

T.C.
RECEP TAYYİP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GAUSS POTANSİYELİ İÇİN SCHRÖDİNGER
DENKLEMİNİN ASİMPOTİK İTERASYON METODU
KULLANARAK ÇÖZÜM

Aylin AYIKOĞLU

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Hasan KARABULUT

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

RİZE 2013

T.C.
RECEP TAYYİP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

GAUSS POTANSİYELİ İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ASİMPOTİK
İTERASYON METODU KULLANILARAK ÇÖZÜMÜ

AYLİN AYIKOĞLU

FİZİK

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 15/05/2013

Tezin Sözlü Savunma Tarihi : 27/05/2013

Tez Danışmanı: Prof.Dr. Hasan KARABULUT

Jüri Üyesi : Yrd.Doç.Dr. Recep KESER

Jüri Üyesi : Yrd.Doç.Dr. İshak CUMHUR

Enstitü Müdürü: Doç.Dr. Fatih YILMAZ

RİZE, 2013



T.C.
RECEP TAYYİP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

GAUSS POTANSİYELİ İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ASİMPTOTİK
İTERASYON METODU KULLANILARAK ÇÖZÜMÜ

AYLİN AYIKOĞLU

FİZİK

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 15/05/2013

Tezin Sözlü Savunma Tarihi : 27/05/2013

Tez Danışmanı: Prof.Dr. Hasan KARABULUT



Jüri Üyesi : Yrd.Doç.Dr. Recep KESER



Jüri Üyesi : Yrd.Doç.Dr. İshak CUMHUR



Enstitü Müdürü: Doç.Dr. Fatih YILMAZ



RİZE, 2013

ÖNSÖZ

Tüm yüksek lisans öğrenimim ve tez çalışmam sırasında değerli bilgilerini benimle paylaşan, benden desteğini ve anlayışını esirgemeyen saygıdeğer danışman hocam, Sayın Prof. Dr. Hasan KARABULUT' a teşekkür ve saygılarımı sunarım.

Yüksek lisans tez çalışmam boyunca değerli yardımlarını eksik etmeyerek, çalışmalarımın her safhasında bilgileriyle beni yönlendiren, her konuda ilgi ve desteğini eksik etmeyen çok değerli ikinci danışman hocam, Sayın Yrd. Doç. Dr. Yasemin KÜÇÜK' e teşekkür ederim.

Bu çalışmanın gerçekleşmesinde beni yönlendiren, bilimsel katkılarını ve her türlü desteğini ve yardımını benden esirgemeyen Saygıdeğer Hocam Sayın Prof. Dr. İsmail BOZTOSUN 'a en içten saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Tez çalışmamda destek ve yardımlarını esirgemeyen çalışma arkadaşlarım Muammer Yasin HACISALİHOĞLU ve Burcu KARAYUNUS'a teşekkür ederim.

Bugüne kadar özveriyle beni yetiştiren, tüm öğrenim hayatım boyunca maddi ve manevi destekleriyle her daim yanımda olan aileme sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Aylin AYIKOĞLU

RİZE, 2013

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
ÖNSÖZ.....	I
İÇİNDEKİLER.....	II
ÖZET.....	III
SUMMARY	IV
TABLolar DİZİNİ.....	V
ŞEKİLLER DİZİNİ	VI
SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ	VII
1. GENEL BİLGİLER.....	1
1.1. Giriş.....	1
1.2. Schrödinger Dalga Denklemi	4
1.3. Pertürbasyon Metodu.....	7
1.3.1. Pertürbasyon Açılımı.....	7
1.4. Varyasyon Metodu	9
1.5. Hypervirial Pade Metodu.....	12
2. YAPILAN ÇALIŞMALAR.....	14
2.1. Asimptotik İterasyon Metodu.....	14
3. BULGULAR	19
3.1. Gauss Potansiyeli için Schrödinger Dalga Denklemine AİM'le Seri Çözümü....	19
3.2. Gauss Potansiyeli için Schrödinger Dalga Denklemine AİM'le Nümerik Çözüm	22
4. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	26
5. ÖNERİLER	28
6. KAYNAKLAR.....	29
EK A	
EK B	
ÖZGEÇMİŞ	

ÖZET

Bu çalışmada Gauss potansiyeli için relativistik olmayan radyal Schrödinger denklemi farklı n ve l değerleri için asimptotik iterasyon metodu kullanarak seri ve nümerik olarak hesaplandı. Farklı n ve l değerleri için hesaplanan enerji özdeğerleri Nümerik metod, Hypervirial Pade metodu, Pertürbasyon ve Varyasyon metodları ile çözülen diğer hesaplamalar ile karşılaştırıldı. Bulduğumuz sonuçlar karşılaştırılan sonuçlar ile başarılı bir şekilde uyum gösterdi.

Anahtar Kelimeler: Gauss Potansiyeli, Asimptotik İterasyon Metodu, Schrödinger Denklemi

SUMMARY

The Solution Of Schrödinger Equation For Gauss Potential By Using Asymptotic Iteration Method

In this study we present approximate solutions of the nonrelativistic radial Schrödinger equation for the gauss potential which were calculated using the series and the numeric solution within the framework of the asymptotic iteration method for any n and l values. Obtained bound state energy eigenvalues for any n and l values were compared with the results of the other groups calculated by using the Numerical, the Hypervirial Pade Scheme, the Perturbation and the Variational methods. Our results are in good agreement with the compared results.

Key Words: Gauss Potential, Asymptotic Iteration Method, Schrödinger Equation

TABLolar DİZİNİ

Tablo 3.1. Gauss potansiyelinin Enerji özdeğerleri E_{nl} için $\hbar = 1$, $m = 0.5$, $A = 400$, $\alpha = 1$ ve $\beta = 10$ değerleri alınarak ilk satırda AIM seri; ikinci satırda AIM nümerik hesaplamaları gösterilmiştir.....27

Tablo 4.1. Gauss potansiyelinin Enerji özdeğerleri E_{nl} için $\hbar = 1$, $m = 0.5$, $A = 400$, $\alpha = 1$ ve $\beta = 10$ değerleri alınarak. İlk satırda AIM; ikinci satırda, AIM nümerik; üçüncü satırda Nümerik; dördüncü satırda Pertürbasyon; beşinci satırda Hypervirial-Pade metodu ve altıncı satırda Varyasyon metodu hesaplamaları gösterilmiştir.....29

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3.1. $\hbar = 1$, $m = 0.5$, $A = 400$, $\alpha = 1$, $\beta = 10$ ve $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$ değerleri için

$V_{etkin}(r)$ etkin potansiyelinin r 'ye bağlı olarak değişimi.....26

SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ

- E : Enerji
- $E_p(\mathbf{r})$: Etkin Potansiyel enerji
- \hat{H} : Hamiltonyen
- \hat{H}_p : Pertürbasyon hamiltonyeni
- \hat{H}_0 : Pertürbe olmayan sistemin hamiltonyeni
- ψ : Dalga fonksiyonu
- $f(\mathbf{r})$: Radyal dalga fonksiyonu
- $g(\mathbf{r})$: Asimptotik davranışı ifade eden radyal dalga fonksiyonu
- p : Momentum
- h : Planck sabiti
- \hbar : $h/2\pi$
- n : Baş kuantum sayısı
- l : Açısız momentum kuantum sayısı,
- λ : Pertürbasyon parametresi
- β : Yakınsama parametresi
- λ_n : İkinci mertebeden homojen diferansiyel denklemden birinci türevli terimin katsayısı
- S_n : İkinci mertebeden homojen diferansiyel denklemden türevsiz terimin katsayısı
- AİM : Asimptotik iterasyon metodu

1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

Bir maddesel parçacığın hareketi, momentumun korunumu, açısal momentumun korunumu ve enerjinin korunumu gibi deneysel gözlemlerle de belirlenebilen bazı temel ilkeler doğrultusunda incelenebilir. Klasik mekaniğin kapsamı içinde, Newton hareket kanunlarının ifadeleri arasında anlam kazanan bu ilkeler evrensel bir karakter taşır. Bununla birlikte, özellikle atomik boyutlara doğru inildikçe madde ve enerjinin yapısında karşılaşılan kuantalaşmanın bir sonucu olarak, aynı fiziksel olaylara bu kez farklı bir açıdan yaklaşılmalıdır. Mikroskopik evrende, klasik mekaniğin bahsedilen üç temel ilkesi geçerliliğini sürdürmekle beraber, artık kuantum sınırlandırmaları gibi bazı yeni kavramların da dikkate alınması gerekir. Dahası madde ve enerjinin kuantlı yapısının ön plana çıkması ile birlikte belirsizlik ilkesi de önemli kavramlardan biri olarak ortaya çıkar. Bu durumda artık fizik daha çok istatistik yöntemleri kullanmaya yönelir ve olaylara bakış açısı bu doğrultuda değerlendirilmeye çalışılır. Geline bu noktada, çeşitli olaylara bakış açısı artık Louis de Broglie, Erwin Schrödinger, Paul Dirac, Max Born ve Werner Heisenberg'in belirledikleri anlayış ve kabuller çerçevesinde Kuantum Mekaniği'ni ortaya çıkarmıştır (Gündüz, 1999). Kuantum mekaniği; mikroskopik sistemleri matematiksel nesnelere (dalga fonksiyonları) cinsinden tanımlayan ve matematiksel nesnelere fiziksel içeriğe dönüştürmek üzere bir dizi kurallar veren bilimsel bir yöntem olarak ifade edilmiştir (Karaoğlu, 1998).

Kuantum mekaniğinin en temel keşiflerinin başında maddenin dalga özelliği göstermesi gelir. Öyle ki deneylerde elektronlar gibi maddesel parçacıkların bir dalga özelliği olan girişim yaptığını göstermiştir. Maddenin dalga özelliğine sahip olduğu ilk kez 1924'te Louis de Broglie tarafından ileri sürülmüştür. Klasik bir parçacık hareketine eşlik eden bir dalganın dalga boyu, kuantum mekaniği ile kesin bir ifade ile açıklanır. p lineer momentumu ile hareket etmekte olan bir parçacığın de Broglie dalgaboyu denklemi:

$$\lambda = h / p \quad (1.1)$$

olarak ifade edilir. De Broglie dalgası adı verilen ve bir elektronun hareketini açıklayabilen bu dalga, konumunun ve hızının ortak gösterimi olan bir dalga genliği ile ifade edilir. Bu ifadeye göre dalga genliğinin fazla olduğu yerler parçacığın uzayda bulunma ihtimalinin yüksek olduğu konumları ifade eder yani bir dalga genliğindeki değişim azaldıkça parçacığın konumu belirlenebilir ancak momentumu belirsizleşir. Dalga genliğindeki

değişim azaldıkça parçacığın konumu belirlenebilir ancak momentumu belirsizleşir. Dalga genliğindeki değişim arttıkça o dalga genliği ile anlatılan parçacığın momentumu belirlenebilir ancak bu uzaydaki parçacığın konum belirsizliğini artırır. Sonuç olarak bir parçacığın hem konumu hem de momentumu aynı anda tam olarak bilinemez ancak momentumu ile konumunun bileşimi hassasiyetleri ters orantılı olacak şekilde belirlenebilirler. Bu bağıntı Werner Heisenberg tarafından ortaya konulan Belirsizlik ilkesidir:

$$\Delta(x)\Delta(p) > \hbar / 2 \quad (1.2)$$

Burada $\Delta(x)$, x deki standart sapma ve $\Delta(p)$, p deki standart sapmadır. Belirsizlik ilkeleri, bir kuvvet etkisi altında bir parçacığın olası en küçük enerjisini tahmin etmek için kullanılır. Bu bilgi atomların taban hali (ya da minimum) enerjilerini belirler. Bu nedenle önemlidir (Fishbane, 2007).

Dalga mekaniği, fiziksel olayları madde dalgalarını gözönüne alarak açıklanması amacı ile, kendine özgü inceleme yöntemleri geliştirmiştir. Sözü edilen yöntemler daha çok diferansiyel denklemler biçiminde ortaya konulan hareket denklemlerinin çözümünü içerir. Elde edilen sonuçlar, örneğin; klasik mekaniğin aksine, bir parçacığın bir t anında bulunduğu konumu mutlak bir biçimde belirtmek yerine, sonsuz küçük bir dV hacim elemanı içindeki bulunma olasılığını istatistiksel olarak tanımlamaktadır. Bu olasılık; sözü edilen bölgedeki De Broglie dalgalarının genliğinin karesi ile temsil edilir.

Herhangi bir parçacığın bir x , y , z koordinat sistemine bağlı olarak yaptığı De Broglie dalgalarının genliği ile belirtilen hareketin denklemi dalga fonksiyonu olarak adlandırılır ve $\psi(x, y, z, t)$ ile ifade edilir. Örneğin tek boyutlu bir hareket için bir parçacığın hareket denklemi $\psi(x)$ dalga fonksiyonu ile verilir ve bir x noktası civarındaki sonsuz küçük bir dx aralığında bulunma olasılığı $|\psi(x)|^2 dx$ 'e eşittir. Parçacığın birim uzunluk veya birim hacim içinde bulunma olasılığı, $P(V) = |\psi(x, y, z)|^2$ şeklinde tanımlanır ve olasılık yoğunluğu olarak adlandırılır ve x eksenini boyunca hareket etmekte olan bir dalga grubu, kendisine eşlik eden parçacıkla birlikte, uzayın bir dx bölgesi içinde sınırlanabilir yani gerek parçacık gerekse dalga bu bölge sınırları içinde birarada incelenebilir. Bu duruma karşılık gelen bir dalga paketinin o noktadaki genliği, kendisine eşlik eden dalganın bulunduğu konum hakkında bir fikir verebilecek niteliktedir.

Klasik fiziğin basit bir olayını göz önüne alırsak herhangi bir atoma ait bir elektron; hareketi esnasında, ait olduğu çekirdekten $\approx 10^{-9} m$ 'den daha fazla uzaklaşmayıp, bu yarıçaptaki bir uzay hacmi içinde kalmaya devam eder. Yani; gerek elektron gerekse ona eşlik ettiği düşünülen dalga hareketi, çekirdek etrafındaki küçük bir uzay parçası içinde kalacak biçimde sınırlandırılmışlardır. Elektronu eşlik eden madde dalgalarının genliği, bu bölgenin dışında sıfır (minimum), bölgenin içinde ise ardışık olarak minimum ve maksimumlar gösterir. Madde dalgalarının genliği $\psi(x)$ ile temsil edilir. Buna karşılık, dalga hareketinin şiddeti, genliğin karesi ile orantılı olduğundan $|\psi(x)|^2$ 'ye eşittir.

$\psi(x)$ dalga fonksiyonu çoğu kez kompleks bir ifade içerir. Bunun kompleks eşleniği $\psi^*(x)$ olmak üzere aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$|\psi(x)|^2 = \psi(x)\psi^*(x) \quad (1.3)$$

gerçek bir fonksiyon için ise $\psi(x) = \psi^*(x)$ dir.

Buna göre, bir parçacığın sonlu bir V hacminde bulunma olasılığı:

$$P(V) = \int_V |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz \quad (1.4)$$

şeklinde verilebilir. Burada olasılık dalga fonksiyonu genliğinin büyük olduğu noktalarda büyük, küçük olduğu noktalarda küçüktür. Kuantum mekaniği tek tek olayların sonuçlarını değil bu sonuçların olasılıklarını verdiği için parçacığın, göz önüne alınan bütün uzay parçası içindeki bulunma olasılığı 1' e eşit olmalıdır:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1 \quad (1.5)$$

Bu koşul olmadan istatistiksel yorum anlamsız olur. Dalga fonksiyonu Schrödinger denklemi tarafından belirlenir ve bu ikisinin tutarlılığı kontrol edilmeden $\psi(x)$ üzerine dışarıdan bir koşul koyulamaz. Schrödinger denkleminde bakıldığında $\psi(x, t)$ tek boyutta bir çözümse A herhangi bir sabit olmak üzere $A\psi(x, t)$ 'nin de bir çözüm olduğu görülür. O hald A çarpanı, (1.5) denklemi sağlanacak şekilde belirlenir. Bu işlem dalga

fonksiyonunun normlanması (normalizasyon) olarak adlandırılır. Bütün bu normalizasyon işlemleri esnasında, ψ dalga fonksiyonunun kendisi tek başına gözlenebilir veya ölçülebilir herhangi bir şey ifade etmez ve işlemler sonrasında tümü ile saf dışı edilir ancak bir parçacık veya bir sistemin enerji ve momentum değerleri gibi gözlenebilir büyüklükleri hakkında bizlere son derece önemli bilgiler sağlayabilen bir araç görevini üstlenir.

Schrödinger denkleminin bazı çözümleri için integral sonsuzdur ve bu durumda hiçbir çarpan integrali 1 yapmaz. Aynı durum aşıkak çözüm $\psi(x,t)=0$ için de geçerlidir. Bu tür normlanamayan çözümler parçacıkları temsil etmediklerinden fiziksel olarak kabul edilebilir durumlar Schrödinger denkleminin karesi integre edilebilir çözümlerine karşılık gelirler (Fishbane, 2007).

1.2. Schrödinger Dalga Denklemi

Klasik mekanikte Newton'un dinamiğın temel ilkesi hangi önemde ise, dalga mekaniğı için de Schrödinger denklemi aynı önemi taşır. $\psi(x)$ dalga fonksiyonu, parçacığın dinamik konumuna bağılı olduğundan, hareketini sağlayan etkileri ve toplam enerjisini birlikte göz önüne almak gerekir. Şayet, parçacık üzerinde etkili olan kuvvetler korunumlu kuvvetler ise, yapılan hareketi yalnızca $E_p(x)$ potansiyel enerjisinin değerine bağılı olarak incelemek mümkün olabilir. Bu durumda, kütlesi m olan bir parçacığın toplam enerjisi:

$$E = \frac{p^2}{2m} = E_p(x) \quad (1.6)$$

eşitliğı ile verilebilir. Gerçek anlamı ile $\psi(x)$ dalga fonksiyonunun elde edilmesindeki kural; tek-boyutlu, zamandan bağımsız ve relativistik olmayan bir hareket için:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}) + E_p(\vec{x})\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \quad (1.7)$$

formunda bir diferansiyel denklemle ifade edilebilmesidir. 1928 yılında ortaya koyduğu bu denklemi Erwin Schrödinger, Schrödinger denklemi olarak adlandırmıştır. Schrödinger denklemi ile ifade edilen bir sistemin potansiyel enerjisi bilindiğı takdirde denklem çözülebilir ve izinli durumların enerjileri ve dalga fonksiyonları elde edilebilir.

(1.7) denklemindeki ∇^2 (Laplasyen) içeren Schrödinger denklemi, 3-boyutta küresel koordinatlarda (r, θ, ϕ) değişkenlerine bağlı olarak aşağıdaki gibi yazılır;

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\right) + E_p(r)\right)\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = E\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \quad (1.8)$$

Burada ψ dalga fonksiyonu da artık (r, θ, ϕ) koordinatlarının bir fonksiyonu olur. Potansiyelin sadece r değişkenine bağlı olması nedeniyle, değişken ayırma yöntemi burada uygulanabilir (Karaoğlu, 1998). Bu amaçla dalga fonksiyonu radyal ve açısal kısım olarak değişkenlerine ayrılarak yazılır:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = u_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.9)$$

(1.9) ifadesi (1.8) denkleminde yerine yazılarak aşağıdaki denklem için bir çözüm aranır:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\right) + E_p(r)\right)u_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = Eu_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.10)$$

Burada denklemin radyal kısmını çözmek için radyal Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılır:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)u_{nl}(r) - \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]u_{nl}(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}u_{nl}(r) = 0 \quad (1.11)$$

Uygun bir $u_{nl}(r)$ tanımlanır ve etkin potansiyel yazılır:

$$u_{nl}(r) = \frac{R_{nl}(r)}{r}, \quad V_{etkin} = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (1.12)$$

Buradan:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}\right) \frac{R_{nl}(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} R_{nl}(r) \quad (1.13)$$

(1.13) denklemi (1.11) denkleminde yerleştirilirse:

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_{etkin}] R_{nl}(r) = 0 \quad (1.14)$$

formunda bir radyal Schrödinger denklemi elde edilir. Radyal Schrödinger denklemi etkin potansiyelinde $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ merkezci potansiyeli, daima l açısai momentumuna baęlı bir terimdir. Farklı l deęerleri için $r \rightarrow 0$ ve $r \rightarrow \infty$ deęerlerine yaklařtıęında bu terim üç boyutlu bir engel oluřturur. Ancak $l=0$ deęerinde iken merkezci terim ortadan kalkar ve radyal denklem tek boyutta Schrödinger denklemine indirgenmiř olur (Karaoęlu, 1998). Bir kuantum sisteminde bu řekilde baęlı durumların relativistik ve relativistik olmayan Schrödinger denkleminin tam çözüümü, sistemin birçok fiziksel özelliklerini açıklamak açısından önemli bir rol oynar. Kuantum problemlerinin enerji özdeęerlerinin hesaplanması bir diferansiyel denklem olarak zorluklar içermektedir ve yalnızca birkaç potansiyel için tam çözüümü mümkün olmaktadır. Bu problemi çözebilmek için yeni analitik metodlar geliřtirilmekte veya farklı yaklařım metodları kullanılmaktadır. Bu yaklařım metodlarından bazıları; pertürbasyon metodu, varyasyon metodu, hypervirial-Pade methodu ve asimptotik iterasyon metodu gibi metodlardır.

Bu tez çalıřmasında ise Gauss potansiyeli için relativistik olmayan Schrödinger denkleminin l'nin farklı durumlarına baęlı enerji özdeęerlerinin Asimptotik İterasyon Metodu (AIM) ile hesaplanması amaçlanmıřtır. Bu bölümde Gauss potansiyeli için relativistik olmayan Schrödinger denkleminin çözümlerinde kullanılan metodlardan bahsedilmiřtir. II. Asimptotik İterasyon metodu bölümünde ayrıntılı řekilde anlatılmıřtır. Daha sonra III. bölümde Schrödinger denklemi gauss potansiyeli için Asimptotik İterasyon methodu ile seri ve nümerik çözümleri anlatılmıřtır ve bu method ile bulunan enerji deęerleri de Tablo-3.1' de incelenmiřtir. IV. tartıřma ve sonuç bölümünde bulduęumuz enerji özdeęerleri daha önceden yapılan Nümerik (Buck vd., 1977), Hypervirial-Pade metodu (Lai, 1983), Pertürbasyon ve Varyasyon metodları (Bessis, 1982) hesaplamaları ile karřılařtırılmıřtır ve sonuç olarak V. bölümde yeni çalıřmalar için öneriler belirtilmiřtir.

1.3. Pertürbasyon Metodu

Zamandan bağımsız Schrödinger denklemi herhangi bir potansiyel için tam olarak çözülemediği durumlarda, sistemin kesin olarak çözülebilen kısımları kullanılarak yaklaşık çözümler elde edilir. Bu yöntemlerden birisi pertürbasyon metodudur (Griffiths, 1999). Bu metod, \hat{H} Hamiltoniyeni ile tanımlanan bir sistemin kesin olarak çözülebilen bir \hat{H}_0 Hamiltoniyenine çok yaklaştığı durumlar için en uygun çözüm metodudur. Bu durumda \hat{H} Hamiltoniyeni zamandan bağımsız iki parçaya ayrılabilir:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p \quad (1.15)$$

Burada \hat{H}_0 perturbe olmayan sistemin Hamiltoniyeni olarak bilinir. \hat{H}_p Hamiltoniyeni ise perturbasyon Hamiltoniyeni olarak adlandırılır ve \hat{H}_0 Hamiltoniyenine göre çok küçük bir katkı değeri alır ($\hat{H}_p \ll \hat{H}_0$). Onun için enerji spektrumu ve özfonksiyonları üzerine etkileri küçük olacaktır. Örneğin zayıf elektrik veya manyetik alanla ilgili sistemlerde böyle bir pertürbasyonla karşılaşılabilir. Biz bu düşüncüyü \hat{H}_p 'yi boyutsuz, reel ve değeri birden oldukça küçük bir λ düzenleme parametresi cinsinden yazarak daha açık hale getirebiliriz:

$$\hat{H}_p = \lambda \hat{W} \quad \lambda \ll 1 \quad (1.16)$$

bu özdeğer problemi (1.15) halini alır:

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{W})|\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (1.17)$$

Buradan sonra, \hat{H}_0 'ın dejenere veya dejenere olmayan durumlarına bağlı olarak iki ayrı çözüm yolu izlenir. Bu çözüm yollarının kendine ait yaklaşım yöntemleri vardır.

1.3.1. Pertürbasyon Açılımı

Burada dejenere olmayan bir enerji seviyesinin zamandan bağımsız bir pertürbasyon operatörü etkisi ile değerindeki değişmeler ve dalga fonksiyonu değerindeki

değişmeler incelenecektir. Öyle ki her E_n^0 enerji değeri için yalnızca bir $|\phi_n\rangle$ özfonksiyonu karşılık gelir:

$$\hat{H}_0|\phi_n\rangle = E_n^0|\phi_n\rangle \quad (1.18)$$

burada E_n^0 özdeğerleri ve $|\phi_n\rangle$ özfonksiyonları kesin olarak bilinmektedir.

Pertürbasyon teorisinin ana fikri, pertürbe özdeğer ve özfonksiyonlarının her ikisi de λ düzenleme parametreleri içeren kuvvet serileri cinsinden yazılabileceğini kabul etmeye dayanır:

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad (1.19)$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots \quad (1.20)$$

(1.19) ve (1.20) denklemlerinde sırasıyla enerji ve dalga fonksiyonunda pertürbasyon teriminin etkisi ile oluşan küçük değişiklikler ifade edilir, yani pertürbasyonun yeterince zayıf olduğu durumda (1.19) ve (1.20) seri açılımları cinsinden ifade edilebilir; ancak pertürbasyon küçük olduğu halde E_n ve $|\psi_n\rangle$, λ nın kuvvetleri cinsinden yazılmadığı bazı durumlar da vardır. Burada dikkat edilmesi gereken nokta (1.19) ve (1.20) seri açılımları her zaman yakınsamaz ancak λ çok küçük bir değer aldığında ilk birkaç terim sistemin güvenilir bir tanımlamasını sağlar. Bu yüzden pratikte bu açılımların ilk birkaç terimi alınır. Böylece bu serilerin yakınsamama problemi ortadan kalkmış olur. Diğer bir önemli bir nokta ise $\lambda = 0$ değerinde (1.19) ve (1.20) seri açılımları pertürbe olmayan çözümleri de elde etmemizi sağlar: $E_n = E_n^0$ ve $|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle$. E_n^k parametreleri ve $|\psi_n^k\rangle$ ketleri sırasıyla enerji özdeğerleri ve özfonksiyonların k .ncı dereceden katkılarını gösterir. Pertürbasyon teorisinde gerçek problemin çözümü ilk birkaç terim için $E_n^1, E_n^2 \dots$ ve $|\psi_n^1\rangle, |\psi_n^2\rangle \dots$ açılım katsayılarının hesaplanmasına indirgenir. Pertürbe olmayan $|\phi_n\rangle$ özfonksiyonları, dejenere değildir. Burada (1.19) ve (1.20) seri açılımlarını (1.17) denkleminde yerleştirilirse denklem:

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{W})(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots) = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots) \quad (1.21)$$

halini alır. Denklem her iki tarafındaki λ katsayıları birbirine eşit olmalıdır. λ nın ilk üç kuvvetinin katsayıları eşitlendiğinde 0. ,1. ve 2. derecelerden pertürbasyon çözümleri elde edilir:

$$\text{Sıfırıncı dereceden } \lambda \quad \hat{H}_0 |\phi_n\rangle = E_n^0 |\phi_n\rangle \quad (1.22a)$$

$$\text{Birinci dereceden } \lambda \quad \hat{H}_0 |\psi_n^1\rangle + \hat{W} |\phi_n\rangle = E_n^0 |\psi_n^1\rangle + E_n^1 |\phi_n\rangle \quad (1.22b)$$

$$\text{İkinci dereceden } \lambda \quad \hat{H}_0 |\psi_n^2\rangle + \hat{W} |\psi_n^1\rangle = E_n^0 |\psi_n^2\rangle + E_n^1 |\psi_n^1\rangle + E_n^2 |\phi_n\rangle \quad (1.22c)$$

burada denklem (1.22.a) dan (1.22.c) ye kadar E_n^1, E_n^2 özdeğerleri ve $|\psi_n^1\rangle$ özfonksiyonları belirlenebilir. Bunun için $|\phi_n\rangle$ ve $|\psi_n\rangle$ özfonksiyonlarının birbirinden çok farklı olmadığı düşünülür ve $\langle \phi_n | \psi_n \rangle \approx 1$ olarak yazılabilir. $|\psi_n\rangle$ normalize edilerek $|\phi_n\rangle$ ile çakışıp tam olarak bire eşitlenmesi sağlanır:

$$\langle \phi_n | \psi_n \rangle = 1 \quad (1.23)$$

(1.27) denklemi (1.31) denklemi içerisine yerleştirilirse:

$$\lambda \langle \phi_n | \psi_n^1 \rangle + \lambda^2 \langle \phi_n | \psi_n^2 \rangle + \dots = 0 \quad (1.24)$$

elde edilir. Daha sonra denklemdeki her bir farklı λ katsayıları ayrı ayrı yok edilmelidir (Zettili, 2001).

$$\langle \phi_n | \psi_n^1 \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^2 \rangle = \dots = 0 \quad (1.25)$$

1.4. Varyasyon Metodu

Hamiltonyenleri bilinen mevcut sistemler tam olarak ya da pertürbe katkı ile çözülemezler. Bu tür problemleri çözmek için uygun yaklaşık metodlardan birisi Varyasyon metodudur ki Rayleigh-Ritz metodu adıyla da bilinir. Varyasyon metod, özdeğerleri ve öz durumları bilinmeyen bir sistemin, Hamiltonyeni bilinen enerji özdeğerleri için üst sınır belirlemede kullanışlıdır. Özellikle taban durum enerjisini hesaplamak için kullanılır. Uyarılmış durumların enerji düzeylerini belirlemek ise oldukça zor olur. Varyasyon metodun içeriğinde özdeğer problemini çözmek yoktur.

$$\hat{H}\psi|x\rangle = E\psi|x\rangle \quad (1.26)$$

fakat yine de yaklaşık enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları bulmak için varyasyonel bir yol kullanılır :

$$\delta E(\psi) = 0 \quad (1.27)$$

burada $E(\psi), |\psi\rangle$ durumundaki enerjinin beklenen değeridir:

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1.28)$$

Eğer $|\psi\rangle$ bir α parametresine bağlı ise, $E(\psi)$ de α parametresine bağlı olacaktır. $E(\psi)$ değerini minimize edecek biçimde α değişkenleri bize varyasyonel yaklaşım sağlar. $E(\psi)$ nin minimum değeri sistemin doğru enerjisi için üst limit yaklaşımı sağlar.

Varyasyon metodu, özellikle taban durum enerjisi ve özfonksiyonu Schrödinger denkleminde açıkça çözmeden hesaplamak açısından kullanışlıdır. Varyasyon metodunun çalışma ilkesine göre $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ parametrelerini içeren bir deneme dalga fonksiyonu seçilir. Hesaplanan $E(\psi)$ değeri her zaman taban durum enerjisi E_0 dan büyük olur:

$$\langle E \rangle(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (1.29)$$

eşitlik sınırları sadece $|\psi\rangle$, doğru taban durum $|\psi_0\rangle$ ile orantılı olduğunda oluşur. Bunu doğrulamak için $|\psi\rangle$ deneme fonksiyonu, \hat{H} Hamiltonyeninin tam özfonksiyonlarının lineer kombinasyonu olarak yazılır.

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle,$$

ile

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad (1.30)$$

ve tek boyutta dejenere olmayan sistemler için $E_0 \geq E_n$ değildir.

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_n |a_n|^2 E_n}{\sum_n |a_n|^2} \geq \frac{E_0 \sum_n |a_n|^2}{\sum_n |a_n|^2} = E_0 \quad (1.31)$$

taban durumu enerjisini hesaplamak için ilk olarak taban durumun bütün fiziksel özelliklerini ortaya çıkaran bir deneme fonksiyonu tahmin edilmelidir. Özellikler hakkında emin olunamadığında deneme fonksiyonuna ayarlanabilir parametre $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ eklemek $(|\psi_0\rangle = |\psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)\rangle)$ bilinmeyen fiziksel özellikleri açıklayacaktır. Daha sonra (1.28) denklemi kullanılarak enerji hesaplanır ki bu denklem $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ parametrelerine bağlı bir ifadeyi verir.

$$E_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = \frac{\langle \psi_0 | (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \hat{H} | \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \rangle}{\langle \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) | \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \rangle} \quad (1.32)$$

çoğu durumda $\psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ normalize olduğu kabul edilecektir dolayısıyla bu ifadenin paydası bire eşit olacaktır. (1.32) kullanılarak $E_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ değerinin minimumu ayarlanabilir α_i parametrelerine göre E_0 değeri minimize edilerek bulunur. Diğer bir deyişle $E(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ değeri $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ parametrelerine göre minimize edilerek E_0 değeri bulunur:

$$\frac{\partial E_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)}{\partial \alpha_i} = \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \frac{\langle \psi_0 | (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \hat{H} | \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \rangle}{\langle \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) | \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \rangle} = 0 \quad (1.33)$$

$i = 1, 2, \dots$ için $(\alpha_{10}, \alpha_{20}, \dots, \alpha_{n0})$ parametreleri E_0 taban durumunun minimize değerini verir. $(\alpha_{10}, \alpha_{20}, \dots, \alpha_{n0})$ parametreleri (1.32) denkleminde yerleştirildiğinde E_0 taban durum enerjisi için bir üst sınır oluşturur. Tam taban durum özfonksiyonu $|\phi_0\rangle$, $(|\psi_0(\alpha_{10}, \alpha_{20}, \dots, \alpha_{n0})\rangle)$ özfonksiyonuna yaklaşır.

Varyasyon metodu birkaç uyarılmış durum enerjileri için de yaklaşık değerler hesaplayabilir. Örneğin birinci uyarılmış durum enerji ve özfonksiyonunu bulmak için E_1 ve $|\phi_1\rangle$ değerini yaklaştırır. Bunun için $|\psi_0\rangle$ değeri ortogonal olan bir $|\psi_1\rangle$ deneme dalga fonksiyonu önerilir.

$$\langle \psi_1 | \phi_0 \rangle = 0 \quad (1.34)$$

Süreç taban durumunda olduğu gibi devam eder. Öyle ki $|\psi_1\rangle$ için varyasyon denklemini çözümler:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} \frac{\langle \psi_1 | (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \hat{H} | \psi_1 (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \rangle}{\langle \psi_1 (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) | \psi_1 (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \rangle} = 0 \quad (i=1,2,\dots) \quad (1.35)$$

Diğer uyarılmış durum enerjileri de aynı şekilde çözülebilir (Zettili, 2001).

1.5. Hypervirial Pade Metodu

Virial teoremi uzun süredir klasik mekanik ve kuantum mekaniğinde bilinmektedir. Klasik durumda teorem kinetik enerjinin ortalama zaman aşımı $\langle T \rangle$ ile potansiyel enerji fonksiyonunu $\langle \vec{r} \cdot \nabla V \rangle$ ilişkilendiren genel bir denklem sağlar. Virial teoremi teknik olarak Clausius tarafından 1870 yılında matematiksel olarak şöyle ortaya konulmuştur:

$$2\langle T \rangle = \langle \vec{r} \cdot \nabla V \rangle \quad (1.36)$$

Eğer fonksiyon üstel bir fonksiyon olursa $V(r) = \alpha r^n$ ve $r = |\vec{r}|$, teorem şöyle basit bir hal alır :

$$2\langle T \rangle = n\langle V \rangle \quad (1.37)$$

Böylece ortalama kinetik enerjinin iki katı ortalama potansiyel enerjinin n katı olur. Virial teoremi kuantum mekaniğinde sistemdeki ortalama enerji öz durumları ile yer değiştiren (1.36) ve (1.37) denklemindeki ortalama zaman aşımı hariç klasik mekanikteki haliyle aynı formdadır. Bu durum zamandan bağımsız operatörün $\vec{r} \cdot \vec{p}$ beklenen değerinin bir özfonksiyon için sabit olması durumundan faydalanılarak çıkarılmıştır :

$$i \frac{d}{dt} \langle \Psi | \vec{r} \cdot \vec{p} | \Psi \rangle = \langle \Psi | [\vec{r} \cdot \vec{p}, H] | \Psi \rangle = 0 \quad (1.38)$$

Burada $H = \frac{p^2}{2m} + V$ Hamiltonyen ve $|\Psi\rangle$ Hamiltonyenin bir özfonksiyonudur.

1960 yılında Hirschfelder ilişkisi $\vec{r} \cdot \vec{p}$ nin açıkça zamana bağlı olmayan herhangi bir operatörle değiştirilebileceğini belirterek genelleştirmiştir. Böylece Hypervirial teoremi ortaya koymuştur. Örneğin bir boyutlu bir sistemde $\vec{r} \cdot \vec{p} = xp$ ifadesi $x^k p$ hypervirial operatörü ile yer değiştirebilir ve $\langle x^k \rangle$ 'nın tekrarlama bağıntısını sağlar:

$$2kE \langle x^{k-1} \rangle = 2k \langle x^{k-1} V \rangle + \left\langle x^k \frac{dV}{dx} \right\rangle - \frac{1}{4} k(k-1)(k-2) \langle x^{k-3} \rangle \quad (1.39)$$

Burada k bir tamsayı ve E is enerji özdeğeridir.

Hellmann-Feynman teoremi, moleküllerdeki kuvvet kavramına çekirdeklerarası uzaklığı parametre olarak uygulayan bir başka önemli kuantum mekaniği teoremidir. $H(\xi)$ Hamiltonyeni bir sistemin zamandan bağımsız bir operatörüdür ve açıkça (ξ) parametresine bağlıdır. $|\Psi(\xi)\rangle$ dalga fonksiyonunu, $H(\xi)$ Hamiltonyeninin normalize edilmiş özfonksiyonu olduğunu ve $E_m(\xi)$ enerji özdeğerine sahip olduğunu kabul edersek, yani $H(\xi)|\Psi(\xi)\rangle = E_m(\xi)|\Psi(\xi)\rangle$, $\langle \Psi(\xi)|\Psi(\xi)\rangle = 1$, Hellmann-Feynman teoremi:

$$\frac{\partial E_m(\xi)}{\partial \xi} = \langle \Psi(\xi) | \frac{\partial H(\xi)}{\partial \xi} | \Psi(\xi) \rangle \quad (1.40)$$

olarak ifade edilir. Eğer potansiyel üstel bir fonksiyon olursa $V(r) = \alpha r^n$ teorem enerji özdeğeri E_m ve r^n 'in ortalama değeri arasındaki ilişki ile ilgili bir denklem verir:

$$\frac{\partial E_m}{\partial \alpha} = \langle r^n \rangle \quad (1.41)$$

(1.39) ve (1.41) denklemlerinin ilişkisine dayanarak, Hypervirial-Hellmann-Feynman methodu ya da diğer adıyla hypervirial pertürbasyon methodu ortaya çıkmıştır. Bu metod (Swenson vd., 1972), fourier serilerinin biçimsel manipülasyonlarının tekrarlama ilişkileriyle değiştirilmesi ile büyük mertebelerde pertürbasyon açılımlarının üretilmesi için çok verimli algoritmalar ortaya koymaktadır. Bu pertürbasyon metodu sistemin dalga fonksiyonu yerine sadece enerji ifadesine ihtiyaç duymaktadır ve bilgisayarla gerçekleştirilmesi kolaydır, (Li vd., 2011; Lai, 1983).

2.YAPILAN ÇALIŞMALAR

2.1.Asimptotik İterasyon Metodu

AİM, Schrödinger denkleminin çeşitli tipte potansiyellerinin çözümü için kullanılan bir yöntemdir. Bu metoda göre Schrödinger denklemini verilen potansiyele göre ikinci mertebe homojen lineer diferansiyel denklemler olarak düzenlenir:

$$y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y \quad (2.1)$$

$\lambda_0(x), s_0(x)$ değişkenleri, $C_\infty(a,b)$ aralığında yeteri kadar türevlenebilir fonksiyonlardır.

Bu formdaki bir diferansiyel denklemin genel çözümünü bulmak için x 'e göre türevi alınır:

$$y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y \quad (2.2)$$

$$y''' = \lambda_0'(x)y' + \lambda_0^2(x)y' + \lambda_0(x)s_0(x)y + s_0'(x)y + s_0(x)y' \quad (2.3)$$

$$y''' = y'(\lambda_0'(x) + \lambda_0^2(x) + s_0(x)) + (\lambda_0(x)s_0(x) + s_0'(x))y \quad (2.4)$$

$$y''' = \lambda_1(x)y' + s_1(x)y \quad (2.5)$$

olur. Burada $\lambda_1(x)$ ve $s_1(x)$ değerleri (2.3), (2.4) denklemlerinden yola çıkarak yazılır:

$$\lambda_1(x) = \lambda_0'(x) + \lambda_0^2(x) + s_0(x) \quad s_1(x) = \lambda_0(x)s_0(x) + s_0'(x) \quad (2.6)$$

(2.1) denklemini 1.mertebeden türevde yerleştirilir ve düzenlenirse aşağıdaki denklem elde edilir:

$$y''' = \lambda_0'(x)y' + \lambda_0(x)y'' + s_0'(x)y + s_0(x)y' \quad (2.7)$$

Benzer şekilde bir kez daha x 'e göre türevi alınır ve düzenlenirse:

$$y^{iv} = \lambda_0''(x)y' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0(x)y''' + s_0''(x)y + s_0'(x)y' + s_0'(x)y' + s_0(x)y''$$

$$y^{iv} = \lambda_0''(x)y' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0(x)(\lambda_0'(x)y' + \lambda_0(x)y'' + s_0'(x)y + s_0(x)y) + s_0''(x)y + s_0'(x)y' + s_0'(x)y' + s_0(x)y''$$

$$y^{iv} = \lambda_0''(x)y' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0'(x)y'' + \lambda_0(x)\lambda_0'(x)y' + \lambda_0^2(x)y'' + \lambda_0(x)s_0'(x)y + \lambda_0(x)s_0(x)y + s_0''(x)y + s_0'(x)y' + s_0'(x)y' + s_0(x)y''$$

$$y^{iv} = \lambda_0''(x)y' + 2\lambda_0'(x)y'' + \lambda_0(x)\lambda_0'(x)y' + \lambda_0^2(x)y'' + \lambda_0(x)s_0'(x)y + \lambda_0(x)s_0(x)y + s_0''(x)y + 2s_0'(x)y' + s_0(x)y''$$

$$y^{iv} = y''(2\lambda_0'(x) + \lambda_0^2(x) + s_0(x)) + y'(\lambda_0''(x) + \lambda_0(x)\lambda_0'(x) + 2s_0'(x) + \lambda_0(x)s_0(x)) + y(\lambda_0(x)s_0'(x) + s_0''(x))y \quad (2.8)$$

elde edilir. Tekrar (2.1) denklemini yukarıdaki denkleme yerleştirilir ve denklem düzenlendiğinde;

$$y^{iv} = (\lambda_0(x)y' + s_0(x)y)(2\lambda_0'(x) + \lambda_0^2(x) + s_0(x)) + y'(\lambda_0''(x) + \lambda_0(x)\lambda_0'(x) + 2s_0'(x) + \lambda_0(x)s_0(x)) + y(\lambda_0(x)s_0'(x) + s_0''(x))y \quad (2.9)$$

$$y^{iv} = y'(\lambda_0''(x) + 3\lambda_0(x)\lambda_0'(x) + \lambda_0^3(x) + 2\lambda_0(x)s_0(x) + 2s_0'(x)) + y(2\lambda_0'(x)s_0(x) + \lambda_0(x)s_0'(x) + s_0''(x) + \lambda_0^2(x)s_0(x) + s_0^2(x)) \quad (2.10)$$

$$y^{iv} = \lambda_2(x)y' + s_2(x)y \quad (2.11)$$

olarak ifade edilir. Burada $\lambda_2(x)$ ve $s_2(x)$ değerleri (2.9) ve (2.10) denklemlerinden yola çıkarak yazılır :

$$\lambda_2(x) = \lambda_1'(x) + s_1(x) + \lambda_0(x)\lambda_1(x) \quad (2.12)$$

$$S_2(x) = S_1'(x) + S_0(x)\lambda_1(x) \quad (2.13)$$

(2.1) denkleminin iterasyonu ile $n = 1, 2, 3, \dots$ olmak üzere $(n + 1)$. ve $(n + 2)$. mertebeden türevleri aşağıdaki gibi yazılır:

$$y^{(n+1)}(x) = \lambda_{n-1}(x)y' + s_{n-1}(x)y \quad (2.14)$$

$$y^{(n+2)}(x) = \lambda_n(x)y' + s_n(x)y \quad (2.15)$$

Bu formdaki bir diferansiyel denklemin $\lambda_n(x)$ ve $s_n(x)$ değerleri:

$$\lambda_n(x) = \lambda_{n-1}'(x) + s_{n-1}(x) + \lambda_0(x)\lambda_{n-1}(x) \quad (2.16)$$

$$S_n(x) = S_{n-1}'(x) + S_0(x)\lambda_{n-1}(x) \quad (2.17)$$

olarak ifade edilir. $(n + 2)$. ve $(n + 1)$. türevleri birbirine oranlanırsa:

$$\frac{y^{(n+2)}}{y^{(n+1)}} = \frac{\partial}{\partial x} \ln(y^{(n+1)}) = \frac{\lambda_n(x)[y' + \frac{S_n(x)}{\lambda_n(x)}y]}{\lambda_{n-1}(x)[y' + \frac{S_{n-1}(x)}{\lambda_{n-1}(x)}y]} \quad (2.18)$$

ifadesi elde edilir. Yeteri kadar büyük herhangi bir n değer için:

$$\frac{S_n(x)}{\lambda_n(x)} = \frac{S_{n-1}(x)}{\lambda_{n-1}(x)} = \alpha(x) \quad (2.19)$$

elde edilir. Bu ifade metodun' asimptotik' yönüdür ve ifadeye göre (2.18) ifadesi aşağıdaki denkleme indirgenir:

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln(y^{(n+1)}) = \frac{\lambda_n(x)}{\lambda_{n-1}(x)} \quad (2.20)$$

Bu oran aşağıdaki birinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklemin genel çözümünü verir:

$$y^{(n+1)} = C_1 e^{(-\int \frac{\lambda_n(x)}{\lambda_{n-1}(x)} dx)} \quad (2.21)$$

C_1 integral sabitidir. Burada (2.16) denkleminde $\lambda_n(x)$ değeri (2.21) denkleminde yerine konularak düzenlendiğinde aşağıdaki denklem elde edilir :

$$y^{(n+1)} = C_1 e^{\left(\int \frac{\lambda'_{n-1}(x) + S_{n-1}(x) + \lambda_0(x)\lambda_{n-1}(x)}{\lambda_{n-1}(x)} dx\right)}$$

$$y^{(n+1)} = C_1 e^{\left(\int \frac{\lambda'_{n-1}(x)}{\lambda_{n-1}(x)} dx + \int \frac{S_{n-1}(x)}{\lambda_{n-1}(x)} dx + \int \frac{\lambda_0(x)\lambda_{n-1}(x)}{\lambda_{n-1}(x)} dx\right)}$$

$$y^{(n+1)} = C_1 \lambda_{n-1}(x) e^{\left(\int (\alpha(x) + \lambda_0(x)) dx\right)} \quad (2.22)$$

(2.14) ve (2.22) denklemleri birbirine eşitlendiğinde birinci dereceden bir diferansiyel denklem elde edilir:

$$y' + \alpha(x)y = C_1 e^{\left(\int [\alpha(x) + \lambda_0(x)] dx\right)} \quad (2.23)$$

birinci mertebeden bir lineer diferansiyel denklem aşağıdaki formda yazılır:

$$y' + p(x)y = q(x) \quad (2.24)$$

O halde genel çözüm:

$$y(x) = e^{\left(-\int p(x) dx\right)} \left[e^{\left(\int p(x) dx\right)} q(x) dx + C \right] \quad (2.25)$$

Bu denklemin elde edilmesi ile ikinci mertebeden lineer homojen diferansiyel denklemleri için genel çözüm:

$$y(x) = e^{\left(\int \alpha(x_1) dx_1\right)} \left[C_2 + C_1 e^{\left(\int (\lambda_0(x_1) + 2\alpha(x_2)) dx_2 dx_1\right)} \right] \quad (2.26)$$

olarak verilir. Yeterince büyük $k > 0$ degerleri için $\lambda_k(x)$ ve $S_k(x)$ degerleri bulunur:

$$\lambda_k(x) = \lambda_{k-1}'(x) + s_{k-1}(x) + \lambda_0(x)\lambda_{k-1}(x) \quad (2.27)$$

$$S_k(x) = S_{k-1}'(x) + S_0(x)\lambda_{k-1}(x) \quad (2.28)$$

metodun yakınsama şartı:

$$\delta_k(x) = \lambda_k(x)S_{k-1}(x) + \lambda_{k-1}(x)S_k(x) = 0 \quad (2.29)$$

olur ve denklemin köklerinden kesin çözülebilir potansiyeller için enerji özdeğerleri elde edilir ve buna uygun düşen dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi elde edilir:

$$y_n(x) = c_2 e^{(-\int \frac{s_n(x)}{\lambda_n(x)} dx)} \quad (2.30)$$

Schrödinger denkleminin çeşitli tipte potansiyellerinin çözümü için kullanılan bir yöntemdir. Bu methoda göre Schrödinger denklemi verilen potansiyele göre ikinci mertebe homojen lineer diferansiyel denklemler olarak düzenlenir. Bu formdaki bir diferansiyel denklemin çözümünü bulmak için fiziksel bir dalga fonksiyonu önerilir. Bu dalga fonksiyonu aşağıdaki formda yazılır:

$$\Psi(x) = g(x)f(x) \quad (2.31)$$

Asimptotik İterasyon metodunun yaygın uygulamalarında $g(x)$ fonksiyonu, söz konusu sistem için asimptotik davranışı ifade eder. (2.26) da verilen $f(x)$ fonksiyonunun polinom formudur ve asimptotik davranışı rahatsız etmez.

enerji özdeğerleri, kesin çözülebilir potansiyeller için, n radyal kuantum sayısı, k iterasyon sayısına eşit olduğunda problem tam çözülebiliyorsa (2.29) denklemi kullanılarak hesaplanabilir. Eğer kesin olarak çözülemiyorsa bir n baş kuantum sayısı için, k iterasyon değerinin n başkuantum sayısından büyük değerleri için uygun bir x_0 noktası seçilir ve asimptotik dalga fonksiyonunun maksimum değeri ya da potansiyelin minimum değeri, ortalama enerji özdeğerleri genel olarak hesaplanabilir (Ciftci vd., 2003; Ciftci vd., 2005).

3. BULGULAR

3.1 Gauss Potansiyeli için Schrödinger Dalga Denkleminin AİM'le Seri Çözümü

Gauss potansiyeli Schrödinger denklemini seri çözümü asimptotik iterasyon metodu ile farklı l durumları için çözümler enerji özdeğerleri elde edilmiştir.

Bir $E_p(r)$ potansiyeli etkisinde bulunan ve m kütleli bir parçacığı hareketini tanımlayan Schrödinger denklemini aşağıdaki gibi yazılır:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \right) \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = E \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \quad (3.1)$$

denkleminde köşeli parantez içindeki terimlerin negatif değeri açısal momentumun operatörünün karesidir, $L^2 \cdot \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = u_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$, dalga fonksiyonları açısal ve radyal olarak değişkenlerine ayrılarak tanımlandığında sistemin radyal Schrödinger denklemini:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) u_{nl}(r) - \frac{2m}{\hbar^2} [E_p(r)] u_{nl}(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} u_{nl}(r) = 0 \quad (3.2)$$

olarak ifade edilir. $u_{nl}(r)$ uygun şekilde aşağıdaki gibi yazılır ve etkin potansiyel aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$u_{nl}(r) = \frac{R_{nl}(r)}{r}, \quad E_p(r) = V_{etkin} = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (3.3)$$

Buradan:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{R_{nl}(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} R_{nl}(r) \quad (3.4)$$

(3.4) denklemini (3.2) denkleminde yerine konularak radyal Schrödinger denklemini aşağıdaki gibi düzenlenir:

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_{etkin}(r)] R_{nl}(r) = 0 \quad (3.5)$$

$V_{etkin}(r)$ potansiyelinde belirtilen $V(r)$ potansiyeli gauss potansiyeli aşağıdaki gibi yazılır:

$$V_{gauss}(r) = -Ae^{-\alpha r^2} \quad (3.6)$$

Etkin potansiyel bir ters kare potansiyel ve bir exponansiyel potansiyelin kombinasyonu olarak aşağıdaki gibi yazılır:

$$V_{etkin}(r) = -Ae^{-\alpha r^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (3.7)$$

Bu potansiyel analitik olarak çözülemediğinden gauss potansiyeli taylor serisine açılarak çözülür. Gauss potansiyeli $r=0$ etrafında seriye açıldığında aşağıdaki gibi yazılır:

$$V_{gauss}(r) = -A + A\alpha r^2 - \frac{A\alpha^2}{2} r^4 + \frac{A\alpha^3}{6} r^6 - \dots \quad (3.8)$$

etkin potansiyel aşağıdaki gibi düzenlenir:

$$V_{etkin}(r) = \left(-A + A\alpha r^2 - \frac{A\alpha^2}{2} r^4 + \frac{A\alpha^3}{6} r^6 - \dots \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (3.9)$$

(3.7) denkleminde verilen etkin potansiyel için radyal Schrödinger denklemi çözmek yerine (3.9) denkleminde oluşturulan yeni etkin potansiyel ile çözülür. Etkin potansiyel (3.5) denkleminde yerleştirilir ve aşağıdaki gibi düzenlemeler yapılırsa:

$$\varepsilon = \frac{2mE_n}{\hbar^2}, \quad \hat{A} = \frac{2mA}{\hbar^2} \quad (3.10)$$

radyal Schrödinger denklemi aşağıdaki formu alır:

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \left(\varepsilon - \hat{A}(-1 + \alpha r^2 - \frac{\alpha^2}{2} r^4 + \frac{\alpha^3}{6} r^6 - \dots) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl}(r) = 0 \quad (3.11)$$

bundan sonra bu denklem ikinci dereceden homojen lineer diferansiyel denklem haline gelir ve l 'nin farklı değerleri için asimptotik iterasyon methodu uygulanarak çözülebilir. Diferansiyel denkleme aşağıdaki gibi fiziksel bir dalga fonksiyonu önerilir:

$$R_{nl}(r) = r^{l+1} e^{-\beta r^2} f_{nl}(r) \quad (3.12)$$

önerilen radyal dalga fonksiyonu (3.11) diferansiyel denkleminde yerleştirilir ve $r^{l+1} = 1$ ve $e^{-\beta r^2} = 1$ olarak Schrödinger denklemi düzenlenirse (2.1) ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklem haline getirilir:

$$\frac{d^2 f_{nl}(r)}{dr^2} = 2 \left(\frac{-(l+1)}{r} + 2r\beta \right) \frac{df_{nl}(r)}{dr} + \left(-2\hat{A} - 2\varepsilon + \hat{A}r^2 - \frac{\hat{A}r^4}{4} + 6\beta r + 4l\beta - 4r^2\beta^2 \right) f_{nl}(r) \quad (3.13)$$

(3.13) denkleminde $\lambda_0(r)$ ve $s_0(r)$ değişkenleri elde edilir:

$$\lambda_0(r) = 2 \left(\frac{-(l+1)}{r} + 2r\beta \right)$$

$$s_0(r) = \left(-2\hat{A} - 2\varepsilon + \hat{A}r^2 - \frac{\hat{A}r^4}{4} + 6\beta r + 4l\beta - 4r^2\beta^2 \right) \quad (3.14)$$

$\lambda_0(r)$ ve $s_0(r)$ değerlerinden (2.25) ve (2.26) denklemleri kullanarak diğer $\lambda_k(r)$ ve $s_k(r)$ değişkenleri hesaplanır:

$$\lambda_1(r) = -\frac{2}{r} + 4r\beta$$

$$s_1(r) = \left(-2\hat{A} + \hat{A}r^2 - \frac{\hat{A}r^4}{4} \right) - 2(\varepsilon + \beta(-3 + 2r^2\beta)) \quad (3.15)$$

Yakınsama şartı kullanılarak burada $\delta_k(r, \varepsilon) = 0$ çözümü özdeğer setlerini verir. $k > 0$

değerleri için $s_{kk}(r) = \frac{s_k(r)}{\lambda_k(r)}$ değerleri hesaplanır:

$$s_{00}(r) = \frac{s_0(r)}{\lambda_0(r)} = \frac{s_1(r)}{\lambda_1(r)} = \varepsilon_0$$

$$s_{11}(r) = \frac{s_1(r)}{\lambda_1(r)} = \frac{s_2(r)}{\lambda_2(r)} = \varepsilon_1$$

$$s_{22}(r) = \frac{s_2(r)}{\lambda_2(r)} = \frac{s_3(r)}{\lambda_3(r)} = \varepsilon_2$$

.

.

.

Önemli olan nokta ise eğer denklem her r noktası için çözülebiliyorsa tam çözülebilir bir denklemdir. Gauss potansiyeli gibi tam olarak çözülemeyen potansiyeller için uygun bir r_0 noktası seçilir ve denklemin ε enerji özdeğerleri bulunur. $R(r) = g(r)f(r)$ olarak önerilen dalga fonksiyonundaki $g(r)$ Asimptotik dalga

fonksiyonunun maksimum değerinden $r_0 = \frac{\sqrt{1+l}}{\sqrt{2\beta}}$ ekstremum noktası elde edilir. Bu nokta

kuantum koşulu gereği herhangi bir l değerinin enerji özdeğerini değişmez hale getirir. Burada β , yakınsama hızını etkileyen bir yakınsama parametresidir. Bu parametre $\beta = 10$ değerini aldığı anda en iyi yakınsamayı sağlamıştır ve 50 kez iterasyon yapılarak farklı l değerleri için enerji özdeğerleri hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar Tablo 4'te verilmiştir. Farklı β değerleri için daha fazla iterasyon gerekmektedir (Bayrak ve Boztosun, 2007).

3.2. Gauss Potansiyeli için Schrödinger Dalga Denkleminin AIM'le Nümerik Çözümü

Gauss potansiyeli farklı l durumları için nümerik çözümü Asimptotik İterasyon methodu ile yapılmıştır. Buna göre gauss potansiyeli ve merkezci potansiyelden oluşan etkin potansiyel aşağıdaki gibi yazılır:

$$V_{etkin}(r) = V_{merkezcil}(r) + V_{gauss}(r) \quad (3.16)$$

Etkin potansiyel (3.5) denkleminde yerleştirilerek denklem aşağıdaki gibi yazılır:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_n - \left(-Ae^{-\alpha r^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) \right) R(r) = 0 \quad (3.17)$$

Denklemi düzenlemek için $\alpha = 1$ alınır. $\varepsilon = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$ ve $\hat{A} = \frac{2mA}{\hbar^2}$ olarak düzenlenir ve denklem aşağıdaki gibi yazılır:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \left(\varepsilon - \hat{A}e^{-r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (3.18)$$

Denklem farklı l değerleri için asimptotik iterasyon metodu ile çözülür. Denklemi (2.1) haline getirmek için bir dalga fonksiyonu önerilir:

$$R_{nl}(r) = r^{l+1} e^{-\beta r^2} f_{nl}(r) \quad (3.19)$$

Önerilen dalga fonksiyonu denklemde yerleştirilir. $r^{l+1} = 1$ ve $e^{-\beta r^2} = 1$ olarak alınır. Schrödinger denklemi düzenlenir ve (2.1) denklemi haline getirilir:

$$\left(-\frac{2(l+1)}{r} + 4r\beta \right) f'(r) + (-\varepsilon - A e^{-\alpha r^2} + 2\beta(3+2l-2r^2\beta)) f(r) - f''(r) = 0 \quad (3.20)$$

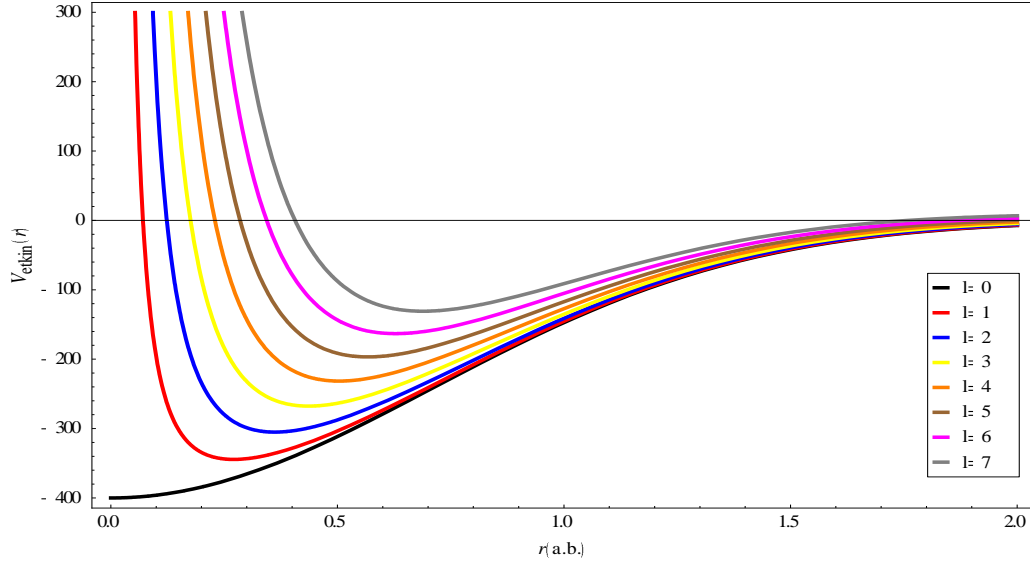
Daha sonra dalga fonksiyonundaki $g'(r) = 0$ uygulanarak $r_0 = \frac{\sqrt{1+l}}{\sqrt{2\beta}}$ belirlenir ve r_0 noktasında enerji özdeğeri değişmez hale gelir. Buradan $\lambda_0(r)$ ve $s_0(r)$ değişkenleri aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\lambda_0 = \left(-\frac{2(l+1)}{r} + 4r\beta \right) \quad (3.21)$$

$$s_0 = (-\hat{A} - \varepsilon + r^2 - \frac{1}{4}r^4 + 6\beta + 4l\beta - 4\beta^2 r^2) \quad (3.22)$$

(2.27) denklemi çözülerek özdeğer setleri elde edilir. Asimptotik İterasyon meodunda l 'nin farklı değerleri için 50 defa iterasyon yapılarak 49 basamaklı enerji özdeğerleri nümerik olarak bulunmuştur.

Gauss ve merkezci potansiyel etkisindeki radyal Schrödinger denklemi $l=0,1,2,3,4,5,6,7$ değerleri için Mathematica programında çizilen grafiği aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.1. $\hbar = 1$, $m = 0.5$, $A = 400$, $\alpha = 1$, $\beta = 10$ ve $l = 0,1,2,3,4,5,6,7$ değerleri için $V_{etkin}(r)$ etkin potansiyelinin r 'ye bağlı olarak değişimi

Burada A , Gauss potansiyelinin genliği; α , sabit bir parametre ve β , yakınsama parametresidir. l açısal momentum değeri arttıkça, potansiyelin minimumu gittikçe sıfıra yaklaşır. Buna bağlı olarak enerji özdeğerleri de negatif değerden pozitif değere doğru değişir.

Gauss potansiyeli için radial Schrödinger denklemi Asimptotik iterasyon methodu kullanarak farklı l değerleri için seri ve nümerik olarak Mathematica programı ile hesaplanmış ve sonuçların birbiriyle çok uyumlu olduğu gözlenmiştir. Hesaplanan özdeğerler Tablo 3.1.'de karşılaştırılmıştır.

Tablo 3.1. Gauss potansiyelinin Enerji özdeğerleri E_{nl} için $\hbar = 1$, $m = 0.5$, $A = 400$, $\alpha = 1$ ve $\beta = 10$ değerleri alınarak ilk satırda AİM seri; ikinci satırda AİM nümerik hesaplamaları gösterilmiştir.

n/l	0	1	2	3	4	5	6	7
0	341.8952	304.4628	268.1107	232.8752	198.7981	165.9281	134.3215	104.047
	341.8952	304.4628	268.1107	232.8752	198.7982	165.9282	134.3215	104.047
1	269.6443	235.449	202.4308	170.6384	140.1387	110.9915	83.31	57.1039
	269.6443	235.449	202.4309	170.6382	140.1352	110.9925	83.29	57.1009
2	203.9775	173.228	143.8014	115.7997	89.172	63.939	40.44	18.926
	203.97	173.229	143.8008	115.7427	89.165	64.130	41.267	18.705
3	145.355	118.232	92.584	68.3856	45.471	26.7778	9.125	
	145.332	118.355	92.759	68.7886	46.745	26.77	9.12	
4	92.183	71.823	50.575	33.126	14.8	1.2		
	91.450	69.957	47.936	33.126	14.81	1.22		

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tez çalışmasında, Gauss potansiyeli için relativistik olmayan radyal Schrödinger denkleminin seri çözümü ve nümerik çözümü ilk kez asimptotik iterasyon methodu kullanılarak elde edilmiştir. Gauss potansiyeli için radyal Schrödinger denklemi, ikinci dereceden homojen lineer bir diferansiyel denklem biçimine dönüştürülmüş ve bu tip diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılan asimptotik iterasyon metodu ile enerji özdeğerleri elde edilmiştir. Gauss potansiyeli için radyal Schrödinger denklemi daha önce Varyasyon metodu, Pertürbasyon metodu ve Hypervirial Pade metod yaklaşım metodlarıyla çözülmüştür. Ancak asimptotik iterasyon metodunun herhangi bir yaklaşım kullanmadan herhangi bir potansiyel parametresi için direk enerji özdeğerlerini hesaplaması diğer yaklaşım metodlarına göre avantaj sağlamıştır (Bayrak ve Boztosun 2006). Diğer metodlar ise pertürbatif yaklaşımları veya farklı nümerik çözümler gerektirir. Ayrıca uygulama açısından da diğer metodlara göre daha basit bir metod olması diğer bir avantajıdır. Bulduğumuz enerji özdeğerleri nümerik (Stephenson 1977), Varyasyon metod (Bessis vd., 1982) ve Pertürbasyon metod (Bessis vd., 1982), Hypervirial Pade metod (Lai, 1983) hesaplamaları ile karşılaştırılmış ve sonuçların birbiriyle oldukça uyumlu olduğu Tablo 4.1.' de gösterilmiştir.

Tablo 4.1. Gauss potansiyelinin Enerji özdeğerleri E_{nl} için $\hbar = 1$, $m = 0.5$, $A = 400$ $\alpha = 1$ ve $\beta = 10$ değerleri alınarak ilk satırda AİM seri; ikinci satırda AİM nümerik; üçüncü satırda Nümerik; dördüncü satırda Pertürbasyon; beşinci satırda Hypervirial Pade metodu ve altıncı satırda Varyasyon metodu hesaplamaları gösterilmiştir.

n/l	0	1	2	3	4	5	6	7
0	341.8952	304.4628	268.1107	232.8752	198.7981	165.9281	134.3215	104.047
	341.8952	304.4628	268.1107	232.8752	198.7982	165.9282	134.3215	104.047
	341.9	304.5	268.1	232.9	198.8	165.9	134.3	104.1
	341.888	304.449	268.089	232.843	198.755	165.875	134.260	103.986
	341.8952	304.4628	268.1107	232.8753	198.7983	165.9282	134.3226	104.0512
	341.895	304.463	268.1111	232.875	198.797	165.925	134.317	104.040
1	269.6443	235.449	202.4308	170.6384	140.1387	110.9915	83.31	57.1039
	269.6443	235.449	202.4309	170.6382	140.1352	110.9925	83.29	57.1009
	269.7	235.5	202.4	170.6	140.1	111.0	83.3	57.2
	269.646	235.453	202.434	170.640	140.1	110.970	83.225	67.099
	269.6445	235.4500	202.4313	170.6393	140.1351	110.9929	83.3069	57.1963
	269.6444	235.450	202.431	170.639	140.128	110.989	83.259	57.171
2	203.9775	173.228	143.8014	115.7997	89.172	63.939	40.44	18.926
	203.97	173.229	143.8008	115.7427	89.165	64.130	41.267	18.705
	204.0	173.3	143.8	115.8	89.2	64.2	41.0	19.8
	203.955	173.226	143.803	115.755	89.167	64.141	40.814	19.371
	203.9835	173.2443	143.8091	115.7542	89.1750	64.1959	40.9887	19.8128
	203.983	173.244	143.808	115.752	89.169	64.180	40.950	19.721
3	145.355	118.232	92.584	68.3856	45.471	26.7778	9.125	-
	145.332	118.355	92.759	68.7886	46.745	26.77	9.12	-
	145.4	118.4	92.89	69.00	46.9	26.8	9.1	-
	145.285	118.331	92.864	68.977	46.788	26.446	8.152	-
	145.3779	118.3840	92.8781	68.9836	46.8681	26.7779	9.1259	-
	145.377	118.381	92.873	68.973	46.846	26.727	8.995	-
4	94.183	71.823	50.575	33.126	14.8	1.2	-	-
	94.450	69.957	47.936	33.126	14.81	1.22	-	-
	94.5	71.6	50.6	31.5	14.9	-	-	-
	94.344	71.595	50.564	31.375	14.187	0.797	-	-
	94.4577	71.6236	50.5677	31.5211	14.8681	1.2949	-	-
	94.454	71.617	50.557	31.499	14.794	1.1	-	-

5. ÖNERİLER

Bu çalışma Egzotik Çekirdek Reaksiyonlarının Continuum Discretized Coupled Channels (CDCC) Modeli Kullanılarak İncelenmesi (proje no: 110T388) adlı proje çalışması kapsamında nükleer yapı kısmına katkı amacıyla yapılmıştır. Bilindiği üzere çekirdek yapısını açıklamada kollektif model özellikle çift çift çekirdeklerde oldukça başarılıdır ancak bazı eksiklikleri de vardır. Bu model nükleer dönme ve nükleer titreşim hareketlerinde R_{ort} ortalama yarıçapı küresel almaktadır. Eğer çekirdekte kalıcı deformasyon yoksa çekirdeğin herhangi bir anda şekli eksensel asimmetriktir. Bu düşünce ile çift çift çekirdeklerin yapısını ve nükleer kollektif hareketlerini Bohr Hamiltonyeni modeli tanımlamaktadır. Nükleer yapı aşamasında, Bohr Hamiltonyeni tanımlanıp çekirdeklerin uyarılma enerji seviyeleri gauss potansiyeli için asimptotik iterasyon metodu kullanarak çözülmesi amaçlanmaktadır. Bohr Hamiltonyeni şu ana kadar gauss potansiyeli için çözülmemiştir. Bohr Hamiltonyeni bazı limitler altında Schrödinger dalga denklemine indirgenebilir bir modeldir. Bu tez çalışmasında sonuçların test edilebilmesi amacıyla gauss potansiyeli için Schrödinger dalga denklemi asimptotik iterasyon metodu kullanılarak çözülmüştür ve daha sonra literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Daha sonraki aşamalarda Bohr Hamiltonyenin gauss potansiyeli için çözümlerine geçilecektir.

6. KAYNAKLAR

- Aygun M., Bayrak O. and Boztosun I. 2007. Solution of the radial Schrödinger equation for the potential family $v(r) = A/r^2 - B/r + Cr^2$ using the asymptotic iteration method. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 40: 537-544.
- Barakat, T. 2006. The asymptotic iteration method for the eigenenergies of the Schrödinger equation with the potential $V(r) \leq -Z/r + gr + \lambda r^2$. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 39: 823-831.
- Bayrak, O. and Boztosun I. 2006. Arbitrary ℓ -state solutions of the rotating Morse potential by the asymptotic iteration method. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 39: 6955-6963.
- Bayrak, O. and Boztosun I. 2007. An alternative accurate solution of the exponential cosine screened Coulomb potential. *International Journal of Modern Physics C*, 18: 1443-1451.
- Bayrak, O. and Boztosun I. 2007. Bound state solutions of the Hulthén potential by using the asymptotic iteration method. *Physica Scripta*, 76: 92-96.
- Bessis, N., G. Bessis and Joulakian B. 1982. A note on the Schrödinger equation for the potential $A \exp(-x^2) - l(l+1)/x^2$. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 15: 3679-3684.
- Buck, B, Friedrich H. and Wheatley C. 1977. Local potential models for the scattering of complex nuclei. *Nuclear Physics, A* 275: 246-268.
- Ciftci, H., Hall R. L. and Saad N. 2003. Asymptotic iteration method for eigenvalue problems., *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36: 11807-11816.
- Ciftci, H., Hall R. L. and Saad N. 2005. Construction of exact solutions to the eigenvalue problems by the asymptotic iteration method. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 38: 1147-1155.
- Fishbane P. M., Gasiorowicz S. , Thornton T. 2007. *Temel Fizik Cilt II. Arkadaş Yayınları, Ankara s. 214*
- Griffiths J. 1999. *Kuantum Mekaniğine Giriş Nobel Yayın Dağıtım, Ankara s. 175.*
- Gündüz E. 1999. *Modern Fiziğe Giriş. Ege Üniversitesi Yayınlar, İzmir s. 201.*
- Hirschfelder J O 1960 Classical and quantum mechanical hypervirial theorems *J. Chem. Phys.*, 33: 1462–1466.
- Karaoğlu B. 1998. *Kuantum Mekaniğine Giriş. Güven Yayıncılık, Ankara s.103.*

- Kocak, G., Bayrak O. and Boztosun I. 2007. Arbitrary ℓ -state solution of the Hellmann potential. *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, 6: 893-903.
- Krane KS. 2001. Nükleer Fizik 1. ve 2. Cilt. Palme Yayıncılık, Ankara s.145
- Lai C S. 1983. On the Schrödinger equation for the gaussian potential $-A\exp(-\lambda r^2)$. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 16: 181-185.
- Li Y., Zhang F and Chen J. 2011. Virial theorem and hypervirial theorem in a spherical geometry. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 44: 1-11.
- Serway R. A., Beichner R. J., 1996. Fen ve Mühendislik için Fizik I. Palme Yayıncılık, Ankara s. 124
- Stephenson, G. 1977. Eigenvalues of the Schrödinger equation with a Gaussian potential. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 10: 227- 229.
- Swenson R J and Danforth S H. 1972 Hypervirial and Hellmann–Feynman theorems applied to anharmonic oscillators *J. Chem. Phys.*, 57: 1734–1737
- Zettili N. 2001. Quantum Mechanics: Concepts and Applications, 2nd ed. Wiley, New York s.466.

EK-A: Gauss potansiyeli için Schrödinger denklemi asimptotik iterasyon metodu kullanarak seri çözümü mathematica program kodu

```

R[r] = g[r] * f[r];
eq[r] = D[R[r], {r, 2}] + k2[r] * R[r];
eq[r] = Simplify[eq[r] / g[r]];
l0[r] = eq[r] /. {f[r] → 0, f(2)[r] → 0, f(1)[r] → 1};
s0[r] = eq[r] /. {f(2)[r] → 0, f(1)[r] → 0, f[r] → 1};

Vmerkezcil[r] =  $\frac{L * (L + 1) * \hbar^2}{2 * m * r^2}$ ;
Vgauss[r] = -A * Exp[-α * r^2]
Vseri[r] = Normal[Series[Vgauss[r], {r, r_0, 15}]]
V[r] = Vmerkezcil[r] * 1 + Vgauss[r] * 0 + Vseri[r] * 1
g[r] = r^(L + 1) * Exp[-β * r^2];
g'[r] = D[g[r], r];
g''[r] = D[g'[r], r];
k2[r] =  $\frac{2 * m}{\hbar^2} * (DEn - V[r])$ ;

l0 = FullSimplify[- $\frac{2 * g'[r]}{g[r]}$ ];

s0 = Expand[Simplify[-k2[r] -  $\frac{g''[r]}{g[r]}$ ]];

l0 = Simplify[l0]
s0 = Simplify[s0]
Solve[g'[r] == 0, r]
hbar = 1; m = 0.5; A = Rationalize[400];

β = Rationalize[10]; α = Rationalize[1]; r0 =  $\frac{\sqrt{1 + L}}{\sqrt{2} \sqrt{\beta}}$ ;

L = 0;
itn = 50;
basamak = 49;
l1 = Simplify[l0]
s1 = Simplify[s0]
Do [Print["iterasyon = ", i];
  l2 = Simplify[D[l1, r] + s1 + l0 * l1];
  s2 = Simplify[D[s1, r] + s0 * l1];
  δ[i] = s2 * l1 - s1 * l2 /. r → r0;
  l1 = l2;
  s1 = s2;
  Print [Cases [NSolve [δ[i] == 0, DEn, WorkingPrecision → basamak + i],
    {DEn → y_ /; Im[y] == 0}] // TableForm];
,
{i,
  itn}]

```

EK-B: Gauss potansiyeli için Schrödinger denklemini asimptotik iterasyon metodu kullanarak nümerik çözümü mathematica program kodu

```

R[r] = g[r] * f[r];
eq[r] = D[R[r], {r, 2}] + k2[r] * R[r];
eq[r] = Simplify[eq[r] / g[r]]
l0[r] = eq[r] /. {f[r] → 0, f(2)[r] → 0, f(1)[r] → 1};
s0[r] = eq[r] /. {f(2)[r] → 0, f(1)[r] → 0, f[r] → 1};

Vmerkezcil[r] =  $\frac{L * (L + 1) * \hbar^2}{2 * m * r^2}$ ;
Vgauss[r] = -A * Exp[-α * r^2];
V[r] = Vmerkezcil[r] + Vgauss[r];
g[r] = r^(L + 1) * Exp[-β * r^2];
g'[r] = D[g[r], r];
g''[r] = D[g'[r], r];
k2[r] =  $\frac{2 * m}{\hbar^2} * (DEN - V[r])$ ;

l0 = FullSimplify[- $\frac{2 * g'[r]}{g[r]}$ ];

s0 = Expand[Simplify[-k2[r] -  $\frac{g''[r]}{g[r]}$ ]];

l0 = Simplify[l0]
s0 = Simplify[s0]
Solve[g'[r] == 0, r]
hbar = 1; m = 0.5; A = Rationalize[400];

β = Rationalize[10]; α = Rationalize[1]; r0 =  $\frac{\sqrt{1 + L}}{\sqrt{2} * \sqrt{\beta}}$ ;

L = 0;
itn = 50;
basamak = 49;
l1 = Simplify[l0]
s1 = Simplify[s0]
Do [Print["iterasyon = ", i];
  l2 = Simplify[D[l1, r] + s1 + l0 * l1];
s2 = Simplify[D[s1, r] + s0 * l1];
δ[i] = s2 * l1 - s1 * l2 /. r → r0;
l1 = l2;
s1 = s2;
Print[Cases[NSolve[δ[i] == 0, DEN, WorkingPrecision → basamak + i],
  {DEN → y_ /; Im[y] == 0}] // TableForm];
,
{i,
itn}]

```

ÖZGEÇMİŞ

11.03.1985 tarihinde Amasya' da doğdu. İlk ve orta öğrenimini Zübeyde Hanım Üçler İlköğretim Okulu' nda tamamladıktan sonra lise öğrenimini Amasya Anadolu Lisesi' nde tamamladı. 2005 yılında Süleyman Demirel Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü' ne girerek 2009 yılında lisans öğrenimini tamamladı. Ekim 2009' da Rize Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Katıhal Fizik Anabilim Dalı' nda Araştırma Görevlisi olarak göreve başladı. 2010 yılında Rize Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü' nde yüksek lisans öğrenimine başladı. Halen Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen- Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Katıhal Fizik Anabilim Dalı' nda Araştırma Görevlisi olarak görevine devam etmektedir.