

**ASİMPTOTİK İTERASYON METODU İLE PERTÜRBASYON
HESAPLAMALARI**

Zeynep BUHUR

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2008
ANKARA**

Zeynep BUHUR tarafından hazırlanan ASİMPOTİK İTERASYON METODU İLE
PERTÜRBASYON HESAPLAMALARI adlı bu tezin Yüksek Lisans olarak uygun
olduğunu onaylarım.

Doç. Dr. Hakan ÇİFTÇİ
Tez Danışmanı, FİZİK Anabilim Dalı

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile FİZİK Anabilim Dalında Yüksek Lisans
tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Bora ALKAN
Fizik, Ankara Üniversitesi

Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK
Fizik, Gazi Üniversitesi

Doç. Dr. Hakan ÇİFTÇİ
Fizik, Gazi Üniversitesi

Tarih: 18/01/2008

Bu tez ile G.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Yüksek Lisans derecesini
onamıştır.

Prof. Dr. Nermin ERTAN
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Zeynep BUHUR

**ASİMPTOTİK İTERASYON METOTU İLE PERTÜRBASYON
HESAPLAMALARI
(Yüksek Lisans Tezi)**

Zeynep BUHUR

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Ocak 2008**

ÖZET

Bu çalışmada Schrödinger özdeğer problemleri için yaklaşım metotlarından biri olan Asimptotik iterasyon metodu kullanılarak bir ve üç boyutta sınırlandırılmış salıncı problemi için pertürbasyon açılım katsayıları hesaplandı. Bu katsayılar kullanılarak enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları için yaklaşık analitik ifadeler elde edildi.

Bilim Kodu : 202.1.149

Anahtar Kelimeler : Asimptotik iterasyon metodu, pertürbasyon teorisi, Schrödinger denklemi

Sayfa Adedi : 53

Tez Yöneticisi : Doç. Dr. Hakan ÇİFTÇİ

**PERTURBATION CALCULATIONS BY THE ASYMPTOTIC ITERATION
METHOD**

(M.Sc. Thesis)

Zeynep BUHUR

**GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

January 2008

ABSTRACT

In this study, the perturbation expansion coefficients have been calculated for Schrödinger eigenvalue problem for one and three dimensional bounded oscillator potential by using the asymptotic iteration method (AIM). By using these perturbation expansion coefficients, we have also obtained approximate analytical expressions for the eigenvalues and eigenfunctions.

Science Code : 202.1.149

Key Words : Asymptotic iteration method, perturbation theory, Schrödinger equation

Page Number : 53

Adviser : Assoc. Prof. Dr. Hakan ÇİFTÇİ

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren, her konuda ilgi ve desteğini eksik etmeyen, engin tecrübesi ve yorumlarıyla bana yol gösteren değerli danışman hocam Doç. Dr. Hakan Çiftci' ye teşekkür ederim. Yüksek lisans eğitimi boyunca çalışmalarım esnasında manevi desteklerini ve yardımlarını hep hissettiğim arkadaşlarıma teşekkür ederim. Yaşamım boyunca iyi ve kötü her durumda desteklerini hissettiğim, hayata atılmamda, lisans ve lisansüstü çalışmalarımda maddi ve manevi olarak beni destekleyen aileme sonsuz teşekkürlerimi ve şükranlarımı sunarım.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	x
SİMGELER VE KISALTMALAR	xi
1. GİRİŞ	1
2. YAKLAŞIM METOTLARI	3
2.1. Varyasyonel Metot	3
2.2. WKB(Wentzel,Kramers ve Brillouin) Metodu	6
2.3. Kaydırılmış $1/N$ Açılım Metodu	11
2.4. Riccati - Pade Metodu	16
2.5. Hill Metodu	18
2.6. Pertürbasyon Teorisi	20
2.6.1. Dejenere olmayan ve durağan bir seviyenin zamandan bağımsız pertürbasyonu	20
3. TEMEL BİLGİLER	24
3.1. Asimptotik İterasyon Metodu	24
3.2. Asimptotik İterasyon Metodu ile Dirac Denklemini	27
3.3. Asimptotik İterasyon Metodu için Pertürbasyon Teorisi	31
3.3.1. Pertürbasyon açılımının sınır değerleri	31

	Sayfa
3.3.2. Dalga fonksiyonu	33
4. UYGULAMALAR	35
4.1. Bir Boyutta Sınırlandırılmış Salıncı Problemi	35
4.2. Üç Boyutta Sınırlandırılmış Salıncı Problemi	42
4.2.1. Dalga fonksiyonu	47
5. SONUÇ VE TARTIŞMA	50
KAYNAKLAR	51
ÖZGEÇMİŞ	53

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. $a = 1$ iken Eş. 4.6 kullanılarak bulunan enerji özdeğerleri.....	41
Çizelge 4.2. $a = 1$ iken, R nin farklı değerleri için enerji özdeğerleri.....	41
Çizelge 4.3. $a = 1$ iken Eş. 4.32 kullanılarak bulunan enerji özdeğerleri.....	47
Çizelge 4.4. $n = 0, n = 1$ için dalga fonksiyonu düzeltme terimleri	49

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Potansiyelin konuma göre değişimi	6
Şekil 4.1. $R = 1, a = 1$ iken bir boyutta sınırlandırılmış salıncı potansiyeli	35
Şekil 4.2. Enerjinin($E_0^{(direk)}$) R 'ye göre değişimi	42

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
E	Enerji
H	Hamiltoniyen
$\hbar$	İndirgenmiş Planck Sabiti, $6,6260693 \times 10^{-34} / 2 \pi \text{ J.s}$
λ	Pertürbasyon Açılım Parametresi
ψ	Dalga fonksiyonu
V	Potansiyel
Kısaltmalar	Açıklama
AIM	Asimptotik İterasyon Metodu
WKB	Wentzel Kramers ve Brillouin

1. GİRİŞ

Yüzyılımızın başında ortaya atılan iki teori, fizik ve felsefe dünyasını çok derinden etkiledi. Bunlar kuantum ve rölativite teorileriydi. Kuantum teorisi birçok kişinin katkılarıyla oluşmuştur: Planck, Einstein, Bohr, De Broglie, Schrödinger, Heisenberg, Dirac ve Pauli gibi... . Kuantum teorisi kısaca tanımlanırsa, atom altı parçacıkların fiziksel yapılarının (konum, momentum,... gibi), matematiksel bazı denklemlerle açıklanmasıdır. Kuantum kuramı klasik fiziğin çözemediği;

- 1.Siyah cisim ışımasının enerji dağılımı
- 2.Fotoelektrik olay
- 3.Atomların kararlılığı

gibi birçok konuya ışık tutmuştur. Kuantum kuramında çok önemli bir yeri olan Schrödinger denklemi bir kuantum sistemi hakkında bilgi veren denklemdir. Schrödinger denklemine göre dalga fonksiyonunun zamana göre değişimini Hamiltoniyen operatörü kontrol eder. Hamiltoniyen operatörü sistemin enerjisi ile yakından ilgilidir. Kuantum sisteminin sahip olabileceği enerji değerlerini Hamiltoniyen operatörü belirler. Bunu veren denklemede zamandan bağımsız Schrödinger denklemi adı verilir. Bu denklemin çözümü incelenen sistemin dalga fonksiyonlarını ve enerji özdeğerlerini verir. Schrödinger denkleminin çözümü için birçok çalışma yapılmıştır. Fakat çoğu durumda Schrödinger denkleminin tam çözümlerine ulaşamamıştır. Az sayıda potansiyel için Schrödinger denklemi çözülebildiğinden dolayı, genellikle nümerik metotlara ve yaklaşım metotlarına başvurulur[1,2]. Yaklaşım metotları Schrödinger denkleminin birçok fiziksel problemi için kullanışlı çözümler verir. Bu çalışmada kullanılan asimptotik iterasyon metodu(AIM) bu yaklaşım metotlarından biridir[3,4]. Schrödinger denkleminin enerji özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını elde edebilmek için kullanışlı bir yöntemdir.

Bu alıřmada ama, yaklařım metotlarından biri olan asimptotik iterasyon metodunu kullanarak pertürbasyon aılım katsayılarını bir boyutta ve üç boyutta sınırlandırılmış salınıcı potansiyeli için elde ederek enerji özdeğerlerini ve enerji özfonksiyonlarını bulmaktır.

Bu alıřma beř bölümden oluřmaktadır. alıřmanın birinci bölümünde, Schrödinger denkleminin özümünde yaklařım metotlarının önemi üzerinde duruldu. İkinci bölümde, bazı yaklařım metotları hakkında genel bilgi verildi. Üüncü bölümde, AIM, AIM ile dirac denkleminin özümü ve AIM ile pertürbasyon teorisinin kullanılması hakkında genel bilgi verildi. Dördüncü bölümde, AIM ile pertürbasyon teorisi kullanılarak, bir ve üç boyutta sınırlandırılmış salınıcı potansiyellerinde enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları elde edildi. Beřinci bölümde ise tüm bu alıřmaların sonuçları tartışıldı.

2. YAKLAŞIM METOTLARI

Bu bölümde Schrödinger denkleminin çözümlerine ulaşabilmek için kullanılan bazı yaklaşım metotlarının yapısı, işlevi ve önemi üzerinde durulmuştur.

2.1. Varyasyonel Metot

Zamandan bağımsız bir H hamiltoniyenin bağlı durum enerjilerini ve dalga fonksiyonlarını elde etmek için kullanılan çok yararlı olan bir yaklaşım metodudur[5]. Hamiltoniyenin özdeğerleri E_n ile ve buna karşılık gelen ortonormal öz fonksiyonları ψ_n ile gösterildiğinde ve H in en az bir kesikli özdeğere sahip olduğu varsayıldığında ϕ keyfi normalize edilebilen bir fonksiyon olduğunda $E[\phi]$ fonksiyonu;

$$E[\phi] = \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{\int \phi^* H \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau} \quad (2.1)$$

şeklinde olsun. Buradaki integrasyon sistemin tüm koordinatları üzerindedir. Eğer ϕ fonksiyonu H 'in tam doğru özfonksiyonları ψ_n den biri ile özdeş ise, $E[\phi]$ bu fonksiyona karşılık gelen tam E_n özdeğerine özdeştir. Eğer ϕ ve ψ_n küçük $\delta\phi$ değişimi kadar farklı iseler;

$$\phi = \psi + \delta\phi \quad (2.2)$$

$E[\phi]$ 'nin buna karşılık gelen birinci mertebe değişimi, $\delta E = 0$ olur ve H 'in özfonksiyonları, $\delta E = 0$ varyasyon denkleminin çözümü olurlar[6]. Bu ifadenin ispatı Eş.2.1'den;

$$\delta E \int \phi^* \phi d\tau = E \int \delta\phi^* \phi d\tau + E \int \phi^* \delta\phi d\tau = \int \delta\phi^* H \phi d\tau + \int \phi^* H \delta\phi d\tau \quad (2.3)$$

$$\int \delta\phi^* (H - E)\phi d\tau + \int \phi^* (H - E)\delta\phi d\tau = 0 \quad (2.4)$$

$\delta\phi$ ve $\delta\phi^*$ değişimleri bağımsız olmalarına rağmen böyle ifade edilebilirler. Bu denklemdaki bağımsız terimler sıfıra eşit alınabilir. Bunun nasıl geldiğini görmek için $\delta\phi$ değişimi $i\delta\phi$ ile değiştirilirse;

$$-i \int \delta\phi^* (H - E)\phi d\tau + i \int \phi^* (H - E)\delta\phi d\tau = 0 \quad (2.5)$$

elde edilir. Eş. 2.4 ve Eş. 2.5 birleştirildiğinde;

$$\int \delta\phi^* (H - E)\phi d\tau = 0 \quad (2.6.a)$$

$$\int \phi^* (H - E)\delta\phi d\tau = 0 \quad (2.6.b)$$

olduğu görülür. H 'in hermityen olduğu gerçeği kullanılırsa;

$$(H - E[\phi])\phi = 0 \quad (2.7)$$

elde edilir. Bu ifadenin Schrödinger denklemine özdeş olduğu görülmektedir. Buna göre Eş. 2.1'in kararlı olduğu herhangi bir $\phi = \psi_n$ fonksiyonu H 'in $E_n \equiv E[\psi_n]$ özdeğerine karşılık gelen özfonksiyonudur. Bunun karşıtı olarak eğer ψ_n , H 'in özfonksiyonu ise ve buna karşılık gelen enerji E_n ise $E_n \equiv E[\psi_n]$ ve $E[\psi_n]$ fonksiyonu kararlı olur. Çünkü ψ_n Eş. 2.6'yı sağlar. ϕ ve ψ_n , $\delta\phi$ kadar farklı iseler $\delta E = 0$ varyasyon ilkesi $E[\phi]$ ile gerçek özdeğer E_n arasındaki farkın en büyük teriminin $\delta\phi$ 'ye göre karesel olduğunu belirtir. Sonuçta Eş. 2.1 hesaplandığında yaklaşık enerjideki hatalar $\delta\phi$ 'ye göre ikinci mertebededir. Eş. 2.1 ϕ 'nin fazından ve normalizasyonundan bağımsızdır. Özellikle $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ koşulu altında $\langle \phi | H | \phi \rangle$ fonksiyonu değiştirilerek elde edilebilir[5]. Bu ifade şöyle gösterilebilir;

$$\delta \int \phi^* H \phi d\tau = 0 \quad (2.8.a)$$

$$\int \phi^* \phi d\tau = 1 \quad (2.8.b)$$

$\langle \phi | \phi \rangle = 1$ şartı ile değişim denklemleri;

$$\delta \left[\int \phi^* H \phi d\tau - E \int \phi^* \phi d\tau \right] = 0 \quad (2.9.a)$$

veya

$$\int \delta \phi^* (H - E) \phi d\tau + \int \phi^* (H - E) \delta \phi d\tau = 0 \quad (2.9.b)$$

şeklinde olur. Eş. 2.1'in başka bir önemli özelliği bunun tam taban durumu enerjisi E_0 'in üst sınırı olmasıdır. Bu sonucu ispatlamak için keyfi normalize edilebilen fonksiyonu ϕ fonksiyonuna H 'in ortonormal özfonksiyonları ψ_n tam takımı cinsinden alındığında;

$$\phi = \sum_n a_n \psi_n \quad (2.10)$$

ifadesi elde edilir. Bu ifade Eş. 2.1'de yerleştirilirse;

$$E[\phi] = \frac{\sum_n |a_n|^2 E_n}{\sum_n |a_n|^2} \quad (2.11)$$

bulunur. Bu denklemden en düşük enerji değeri E_0 çıkarılırsa;

$$E[\phi] - E_0 = \frac{\sum_n |a_n|^2 (E_n - E_0)}{\sum_n |a_n|^2} \quad (2.12)$$

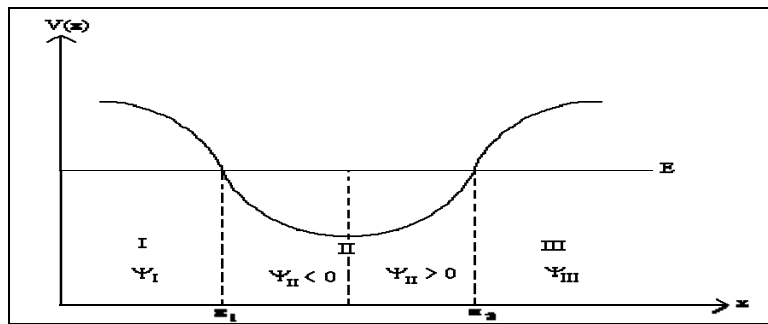
bulunur. Bu ifadede $E_n \geq E_0$ olduğu için denklemin sağ tarafı pozitifdir. Buna göre;

$$E_0 \leq E[\phi] \quad (2.13)$$

olur. $E[\phi]$ ifadesi bir üst sınırı (taban durumu enerjisi için minimum ilkesi) verir. Eş. 2.13'ün özelliği E_0 'ın yaklaşık hesabı için Rayleigh Ritz değiştirme yönteminin temelini oluşturmaktadır. Bu yöntem belli sayıda, değiştirilen değişkenlere bağlı olan ϕ deneme fonksiyonlarını kullanarak $E[\phi]$ büyüklüğünü değerlendirmek ve sonra ϕ 'nin seçilen biçimi ile E_0 'ın izin verilen en iyi yaklaşık değerini elde etmek için bu değişkenlere göre $E[\phi]$ 'yi minimum hale getirmekten ibarettir.

2.2. WKB (Wentzel, Kramers ve Brillouin) Metodu

Kuantum mekaniği problemlerini çözmek için klasik ifadelere düzeltmeler getiren yarıklasik bir yaklaşım olarak bilinen WKB metodunda, uzayın belli bir bölgesinde Schrödinger denklemi ile bu denklemin klasik limiti yer değiştirmiştir.



Şekil 2.1. Potansiyelin konuma göre değişimi

x_1 ve x_2 dönüm noktaları olmak üzere; $x_1 - x_2$ aralığında hareket eden bir parçacık olsun(Şekil 2.1). Parçacık bu aralıkta bir salınım hareketi yapar. Buraya Kuantum mekaniksel olarak bakıldığında tünelleme vardır. Klasik olarak bakılırsa tünelleme olayı olmadığından dolayı $V(x) > E$ olan bölgelerde parçacık yasaklıdır. Zamandan bağımsız Schrödinger denklemi;

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{p^2(x)}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (2.14)$$

şeklinde yazılır. Burada $p^2(x) = (2m(E - V(x)))$ şeklinde ifade edilir. Yarıklasik sistemlerde kullanılan WKB yaklaşım metodunda potansiyel $\hbar$ parametresinde bir bölgede hemen hemen sabit kalır[7]. Başka bir deyişle;

$$\left| \frac{d\hbar}{dx} \right| = \left| \frac{m\hbar}{P^3} \frac{dV}{dx} \right| \quad (2.15)$$

olmalıdır. Bu ifadeden WKB metodunun uygulanabilirlik şartının;

$$\frac{1}{2} \left| \hbar \frac{dV(x)}{dx} \right| \ll \frac{|p(x)|^2}{2m} \quad (2.16)$$

olduğu görülmektedir. Bu eşitsizlikten, WKB yaklaşımı için gerekli olan şartın büyük momentum ve yavaş değişen bir potansiyel olduğu görülmektedir. Bundan dolayı $\psi(x)$ dalga fonksiyonunun formu;

$$\psi(x) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x)\right) \quad (2.17)$$

şeklinde serbest çözümün formuna benzer. Bu ifade Eş. 2.14'de yerine yazılırsa;

$$-i\hbar S''(x) + S'(x)^2 = 2m(E - V(x)) \quad (2.18)$$

ifadesi bulunur. Burada $2m(E - V(x)) = p^2(x)$ dır. Başka bir deyişle WKB yaklaşımı Eş. 2.18'in kararlı durum dalga fonksiyonunu belirleyen $S(x)$ fonksiyonu için yaklaşık bir çözüm metodudur. Bu yüzden denklemin çözümü için $S(x)$, $\hbar$ 'in kuvvetleri cinsinden seriye açılır;

$$S(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hbar^k}{k!} S_k(x) \quad (2.19)$$

buna göre $S(x)$ fonksiyonunun açılımı;

$$S(x) = \mp \hbar \int k(x) dx + \frac{i\hbar}{2} \ln(\hbar k(x)) + \dots \quad (2.20)$$

şeklinde olur. Bu ifade Eş. 2.17'de yerine yazılırsa;

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\mp \hbar \int k(x) dx + \frac{i\hbar}{2} \ln(\hbar k(x)) + \dots\right)\right) \quad (2.21)$$

elde edilir. Buradan;

$$\psi(x) = \frac{A}{k^{1/2}} \exp(i \int k(x) dx) + \frac{B}{k^{1/2}} \exp(-i \int k(x) dx) \quad (2.22)$$

şeklinde serbest parçacık formuna benzer. Şekil(2.1)'de görüldüğü gibi dalga fonksiyonu süreklidir. Burada x_1, x_2 ; $E = V(x)$ 'in kökleridir ve aynı zamanda klasik dönüm noktalarıdır. $V(x)$, x_1 civarında seriye açılarak, Eş. 2.14'de yerine yazılırsa;

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - y\psi = 0 \quad (2.23)$$

denklemini elde edilir. Burada $F_1 = -\frac{dV(x)}{dx} \Big|_{x_1} (x - x_1)$ şeklindedir ve

$$y = -\left(\frac{2mF_1}{\hbar^2}\right)^{1/3} (x - x_1) \text{ dönüşümü yapılmıştır. } y \rightarrow \infty \text{ ya da } x \rightarrow -\infty \text{ asimptotik}$$

olan çözümleri verir. Aynı şekilde $V(x)$ x_2 civarında seriye açılarak;

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - y\psi = 0 \quad (2.24)$$

denklemini elde edilir. Burada $F_2 = \frac{dV(x)}{dx} \Big|_{x_2} (x - x_2)$ şeklindedir ve

$$y = \left(\frac{2mF_2}{\hbar^2}\right)^{1/3} (x - x_2) \text{ dönüşümü yapılmıştır. } y \rightarrow \infty \text{ ya da } x \rightarrow \infty \text{ asimptotik olan}$$

çözümleri verir. Eş. 2.23 ve Eş. 2.24 Airy diferansiyel denklemleri olarak bilinir. Bu denklemlerin çözümleri Airy fonksiyonudur. Buna göre bu denklemlerin çözümleri;

$$A_i(y) \cong \frac{1}{2\sqrt{\pi}y^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\right)y^{3/2} \quad y > 0 \quad (2.25.a)$$

$$A_i(y) \cong \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-y)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad y < 0 \quad (2.25.b)$$

olur. x_1 'den sola doğru çok uzağa gidilirse dalga fonksiyonu;

$$\psi_1(x) = \frac{1}{k^{1/2}} \exp\left(\int_{x_1}^x k(x)dx\right) \quad (2.26)$$

x_2 'den sağa doğru çok uzağa gidilirse dalga fonksiyonu;

$$\psi_3(x) = \frac{A}{\kappa^{1/2}} \exp\left(-\int_{x_2}^x \kappa(x) dx\right) \quad (2.27)$$

Ara bölgede iken;

$$\psi_2^<(x) = \frac{B}{k^{1/2}} \sin\left(\int_{x_1}^x k(x) dx + \delta\right) \quad (2.28.a)$$

$$\psi_2^>(x) = \frac{C}{k^{1/2}} \sin\left(\int_x^{x_2} k(x) dx + \delta\right) \quad (2.28.b)$$

δ : Faz farkı

şeklinde bulunur. Eş. 2.25.a ve Eş. 2.25.b ile Eş. 2.28.a ve Eş. 2.28.b kıyaslanırsa;

$$\psi_2^<(x) = \frac{2}{k^{1/2}} \sin\left(\int_{x_1}^x k(x) dx + \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.29.a)$$

$$\psi_2^>(x) = \frac{2A}{k^{1/2}} \sin\left(\int_x^{x_2} k(x) dx + \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.29.b)$$

ifadeleri bulunur. İkinci bölgede $\psi_2^<(x)$ ile $\psi_2^>(x)$ ortada bir yerde birbirine eşit olmalıdır. Bu ifadeden;

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \pi \quad (2.30.a)$$

$$\oint p(x)dx = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2}) \quad (2.30.b)$$

şeklinde Bohr Summerfield kuantumlanma koşulu elde edilir. Bu durumdan hareketle yarıklasik sistemlerde bağlı durumların E_n enerjileri hesaplanır[7,8]. Dolayısıyla WKB metodu yarıklasik bir yöntem olarak değerlendirilir.

2.3. Kaydırılmış 1/N Açılım Metodu

Herhangi bir küresel simetrik potansiyelde kaydırılmış 1/N açılımı, Schrödinger denkleminin enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlarını elde edebilmek için kullanışlı ve kesin analitik ifadeler verir[1,9,10]. $\bar{k}$ kaydırılmış açılım parametresi;

$$\bar{k} = N + 2l - a \quad (2.31)$$

olmak üzere;

N: uzaysal boyut sayısı

l : açılmal kuantum sayısı

a: kaydırma parametresi(uygun bir kayma)

şeklinde tanımlanır. Buna $1/N$ ya da $1/\bar{k}$ metodu denir. Kaydırılmamış açılım parametresi;

$$k = N + 2l \quad (2.32)$$

şeklinde a kaydırma parametresi kullanılarak elde edilen sonuçlar, kaydırılmamış açılım parametresi ($1/k$) kullanılarak elde edilen sonuçlardan daha iyidir[9,10]. Enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlarını belirlemek için Schrödinger denkleminin küresel simetrik potansiyelleri için çözümü gerekir. N boyutta çalışmak ve $1/N$

pertürbasyon açılım parametresini kullanmak avantajlıdır. Bu büyük-N tekniği Schrödinger denkleminin çözümünde yeni bir yol türetir. $V(r)$ keyfi küresel simetrik potansiyel olmak üzere, N uzaysal boyutta radyal denklem;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{(k-1)(k-3)\hbar^2}{8mr^2} + V(r)\right]\Psi(r) = E\Psi(r) \quad (2.33)$$

şeklindedir. Burada $k = N + 2l$ dır. Kaydırma terimi $\bar{k} = k - a$ denklemde yerine yazılırsa;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\bar{k}^2 \left[1 - (1-a)/\bar{k}\right] \left[1 - (3-a)\bar{k}\right] \hbar^2}{8mr^2} + V(r)\right]\Psi(r) = E\Psi(r) \quad (2.34)$$

denklemini elde edilir. $V(r)$ potansiyelinin en küçük k limiti uygun tanımlanmadıkça, $1/\bar{k}$ açılımından faydalı sonuçlar elde edilemez. Enerjiye sebep olan katkı effective(etkin) potansiyelden gelir[1,9]. Eş. 2.34 düzenlenirse;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} + \bar{k}^2 \left[\frac{\hbar^2 \left[1 - (1-a)/\bar{k}\right] \left[1 - (3-a)\bar{k}\right]}{8mr^2} + \frac{V(r)}{Q} \right] \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (2.35)$$

denklemini elde edilir. Bu ifadede; $\bar{k} = \sqrt{Q}$ olmak üzere etkin potansiyel;

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2}{8mr^2} + \frac{V(r)}{Q} \quad (2.36)$$

şeklindedir. $V_{eff}(r)$ bir minimuma sahip olduğunda $V(r)$ 'nin etkin davranış gösterdiği düşünülerek sınır durumları belirlenir. r_0 'ın minimum durumları izinlidir. Bundan yola çıkılarak;

$$\hbar^2 Q = 4mr_0^3 V'(r_0) \quad (2.37)$$

bulunur. Eş. 2.31'den enerjideki katkı terimi;

$$\bar{k}^2 V_{eff}(r_0) = \frac{\bar{k}^2}{r_0^2} \left[\frac{\hbar^2}{8m} + \frac{r_0^2 V(r_0)}{Q} \right] \quad (2.38)$$

şeklinde bulunur[1]. $r = r_0$ için koordinatların orijine kaydırılması uygundur;

$$x = \frac{\bar{k}^{1/2}}{r_0} (r - r_0) \quad (2.39)$$

Bu ifade $x = 0$ civarında seriye açılarak Eş. 2.35'de kullanılırsa;

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\bar{k}\hbar^2}{8m} \left[1 + \frac{3x^2}{\bar{k}} - \frac{4x^3}{\bar{k}^{3/2}} + \frac{5x^4}{\bar{k}^2} - \dots \right] - \frac{(2-a)\hbar^2}{4m} \left[1 - \frac{2x}{\bar{k}^{1/2}} + \frac{3x^2}{\bar{k}} - \dots \right] \\ & + \frac{(1-a)(3-a)\hbar^2}{8m\bar{k}} \left[1 - \frac{2x}{\bar{k}^{1/2}} + \frac{3x^2}{\bar{k}} - \dots \right] + \frac{r_0^2 \bar{k}}{Q} \left[V(r_0) + \frac{V''(r_0)r_0^2 x^2}{2\bar{k}} + \frac{V'''(r_0)r_0^3 x^3}{6\bar{k}^{3/2}} + \dots \right] \phi = \frac{Er_0}{\bar{k}} \phi \end{aligned} \quad (2.40)$$

elde edilir. Eş. 2.40'de;

$$\omega = \left[\frac{3\hbar^2}{4m^2} + \frac{r_0^4 V''(r_0)}{mQ} \right]^{1/2} = \frac{\hbar}{2m} \left[3 + \frac{r_0 V''(r_0)}{V'(r_0)} \right]^{1/2}, \quad (2.41)$$

$$g = \frac{1}{\bar{k}}, \lambda = \frac{Er_0^2}{\bar{k}},$$

$$\epsilon_0 = \frac{\hbar\bar{k}}{8m} - \frac{(2-a)\hbar^2}{4m} + \frac{\hbar^2(1-a)(3-a)}{8m\bar{k}} + \frac{r_0^2 \bar{k} V(r_0)}{Q}, \quad (2.42.a)$$

$$\epsilon_1 = \frac{(2-a)\hbar^2}{2m}, \quad (2.42.b)$$

$$\epsilon_2 = \frac{-3\hbar^2(2-a)}{4m}, \quad (2.42.c)$$

$$\epsilon_3 = \frac{-\hbar^2}{2m} + \frac{r_0^5 V'''(r_0)}{6Q}, \quad (2.42.d)$$

$$\epsilon_4 = \frac{5\hbar^2}{8m} + \frac{r_0^6 V''''(r_0)}{24Q}, \quad (2.42.e)$$

$$\delta_1 = \frac{-(1-a)(3-a)\hbar^2}{4m}, \quad (2.43.a)$$

$$\delta_2 = \frac{3(1-a)(3-a)\hbar^2}{8m}, \quad (2.43.b)$$

$$\delta_3 = \frac{(2-a)\hbar^2}{m}, \quad (2.43.c)$$

$$\delta_4 = \frac{-5(2-a)\hbar^2}{4m}, \quad (2.43.d)$$

$$\delta_5 = \frac{-3\hbar^2}{4m} + \frac{r_0^7 V'''''(r_0)}{120Q}, \quad (2.43.e)$$

$$\delta_6 = \frac{7\hbar^2}{8m} + \frac{r_0^8 V''''''(r_0)}{720Q}, \quad (2.43.f)$$

olmak üzere;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \epsilon_0 + V(x) \right] \psi(x) = \lambda \psi(x) \quad (2.44)$$

$$V(x) = g^{1/2}(\epsilon_1 x + \epsilon_3 x^3) + g(\epsilon_2 x^2 + \epsilon_4 x^4) + g^{3/2}(\delta_1 x + \delta_3 x^3 + \delta_5 x^5) + g^2(\delta_2 x^2 + \delta_4 x^4 + \delta_6 x^6) \quad (2.45)$$

ifadesi elde edilir. Logaritmik pertürbasyon teorisi kullanılarak;

$$\lambda_0 = \lambda_0^{(0)} + \lambda_0^{(1)} + \lambda_0^{(2)} + \dots \quad (2.46)$$

$$\lambda_0^{(0)} = \epsilon_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (2.47)$$

şeklinde enerji seviyeleri,

$$\psi_0 = \psi_0^{(0)} + \psi_0^{(1)} + \psi_0^{(2)} + \dots \quad (2.48)$$

$$S_i(x) = \int_0^x C_i(x), \quad i = 1, 2, \dots \quad (2.49)$$

$$\psi_0^{(0)}(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}, \quad \alpha \equiv m\omega/\hbar \quad (2.50)$$

$$\psi_0(x) = \exp\left[\sum_{i=1}^{\infty} S_i(x)\right] \psi_0^{(0)}(x) \quad (2.51)$$

şeklinde dalga fonksiyonu bulunur. Bu ifadeler r_0, Q ve a kayması gelince dalga fonksiyonu ψ_0 ve enerji özdeğerleri E_n için kaydırılmış $1/N$ açılımının bir ifadesini verir. Enerjideki katkı Eş. 2.38 ile verilen $\bar{k}^2 V_{eff}(x)$ 'dir. Sonraki katkı $\bar{k}$ mertebesinde ve a kaydırma parametresi;

$$a = 2 - 2(2n+1) \frac{m\omega}{\hbar} \quad (2.52)$$

şeklindedir. Bu ifadeden;

$$\bar{k} = N + 2l - 2 + (2n + 1) \left\{ 3 + \frac{r_0 V''(r_0)}{V'(r_0)} \right\}^{1/2} \quad (2.53)$$

bulunur. Eş. 2.37 ve Eş. 2.53 eşitlenerek r_0 değeri belirlenir. Eş. 2.37'den Q değeri bulunur. Bu enerji özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını hesaplamak için önemlidir. r_0 , radyal kuantum sayısı n 'ye bağlıdır. n değeri arttıkça E_n enerji sonuçlarının giderek bozulması beklenir. Çünkü enerji ifadesindeki tüm kısmi toplamalar n 'in büyük değerlerinde temel durum seviyesindeki gibi davranan terimleri içerir. Böylece kısmi toplamlardan gelen ardışık katkılar azalmayabilir ve serilerin yakınsama problemi ortaya çıkar. Buna rağmen birçok fiziksel potansiyelin sonuçları için kaydırılmış $1/N$ açılımı n 'in büyük değerlerinde çok iyi sonuçlar verir[1,9,10].

2.4. Riccati-Pade Metodu

Riccati-Pade metodu merkezi potansiyellerde ve değişmez parite için Schrödinger denkleminin enerji özdeğerlerinin alt ve üst sınırlarını elde etmek için tanımlanmıştır[11,12,13]. Yöntem Schrödinger denklemini logaritmik türev ile ilgili olan Riccati denklemine dönüştürmeye daha sonra bu denklemi Pade serisiyle çözmeye dayanır. Yaklaşık enerji özdeğerleri ilgili determinantın köklerinden elde edilir ve asıl enerji özdeğerleri alt ve üst sınırlarda elde edilir[2]. $V(x) = V(-x)$ durumunda zamandan bağımsız Schrödinger denklemi;

$$\psi''(x) = [V(x) - E]\psi(x) \quad (2.54)$$

şeklindedir. Tek durumda $s=0$, çift durumda $s=1$ olmak üzere dalga fonksiyonu;

$$\phi(x) = x^{-s}\psi(x) \quad (2.55)$$

şeklinde alınarak logaritmik türev olan ve Eş. 2.54'ün bütün öz durumları için düzenli olan;

$$f(x) \equiv \frac{[\phi(x)]'}{\phi(x)} \quad (2.56)$$

dönüşümü uygulanırsa Schrödinger denklemi;

$$[f(x)]' - f(x)^2 + 2sf(x)/x = E - V(x) \quad (2.57)$$

şeklinde Riccati denklemine dönüşür[11]. $V(x)$ potansiyeli;

$$V(x) = \sum_{j=1}^k v_j x^{2j}, \quad v_k > 0 \quad (2.58)$$

formunda alınarak Eş. 2.55 orijin civarında Taylor serisine açılır;

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j x^{2j+1} \quad (2.59)$$

Eş. 2.58 ve Eş. 2.59 Riccati denklemine uygulanırsa;

$$f_j = (2j + 2s + 1)^{-1} \left[\sum_{i=0}^{j-1} f_j f_{j-i-1} + E \delta_{j0} - \sum_{i=1}^k v_i \delta_{ij} \right] \quad (2.60)$$

denklemini elde edilir. Bu denklemden f_j katsayıları bulunur. f_j katsayılarının bir polinom belirttiği açıkça görülmektedir. Rasyonel bir yaklaşımda bulunulursa;

$$g(x) = \frac{A(x)}{B(x)}, \quad (2.61)$$

$$A(x) = \sum_{j=0}^M a_j x^{2j+1}, \quad B(x) = \sum_{j=0}^N b_j x^{2j}, \quad b_0 = 1 \quad (2.62)$$

şeklindedir. Eğer $g(x)$ tam bir Pade yaklaşımı ise; $f(x) - g(x) = O(x^{2(M+N)+3})$ olmalıdır[14]. Enerji sınır değerleri bilinmediğinden bu ifade ayarlanılabilir bir parametre olarak düşünülebilir. Bu yöntemle göre $f(x) - g(x) = O(x^{2(M+N)+5})$ almak daha uygundur. Çünkü bu yolla $g(x)$ Riccati denkleminin çözümüne $x = 0$ civarında daha açık yaklaşır[2]. Bu koşullar altında a_j ve b_j katsayıları;

$$\sum_{i=0}^j b_i f_{j-i} = a_j, \quad j = 0, 1, \dots, M, \quad (2.63.a)$$

$$\sum_{i=0}^j b_i f_{j-i} = 0, \quad j = M+1, M+2, \dots, M+N+1 \quad (2.63.b)$$

şeklinde verilir. Burada $i > N$ ise $b_i = 0$ dır. $d = M - N \geq 0$ ve $D = N + 1$ olmak üzere Eş. 2.63.b'den;

$$H_D^d = \begin{vmatrix} f_{d+1} & f_{d+2} & \cdots & f_{d+D} \\ f_{d+2} & f_{d+3} & \cdots & f_{d+D+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_{d+D} & f_{d+D+1} & \cdots & f_{d+2D-1} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.64)$$

determinantı elde edilir. D artışıyla asıl enerji özdeğerleri DXD determinantının köklerinin bir noktada birleşmesiyle bulunulur[13].

2.5. Hill Determinant Metodu

Hill determinant metodu belli potansiyellerde Schrödinger denkleminin enerji özdeğerlerini elde etmek için kullanılır. Yöntem Schrödinger denkleminin dalga

fonksiyonunu Hill-Taylor yaklaşımını kullanarak ilgili determinanti elde edip bu determinantın köklerinden enerji özdeğerlerini bulmaya dayanır. Herhangi bir $V(x)$ potansiyelinde zamandan bağımsız Schrödinger denklemi;

$$\psi''(x) + [E - V(x)]\psi(x) = 0 \quad (2.65)$$

şeklindedir. Denklemin dalga fonksiyonu;

$$\psi(x) = \phi(x) \exp(f(x)) \quad (2.66)$$

olarak alınılabilir. Burada $\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^{2n+\nu}$ şeklinde gösterilebilir. $\sum_{n=0}^{\infty} C_n x^{2n+\nu}$

açılımı Hill-Taylor yaklaşımı için tipik bir gösterimdir[15]. Bu ifadede genellikle $\nu = 0$ için sonuçlar tam çıkar[15,16,17]. $f(x)$ ise uygulanan potansiyele göre belirlenen x 'e bağlı bir polinom belirtir[18]. Bu ifadeler Eş.2.65'e uygulanırsa;

$$\dots + b_n C_{n+1} + a_n C_n + c_n C_{n-1} + d_n C_{n-2} + \dots = 0, n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.67)$$

şeklinde bir tekrarlama bağıntısı elde edilir. Buradaki a_n, b_n, c_n, d_n ifadeleri kullanılan potansiyele ve enerji değerlerine bağlıdır. $k = 1, 2, 3, \dots$ olmak üzere $C_{-k} = 0$ 'dır[16,17,18]. Eş.2.67'nin katsayılarından;

$$D_N = \begin{vmatrix} a & b & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ c_1 & a_1 & b_1 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ d_2 & c_2 & a_2 & b_2 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & d_{N-1} & c_{N-1} & a_{N-1} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.68)$$

determinantı elde edilir. $\det D_N = 0$ özdeğer şartı ile sistemin özdeğerleri $N \times N$ determinantının köklerinden bulunur[17,18,19].

2.6. Pertürbasyon Teorisi

Küçük değişimler teorisidir. Pertürbasyonlar bir elektromagnetik alan tarafından dışarıdan verilebilir. Pertürbasyon teorisinde pertürbe olmamış hamiltoniyeinin enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları tam olarak bilindiği varsayılır. Bu hamiltoniyein bir ek terim ile pertürbe edilerek az da olsa değiştirilir. Bu değişim ile yeni enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları elde edilir. Bu teoreinin en geniş uygulama alanı atom fiziği ve parçacık fiziğinde bulunur[6]. Atomların enerji seviyeleri kuantumlu bölge, sürekli bölge olmak üzere iki biçimde ele alınır. Bu nedenle pertürbasyon ;

1. Bağımlı durumların pertürbasyonu
2. Sürekli bölge pertürbasyonu (saçılma teoreisi)

olmak üzere iki bölümde ele alınır. Bağımlı durumların pertürbasyonu da zamandan bağımsız ve zamana bağımlı olmak üzere iki başlık altında toplanır. Pertürbasyon teorisinde; pertürbe olmamış hamiltoniyein $H^{(0)}$ ile pertürbasyon hamiltoniyeini $H^{(1)}$ arasında $H^{(1)} \ll H^{(0)}$ ilişkisi vardır.

2.6.1. Dejenere olmayan ve durağan bir seviyenin zamandan bağımsız pertürbasyonu

Bu konu literatürde Rayleigh-Schrödinger pertürbasyonu olarak bilinmektedir. Burada dejenere olmayan bir enerji seviyesinin zamandan bağımsız pertürbasyon operatörü etkisi ile değerindeki değişimler ve aynı zamanda dalga fonksiyonundaki değişimler incelenmektedir. Bir sistemin toplam hamiltoniyeini;

$$H = H^{(0)} + H^{(1)} = H^{(0)} + \lambda H' \quad (2.69)$$

olup bunun çözümleri için;

$$E_n = E_n^{(0)} + \Delta E_n, \quad (2.70.a)$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \Delta \psi_n \quad (2.70.b)$$

denklemleri yazılabilir. Burada $\lambda, 1 \geq \lambda \geq 0$ aralığında düzeltme parametresi denen bir sabittir. ΔE_n enerjide, $\Delta \psi_n$ dalga fonksiyonunda pertürbasyon teriminin etkisi ile oluşan değişiklikleri ifade eder. Pertürbe olmuş operatörün herhangi bir ψ_n özfonksiyonu, pertürbe olmamış fonksiyonlar cinsinden;

$$\psi_n = \sum_{k=1}^{\infty} a_{nk} \psi_k^{(0)} \quad (2.71)$$

olarak yazılır. Burada a_{nk} , k'inci pertürbe olmamış dalga fonksiyonunun, pertürbe olmuş n'inci fonksiyona katkısını belirtir. $\lambda \rightarrow 0$ iken pertürbe olmuş ve olmamış kavramlar arasında;

$$H \xrightarrow{(\lambda \rightarrow 0)} H^{(0)} \quad (2.72.a)$$

$$E_n \xrightarrow{(\lambda \rightarrow 0)} E_n^{(0)} \quad (2.72.b)$$

$$\psi_n \xrightarrow{(\lambda \rightarrow 0)} \psi_n^{(0)} \quad (2.72.c)$$

$$a_{nk} \xrightarrow{(\lambda \rightarrow 0)} \delta_{nk} \quad (2.72.d)$$

şeklinde bir karşılık gelme vardır. Bu sebeple ψ_n dalga fonksiyonu ve E_n pertürbe olmuş enerji $\lambda = 0$ civarında;

$$\psi_n = \varphi_n^{(0)} \lambda^0 + \varphi_n^{(1)} \lambda^1 + \varphi_n^{(2)} \lambda^2 + \dots \quad (2.73.a)$$

$$E_n = A_n^{(0)} \lambda^0 + A_n^{(1)} \lambda^1 + A_n^{(2)} \lambda^2 + \dots \quad (2.73.b)$$

şeklinde Taylor serisine açılabilir. Eş.2.69, Eş.2.73.a ve Eş.2.73.b ifadeleri;

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad (2.74)$$

ifadesinde kullanılarak;

$$\lambda^0 \text{ için: } H^{(0)}\varphi_n^{(0)} = A_n^{(0)}\varphi_n^{(0)} \quad (2.75.a)$$

$$\lambda^1 \text{ için: } H^{(0)}\varphi_n^{(1)} + H'\varphi_n^{(0)} = A_n^{(0)}\varphi_n^{(1)} + A_n^{(1)}\varphi_n^{(0)} \quad (2.75.b)$$

$$\lambda^2 \text{ için: } H^{(0)}\varphi_n^{(2)} + H'\varphi_n^{(1)} = A_n^{(0)}\varphi_n^{(2)} + A_n^{(1)}\varphi_n^{(1)} + A_n^{(2)}\varphi_n^{(0)} \quad (2.75.c)$$

eşitlikleri elde edilir[6]. Burada λ^0 sıfıncı merteye, λ^1 birinci merteye, λ^2 ikinci merteye düzeltme terimleridir. Bu ifadeler kullanılarak $\delta_{kn} = \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle$ olmak üzere birinci mertebeden yaklaşım durumunda;

$$a_{nk}^{(1)}E_k^{(0)} + \langle \psi_k^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)}a_{nk}^{(1)} + A_n^{(1)}\delta_{kn} \quad (2.76)$$

ifadesi elde edilir. Burada $k = n$ iken;

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle \quad (2.77)$$

olur. $E_n^{(1)}$: Herhangi bir n . seviyeye pertürbasyondan gelen 1. merteye düzeltme terimidir. Pertürbe edilmiş enerji;

$$E_n \cong E_n^{(0)} + \langle \psi_n^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle \quad (2.78)$$

şeklinde bulunur. $k \neq n$ iken k .pertürbe olmuş dalga fonksiyonuna katkısı;

$$a_{nk}^{(1)} = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (2.79)$$

şeklindedir. Bu durumda birinci mertebeden pertürbe olmuş n . dalga fonksiyonu;

$$\psi_n \cong \psi_n^{(0)} + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)} \quad (2.80)$$

şeklindedir. İkinci mertebeden yaklaşım durumunda enerji ve dalga fonksiyonlarına ikinci mertebeden yaklaşım ek terimleri gelir. Pertürbe edilmiş enerji;

$$E_n \cong E_n^{(0)} + \langle \psi_n^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \psi_k^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (2.81)$$

şeklindedir. Dalga fonksiyonu ise;

$$\begin{aligned} \psi_n \cong \psi_n^{(0)} + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)} \\ + \sum_{k \neq n} \left\{ \left[\sum_{\substack{m \neq k \\ m \neq n}} \frac{H_{km}^{(1)} H_{mn}^{(1)}}{(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} - \frac{H_{kn}^{(1)} H_{nn}^{(1)}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \right] \psi_k^{(0)} \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \frac{|H_{kn}^{(1)}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \psi_n^{(0)} \right\} \end{aligned} \quad (2.82)$$

şeklinde olur[6].

3. TEMEL BİLGİLER

İkinci dereceden homojen lineer diferansiyel denklemler matematiksel fizikte birçok alanda kullanılmaktadır. Bu denklemlerin çözümü için literatürde birçok metod mevcuttur. Asimptotik iterasyon metodu(AIM) bu denklemlerin çözümü için kullanılan yeni bir yaklaşım metodudur. Bu yöntem bilgisayar algoritmasına uygun olduğu için direk kullanılabilen ayrıca sonuçlara kısa sürede ulaşılabilen kullanışlı bir yöntemdir.

Bu kısımda asimptotik iterasyon metodunun(AIM) yapısı, bu metodun dirac denklemine uygulanışı ve pertürbasyon teorisine uygulanışı üzerinde durulmuştur.

3.1. Asimptotik İterasyon Metodu

AIM’da ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklemin formu;

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

şeklindedir[3,20]. $\lambda_0(x)$ ve $s_0(x)$ türevlenebilir fonksiyonlar olmak üzere Eş. 3.1’in x ’e göre birinci dereceden türevi alınır;

$$y''' = \lambda_1(x)y' + s_1(x)y \quad (3.2)$$

elde edilir. Burada $\lambda_1 = \lambda_0' + s_0 + \lambda_0^2$ ve $s_1 = s_0' + s_0\lambda_0$ şeklindedir. Eş. 3.1’in ikinci dereceden türevi alınır;

$$y'''' = \lambda_2(x)y' + s_2(x)y \quad (3.3)$$

ifadesi bulunur. Burada $\lambda_2 = \lambda_1' + s_1 + \lambda_0 \lambda_1$ ve $s_2 = s_1' + s_0 \lambda_1$ şeklindedir. Böylece $(n+1)$ 'inci ve $(n+2)$ 'inci türevleri $n = 1, 2, \dots$ olmak üzere;

$$y^{(n+1)} = \lambda_{n-1}(x)y' + s_{n-1}(x)y \quad (3.4)$$

ve

$$y^{(n+2)} = \lambda_n(x)y' + s_n(x)y \quad (3.5)$$

olur. Buradan;

$$\lambda_n = \lambda_{n-1}' + s_{n-1} + \lambda_0 \lambda_{n-1}$$

$$s_n = s_{n-1}' + s_0 \lambda_{n-1} \quad (3.6)$$

şeklinde iterasyon formülleri elde edilir[3,21]. $(n+1)$ 'inci ve $(n+2)$ 'inci türevler oranlandığında;

$$\frac{d}{dx} \ln(y^{n+1}) = \frac{y^{(n+2)}}{y^{(n+1)}} = \frac{\lambda_n \left(y' + \frac{s_n}{\lambda_n} y \right)}{\lambda_{n-1} \left(y' + \frac{s_{n-1}}{\lambda_{n-1}} y \right)} \quad (3.7)$$

olur. Yeterince büyük n değeri için eğer;

$$\frac{s_n}{\lambda_n} = \frac{s_{n-1}}{\lambda_{n-1}} \equiv \alpha \quad (3.8)$$

şartı sağlanıyor ise, Eş. 3.7'den ;

$$\frac{d}{dx} \ln(y^{n+1}) = \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} \quad (3.9)$$

ifadesi elde edilir. Bu denklemin çözümü;

$$y^{(n+1)}(x) = C_1 \exp\left(\int^x \frac{\lambda_n(t)}{\lambda_{n-1}(t)} dt\right) = C_1 \lambda_{n-1} \exp\left(\int^x (\alpha + \lambda_0) dt\right) \quad (3.10)$$

şeklindedir [3]. Burada C_1 integrasyon sabitidir ve Eş. 3.6 kullanılarak α tanımlanır. Eş. 3.10'da Eş. 3.4 kullanılarak;

$$y' + \alpha y = C_1 \exp\left(\int^x (\alpha + \lambda_0) dt\right) \quad (3.11)$$

şeklinde birinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklem elde edilir. Buna göre Eş. 3.1'in genel çözümü;

$$y(x) = \exp\left(-\int^x \alpha dt\right) \left[C_2 + C_1 \int^x \exp\left(\int^t (\lambda_0(\tau) + 2\alpha(\tau)) d\tau\right) dt \right] \quad (3.12)$$

şeklinde elde edilir.

Teorem: λ_0 ve s_0 türevlenebilir fonksiyon olmak üzere;

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

şeklinde verilirse, $n > 0$ iken denklemin çözülebilirlik şartı;

$$\frac{s_n}{\lambda_n} = \frac{s_{n-1}}{\lambda_{n-1}} \equiv \alpha \quad (3.13)$$

şeklindedir. Burada $k = 1, 2, \dots, n$ iken;

$$\lambda_k = \lambda'_{k-1} + s_{k-1} + \lambda_0 \lambda_{k-1} \text{ ve } s_k = s'_{k-1} + s_0 \lambda_{k-1} \quad (3.14)$$

şeklinde iterasyon formülü elde edilir. Buradan;

$$\delta(x) = s_n(x) \lambda_{n+1}(x) - s_{n+1}(x) \lambda_n(x) = 0 \quad (3.15)$$

elde edilir. $\delta(x)$ fonksiyonunun sınır değer problemlerinde çok önemli rolü vardır. $\delta(x, E)$ enerjiye bağlı olduğundan $\delta(x, E) = 0$ değeri (bilinmeyen) enerji özdeğerlerini verir[3,20,21].

3.2. Asimptotik İterasyon Metodu ile Dirac Denklemi

Merkezi bir alanda $\hbar = c = 1$ olmak üzere d boyutta dirac denklemi;

$$i \frac{d\psi}{dt} = H \psi, \quad H = \sum_{j=1}^d \alpha_j p_j + \beta [m + U(r)] + V(r) \quad (3.16)$$

şeklindedir. Burada; m taneciğin kütlesi, $V(r)$ küresel simetrik vektörel potansiyel, $U(r)$ küresel simetrik skaler potansiyel ve $\{\alpha_j\}$ ile β komütatif olmayan Dirac matrisleridir. Bazı matematiksel hesaplamalardan sonra birinci dereceden lineer diferansiyel denklem çifti;

$$\frac{dG}{dr} = -\frac{k_d}{r} G + [E + m - V(r) + U(r)] F, \quad (3.17)$$

$$\frac{dF}{dr} = -[E - m - V(r) - U(r)] G + \frac{k_d}{r} F \quad (3.18)$$

şeklinde elde edilir[22]. Bunlar $k_d = \tau[j + (d - 2)/2]$ ve $\tau = \pm 1$ olmak üzere d boyutta radyal Dirac denklemleridir. Bu ifadelerden elde edilen birinci dereceden lineer diferansiyel denklem çifti;

$$\phi_1' = \lambda_0(x)\phi_1 + s_0(x)\phi_2 \quad (3.19)$$

$$\phi_2' = \omega_0(x)\phi_1 + p_0(x)\phi_2 \quad (3.20)$$

şeklindedir[22]. Burada $\lambda_0(x), s_0(x), \omega_0(x)$ ve $p_0(x)$ x 'e göre türevlenebilir fonksiyonlardır. Eğer Eş. 3.19 ve Eş. 3.20'nin x 'e göre türevi alınırsa;

$$\phi_1'' = \lambda_1(x)\phi_1 + s_1(x)\phi_2 \quad (3.21)$$

$$\phi_2'' = \omega_1(x)\phi_1 + p_1(x)\phi_2 \quad (3.22)$$

bulunur. Burada;

$$\lambda_1 = \lambda_0' + \lambda_0^2 + s_0\omega_0,$$

$$s_1 = s_0' + \lambda_0 s_0 + s_0 p_0,$$

$$\omega_1 = \omega_0' + \lambda_0 \omega_0 + p_0 \omega_0,$$

$$p_1 = p_0' + p_0^2 + s_0 \omega_0$$

şeklindedir. Benzer şekilde $n = 1, 2, \dots$, olmak üzere $(n + 2)$ 'inci dereceden türevi hesaplanırsa;

$$\phi_1^{n+2} = \lambda_{n+1}(x)\phi_1 + s_{n+1}(x)\phi_2 \quad (3.23)$$

$$\phi_2^{n+2} = \omega_{n+1}(x)\phi_1 + p_{n+1}(x)\phi_2 \quad (3.24)$$

bulunur. Burada;

$$\lambda_{n+1} = \lambda'_n + \lambda_n \lambda_0 + s_n \omega_0,$$

$$s_{n+1} = s'_n + \lambda_n s_0 + s_n p_0,$$

$$\omega_{n+1} = \omega'_n + \omega_n \lambda_0 + p_n \omega_0,$$

$$p_{n+1} = p'_n + \omega_n s_0 + p_n p_0$$

şeklindedir. Buradan ϕ_1 'in $(n + 2)$ 'inci ve $(n + 1)$ 'inci türevlerinin birbirine oranı;

$$\frac{d}{dx} \ln(\phi_1^{(n+1)}) = \frac{\phi_1^{(n+2)}}{\phi_1^{(n+1)}} = \frac{\lambda_{n+1}[\phi_1 + (s_{n+1} / \lambda_{n+1})\phi_2]}{\lambda_n[\phi_1 + (s_n / \lambda_n)\phi_2]} \quad (3.25)$$

denklemini verir. Aynı şekilde ϕ_2 'ye bağlı bir sonuçta elde edilebilir. Bununla birlikte Eş. 3.19 ve Eş. 3.20'nin çözümünü bu sistem verir. Bunun için Asimptotik olarak bakılmalıdır. Metot için n yeterince büyük iken;

$$\frac{S_{n+1}}{\lambda_{n+1}} = \frac{S_n}{\lambda_n} := \alpha, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.26)$$

ifadesi Eş. 3.25’de kullanılarak $(d/dx)\ln(\phi_1^{n+1}) = \lambda_{n+1}/\lambda_n$ ifadesi elde edilir. Bu ifade ile;

$$\phi_1^{(n+1)}(x) = C_1 \exp\left(\int^x \frac{\lambda_{n+1}(t)}{\lambda_n(t)} dt\right) = C_1 \lambda_n \exp\left(\int^x (\alpha\omega_0 + \lambda_0) dt\right) \quad (3.27)$$

elde edilir. Burada C_1 integrasyon sabitidir. Bir sonraki aşamada $\phi_1^{(n+1)} = \lambda_n(x)\phi_1 + s_n(x)\phi_2$ ile Eş. 3.27 karşılaştırılarak;

$$\phi_1 + \alpha(x)\phi_2 = C_1 \exp\left(\int^x (\alpha\omega_0 + \lambda_0) dt\right) \quad (3.28)$$

bulunur. Eş. 3.20 ile Eş. 3.28 kullanılarak;

$$\phi_2(x) = \exp\left(\int^x (p_0 - \omega_0\alpha) dt\right) \left\{ C_2 + C_1 \int^x [\omega_0 \exp\left(\int^t (\lambda_0 - p_0 + 2\omega_0\alpha) d\tau\right) dt] \right\} \quad (3.29)$$

şeklinde $\phi_2(x)$ için genel bir çözüm elde edilir[22]. Aynı şekilde $\phi_1(x)$ içinde genel bir çözüm Eş. 3.29 kullanılarak bulunur.

3.3. Asimptotik İterasyon Metodu için Pertürbasyon Teorisi

Pertürbe olmuş bir sistemde hamiltoniyen;

$$H = H_0 + \lambda V_p \quad (3.30)$$

şeklindedir. Burada H_0 pertürbe olmamış bir sistemin hamiltoniyenini, λV_p ise pertürbe kısmını oluşturur. Dalga fonksiyonları ve toplam hamiltoniyen H_0 'ın tam çözümlerine göre hesaplanan λ katsayılı parametrelerle bir pertürbasyon serisi olarak yazılır[4,23]. Pertürbasyon serilerindeki katsayıları bulmak için iterasyon metodu kullanılır.

3.3.1. Pertürbasyon açılımının sınır değerleri

Schrödinger özdeğer problemleri için AIM kullanılarak pertürbasyon açılım katsayıları hesaplanmaktadır. İki kısmın toplamından oluşan potansiyel;

$$V(x) = V_1(x) + \lambda V_2(x) \quad (3.31)$$

şeklindedir. Burada $V_1(x)$ tam çözüme sahip, $V_2(x)$ pertürbe durumdur. λ ise pertürbasyon açılım parametresidir. Özdeğerler bir pertürbasyon serisi olarak yazılırsa;

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \lambda^3 E^{(3)} + \dots \quad (3.32)$$

olur. Amaç $j = 0,1,2,\dots$ için $E^{(j)}$ katsayılarını hesaplamaktır. Eş. 3.31 için Schrödinger denklemi;

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) + \lambda V_2(x) \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.33)$$

şeklindedir. Dalga fonksiyonu;

$$\psi(x) = y_o(x) f(x) \quad (3.34)$$

şeklinde yazılırsa, genel formda $f(x)$ için 2.dereceden bir lineer diferansiyel denklem ;

$$f''(x) = \lambda_0(x, \lambda) f'(x) + s_0(x, \lambda) f(x) \quad (3.35)$$

olarak elde edilir [4,24,25]. Enerji değerlerinin Eş. 3.32 ile verildiği varsayılınsın. Dolayısıyla her bir $\lambda_0(x, \lambda)$ ve $s_0(x, \lambda)$ fonksiyonları $E^{(j)}$ 'lere bağlı olacaktır. AIM Eş. 3.35'e uygulandığında $\lambda_n(x, \lambda)$ ve $s_n(x, \lambda)$ fonksiyonları Eş. 3.6 ile hesaplanır. $\delta(x, \lambda)$ fonksiyon formu;

$$\delta(x, \lambda) = s_n(x, \lambda) \lambda_{n+1}(x, \lambda) - s_{n+1}(x, \lambda) \lambda_n(x, \lambda) = 0 \quad (3.36)$$

şeklinde olur. Eğer $\delta(x, \lambda)$, $\lambda = 0$ civarında seriye açılırsa;

$$\delta(x, \lambda) = \delta(x, 0) + \frac{\lambda}{1!} \frac{d\delta(x, \lambda)}{d\lambda} \Big|_{\lambda=0} + \frac{\lambda^2}{2!} \frac{d^2\delta(x, \lambda)}{d\lambda^2} \Big|_{\lambda=0} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \delta^{(k)}(x) \quad (3.37)$$

elde edilir. AIM'na uygun olarak $\delta(x, \lambda)$ sıfır olmalıdır. Eğer bu her λ değeri için sağlanıyor ise Eş.3.37'deki serinin katsayıları özdeş olarak sıfır olmalıdır. Yani;

$$\delta^{(j)}(x) = \frac{1}{j!} \frac{d^j \delta(x, \lambda)}{d\lambda^j} \Big|_{\lambda=0} = 0 \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (3.38)$$

olmalıdır. Bu denklem $\delta^{(0)}(x) = 0$ iken $E^{(0)}$ değerini, $\delta^{(1)}(x) = 0$ iken $E^{(1)}$ değerini verir[4,23]. Bu $E^{(1)}$ değeri enerjideki birinci düzeltme terimidir. Bu özellik enerji açılım katsayılarının bulunmasında kullanılır.

3.3.2. Dalga fonksiyonu

Eş. 3.36 kullanıldığında Eş. 3.35'in çözümü olarak Eş. 3.12 bulunur[4]. Eğer Eş.3.12'nin birinci kısmı göz önüne alınırsa;

$$f(x) = C_2 \exp\left(-\int^x \alpha(t, \lambda) dt\right) \quad (3.39)$$

olur. Burada;

C_2 : integrasyon sabiti

k : iterasyon numarası

$$\alpha(x, \lambda) = \frac{s_k(x, \lambda)}{\lambda_k(x, \lambda)} \quad (3.40)$$

şeklinde tanımlanır. Eğer $\alpha(x, \lambda)$, $\lambda = 0$ civarında seriye açılırsa;

$$\alpha(x, \lambda) = \alpha^{(0)}(x) + \lambda \alpha^{(1)}(x) + \lambda^2 \alpha^{(2)}(x) + \lambda^3 \alpha^{(3)}(x) + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \alpha^{(k)}(x) \quad (3.41)$$

olur. Buradan $j = 0, 1, 2, \dots$ olmak üzere $\alpha^{(j)}(x)$;

$$\alpha^{(j)}(x) = \frac{1}{j!} \left(\frac{d^j}{d\lambda^j} \left(\frac{s_k(x, \lambda)}{\lambda_k(x, \lambda)} \right) \right)_{\lambda=0} = \frac{1}{j!} \left(\frac{d^j \alpha(x, \lambda)}{d\lambda^j} \right)_{\lambda=0} \quad (3.42)$$

şeklindedir[4,25]. Eş. 3.39'dan;

$$f^{(k)}(x) = \exp\left(-\lambda^k \int_x^{\infty} (\alpha^{(k)}(t)) dt\right), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.43)$$

olmak üzere $f(x)$ fonksiyonu;

$$f(x) = C_2 f^{(0)}(x) f^{(1)}(x) f^{(2)}(x) f^{(3)}(x) \dots = C_2 \prod_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(x) \quad (3.44)$$

şeklinde olur[4].

4. UYGULAMALAR

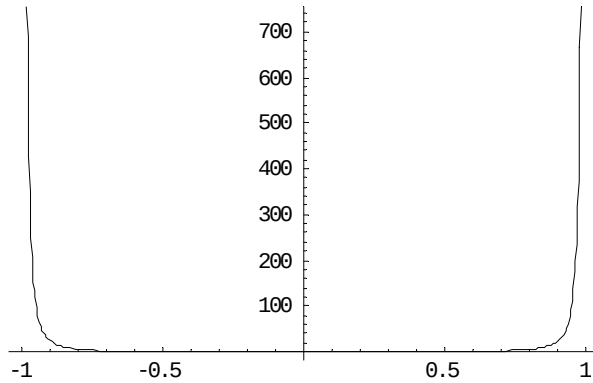
Bu kısımda sınırlandırılmış salıncı problemi bir boyutta ve üç boyutta incelenmiştir.

4.1. Bir Boyutta Sınırlandırılmış Salıncı Problemi

Schrödinger denkleminin analitik çözümü coulomb, harmonik osilatör ve Poeschl-Teller potansiyelleri için yapılmıştır[25]. Bu yöntem ile bağlı-tam durumların çözümü de mümkündür [26]. Bu çalışmada sınırlandırılmış salıncı potansiyeli için Schrödinger denkleminin analitik çözümü elde edilecektir. Sınırlandırılmış salıncı potansiyeli;

$$V(x) = \frac{a^2 x^2}{(1 - \frac{x^2}{R^2})^2}, \quad x \in [-R, +R] \quad (4.1)$$

olarak tanımlanır. Burada a reel bir parametredir.



Şekil 4.1. $R = 1, a = 1$ iken bir boyutta sınırlandırılmış salıncı potansiyeli

$R \rightarrow \infty$ için potansiyel harmonik salıncıya indirgenir. Potansiyel için Schrödinger denklemini yazılırsa, ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklem;

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{a^2 x^2}{\left(1 - \frac{x^2}{R^2}\right)^2} \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (4.2)$$

şeklinde olur. AIM'nu uygulamak için önce asimptotik dalga fonksiyonu elde edilmeli ve Eş.4.2'ye uygulanmalıdır. Dalga fonksiyonu $\psi(x \rightarrow \pm R) = 0$ olmalıdır. Bundan dolayı asimptotik dalga fonksiyonu;

$$\psi(x) = \left(1 - \frac{x^2}{R^2}\right)^{\left(\frac{b}{2}\right)R^2} \quad (4.3)$$

şeklinde alınabilir. Burada b değeri sonradan belirlenecektir. $R \rightarrow \infty$ iken dalga fonksiyonu $\psi(x) \rightarrow \exp\left(-\frac{b}{2}x^2\right)$ şeklinde harmonik salıncı dalga fonksiyonu ve potansiyel $V(x) = a^2 x^2$ şeklinde harmonik salıncı olur. Böylece dalga fonksiyonu;

$$\psi(x) = \left(1 - \frac{x^2}{R^2}\right)^{\left(\frac{b}{2}\right)R^2} f(x) \quad (4.4)$$

olur. Eş. 4.4, Eş. 4.2'ye uygulandığında;

$$f''(x) = \frac{2bx}{1 - \frac{x^2}{R^2}} f'(x) + \frac{(b - E) + \frac{x^2}{R^2} E}{1 - \frac{x^2}{R^2}} f(x) \quad (4.5)$$

şeklinde bir ifade elde edilir. Burada $b = \frac{1}{R^2} + \sqrt{a^2 + \frac{1}{R^4}}$ dır. Bu denkleme $y = \frac{x}{R}$

dönüşümü uygulanırsa;

$$f''(y) = \frac{2sy}{1-y^2} f'(y) + \frac{-\omega + \eta y^2}{1-y^2} f(y) \quad (4.6)$$

elde edilir. Burada $s = bR^2$, $\omega = (E - b)R^2$, $\eta = ER^2$ şeklindedir. Sonuçta AIM'na

göre $\lambda_0 = \frac{2sy}{1-y^2}$, $s_0 = \frac{-\omega + \eta y^2}{1-y^2}$ dır. Bu ifadeler ;

$$\lambda_n = \lambda'_{n-1} + s_{n-1} + \lambda_0 \lambda_{n-1} \quad (4.7)$$

$$s_n = s'_{n-1} + s_0 \lambda_{n-1} \quad (4.8)$$

şeklindeki iterasyon formüllerinde kullanılır. Elde edilen ifadeler;

$$\delta_n(y, \omega, \eta) = \lambda_{n+1} s_n - \lambda_n s_{n+1} \quad (4.9)$$

şeklindeki δ fonksiyonuna uygulanır. AIM'na göre $\delta_n(y, \omega, \eta) = 0$ sonuçları özdeğerleri verir[25]. Eğer bu denklem her y noktasında çözülürse problem tam olarak çözülür. Problem tam olarak çözülemediğinden uygun bir y_0 (başlangıç noktası) seçilmeli ve $\delta_n(y_0, \omega, \eta) = 0$ da çözülerek özdeğerler bulunmalıdır. Bu çalışmada $y_0 = 0$ olarak alınmıştır. Çizelge 4.1'de $a = 1$ ve farklı R değerleri için sonuçlar gösterilmiştir. Çizelge 4.2'de taban enerji değerinin R ile değişimi verilmiştir. $\eta = 0$ için $n = 0, 1, 2, \dots$ olmak üzere Eş. 4.6'nın tam çözümleri $\omega = n(n-1) + 2ns$ şeklinde elde edilmiştir. ω 'nın η 'ya bağlı bir pertürbasyon serisi olarak yazılarak açılım katsayıları elde edilir[21]. Sonuçlardaki bu açılım katsayıları yakınsadığında seriler kesilir. Seri açılımının 1. teriminde ya da çoğu zaman 2. teriminde enerji için iyi bir analitik forma ulaşılır. Enerji için iyi bir analitik formu elde ettikten sonra $R \rightarrow \pm\infty$ olduğunda $2(n+1)a$ ile harmonik salıncı enerjileri elde edilmelidir. AIM'da pertürbasyon tekniği kullanılırsa, ω ;

$$\omega = \sum_{k=0}^{\infty} \eta^k \omega_k \quad (4.10)$$

şeklinde alınır. $\delta_n(y, \omega, \eta)$ ifadesi η parametresine bağlıdır. Şöyle ki Eş.4.9 $\eta = 0$ iken aşağıdaki gibi bir açılıma sahiptir;

$$\delta(y, \omega, \eta) = \delta(y, \omega, 0) + \eta \left(\frac{d\delta(y, \omega, \eta)}{d\eta} \right)_{\eta=0} + \frac{1}{2!} \eta^2 \left(\frac{d^2\delta(y, \omega, \eta)}{d\eta^2} \right)_{\eta=0} + \dots = 0 \quad (4.11)$$

eğer her η için sağlanıyorsa, Eş. 4.11'deki her bir katsayı sıfır olmalıdır. Yani genel olarak $j = 0, 1, 2, \dots$ için;

$$\left(\frac{d^j \delta(y, \omega, \eta)}{d\eta^j} \right)_{\eta=0} = 0 \quad (4.12)$$

şeklinde ifade edilebilir. ω için ; $\delta(y, \omega, 0) = 0$ çözümü sıfırdan düzeltme

terimini (ω_0) , $\left(\frac{d\delta(y, \omega, \eta)}{d\eta} \right)_{\eta=0} = 0$ çözümü birinci dereceden düzeltme terimini

(ω_1) ve $\left(\frac{d^2\delta(y, \omega, \eta)}{d\eta^2} \right)_{\eta=0} = 0$ çözümü ikinci dereceden düzeltme terimini (ω_2)

verir. $n=0, 1, 2, \dots$ olmak üzere çözümlerimiz :

$\delta(y, \omega_0, 0) = 0$ için ;

$$\omega_0(n) = n(n-1) + 2ns \quad (4.13)$$

$$\left(\frac{d\delta(y, \omega, \eta)}{d\eta} \right)_{\eta=0} = 0 \text{ için ;}$$

$$\omega_1(n) = \frac{2(2n-1)s + 2n^2 - 2n - 3}{(2s + 2n - 3)(2s + 2n + 1)} \quad (4.14)$$

$$\left(\frac{d^2 \delta(y, \omega, \eta)}{d\eta^2} \right)_{\eta=0} = 0 \quad \text{için ;}$$

$$\omega_2(n) = \frac{P_n(s)}{(2n + 2s + 3)(2n + 2s - 3)^3 (2n + 2s + 1)^3 (2n + 2s - 5)} \quad (4.15)$$

$$P_n(s) = q_5 s^5 + q_4 s^4 + q_3 s^3 + q_2 s^2 + q_1 s + q_0 \quad (4.16)$$

$$q_5(n) = -32(2n + 1) \quad (4.17)$$

$$q_4(n) = -32(4n^2 - 6n - 7) \quad (4.18)$$

$$q_3(n) = -16(2n^3 - 29n^2 + 9n + 36) \quad (4.19)$$

$$q_2(n) = 8(9n^4 + 30n^3 - 82n^2 - 23n + 81) \quad (4.20)$$

$$q_1(n) = 6(8n^5 - 4n^4 - 68n^3 + 46n^2 + 60n - 45) \quad (4.21)$$

$$q_0(n) = 2n(n-1)(4n^4 - 8n^3 - 35n^2 + 39n + 63) \quad (4.22)$$

şeklindedir. Nitekim ikinci dereceden pertürbasyon açılımında sonuçlar kullandığında analitik özdeğerler;

$$\omega \cong \omega_0 + \omega_1 \eta + \omega_2 \eta^2 \quad (4.23)$$

eşitliğinden elde edilir. Eğer bu eşitlikte $s = bR^2 = 1 + \sqrt{1 + a^2 R^4}$, $\omega = (E - b)R^2$ ve $\eta = ER^2$ şeklinde alınırsa ikinci dereceden enerji düzeltme terimi;

$$\left(E_n^{(2)}\right)^2 - \frac{1-\omega_1}{\omega_2 R^2} E_n^{(2)} + \frac{\omega_0 + s}{\omega_2 R^4} = 0 \quad (4.24)$$

birinci dereceden enerji düzeltme terimi;

$$E_n^{(1)} = \frac{\omega_0 + s}{(1-\omega_1)R^2} \quad (4.25)$$

sıfıncı dereceden enerji düzeltme terimi;

$$E_n^{(0)} = \frac{\omega_0 + s}{R^2} \quad (4.26)$$

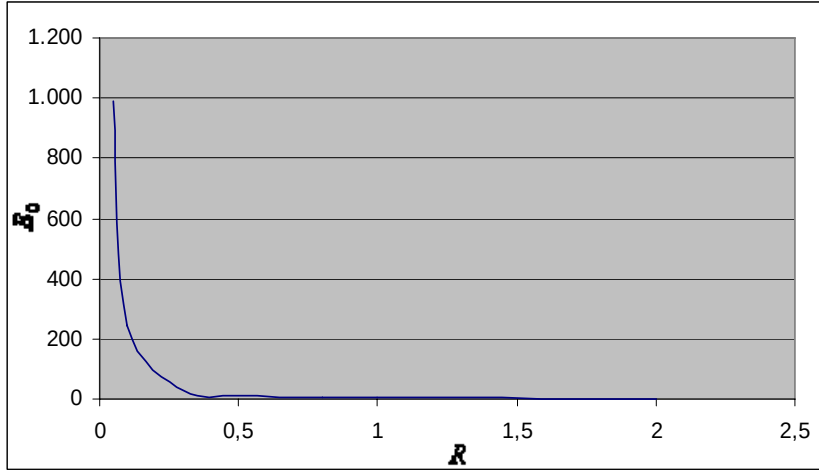
şeklinde olur. Bu sonuçlar ile bilinen kuyu durumları analiz edilebilir; $R \rightarrow \mp\infty$ iken $\omega_0 = 2naR^2$, $\omega_1 \rightarrow 0$, $\omega_2 \rightarrow 0$ olur ve enerji değeri $E_n = (2n+1)a$ şeklinde bulunur. Bu ifade bir boyutlu salıncı enerji değerleri ile aynıdır. $R \rightarrow 0$ $\omega_0 \cong n^2$, $\omega_1 = \frac{1}{2}$, $\omega_2 = \frac{1}{32n^2}$ olur ve enerji değeri $E_n = 13,6569\left(\frac{n}{R}\right)^2$ şeklinde bulunulur. Bu analitik formüller direk uygulamalarla Çizelge 4.1’de kıyaslanmıştır. $R \approx 0$ iken sonsuz potansiyel kuyusu elde edilir ve bu durum için tam çözümler (büyük n değerleri için) $E_n = \pi^2\left(\frac{n}{R}\right)^2 \approx 9,8696\left(\frac{n}{R}\right)^2$ şeklindedir. Yüksek pertürbasyon düzeltmelerinde bu değer elde edilebilir. Ayrıca Çizelge 4.2’de $R = 0,05$ için $E_0 = 986,9617009$ değeri elde edildi. Bu $E_0 = \frac{\pi^2}{4R^2}$ ifadesi ile uyumludur. E_0 ’ın R ’ye göre değişimi Şekil 4.2’de verildi. Şekilden de görüleceği gibi elde edilen enerji eğrisi özellikle küçük R değerlerinde harmonik salıncı davranışını vermektedir.

Çizelge 4.1. $a = 1$ iken Eş. 4.6 kullanılarak bulunan enerji özdeğerleri

R	n	$E_n^{(0)}$	$E_n^{(1)}$	$E_n^{(2)}$	$E_n^{(direk)}$ (Eş.4.12)
0,1	0	200,0049999	250,0049999	246,5321540	246,7451540
	1	600,0149997	1050,014999	984,1321639	986,9760916
	2	1200,025000	2250,032501	2397,045478	2220,687973
1	0	2,414213562	2,914213562	2,882959969	2,884884988
	1	7,242640687	11,74264068	11,12608417	11,16173787
	2	14,07106781	25,07770096	25,54146993	24,42914347
10	0	1,010049999	1,015049999	1,015037805	1,015037863
	1	3,030149997	3,070249995	3,074823995	3,074828397
	2	5,075149997	5,195238292	5,193756878	5,193788932

Çizelge 4.2. $a = 1$ iken, R'nin farklı değerleri için enerji özdeğerleri

R	$E_0^{(direk)}$ (Eş.4.12)
0,05	986,9617009
0,1	246,7451540
0,3	27,46087181
0,5	9,993784253
0,8	4,150364992
1	2,884884988
2	1,401326758
3	1,171662525
10	1,015037863
100	1,000150002
1000	1,000001500



Şekil 4.2. Enerjinin($E_0^{(direk)}$) R 'ye göre değişimi

4.2. Üç Boyutta Sınırlandırılmış Salıncı Problemi

Potansiyel;

$$V(r) = \frac{a^2 r^2}{\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^2}, \quad r \in [0, R] \quad (4.27)$$

şeklindedir. Burada a reel bir parametredir. Bu potansiyel için Schrödinger denklemini yazılırsa, ikinci dereceden lineer homojen diferansiyel denklem;

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{a^2 r^2}{\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^2} \right] \psi(r) = E \psi(r) \quad (4.28)$$

şeklinde olur. AIM'nu uygulamak için önce asimptotik dalga fonksiyonunu elde edilmeli ve Eş. 4.28'e uygulanmalıdır. Dalga fonksiyonu $r \rightarrow R$ sıfır olmalıdır. Bundan dolayı asimptotik dalga fonksiyonu;

$$\psi(r) = \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{\left(\frac{b}{2}\right)R^2} \quad (4.29)$$

şeklinde alınabilir. Burada b değeri sonradan belirlenecektir. Böylece dalga fonksiyonu;

$$\psi(r) = r^{l+1} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{\left(\frac{b}{2}\right)R^2} f(r) \quad (4.30)$$

şeklinde olur. Eş. 4.30 Eş. 4.28’de kullanıldığında;

$$f''(r) = 2 \left(\frac{br}{1 - \frac{r^2}{R^2}} - \frac{(l+1)}{r} \right) f'(r) + \frac{(2b(l+1) + b - E) + \frac{r^2}{R^2} E}{1 - \frac{r^2}{R^2}} f(r) \quad (4.31)$$

şeklinde bir ifade elde edilir. Burada $b = \frac{1}{R^2} + \sqrt{a^2 + \frac{1}{R^4}}$ şeklindedir. Bu denkleme

$y = \frac{r}{R}$ dönüşümü uygulanırsa;

$$f''(y) = 2 \left(\frac{sy}{1 - y^2} - \frac{(l+1)}{y} \right) f'(y) + \frac{-\omega + \eta y^2}{1 - y^2} f(y) \quad (4.32)$$

elde edilir. Burada $s = bR^2$, $\omega = (E - 2b(l+1) - b)R^2$, $\eta = ER^2$ ’dir. Sonuçta

AIM’na göre $\lambda_0 = 2 \left(\frac{sy}{1 - y^2} - \frac{(l+1)}{y} \right)$, $s_0 = \frac{-\omega + \eta y^2}{1 - y^2}$ ’dir. Bu ifadeler;

$$\lambda_n = \lambda'_{n-1} + s_{n-1} + \lambda_0 \lambda_{n-1} \quad (4.33)$$

$$s_n = s'_{n-1} + s_0 \lambda_{n-1} \quad (4.34)$$

şeklindeki iterasyon formüllerinde kullanılır. Elde edilen ifadeler;

$$\delta_n(y, \omega, \eta) = \lambda_{n+1} s_n - \lambda_n s_{n+1} \quad (4.35)$$

şeklindeki δ fonksiyonuna uygulanır. AIM'na göre $\delta_n(y, \omega, \eta) = 0$ sonuçları özdeğerleri verir. Problem tam olarak çözülemediğinden uygun bir y_0 (başlangıç noktası) seçilmeli ve $\delta_n(y_0, \omega, \eta) = 0$ da çözülerek özdeğerler bulunmalıdır. Bu çalışmada $y_0 = 1/2$ olarak alınmıştır. AIM'da pertürbasyon tekniği kullanılırsa, ω ;

$$\omega = \sum_{k=0}^{\infty} \eta^k \omega_k \quad (4.36)$$

şeklinde alınır. $\delta_n(y, \omega, \eta)$ ifadesi η parametresine bağlıdır. Şöyle ki Eş. 4.35 $\eta = 0$ iken aşağıdaki gibi bir açılıma sahiptir;

$$\delta(y, \omega, \eta) = \delta(y, \omega, 0) + \eta \left(\frac{d\delta(y, \omega, \eta)}{d\eta} \right)_{\eta=0} + \frac{1}{2!} \eta^2 \left(\frac{d^2 \delta(y, \omega, \eta)}{d\eta^2} \right)_{\eta=0} + \dots = 0 \quad (4.37)$$

eğer her η için sağlanıyorsa, Eş. 4.37'deki her bir katsayı için sıfır olmalıdır. Yani genel olarak $j = 0, 1, 2, \dots$ için;

$$\left(\frac{d^j \delta(y, \omega, \eta)}{d\eta^j} \right)_{\eta=0} = 0 \quad (4.38)$$

şeklinde ifade edilebilir. ω için ; $\delta(y, \omega, 0) = 0$ çözümü sıfırıncı dereceden düzeltme

terimini (ω_0) , $\left(\frac{d\delta(y, \omega, \eta)}{d\eta} \right)_{\eta=0} = 0$ çözümü birinci dereceden düzeltme terimini

$$(\omega_1) \text{ ve } \left(\frac{d^2 \delta(y, \omega, \eta)}{d\eta^2} \right)_{\eta=0} = 0 \quad \text{çözümü ikinci dereceden düzeltme terimini } (\omega_2)$$

verir. $n = 0, 1, 2, \dots$ ve $l = 0, 1, 2, \dots$ olmak üzere çözümlerimiz:

$$\delta(y, \omega_0, 0) = 0 \quad \text{için};$$

$$\omega_0(n, l) = 2n(2l + 2s + 2n + 1) \quad (4.39)$$

$$\left(\frac{d\delta(y, \omega, \eta)}{d\eta} \right)_{\eta=0} = 0 \quad \text{için};$$

$$\omega_1(n, l) = \frac{(2l + 3)(2l + 2s + 4n - 1) + 8n(s + n - 1)}{(2l + 2s + 4n - 1)(2l + 2s + 4n + 3)} \quad (4.40)$$

$$\left(\frac{d^2 \delta(y, \omega, \eta)}{d\eta^2} \right)_{\eta=0} = 0 \quad \text{için};$$

$$\omega_2(n, l) = \frac{P_{n,l}(s)}{(2l + 2s + 4n + 5)(2l + 2s + 4n - 1)^3 (2l + 2s + 4n + 3)^3 (2l + 2s + 4n - 3)} \quad (4.41)$$

$$P_{n,l}(s) = q_5 s^5 + q_4 s^4 + q_3 s^3 + q_2 s^2 + q_1 s + q_0 \quad (4.42)$$

$$q_5(n, l) = -32(4n + 2l + 3) \quad (4.43)$$

$$q_4(n, l) = -32(8l^2 + (16n + 6)l + 16n^2 + 4n - 9) \quad (4.44)$$

$$q_3(n, l) = -32(12l^3 + 28nl^2 + (12n(n - 2) - 21)l + 8n^3 - 46n^2 - 43n + 9) \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned}
q_2(n,l) = & -8(32l^4 + (112n - 24)l^3 - 4(15 + 2n(4n + 25))l^2 + \\
& (-101n^4 + 621n^3 - 3234n^2 + 2188n + 62)l - \\
& (144n^4 + 528n^3 + 248n^2 - 122n + 15))
\end{aligned} \tag{4.46}$$

$$\begin{aligned}
q_1(n,l) = & -2(32l^5 + 16(16n - 3)l^4 + 16(12n^2 - 12n - 3)l^3 + \\
& 8(13 - 4n(36n^2 + 37n - 5))l^2 - 2(27 + 8n(120n^3 + 168n^2 - 25n - 71))l + \\
& 3(3 - 8n(392n^3 - 1124n^2 + 1549n - 775)))
\end{aligned} \tag{4.47}$$

$$\begin{aligned}
q_0(n,l) = & -2n(64l^5 + 32(8n + 5)l^4 + 32(4(n + 5)(n - 1) + 33)l^3 + \\
& 16(81 - 4(n - 1)(35(n - 1) + (n - 2)(n + 1)^2))l^2 + \\
& 12(63 - 8(n - 1)(86n^2 - 207n + 183))l + 162 - n^2(2705n^2 - 7229n + 5886))
\end{aligned} \tag{4.48}$$

şeklinde bulunulur. Nitekim ikinci dereceden pertürbasyon açılımında sonuçlar kullandığında analitik özdeğerler;

$$\omega \cong \omega_0 + \omega_1\eta + \omega_2\eta^2 \tag{4.49}$$

eşitliğinden elde edilir. Eğer bu eşitlikte $s = bR^2 = 1 + \sqrt{1 + a^2 R^4}$, $\omega = (E - 2b(l + 1) - b)R^2$ ve $\eta = ER^2$ şeklinde alınırsa ikinci dereceden enerji düzeltme terimi;

$$\left(E_{n,l}^{(2)}\right)^2 - \frac{1 - \omega_1}{\omega_2 R^2} E_{n,l}^{(2)} + \frac{\omega_0 + s(2l + 3)}{\omega_2 R^4} = 0 \tag{4.50}$$

birinci dereceden enerji düzeltme terimi;

$$E_{n,l}^{(1)} = \frac{\omega_0 + s(2l + 3)}{(1 - \omega_1)R^2} \tag{4.51}$$

sıfıncı dereceden enerji düzeltme terimi;

$$E_{n,l}^{(0)} = \frac{\omega_0 + s(2l + 3)}{R^2} \quad (4.52)$$

şeklinde olur. Analitik formüller direk uygulamalarla Çizelge 4.3’de kıyaslanmıştır.

Çizelge 4.3. $a = 1$ iken Eş. 4.32 kullanılarak bulunan enerji özdeğerleri

R	n	l	$E_{n,l}^{(0)}$	$E_{n,l}^{(1)}$	$E_{n,l}^{(2)}$	$E_{n,l}^{(direk)}$ (Eş.(4.38))
0,1	0	0	600,0129997	1050,015000	984,1321640	986,9760940
		1	1000,025000	2250,025001	1901,647215	2019,098379
		2	1400,034999	3850,034998	3268,276283	3291,553317
	1	0	2000,035000	3850,051499	3621,459565	3474,214685
		1	2800,045000	5850,068213	6063,197335	5977,206048
		2	3600,084163	8250,084163	8184,599580	8384,113246
1	0	0	7,242640686	11,74264068	11,12608417	11,16175504
		1	12,07106781	24,57106781	21,50239306	22,40924660
		2	16,89949493	41,39949494	35,82641277	36,39241357
	1	0	22,89949494	42,58012009	45,40956389	45,65632787
		1	31,72792206	63,92619513	65,11826008	64,89316441
		2	40,55634917	89,21322798	87,96464732	87,54798936
10	0	0	3,030149997	3,075149997	3,074823995	3,077988351
		1	5,050249995	5,175249995	5,173755107	5,171837418
		2	7,070349993	7,315349993	7,311288442	7,079453829
	1	0	7,130349993	7,375292059	7,371307922	7,351348458
		1	9,190449991	9,595316142	9,586977832	9,533790824
		2	11,25054999	11,85531141	11,84029045	11,85205014

4.2.1.Dalga fonksiyonu

Bu kısımda pertürbasyon açılım tekniği ile AIM kullanılarak dalga fonksiyonu için analitik ifade elde edilecektir. AIM’na göre Eş.4.32’nin çözümü;

$$f(y) = \exp\left(-\int^y \alpha(y', \eta) dy'\right) \quad (4.53)$$

şeklindedir. Burada $\alpha(y, \eta) = \frac{s_n}{\lambda_n}$ 'dir. Bu fonksiyonu $\eta = 0$ civarında seriye açılarak yapılan bazı matematiksel işlemlerden sonra;

$$f(y) = f^{(0)}(y) f^{(1)}(y) \dots f^{(n)}(y) = \prod_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(y) \quad (4.54)$$

ifadesi elde edilir. Burada

$$f^{(k)}(y) = \exp\left(-\eta^{(k)} \int^y \alpha^{(k)}(y') dy'\right) \quad (4.55)$$

şeklinde ve

$$\alpha^{(k)}(y) = \frac{1}{k!} \left(\frac{d^k}{d\eta^k} \left(\frac{s_n}{\lambda_n} \right) \right)_{\eta=0} = \frac{1}{k!} \left(\frac{d^k \alpha(y, \eta)}{d\eta^k} \right)_{\eta=0} \quad (4.56)$$

şeklinde tanımlanır[4,21]. Bu ifadeler kullanılarak dalga fonksiyonu için analitik bir ifade elde edilebilir[25]. Enerji için elde edilen açılım parametreleri kullanılarak dalga fonksiyonu için düzeltme terimleri bulunabilir. Bulunan düzeltme terimi;

$$f(y) \approx f^{(0)} f^{(1)} \quad (4.57)$$

şeklindedir. Buradaki $f^{(0)}$ ve $f^{(1)}$ ifadeleri $n=0$ ve $n=1$ için Çizelge 4.4'de verilmiştir. Çizelge 4.4'de $s = bR^2$, $\eta = ER^2$ ve $y = \frac{r}{R}$ ifadeleri kullanıldığında dalga fonksiyonu;

$$\psi(r) \approx r^{l+1} \times \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right)^{\frac{s}{2}} \times f(r) \quad (4.58)$$

şeklinde olur.

Çizelge 4.4. $n = 0$, $n = 1$ için dalga fonksiyonu düzeltme terimleri

n	f^0	f^1
0	1	$\exp\left(-\frac{y^2}{6+4s+4l}\right)$
1	$y^2(2l+2s+3)-2l-3$	$\exp(-(y^4(l^2(36+24s)+s^2(36+24l)+8(l^3+s^3)+54(s+l)+72sl+27)+y^2(-8l^3-l^2(36+16s)-s^2(12+8l)-l(48s+54)-36s-27)-s(16l+24))))/(2(2l+2s+7)(2l+2s+3)^2(y^2(2l+2s+3)-2l-3)))$

5.SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada Schrödinger özdeğer problemleri için AIM kullanılarak bir ve üç boyutta sınırlandırılmış salıncı problemi için ilk önce pertürbasyon açılım katsayıları elde edildi. Bu açılım katsayıları kullanılarak enerji düzeltme terimleri için analitik ifadeler elde edildi. Seri açılımının ikinci teriminde enerji için iyi bir analitik forma ulaşıldığı için seri açılımı ikinci terimde kesildi.

Çizelge 4.1’de ve Çizelge 4.3’de enerji düzeltme terimlerinden ikinci mertebeden yaklaşım durumundaki enerji değerleri ile direk enerji değerlerinin birbiri ile uyumlu olduğu görüldü. Çizelge 4.2’de $n = 0$ iken R ’nin farklı değerleri için direk enerji değerleri verildi. Burada R değeri büyüdükçe enerji değerinin harmonik salıncı enerji değerini verdiği görüldü. Ayrıca R çok küçük iken başka bir deyişle sonsuz potansiyel kuyusu iken temel durum enerjisinin $E_0 = \frac{\pi^2}{4R^2}$ ile uyumlu olduğu görüldü. Şekil 4.2’de bu davranış gösterilmiştir. Çizelge 4.4’de dalga fonksiyonuna gelen düzeltme terimleri verildi. Burada sıfırıncı mertebeden düzeltme teriminin Legendre polinomlarını oluşturduğu görüldü.

Üç boyutta sınırlandırılmış salıncı problemi quarkonium fiziğinde kullanılabilir. $r \rightarrow R$ iken potansiyel sonsuz olacaktır. Bu ifadeden üç boyutta sınırlandırılmış salıncı potansiyeli R yarıçaplı bir hadron içine hapsolmuş bir quarkın etkileştiği potansiyel olarak düşünülebilir.

KAYNAKLAR

1. Imbo, T., Papnamenta, A., Sukhatme, U. "Energy eigenstates of spherically symmetric potentials using the shifted $1/N$ expansion." **Physical Review D**, 29(8): 1669-1672 (1983).
2. Fernandez, F. M. "Eigenvalues of the Schrödinger equation via the Riccati-Pade method." **Physical Review A**, 40(11):6149–6151 (1989).
3. Ciftci, H., Hall, R. L., Saad, N. "Asymptotic iteration method for eigenvalue problems." **Journal of Physics A:Mathematical and General**, 36:11807–11809 (2003).
4. Ciftci, H., Hall, R. L., Saad, N. "Perturbation theory in a framework of iteration methods." **Physical Letters A**, 340:388–396 (2005).
5. Bransden, B. H., Joachin, C. J., "Atom ve Molekül Fiziği" Köksal, F., Gümüş, H., **Bilim Yayıncılık**, Ankara, 116-122 (1999).
6. Aygün, E., Zengin, D. M. "Atom ve Molekül Fiziği", **Bilim Yayıncılık**, Ankara, 201-205 (1998).
7. Gottfried, K., Yan, T. M. "Quantum Mechanics: Fundamandal Second Edition." **Bıçaklar Kitabevi**, Ankara, 216-218 (2004).
8. Krieger, J. B., Lewis, M. L., Rosenzweig, C., "Use of the WKB Method for Obtaining Energy Eigenvalues." **The Journal of Chemical Physics**, 47(8): 2942-2944 (1967).
9. Tang, A. Z., Chan, F. T. "Shifted $1/N$ expansion for the Hulthen Potential." **Physical Review A**, 35(2):911–914 (1986).
10. Roychoudhury, R., Varshini, T. P. "Rotating oscillator-shifted $1/N$ expansion and supersymmetric considerations." **Physical Review A**, 37(7):2309–2313 (1988).
11. Fernandez, F. M., Ma, Q., Tipping, R. H. "Tight upper and lower bounds for energy eigenvalues of the Schrödinger equation." **Physical Review A**, 39(4): 1605-1609 (1989).
12. Fernandez, F. M., Frydman, G. I., Castro, E. A. "Tight bounds to the Schrödinger equation eigenvalues," **J. Phys. A:Math. Gen.**, 22: 641-645 (1989).
13. Fernandez, F. M., Guardiola, R. "The Riccati-Pade method for coupled-channel equations." **J.Phys. A:Math. Gen.**, 30:5825–5833 (1997).

14. Baker, G. A. "Essentials of Pade Approximants", **Academic Press**, New York, San Francisco, London, 5–9 (1975).
15. Hautot, A. "On The Hill-determinat method." **Physical Review D**, 33(2):437–443 (1985).
16. Chaudhuri, R. N., Mondal, M. "Eigenvalues of anharmonic oscillators and the perturbed Coulomb problem in N-dimensional space." **Physical Review A**, 52(3):1850–1854 (1995).
17. Biswas, S. N., Data, K., Saxena, R. P., Srivastava, P. K., Varma, V. S. "The Hill Determinant: An Application to the Anharmonic Oscillator." **Physical Review D**, 3(12):3617–3619 (1971).
18. Drozdov, A. N. "On the improvement of convergence of Hill determinants." **J.Phys.A:Math. Gen.**, 245: 445–457 (1994).
19. Znojil, M. "Asymetric anharmonic oscillators in the Hill-determinant picture." **J. Math.Phys.**, 33:213 (1992).
20. Ciftci, H., Hall, R. L., Saad, N. "Construction of exact solutions to eigenvalue problems by the asymptotic iteration method." **Journal of Physics A:Mathematical and General**, 38:1147–1155 (2005).
21. Fernandez, F. M. "On an method for eigenvalue problems." **Journal of Physics A: Mathematical and General**, 37:6173–6180 (2004).
22. Ciftci, H., Hall, R. L., Saad, N. "Iterative solutions to the dirac equation". **Physical Review A**, 72(022101): 1-3 (2005).
23. Ciftci, H., Fernandez, F., M. "Alternative perturbation expansions for partially solvable quantum-mechanical models." **Physics Letters A**, 36:11807–11809 (2003).
24. Amore, P., Fernandez, F. M. "Comment on an application of the asymptotic iteration method to a perturbed Coulomb model ." **Journal of Physics A:Mathematical and General**, 39:10491–10497 (2006).
25. Ciftci, H., Ateser, E., "Study of a bounded oscillator problem in one dimension." **Physica Scripta.**, 76: 517– 520 (2007).
26. Zhdanov, R. Z. "On quasi-exactly solvable matrix models." **Phys. Lett. B**, 405(3/4):253–256 (1997).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : BUHUR, Zeynep
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 31.08.1981 Ankara
Medeni hali : Bekar
Telefon : 0 (505) 309 63 65
e-mail : zeynepbuhur@mynet.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek Lisans	Gazi Üniversitesi / Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı	2008
Lisans	Selçuk Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2004
Lise	Dikmen Lisesi	1998

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Bilgisayar teknolojileri, Müzik, Sinema