T.C
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANA BİLİM DALI

ASİMTOTİK İTERASYON METODUNUN LİNEER POTANSİYELE SAHİP SCHRÖNDİNGER DENKLEMİNE UYGULANMASI

Metehan UĞURLU

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Danışman

Yrd.Doç.Dr.Engin ATEŞER

2007
KARS

İÇİNDEKİLER **Sayfa no**

ÖZET
YÜKSEK LİSANS TEZİ

ASİMTOTİK İTERASYON METODU'NUN LİNEER POTANSİYELE SAHİP SCHRÖNDİNGER DENKLEMİNE UYGULANMASI

Metehan UĞURLU

KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANA BİLİM DALI

Danışman

Yrd.Doç.Dr.Engin ATEŞER

Bu çalışmada Asimtotik İterasyon Metodu kullanılarak 3 boyutlu lineer potansiyel için Schröndinger denklemi nümerik olarak çözülmüştür. Schröndinger denkleminin enerji öz değerleri, hem Asimtotik İterasyon Metodunun direk uygulaması, hem de Asimtotik İterasyon Metodunun çerçevesinde pertürbasyon yaklaşımı yapılarak elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar tam çözümleri ile karşılaştırılmıştır.

ANAHTAR SÖZCÜKLER: Asimtotik İterasyon Metodu, Schröndinger denklemi, Lineer potansiyel, Pertürbasyon Metodu, Yaklaşık Metodlar.

ABSTRACT

M.Sc

STUDY OF SCHRÖNDİNGER EQUATION WITH THE LINEAR POTANTIAL BY THEASYMTOTIC ITERATION METHOD

Metehan UĞURLU

KAFKAS UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES
DEPARTMENT OF PHYSICS

Supervisor

Yrd. Doç. Dr. Engin ATEŞER

In this work, the asymptotic iteration method is used to study the Schröndinger equation for the linear potential in 3-dimentions. The energy eigenvalues of Schröndinger eqution are ibtained both using the asymptotic iteration method directly and using the perturbation expansion method in the frame work of asymptotic iteratıon method. The obtained eigenvalues are compared with exact ones.

KEY WORDS: Asymptotic iteration method, Schröndinger equation, Linear potential, expansion method, perturbation method

TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın tez konusu olarak seçiminde, hazırlanmasında ve sonuçlandırılmasında bana yol gösteren, bilgi ve yardımlarını esirgemeyen Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim üyesi değerli danışman hocam, sayın Yrd.Doç.Dr.Engin ATEŞER' e , Gazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü öğretim üyesi sayın Doç.Dr.Hakan Çiftçi 'ye ve çalışmalarım sırasında emeği geçen herkese teşekkürlerimi sunarım.

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Sayfa no

1.GİRİŞ:

Işığın davranışı ile maddenin davranışı arasında yakın bir ilişki vardır. Her ikisi de hem dalga hem de parçacık karakteri sergiler. Örneğin ışık dalgalarında belirli bir zaman aralığında verilen noktada fotonun bulunma olasılığını dalga teorisinden elde edilebilir. Benzer şekilde madde dalgaları, kompleks kısmı olan dalga fonksiyonuyla tanımlanır. $|\psi|^2 = \psi^* \psi$, belirli bir anda ve verilen bir noktada, parçacığın bulunma olasılığını verir. Ayrıca dalga fonksiyonu parçacık hakkında bilmek istediğimiz bütün bilgileri elde etmemizi sağlar.(1)

Madde dalgalarının ilk açıklaması, Max Born tarafından 1928 yılında yapıldı. Aynı yılda Ervin Schröndinger uzay ve zaman içinde değişen madde dalgalarını açıklamak için bir dalga fonksiyonu önerdi. Schröndinger dalga fonksiyonu olarak bilinen bu dalga fonksiyonu kuantum mekaniğinde çok önemli bir rol oynar. Bu dalga fonksiyonu hidrojen atomuna ve birçok mikroskobik sistemlere başarıyla uygulanmıştır. Nasıl ses dalgaları bir basınç değişimi ile açıklanıyorsa veya bir yaydaki enine dalgalar y eksenindeki yer değiştirme ile açıklanıyorsa, bir elektronun hareketini açıklayan De Brogle dalgası da ψ adını verdiğimiz dalga fonksiyonu ile açıklanır. Genelde ψ bir sistemdeki bütün parçacıklar için hem konuma hem de zamana bağlıdır. Bu nedenle, $\psi(x, y, z, t)$ olarak yazılır. ψ, yapı olarak açıkladığı sistemin yapısına, ayrıca sisteme etki eden kuvvetlerin yapısına bağlıdır. Eğer parçacığın dalga fonksiyonu biliniyorsa, parçacığın belli özellikleri açıklanabilir. Aslında kuantum mekaniğinin temel problemi, t=0 anında verilen bir dalga fonksiyonun belli bir zaman sonra ne olduğunu bulmaktır. Bildiğimiz gibi De Brogle denklemi, bir parçacığın momentumu ile dalga boyunu ilişkilendirir. $(p = \frac{h}{\lambda})$. Eğer bir serbest parçacığın momentumu biliniyorsa dalga fonksiyonu $\lambda = \frac{h}{P}$ olmak üzere sinüzoideal bir fonksiyondur. Dalga fonksiyonun reel kısmı x-ekseninde hareket eden bir parçacık için aşağıdaki formül ile verilir. (1)

$$\psi(x) = A\sin(\frac{2\pi x}{\lambda}) = A\sin(kx) \qquad [1.1]$$

Burada $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ olmak üzere dalga sayısıdır. A ise bir sabittir. Aslında genel olarak böyle bir serbest parçacık için dalga fonksiyonunu Ae^{ikx} yapısıyla açıklarız ki, bu fonksiyonun sanal kısmı dalganın fazını verir. Buradaki diğer bir ayrıntı, ψ'nin kendisi bir dalga fonksiyonu olmamasına rağmen $|\psi|^2$ nin bir fiziksel anlamı olmasıdır. Eğer ψ bir tek parçacığı tanımlıyorsa, $|\psi|^2$ birim hacim başına tek bir parçacığın verilen bir noktada bulunma olasılığını verir. Bu yorum ilk defa 1928 yılında Born tarafından ortaya atılmıştır. (1)

Eğer dv belli noktaları saran birim hacim elemanı ise, parçacığın bu hacim elemanı içerisinde bulunma olasılığı;

$$\text{Olasılık}=|\psi|^2 dv \qquad [1.2]$$

şeklinde ifade edilir. Parçacığın tek boyutlu uzay için, x noktası civarında sonsuz küçük dx içinde bulunma olasılığı dP(x);

$$\mathrm{d}P(x) = |\psi|^2 dx \qquad [1.3]$$

olarak ifade edilir. Parçacık x ekseni boyunca bir yerlerde bulunmak zorunda olduğu için x in tüm değerleri üzerinden olasılıkları toplamı 1 olmalıdır. (1)Yani;

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1 \qquad [1.4]$$

Bu eşitliği sağlayan herhangi bir dalga fonksiyonu normalize olmuş demektir. $|\psi|^2$ bazen olasılık yoğunluğu olarak da adlandırılır. Normalizasyonun anlamı, parçacığın bütün zamanlarda, bazı noktalarda bulunduğunu belirtir. Eğer olasılık sıfır olsaydı parçacık var olmazdı. Bu nedenle bir parçacığın konumunu tam bir hassaslıkla bilememize rağmen, $|\psi|^2$ onu gözlemleme olasılığını verir. Dahası, parçacığın $a \leq x \leq b$ aralığında bulunma olasılığı;

$$P_{ab} = \int_a^b |\psi|^2 dx \qquad [1.6]$$

şeklinde ifade edilir. P_{ab}, olasılık yoğunluğunun x'e göre grafiğinde eğri altında kalan alana eşittir.(1)

ψ dalga fonksiyonun sağladığı dalga denklemi SCHRÖNDİNGER dalga denklemi olarak da adlandırılır. ψ ölçülebilir bir büyüklük olmamasına rağmen, enerji ve momentum gibi bütün ölçülebilen büyüklükler ψ dalga fonksiyonun bilinmesiyle elde edilir. Örneğin bir parçacığın dalga fonksiyonu biliniyorsa parçacığın ortalama konumu bulunabilir. Bu ortalama konum x' in beklenen değeri olarak da adlandırılır.

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi|^2 dx \qquad [1.7]$$

Bu ifade parçacığın belli bir durum içinde olduğu anlamına gelir.Böylece olasılık yoğunluğu zamandan bağımsızdır.(1)

De Brogle dalgalarını açıklamak için kullanılan dalga fonksiyonu Schröndinger dalga denklemini sağlamalıdır. Dalga mekaniğindeki temel problem, bu denklemin çözümünü bulmaktır. Böylece araştırılan bir sistem için enerji düzeyleri ve izinli dalga fonksiyonu elde edilmiş olur.(1) Tek boyutta hareket eden dalgalar için dalga denkleminin genel formu;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{1}{v^2}\frac{d^2\psi}{dt^2} \qquad [1.8]$$

şeklindedir. Burada v dalga hızıdır ve ψ zamana ve konuma bağlıdır. De Brogle dalgalarını açıklamak için sistemin toplam enerjisinin sabit kaldığını varsayalım. E=hf olduğu için parçacığa eşlik eden De Brogle dalgasının frekansı da sabit kalacaktır. Bu durumda dalga fonksiyonu $\psi(x,t)$, x e bağlı bir terimle, t ye bağlı bir terimin çarpımı olarak yazılabilir.(1) Yani;

$$\psi(x,t) = \psi(x)\cos(wt) \qquad [1.9]$$

Bu aynı bir ipteki duran dalgaların mantığıyla benzer bir durumdadır. İpteki duran dalga için dalga fonksiyonu;

$$y(x.t) = y(x)\cos(wt) \qquad [1.10]$$

şeklinde olur. Çünkü frekans hassas olduğu için frekansa bağlı kısım periyodiktir. Bu dalga fonksiyonu [1.8] denkleminde yerine yazılırsa;

$$\cos(wt)\frac{d^2\psi}{dx^2} = -(\frac{w^2}{v^2})\psi\cos(wt) \qquad [1.11]$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -(\frac{w^2}{v^2})\psi \qquad [1.12]$$

Açısal hız $w = 2\pi f = 2\pi\frac{v}{\lambda}$ ve $p = \frac{h}{\lambda}$ ise

$$\frac{w^2}{v^2} = (\frac{2\pi}{\lambda}) = \frac{4\pi^2}{h^2}\,p^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \qquad [1.13]$$

Dahası toplam enerji kinetik ve potansiyel enerjinin toplamı olarak yazılarak;

$$E = K + U = \frac{p^2}{2m} + U$$

$$p^2 = 2m(E - U) \qquad [1.14]$$

$$\frac{w^2}{v^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = 2m(E - U) \qquad [1.15]$$

elde edilen sonuç $[1.12]$ konulduğu zaman;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U) \qquad [1.16]$$

denklemi, yani zamandan bağımsız Schröndinger denklemi elde edilir. Eğer sistemin potansiyel enerjisi biliniyorsa Schröndinger denklemi çözülebilir. Ayrıca izinli durumların enerjileri ve dalga fonksiyonları elde edilebilir. Potansiyel enerji konuma bağlı olarak değişebileceğinden, Schröndinger denklemini uzayın farklı bölgelerinde çözmek faydalı olacaktır. Bunu yaparken farklı bölgelerin sınırlarında, dalga fonksiyonları uygun şekilde birleştirilmelidir. (1)

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r},t) \qquad [1.17]$$

ifadesiyle bilinen Schröndinger dalga denklemi, kısmi diferansiyel denklemlerin bilinen, değişken ayırma yöntemiyle çözülür. Bunun için

$$\psi(\vec{r},t) = \chi(t).\psi(\vec{r}) \qquad [1.18]$$

Şeklinde r ve t ye bağlı bir çözüm aranır. Buna göre;

$$\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial t} = \frac{\partial\chi}{\partial t}\psi(\vec{r}) \qquad \text{ve} \qquad \nabla^2\psi(\vec{r},t).\chi\nabla^2\psi(\vec{r}) \qquad [1.19]$$

değerleri Schröndinger denkleminde yerine yazılıp, eşitliğin her iki tarafı $\chi(t).\psi(\vec{r})$ ifadesine bölünürse;

$$i\hbar\frac{1}{\chi}\frac{\partial\chi}{\partial t} = \frac{1}{\psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r})\right] \qquad [1.20]$$

denklemi elde edilir. Eşitliğin sol tarafı sadece t değişkenine sağ tarafı da sadece r değişkenine bağlıdır. Bu eşitliğin sağlanabilmesi için her iki tarafının aynı sabite eşit olması gerekmektedir. Seçilen bu sabite E dersek;

$$i\hbar\frac{1}{\chi}\frac{\partial\chi}{\partial t} = E \qquad [1.21]$$

$$\frac{1}{\psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r}).\psi(\vec{r})\right] = E \qquad [1.22]$$

ifadesi elde edilir. Burada ilk denklemin çözümü

$$\chi(t) = A.e^{-iEt/\hbar} \qquad [1.23]$$

şeklindedir. Diğer denklem de aşağıdaki gibi düzenlenir.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad [1.24]$$

Daha sonra bu denklemdeki ∇^2 (laplasyeni) küresel koordinatlarda yazarsak;

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

$$+V(\vec{r})\psi=E\psi \qquad [1.25]$$

şeklini alır ve ψ dalga fonksiyonu (r,θ,ϕ) koordinatlarının bir fonksiyonu olur. Potansiyelin sadece r değişkenine bağlı oluşu nedeniyle, değişken ayırma yöntemi burada uygulanabilir.(2) Bu amaçla;

$$\psi(\vec{r})=R(r)\theta(\theta)\Phi(\phi) \qquad [1.26]$$

şeklinde bir çözüm aranacaktır. Bu ifadeyi yukarıdaki denklemde yerine yazarsak;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]R\theta\phi$$

$$+V(\vec{r})R\theta\phi=ER\theta\phi \qquad [1.27]$$

denklemi elde edilir. Elde edilen bu denklemin her iki tarafı $R\theta\phi$ ile bölünürse;

$$\frac{1}{Y}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(\vec{r})\right]=$$

$$-\left[\frac{1}{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Phi\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}\right] \qquad [1.28]$$

denklemi elde edilir. Dikkat edilirse bu denklemin sağ tarafı yalnız r ye bağlı, sol tarafı (θ,ϕ) bağlıdır. Aynı zamanda iki ifade birbirlerine eşit olduğu için her iki taraf da bir λ sabitine eşitlenir.

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(\vec{r})\right]R-\lambda R=0 \qquad [1.29]$$

$$\left[\frac{1}{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Phi\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}\right]+\lambda=0 \qquad [1.30]$$

Yukarıdaki denklemlerden $[1.29]$ radyal, $[1.30]$ açısal Schröndinger denklemi adını alır.(2) $\lambda = l(l+1)$ öz değeri $[1.29]$ denkleminde yerine konulursa;

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\left[\frac{2mr^2}{\hbar^2}E-V(\vec{r})-\frac{l(l+1)}{2mr^2}\hbar\right]R(r)=0 \qquad [1.31]$$

şeklini alır. Burada $\psi(r) = rR(r)$ bağıntısıyla yeni bir $\psi(r)$ fonksiyonu tanımlarsak radyal Schröndinger denklemi daha basit bir ifadeye dönüşür.

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi=0 \qquad [1.32]$$

Radyal denklemde potansiyele ek olarak $l(l+1)\hbar^2/(2mr^2)$ gibi daima l' e bağlı bir terim olması dikkat çekicidir. Merkez kaç potansiyeli olarak bilinen bu terim $(l \neq 0)$ için ve r sıfıra yaklaşırken önem kazanır. $l = 0$ olduğun da ise merkezkaç terim kalkar ve $\psi(r)$ fonksiyonu için yazdığımız radyal denklem tek boyutta Schröndinger denklemine indirgenmiş olur.(2)

$[1.32]$ denkleminde gerekli düzenlemeler yapılırsa radyal Schröndinger denklemi aşağıdaki halini alır. (2)

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+V+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}) \qquad [1.33]$$

2.ASİMTOTİK İTERASYON METODU

İkinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklemleri matematiksel fiziğin birçok uygulamasında karşımıza çıkmaktadır. Sınır değerleri verilen bu tip diferansiyel denklemleri çözmek için birçok farklı metod kullanılmaktadır. Bu bölümde, Asimtotik İterasyon Metodu (A.İ.M) olarak adlandırılan yeni bir metod aşağıda verilen, ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklemleri çözmek için çalışılmıştır.

$$y'' = \lambda_0(x)y' + S_0(x)y \qquad [2.1]$$

Burada $\lambda_0(x)$ ve $S_0(x)$ yeterli sayıda sürekli türeve sahip x'e bağlı fonksiyonlardır. Şimdi ikinci dereceden lineer denklem formu aşağıdaki gibi yazılsın;

$$y'' = \lambda_0(x)y' + S_0(x)y$$

Bu eşitlikte $\lambda_0(x)$ ve $S_0(x)$, C_∞ (a,b) aralığında tanımlı, yani a,b aralığında sonsuz türevlenebilir birer fonksiyon olsun.

Genel bir çözüm yolu bulmak için $y'' = \lambda_0(x)y' + S_0(x)y$ denkleminin sağ tarafının simetrik yapısı kullanılacaktır. Eğer denklemin x'e göre türevi alınırsa,

$$y'' = \lambda_0(x)y' + S_0(x)y$$

$$y''' = \lambda_0'(x)y' + \lambda_0^2(x)y' + \lambda_0(x)S_0(x)y + S_0'(x)y + S_0(x)y'$$

$$y''' = y'\left(\lambda_o'(x) + S_0(x) + \lambda_0^2(x)\right) + y\left(S_0(x)\lambda_0(x) + S_0'(x)\right)$$

$$y''' = \lambda_1(x)y' + S_1(x)y \qquad [2.2]$$

Yukarıdaki denklemde:

$$\lambda_1(x) = \lambda_0'(x) + S_0(x) + \lambda_0^{'}(x) \qquad S_1(x) = S_0(x)\lambda_0(x) + S_0'(x) \quad [2.3]$$

Eğer $[2.1]$ in 2. türevi alınırsa;

$$y''' = \lambda_0'(x)y' + \lambda_0(x)y'' + S_0'(x)y + S_0(x)y'$$

$$y^{IV} = \lambda_o''(x)y' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0(x)y''' + S_0''(x)y + S_0'(x)y' + S_0'(x)y' + S_0(x)y''$$

$$y^{IV} = \lambda_0''(x)y' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0(x)\left(\lambda_0'(x)y' + \lambda_0(x)y'' + S_0'(x)y'S_0(x)y'\right)$$
$$+ S_0''(x)y + S_0'(x)y' + S_0'(x)y' + S_0(x)y''$$

$$y^{IV} = \lambda_0''(x)y_0' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0(x)\lambda_0'(x)y' + \lambda_0^{2}(x)y'' + \lambda_0(x)S_0'(x)y$$
$$+ \lambda_0(x)S_0(x)y' + S_0''(x)y + S_0'(x)y' + S_0'(x)y' + S_0(x)y''$$

$$y^{IV} = \lambda_0''(x)y' + 2\lambda_0'(x)y'' + \lambda_0(x)\lambda_0'(x)y' + \lambda_0^{2}(x)y'' + \lambda_0(x)S_0'(x)y + \lambda_0(x)S_0(x)y' + S_0''(x)y$$
$$+ 2S_0'(x)y' + S_0(x)y''$$

$$y^{IV} = y''\left(2\lambda_0'(x) + \lambda_0^{2}(x) + S_0(x)\right) + y'\left(\lambda_0''(x) + \lambda_0(x)\lambda_0'(x) + \lambda_0(x)S_0(x) + 2S_0'(x)\right)$$
$$+ y\left(\lambda_0(x)S_0'(x) + S_0''(x)\right)$$

denkemi elde edilir. $[2.1]$ denklemi yukarıdaki bu denklemde yerine konulursa;

$$y^{IV} = 2\lambda_0(x)\lambda_0'(x)y' + \lambda_0^{3}(x)y' + S_0(x)\lambda_0(x)y' + 2S_0(x)\lambda_0'(x) + \lambda_0^{2}(x)S_0(x)$$
$$+ S_0^{2}(x)y + y'\left(\lambda_0''(x) + \lambda_0(x)\lambda_0'(x) + \lambda_0(x)S_0(x) + 2S_0'(x)\right) + y\left(\lambda_0(x)S_0'(x) + S_0''(x)\right)$$

$$y^{IV} = y'\left(\lambda_0''(x) + 3\lambda_0(x)\lambda_0'(x) + \lambda_0^{3}(x) + 2S_0(x)\lambda_0(x) + 2S_0'(x)\right)$$
$$+ y\left(2S_0(x)\lambda_0'(x) + S_0'(x)\lambda_0(x) + S_0''(x) + \lambda_0^{2}(x)S_0 + S_0^{2}(x)\right)$$

denklemi elde edilir. Bu ifade düzenlenirse:

$$y^{IV} = \lambda_2(x)y' + S_2(x)y \qquad [2.4]$$

şeklini alır. Yukarıdaki denklem de;

$$\lambda_2(x) = \lambda_1'(x) + S_1(x) + \lambda_0(x)\lambda_1(x)$$
$$S_2(x) = S_1'(x) + S_0(x)\lambda_1(x) \qquad [2.5]$$

şeklinde alınmıştır.(3)

Böylece (n+1). ve (n+2). türevler için (n=1,2,3,…..)

$$y^{(n+1)} = \lambda_{n-1}(x)\,y' + S_{n-1}(x)\,y \qquad [2.6]$$

$$y^{(n+2)} = \lambda_n(x)y' + S_n(x)y \qquad [2.7]$$

sonuçları elde edilir. Burada;

$$\lambda_n = \lambda_{n-1}'(x) + S_{n-1} + \lambda_0\lambda_{n-1} \qquad S_n = S_{n-1}'(x) + S_0\lambda_{n-1} \qquad [2.8]$$

(n+2). türevin (n+1). türeve oranı alınırsa;

$$\frac{\partial}{\partial x}\ln(y^{(n+1)}) = \frac{y^{(n+2)}}{y^{(n+1)}} = \frac{\lambda_n\left(y' + \frac{S_n}{\lambda_n}y\right)}{\lambda_{n-1}\left(y' \frac{S_{n-1}}{\lambda_{n-1}}y\right)} \qquad [2.9]$$

ifadesi elde edilir. Şimdi burada metodun asimtotik tarafı tanıtılacaktır.Yeteri kadar büyük herhangi bir n değer için ;

$$\frac{S_n}{\lambda_n} = \frac{S_{n-1}}{\lambda_{n-1}} = \alpha \qquad [2.10]$$

ifadesi alınırsa [2.9] ifadesi aşağıdaki denkleme indirgenir;

$$\frac{\partial}{\partial x}\ln(y^{(n+1)}) = \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} \qquad [2.11]$$

Bu ifade aşağıda bilinen birinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklem çözümünü sağlar.

$$y^{(n+1)} = C_1 \exp\left(\int^{x} \frac{\lambda_n(t)}{\lambda_{n-1}(t)}\,dt\right) =$$

$$C_1\lambda_{n-1} \exp\left(\int^{x} (\alpha + \lambda_0)dx\right) \exp\left(\int^{x} (\alpha + \lambda_0)dt\right) \qquad [2.12]$$

Burada C_1 integrali sabittir ve sağ taraftaki eşitlik [2.1.7] nin devamından ve α 'nın tanımından gelmektedir. [2.12] denklemi [2.6] denkleminde yerine konunca aşağıdaki birinci dereceden denklemi elde edilir.

$$y' + \alpha y = C_1 \exp\left(\int^{x} (\alpha + \lambda_0)dt\right) \qquad [2.13]$$

Bu denklemin elde edilmesi ile ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklemleri için çözüm aşağıdaki gibi elde edilir.(3)

$$y(x) = \exp(-\int \alpha dt)\left[C_2 + C_1\int^{x} \exp\left(\int^{t} (\lambda_0(\tau) + 2\alpha(\tau))\right)d\tau\right] \qquad [2.14]$$

Böylece, $[2.1]$ formu ile verilen ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklemler için genel bir çözüm, n $\rangle$ 0 için aşağıdaki şekilde verilir.(3)

$$\frac{S_n}{\lambda_n} = \frac{S_{n-1}}{\lambda_{n-1}} \equiv \alpha \qquad [2.15]$$

burada k=1,2,3…. olmak üzere

$$\lambda_k = \lambda'_{k-1} + S_{k-1} + \lambda_0 \lambda_{k-1} \qquad [2.16]$$

$$S_{k-1} = s'_{k-1} + S_0 \lambda_{k-1} \qquad [2.17]$$

denklemleri elde edililir.

2.1Asimtotik İterasyon Metodunun 2. Dereceden Homojen Lineer Adi Diferansiyel Sistemlerine Uygulanması

$\lambda_0 = 4$ ve $S_0 = -3$ olmak üzere $y'' = \lambda_0(x)y' + S_0(x)y$ denklemi $y'' = 4y' - 3y$ şeklini alır. $[2.16]$ ve $[2.17]$ eşitlikleri için λ_n ve S_n ifadeleri;

$$\lambda_n = \frac{1}{2}(3^{n+2} - 1) \qquad [2.18]$$

$$S_n = \frac{-3}{2}(3^{n+1} - 1) \qquad [2.19]$$

şeklini alırlar. $[2.10]$ daki asimtotik iterasyon koşulu uygulanırsa α sabiti;

$$\lim_{n \to \infty} \frac{S_n}{\lambda_n} = -1 \qquad [2.20]$$

olarak bulunur. Böylece ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklem çözümü için aşağıda verilen genel çözüm elde edilir.

$$y(x) = C_2 e^{x} + C_1 e^{3x} \qquad [2.21]$$

Genel olarak $\lambda_0(x)$ ve $S_0(x)$ fonksiyonları sabitse ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklemleri için, genel çözüm Asimtotik İterasyon Metodu kullanılarak aşağıdaki şekilde genelleştirilebilir.

$$\lambda_n = S_{n-1} + \lambda_0 \lambda_{n-1} \quad \text{ve} \quad S_n = S_0 \lambda_{n-1} \qquad [2.22]$$

Sonuç olarak $\dfrac{S_n}{\lambda_n}$ oranı aşağıdaki gibi olur.

$$\frac{S_n}{\lambda_n} = \frac{S_0 \lambda_{n-1}}{S_{n-1} + \lambda_0 \lambda_{n-1}} = \frac{S_0}{S_{n-1}/\lambda_{n-1} + \lambda_0} \qquad [2.23]$$

$[2.15]$ denkleminden yola çıkılırsa,

$$\frac{S_n}{\lambda_n} = \frac{S_0}{S_n/\lambda_n + \lambda_0} \qquad [2.24]$$

denklemini , dolayısıyla da;

$$\left(\frac{S_n}{\lambda_n}\right)^2 + \lambda_0 \frac{S_n}{\lambda_n} - S_0 = 0 \qquad [2.25]$$

denklemi elde edilir. Bu eşitlik $\dfrac{S_n}{\lambda_n}$ oranını λ_0 ve S_0 ‘ a göre bulmak için kullanılan eşitliktir. Haliyle sabit katsayılı $[2.1]$ diferansiyel eşitliklerinin çözümleri direk olarak $[2.14]$ den elde edilir. (3)

3.PERTÜRBASYON TEORİSİ

Kuantum mekaniğinde PERTÜRBASYON TEORİSİ basit, bilinen bir fiziksel sistemden başlayarak bilinmeyen complike bir sistemin fiziksel özelliklerini açıklayabilmek için kullandığımız bir nümerik çözüm yöntemidir. Burada ki mantık basit, bilinen bir sistemden başlayarak, sistemi açıklayan Hamiltonyene eklemeler yaparak değiştirerek yani, pertürbe ederek daha complike bilinmeyen, sistemlerin fiziksel özelliklerini açıklayabilmektir. Eğer Hamiltonyendeki bu pertürbasyon yani, değişim çok büyük değil ise, bu yeni pertürbe edilmiş sistemin enerji seviyeleri, enerji öz değerleri gibi fiziksel özellikleri bilinen basit sistem kullanılarak elde edilebilir.(10)

Pertürbasyon teorisi, gerçek kuantum sistemlerinin açıklanması için oldukça önemli bir teoridir. Çünkü orta zorlukta bir sistemin Hamiltonyenini içeren Schröndinger denkleminin bile tam çözümlerini elde etmek mümkün değildir. Tam çözümünü bildiğimiz hidrojen atomu, kuantum harmonik salınıcısı, bir kutudaki parçacık gibi sistemler, birçok bilinmeyen sistemi açıklamada kullanılmıştır. Pertürbasyon teorisi kullanılarak bu çözümleri bilinen basit Hamiltonyenleri kullanılarak daha karmaşık sistemler için çözümler elde edilebilir. Örneğin; hidrojen atomunun kuantum modeline bir pertürbatik elektriksel potansiyel ekleyerek bir elektrik alanın varlığından kaynaklanan hidrojen atomunun enerji çizgilerinde görülen küçük kaymalar bulunabilir. Bu olay kuantum mekaniğinde ‘STARK’ etkisi olarak bilinmektedir. Pertürbasyon teorisiyle elde edilen sonuçlar tam değildir yani yaklaşık çözümlerdir. Eğer α yani açılım parametresi çok küçük ise pertürbatik sonuçlarda sağlıklı bir şekilde elde edilebilir.(10)

Kuantum elektrodinamiğinde elektron-foton etkileşmeleri pertürbatik olarak incelenmekte ve bu sayede elektronun manyetik momenti deneysel sonuçlarda elde edilen sonuçla 11. ondalık haneye kadar uyuşmaktadır.

Bazı durumlarda pertürbasyon teorisini kullanılmamaktadır. Böyle bir durumda açıklamak istenilen sistem bilinen, basit sistemde değişiklik yapılarak elde edilemez.

Örneğin; kuantum renk dinamiğinde gluonların quarklarla etkileşmeleri pertürbatik olarak, düşük enerjilerde incelenemez. Çünkü kuvvetli etkileşme sabiti çok büyüktür.

3.1.Zamandan Bağımsız Pertürbasyon Teorisi

Pertürbasyon teorisi iki kısımda incelenmektedir.(10)

-Zamandan bağımsız
-Zamandan bağımlı

Zamandan bağımsız Pertürbasyon Teorisi 1926 yılında ERWİN SCHRÖNDİNGER tarafından bulunmuştur. Zamana bağlı olmayan, pertürbe olmamış bir hamiltonyen H_0 alınırsa bu hamiltonyen için zamandan bağımsız Schröndinger denklemi kullanılarak elde edilmiş olan enerji düzeyleri ve öz durumları

$$H_0\,\psi_n^{(0)} = E_n^{\,0}\,\psi_n^{(0)} \qquad (n=1,2,3\ldots\ldots) \qquad [3.1.1]$$

şeklindedir. Burada E_n^{0} ve ψ_n^{0} pertürbe olmamış hamiltonyenin öz değer ve öz durumlarını belirtir.(10)

Sistemin toplam hamiltonyeni (H) ,öz fonksiyon ve öz durumları bilinen temel durum yani pertürbe olmamış hamiltonyen (H_0) ve pertürbe olmuş (H’) cinsinden ifade edilirse;

$$H = H_0 + H' \qquad [3.1.2]$$

şeklinde olur. Bu ifade Schröndinger denkleminde yerine konulursa;

$$H\psi_n = (H_0 + H')\,\psi_n = E_n\,\psi_n \qquad [3.1.3]$$

şeklini alır. Ayrıca ψ_n ve E_n ifadeleri aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\psi_n = \psi_n^0 + \Delta \psi_n \qquad [3.1.4]$$

$$E_n = E_n^0 + \Delta E_n \qquad [3.1.5]$$

H' yani peretürbe olmuş hamilyonyen çok küçük olduğu için $\Delta \psi_n$,ψ_n^0 ' a küçük bir katkı, benzer şekilde ΔE_n ' de E_n^0' a küçük bir katkı getirecektir.(10)

H' hamiltonyeni yine çok küçük olduğu düşünülürse ifadeye λ çarpanı eklenerek λH' şeklinde yazılabilir. Burada λ sonsuz küçüklükte bir parametredir. O zaman ifade aşağıdaki şekli alır.(10)

$$(H_0 + \lambda H')\,\psi_n = E_n\,\psi_n \qquad [3.1.6]$$

Artık yukarıdaki ifadelerden hamiltonyenin öz durum ve öz vektörleri bilinmektedir. İfadelerde ψ_n , ψ_n^0 ' a yaklaştıkça λ paremetresi de 0 ' a şaklaşır. ψ_n ve E_n ' i kuvvet serisi yöntemiyle açılırsa;

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \ldots.. \qquad [3.1.7]$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots. \qquad [3.1.8]$$

ifadeleri [3.1.3] denkleminde yerine konularak ve λ paremetresinin kuvvetlerinin ortak parantezine alınırsa;

$$\left[H_0\psi_n^{(0)} - E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}\right] + \lambda\left[H_0\psi_n^{(1)} + H'\psi_n^{(0)} - E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} - E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}\right] +$$
$$\lambda^2\left[H_0\psi_n^{(2)} + H'\psi_n^{(1)} - E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} - E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} - E_n^{(2)}\psi_n^{(0)}\right] + \ldots. = 0 \qquad [3.1.9]$$

şeklini alır ve denlem aşağıdaki şekilde yazlıabilir.

$$F^{(0)} + \lambda F^{(1)} + \lambda^2 F^{(2)} + \lambda^3 F^{(3)} + ... = 0 \qquad [3.1.10]$$

Eğer bu eşitlik keyfi, bütün küçük λ değerleri için doğru ise;

$$F^{(0)} = F^{(1)} = F^{(2)} = F^{(3)} = ... = 0 \qquad [3.1.11]$$

şeklini alır. Benzer şekilde $[3.1.9]$denklemi de 0' a eşit olduğundan $\lambda, \lambda^2, \lambda^3....$ kuvvetlerinin çarpanlarının her biri ayrı ayrı 0' a eşit olacaktır. Buna göre;

$$H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \qquad [3.1.12]$$

$$\left(H_0 - E_n^{(0)}\right)\psi_n^{(1)} = \left(E_n^{(1)} - H^{'}\right)\psi_n^{(0)} \qquad [3.1.13]$$

$$\left(H_0 - E_n^{(0)}\right)\psi_n^{(2)} = \left(E_n^{(1)} - H^{'}\right)\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} \qquad [3.1.14]$$

$$\left(H_0 - E_n^{(0)}\right)\psi_n^{(3)} = \left(E_n^{(1)} - H^{'}\right)\psi_n^{(2)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(3)}\psi_n^{(0)} \qquad [3.1.15]$$

.

En düşük yaklaşımda yani$[3.1.12]$ eşitliğinde ψ_n^0 ve E_n^0 bildiğimiz gibi dejenere olmamış H_0 Hamiltonyeninin bilinen öz durum ve öz enerjileridir. 2. ve daha yüksek dereceden denklemler için şunu söyleyebiliriz. $[3.1.13]$ eşitliğinin sol tarafı aşağıdaki gibi yazılabilir.(10)

$$\psi_n^{(1)} = \psi_n^{(1)} + \alpha \psi_n^{(0)} \qquad [3.1.16]$$

Burada α keyfi bir sabittir. Böylece b) eşitliği $\psi_n^{(1)}$ ve $E_n^{(1)}$ için çözülüyorsa $\psi_n^{(1)} + \alpha \psi_n^{(0)}$; $E_n^{(1)}$ de bir çözümdür. Burada tek zorluk bu keyfi sabitin ortadan kaldırılması ile ilgilidir. Bu zorluk aşağıdaki gibi aşılabilir.

$$\left\langle \psi_n^{(s)} \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle = 0 \qquad (s>0) \qquad [3.1.17]$$

Yani ψ_n ‘e gelen tüm katılar $\psi_n^{(0)}$ ‘ a diktir. Hilbert uzayında bu olay $\Delta\psi_n$, ψ_n^{0} ’ın normali olarak açıklanabilir. Bu koşul $\psi_n^{(s)}$ ‘lerin yapılandırılmasında yardımcı olacaktır. $[3.1.13]$ eşitliğinde H_0 operatörü $\psi_n^{(1)}$ ‘ e opera ettiği için çözüm H_0 ’ın öz durumlarının bir süperpozisyonu içinde $\psi_n^{(1)}$ ’ in açılımı üzerinden elde edilebilir. (10)Yani;

$$\left|\psi_n^{1}\right\rangle = \sum_i C_{ni} \left|\psi_i^{(0)}\right\rangle \qquad [3.1.18]$$

bu denklem $[3.1.13]$ denkleminde yerine konursa;

$$(H_0 - E_n^{(0)}) \sum_i C_{ni} \left|\psi_i^{(0)}\right\rangle = (E_n^{(1)}) - H') \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle \qquad [3.1.19]$$

Denklemi elde edilir. Bu denklem de soldan $\left\langle \psi_j^{(0)} \right|$ ile çarpılırsa;

$$(E_j^{(0)} - E_n^{(0)}) C_{nj} + H'_{jn} = E_n^{(1)} \delta_{jn} \qquad [3.1.20]$$

denklemi elde edilir. Burada Hamiltonyenin matris elemanı olan H'_{jn} nin $(\psi_n^{(0)})$ cinsinden gösterimi ise aşağıdaki gibi olur.

$$H'_{jn} \equiv \left\langle \psi_j^{(0)} \middle| H' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \qquad [3.1.21]$$

$j \neq n$ için (C_{nj}) katsayıları elde edilir ve $[3.1.18]$ de yerlerine konursa ψ_n ’e 1. dereceden katkıyı verir.

$$C_{ni} = \frac{H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \qquad [3.1.22]$$

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{i \neq n} \frac{H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \psi_i^{(0)} + C_{nn} \psi_n^{(0)} \qquad [3.1.23]$$

Burada bir Hilbert uzayında buluna bütün $\psi_n^{(s)}$ katkılarının pertürbe olmamış ($\psi_n^{(o)}$) dalga fonksiyonları ile spanlandığı düşünülür. C_{nn} katsayısı $[3.1.17]$ den aşağıdaki gibi elde edilir.(10)

$$C_{nn} = 0 \qquad [3.1.24]$$

$j \neq n$ için E_n 1. dereceden katkı elde edilir.

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} \qquad [3.1.25]$$

Bunlar H' nün diagonal elemanlarıdır. $[3.1.22]$ ve $[3.1.25]$, $[3.1.17]$ ile $[3.1.18]$denklemlerinde yerlerine konursa ve $\lambda = 1$ alınırsa;

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{i \neq n} \frac{H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \psi_i^{(0)} \qquad [3.1.26]$$

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} \qquad [3.1.27]$$

Bu denklemlerde şunu belirtmek gerekir ki açılım katsayıları 1 den küçük olmalıdır.(10)

$$\left| H'_{nn} \right| \langle\langle\langle \left| E_n^{(0)} - E_i^{(0)} \right| \qquad [3.1.28]$$

4.ASİMTOTİK İTERASYON METODUNUN UYGULAMALARI

4.1.Asimtotik İterasyon Metodunun Pertürbasyon Teorisine Uygulanması

Sınır değer problemleri matematiksel fizikte önemli bir yere sahiptir. Kuantum mekaniği öz değer problemleri, fizikte en önemli matematiksel problemleri gösterir. Belli özel potansiyeller için Schröndinger denkleminin tam çözümleri olmasına rağmen, birçok durumda, Schröndinger denklemini çözmek için yaklaşık yöntemler kullanılır.(4)

Pertürbasyon teorisinde, Hamiltonyen $H = H_0 + \lambda V_P$ şeklinde verilir. Burada H_0, çözülebilen hamiltonyen, λV_P ise buna eklenen pertürbe terimdir. Toplam hamiltonyen, dalga fonksiyonları ve öz fonksiyonların λ parametresi cinsinden pertürbasyon serisi olarak yazılır. Bu pertürbasyon serilerinin katsayıları bildiğimiz gibi tam olarak çözülebilen H_0 cinsinden elde edilmektedir. Pertüsbasyon katsayılarını bulmak için A.İ.M. de kullanılabilir. Ayrıca A.İ.M. sayesinde pertürbasyon katsayılarının (H_0), öz fonksiyonları kullanılmadan elde edilebilir. Bunun için sınır değer problemlerini ifade eden diferansiyel denklemleri, A.İ.M. in uygulanmasını sağlayacak forma dönüştürülmesi gerekmektedir.(4)

Asimtotik İterasyon Metodundan bilinen;

$$\frac{S_n}{\lambda_n} = \frac{S_{n-1}}{\lambda_{n-1}} \equiv \alpha \qquad [4.1.1]$$

ifadesinin kuantumlanma koşulu aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\delta(x) = S_n(x)\lambda_{n+1}(x) - S_{n+1}\lambda_n(x) = 0 \qquad [4.1.2]$$

$\delta(x)$ fonksiyonu sınır değer problemleri çözümünde önemli rol oynar. S_n ve λ_n katsayıları bu şekilde bilinmeyen E öz değerlerine bağlanabilir. E nin uygun seçimi için bu eşitlik her x noktası için sağlanırsa, bu problem tam olarak çözülebilir. (Analitik bir problem olur.) Asimtotik İterasyon Metodunu ikinci dereceden diferansiyel denklemlerde minimum matematiksel işlemler kullanılarak çözmemizi sağlar. Dahası mathematica, meple gibi sembolik matematiksel hesaplamalar yapılabilen paket programlar kullanılarak Asimtotik İterasyon Metodu yüksek iterasyon sayıları için dahi kolay hesaplama imkanı sunmaktadır.(4)

Öz değerler için pertürbasyon açılımları bu bölümde Schröndinger özdeğer problemleri için tanımlanmış bir pertürbasyon açılımının katsayılarının AİM ile de hesaplanabileceğini göstermektedir. Varsayalım ki Schröndinger denkleminin potansiyeli aşağıdaki gibi iki kısımda verilsin;

$$V(x) = V_1(x) + \lambda V_2(x) \qquad [4.1.3]$$

Burada $V_1(x)$ tam olarak çözülebilen , $V_2(x)$ de ek potansiyeldir. λ ise pertürbasyon açılımının parametresidir. Varsayalım ki öz değer bir pertürbasyon serisi şeklinde aşağıdaki gibi yazılsın,

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \lambda^3 E^{(3)} + ... \qquad [4.1.4]$$

Amacımız burada $E^{(j)}$ (j=0,1,2,…) katsayılarını hesaplamaktır. Yukarıda verilen potansiyeller için Schröndinger denklemini aşağıdaki gibidir.(4)

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) + \lambda V_2(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \qquad [4.1.5]$$

$\varphi(x) = Y_0(x) f(x)$ gibi uygun değişken dönüşümleri yapılarak ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklemler elde edilebilir. Böyle bir diferansiyel denklem için

$f(x)$ çarpanı ile birlikte böyle bir değişken değiştirme sonucu ile elde edilen ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denkleminin genel formu aşağıdaki gibidir.(4)

$$f'' = \lambda_0(x,\lambda) f'(x) + S_0(x,\lambda) f(x) \qquad [4.1.6]$$

Eğer E öz değeri yukarıdaki gibi bir pertürbasyon serisi formunda verilirse $\lambda_0(x,\lambda)$ ve $S_0(x,\lambda)$ fonksiyonları tabiî ki direk olarak $E^{(j)}$ ye bağlı olacaktır. Bu şartlar altında Asimtotik İterasyon Metodu, lineer homojen diferansiyel denklemine uygulanarak $\lambda_n(x,\lambda)$ ve $S_n(x,\lambda)$ fonksiyonları hesaplanırsa, δ fonksiyonunu aşağıdaki gibi kurulabilir.

$$\delta(x,\lambda) = S_n(x,\lambda)\lambda_{n+1}(x,\lambda) - S_{n+1}(x,\lambda)\lambda_n(x,\lambda) = 0 \qquad [4.1.7]$$

$\delta(x,\lambda)$ fonksiyonu $\lambda = 0$ civarında aşağıdaki seriye açılırsa;

$$\delta(x,\lambda) = \delta(x,0) + \frac{\lambda}{1!}\left(\frac{\partial\delta(x,\lambda)}{\partial\lambda}\right)_{\lambda=0} + \frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{\partial^2\delta(x,\lambda)}{\partial\lambda^2}\right)_{\lambda=0}$$

$$+ \frac{\lambda^3}{3!}\left(\frac{\partial^3\delta(x,\lambda)}{\partial\lambda^3}\right)_{\lambda=0} + ... = \sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k\delta^k(x) \qquad [4.1.8]$$

$$\delta^{(j)}(x) = \left(\frac{1}{j!}\frac{\partial^j\delta(x,\lambda)}{\partial\lambda^j}\right)_{\lambda=0} = 0 \qquad j = 0,1,2...... \qquad [4.1.9]$$

denklemleri elde edilir. Bu denklemlerden açıkça görülmektedir ki $\delta^{(0)}(x) = 0$, $E^{(0)}$ değerine, $\delta^{(1)}(x) = 0$,da $E^{(1)}$ değerine karşılık gelir. $E^{(1)}$ öz değerin birinci düzeltme terimine karşılık gelir. Yukarıdaki değerler kullanılarak $\lambda, \lambda^2, ...$ ve $E^{(1)}, E^{(2)}, ...$ ifadeleri elde edebilir. Yani öz değerlerin katsayıları bulunabilir. Bu da Asimtotik İterasyon Metodunun yeni bir kullanımını göstermiş olur.(4)

4.2.Dalga Fonksiyonlarının Pertürbasyon Katsayıları

$$\delta(x,\lambda) = S_n(x,\lambda)\lambda_{n+1}(x,\lambda) - S_{n+1}(x,\lambda)\lambda_n(x,\lambda) = 0$$

Şartı sağlandığı zaman ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklemlerin çözümleri denklem $[4.1.2]$ kullanarak elde edilebilir.

Eğer $[4.1.2]$ denkleminin ilk kısmı yeniden yazılırsa;

$$f(x) = C_2 \exp\left(-\int^{x} \alpha(t,\lambda)dt\right) \qquad [4.2.1]$$

denklemi elde edilir. $\alpha(x,\lambda) = \dfrac{S_k(x,\lambda)}{\lambda_k(x,\lambda)}$ alınarak, yine $\lambda = 0$ civarında seri açılırsa;

$$\begin{aligned}\alpha(x,\lambda) &= \alpha^{(0)}(x) + \lambda\alpha^{(1)}(x) + \lambda^2\alpha^{(2)}(x) \\ &+ \lambda^3\alpha^{(3)}(x) + ... = \sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k\alpha^{(k)}(x)\end{aligned} \qquad [4.2.2]$$

$$\alpha^{(j)} = \frac{1}{j!}\left(\frac{\partial^j}{\partial\lambda^j}\left(\frac{S_k(x,\lambda)}{\lambda_k(x,\lambda)}\right)\right)_{\lambda=0} = \frac{1}{j!}\left(\frac{\partial^j\alpha(x,\lambda)}{\partial\lambda^j}\right)_{\lambda=0} \qquad [4.2.3]$$

$$f(x) = C_2 f^{(0)}(x) f^{(1)}(x) f^{(2)}(x) f^{(3)}(x)..... = C_2\prod_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(x) \qquad [4.2.4]$$

$$f^{(k)}(x)\exp\left(-\lambda^k\int^{x}(\alpha^{(k)}(t))dt\right) \qquad k = 0,1,2,...... \qquad [4.2.5]$$

Denklemleri elde edilir. (4)

5. ASİMTOTİK İTERASYON METODUNUN LİNEER POTANSİYELE SAHİP SCHRÖNDİNGER DENKLEMİNE UYGULANMASI

Schördinger denkleminin bulunmasından sonra atomik sistemlerin açıklanması için bu denklem çözülmeye çalışılmıştı. Birçok durumda, Schördinger denklemi tam olarak çözülmez. Sadece columb , harmonik osilatör ve poesst- teller potansiyelleri gibi birçok potansiyel için Schördinger denklemi analitik olarak çözülmektedir. Bu denklem, WKB(6), Hill determinant(7.8), pertürbasyon ve varyasyon metodları gibi nümerik hesaplama metodlarıyla yaklaşık çözülebilmektedir. Bütün bu metodlar, birçok potansiyel için, Schördinger denkleminin çözümü kullanılarak fiziksel sistemleri çalışmaktadır. İyi bilinen önemli potansiyellerden biri lineer potansiyeldir. Bildiğimiz gibi bu potansiyel $l = 0$ için analitik olarak çözülebilmektedir. $l \neq 0$ için ise, bazı yaklaşımlar veya direk nümerik integrasyon uygulanmaktadır. Bu çalışmada 3 boyutlu Schördinger denklemi lineer potansiyel için çalışılacaktır. Asimtotik iterasyon metodu yaklaşık çözüm olarak kullanılacaktır.(5)

3 boyutta aşağıdaki lineer potansiyeli ele alınır;

$$V(r) = r \qquad [5.1]$$

Potansiyel küresel simetri olduğu için Schördinger denkleminin radyal kısmı aşağıdaki gibi elde edilmişti.

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + V + \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad [5.2]$$

Bu diferansiyel denkleme Asimtotik İterasyon Metodu uygulamadan önce, asimtotik dalga fonksiyonu elde edilerek denklem $[5.2]$i, Asimtotik İterasyon Metodunda kullanılacak forma dönüştürülmelidir. Bunun için $r = u^2$ ve $\varphi_u = u^{\frac{1}{2}}\phi(u)$ değişken değişimleri yapılsın. Sonuçta asimtotik analiz için daha uygun olan aşağıdaki Schördinger denklemi elde edilir.

$$\left[-\frac{d^2}{du^2}+4u^4-4Eu^2+\frac{l^{'}(l^{'}+1)}{u^2}\right]\Phi(u)=0 \qquad [5.3]$$

Basitlik için $u=u_0 y$ dönüşü kullanılarak,

$$\left[-\frac{d^2}{dy^2}+y^4-\omega y^2+\frac{l^{'}(l^{'}+1)}{y^2}\right]\Phi(y)=0 \qquad [5.4]$$

elde edilir. Burada $u_0=\frac{1}{2^{1/3}}$, $\omega=2^{2/3}E$, $l^{'}=2l+\frac{1}{2}$ şeklinde kullanılmıştır. Ayrıca l açısal momentum kuantum sayısıdır. Denklem $[4.1.2]$den açıkça görülmektedir ki y sıfıra gittikçe Φ_y , $y^{l^{'}}+1$ gibi davranır. Ve y sonsuza gittikçe de Φ_y , $\exp(-\frac{1}{3}y^3)$ gibi davranır. Sonuçta bu problem için

$$\Phi_y=y^{l^{'}+1}\exp(-\frac{1}{3}y^3)f(y) \qquad [5.5]$$

denklemi elde edilir. Bu dalga fonksiyonu denklem$[5.4]$ de yerine konursa, Asimtotik İterasyon Metodu için uygun olan 2. dereceden lineer, homojen, diferensiyel denklemi aşağıdaki şekilde elde edilebilir.

$$f^{''}=2(y^2-\frac{l^{'}+1}{y})f^{'}+(-\eta y-\omega y^2)f \qquad [5.6]$$

Burada $\eta=-2l^{'}-4$ şeklinde kullanılmıştır. Bu son denklem artık Asimtotik İterasyon Metodunda uygulamak için uydundur. Burada;

$$\lambda_0 = 2(y^2 - \frac{l^{'}+1}{y}) \qquad S_0 = -\eta y - \omega y^2 \qquad [5.7]$$

şeklindedir. Asimtotik İterasyon Metodudan bilindiği gibi $\lambda_n(y)$ ve $S_n(y)$ aşağıdaki şekilde elde edilir.

$$\lambda_n = \lambda^{'}_{n-1} + S_{n-1} + \lambda_0\lambda_{n-1} \qquad [5.8]$$

$$S_n = S^{'}_{n-1} + S_0\lambda_{n-1} \qquad [5.9]$$

Bu fonksiyonlar hesaplandıktan sonra, öz değerleri elde etmek için kullandığımız delta fonksiyonu aşağıdaki şekilde yazabiliriz.

$$\delta_n(y,\omega) = \lambda_{n+1}S_n - \lambda_n S_{n+1} \qquad [5.10]$$

Asimtotik İterasyon Metoduna göre $\delta(y,\omega) = 0$ denkleminin çözümü bize öz değer setlerini verecektir. Şunu belirtmek önemlidir ki eğer bu problem bütün y noktaları için çözülebilseydi, tam çözülebilir bir problem olurdu. Fakat incelediğimiz durumda, problem tam çözülebilir olmadığı için uygun bir y_0 noktası seçilmelidir ve ω değerini bulmak için $\delta_n(y_0,\omega) = 0$ denklemi çözülmelidir. Bu çalışmada y_0, $\lambda_0(y) = 0$ denkleminin kökü ile aynı olan Asimtotik dalga fonksiyonunun maksimum noktasından aşağıdaki gibi elde edilir.(5)

$$y_0 = (l^{'}+1)^{1/3} \qquad [5.11]$$

Denklem $[5.6]$ yı kullanarak enerji öz değerleri nümerik olarak hesaplayabiliriz. Bunun yerine burada Asimtotik İterasyon Metodu, pertürbasyın katsayılarını bulmak için kullanılacaktır.(9) Daha sonra ise lineer potansiyel ile verilmiş Schröndinger denkleminin özdeğerleri için bazı Analitik formüller verilecektir. Bu amaçla denklem $[5.6]$ da η, ω terimli seriler olarak aşağıdaki gibi yazılabilir. (5)

$$\eta = \eta_0 - \sum_{k=1}^{\infty} \omega^k \eta_k \qquad [5.12]$$

$\delta_n(y,\omega)$ fonksiyonu $\omega = 0$ civarında seriye açılırsa , aşağıdaki denklem elde edilir.

$$\delta(y,\omega) = \delta(y,0) + \omega\left(\frac{d\delta(r,\omega)}{d\omega}\right)_{\omega=0} + \frac{1}{2!}\omega^2\left(\frac{d^2\delta(r,\omega)}{d\omega^2}\right)_{\omega=0} + ... = 0 \qquad [5.13]$$

Eğer bu denklem her ω değeri için sağlanırsa, ω'nın her katsayısı sıfıra eşit olmak zorundadır. Sonuçta, sıfırıncı mertebeden η için düzeltmeyi hesaplamak istiyorsak $\delta(y,0) = 0$ denklemini çözer ki bunun sonucu bize $\eta_0 = 6n$ olarak verilir. Burada $(n = 0,1,2,.....)$ şeklindedir. Benzer şekilde 1. mertebeden düzeltme için

$$\left(\frac{d\delta(r,\omega)}{d\omega}\right)_{\omega=0} = 0 \qquad [5.14]$$

alınır ki buda bize η_1 'i verir. Benzer şekilde daha yüksek mertebeden katkılar bulunabilir. Diğer taraftan $\eta = -2l' - 4$ ve $l' = 2l + \frac{1}{2}$ eşitlikleri ile denklem $[5.12]$ u kullanarak;

$$\sum_{k=1}^{\infty} \omega^k \eta_k = 6n + 4l + 5 \qquad [5.15]$$

elde edilir. Burada $\omega = 2^{2/3} E$ alınırsa, aşağıdaki denklem elde edilir.

$$\sum_{k=1}^{\infty} 2^{\frac{2k}{3}} E^k \eta_k = 6n + 4l + 5 \qquad [5.16]$$

Sonuçta E' nin sonsuz bir serisi elde edilmiş olur. pertürbasyon katsayıları için yaptığımız hesaplamalar gösterir ki bu seri çizelge1'de gösterildiği gibi yakınsak bir seridir. Denklem [5.16] den E (enerji) ifadesi için analitik denklemler aşağıdaki şekilde elde edilebilir. Eğer serinin ilk terimi alınırsa;

$$E_{nl} = 2^{-2/3}\left(\frac{6n+4l+5}{\eta_1}\right) \qquad [5.17]$$

İlk iki terimi alınırsa;

$$E_{nl} \cong 2^{-2/3}\left(-\frac{\eta_1}{2\eta_2} + \sqrt{\left(\frac{\eta_1}{2\eta_2}\right) + \frac{6n+4l+5}{4\eta_3}}\right) \qquad [5.18]$$

İlk üç terim alınırsa;

$$E_{nl}{}^{3} + \frac{\eta_2}{2^{2/3}\eta_3}E_{nl}{}^{2} + \frac{\eta_1}{2^{4/3}\eta_3} + E_{nl} = \frac{6n+4l+5}{4\eta_3} \qquad [5.19]$$

elde edilir.(5) Burada $\eta_1, \eta_2, \eta_{3......}$ pertürbasyon katsayıları, yukarıda verilen denklemlere göre bulunabilir. Çizelge 1.1' de ilk 3 katsayıya göre η_1, η_2, η_3 değerleri mümkün l değerleri için denklem [5.17] , [5.19] kullanılarak bulunmuştur.(4) Denklem [5.18] den gösterilir ki bu şekilde bir hesaplama, hem basit hem de birçok amaç için çok daha uygundur. Tabiî ki daha yüksek mertebeden katkılar bulundukça, daha hassas sonuçlar elde edilecektir. $n = 0$, $l = 0$ taban enerji durumu için çizelge 1.2 'de ilk dört terim kullanılarak $E_{00} = 2,33809$ bulunmuştur ki, bu sonucun tam değeri 2,33810 dur.(5)

Çizelge 1.1. Farklı η ve l değerleri için ilk dört pertürbasyon katsayıları

η	l	$\eta_1(\eta,l)$	$\eta_2(\eta,l)$	$\eta_3(\eta,l)$	$\eta_4(\eta,l)$
0	0	1,2680368	0,0187994	0,0006158	0,0000173
	1	1,5980098	0,0161128	0,0003478	0,0000057
	2	1,8185091	0,0144628	0,0002409	0,0000028
	3	2,0008632	0,0133223	0,0001839	0,0000017
1	0	1,6061799	0,0123305	0,0001744	0,0000026
	1	1,8256689	0,0124174	0,0001827	0,0000029
	2	2,0050228	0,0119866	0,0001559	0,0000019
	3	2,1577937	0,0115048	0,0001325	0,0000014
2	0	1,8456979	0,0100538	0,0000732	-0,0000008
	1	2,0154338	0,0105644	0,0001096	0,0000012
	2	2,1643366	0,0104259	0,0001079	0,0000012
	3	2,2964156	0,0102396	0,0000933	0,0000009
3	0	2,0364016	0,0088362	0,0000382	-0,0000014
	1	2,1763584	0,0092481	0,0000719	0,0000005
	2	2,3044037	0,0093508	0,0000784	0,0000007
	3	2,4211516	0,0093079	0,0000767	0,0000007

Çizelge 1.2 Farklı n ve l değerleri için enerji öz değerlerinin, Asimtotik İterasyon Metodunun direk ve pertürbasyon katsayıları şeklinde uygulanması sonucu elde edilerek tam çözümleri ile karşılaştırılması.

η	l	$E^{(2)}$	$E^{(3)}$	$E^{(4)}$	$E_{direk}(A.\dot{I}.M)$	$E_{tam}(5)$
0	0	2,35362	2,33951	2,33808	2,33810	2,33810
	1	3,38164	3,36285	3,36112	3,36125	3,36130
	2	4,27290	4,24924	4,24799	4,24818	4,24818
	3	5,07965	5,05305	5,05069	5,05093	5,05093
1	0	4,10860	4,09206	4,08993	4,08795	4,08795
	1	4,91503	4,88867	4,88524	4,88445	4,88445
	2	5,66508	5,63536	5,63005	5,62971	5,62971
	3	6,37123	6,33569	6,33198	6,33215	6,33212
2	0	5,53719	5,52245	5,52336	5,52056	5,52056
	1	6,24274	6,21186	6,20976	6,20757	6,20762
	2	6,91133	6,87585	6,87002	6,86877	6,86888
	3	7,55171	7,51191	7,50525	7,50427	7,50465
3	0	6,79679	6,78327	6,78861	6,78667	6,78671
	1	7,44175	7,41084	7,40847	7,40581	7,40567
	2	8,05648	8,01668	8,01197	8,01027	8,00971
	3	8,65005	8,60437	8,59841	8,59888	8,59712

6.SONUÇ

Bu çalışmada, 3 boyutlu lineer potansiyel için Schröndinger denklemini Asimtotik İterasyon Metodunu kullanarak olarak çözülmüştür. Çalışma sonunda hem pertürbasyon açılımıyla elde edilen hem de Asimtotik İterasyon Metodununun direk uygulamasıyla elde edilen sonuçlar verilmiştir. Pertürbasyon açılımının uygulamasının sebebi öz değerler için yarı analitik formüllerin elde edilmek istenmesidir ve sonuçlar göstermektedir ki her iki tip hesaplamalar birbirleriyle uyum içindedir**.**

7.KAYNAKLAR

1. Çolakoğlu K. Serway Fizik, Palme Yayıncılık, 1182-1188 (1996)

2. Karaoğlu B. Kuantum Mekaniğine Giriş, Güven Yayıncılık, 105-117(1998)

3. Çiftçi H. , Richard L. H. And Saad N. Asymtotik İteration Method, J.Phys.A:Gen36-11807-11816 (2003)

4. Çiftçi H. , Richard L. H. And Saad N. Perturbatıon theory in aframework of iteration methods, Hakan Çifçi, Physics Letters A340-388-396(2005) (ve içindeki mevcut kaynaklar.)

5. Ateşer E. Çiftçi H. And Uğurlu M. Study of Schröndinger equation with the linear potantial by the asymptotic iteration method in 3D The Chinese Journal of Physics,vol.,45-346 (3 JUNE 2007)

6.Varshni Y.P, Relative convergences of the WKB and SWKB approximations, J. Phys.A 25,5761 (1992)

7.Znojil M, Asymetric Anharmonik oscillatorsin the Hill-Determinant Picture, J.Math.Phys. 33,213 (1992)

8.Chaudhuri R.N and Mondal M., Anaytic Expression for exact-ground-state energy based on an operator ,Phys Rev A 52, 1850(1995)

9. Çiftçi H. , Richard L. H. And Saad N. İterative Solition to the Dirac equation, Phys.Rev.A340,388-396(2005)

10. Richard L.L., ‘’Introductory Quantum Mechanics 2 nd ed. ‘’, Addıson Wesley

8.TEZDEN ÇIKAN YAYINLAR

1.Ateşer E. Çiftçi H. And Uğurlu M. Study of Schröndinger equation with the linear potantial by the asymptotic iteration method in 3D The Chinese Journal of Physics,vol.,45-346 (3 JUNE 2007)

9.ÖZGEÇMİŞ

1982 yılında Kars’ da doğdu. İlköğretim ve lise öğretimini Kars’ da tamamladı.1999 yılında okumaya hak kazandığı Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünden 2003 yılında Fizikçi olarak mezun oldu. 2004 yılında Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalında Yüksek Lisans öğrenimine başladı. Hala yüksek lisans öğrenimine devam etmektedir.