \left[ c_2 + c_1 \int e^{2t} dt \right] = c_2 e^x + c_1 e^{3x} \quad (3.1.25)$$

çözümü elde edilir [12].

Matematik, fizik ve mühendislik gibi pek çok alanda önemli uygulamaları olan ve (3.1.1) formunda yazılabilen birçok diferansiyel denklem vardır. Bu diferansiyel denklemlerden birkaçı ve bunların bilinen çözümleri tablo 3.1.1'de verilmektedir [51, 52]. Asimptotik iterasyon yöntemi, bu diferansiyel denklemlere tam çözümler de önermektedir.

**Tablo 3.1.1.** İkinci mertebeden lineer homojen bazı diferansiyel denklemler ve bilinen çözümleri [51, 52].

Diferansiyel denklem		Çözüm
Hermite denklemi	$y'' - 2xy' + 2vy = 0$	$H_v(x) = \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{v}{2} \rfloor} \frac{(-1)^i v!}{i!(v-2i)!} (2x)^{v-2i}$
Legendre denklemi	$(1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0$	$P_n(x) = \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{(-1)^i (2n-2i)!}{2^n i!(n-i)!(n-2i)!} x^{n-2i}$
Hipergeometrik denklem	$x(1-x)y'' + [c - (a+b+1)x]y' - aby = 0$	${}_2F_1(a, b; c; x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(a)_i (b)_i}{(c)_i} \frac{x^i}{i!}$
Confluent hipergeometrik denklem	$xy'' + (c-x)y' - ay = 0$	${}_1F_1(a; c; x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(a)_i}{(c)_i} \frac{x^i}{i!}$

**3.1.2. Örnek:**  $\nu$  keyfi bir parametre olmak üzere ikinci mertebeden değişken katsayılı lineer homojen

$$y'' = 2xy' - 2\nu y, \quad -\infty < x < \infty \quad (3.1.26)$$

denklemini göz önüne alalım [12]. Bu denklem, Hermite diferansiyel denklemdir [52]. Denklemdaki  $\nu$  parametresi ve  $y(x)$  çözüm fonksiyonu asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak belirlenebilir [12]. Bunları belirlemek için; (3.1.26) denklemi ile (3.1.1) denklemi karşılaştırılırsa

$$\lambda_0(x) = 2x \text{ ve } s_0(x) = -2\nu \quad (3.1.27)$$

olduğu görülür.  $\lambda_k(x)$ ,  $s_k(x)$   $k = 1, 2, \dots$  için (3.1.8) iterasyon bağıntıları kullanılarak hesaplanırsa

$$\lambda_1(x)s_0(x) - \lambda_0(x)s_1(x) = 2^2\nu(\nu - 1),$$

$$\lambda_2(x)s_1(x) - \lambda_1(x)s_2(x) = 2^3\nu(\nu - 1)(\nu - 2),$$

$$\lambda_3(x)s_2(x) - \lambda_2(x)s_3(x) = 2^4\nu(\nu - 1)(\nu - 2)(\nu - 3),$$

$$\lambda_4(x)s_3(x) - \lambda_3(x)s_4(x) = 2^5\nu(\nu - 1)(\nu - 2)(\nu - 3)(\nu - 4),$$

...

$$\lambda_k(x)s_{k-1}(x) - \lambda_{k-1}(x)s_k(x) = 2^{k+1} \prod_{i=0}^k (\nu - i) \quad (3.1.28)$$

bulunur [12]. (3.1.10) koşulunun sağlanması için

$$\lambda_k(x)s_{k-1}(x) - \lambda_{k-1}(x)s_k(x) = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.1.29)$$

olması gerekir. Bu durumda (3.1.28)'den de

$$\nu = 0, 1, 2, \dots \quad (3.1.30)$$

olması gerektiği görülür.

Asimptotik iterasyon yöntemine göre (3.1.26) denkleminin çözümleri

$$y(x) = e^{-\int \frac{s_k(t)}{\lambda_k(t)} dt}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.1.31)$$

şeklinde belirlenebilir [12]. Böylece

$$\nu = 0 \text{ için } \frac{s_0(x)}{\lambda_0(x)} = \frac{s_1(x)}{\lambda_1(x)} = \dots = 0 \text{ 'dan } y_0(x) = 1,$$

$$\nu = 1 \text{ için } \frac{s_1(x)}{\lambda_1(x)} = \frac{s_2(x)}{\lambda_2(x)} = \dots = -\frac{1}{x}, \text{ dan } y_1(x) = x,$$

$$\nu = 2 \text{ için } \frac{s_2(x)}{\lambda_2(x)} = \frac{s_3(x)}{\lambda_3(x)} = \dots = -\frac{4x}{2x^2-1}, \text{ dan } y_2(x) = 2x^2 - 1,$$

$$\nu = 3 \text{ için } \frac{s_3(x)}{\lambda_3(x)} = \frac{s_4(x)}{\lambda_4(x)} = \dots = -\frac{6x^2-3}{2x^3-3x}, \text{ dan } y_3(x) = 2x^3 - 3x,$$

$$\nu = 4 \text{ için } \frac{s_4(x)}{\lambda_4(x)} = \frac{s_5(x)}{\lambda_5(x)} = \dots = -\frac{16x^3 - 24x}{4x^4 - 12x^2 + 3}, \text{ dan } y_4(x) = 4x^4 - 12x^2 + 3,$$

...

çözümleri bulunur [12]. Benzer işlemlerle,  $k = 0, 1, 2, \dots$  için

$$y_{2k}(x) = \frac{1}{2^k} H_{2k}(x) \quad (3.1.32)$$

ve

$$y_{2k+1}(x) = \frac{1}{2^{k+1}} H_{2k+1}(x) \quad (3.1.33)$$

çözümleri elde edilir [12]. Burada

$$H_k(x) = \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \frac{(-1)^i k!}{i!(k-2i)!} (2x)^{k-2i}, \quad \lfloor \frac{k}{2} \rfloor = \begin{cases} k/2 & , k \text{ çift sayı} \\ (k-1)/2 & , k \text{ tek sayı} \end{cases} \quad (3.1.34)$$

Hermite polinomlarıdır [52].

Benzer şekilde, tablo 3.1.1’de göz önüne alınan diğer denklemlere de asimptotik iterasyon yöntemi uygulandığında tablo 3.1.2’deki ifadeler ve 3.1.3’deki çözümler elde edilir [13]. Tablo 3.1.1 ve tablo 3.1.3’deki çözümler karşılaştırıldığında asimptotik iterasyon yönteminin polinom çözümlere sahip olan diferansiyel denklemlere tam çözümler önerdiği görülmektedir.

**Tablo 3.1.2.** İkinci mertebeden bazı lineer homojen diferansiyel denklemlere asimptotik iterasyon yöntemi uygulandığında elde edilen değerler [13].

Diferansiyel Denklem	$\lambda_0(x)$	$s_0(x)$	$\delta_k(x) = \lambda_k(x)s_{k-1}(x) - \lambda_{k-1}(x)s_k(x)$ , $k = 1, 2, \dots$	$\delta_k(x) = 0$ , $k = 1, 2, \dots$
Hermite denklemi	$2x$	$-2\nu$	$2^{k+1} \prod_{i=0}^k (\nu - i)$	$\nu = 0, 1, 2, \dots$
Legendre denklemi	$\frac{2x}{1-x^2}$	$\frac{n(n+1)}{x^2-1}$	$\frac{(-1)^k}{(x^2-1)^{k+1}} \prod_{i=0}^k (n^2 - i^2)$	$n = 0, 1, 2, \dots$
Hipergeometrik denklem	$\frac{(a+b+1)x-c}{x(1-x)}$	$\frac{ab}{x(1-x)}$	$\frac{1}{x^{k+1}(x-1)^{k+1}} \prod_{i=0}^k (a+i)(b+i)$	$a = 0, -1, -2, \dots$ veya $b = 0, -1, -2, \dots$
Confluent hipergeometrik denklem	$1 - \frac{c}{x}$	$\frac{a}{x}$	$\frac{(-1)^{k+1}}{x^{k+1}} \prod_{i=0}^k (i+a)$	$a = 0, -1, -2, \dots$

**Tablo 3.1.3.** İkinci mertebeden lineer homojen bazı diferansiyel denklemlere asimptotik iterasyon yönteminin önerdiği çözümler [13].

Diferansiyel Denklem	Asimptotik iterasyon yönteminin önerdiği çözüm
Hermite denklemi	$y_0(x) = 1$ $y_1(x) = x$ $y_2(x) = 2x^2 - 1$ ... $y_{2k}(x) = \frac{1}{2^k} H_{2k}(x), k = 0, 1, 2, \dots$ $y_{2k+1}(x) = \frac{1}{2^{k+1}} H_{2k+1}(x), k = 0, 1, 2, \dots$
Legendre denklemi	$y_0(x) = 1$ $y_1(x) = x$ $y_2(x) = 3x^2 - 1$ ... $y_k(x) = P_k(x), k = 0, 1, 2, \dots$
Hipergeometrik denklem	$y_0(x) = 1$ $y_1(x) = bx - c$ $y_2(x) = 2x^2 + 4(c + 1)x + c(c + 1)$ ... $y_k(x) = (c)_n {}_2F_1(-k, b; c; x), k = 0, 1, 2, \dots$
Confluent hipergeometrik denklem	$y_0(x) = 1$ $y_1(x) = x - c$ $y_2(x) = x^2 - 2(1 + c)x + c(c + 1)$ ... $y_k(x) = (-1)^n (c)_n {}_1F_1(-k; c; x), k = 0, 1, 2, \dots$

Asimptotik iterasyon yöntemi  $s_0(x) \neq 0$  olması durumunda da (3.1.1) diferansiyel denkleminin çözümleri önerir. Bu çözümleri belirlerken,  $\lambda_0(x) \neq 0$  olması durumuna benzer şekilde denklemin  $x$ 'e göre ardışık türevleri alınarak (3.1.8) iterasyon bağıntıları elde edilir [12, 13]. (3.1.1) diferansiyel denkleminin mertebesi indirgenerek daha kolay çözülebilecek bir hale getirilebilir. Bunun için (3.1.6) ve (3.1.7) türevlerinin oranından elde edilen

$$\frac{d}{dx} \ln \left( y^{(k+1)}(x) \right) = \frac{y^{(k+2)}(x)}{y^{(k+1)}(x)} = \frac{s_k(x) \left( \frac{\lambda_k(x)}{s_k(x)} y'(x) + y(x) \right)}{s_{k-1}(x) \left( \frac{\lambda_{k-1}(x)}{s_{k-1}(x)} y'(x) + y(x) \right)} \quad (3.1.35)$$

eşitliği göz önüne alınır. Bir  $k > 0$  sayısı için,

$$\frac{\lambda_k(x)}{s_k(x)} = \frac{\lambda_{k-1}(x)}{s_{k-1}(x)} = \alpha(x) \quad (3.1.36)$$

olacak şekilde  $\alpha$  fonksiyonu varsa (3.1.35) ifadesinden

$$\frac{d}{dx} \ln \left( y^{(k+1)}(x) \right) = \frac{s_k(x)}{s_{k-1}(x)} \quad (3.1.37)$$

eşitliği elde edilir. Buradan,  $c_1$  bir integrasyon sabiti olmak üzere,

$$y^{(k+1)}(x) = c_1 e^{\int \frac{s_k(t)}{s_{k-1}(t)} dt} \quad (3.1.38)$$

bulunur. (3.1.38) eşitliğinin sağ tarafındaki integral,  $s_k(x)$  için (3.1.8)'de verilen iterasyon bağıntısı kullanıldığında

$$\int \frac{s_k(t)}{s_{k-1}(t)} dt = \ln(s_{k-1}(x)) + \int s_0(t) \frac{\lambda_{k-1}(t)}{s_{k-1}(t)} dt \quad (3.1.39)$$

ve (3.1.36) koşulu göz önünde bulundurulduğunda

$$\int \frac{s_k(t)}{s_{k-1}(t)} dt = \ln(s_{k-1}(x)) + \int s_0(t) \alpha(t) dt \quad (3.1.40)$$

şeklinde olur. (3.1.40) ifadesi (3.1.38) eşitliğinde kullanılırsa

$$y^{(k+1)}(x) = c_1 s_{k-1}(x) e^{\int s_0(t) \alpha(t) dt} \quad (3.1.41)$$

elde edilir. (3.1.6) ve (3.1.41) eşitliklerinin sağ tarafları eşitlenirse,  $s_{k-1}(x) \neq 0$  olmak üzere

$$\frac{\lambda_k(x)}{s_k(x)} y' + y = c_1 e^{\int s_0(t) \alpha(t) dt} \quad (3.1.42)$$

ve (3.1.36) koşulu kullanılırsa

$$\alpha(x) y'(x) + y(x) = c_1 e^{\int s_0(t) \alpha(t) dt} \quad (3.1.43)$$

şeklinde birinci mertebeden, ikinci taraflı, lineer bir diferansiyel denkleme ulaşılır. Bu denklemden, bilinen standart çözüm yöntemleri kullanıldığında,  $c_2$  bir integrasyon sabiti olmak üzere,

$$y(x) = e^{-\int \frac{1}{\alpha(t)} dt} \left[ c_2 + c_1 \int \frac{1}{\alpha(t)} e^{\int (s_0(\tau)\alpha(\tau) + \frac{1}{\alpha(\tau)}) d\tau} dt \right] \quad (3.1.44)$$

çözümü elde edilir [13]. Bu çözüm, (3.1.1) denkleminin de çözümü olur.

### 3.1.3. Örnek:

$$x^2 y'' - 2y = 0 \quad (3.1.45)$$

Euler denkleminin çözümünü bulalım [13].

Denklem  $x = e^t$  dönüşümü ile

$$y'' - y' - 2y = 0 \quad (3.1.46)$$

denkleme dönüşür. (3.1.46) denkleminin çözümü,  $c_1$  ve  $c_2$  keyfi sabitler olmak üzere,

$$y = c_1 e^{-t} + c_2 e^{2t} \quad (3.1.47)$$

dir. (3.1.47) ifadesinde,  $x = e^t$  dönüşümü kullanılırsa (3.1.45) denkleminin çözümü

$$y(x) = c_1 \frac{1}{x} + c_2 x^2 \quad (3.1.48)$$

olur.

(3.1.45) denkleminin çözümünü asimptotik iterasyon yöntemini kullanarak belirleyelim.

$$y'' = \frac{2}{x^2} y \quad (3.1.49)$$

diferansiyel denklemin için

$$\lambda_0(x) = 0 \text{ ve } s_0(x) = \frac{2}{x^2} \quad (3.1.50)$$

dir. (3.1.8) bağıntılarından her  $k > 0$  sayısı için

$$\frac{\lambda_k(x)}{s_k(x)} = \frac{\lambda_{k-1}(x)}{s_{k-1}(x)} = \alpha(x) = -\frac{x}{2} \quad (3.1.51)$$

bulunur. (3.1.44) ifadesinden de

$$y(x) = e^{\int \frac{2}{t} dt} \left[ c_2 + c_1 \int -\frac{2}{t} e^{\int (-\frac{3}{t}) d\tau} dt \right] = \left( c_2 + c_1 \frac{2}{3x^3} \right) x^2 \quad (3.1.52)$$

şeklinde bir çözüm elde edilir [13].

## 3.2. Radyal Schrödinger Denkleminin Özel Potansiyeller İçin Asimptotik İterasyon Yöntemiyle Çözümleri

### 3.2.1. Radyal Schrödinger Denklemi

$m$  kütleli bir parçacığın zamandan bağımsız Schrödinger denklemi,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r), \quad \left(\hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad h \text{ Planck sabiti}\right) \quad (3.2.1.1)$$

Hamiltonian operatörü ve

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \quad (3.2.1.2)$$

küresel koordinatlarda Laplace operatörü,  $V \in C^\infty$  parçacığın potansiyeli,  $E \in \mathbb{R}$  enerjisi  $H$  operatörünün özdeğeri ve  $\psi \in L_2$  çözüm fonksiyonu veya parçacığın dalga fonksiyonu olmak üzere

$$H\psi = E\psi \quad (3.2.1.3)$$

şeklinde ifade edilir [15-18]. Küresel koordinatlarda Schrödinger denkleminin  $E$  özdeğeri ve  $\psi$  çözüm fonksiyonları çeşitli yöntemler kullanılarak çözümlenmektedir. Bu denklemin belirli koşullar altında  $E$  özdeğeri ve  $\psi$  çözüm fonksiyonları varyasyonel yöntemle elde edilmiştir [19-22].

Küresel koordinatlardaki Schrödinger denkleminin çözümü, denklem adi diferansiyel denklemlere indirgenerek incelenebilir. Bunun için  $R$ ,  $\theta$  ve  $\Phi$  daha sonra belirlenecek olan fonksiyonlar olmak üzere,  $\psi$ 'nin

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (0 < r < \infty, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi) \quad (3.2.1.4)$$

şeklinde değişkenlerine ayrılabilirdiği varsayılarak (3.2.1.3) denklemi,

$$\begin{aligned} \Theta(\theta)\Phi(\phi)\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\Theta(\theta)\Phi(\phi)\frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{r^2}R(r)\Phi(\phi)\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} + \\ \frac{\cot\theta}{r^2}R(r)\Phi(\phi)\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}R(r)\Theta(\theta)\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) = 0 \end{aligned} \quad (3.2.1.5)$$

şeklinde yazılır[10, 15]. (3.2.1.5) eşitliği açısal ve radyal olarak düzenlenirse,

$$\begin{aligned} \frac{r^2}{R(r)}\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2r}{R(r)}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))r^2 \\ = -\left(\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\cot\theta}{\Theta(\theta)}\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}\right) \end{aligned} \quad (3.2.1.6)$$

elde edilir. (3.2.1.6) eşitliği,  $v \in \mathbb{R}$  bir ayırma sabiti olmak üzere,

$$\frac{r^2}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2r}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 = \nu \quad (3.2.1.7)$$

ve

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\cot \theta}{\Theta(\theta)} \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = -\nu \quad (3.2.1.8)$$

şeklinde iki denkleme ayrılarak

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V(r) - \frac{\nu \hbar^2}{2mr^2} \right) R(r) = 0 \quad (3.2.1.9)$$

radyal denklemi ve

$$\frac{\sin^2 \theta}{\Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\sin 2\theta}{2\Theta(\theta)} \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \nu \sin^2 \theta + \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = 0 \quad (3.2.1.10)$$

açısal denklemi elde edilir. Benzer şekilde (3.2.1.10) denkleminde de  $\eta \in \mathbb{R}$  bir ayırma sabiti olmak üzere,

$$\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = -\eta \quad (3.2.1.11)$$

ve

$$\frac{\sin^2 \theta}{\Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} + \frac{\sin 2\theta}{2\Theta(\theta)} \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \nu \sin^2 \theta = \eta \quad (3.2.1.12)$$

denklemleri elde edilir.  $\eta = \mu^2$  ile ifade edilirse, (3.2.1.11) ve (3.2.1.12) denklemleri sırasıyla

$$\frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} + \mu^2 \Phi(\phi) = 0 \quad (3.2.1.13)$$

ve

$$\frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} + \left( \nu - \frac{\mu^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = 0 \quad (3.2.1.14)$$

şeklinde yazılırlar. Böylece, kısmi türevli bir diferansiyel denklem olan (3.2.1.3) denklemi; (3.2.1.9), (3.2.1.13) ve (3.2.1.14)'de verilen adi türevli üç diferansiyel denkleme dönüşmüş olur [10, 15, 16].

(3.2.1.13) denkleminin genel çözümü,  $c$  ve  $d$  keyfi sabitler olmak üzere,

$$\Phi(\phi) = ce^{i\mu\phi} + de^{-i\mu\phi} \quad (3.2.1.15)$$

şeklinindedir. Bu fonksiyonun periyodunun  $2\pi$  olması yani,  $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$  koşulunun sağlanması için  $\mu \in \mathbb{Z}$  olması gerektiği görülür. Bu durumda (3.2.1.15) çözümü,

$$\Phi_\mu(\phi) = c_\mu e^{i\mu\phi}, \quad \mu \in \mathbb{Z} \quad (3.2.1.16)$$

olarak bulunur [10, 15, 16].

(3.2.1.14) denkleminin çözümünü belirlemek için



$$z = \cos \theta \quad (3.2.1.17)$$

değişken dönüşümü kullanılırsa,

$$(1 - z^2) \frac{d^2 \theta}{dz^2} - 2z \frac{d\theta}{dz} + \left( \nu - \frac{\mu^2}{1-z^2} \right) \theta = 0 \quad (3.2.1.18)$$

şeklindeki associated Legendre diferansiyel denkleminin çözümü,  $\nu = l(l+1)$ ,  $l = 0, 1, 2, \dots$  ve  $|\mu| \leq l$ ,  $\mu \in \mathbb{Z}$  için

$$P_l^\mu(z) = (-1)^\mu (1 - z^2)^{\frac{\mu}{2}} \frac{d^\mu}{dz^\mu} P_l(z) \quad (3.2.1.19)$$

associated Legendre polinomlarıdır [51, 52]. Bu durumda (3.2.1.14) denkleminin çözümü,  $d_{l\mu}$  keyfi sabitler olmak üzere,

$$\Theta_{l\mu}(\theta) = d_{l\mu} P_l^\mu(\cos \theta), \quad l = 0, 1, 2, \dots \text{ ve } |\mu| \leq l, \quad \mu \in \mathbb{Z} \quad (3.2.1.20)$$

olur [50].

Buna göre, küresel koordinatlarda Schrödinger denklemini sağlayan  $\psi$  çözüm fonksiyonu

$$\psi(r, \theta, \phi) = c_\mu d_{l\mu} e^{i\mu\phi} P_l^\mu(\cos \theta) R(r), \quad l = 0, 1, 2, \dots \text{ ve } |\mu| \leq l, \quad \mu \in \mathbb{Z} \quad (3.2.1.21)$$

şeklinde olur. Buradaki  $R$  çözüm fonksiyonunu belirlemek için (3.2.1.9) radyal Schrödinger denklemi göz önüne alınır. (3.2.1.9) denklemi,  $\nu = l(l+1)$ ,  $l = 0, 1, 2, \dots$  için

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) R(r) = 0 \quad (3.2.1.22)$$

şeklinde yazılarak  $U$ ,  $r$ 'nin bir fonksiyonu olmak üzere

$$R(r) = \frac{U(r)}{r} \quad (3.2.1.23)$$

dönüşümü ile

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) U(r) = 0, \quad 0 < r < \infty, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.1.24)$$

kanonik formuna dönüştürülür.  $U$  fonksiyonunun (3.2.1.24) denkleminin çözümü olabilmesi için normunun sonlu yani

$$\int_0^\infty (U(r))^2 dr < \infty \quad (3.2.1.25)$$

olması gerekir. Bunun için  $U$  fonksiyonu

$$\lim_{r \rightarrow \infty} U(r) = 0 \quad (3.2.1.26)$$

koşulunu sağlamalıdır [15].

(3.2.1.24) denkleminin tam çözümlerini bulmak her zaman mümkün değildir. Ancak  $V$ 'nin özel durumları için genellikle nümerik çözüm yöntemleri ile çözümler önerilmektedir [23, 25, 26, 27, 33, 34].

### 3.2.2. Morse Potansiyeli İçin Çözüm

$a, r_e, D \in \mathbb{R}_+$  birer parametre olmak üzere Morse potansiyeli,

$$V(r) = D(e^{-2ax} - 2e^{-ax}), \quad x = \frac{r-r_e}{r_e}, \quad \alpha = ar_e \in \mathbb{R}_+, \quad 0 < r < \infty \quad (3.2.2.1)$$

şeklinde verilir [17, 28]. (3.2.1.24) radyal Schrödinger denklemi Morse potansiyeli için

$$U''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + D(e^{-2ax} - 2e^{-ax}) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) U(r) = 0 \quad (3.2.2.2)$$

olur [17, 28].

(3.2.2.2) denkleminin  $l \neq 0$  için (3.2.1.26) koşullarını sağlayan genel çözümü yoktur. Bu durumda denklemin çözümünü bulmak için  $1/r^2$  terimine yaklaşım yapılır [17, 28]. Bu yaklaşımı belirlerken  $x = (r - r_e)/r_e$  olduğundan

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{r_e^2(1+x)^2} \quad (3.2.2.3)$$

eşitliği göz önüne alınır. Bu eşitliğin sağ tarafındaki  $1/(1+x)^2$  terimi için

$$\frac{1}{(1+x)^2} = c_0 + c_1 e^{-ax} + c_2 e^{-2ax} \quad (3.2.2.4)$$

eşitliği sağlanacak şekilde  $c_0, c_1$  ve  $c_2$  sabitleri belirlenir. (3.2.2.4) eşitliği

$$\frac{1}{(1+x)^2} = 1 - 2x + 3x^2 - 4x^3 + \dots, \quad (3.2.2.5)$$

$$e^{-ax} = 1 - ax + \alpha^2 \frac{x^2}{2!} - \alpha^3 \frac{x^3}{3!} + \dots \quad (3.2.2.6)$$

ve

$$e^{-2ax} = 1 - 2ax + 2\alpha^2 x^2 - \frac{4}{3}\alpha^3 x^3 + \dots \quad (3.2.2.7)$$

Maclaurin seri açılımları kullanılarak (3.2.2.5) ifadesi

$$1 - 2x + 3x^2 - 4x^3 + \dots = c_0 + c_1 + c_2 - (c_1 + 2c_2)\alpha x + \left(\frac{c_1}{2} + 2c_2\right)\alpha^2 x^2 - \left(\frac{c_1}{6} + \frac{4}{3}c_2\right)\alpha^3 x^3 + \dots \quad (3.2.2.8)$$

şeklinde yazılırsa

$$\begin{aligned} c_0 + c_1 + c_2 &= 1 \\ (c_1 + 2c_2)\alpha &= 2 \\ \left(\frac{c_1}{2} + 2c_2\right)\alpha^2 &= 3 \end{aligned} \quad (3.2.2.9)$$

denklemler sistemi elde edilir [28, 49]. Bu sistemden

$$c_0 = 1 - \frac{3}{\alpha} + \frac{3}{\alpha^2}, \quad c_1 = \frac{4}{\alpha} - \frac{6}{\alpha^2}, \quad c_2 = -\frac{1}{\alpha} + \frac{3}{\alpha^2} \quad (3.2.2.10)$$

değerleri bulunur. Böylece (3.2.2.2) denklemindeki (3.2.2.3) terimi yerine, (3.2.2.10)'da elde edilen değerler için

$$\frac{1}{r_e^2}(c_0 + c_1 e^{-\alpha x} + c_2 e^{-2\alpha x}) \quad (3.2.2.11)$$

şeklindeki ifadesi alınırsa denklem

$$U''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + D(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr_e^2} (c_0 + c_1 e^{-\alpha x} + c_2 e^{-2\alpha x}) \right) U(r) = 0 \quad (3.2.2.12)$$

denkleme indirgenir. Bu denklem  $x = (r - r_e)/r_e$  için

$$\gamma = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr_e^2} \quad (3.2.2.13)$$

olmak üzere

$$U''(x) + \frac{2mr_e^2}{\hbar^2} (E - \gamma c_0 + (2D - \gamma c_1)e^{-\alpha x} - (D + \gamma c_2)e^{-2\alpha x}) U(x) = 0 \quad (3.2.2.14)$$

şeklinde yazılır. Denklemden  $\varepsilon > 0$ ,  $\beta_1 > 0$ ,  $\beta_2 > 0$  olmak üzere,

$$-\varepsilon^2 = \frac{2mr_e^2}{\hbar^2} (E - \gamma c_0), \quad \beta_1^2 = \frac{2mr_e^2}{\hbar^2} (2D - \gamma c_1), \quad \beta_2^2 = \frac{2mr_e^2}{\hbar^2} (2D + \gamma c_2) \quad (3.2.2.15)$$

değiştirmeleri yapılırsa denklem

$$U''(x) + (-\varepsilon^2 + \beta_1^2 e^{-\alpha x} - \beta_2^2 e^{-2\alpha x}) U(x) = 0 \quad (3.2.2.16)$$

şeklini alır. Denkleme asimptotik iterasyon yönteminin uygulanabilmesi için denklemin (3.1.1) formunda olması gerekir. Bu nedenle (3.2.2.16) denkleminde

$$y = e^{-\alpha x} \quad (3.2.2.17)$$

değişken dönüşümü yapılırsa denklem

$$U''(y) + \frac{1}{y} U'(y) + \left( -\frac{\varepsilon^2}{\alpha^2 y^2} + \frac{\beta_1^2}{\alpha^2 y} - \frac{\beta_2^2}{\alpha^2} \right) U(y) = 0 \quad (3.2.2.18)$$

şeklini alır. Bu denklemindeki  $\varepsilon$  ve  $U$ 'nin genel ifadelerini elde edebilmek için; denklemin çözümünün,  $f$  daha sonra belirlenecek bir fonksiyon olmak üzere,

$$U(y) = y^\alpha e^{-\frac{\beta_2}{\alpha} y} f(y) \quad (3.2.2.19)$$

şeklinde olduğu varsayılır.  $U$  fonksiyonu ve türevleri (3.2.2.18) denkleminde yerlerine yazılıp düzenleme yapılırsa

$$f''(y) = \frac{2\beta_2 \alpha y - 2\varepsilon \alpha - \alpha^2}{\alpha^2 y} f'(y) + \frac{2\varepsilon \beta_2 + \alpha \beta_2 - \beta_1^2}{\alpha^2 y} f(y) \quad (3.2.2.20)$$

denklemini bulunur. Bu denklem, (3.1.1) ile karşılaştırılırsa,

$$\lambda_0(y) = \frac{2\beta_2\alpha y - 2\varepsilon\alpha - \alpha^2}{\alpha^2 y}, \quad s_0(y) = \frac{2\varepsilon\beta_2 + \alpha\beta_2 - \beta_1^2}{\alpha^2 y} \quad (3.2.2.21)$$

olduğu görülür.  $\lambda_k(y)$ ,  $s_k(y)$  değerleri  $k = 1, 2, \dots$  için (3.1.8) iterasyon bağıntıları kullanılarak hesaplanabilir. (3.1.10) koşulunun sağlanması için

$$\lambda_{k+1}(y)s_k(y) - \lambda_k(y)s_{k+1}(y) = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.2.22)$$

olması gerekir. Bu durumda,

$$k = 0 \text{ için } \lambda_1(y)s_0(y) - \lambda_0(y)s_1(y) = 0 \text{ dan } \varepsilon = \frac{\beta_1^2 - \alpha\beta_2}{2\beta_2},$$

$$k = 1 \text{ için } \lambda_2(y)s_1(y) - \lambda_1(y)s_2(y) = 0 \text{ dan } \varepsilon = \frac{\beta_1^2 - 3\alpha\beta_2}{2\beta_2},$$

$$k = 2 \text{ için } \lambda_3(y)s_2(y) - \lambda_2(y)s_3(y) = 0 \text{ dan } \varepsilon = \frac{\beta_1^2 - 5\alpha\beta_2}{2\beta_2},$$

...

$k, l = 0, 1, 2, \dots$  için

$$\varepsilon_{kl} = \frac{\beta_1^2 - (2k+1)\alpha\beta_2}{2\beta_2} \quad (3.2.2.23)$$

bulunur. Böylece, (3.2.2.15)'den

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mr_e^2} \varepsilon_{kl}^2 + \gamma c_0 = E_{kl}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.2.24)$$

şeklinde ifade edilebilen  $E_{kl}$  özdeğerlerinde, (3.2.2.23) değerleri kullanılırsa

$$E_{kl} = -\frac{\hbar^2}{2mr_e^2} \left( \frac{\beta_1^2}{2\beta_2} - \left( k + \frac{1}{2} \right) \alpha \right)^2 + \gamma c_0, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.2.25)$$

elde edilir [28].

(3.2.2.25)'de verilen  $E_{kl}$  özdeğerlerine karşılık gelen  $U_{kl}(y)$  çözümlerini belirlemek için (3.2.2.19) varsayımındaki  $f$  fonksiyonları belirlenmelidir. (3.2.2.20) denkleminin çözümü olan  $f(y)$  çözümleri, (3.2.2.23)'de verilen  $\varepsilon_{kl}$  değerleri kullanılarak, asimptotik iterasyon yöntemine göre

$$f(y) = e^{-\int \frac{s_k(t)}{\lambda_k(t)} dt}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.2.26)$$

şeklinde belirlenebilir [12]. Buna göre

$$\varepsilon_{0l} = \frac{\beta_1^2 - \alpha\beta_2}{2\beta_2} \text{ için } f_0(y) = 1$$

$$\varepsilon_{1l} = \frac{\beta_1^2 - 3\alpha\beta_2}{2\beta_2} \text{ için } f_1(y) = -(\beta_1^2 - 2\alpha\beta_2) \left( 1 - \frac{1}{\frac{2\varepsilon_1}{\alpha} + 1} \frac{2\beta_2 y}{\alpha} \right)$$

$$\varepsilon_{2l} = \frac{\beta_1^2 - 5\alpha\beta_2}{2\beta_2} \text{ için}$$

$$f_2(y) = -(\beta_1^2 - 4\alpha\beta_2)(\beta_1^2 - 3\alpha\beta_2) \left( 1 - \frac{1}{\frac{2\varepsilon_1}{\alpha} + 1} \frac{4\beta_2 y}{\alpha} + \frac{1}{\left(\frac{2\varepsilon_1}{\alpha} + 1\right)\left(\frac{2\varepsilon_1}{\alpha} + 2\right)} \frac{4\beta_2^2 y^2}{\alpha^2} \right)$$

...

$$\varepsilon_{kl} = \frac{\beta_1^2 - (2k+1)\alpha\beta_2}{2\beta_2} \text{ için}$$

$$f_{kl}(y) = (-1)^k \left( \prod_{n=k}^{2k-1} (\beta_1^2 - (n+1)\alpha\beta_2) \right) {}_1F_1 \left( -k, \frac{2\varepsilon_{kl}}{\alpha} + 1; \frac{2\beta_2 y}{\alpha} \right), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.2.27)$$

dir. Burada  ${}_1F_1 \left( -k, \frac{2\varepsilon_{kl}}{\alpha} + 1; \frac{2\beta_2 y}{\alpha} \right)$  fonksiyonu

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_k = a(a+1)(a+2) \dots (a+k-1), \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.2.2.28)$$

ve

$$(-k)_n = (-1)^n k(k-1)(k-2) \dots (k-n+1) = \begin{cases} 0 & , n > k \\ (-1)^n \frac{k!}{(k-n)!} & , n \leq k \end{cases} \quad (3.2.2.29)$$

olmak üzere

$${}_1F_1(-k; a; z) = \sum_{n=0}^k \frac{(-k)_n}{(a)_n} \frac{z^n}{n!}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (|z| < 1, \quad a \in \mathbb{C}) \quad (3.2.2.30)$$

şeklinde confluent hipergeometrik fonksiyondur [50]. Belirlenen bu değer,  $U_{kl}(y)$  için yapılan

$$U(y) = y^{\frac{\varepsilon_{kl}}{\alpha}} e^{-\frac{\beta_2}{\alpha} y} f_{kl}(y) = U_{kl}(y), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.2.31)$$

şeklindeki varsayımda yerine yazılırsa (3.2.2.2) denkleminin çözümü

$$U_{kl}(y) = (-1)^k \left( \prod_{n=k}^{2k-1} (\beta_1^2 - (n+1)\alpha\beta_2) \right) y^{\frac{\varepsilon_{kl}}{\alpha}} e^{-\frac{\beta_2}{\alpha} y} {}_1F_1 \left( -k, \frac{2\varepsilon_{kl}}{\alpha} + 1; \frac{2\beta_2 y}{\alpha} \right), \quad n, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.2.32)$$

olur [28].  $U_{kl}(y)$  fonksiyonu, (3.2.2.17) dönüşümü ve  $x = (r - r_e)/r_e$  değiştirmesi ile

$$U_{kl}(r) = (-1)^k \left( \prod_{n=k}^{2k-1} (\beta_1^2 - (n+1)\alpha\beta_2) \right) e^{-\varepsilon_{kl} \left( \frac{r-r_e}{r_e} \right)} e^{-\frac{\beta_2}{\alpha} e^{-\alpha \left( \frac{r-r_e}{r_e} \right)}} \times {}_1F_1 \left( -k, \frac{2\varepsilon_{kl}}{\alpha} + 1; \frac{2\beta_2}{\alpha} e^{-\alpha \left( \frac{r-r_e}{r_e} \right)} \right), \quad n, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.2.33)$$

şeklinde ifade edilir. Bu fonksiyon (3.2.1.23)'de kullanılırsa, (3.2.1.22) radyal Schrödinger denkleminin, (3.2.2.1) Morse potansiyeli için çözümü

$$R_{kl}(r) = (-1)^k \left( \prod_{n=k}^{2k-1} (\beta_1^2 - (n+1)\alpha\beta_2) \right) e^{-\varepsilon_{kl} \left( \frac{r-r_e}{r_e} \right)} e^{-\frac{\beta_2}{\alpha} e^{-\alpha \left( \frac{r-r_e}{r_e} \right)}} r^{-1} \times {}_1F_1 \left( -k, \frac{2\varepsilon_{kl}}{\alpha} + 1; \frac{2\beta_2}{\alpha} e^{-\alpha \left( \frac{r-r_e}{r_e} \right)} \right), \quad n, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.2.34)$$

olur [28].

### 3.2.3. $V(r) = \frac{a}{r^2} - \frac{b}{r} + cr^\kappa$ Potansiyeli İçin Çözüm

Radyal Schrödinger denkleminin kanonik formu olan (3.2.1.24) diferansiyel denklemi,

$$V(r) = \frac{a}{r^2} - \frac{b}{r} + cr^\kappa, \quad a, b, c \in \mathbb{R}, \quad \kappa = -2, -1, 0 \quad (3.2.3.1)$$

için

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{a}{r^2} + \frac{b}{r} - cr^\kappa - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) U(r) = 0, \quad 0 < r < \infty, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.2)$$

şeklinde yazılır. Denklemden,

$$-\varepsilon^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \tilde{a} = \frac{2ma}{\hbar^2}, \quad \tilde{b} = \frac{2mb}{\hbar^2}, \quad \tilde{c} = \frac{2mc}{\hbar^2} \quad (3.2.3.3)$$

değişirmeleri yapılırsa denklem

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \left[ -\varepsilon^2 - \frac{\tilde{a}}{r^2} + \frac{\tilde{b}}{r} - \tilde{c}r^\kappa - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] U(r) = 0 \quad (3.2.3.4)$$

şeklini alır [31].

Bu denklem, (3.1.1) formuna dönüştürülebilirse  $\kappa = -2, -1, 0$  değerleri için asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak çözümler belirlenebilir.  $\kappa$ 'nın bu üç durumu için çözümleri belirleyelim [31].

#### 3.2.3.1. $\kappa = 0$ Durumu: (3.2.3.4) denklemi, $\kappa = 0$ için

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \left[ -\varepsilon^2 - \tilde{c} + \frac{\tilde{b}}{r} - \frac{l(l+1)+\tilde{a}}{r^2} \right] U(r) = 0 \quad (3.2.3.5)$$

olur. Bu denklemde

$$-\varepsilon^2 = -\varepsilon^2 - \tilde{c} \text{ ve } \Lambda = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \tilde{a}} \quad (3.2.3.6)$$

değişirmeleri yapılırsa denklem

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \left[ -\varepsilon^2 + \frac{\tilde{b}}{r} - \frac{\Lambda(\Lambda+1)}{r^2} \right] U(r) = 0 \quad (3.2.3.7)$$

şeklinde yazılır.  $f$  daha sonra asimptotik iterasyon yöntemi ile belirlenecek bir fonksiyon olmak üzere, (3.2.3.7) denklemin çözümünün

$$U(r) = r^{\Lambda+1} e^{-\varepsilon r} f(r) \quad (3.2.3.8)$$

şeklinde olduğu varsayılarak  $U(r)$  fonksiyonu ve türevi denklemde yerine yazılırsa

$$f''(r) = 2 \left( \varepsilon - \frac{\Lambda+1}{r} \right) f'(r) + \frac{2\varepsilon(\Lambda+1) - \tilde{b}}{r} f(r) \quad (3.2.3.9)$$

ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklemi elde edilir. Bu denklem, asimptotik iterasyon yönteminin uygulanabileceği (3.1.1) formunda bir denklemdir.

(3.2.3.9) diferansiyel denklemi, (3.1.1) denklemi ile karşılaştırılırsa,

$$\lambda_0(r) = 2 \left( \epsilon - \frac{\Lambda+1}{r} \right), \quad s_0(r) = \frac{2\epsilon(\Lambda+1)-\bar{b}}{r} \quad (3.2.3.10)$$

olduğu görülür.  $k = 1, 2, \dots$  için (3.1.8) iterasyon bağıntılarından  $\lambda_k(r)$  ve  $s_k(r)$  hesaplanır. (3.1.10) koşulunun sağlanması için

$$\lambda_{k+1}(r)s_k(r) - \lambda_k(r)s_{k+1}(r) = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.11)$$

olması gerekir. Bu durumda,

$$k = 0 \text{ için } \lambda_1(r)s_0(r) - \lambda_0(r)s_1(r) = 0 \text{ dan } \epsilon = \frac{\bar{b}}{2(\Lambda+1)},$$

$$k = 1 \text{ için } \lambda_2(r)s_1(r) - \lambda_1(r)s_2(r) = 0 \text{ dan } \epsilon = \frac{\bar{b}}{2(\Lambda+2)},$$

$$k = 2 \text{ için } \lambda_3(r)s_2(r) - \lambda_2(r)s_3(r) = 0 \text{ dan } \epsilon = \frac{\bar{b}}{2(\Lambda+3)},$$

$$k = 3 \text{ için } \lambda_4(r)s_3(r) - \lambda_3(r)s_4(r) = 0 \text{ dan } \epsilon = \frac{\bar{b}}{2(\Lambda+4)},$$

...

$k, l = 0, 1, 2, \dots$  için

$$\epsilon_{kl} = \frac{\bar{b}}{2(k+\Lambda+1)} \quad (3.2.3.12)$$

bulunur [31].

$E_{kl}$  özdeğerleri, (3.2.3.3) ve (3.2.3.6) deęiřtirmelerinden

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (\tilde{c} - \epsilon_{kl}^2) = E_{kl}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.13)$$

řeklinde yazılabilir. Bu ifadede, (3.2.3.12) deęerleri ile (3.2.3.3) ve (3.2.3.6) deęiřtirmeleri kullanılırsa

$$E_{kl} = c - \frac{mb^2}{2\hbar^2} \left( k + \frac{1}{2} + \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2ma}{\hbar^2}} \right)^{-2}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.14)$$

elde edilir [31, 32].

Asimptotik iterasyon yöntemine göre (3.2.3.9) denkleminin çözümleri

$$f(r) = e^{-\int \frac{s_k(r')}{\lambda_k(r')} dr'}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.15)$$

řeklinde belirlenir [12]. Buna göre

$$\epsilon_{0l} = \frac{\bar{b}}{2(\Lambda+1)} \text{ için } f_{0l}(r) = 1,$$

$$\epsilon_{1l} = \frac{\tilde{b}}{2(\Lambda+2)} \text{ için } f_{1l}(r) = (2\Lambda+2)(\Lambda+2) \left(1 - \frac{2\epsilon_{1l}r}{2\Lambda+2}\right),$$

$$\epsilon_{2l} = \frac{\tilde{b}}{2(\Lambda+3)} \text{ için } f_{2l}(r) = (2\Lambda+2)(2\Lambda+3)(\Lambda+3)^2 \left(1 - \frac{2\epsilon_{2l}r}{2\Lambda+2} + \frac{4\epsilon_{2l}^2 r^2}{(2\Lambda+2)(2\Lambda+3)}\right),$$

$$\epsilon_{3l} = \frac{\tilde{b}}{2(\Lambda+4)} \text{ için } f_{3l}(r) = (2\Lambda+2)(2\Lambda+3)(2\Lambda+4)(\Lambda+4)^2 \left(1 - \frac{6\epsilon_{3l}r}{2\Lambda+2} + \frac{12\epsilon_{3l}^2 r^2}{(2\Lambda+2)(2\Lambda+3)} - \frac{8\epsilon_{3l}^3 r^3}{(2\Lambda+2)(2\Lambda+3)(2\Lambda+4)}\right)$$

...

bulunur. Benzer şekilde devam edilirse

$$f_{kl}(r) = (\Lambda+k+1)^k \left( \prod_{n=0}^{k-1} (2\Lambda+2+n) \right) {}_1F_1(-k; 2\Lambda+2; 2\epsilon_{kl}r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.16)$$

olur. Diğer taraftan, (3.2.2.30)'e benzer şekilde  ${}_1F_1(-k; 2\Lambda+2; 2\epsilon_{kl}r)$  fonksiyonu, confluent hipergeometrik fonksiyondur [50]. Buradan, (3.2.3.5) denkleminin

$$U(r) = r^{\Lambda+1} e^{-\epsilon_{kl}r} f_{kl}(r) = U_{kl}(r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.17)$$

şeklindeki çözümünün,

$$U_{kl}(r) = (\Lambda+k+1)^k \left( \prod_{n=0}^{k-1} (2\Lambda+2+n) \right) r^{\Lambda+1} e^{-\epsilon_{kl}r} {}_1F_1(-k; 2\Lambda+2; 2\epsilon_{kl}r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.18)$$

olduğu görülür [31, 32].  $U_{kl}(r)$  fonksiyonu (3.2.1.23)'de yerine yazılırsa

$$R_{kl}(r) = (\Lambda+k+1)^k \left( \prod_{n=0}^{k-1} (2\Lambda+2+n) \right) r^\Lambda e^{-\epsilon_{kl}r} {}_1F_1(-k; 2\Lambda+2; 2\epsilon_{kl}r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.19)$$

çözüm fonksiyonu bulunur [31, 32].

**3.2.3.2.  $\kappa = -1$  Durumu:** (3.2.3.4) denklemini,  $\kappa = -1$  için

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \left[ -\epsilon^2 + \frac{\tilde{b}-\tilde{c}}{r} - \frac{l(l+1)+\tilde{a}}{r^2} \right] U(r) = 0 \quad (3.2.3.20)$$

şeklini alır. Denklemden

$$\beta = \tilde{b} - \tilde{c} \quad \text{ve} \quad \Lambda = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \tilde{a}} \quad (3.2.3.21)$$

değişimleri yapılsa, denklem

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \left[ -\epsilon^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{\Lambda(\Lambda+1)}{r^2} \right] U(r) = 0 \quad (3.2.3.22)$$



olur. Bu denklem,  $\kappa = 0$  durumu için verilen (3.2.3.7) denklemi formundadır. Bu nedenle  $\kappa = 0$  durumu için elde edilen sonuçlar burada da geçerlidir. Buna göre, (3.2.3.12)'ye benzer şekilde

$$\varepsilon_{kl} = \frac{\beta}{2(k+\Lambda+1)}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.23)$$

bulunur.

$E_{kl}$  özdeğerleri, (3.2.3.3)'den

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \varepsilon_{kl}^2 = E_{kl}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.24)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifadede, (3.2.3.23) değerleri ile (3.2.3.21), (3.2.3.3) değiştirmeleri kullanıldığında,  $\kappa = -1$  durumu için

$$E_{kl} = -\frac{m(b-c)^2}{2\hbar^2} \left( k + \frac{1}{2} + \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2ma}{\hbar^2}} \right)^{-2}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.25)$$

özdeğerleri elde edilir [31].

$\varepsilon_{kl}$ 'nin (3.2.3.23) değerleri için, (3.2.3.22) denkleminin

$$U(r) = r^{\Lambda+1} e^{-\varepsilon_{kl}r} f_{kl}(r) = U_{kl}(r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.26)$$

şeklindeki çözümü, (3.2.3.18)'ya bezer şekilde

$$U_{kl}(r) = (\Lambda + k + 1)^k \left( \prod_{n=0}^{k-1} (2\Lambda + 2 + n) \right) r^{\Lambda+1} e^{-\varepsilon_{kl}r} {}_1F_1(-k; 2\Lambda + 2; 2\varepsilon_{kl}r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.27)$$

dir [31].  $U_{kl}(r)$  fonsiyonu (3.2.1.23) denkleminde yerine yazılırsa

$$R_{kl}(r) = (\Lambda + k + 1)^k \left( \prod_{n=0}^{k-1} (2\Lambda + 2 + n) \right) r^{\Lambda} e^{-\varepsilon_{kl}r} {}_1F_1(-k; 2\Lambda + 2; 2\varepsilon_{kl}r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.28)$$

çözüm fonksiyonu bulunur [31].

**3.2.3.3.  $\kappa = -2$  Durumu:** (3.2.3.4) denklemi,  $\kappa = -2$  için

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \left[ -\varepsilon^2 + \frac{\tilde{b}}{r} - \frac{l(l+1)+\tilde{a}+\tilde{c}}{r^2} \right] U(r) = 0 \quad (3.2.3.29)$$

olur. Bu denklemde

$$\alpha = \tilde{a} + \tilde{c} \text{ ve } \Lambda' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 + \alpha} \quad (3.2.3.30)$$

ile gösterilirse denklem

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \left[ -\varepsilon^2 + \frac{\tilde{b}}{r} - \frac{\Lambda'(\Lambda'+1)}{r^2} \right] U(r) = 0 \quad (3.2.3.31)$$

şeklini alır. Bu denklem,  $\kappa = 0$  için elde edilen (3.2.3.7) denklemi formundadır. Bu nedenle  $\kappa = 0$  durumu için elde edilen sonuçlar burada da geçerlidir. Buna göre, (3.2.3.12)'ye benzer şekilde

$$\varepsilon_{kl} = \frac{\tilde{b}}{2(k+\Lambda'+1)}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.32)$$

bulunur.

$E_{kl}$  özdeğerleri, (3.2.3.3)'den

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \varepsilon_{kl}^2 = E_{kl}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.33)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifadede, (3.2.3.32) değerleri ile (3.2.3.3) ve (3.2.3.30) değiştirmeleri kullanılırsa

$$E_{kl} = -\frac{mb^2}{2\hbar^2} \left( k + \frac{1}{2} + \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2m(a+c)}{\hbar^2}} \right)^{-2}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.34)$$

özdeğerleri elde edilir [31].

Böylece  $\varepsilon_{kl}$ 'nin (3.2.3.32) değerleri için, (3.2.3.31) denkleminin

$$U(r) = r^{\Lambda'+1} e^{-\varepsilon_{kl}r} f_{kl}(r) = U_{kl}(r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.35)$$

şeklindeki çözümü,

$$U_{kl}(r) = (\Lambda' + k + 1)^k \left( \prod_{n=0}^{k-1} (2\Lambda' + 2 + n) \right) r^{\Lambda'+1} e^{-\varepsilon_{kl}r} {}_1F_1(-k; 2\Lambda' + 2; 2\varepsilon_{kl}r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.36)$$

olur [31].  $U_{kl}(r)$  fonsiyonu (3.2.1.23) denkleminde yerine yazılırsa çözüm

$$R_{kl}(r) = (\Lambda' + k + 1)^k \left( \prod_{n=0}^{k-1} (2\Lambda' + 2 + n) \right) r^{\Lambda'} e^{-\varepsilon_{kl}r} {}_1F_1(-k; 2\Lambda' + 2; 2\varepsilon_{kl}r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.3.37)$$

şeklinde bulunur [31].

### 3.2.4. $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} - \frac{d}{r^2}$ Potansiyeli İçin Çözüm

(3.2.1.24) diferansiyel denkleminin

$$a, b, c \in \mathbb{R}_+, d \in \mathbb{R}, 0 < r < \frac{b}{a\sqrt{2}}, c = \frac{\hbar b}{2\sqrt{2ma}} \left( 1 + \sqrt{(2l+1)^2 - \frac{8md}{\hbar^2}} \right) \text{ ve} \quad d \leq \frac{\hbar^2(2l+1)^2}{8m}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4.1)$$

olmak üzere

$$V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} - \frac{d}{r^2} \quad (3.2.4.2)$$

için asimptotik iterasyon yöntemi ile yapılan çözümlerini belirleyelim. (3.2.1.24) denklemi (3.2.4.1) değerleri ve (3.2.4.2) potansiyeli için denklem

$$U''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - ar^2 - br + \frac{c}{r} + \frac{d}{r^2} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) U(r) = 0 \quad (3.2.4.3)$$

şeklinde yazılır. Bu denklemde

$$\varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad \alpha = \frac{2m}{\hbar^2} a, \quad \beta = \frac{2m}{\hbar^2} b, \quad \gamma = \frac{2m}{\hbar^2} c, \quad \eta = \frac{2m}{\hbar^2} d, \quad \Lambda = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \eta} \quad (3.2.4.4)$$

değişirmeleri yapılırsa denklem

$$U''(r) + \left[ \varepsilon - \alpha r^2 - \beta r + \frac{\gamma}{r} - \frac{\Lambda(\Lambda+1)}{r^2} \right] U(r) = 0 \quad (3.2.4.5)$$

şeklini alır [31, 53, 54]. Bu denklemin (3.2.1.26) koşulunu sağlayan çözümünün,  $f$  daha sonra belirlenecek bir fonksiyon olmak üzere,

$$U(r) = r^{\Lambda+1} e^{-\frac{\sqrt{\alpha}}{2}r^2 - \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}}r} f(r), \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}_+, \quad 0 < r < \frac{\beta}{\alpha\sqrt{2}} \quad (3.2.4.6)$$

şeklinde olduğunu varsayalım.  $U(r)$  ve  $U''(r)$  değerleri (3.2.4.5) denkleminde kullanılırsa

$$f''(r) - 2 \left( \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}} + \sqrt{\alpha}r - \frac{\Lambda+1}{r} \right) f'(r) + \left( \varepsilon - \sqrt{\alpha}(2\Lambda+3) + \frac{\beta^2}{4\alpha} \right) f(r) = 0 \quad (3.2.4.7)$$

denkleminde ulaşılır. (3.2.4.7) denklemindeki  $\varepsilon$  değeri ve  $f$  fonksiyonu asimptotik iterasyon yöntemi ile belirlenirken, bunların genel ifadelerini elde etmek için (3.2.4.7) denklemi daha uygun bir denkleme dönüştürülebilir. Gerçekten; (3.2.4.7) denkleminde (3.2.4.1) olduğu göz önüne alınır,  $|t| < \frac{\beta^2}{4\alpha^2}$  için

$$r = -\sqrt{t + \frac{\beta^2}{4\alpha^2}} \quad (3.2.4.8)$$

dönüşümü yapılırsa

$$\begin{aligned} \left( t + \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \right) f''(t) + \left( \Lambda + \frac{3}{2} - \sqrt{\alpha} \left( t + \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \right) + \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}} \sqrt{t + \frac{\beta^2}{4\alpha^2}} \right) f'(t) \\ + \frac{1}{4} \left( \varepsilon - \sqrt{\alpha}(2\Lambda+3) + \frac{\beta^2}{4\alpha} \right) f(t) = 0 \end{aligned} \quad (3.2.4.9)$$

denkleminde elde edilir. (3.2.4.9) denkleminin  $\sqrt{t + \frac{\beta^2}{4\alpha^2}}$  terimi yerine

$$\sqrt{t + \frac{\beta^2}{4\alpha^2}} \cong \frac{\beta}{2\alpha} + \frac{\alpha}{\beta} t, \quad -\frac{\beta^2}{4\alpha^2} < t < \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \quad (3.2.4.10)$$

şeklinde Maclaurin seri açılımı alınır,

$$\left(t + \frac{\beta^2}{4\alpha^2}\right) f''(t) + \left(\Lambda + \frac{3}{2} - \frac{\sqrt{\alpha}}{2}t\right) f'(t) + \frac{1}{4}\left(\varepsilon - \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 3) + \frac{\beta^2}{4\alpha}\right) f(t) = 0 \quad (3.2.4.11)$$

denklemini bulunur. (3.2.4.11) denkleminin, asimptotik iterasyon yönteminin uygulanabileceği (3.1.1) denklemine benzemesi için denklemde

$$t = \frac{2}{\sqrt{\alpha}}\rho - \frac{\beta^2}{4\alpha^2}, \quad 0 < \rho < \frac{\beta^2}{4\alpha^{3/2}} \quad (3.2.4.12)$$

dönüşümü yapılırsa

$$f''(\rho) = \left(1 - \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}\rho}\right) f'(\rho) - \frac{\beta^2 + 4\alpha(\varepsilon - \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 3))}{8\alpha^{3/2}\rho} f(\rho) \quad (3.2.4.13)$$

denklemini elde edilir. (3.2.4.13) denklemini de

$$\lambda_0(\rho) = 1 - \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}\rho}, \quad s_0(\rho) = -\frac{\beta^2 + 4\alpha(\varepsilon - \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 3))}{8\alpha^{3/2}\rho} \quad (3.2.4.14)$$

olmak üzere

$$f''(\rho) = \lambda_0(\rho)f'(\rho) + s_0(\rho)f(\rho) \quad (3.2.4.15)$$

formunda yazılır. Böylece (3.2.1.24) denklemini, asimptotik iterasyon yönteminin uygulanabildiği (3.2.4.15) formuna indirgenmiş olur.

$\lambda_k(\rho)$  ve  $s_k(\rho)$  değerleri  $k = 1, 2, \dots$  için  $\lambda_0(\rho)$ ,  $s_0(\rho)$  ifadeleri ve (3.1.8) iterasyon bağıntıları kullanılarak hesaplanabilir. Diğer taraftan (3.1.10) koşulunun sağlanması için

$$\lambda_{k+1}(\rho)s_k(\rho) - \lambda_k(\rho)s_{k+1}(\rho) = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4.16)$$

olması gerekir. Bu durumda,

$$k = 0 \text{ için } \lambda_1(\rho)s_0(\rho) - \lambda_0(\rho)s_1(\rho) = 0 \text{ dan } \varepsilon = \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 3) - \frac{\beta^2}{4\alpha},$$

$$k = 1 \text{ için } \lambda_2(\rho)s_1(\rho) - \lambda_1(\rho)s_2(\rho) = 0 \text{ dan } \varepsilon = \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 5) - \frac{\beta^2}{4\alpha},$$

$$k = 2 \text{ için } \lambda_3(\rho)s_2(\rho) - \lambda_2(\rho)s_3(\rho) = 0 \text{ dan } \varepsilon = \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 7) - \frac{\beta^2}{4\alpha},$$

$$k = 3 \text{ için } \lambda_4(\rho)s_3(\rho) - \lambda_3(\rho)s_4(\rho) = 0 \text{ dan } \varepsilon = \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 9) - \frac{\beta^2}{4\alpha},$$

...

$k, l = 0, 1, 2, \dots$  için

$$\varepsilon_{kl} = \sqrt{\alpha}(2k + 2\Lambda + 3) - \frac{\beta^2}{4\alpha} \quad (3.2.4.17)$$

bulunur. Böylece (3.2.4.4)

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\varepsilon_{kl} = E_{kl}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4.18)$$

şeklinde ifade edilebilen  $E_{kl}$  özdeğerlerinde, (3.2.4.17) değerleri kullanılırsa

$$E_{kl} = \sqrt{\frac{\hbar^2 a}{2m}} \left( 2k + 2 + \sqrt{(2l + 1)^2 - \frac{8md}{\hbar^2}} \right) - \frac{b^2}{4a}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4.19)$$

elde edilir. Bulunan bu özdeğerler literatürle uyumludur [53].

Diğer taraftan asimptotik iterasyon yöntemine göre (3.2.4.15) denkleminin çözümleri

$$f(\rho) = e^{-\int \frac{s_k(\rho')}{\lambda_k(\rho)} d\rho'}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4.20)$$

formundadır [12]. Buna göre, (3.2.4.17) değerleri kullanılarak (3.2.4.20)'dan

$$\varepsilon_{0l} = \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 3) - \frac{\beta^2}{4\alpha} \quad \text{için} \quad f_{0l}(\rho) = 1,$$

$$\varepsilon_{1l} = \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 5) - \frac{\beta^2}{4\alpha} \quad \text{için} \quad f_{1l}(\rho) = \rho - \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}},$$

$$\varepsilon_{2l} = \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 7) - \frac{\beta^2}{4\alpha} \quad \text{için}$$

$$f_{2l}(\rho) = \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} + 1 \right) - 2 \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} + 1 \right) \rho + \rho^2,$$

$$\varepsilon_{3l} = \sqrt{\alpha}(2\Lambda + 9) - \frac{\beta^2}{4\alpha} \quad \text{için}$$

$$f_{3l}(\rho) = -\frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} + 1 \right) \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} + 2 \right)$$

$$+ 3 \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} + 1 \right) \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} + 2 \right) \rho - 3 \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} + 2 \right) \rho^2 + \rho^3$$

...

bulunur. Benzer şekilde devam edilirse (3.2.4.13) denkleminin çözümü

$$f_{kl}(\rho) = (-1)^k \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} \right)_k {}_1F_1 \left( -k; \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}}; \rho \right), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4.21)$$

şeklinde elde edilir. Bu çözümdeki  ${}_1F_1 \left( -k; \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}}; \rho \right)$  terimi (3.2.2.30)'e

benzer şekilde confluent hipergeometrik fonksiyondur. Buna göre (3.2.4.7) denkleminin çözümü; (3.2.4.8) ve (3.2.4.12) dönüşümleri (3.2.4.21)'de kullanılırsa

$$f_{kl}(r) = (-1)^k \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}} \right)_k {}_1F_1 \left( -k; \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda + 3)}{8\alpha^{3/2}}; \frac{\sqrt{\alpha}}{2} r^2 \right), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4.22)$$

şeklinde bulunur. Bu ifade, (3.2.4.6)'da verilen

$$U(r) = r^{\Lambda+1} e^{-\frac{\sqrt{\alpha}}{2} r^2 - \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}} r} f_{kl}(r) = U_{kl}(r), \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4.23)$$

şeklindeki varsayımda kullanılırsa

$$U_{kl}(r) = (-1)^k \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda+3)}{8\alpha^{3/2}} \right)_k r^{\Lambda+1} e^{-\frac{\sqrt{\alpha}}{2}r^2 - \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}}r} {}_1F_1 \left( -k; \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda+3)}{8\alpha^{3/2}}; \frac{\sqrt{\alpha}}{2}r^2 \right),$$

$$k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.4.24)$$

şeklini alır. Buradan da (3.2.1.22) radyal Schrödinger denkleminin çözümü (3.2.4.1) varsayımı ile  $k, l = 0, 1, 2, \dots$  için

$$R_{kl}(r) = (-1)^k \left( \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda+3)}{8\alpha^{3/2}} \right)_k r^{\Lambda} e^{-\frac{\sqrt{\alpha}}{2}r^2 - \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}}r} {}_1F_1 \left( -k; \frac{\beta^2 + 4\alpha^{3/2}(2\Lambda+3)}{8\alpha^{3/2}}; \frac{\sqrt{\alpha}}{2}r^2 \right)$$

$$(3.2.4.25)$$

veya

$$R_{kl}(r) = (-1)^k \left( 1 + \frac{b^2}{2} \sqrt{\frac{m}{8\hbar^2 a^3}} + \frac{1}{2} \sqrt{(2l+1)^2 - \frac{8md}{\hbar^2}} \right)_k r^{-\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(2l+1)^2 - \frac{8md}{\hbar^2}}}$$

$$\times e^{-\sqrt{\frac{ma}{2\hbar^2}}r^2 - \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2 a}}br} {}_1F_1 \left( -k; 1 + \frac{b^2}{2} \sqrt{\frac{m}{8\hbar^2 a^3}} + \frac{1}{2} \sqrt{(2l+1)^2 - \frac{8md}{\hbar^2}}; \sqrt{\frac{ma}{2\hbar^2}}r^2 \right)$$

$$(3.2.4.26)$$

olarak bulunur.

## BÖLÜM 4

### RADYAL SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN ÖZEL POTANSİYELLER İÇİN VARYASYONEL YÖNTEMLE ÇÖZÜMLERİ

Bu bölümde,  $p, q \in C^\infty$  olmak üzere,

$$y'' = p(x)y' + q(x)y \quad (4.1)$$

şeklindeki denklemlerin çözümlerinin bulunmasında kullanılabilen nümerik çözüm yöntemlerinden birisi olan varyasyonel yöntem tanıtılmıştır.

(4.1) denkleminin özel bir hali olarak;

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) R(r) = 0, \quad 0 < r < \infty, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$
$$\left( \hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad h \text{ Planck sabiti} \right) \quad (4.2)$$

şeklindeki radyal Schrödinger denklemi,

$$\hbar = 1, \quad m = 1, \quad l = 0, \quad r_0 \in \mathbb{R}_+, \quad 0 < r < r_0 \quad (4.3)$$

olmak üzere

$$H = -\frac{1}{2} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + V(r) \quad (4.4)$$

Hamiltonian operatörü kullanılarak

$$HR = ER \quad (4.5)$$

şeklinde ifade edilebilir. (4.5) denkleminin,  $a, b, c \in \mathbb{R}_+ \cup \{0\}$  olmak üzere

$$V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} \quad (4.6)$$

potansiyeli için  $E \in \mathbb{R}$  özdeğerleri ve

$$\lim_{r \rightarrow r_0} rR(r) = 0 \quad (4.7)$$

koşulunu sağlayan  $R$  çözüm fonksiyonları varyasyonel yöntem kullanılarak bulunmuştur. Bunun için varyasyonel yöntemle göre (4.5) denkleminde parametreye bağlı uygun bir  $R$  çözüm fonksiyonunun önerilmesi gerekir.  $R$  fonksiyonunu belirleyebilmek

için örnek olarak, (4.3)'deki değerler ve  $V(r) = 0$  potansiyeli için radyal Schrödinger denklemi ile verilen özdeğer probleminin varyasyonel yöntem kullanılarak yapılmış olan çözümü incelenmiştir[61]. Bu çözümden yararlanılarak 4.2.2. bölümde, (4.3)'deki değerler ve  $V(r) = -\frac{c}{r}$  potansiyeli için radyal Schrödinger denklemi ile verilen özdeğer probleminin çözümü bir parametreye bağlı olarak ve  $V(r) = 0$  potansiyelli durumdaki çözümün bir çarpımı olacak şekilde önerilmiş, önerilen çözüm fonksiyonu yardımıyla varyasyonel yöntem kullanılarak  $E$  özdeğerleri tanımlanmıştır. Radyal Schrödinger denklemi ile verilen özdeğer probleminin  $V(r) = br - \frac{c}{r}$  ve  $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r}$  potansiyelleri için çözümleri sırasıyla 4.2.3. ve 4.2.4. bölümde, her birisi için bir önceki bölümde elde edilen sonuçlar ve varyasyonel yöntem kullanılarak, verilmiştir.

Özel olarak, 4.2.5. bölümde

$$\hbar = 1, m = 1, l = 0, a = \frac{1}{32}, b = 1, c = 4, d = 0 \text{ ve } r_0 = \frac{b}{a\sqrt{2}} = 22.6274 \quad (4.8)$$

olmak üzere

$$V(r) = \frac{1}{32}r^2 + r - \frac{4}{r} \quad (4.9)$$

potansiyeli için radyal Schrödinger denklemi ile verilen özdeğer probleminin çözümü, varyasyonel yöntem ve asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar, hem birbirleriyle hem de farklı yöntemler kullanılarak bulunan sonuçlar ile karşılaştırılmıştır.



#### 4.1. Varyasyonel Yöntem

Bir sistemin özelliklerini belirleyen parametrelerde küçük değişiklikler yapıldığında, sistemin bütününde meydana gelen değişikliklerin incelenmesine olanak sağlayan yönteme “varyasyon hesabı” denir. Varyasyon hesabının en basit şekli, ikinci mertebeye kadar sürekli türevlere sahip olan  $y$  fonksiyonlarından  $(x_1, y_1)$  ve  $(x_2, y_2)$  noktalarından geçen ve

$$J[y(x)] = \int_{x_1}^{x_2} f(x, y(x), y'(x)) dx \quad (4.1.1)$$

integralini ekstremum yapan  $y$  fonksiyonunun bulunması problemidir [10]. Bu problemin çözümü olan sonsuz sayıda fonksiyon bulunabilir. Bu fonksiyonlardan herhangi biri  $y^*$  ise  $y(x) - y^*(x)$  farkına  $y$ 'nin “varyasyonu” denir ve

$$\delta y = y(x) - y^*(x) \quad (4.1.2)$$

şeklinde gösterilir [9].  $\delta y$ ,  $(x_1, x_2)$  aralığında sürekli türevlere sahip ve

$$\delta y|_{x=x_1} = 0, \quad \delta y|_{x=x_2} = 0 \quad (4.1.3)$$

olan bir fonksiyondur [9].  $\alpha$ , varyasyon büyüklüğünü belirten küçük bir skaler parametre olmak üzere  $[x_1, x_2]$  aralığında tanımlanan herhangi bir  $y$  fonksiyonu

$$y(x, \alpha) = y(x) + \alpha \delta y \quad (4.1.4)$$

şeklinde parametrelendirilebilir [9, 10]. (4.1.4) tanımından,  $\alpha = 0$  ise (4.1.1) integralini ekstremum yapan  $y$  fonksiyonu,  $\alpha = 1$  ise  $y^*$  fonksiyonu elde edilir.

(4.1.4) tanımına göre (4.1.1) integrali  $\alpha$  parametresine bağlı olarak

$$\varphi(\alpha) = \int_{x_1}^{x_2} f[x, y(x, \alpha), y'(x, \alpha)] dx \quad (4.1.5)$$

şeklinde yazılırsa  $\varphi$ 'nin ekstremum değeri

$$\left. \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} = 0 \quad (4.1.6)$$

koşulu ile belirlenir. (4.1.5)'in  $\alpha$ 'ya göre türevi olan

$$\frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha} = \int_{x_1}^{x_2} \left[ \frac{\partial f[x, y(x, \alpha), y'(x, \alpha)]}{\partial y} \frac{\partial y(x, \alpha)}{\partial \alpha} + \frac{\partial f[x, y(x, \alpha), y'(x, \alpha)]}{\partial y'} \frac{\partial y'(x, \alpha)}{\partial \alpha} \right] dx \quad (4.1.7)$$

ifadesi (4.1.4)'ün

$$\frac{\partial y(x, \alpha)}{\partial \alpha} = \delta y, \quad \frac{\partial y'(x, \alpha)}{\partial \alpha} = \delta y' \quad (4.1.8)$$

türevleri kullanılarak

$$\frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha} = \int_{x_1}^{x_2} \left[ \frac{\partial f[x,y(x,\alpha),y'(x,\alpha)]}{\partial y} \delta y + \frac{\partial f[x,y(x,\alpha),y'(x,\alpha)]}{\partial y'} \delta y' \right] dx \quad (4.1.9)$$

şeklinde yazılır. Bu ifadede; (4.1.3) koşulu göz önünde bulundurulur ve ikinci terime kısmi integrasyon uygulanırsa

$$\frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha} = \int_{x_1}^{x_2} \left( \frac{\partial f[x,y(x,\alpha),y'(x,\alpha)]}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f[x,y(x,\alpha),y'(x,\alpha)]}{\partial y'} \right) \delta y dx \quad (4.1.10)$$

elde edilir. Böylece (4.1.6) ekstremum olma koşulu

$$\int_{x_1}^{x_2} \left( \frac{\partial f(x,y(x),y'(x))}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f(x,y(x),y'(x))}{\partial y'} \right) \delta y dx = 0 \quad (4.1.11)$$

şeklini alır.  $y^*$  keyfi bir fonksiyon olduğundan  $\delta y$  varyasyonu da keyfi bir fonksiyondur. Bu nedenle, (4.1.11) koşulunun her  $\delta y$  için sağlanması

$$\frac{\partial f(x,y(x),y'(x))}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f(x,y(x),y'(x))}{\partial y'} = 0 \quad (4.1.12)$$

olması ile mümkündür. Böylece varyasyon hesabı;  $J[y(x)]$  fonksiyonunu ekstremum yapan  $y$  fonksiyonunun sağladığı Euler denklemi olarak bilinen bir diferansiyel denkleme indirgenir [9].

Varyasyon probleminin sonucu olarak ortaya çıkan pek çok diferansiyel denklem vardır. Bu denklemlerden birisi de;  $\lambda$  reel veya kompleks bir parametre,  $p_i$  ( $i = 0, 1, 2$ ),  $(2 - i)$ . mertebeye kadar sürekli türevleri olan bir reel fonksiyon ve

$$L = p_0(x) \frac{d^2}{dx^2} + p_1(x) \frac{d}{dx} + p_2(x) \quad , \quad x \in [x_1, x_2] \quad (4.1.13)$$

ikinci mertebeden bir lineer diferansiyel operatör olmak üzere

$$Ly(x) = -\lambda \rho(x)y(x) \quad (4.1.14)$$

şeklindeki Sturm-Liouville denklemdir [6, 40, 55, 56]. Sturm-Liouville denklemi

$$(4.1.13) \text{ operatörü kullanılarak, } p_0(x) = p(x), \quad p_1(x) = \frac{dp(x)}{dx}, \quad p_2(x) = -q(x) \text{ olmak}$$

üzere,

$$\frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] - q(x)y(x) + \lambda \rho(x)y(x) = 0 \quad (4.1.15)$$

şeklinde de yazılabilir. Burada,  $-\lambda$  sayısına spektral parametre,  $q$  fonksiyonuna potansiyel fonksiyonu,  $\rho > 0$  fonksiyonuna ağırlık fonksiyonu denir [9, 40, 55, 56].

(4.1.15) denkleminin  $c_1, c_2, C_1, C_2$  reel sabitler ve  $c_1^2 + C_1^2 \neq 0$  ve  $c_2^2 + C_2^2 \neq 0$  olmak üzere

$$\begin{cases} c_1 y(x_1) + C_1 y'(x_1) = 0 \\ c_2 y(x_2) + C_2 y'(x_2) = 0 \end{cases} \quad (4.1.16)$$

sınır koşullarını sağlayan çözümünün bulunması problemine Sturm-Liouville sınır değer problemi denir [40].

Sturm-Liouville denklemi  $L$  operatörü için bir özdeğer problemi tanımlar. Eğer (4.1.15) denkleminin  $\lambda$ 'nın herhangi bir değerinde (4.1.16) homojen sınır koşullarını sağlayan sıfırdan farklı bir çözümü varsa,  $\lambda$ 'nın bu değerine Sturm-Liouville sınır değer probleminin özdeğeri, bu özdeğere karşı gelen  $y$  çözümüne ise özfonksiyon denir [40].

(4.1.15) diferansiyel denklemi;

$$J[y(x)] = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x)[y(x)]^2 dx = \text{sabit} \quad (4.1.17)$$

koşulu ile birlikte

$$I[y(x)] = \int_{x_1}^{x_2} [p(x)[y'(x)]^2 + q(x)[y(x)]^2] dx \quad (4.1.18)$$

varyasyon probleminin sonucu olarak elde edilebilen bir diferansiyel denklemdir [10].

(4.1.17) koşulu  $y$  için normalizasyon koşulu da olduğundan, bu koşul ile verilen (4.1.18) varyasyon problemi

$$K[y(x)] = \frac{I[y(x)]}{J[y(x)]} \quad (4.1.19)$$

fonksiyonelinin minimize edilmesine eşdeğerdir [10].

Bir Sturm-Liouville denklemi;  $\lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_n$  olmak üzere bir en küçük  $\lambda_0$  özdeğerine sahiptir,  $n \rightarrow \infty$  için  $\lambda_n \rightarrow \infty$  olur ve  $n \rightarrow \infty$  için  $\lambda_n$  özdeğeri  $n^2$  ile orantılıdır [10]. Bu nedenle, (4.1.19) fonksiyonelinin mutlak minimumu en küçük özdeğer olan  $\lambda_0$ 'ı verir ve

$$\lambda_0 \leq K[y(x)] \quad (4.1.20)$$

eşitsizliği sağlanır [10, 57].

En küçük özdeğeri tahmin etmek için önce yaklaşık bir  $y$  fonksiyonu seçilir.  $y$  fonksiyonu,  $K[y(x)]$ 'in değeri minimum olacak şekilde belirlenir. Seçilen bu  $y$  fonksiyonuna deneme fonksiyonu da denir [10]. Böylece, (4.1.15) diferansiyel denklemini çözmeden, bu diferansiyel denklemi türeten (4.1.19) varyasyon problemi çözümlenerek  $\lambda_n$  özdeğerleri ve bu özdeğerlere karşılık gelen  $y_n$  çözüm fonksiyonları yaklaşık olarak bulunabilir.

Genel olarak bir parçacığın hareketi; klasik mekanikte parçacığın konum ve hızı, kuantum mekaniğinde dalga fonksiyonu ile belirlenir. Parçacığın durumunun zaman içinde değişimi bir hareket denklemi ile verilir. Klasik hareket denklemi Newton'un

ikinci yasası olan  $\vec{F} = m\vec{a}$ 'dır;  $t = 0$  anında parçacığın konum ve hızı biliniyorsa daha sonraki zamanlardaki konum ve hızı Newton yasasıyla bulunur. Kuantum mekaniğinde hareket denklemi zamana bağlı Schrödinger denklemidir. Parçacığın  $t = 0$  anında dalga fonksiyonu biliniyorsa, zamana bağlı Schrödinger denklemi çözülerek diğer zamanlardaki dalga fonksiyonları bulunabilir [16].

Zamana bağlı Schrödinger denklemi bir kısmi diferansiyel denklemdir. Kuantum mekaniğindeki problemlerin büyük çoğunluğu zamana bağlı Schrödinger denkleminin kullanılmasını gerektirmez. Fizikte zamandan bağımsız Schrödinger denklemi yaygın olarak kullanılmaktadır [16].

$V(x)$  potansiyeli altında  $m$  kütleli bir parçacık için bir boyutlu zamandan bağımsız Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.1.21)$$

şeklinde ifade edilir [15-18, 58]. Burada  $\psi$  dalga fonksiyonu,  $E$  enerji özdeğeridir. Bu denklem

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (4.1.22)$$

olmak üzere

$$H\psi = E\psi \quad (4.1.23)$$

şeklinde de yazılır [59].

Schrödinger denklemi

$$K[\psi(x)] = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)H\psi(x)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} (\psi(x))^2 dx} \quad (4.1.24)$$

varyasyon probleminin sonucu olarak elde edilebilen bir diferansiyel denklemdir [10]. Uygun bir  $\psi$  deneme dalga fonksiyonu seçilerek (4.1.24) varyasyon problemi çözümlerse  $E_n$  özdeğerleri ve bu özdeğerlere karşılık gelen  $\psi_n$  çözüm fonksiyonları yaklaşık olarak hesaplanabilir.

(4.1.24) varyasyon probleminin çözümü için gerekli olan  $\psi$  deneme dalga fonksiyonu belirlenirken çeşitli yöntemler kullanılır. Bu yöntemlerden birisi de Hasse varyasyonel yöntemidir. Varyasyonel yöntem kuantum mekaniğinde kullanılan bir temel yaklaşım yöntemidir. Varyasyonel yöntemin temeli; problemin çözümü için, varyasyonel parametreler denen ve ayarlanabilen parametrelerden oluşan bir “deneme” dalga fonksiyonunu tahmin etmeye dayanır. Deneme dalga fonksiyonunda bulunan

parametreler fonksiyonun enerjisi minimize oluncaya kadar ayarlanabilirler. Bulunan deneme dalga fonksiyonu ve bu fonksiyona karşılık gelen enerji, gerçek dalga fonksiyonu ve enerjiye varyasyonel bir yaklaşımdır. En yaklaşık deneme dalga fonksiyonu, en düşük enerjili olanıdır [60].

Herhangi bir  $\Phi$  deneme dalga fonksiyonu,  $\Psi_i$  çözüm fonksiyonlarının bir lineer bileşimi olarak yazılabilir [60]. Uygulamalarda; varyasyonel yöntem analitik olarak çözülemeyen bir probleme uygulanırken  $\Psi_i$  çözüm fonksiyonları bilinmemektedir.  $\Psi_i$  fonksiyonları bilinmese bile, kesinlikle var oldukları ve bir tam küme oluşturdukları göz önüne alınarak ispatlarda kullanılabilirler. Bu nedenle

$$\Phi = \sum_i c_i \Psi_i \quad (4.1.25)$$

deneme dalga fonksiyonu ve bu fonksiyona karşı gelen yaklaşık enerji

$$E[\Phi] = \frac{\int \Phi^* H \Phi d\tau}{\int \Phi^* \Phi d\tau} \quad (4.1.26)$$

şeklinde yazılır. Gerçek dalga fonksiyonlarına göre (4.1.25) açılımı (4.1.26)'da yerine konursa Rayleigh oranı da denilen

$$E[\Phi] = \frac{\sum_{ij} c_i^* c_j \int \Psi_i^* H \Psi_j d\tau}{\sum_{ij} c_i^* c_j \int \Psi_i^* \Psi_j d\tau} \quad (4.1.27)$$

oranı elde edilir [60].  $\Psi_i$  fonksiyonları,  $H$ 'nin gerçek çözüm fonksiyonları olduğundan

$$E[\Phi] = \frac{\sum_{ij} c_i^* c_j \varepsilon_j \int \Psi_i^* \Psi_j d\tau}{\sum_{ij} c_i^* c_j \int \Psi_i^* \Psi_j d\tau} \quad (4.1.28)$$

enerjisini elde etmek için  $H\Psi_j = \varepsilon_j \Psi_j$  özdeğer denklemi kullanılır. Eğer; bir Hermitian operatörün çözüm fonksiyonlarının bir ortonormal küme oluşturduğu göz önüne alınırsa enerji

$$E[\Phi] = \frac{\sum_i c_i^* c_i \varepsilon_i}{\sum_i c_i^* c_i} \quad (4.1.29)$$

şeklinde yazılır [60]. (4.1.29) enerjisinin her iki yanından  $\varepsilon_0$  çıkarılırsa

$$E[\Phi] - \varepsilon_0 = \frac{\sum_i c_i^* c_i (\varepsilon_i - \varepsilon_0)}{\sum_i c_i^* c_i} \quad (4.1.30)$$

elde edilir. (4.1.30) eşitliğinin sağ yanındaki her terim sıfırdan büyük veya sıfıra eşit olduğundan

$$E[\Phi] \geq \varepsilon_0 \quad (4.1.31)$$

dir. Bu ise herhangi bir yaklaşık dalga fonksiyonunun enerjisinin her zaman  $\varepsilon_0$ 'dan büyük veya  $\varepsilon_0$ 'a eşit olması demektir. Bu sonuç varyasyonel yöntemin stratejisini oluşturur. Kısaca; bir yaklaşık deneme fonksiyonunun enerjisi daima gerçek enerjiden büyüktür ve deneme dalga fonksiyonunun enerjisini düşüren varyasyonlar yaklaşık enerjiyi gerçek enerjiye yaklaştırırlar [60].

Deneme fonksiyonu taban fonksiyonlarının bir lineer kombinasyonu olarak

$$\Phi = \sum_i c_i \phi_i \quad (4.1.32)$$

şeklinde yazılır.  $c_i$  katsayıları varyasyonel parametreler olmak üzere  $\Phi$ 'nin bu yazılışı varyasyonel yöntemi lineer varyasyon yöntemine yönlendirir. Bu şekilde elde edilen yaklaşık dalga fonksiyonuna karşı gelen enerji (4.1.27) enerjisidir. Bu enerji

$$H_{ij} = \int \phi_i^* H \phi_j d\tau \quad (4.1.33)$$

ve

$$S_{ij} = \int \phi_i^* \phi_j d\tau \quad (4.1.34)$$

olmak üzere

$$E[\Phi] = \frac{\sum_{ij} c_i^* c_j H_{ij}}{\sum_{ij} c_i^* c_j S_{ij}} \quad (4.1.35)$$

şeklinde de ifade edilebilir. (4.1.35) enerjisinin  $c_i$  katsayılarına göre türevleri alınırsa, (4.1.33), (4.1.34) ve (4.1.35) değerlerinin oluşturduğu

$$\begin{vmatrix} H_{11} - ES_{11} & H_{12} - ES_{12} & \cdots & H_{1N} - ES_{1N} \\ H_{21} - ES_{21} & H_{22} - ES_{22} & \cdots & H_{2N} - ES_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{N1} - ES_{N1} & H_{N2} - ES_{N2} & \cdots & H_{NN} - ES_{NN} \end{vmatrix} \quad (4.1.36)$$

determinantı kullanılarak tanımlanan karakteristik polinom elde edilir. Karakteristik polinom sıfıra eşit ise sistemin aşikar olmayan bir çözümü olabilir.

$$S_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (4.1.37)$$

olduğundan eğer ortonormal bir taban kullanılırsa karakteristik denklem basitleştirilir ve karakteristik polinom

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} - E & \cdots & H_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \cdots & H_{NN} - E \end{vmatrix} \quad (4.1.38)$$

determinantı kullanılarak tanımlanır. Her iki durumda da  $E$  enerjisine göre  $N$  tane taban fonksiyonu için karakteristik polinom  $N$ -inci dereceden bir polinom verir. Bu polinomlar, her biri farklı bir özdeğere yaklaşan  $N$  tane farklı kök için çözülebilirler.

Varyasyonel yöntemle örnek hidrojen atomunun taban durumunu incelemek için deneme dalga fonksiyonu olarak  $\phi(r) = e^{-\alpha r^2}$  Gaussian fonksiyonunu kullanmaktır. Bu problem,  $\phi(r)$ 'nin  $E(\alpha)$  enerjisini  $\alpha$  varyasyonel parametresinin fonksiyonu şeklinde ifade ederek ve  $E(\alpha)$ 'yı minimize eden  $\alpha_{min}$  değeri bulunarak varyasyonel yöntemle çözülebilir. Bu durumda, hidrojen atomu için yaklaşık dalga fonksiyonu  $\phi(r) = e^{-\alpha_{min} r^2}$  ve enerjisi  $E(\alpha_{min})$  olur [60].

**4.1.1. Örnek:**  $\psi \in L_2, E \in \mathbb{R}, V(x) = x^2$  ve

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (4.1.39)$$

Hamiltonian operatörü olmak üzere

$$H\psi = E\psi \quad (4.1.40)$$

özdeğer problemini göz önüne alalım [10, 12].

Bu problemin enerji ve dalga fonksiyonlarını bulmak için önce asimptotik iterasyon yöntemini daha sonra varyasyonel yöntemi kullanalım.

$f$  daha sonra belirlenecek bir fonksiyon olmak üzere (4.1.40) denkleminin çözümünün

$$\psi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} f(x) \quad (4.1.41)$$

şeklinde olduğunu varsayalım. (4.1.41) fonksiyonu (4.1.40) denkleminde kullanılırsa

$$f''(x) = 2x f'(x) + (1 - E)f(x) \quad (4.1.42)$$

diferansiyel denklemi elde edilir. (4.1.42) denkleminin (3.1.1) denkleminin ile karşılaştırılırsa

$$\lambda_0(x) = 2x \text{ ve } s_0(x) = 1 - E \quad (4.1.43)$$

olduğu görülür.  $\lambda_k(x), s_k(x)$   $k = 1, 2, \dots$  için (3.1.8) iterasyon bağıntıları kullanılarak hesaplanırsa

$$\lambda_1(x)s_0(x) - \lambda_0(x)s_1(x) = (E - 1)(E - 3),$$

$$\lambda_2(x)s_1(x) - \lambda_1(x)s_2(x) = (E - 1)(E - 3)(E - 5),$$

$$\lambda_3(x)s_2(x) - \lambda_2(x)s_3(x) = (E - 1)(E - 3)(E - 5)(E - 7),$$

...

$$\lambda_k(x)s_{k-1}(x) - \lambda_{k-1}(x)s_k(x) = \prod_{i=0}^{k-1} (E - 2i - 1) \quad (4.1.44)$$

elde edilir. (3.1.10) koşulunun sağlanması için

$$\lambda_k(x)s_{k-1}(x) - \lambda_{k-1}(x)s_k(x) = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (4.1.45)$$

olması gerekir. Bu durumda (4.1.44)'den

$$E_k = 2k + 1, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1.46)$$

bulunur [12]. Asimptotik iterasyon yöntemine göre (4.1.42) denkleminin çözümleri

$$f(x) = e^{-\int \frac{s_k(t)}{\lambda_k(t)} dt}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1.47)$$

şeklinde belirlenebilir [12]. Buna göre

$$E_0 = 1 \text{ için } \frac{s_0(t)}{\lambda_0(t)} = \frac{s_1(t)}{\lambda_1(t)} = \dots = 0 \text{ dan } f_0(x) = 1$$

$$E_1 = 3 \text{ için } \frac{s_1(t)}{\lambda_1(t)} = \frac{s_2(t)}{\lambda_2(t)} = \dots = -\frac{1}{x}, \text{ dan } f_1(x) = x$$

$$E_2 = 5 \text{ için } \frac{s_2(t)}{\lambda_2(t)} = \frac{s_3(t)}{\lambda_3(t)} = \dots = -\frac{4x}{2x^2-1}, \text{ dan } f_2(x) = 2x^2 - 1$$

$$E_3 = 7 \text{ için } \frac{s_3(t)}{\lambda_3(t)} = \frac{s_4(t)}{\lambda_4(t)} = \dots = -\frac{6x^2-3}{2x^3-3x}, \text{ dan } f_3(x) = 2x^3 - 3x$$

...

dir. Benzer şekilde devam edilirse,

$$f_{2k}(x) = \frac{1}{2^k} H_{2k}(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1.48)$$

ve

$$f_{2k+1}(x) = \frac{1}{2^{k+1}} H_{2k+1}(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1.49)$$

elde edilir [12]. Burada

$$H_k(x) = \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \frac{(-1)^i k!}{i!(k-2i)!} (2x)^{k-2i}, \quad \lfloor \frac{k}{2} \rfloor = \begin{cases} k/2 & , k \text{ çift sayı} \\ (k-1)/2 & , k \text{ tek sayı} \end{cases} \quad (4.1.50)$$

Hermite polinomlarıdır [52]. (4.1.48) ve (4.1.49) ifadeleri (4.1.41)'de kullanılırsa

(4.1.40) denkleminin

$$\psi_{2k}(x) = \frac{1}{2^k} e^{-\frac{x^2}{2}} H_{2k}(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1.51)$$

ve

$$\psi_{2k+1}(x) = \frac{1}{2^{k+1}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_{2k+1}(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1.52)$$

şeklindeki çözümleri bulunur [12].

Problemin enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını varyasyonel yöntem ile bulmak için, (4.1.40) denkleminin çözümünün  $\alpha$  bir parametre olmak üzere

$$\psi(x, \alpha) = (1 + \alpha x^2) e^{-x^2} \quad (4.1.53)$$



şeklinde olduğunu varsayalım[10]. Burada  $\alpha$  parametresi

$$K[\psi(x, \alpha)] = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, \alpha) H\psi(x, \alpha) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} (\psi(x, \alpha))^2 dx} \quad (4.1.54)$$

fonksiyoneli minimum olacak şekilde belirlenecektir. (4.1.54) ifadesi, (4.1.39) Hamiltonian operatörü ve (4.1.53) fonksiyonu kullanılarak

$$K[\psi(x, \alpha)] = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (-2(\alpha-1) - (2\alpha^2 - 12\alpha + 3)x^2 + \alpha(10\alpha - 6)x^4 - 3\alpha^2 x^6) e^{-2x^2} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} (1 + 2\alpha x^2 + \alpha^2 x^4) e^{-2x^2} dx} \quad (4.1.55)$$

şeklinde yazılabilir.

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-px^2} dx = \frac{\prod_{k=1}^n (2k-1)}{2(2p)^n} \sqrt{\frac{\pi}{p}}, \quad p > 0, n = 0, 1, \dots \quad (4.1.56)$$

olduğu göz önünde bulundurularak (4.1.55) fonksiyoneli hesaplanırsa

$$K[\psi(x, \alpha)] = \frac{80 - 8\alpha + 43\alpha^2}{4(18 + 8\alpha + 3\alpha^2)} \quad (4.1.57)$$

bulunur [10].

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{80 - 8\alpha + 43\alpha^2}{4(18 + 8\alpha + 3\alpha^2)} \right) = 0 \quad (4.1.58)$$

koşulundan elde edilen

$$\alpha = 0.6718 \quad (4.1.59)$$

değeri için  $K[\psi(x, \alpha)]$  fonksiyoneli minimum olur. Bu değer

$$K[\psi(x)] \cong 1.034 \quad (4.1.60)$$

şeklinde belirlenir. Buradan

$$E_0 \leq 1.034 \quad (4.1.61)$$

ve (4.1.53) dalga fonksiyonu

$$\psi_0(x) = (1 + 0.6718 x^2) e^{-x^2} \quad (4.1.62)$$

şeklinde bulunur [10].

Bu örnekte asimptotik iterasyon yöntemi çözüm fonksiyonunu bir bilinmeyen fonksiyona bağlı olarak, varyasyonel yöntem ise çözüm fonksiyonunu bir bilinmeyen parametreye bağlı olarak önermektedir. Asimptotik iterasyon yöntemi özdeğerlere genel bir analitik ifade verirken, varyasyonel yöntem özdeğerler için bir üst sınır değeri vermektedir.

## 4.2. Radyal Schrödinger Denkleminin Özel Potansiyeller İçin Varyasyonel Yöntemle Çözümleri

(3.2.1.22) Radyal Schrödinger denklemi,

$$\hbar = 1, m = 1, l = 0, r_0 \in \mathbb{R}_+, 0 < r < r_0 \quad (4.2.1)$$

olmak üzere

$$H = -\frac{1}{2} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + V(r) \quad (4.2.2)$$

Hamiltonian operatörü kullanılarak

$$HR = ER \quad (4.2.3)$$

şeklinde ifade edilebilir. (4.2.3) özdeğer probleminin,  $V$  potansiyelinin özel durumları için  $E$  özdeğerleri ve  $R$  çözüm fonksiyonları varyasyonel yöntem kullanılarak bulunabilir. Problemden;  $a, b, c \in \mathbb{R}_+ \cup \{0\}$  olmak üzere

$$V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} \quad (4.2.4)$$

potansiyeli için  $E$  özdeğerleri ve

$$\lim_{r \rightarrow r_0} rR(r) = 0 \quad (4.2.5)$$

koşulu sağlanacak şekilde  $R$  çözüm fonksiyonları varyasyonel yöntem kullanılarak araştırılmıştır. Bunun için varyasyonel yöntemle göre (4.2.3) denkleminin, parametreye bağlı uygun bir  $R$  çözüm fonksiyonunun önerilmesi gerekir. Bu fonksiyonu belirleyebilmek için (4.2.4)'de verilen potansiyelin daha basit durumları incelenmiş ve elde edilen sonuçlardan yararlanılmıştır.

### 4.2.1. $V(r) = 0$ İçin Çözüm

(4.2.1) değerleri ve

$$V(r) = 0 \quad (4.2.1.1)$$

potansiyeli için (4.2.2) operatörü

$$H_0 = -\frac{1}{2} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \quad (4.2.1.2)$$

şeklini alır. (4.2.3) problemi,  $H_0$ 'ın özdeğeri ve bu özdeğere karşılık gelen çözüm fonksiyonu sırasıyla  $E_0$  ve  $R_0$  ile gösterilirse,

$$H_0 R_0 = E_0 R_0, \quad \lim_{r \rightarrow r_0} rR_0(r) = 0 \quad (4.2.1.3)$$

şeklini alır. (4.2.1.3)'ün çözümünün

$$R_0(r) = N_0 \frac{\sin\left(\frac{\pi}{r_0} r\right)}{r} \quad (4.2.1.4)$$

şeklinde olduğu varsayılır ve

$$E_0 = \frac{\int_0^{r_0} R_0(r) H_0 R_0(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_0(r))^2 r^2 dr} \quad (4.2.1.5)$$

hesaplanırsa

$$E_0 = \frac{1}{2} \left( \frac{\pi}{r_0} \right)^2 \quad (4.2.1.6)$$

bulunur[61]. Burada  $N_0$ ;  $R_0$  fonksiyonunun (4.2.1.3) denkleminin çözümü olabilmesi için sağlaması gereken,

$$\int_0^{r_0} (R_0(r))^2 r^2 dr = 1 \quad (4.2.1.7)$$

şeklindeki eşitlikten belirlenebilen normalizasyon sabitidir.

#### 4.2.2. $V(r) = -\frac{c}{r}$ İçin Çözüm

$c \in \mathbb{R}_+$  olmak üzere, (4.2.1) değerleri ve

$$V(r) = -\frac{c}{r} \quad (4.2.2.1)$$

potansiyeli için (4.2.2) operatörü

$$H_c = -\frac{1}{2} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{c}{r} \quad (4.2.2.2)$$

şeklini alır. (4.2.3) problemi,  $H_c$ 'nin özdeğeri ve bu özdeğere karşılık gelen çözüm fonksiyonu sırasıyla  $E_c$  ve  $R_c$  ile gösterilirse,

$$H_c R_c = E_c R_c, \quad \lim_{r \rightarrow r_0} r R_c(r) = 0 \quad (4.2.2.3)$$

olur. (4.2.2.3) denkleminin çözümünün;  $\mu$  bir pozitif parametre ve  $N_c$  normalizasyon sabiti olmak üzere, (4.2.1.4)'de verilen  $R_0$  fonksiyonunun

$$R_c(r, \mu) = N_c \frac{\sin\left(\frac{\pi}{r_0} r\right)}{r} e^{-\mu r} \quad (4.2.2.4)$$

şeklinde bir çarpımı olduğu varsayılır.  $\mu$  parametresi,

$$K_c[R_c(r, \mu)] = \frac{\int_0^{r_0} R_c(r, \mu) H_c R_c(r, \mu) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_c(r, \mu))^2 r^2 dr} \quad (4.2.2.5)$$

fonksiyoneli minimum olacak şekilde belirlenir. Belirlenen bu  $\mu$  değeri için

$$E_c = \min_{\mu} \frac{\int_0^{r_0} R_c(r, \mu) H_c R_c(r, \mu) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_c(r, \mu))^2 r^2 dr} \quad (4.2.2.6)$$

ve (4.2.2.4)'de verilen  $R_c$  fonksiyonu bulunur.

#### 4.2.3. $V(r) = br - \frac{c}{r}$ İçin Çözüm

$b, c \in \mathbb{R}_+$  olmak üzere, (4.2.1) değerleri ve

$$V(r) = br - \frac{c}{r} \quad (4.2.3.1)$$

potansiyeli için (4.2.2) operatörü

$$H_{bc} = -\frac{1}{2} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + br - \frac{c}{r} \quad (4.2.3.2)$$

dir.  $H_{bc}$ 'nin özdeğeri ve bu özdeğere karşılık gelen çözüm fonksiyonu sırasıyla  $E_{bc}$  ve  $R_{bc}$  ile gösterilirse (4.2.3) problemi,

$$H_{bc} R_{bc} = E_{bc} R_{bc}, \quad \lim_{r \rightarrow r_0} r R_{bc}(r) = 0 \quad (4.2.3.3)$$

şeklini alır. (4.2.3.3) denkleminin çözümünün;  $\mu$ , (4.2.2.5) fonksiyoneli minimum yapan değer,  $\eta$  bir pozitif parametre ve  $N_{bc}$  normalizasyon sabiti olmak üzere, (4.2.2.4)'de verilen  $R_c$  fonksiyonunun

$$R_{bc}(r, \eta) = N_{bc} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{r_0} r\right)}{r} e^{-(\mu+\eta)r} \quad (4.2.3.4)$$

şeklinde bir çarpımı olduğu varsayılır.  $\eta$  parametresi; (4.2.2.1) potansiyeli için elde edilen  $\mu$  değeri kullanılarak,

$$K_{bc}[R_{bc}(r, \eta)] = \frac{\int_0^{r_0} R_{bc}(r, \eta) H_{bc} R_{bc}(r, \eta) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_{bc}(r, \eta))^2 r^2 dr} \quad (4.2.3.5)$$

fonksiyoneli minimum olacak şekilde belirlenir. Belirlenen bu  $\eta$  değeri için

$$E_{bc} = \min_{\eta} \frac{\int_0^{r_0} R_{bc}(r, \eta) H_{bc} R_{bc}(r, \eta) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_{bc}(r, \eta))^2 r^2 dr} \quad (4.2.3.6)$$

ve (4.2.3.4)'de verilen  $R_{bc}$  fonksiyonu bulunur.

#### 4.2.4. $V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r}$ İçin Çözüm

$a, b, c \in \mathbb{R}_+$  olmak üzere, (4.2.1) değerleri ve

$$V(r) = ar^2 + br - \frac{c}{r} \quad (4.2.4.1)$$

potansiyeli için (4.2.2) operatörü

$$H_{abc} = -\frac{1}{2} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + ar^2 + br - \frac{c}{r} \quad (4.2.4.2)$$

dir.  $H_{abc}$ 'nin özdeğeri ve bu özdeğere karşılık gelen çözüm fonksiyonu sırasıyla  $E_{abc}$  ve  $R_{abc}$  ile gösterilirse, (4.2.3) problemi,

$$H_{abc} R_{abc} = E_{abc} R_{abc}, \quad \lim_{r \rightarrow r_0} r R_{abc}(r) = 0 \quad (4.2.4.3)$$

şeklini alır. (4.2.4.3) denkleminin çözümünün;  $\mu$  ve  $\eta$  sırasıyla (4.2.2.5) ve (4.2.3.5) fonksiyonellerini minimum yapan değerler,  $\xi$  bir pozitif parametre ve  $N_{abc}$  normalizasyon sabiti olmak üzere, (4.2.3.4)'de verilen  $R_{bc}$  fonksiyonunun

$$R_{abc}(r, \xi) = N_{abc} \frac{\sin\left(\frac{\pi r}{r_0}\right)}{r} e^{-\xi r^2 - (\mu + \eta)r} \quad (4.2.4.4)$$

şeklinde bir çarpımı olduğu varsayılır.  $\xi$  parametresi, (4.2.2.1) potansiyeli için elde edilen  $\mu$  değeri ve (4.2.3.1) potansiyeli için elde edilen  $\eta$  değeri kullanılarak,

$$K_{abc}[R_{abc}(r, \xi)] = \frac{\int_0^{r_0} R_{abc}(r, \xi) H_{abc} R_{abc}(r, \xi) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_{abc}(r, \xi))^2 r^2 dr} \quad (4.2.4.5)$$

fonksiyoneli minimum olacak şekilde belirlenir. Belirlenen bu  $\xi$  değeri için

$$E_{abc} = \min_{\xi} \frac{\int_0^{r_0} R_{abc}(r, \xi) H_{abc} R_{abc}(r, \xi) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_{abc}(r, \xi))^2 r^2 dr} \quad (4.2.4.6)$$

özdeğeri ve (4.2.4.4)'de verilen  $R_{abc}$  çözüm fonksiyonu bulunur.

(4.2.3) probleminin; (4.2.1) değerleri, (4.2.5) koşulu ve (4.2.1)'deki  $H$ 'nin, (4.2.4)'deki  $V$  potansiyelinin özel durumlarında geçerli olan özel halleri için,  $E$  özdeğerleri ve bu özdeğerlere karşılık gelen  $R$  çözüm fonksiyonlarının varyasyonel yöntem kullanılarak elde edilen ifadeleri tablo 4.1'de verilmiştir.

**Tablo 4.1.**  $\hbar = 1, m = 1, l = 0, a, b, c, r_0 \in \mathbb{R}_+$ ,  $0 < r < r_0$  için  $V(r)$  ve  $H$ 'nin özel hallerinde varyasyonel yöntem ile elde edilen özdeğerler ve çözüm fonksiyonları.

$V(r)$	Hamiltonian	Özdeğer	Çözüm fonksiyonu
0	$H_0 = -\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)$	$E_0 = \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{r_0}\right)^2$ [61]	$R_0(r) = N_0 \frac{\sin\left(\frac{\pi r}{r_0}\right)}{r}$ [61]
$-\frac{c}{r}$	$H_c = H_0 - \frac{c}{r}$	$E_c = \min_{\mu} \frac{\int_0^{r_0} R_c(r) H_c R_c(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_c(r))^2 r^2 dr}$	$R_c(r) = N_c \frac{\sin\left(\frac{\pi r}{r_0}\right)}{r} e^{-\mu r}$
$br - \frac{c}{r}$	$H_{bc} = H_c + br$	$E_{bc} = \min_{\eta} \frac{\int_0^{r_0} R_{bc}(r) H_{bc} R_{bc}(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_{bc}(r))^2 r^2 dr}$	$R_{bc}(r) = N_{bc} \frac{\sin\left(\frac{\pi r}{r_0}\right)}{r} e^{-(\mu+\eta)r}$
$ar^2 + br - \frac{c}{r}$	$H_{abc} = H_{bc} + ar^2$	$E_{abc} = \min_{\xi} \frac{\int_0^{r_0} R_{abc}(r) H_{abc} R_{abc}(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_{abc}(r))^2 r^2 dr}$	$R_{abc}(r) = N_{abc} \frac{\sin\left(\frac{\pi r}{r_0}\right)}{r} e^{-\xi r^2 - (\mu+\eta)r}$

#### 4.2.5. Radyal Schrödinger Denkleminin Belli Koşullar Altında Asimptotik İterasyon Yöntemi ve Varyasyonel Yöntem Kullanılarak Elde Edilen Çözümlerinin Karşılaştırılması

Asimptotik iterasyon yöntemi ve varyasyonel yöntem kullanılarak elde edilen sonuçları, hem birbirleriyle hem de farklı yöntemler kullanılarak bulunan sonuçlar ile karşılaştırabilmek için

$$\hbar = 1, m = 1, l = 0, a = \frac{1}{32}, b = 1, c = 4, d = 0 \text{ ve } r_0 = \frac{b}{a\sqrt{2}} = 22.6274 \quad (4.2.5.1)$$

olmak üzere

$$V(r) = \frac{1}{32}r^2 + r - \frac{4}{r} \quad (4.2.5.2)$$

potansiyeli göz önüne alınır. (4.2.5.1) değerleri ve (4.2.5.2) potansiyeli için (4.2.2) operatörü

$$H = -\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{1}{32}r^2 + r - \frac{4}{r} \quad (4.2.5.3)$$

şeklinde olur. (4.2.5.3) operatörü için (4.2.3) denkleminin  $E$  özdeğerleri ve  $R$  çözüm fonksiyonu, asimptotik iterasyon yöntemine göre,  $k = 0$  ve (4.2.5.1) değerleri (3.2.4.18)

ve (3.2.4.24)'de kullanılırsa, (3.2.2.27), (3.2.2.28) ve (3.2.2.29) ifadeleri göz önünde bulundurulduğunda, seçilen sabit değerler için

$$E_{00} = -7.625 \quad (4.2.5.4)$$

ve

$$R_{00}(r) = e^{-0.125r^2-4r} \quad (4.2.5.5)$$

şeklinde bulunur. Bu çözüm,  $r_0 = 22.6274$  için (4.2.5) sınır koşulunu sağlar.

(4.2.5.3)  $H$  Hamiltonian operatörü için (4.2.3) denkleminin  $E$  özdeğerleri ve  $R$  çözüm fonksiyonunu varyasyonel yöntemle belirlemek için tablo 4.1'deki  $H$ 'nin özel halleri için elde edilen özdeğer ve çözüm fonksiyonlarından yararlanılır.

$c = 4$  için tablo 4.1'e göre,  $\mu$  bir pozitif parametre olmak üzere

$$H_4 = H_0 - \frac{4}{r}, \quad (4.2.5.6)$$

$$R_4(r, \mu) = N_4 \frac{\sin\left(\frac{\pi r}{r_0}\right)}{r} e^{-\mu r} \quad (4.2.5.7)$$

ve

$$E_4 = \min_{\mu} \frac{\int_0^{r_0} R_4(r) H_4 R_4(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_4(r))^2 r^2 dr} \quad (4.2.5.8)$$

olur. Bu durumda varyasyonel yöntemle göre

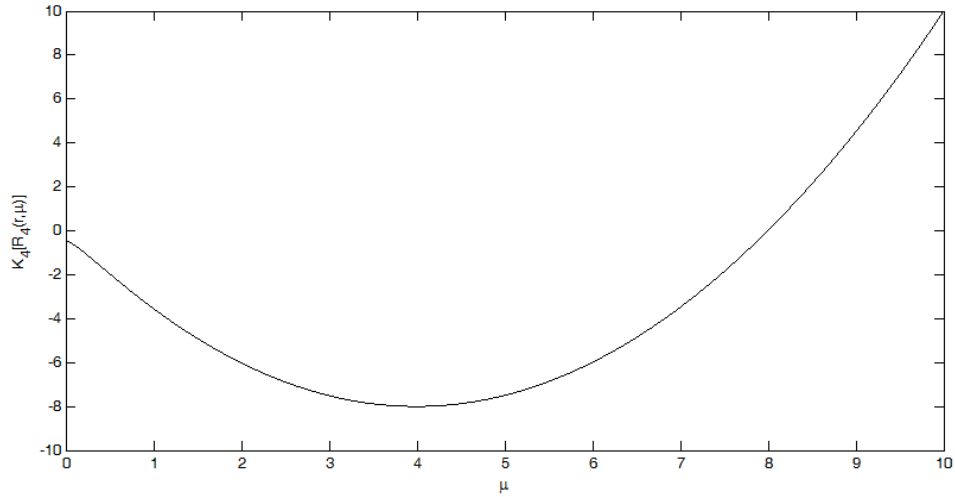
$$K_4[R_4(r, \mu)] = \frac{\int_0^{r_0} R_4(r) H_4 R_4(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_4(r))^2 r^2 dr} \quad (4.2.5.9)$$

fonksiyoneli,  $r_0 = 22.6274$  için bilgisayar programı (MATLAB programı) kullanılarak hesaplandığında şekil 4.1'deki  $K_4[R_4(r, \mu)]$ 'nin  $\mu$ 'ye göre değişim grafiği elde edilir. Bu grafiğe göre,  $K_4[R_4(r, \mu)]$  fonksiyoneli minimum yapan  $\mu$  değeri  $\mu = 3.9980$  ve bu değer için fonksiyonelin minimum olduğu özdeğer  $E_4 = -7.9999$  olur.

(4.2.5.7) fonksiyonu,  $\mu = 3.9980$  değeri için

$$R_4(r) = N_4 \frac{\sin(0.1388r)}{r} e^{-3.9980r} \quad (4.2.5.10)$$

şeklinde bulunur. Bu çözüm,  $r_0 = 22.6274$  için (4.2.5) sınır koşulunu sağlar.



**Şekil 4.1.**  $c = 4$  ve  $r_0 = 22.6274$  için  $K_4[R_4(r, \mu)]$  fonksiyonelinin  $\mu$ 'ye göre değişim grafiği.

$b = 1$ ,  $c = 4$  ve  $\mu = 3.9980$  için tablo 4.1'e göre,  $\eta$  bir pozitif parametre olmak üzere

$$H_{14} = H_4 + r, \quad (4.2.5.11)$$

$$R_{14}(r, \eta) = N_{14} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{r_0}r\right)}{r} e^{-(3.9980+\eta)r} \quad (4.2.5.12)$$

ve

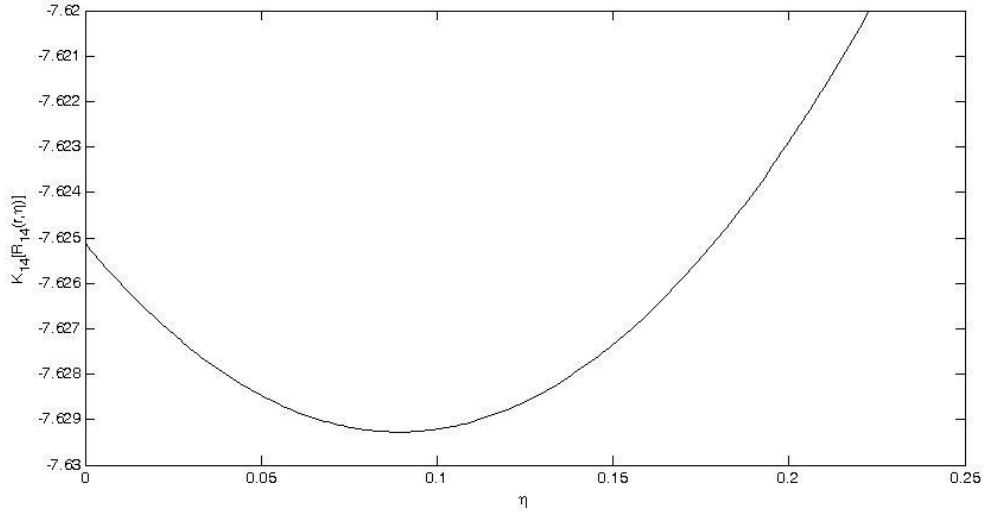
$$E_{14} = \min_{\eta} \frac{\int_0^{r_0} R_{14}(r) H_{14} R_{14}(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_{14}(r))^2 r^2 dr} \quad (4.2.5.13)$$

olur. Bu durumda varyasyonel yöntemle göre

$$K_{14}[R_{14}(r, \eta)] = \frac{\int_0^{r_0} R_{14}(r) H_{14} R_{14}(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} (R_{14}(r))^2 r^2 dr} \quad (4.2.5.14)$$

fonksiyoneli,  $r_0 = 22.6274$  için bilgisayar programı(MATLAB programı) kullanılarak hesaplandığında şekil 4.2'deki  $K_{14}[R_{14}(r, \eta)]$ 'nin  $\eta$ 'ya göre değişim grafiği elde edilir. Bu grafiğe göre,  $K_{14}[R_{14}(r, \eta)]$  fonksiyonelinin minimum yapan  $\eta$  değeri  $\eta = 0.0890$  ve bu değer için fonksiyonelin minimum olduğu özdeğer  $E_{14} = -7.6293$  olur.





**Şekil 4.2.**  $b = 1$ ,  $c = 4$ ,  $\mu = 3.9980$  ve  $r_0 = 22.6274$  için  $K_{14}[R_{14}(r, \eta)]$  fonksiyonelinin  $\eta$ 'ya göre değişim grafiği.

(4.2.5.12) fonksiyonu,  $\eta = 0.0890$  değeri için

$$R_{14}(r) = N_{14} \frac{\sin(0.1388r)}{r} e^{-4.0870r} \quad (4.2.5.15)$$

şekinde bulunur. Bu çözüm,  $r_0 = 22.6274$  için (4.2.5) sınır koşulunu sağlar.

$a = \frac{1}{32}$ ,  $b = 1$ ,  $c = 4$ ,  $\mu = 3.9980$  ve  $\eta = 0.0890$  için tablo4.1'e göre,  $\xi$  bir pozitif parametre olmak üzere

$$H_{\frac{1}{32}14} = H_{14} + \frac{1}{32}r^2, \quad (4.2.5.16)$$

$$R_{\frac{1}{32}14}(r, \xi) = N_{\frac{1}{32}14} \frac{\sin\left(\frac{\pi r}{r_0}\right)}{r} e^{-\xi r^2 - 4.0870r} \quad (4.2.5.17)$$

ve

$$E_{\frac{1}{32}14} = \min_{\xi} \frac{\int_0^{r_0} R_{\frac{1}{32}14}(r) H_{\frac{1}{32}14} R_{\frac{1}{32}14}(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} \left(R_{\frac{1}{32}14}(r)\right)^2 r^2 dr} \quad (4.2.5.18)$$

olur. Bu durumda varyasyonel yöntemle göre

$$K_{\frac{1}{32}14} \left[ R_{\frac{1}{32}14}(r, \xi) \right] = \frac{\int_0^{r_0} R_{\frac{1}{32}14}(r) H_{\frac{1}{32}14} R_{\frac{1}{32}14}(r) r^2 dr}{\int_0^{r_0} \left(R_{\frac{1}{32}14}(r)\right)^2 r^2 dr} \quad (4.2.5.19)$$

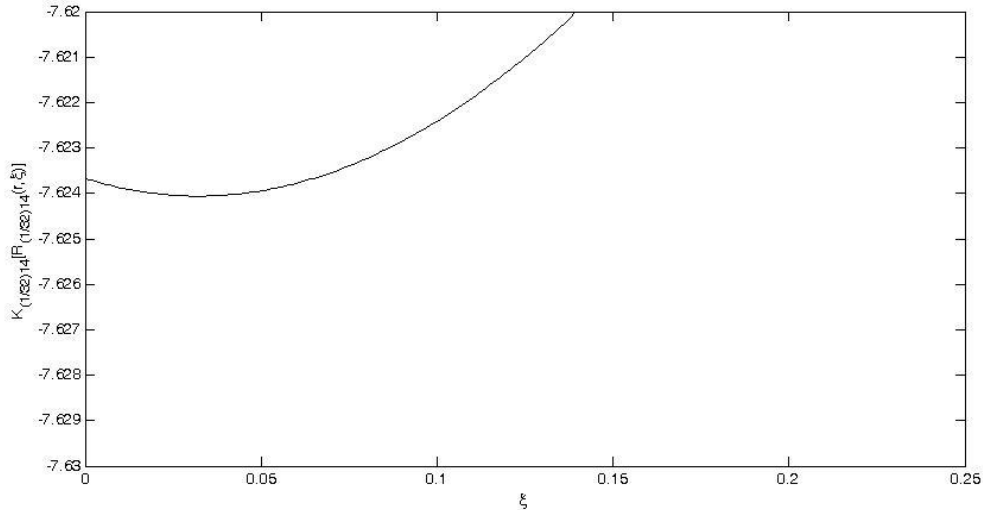
fonksiyoneli,  $r_0 = 22.6274$  için bilgisayar programı(MATLAB programı) kullanılarak hesaplandığında şekil 4.3'deki  $K_{\frac{1}{32}14} \left[ R_{\frac{1}{32}14}(r, \xi) \right]$ 'nin  $\xi$ 'ye göre değişim grafiği elde edilir. Bu grafiğe göre,  $K_{\frac{1}{32}14} \left[ R_{\frac{1}{32}14}(r, \xi) \right]$  fonksiyoneli minimum yapan  $\xi$  değeri  $\xi = 0.0320$  ve bu değer için fonksiyonelin minimum olduğu özdeğer  $E_{\frac{1}{32}14} = -7.6241$  olur.

(4.2.5.17) fonksiyonu,  $\xi = 0.0320$  değeri için

$$R_{\frac{1}{32}14}(r) = N_{\frac{1}{32}14} \frac{\sin(0.1388r)}{r} e^{-0.0320r^2 - 4.0870r} \quad (4.2.5.20)$$

şekinde bulunur. Bu çözüm,  $r_0 = 22.6274$  için (4.2.5) sınır koşulunu sağlar.

Tablo 4.2'de, (4.2.5.3) operatörü için (4.2.3) denkleminin  $E$  özdeğerlerinin; asimptotik iterasyon yöntemi ve varyasyonel yöntem ile elde edilen değerleri; literatürde yer alan tam analitik iterasyon yöntemi ve Hill determinant yöntemi ile elde edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Bu sonuçlara göre asimptotik iterasyon yöntemi ve varyasyonel yöntem ile elde edilen özdeğerlerin, tam analitik iterasyon yöntemi ve Hill determinant yöntemi ile elde edilen özdeğerler ile uyumlu olduğu görülmektedir [53, 62].



**Şekil 4.3.**  $a = \frac{1}{32}$ ,  $b = 1$ ,  $c = 4$ ,  $\mu = 3.9980$ ,  $\eta = 0.0890$  ve  $r_0 = 22.6274$  için  $K_{\frac{1}{32}14} \left[ R_{\frac{1}{32}14}(r, \xi) \right]$  fonksiyonelinin  $\xi$ 'ye göre değişim grafiği.

**Tablo 4.2.**  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ ,  $l = 0$ ,  $a = \frac{1}{32}$ ,  $b = 1$ ,  $c = 4$ ,  $d = 0$  ve  $r_0 = 22.6274$  için asimptotik iterasyon yöntemi, varyasyonel yöntem, tam analitik iterasyon yöntemi ve Hill determinant yöntemi ile elde edilen  $E$  özdeğerleri.

Yöntem	Asimptotik iterasyon yöntemi	Varyasyonel yöntem	Tam analitik iterasyon yöntemi [53]	Hill determinant yöntemi [62]
$E$	-7.625	-7.624	-7.625	-7.625

## BÖLÜM 5

### SONUÇLAR

$$y'' = p(x)y' + q(x)y \quad (5.1)$$

tipinde ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklemlerin bazı özel hallerinin çözümleri asimptotik iterasyon yöntemi ve varyasyonel yöntem kullanılarak incelenmiştir. (5.1) tipindeki denklemlerin bir örneği olarak bir boyutta zamandan bağımsız Schrödinger denklemi göz önüne alınmıştır. (4.2.2)'deki  $H$  operatörü için (4.2.3) Schrödinger denkleminin tanımladığı özdeğer probleminin, özel potansiyeller için  $E$  özdeğerleri ve  $R$  çözüm fonksiyonları hem asimptotik iterasyon yöntemi hem de varyasyonel yöntem kullanılarak araştırılmıştır.

Asimptotik iterasyon yöntemi ve varyasyonel yöntem kullanılarak elde edilen sonuçlar, hem birbirleriyle hem de farklı yöntemler kullanılarak bulunan sonuçlar ile karşılaştırıldığında aşağıdaki sonuçlara ulaşılmıştır:

Asimptotik iterasyon yöntemi ve varyasyonel yöntem, özellikle özdeğer problemlerine uygulandığında, hem özdeğerlerin hem de çözüm fonksiyonlarının belirlenmesini sağladıkları için iyi işleyen yöntemlerdir.

Her iki yöntemin Schrödinger tipindeki bazı özel özdeğer problemlerine uygulanmasında başlangıçta, asimptotik iterasyon yönteminde bir bilinmeyen fonksiyona, varyasyonel yöntemde ise bir veya daha fazla bilinmeyen parametreye bağlı olarak bir çözüm fonksiyonu önerilmesi gerekmektedir. Bu önerilecek fonksiyonun uygun şekilde seçilmesi her iki yöntem için de zorluk oluşturmaktadır.

Asimptotik iterasyon yönteminde, ikinci mertebeden diferansiyel denklemin katsayılarını oluşturan fonksiyonların sağlanması gereken koşul da yöntemin kullanımını kısıtlamaktadır.

Hermite, Laguerre, Legendre, Bessel, hipergeometrik ve confluent hipergeometrik denklem gibi birçok denklemin çözümlerinde, bu yöntemlerin verdiği

sonular ile bunlardan farklı yntemlerin verdiđi sonular karřılařtırıldıđında, sonuların uyumlu olduđu grlmektedir.

Asimptotik iterasyon yntemi, diferansiyel denklemlere belli kořullar altında tam zmler verebilmesi, tam zm veremediđinde ise iyi yaklařık sonular vermesi aısından kullanıřlı bir yntemdir.

## KAYNAKLAR

- [1] Kendall E. Atkinson, Weimin Han, *Elementary Numerical Analysis*, (John Wiley and Sons Inc., Delhi, 2007).
- [2] Kendall E. Atkinson, Weimin Han, David E. Stewart, *Numerical Solution of Ordinary Differential Equations*, (John Wiley and Sons Inc., USA, 2009).
- [3] Arieh Iserles, *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*, (Cambridge University Press, USA, 1996).
- [4] John C. Butcher, *Numerical methods for ordinary differential equations*, (John Wiley and Sons Ltd., England 2008)
- [5] James F. Epperson, *An Introduction to Numerical Methods and Analysis*, (John Wiley and Sons Inc., New Jersey, 2013)
- [6] William E. Boyce, Richard C. DiPrima, *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*, (John Wiley and Sons Inc., USA, 2001).
- [7] Karel Rektory, *Variational Methods in Mathematics, Science and Engineering*, (D. Reidel Publishing Company, London, 1980).
- [8] Carl M. Bender, Steven A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers: Asymptotic Methods and Perturbation Theory*, (Springer-Verlag New York, 1999).
- [9] Günay Gökhan, *Varyasyonlar Hesabı*, (İstanbul Devlet Mühendislik ve Mimarlık Akademisi Yayınları, İstanbul, 1978).
- [10] Selçuk Bayın, *Fen ve Mühendislik Bilimlerinde Matematik Yöntemler*, (Ders Kitapları A.Ş., İstanbul Ankara, 2004).
- [11] Mary L. Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, (John Wiley and Sons Inc., New York, 1983).
- [12] Hakan Ciftci, Richard L. Hall, Nasser Saad, *Asymptotic iteration method for eigenvalue problems*, J. Phys. A: Math. Gen., 36, 47, 11807-11816, (2003).
- [13] Nasser Saad, Richard L. Hall, Hakan Ciftci, *Criterion for polynomial solutions to a class of linear differential equations of second order*, J. Phys. A: Math. Gen., 39, 43, 13445-13454, (2006).
- [14] [http://en.wikipedia.org/wiki/Calculus\\_of\\_variations](http://en.wikipedia.org/wiki/Calculus_of_variations)

- [15] Bekir Karaoğlu, *Kuantum Mekanikine Giriş*, (Bilgi Tek Yayıncılık, İstanbul, 1994).
- [16] John R. Taylor, Chris Zafaritos, *Fizik ve Mühendislikte Modern Fizik*, (Bilgi Tek Yayıncılık, İstanbul, 1996).
- [17] Siegfried Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [18] [http://en.wikipedia.org/wiki/Schrödinger\\_equation](http://en.wikipedia.org/wiki/Schrödinger_equation)
- [19] Cengiz Dane, Hasan Akbaş, Sema Minez, Arzu Güleroğlu, *Electric field effect in a GaAs/AlAs spherical quantum dot*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 40, 3, 627-632, (2008).
- [20] Hasan Akbaş, Cengiz Dane, Arzu Güleroğlu, Sema Minez, *The effect of magnetic field in a GaAs/AlAs spherical quantum dot with a hydrogenic impurity*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 41, 4, 605-608, (2009).
- [21] Cengiz Dane, Hasan Akbaş, Sema Minez, Arzu Güleroğlu, *Simultaneous effects of electric and magnetic fields in a GaAs/AlAs spherical quantum dot with a hydrogenic impurity*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 42, 7, 1901-1904, (2010).
- [22] Cengiz Dane, Hasan Akbaş, Arzu Güleroğlu, Sema Minez, Kısmet Kasapoğlu, *The hydrostatic pressure and electric field effects on the normalized binding energy of hydrogenic impurity in a GaAs/AlAs spherical quantum dot*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 44, 1, 186-189, (2011).
- [23] Francisco M. Fernández, *On an iteration method for eigenvalue problems*, J. Phys. A: Math. Gen., 37, 23, 6173–6180, (2004).
- [24] Hakan Ciftci, Richard L. Hall, Nasser Saad, *Construction of exact solutions to eigenvalue problems by the asymptotic iteration method*, J. Phys. A: Math. Gen., 38, 5, 1147–1155, (2005).
- [25] T. Barakat, *The asymptotic iteration method for the eigenenergies of the anharmonic oscillator potential  $V(r) = Ax^{2\alpha} + Bx^2$* , Physics Letters A, 344, 6, 411–417, (2005).
- [26] T. Barakat, *The asymptotic iteration method for the eigenenergies of the Schrödinger equation with the potential  $V(r) = -Z/r + gr + \lambda r^2$* , J. Phys. A Math. Gen., 39, 4, 823-831, (2006).
- [27] Paolo Amore, Francisco M. Fernández, *Comment on an application of the asymptotic iteration method to a perturbed Coulomb model*, J. Phys. A: Math. Gen., 39, 33, 10491–10497, (2006).

- [28] O. Bayrak, I. Boztosun, *Arbitrary l-state solutions of the rotating Morse potential by the asymptotic iteration method*, J. Phys. A: Math. Gen., 39, 22, 6955-6963, (2006).
- [29] Nasser Saad, Richard L. Hall, Hakan Ciftci, *Sextic anharmonic oscillators and orthogonal polynomials*, J. Phys. A: Math. Gen., 39, 26, 8477-8486, (2006).
- [30] O. Bayrak, G. Kocak, I. Boztosun, *Any l-state solutions of the Hulthén potential by the asymptotic iteration method*, J. Phys. A: Math. Gen., 39, 37 11521-11529, (2006).
- [31] M. Aygun, O. Bayrak, I. Boztosun, *Solution of the radial Schrödinger equation for the potential family  $V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} + Cr^k$  using the asymptotic iteration method*, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys., 40, 3, 537-544, (2007).
- [32] O. Bayrak, I. Boztosun, H. Ciftci, *Exact Analytical Solutions to the Kratzer Potential by the Asymptotic Iteration Method*, International Journal of Quantum Chemistry, 107, 3, 540-544 (2007).
- [33] A. Soylu, I. Boztosun, *Accurate iterative solution of the energy eigenvalues of a two-dimensional hydrogenic donor in a magnetic field of arbitrary strength*, Physica B, 396, 1-2, 150-154, (2007).
- [34] Hakan Ciftci, *Anharmonic oscillator energies by the asymptotic iteration method*, Modern Physics Letters A, 23, 4, 261-267, (2008).
- [35] H. Ciftci, R. L. Hall, N. Saad, *Study of a Confined Hydrogen-Like Atom by the Asymptotic Iteration Method*, International Journal of Quantum Chemistry, 109, 5, 931-937, (2009).
- [36] Babatunde J. Falaye, *Any l-state solutions of the Eckart potential via asymptotic iteration method*, Central European Journal of Physics, 10, 4, 960-965, (2012).
- [37] Babatunde J. Falaye, *Arbitrary  $\ell$ -State Solutions of the Hyperbolic Potential by the Asymptotic Iteration Method*, Few-Body Systems, 53, 3-4, 557-562, (2012).
- [38] B. J. Falaye, K. J. Oyewumi, T. T. Ibrahim, M. A. Punyasena, C. A. Onate, *Bound state solutions of the Manning-Rosen potential*, Canadian Journal of Physics, 91, 1, 98-104, (2013).
- [39] William F. Trench, *Elementary Differential Equations with Boundary Value Problems*, (Books and Monographs. Book 9. 2013).
- [40] Elman Hasanov, Gökhan Uzgören, Alinur Büyükaksoy, *Diferansiyel Denklemler Teorisi*, (Papatya Yayıncılık, İstanbul, 2002).



- [41] Edward L. Ince, *Ordinary Differential Equations* (Dover Publications, USA, 1956).
- [42] Thomas Archibald, Craig Fraser, Ivor Grattan-Guinness, *The History of Differential Equations, 1670-1950*, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, Report No. 51 (2004).
- [43] <http://web.itu.edu.tr/~yükselen/HM504/04-%20Adi%20diferansiyel%20denklemler.pdf>
- [44] Ali Özdeş, *Diferansiyel Denklemlerin Çözümünde Galerkin Yöntemi*, Erc. Fen Bil. Enst. Derg., 16, 1-2, 71-75, (2000).
- [45] [http://en.wikipedia.org/wiki/Galerkin\\_method](http://en.wikipedia.org/wiki/Galerkin_method)
- [46] [http://en.wikipedia.org/wiki/Weak\\_formulation](http://en.wikipedia.org/wiki/Weak_formulation)
- [47] [http://www.encyclopediaofmath.org/index.php/Ritz\\_method](http://www.encyclopediaofmath.org/index.php/Ritz_method)
- [48] [http://en.wikipedia.org/wiki/Perturbation\\_theory](http://en.wikipedia.org/wiki/Perturbation_theory)
- [49] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, (Academic Press, USA, 1980).
- [50] Milton Abramowitz, Irene A. Stegun, *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, (National Bureau of Standards, Washington, 1964).
- [51] William W. Bell, *Special Functions for Scientists and Engineers*, (D. Van Nostrand Company Ltd., London, 1968).
- [52] Wilhelm Magnus, Fritz Oberhettinger, Raj P. Soni, *Formulas and theorems for the special functions of mathematical physics* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1966).
- [53] Sameer M. Ikhdaïr, Majid Hamzavi, *Spectral properties of quantum dots influenced by a confining potential model*, Physica B, 407, 24, 4797–4803, (2012).
- [54] D. Bessis, E. R. Vrscaïy, C. R. Handy, *Hydrogenic atoms in the external potential  $V(r) = gr + \lambda r^2$ : exact solutions and ground-state eigenvalue bounds using moment methods*, J. Phys. A: Math. Gen., 20, 2, 419-428 (1987).
- [55] Andrei D. Polyanin, Valentin F. Zaitsev, *Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations*, (Chapman and Hall/CRC, America, 2003).
- [56] C. Henry Edwards, David E. Penney, *Differential Equations and Boundary Value Problems: Computing and Modeling*, (Pearson International Edition, USA, 2008).

- [57] <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/reh10/lectures/nst-mmii-chapter1.pdf>
- [58] <http://www.fisica.uniud.it/~giannozz/Corsi/MQ/LectureNotes/mq-cap1.pdf>
- [59] Gordon Leslie Squires, *Problems in Quantum Mechanics With Solutions*, (Cambridge University Press, 1995).
- [60] <http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/quantrev/node28.html>
- [61] H. Paredes-Gutiérrez, J. C. Cuero-Yépez, N. Porrás-Montenegro, *Effect of spatially dependent screening on the binding energy of shallow impurities in spherical GaAs-(Ga,Al)As quantum dots*, J. Appl. Phys., 75, 10, 5150-5153, (1994).
- [62] R. N. Chaudhuri, M. Mondal, *Eigenvalues of anharmonic oscillators and the perturbed Coulomb problem in N-dimensional space*, Phys. Rev. A, 52, 3, 1850-1856, (1995).

## ÖZGEÇMİŞ

21 Eylül 1980 yılında Ankara'da doğdu. İlköğrenimini Yozgat Merkez Sakarya İlkokulu'nda, ortaöğrenimini Kars Merkez Atatürk Ortaokulu'nda, lise öğrenimini Edirne Lisesi'nde tamamladı. 1998 yılında Trakya Üniversitesi Fen Fakültesi Matematik Bölümü'nde lisans eğitimine başladı. 2002'de bu bölümden mezun oldu. 2003'de Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans eğitimine başladı. 2005 yılında Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı'nda araştırma görevlisi olarak çalışmaya başladı. 2007'de yüksek lisans eğitimini tamamladı. Aynı yıl Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı'nda doktora eğitimine başladı. 2012 yılından beri Trakya Üniversitesi Fen Fakültesi Matematik Bölümü Uygulamalı Matematik Anabilim Dalı'nda araştırma görevlisi olarak çalışmaktadır.

## TEZ İLE İLGİLİ BİLİMSEL FAALİYETLER

### Uluslararası Bilimsel Toplantılarda Sunulan Bildiriler

1. Arzu Güleröğlü, Cengiz Dane, Hasan Akbaş, *A solution of the Radial Schrödinger Equation for the Potential Family  $V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} + Cr + Dr^2$* , 1st International Eurasian Conference on Mathematical Sciences and Applications IECMSA-2012, Prishtine University, Priştine/KOSOVA, 331, Poster bildiri. (Eylül 2012)
2. Arzu Güleröğlü, Cengiz Dane, Hasan Akbaş, *On a solution of radial Schrödinger equation for special potentials*, 5th International Eurasian Conference on Mathematical Sciences and Applications IECMSA-2016, Belgrade/SERBIA, 78, Sözlü bildiri. (Ağustos 2016)

### Trakya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projesi

Proje No : 2010/127

Proje Niteliği : Doktora

Proje Başlığı :  $y'' = p(x)y' + q(x)y$  Tipinde İkinci Mertebeden Lineer Homojen Diferansiyel Denklemlerin Çözümleri ve Schrödinger Denklemine Uygulanması

Proje Yöneticisi : Doç. Dr. Cengiz DANE

Araştırmacılar : Arzu GÜLERÖĞLÜ

Projenin Başlama ve Bitiş Tarihi : 15.07.2010-20.11.2013