

SİNGÜLER ($r=0$) VE DİĞER KUVVET SERİSİ ŞEKLİNDEKİ POTANSİYELLER

İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMLERİ

DOKTORA TEZİ

CFİZİK

Stileyman ÖZÇELİK

Temmuz 1991

GAZİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTUSU

Bu tezin Doktora tezi olarak uygun olduğunu
onaylarım.



Doç. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

Sınav Jürisi

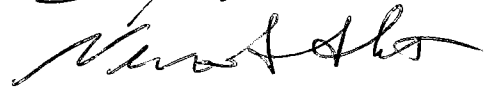
Başkan: Prof. Dr. Ramazan SEVER

Üye : Prof. Dr. Hüseyin AKGAY

Üye : Doç. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

Üye : Doç. Dr. Satılmış ATAĞ

Üye : Doç. Dr. Devzat AKTEKİN



Bu tez Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Tez yazım Esaslarına Uygundur.



SİNGÜLER ($r=0$) VE DİĞER KUVVET SERİSİ ŞEKLİNDEKİ POTANSİYELLER

İÇİN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜMLERİ

(Doktora Tezi)

Süleyman ÖZÇELİK

GAZİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTUSU

ÖZ

Bu çalışmada, radyal Schrödinger denklemini cebirik olarak çözmeyi amaçlayan bir metod geliştirildi. Metod, $\phi(r)=f(r)\exp(g(r))$ formunda bir çözüm fonksiyonunun tanımlanması ile radyal denklemin; $f(r)$ ve $g(r)$ fonksiyonlarına bağlı bir diferansiyel denkleme dönüştürülmesi temeline dayanır. Bu diferansiyel denklem verilen bir potansiyel için, $f(r)$ ve $g(r)$ fonksiyonlarının uygun seçimleriyle cebirik olarak çözülebilmektedir. Metodun genel uygulaması olarak radyal dalga denklemi, singular ve diğer kuvvet serisi şeklindeki bazı potansiyeller için çözüldü. Bulunan sonuçlar, farklı metodların sonuçları ile karşılaştırıldı.

Bilim Kodu : 404.03.01; 404.06.01

Anahtar Kelimeler : Potansiyeller, Schrödinger Denklemi,
Tam Çözümler

Sayfa Adedi : 108

Tez Yöneticisi : Doç. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

SOLUTIONS OF THE SCHRÖDINGER EQUATION FOR THE SINGULAR ($r=0$)

AND OTHER POWER SERIES POTENTIALS

(Ph.D. Thesis)

Süleyman ÖZÇELİK

GAZİ UNIVERSITY

INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

July 1991

ABSTRACT

In this study, a method is presented to solve the radial Schrödinger equation. The method based on defining a solution function of the form $\phi(r) = f(r)\exp(g(r))$ and transforming the radial equation into a differential equation which depends on the functions $f(r)$ and $g(r)$. For any given potential this differential equation can be solved algebraically by choosing appropriate $f(r)$ and $g(r)$ functions. As an application for this method, the radial wave equation is solved for some singular and other power-series potentials. The results obtained are compared with the results of some of the other methods.

Science Code : 404.03.01; 404.06.01
Keywords : Potentials, Schrödinger Equation,
Exact Solutions
Page Number : 108
Adviser : Doç. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca teşfik ve desteğini esirgemeyen değerli hocam sayın Doç. Dr. Mehmet ŞİMŞEK'e teşekkürü bir borç bilirim.



TABLolarIN LİSTESİ

Tablo

Sayfa

- Tablo 1. $V(r) = A'/r + B'r^2 + C'r$ potansiyelinin geliştirilen yeni metodla elde edilen enerji özdeğerleri, Pade metodu ile elde edilen özdeğerler ve kaydırılmış $1/N$ açılımına göre elde edilen (Ref.31) özdeğerler ($\hbar=\mu=1$ birim sisteminde). (73)
- Tablo 2. $V(r) = A/r + Br + Cr^2 + Dr^3 + Fr^4$ potansiyelinin geliştirilen yeni metodla elde edilen enerji özdeğerleri, Pade metodu ile elde edilen sonuçlar ve Ref.50'de kaydırılmış $1/N$ açılımı ile elde edilen özdeğerler ($\hbar=2\mu=1$ birim sisteminde). (80)

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil

Sayfa

Şekil 1. $V_1(x) = 5x^2$ ve $V_2(x) = 5x^2 + 10x$ potansiyellerinin grafikleri ($\hbar=2\mu=1$ birim sisteminde). (47)

Şekil 2. $V(r) = -10/r + 1000r^2 + 447.2136r$ potansiyelinin grafiği ($\hbar=\mu=1$ birim sisteminde). (65)

Şekil 3. $V(r) = -100/r + 0.1r^2 + 22.3591r$ potansiyelinin grafiği ($\hbar=\mu=1$ birim sisteminde). (66)

Şekil 4a. $-1/r - 4.74342r + 10.15811r^2 - 2r^3 + 0.1r^4 + 2/r^2$ potansiyelinin grafiği ($\hbar=2\mu=1$ birim sisteminde) (75)

Şekil 4b. $-1/r - 2.84605r + 2.81623r^2 - r^3 + 0.1r^4$ potansiyelinin grafiği ($\hbar=\mu=1$ birim sisteminde). (81)

İÇİNDEKİLER

ÖZ	II
ABSTRACT	III
TEŞEKKÜR	IV
TABLoların LİSTESİ	V
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	VI
İÇİNDEKİLER	VII
GİRİŞ	1
BÖLÜM 1	
SİNGULER ($r=0$) VE DİĞER KUVVET SERİSİ ŞEKLİNDEKİ POTANSİYELLER	4
1.1 Genel Kuvvet Serisi Şeklindeki Potansiyeller	4
1.1a r 'nin Pozitif Kuvvetleri Şeklindeki Potansiyeller	5
1.1b Coulomb + r 'nin Kuvvetleri Şeklindeki Potansi- Potansiyeller	7
1.1c Ters-Kuvvet Serisi Şeklindeki Singuler ($r=0$) Potansiyeller	8
BÖLÜM 2	
SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜM TEKNİKLERİ	12
2.1. Hill-Determinantı Metodu	13
2.2. Süpersimetrik Kuantum Mekaniği Metodu	14

2.3. Yol (Path) İntegrali Metodu	17
2.4. Rasyonel Fonksiyon Yaklaşdırma (Pade) Metodu	21
2.5. $1/N$ Açılımı Metodu	24
2.6. Kaydırılmış $1/N$ Açılımı Metodu	29
2.7. Radyal Schrödinger Denkleminin Çözümü için Cebirik Metod	34

BÖLÜM 3

METODUN UYGULAMALARI	41
3.1 Bir-Boyutlu Harmonik Osilatör	42
3.2 Üç-Boyutta Harmonik Osilatör	49
3.3 Üç-Boyutta Coulomb Potansiyeli	54
3.4 Üç-Boyutta Altıncı Mertebe Anharmonik Osilatör Potansiyeli	57
3.5 Üç-Boyutta Coulomb + Harmonik Osilatör + Lineer Potansiyeli	64
3.6 Üç-Boyutta r 'nin Kuvvetleri Şeklinde Perturbe Coulomb Potansiyeli	74
3.7 Ters-Kuvvet Potansiyeli ($1/r^n$)	81

BÖLÜM 4

SONUÇLAR VE TARTIŞMA	93
REFERANSLAR	99

GİRİŞ

Kuantum mekaniğinde, Schrödinger denklemi başlangıçtan buyana önemini kaybetmemiştir. Bu denklemin çözümü için çok sayıda çalışma yapılmış ve bir çok çözüm tekniği geliştirilmiştir. Bu çözüm teknikleri kısaca, yaklaşık ve tam çözümler veren metodlar olmak üzere iki grupta toplanabilir. Yaygın olarak kullanılan metodlardan bazıları; Wentzel Kremar Brillon (WKB) (1), JWKB (2), Süpersimetrik Kuantum Mekaniğinin kullanıldığı metodlar (3,4), Rasyonel Fonksiyon (Pade) yaklaşımları (5), Hellman-Feynman teoremi ve Virial Teoremi yaklaşımları (6), Grup Teorisi yaklaşımları (7-10), Hill-Determinantı Metodu (11), Sürekli Kesirler metodu (10,12), $1/N$ açılımları (13), kısmi cebir çözümleri (14) ve Path (yol) Integralı Hesabı (15) olarak verilebilir.

Enerji özdeğerlerinin tam olarak hesaplanabildiği potansiyel sayısı son derece sınırlıdır. Son zamanlarda, çözülebilir potansiyelleri çoğaltmak (3-5,11-20) ve bilinen sistemleri daha iyi tarif edebilmek için potansiyel türetme çalışmaları (21-23) alanlarında önemli adımlar atılmıştır.

Potansiyel çözüm tekniklerinde, teklif edilen metodun kolaylığı onu ön plana çıkarmaktadır. Bu yüzden diferansiyel

denklemleri çözmeden, çözümün doğrudan cebirik olarak elde edilebildiği metodlar (4,10-12,14) daha çok tercih edilmektedir.

Bu çalışmada, son yıllarda geliştirilen metodlara ilave olarak, Schrödinger dalga denklemini basit cebirik işlemlerle çözmeyi amaçlayan bir metod geliştirilmiş ve metod, kuvvet serisi şeklindeki potansiyellere uygulanmıştır.

Birinci bölümde; İlk olarak, kuvvet serisi şeklindeki potansiyeller, fiziksel özellikleri ile birlikte genel olarak tanıtıldı.

İkinci bölümde; Schrödinger denkleminin çözümleri için geliştirilmiş olan metodlardan günümüzde çok sayıda araştırmacının ilgilendiği, Hill-Determinantı metodu, SSKM metodu, Yol (Path) Integralı metodu, Rasyonel Fonksiyon Yaklaşdırma (Pade) metodu, $1/N$ Açılımı metodu ve Kaydırılmış $1/N$ Açılımı metodu kısaca özetlendi. Daha sonra, Dalga denkleminin çözümü için $\phi(r) = f_n(r)\exp[g(r)]$ formunda bir dalga fonksiyonu tanımlanması ile geliştirilen yeni metod tanıtıldı. $\phi(r)$ 'nin radyal Schrödinger denkleminde kullanılması ile, $f_n(r)$ ve $g(r)$ fonksiyonlarına bağlı bir diferansiyel denklem elde edildi. Bu diferansiyel denklem, uygun bir dönüşüm ile Riccati denklemine indirgenebilir

uygun bir dönüşüm ile Riccati denklemine indirgenebilir karakterdedir. Geliştirilen metodla bu diferansiyel denklemin çözüm fonksiyonları, verilen bir potansiyel fonksiyonu için $f_n(r)$ ve $g(r)$ 'nin uygun seçimleri ile ve sadece cebirik işlemlerle elde edilebilmektedir.

Üçüncü bölümde; Geliştirilen metod çeşitli potansiyeller için özdeğer ve özfonksiyonların belirlenmesinde kullanıldı. Metodun işlerliğini göstermek amacıyla ilk olarak, en meşhur potansiyeller olan harmonik osilatör ve Coulomb problemleri çözüldü. Daha sonra; metodun genelliğini göstermek için ise altıncı mertebe osilatör, Coulomb + harmonik osilatör+ lineer, potansiyeli, r 'nin kuvvetleriyle perturbe Coulomb potansiyeli ve ters-kuvvet ($1/r^n$) potansiyellerinin çözümleri elde edildi. Ayrıca, Coulomb + harmonik osilatör potansiyeli ve r 'nin kuvvetleriyle perturbe Coulomb potansiyeli için enerji özdeğerleri, Rasyonel Fonksiyon yaklaştırma metodu ile elde edildi. Elde edilen bu enerji özdeğerleri ile Bölüm 2.7'de geliştirilen metodla elde edilen tam sonuçlar tablolar halinde gösterildi.

Son bölüm olan dördüncü bölümde de; bu çalışmanın sonuçları tartışıldı ve sonuçlar diğer metodlarla kıyaslandı.

BÖLÜM I

SİNGÜLER ($r=0$) ve DİĞER KUVVET SERİSİ ŞEKLİNDEKİ POTANSİYELLER

1.1 Genel Kuvvet Serisi Şeklindeki Potansiyeller

Kuantum teorisinde, en genel anlamda polinom şeklindeki etkileşme potansiyelleri (örneğin, anharmonik osilatör, potansiyeli, r 'nin kuvvetleriyle perturbe Coulomb potansiyelleri, ters-kuvvet potansiyelleri,...), problemi uzun zamandan beri aktif bir araştırma alanı olmaya devam etmektedir. Bu potansiyel türleri molekül, atom ve katıhal fiziğinde bir çok etkileşmeyi tarif edebilmeleri açısından araştırmacıların ilgi odağı haline gelmiştir.

Genel olarak, sınırlı-kuvvet serisi şeklindeki potansiyeller

$$V(r) = \sum_{i=-2j}^{2k} A_i r^i \quad j, k \geq 0 \quad (1)$$

şeklinde ifade edilebilir(24,25). Bu ifadeden j ve k 'nin çeşitli değerlerine karşılık gelen çok sayıda potansiyel ailesi türetilebilir: $j = 0$, $k > 0$ için r 'nin pozitif kuvvetle-

rinin bir polinomu şeklindeki potansiyeller, $j > 0$ için üç boyutta küresel simetrik potansiyeller ve $j > 0$, $k = 0$ için ters-kuvvet potansiyelleri elde edilebilir. Ayrıca (1) ifadesinden, $r' = r^2$ dönüşümü ile $V(r) = V(-r)$ simetrik potansiyeller yazılabilir. Bu durumda, j ve k sıfırdan büyük tam sayılar olmalıdır. j ve k 'nın çeşitli değerleri için potansiyel türleri aşağıda sınıflandırılmıştır (bu kısımdaki tüm potansiyel ifadelerinde $A_0 = 0$ alındı):

1.1a r 'nin Pozitif Kuvvetleri Şeklindeki Potansiyeller

Denklem (1) ile verilen genel ifade, $j = 0$ ve $k > 0$ değerleri için

$$V(r) = \sum_{i=0}^{2k} A_i r^i \quad (2)$$

şekline döndür. Bu ifadeden k 'nın çeşitli değerlerine göre polinom şeklindeki potansiyeller elde edilebilir. Örneğin $k=1$ için,

$$V(r) = A_1 r + A_2 r^2 \quad (3)$$

harmonik osilatör + lineer potansiyeli elde edilir. Bu potansiyel, düzgün bir elektrik alanı içindedeki harmonik osilatör problemine karşılık gelir. $k=3$ için

$$V(r) = A_1 r + A_2 r^2 + A_3 r^3 + A_4 r^4 + A_5 r^5 + A_6 r^6 \quad (4)$$

altıncı mertebeden polinom şeklindeki anharmonik osilatör potansiyeli yazılabilir. Denk.(2)'de $r' = r^2$ dönüşümü yapılırsa

$$V(r') = \sum_{i=0}^k A_i r'^i \quad k > 0 \quad (5)$$

olur. Bu ifade, $V(r) = V(-r)$ simetrik potansiyellere karşılık gelir. Örneğin $k=1$ için, iki atomlu bir molekül veya bir kristaldeki bir atomun denge konumu etrafında yaptığı harekete karşılık gelebilen, $V(r) = Ar^2$ harmonik osilatör potansiyeli elde edilir. Harmonik osilatör yaklaşımı, gerçek sistemleri tam olarak tarif edememektedir. Bu nedenle gerçek sistemleri daha iyi tarif edebilmek için, uygun anharmonik potansiyellerin kullanılması gerekir. Denk.(5)'den, $k>1$ değerleri için anharmonik osilatör potansiyelleri türetilebilir: $k=2$ için

$$V(r) = A_1 r^2 + A_2 r^4 \quad (6)$$

dördüncü mertebeden anharmonik osilatör potansiyeli ve $k=3$ için, molekül fiziğinde (26a) ve kuantum alan teorisinde(26b) geniş kullanım alanları olan

$$V(r) = A_1 r^2 + A_2 r^4 + A_3 r^6 \quad (7)$$

altıncı mertebeden anharmonik osilatör potansiyeli elde edilmiş olur.

1.1b Coulomb + r'nin Polinomu Şeklindeki Singuler (r=0) Potansiyeller

$j \geq 1$, $k \neq 0$ için denk.(1)'den

$$V(r) = \sum_{\substack{i=-2j \\ j \geq 1}}^{2k} A_i r^i \quad (8)$$

elde edilir. Bu denklemden, $j=1$ olmak üzere k'nın çeşitli değerlerine karşılık, r'nin bir polinomu şeklinde (üç-boyutta) perturbe Coulomb potansiyelleri elde edilebilir: $j=k=1$ için (8) ifadesi,

$$V(r) = \frac{A_{-2}}{r^2} + \frac{A_{-1}}{r} + A_1 r + A_2 r^2 \quad (9)$$

Coulomb + lineer + harmonik osilatör potansiyelini verir. Denklem (9) ile tanımlanan potansiyel son yıllarda, perturbe hidrojen atomu problemi (27-31) ve ayrıca model kuarkoniyum potansiyeli (32-35) olarak ele alınmıştır.

Denk.(8) ile tanımlanan genel ifadeden, $j=1$ ve $k=2$ değerleri için r 'nin dördüncü kuvvetiyle perturbe Coulomb potansiyeli

$$V(r) = \frac{A_{-2}}{r^2} + \frac{A_{-1}}{r} + A_1 r + A_2 r^2 + A_3 r^3 + A_4 r^4 \quad (10)$$

şeklinde elde edilir. Bu tipteki perturbe Coulomb potansiyelleri, perdelenmiş Coulomb ya da Yukawa potansiyelinin seri açılımı olarak ele alınabilir. Böylece Denk.(10) ile tanımlanan potansiyel türlerinin çözülmesiyle, perdelenmiş Coulomb potansiyelleri belli bir yaklaşıklıkla hesaplanmış olur. Ayrıca parametrelerin uygun seçimleri ile; Denk.(10)'da verilen potansiyel, iki minimuma sahip (çift-kuyu) bir potansiyel şeklini alır.

Denk.(8) ile genel ifadesi verilen perturbe Coulomb potansiyel fonksiyonları, $r \rightarrow 0$ civarında düzensizliğe sahiptir. Bu ise, potansiyel fonksiyonunun bu nokta civarında analitik olmadığını gösterir. Bu nedenle $r=0$ noktası potansiyel fonksiyonu için (oriijinde) izole bir singuler (36) noktadır.

1.1c Ters-Kuvvet Serisi Şeklindeki Singuler ($r=0$)

Potansiyeller

$j \neq 0$, $k = 0$ için (1) denklemi

$$V(r) = \sum_{i=-2j}^0 A_i r^i \quad (11)$$

şeklinde ters-kuvvet potansiyellerine (23) dönüştür. Bu potansiyel fonksiyonu da $r=0$ noktasında singulerdir. Ayrıca bütün terimleri $r \rightarrow 0$ civarında bir düzensizliğe sahip olduğundan denk.(11) ile verilen potansiyel genel singuler potansiyeller (37- 39) olarak tanımlanabilir.

Ters-kuvvet potansiyelleri, klasik ve kuantum fiziğinde çok sayıda etkileşmeyi tarif etmek için kullanılır (23,40). Denk.(11) ile verilen potansiyel fonksiyonundan, j 'nin uygun şekilde seçilmesiyle; atom, molekül ve katıhal fiziğinde bir çok etkileşme için kullanılabilen potansiyelleler türetilir. Denk.(11) ile tanımlanan genel ifadeden:

a) İlk olarak Mie (41) tarafından önerilen ve Lennard-Jones (42) tarafından geliştirilen; moleküller arası kısa-mesafe etkileşmelerine iyi bir şekilde karşılık gelen ve bir çok sisteme uygulanabilen

$$V(r) = Ar^{-n} - Br^{-m} \quad (12)$$

formundaki potansiyeller (burada $A=m/(m-n)$ ve $B=n/(n-m)$ dir),

b) Hem çok atomlu moleküller hemde ağır gazlar için

kullanılabilen

$$V(r) = Ar^{-28} - Br^{-24} + Cr^{-18} - Dr^{-8} + Er^{-6}. \quad (13)$$

Dymond-Rigby-Smith potansiyeli (43) ve özellikle ağır gazlar için iyi bir yaklaşım olan

$$V(r) = \left[\frac{6}{n-6} \right] r^{-n} - \left[\frac{n}{n-6} \right] r^{-m} \quad (14)$$

Maitland-Smith potansiyeli (44),

c) İyon-nötral molekül etkileşmeleri için $n-6-4$ tipindeki

$$V(r) = Ar^{-n} - Br^{-6} - Cr^{-4} \quad (15)$$

potansiyel fonksiyonu (45) ve iki atomlu moleküller için

kullanılabilen $5/2 [5(a/r)^{12} - 6(a/r)^7 - \lambda(a/r)^6]$ tipindeki

Murrel potansiyeli (46) gibi çok sayıda potansiyel türleri

yazılabilir (23, 40, 47).

$j=1$ için; (11) ifadesinden, atomik ve moleküler etki-

leşme enerjileri (23) ve katıların dinamik özellikleri (48)

için kullanılabilen

$$V(r) = \frac{A_{-2}}{r^2} + \frac{A_{-1}}{r} \quad (16)$$

şeklinde bir Mie-tipi potansiyel yazılabilir.

$j=2$ için (11) denkleminde

$$V(r) = \frac{A_{-4}}{r^4} + \frac{A_{-3}}{r^3} + \frac{A_{-2}}{r^2} + \frac{A_{-1}}{r} \quad (17)$$

dördüncü mertebeden ters-kuvvet potansiyeli elde edilebilir. Denk.(17) ile verilen potansiyel ifadesi, iki molekülün etkileşme potansiyeli olarak alınabilir (23,49): Potansiyel parametrelerinden A_{-1} molekülün toplam yüküne, A_{-2} yük dağılımının dipol momentine, A_{-3} kuadrupol moment ve A_{-4} ise dipol-kuadrupol momentine karşılık gelir (23). d_1 ve d_2 dipol momentine sahip iki atom (ya da molekül (23)) için etkileşme terimi $-d_1 d_2 / r^3$ 'dür (40). Ayrıca α polarizasyon sabiti ve Z iyon yükü olmak üzere, $-\alpha Z^2 / r^4$ terimi bir molekül ile bir iyon etkileşmesine karşılık gelir (50). Bunlardan başka, $1/2$ spinli parçacıkların arasındaki manyetik etkileşmeler de ters-kuvvet potansiyelleri ile ifade edilebilir (51).

SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN ÇÖZÜM TEKNİKLERİ

Relativistik olmayan kuantum mekaniğinde, merkezi $V(r)$ potansiyeli içindeki bir parçacığın veya indirgenmiş kütleli iki parçacıklı bir sistemin enerjileri radyal Schrödinger denkleminin çözümü ile belirlenir. Schrödinger dalga denkleminin tam çözümlerinin bir kaç potansiyelle sınırlı kalması, bir çok araştırmacının ilgisini çekmiş ve son yıllarda yeni metodların geliştirilmesine yol açmıştır.

Schrödinger denklemini tam olarak çözmenin bir yolu, verilen bir potansiyel için, doğrudan diferansiyel denklemi çözmektir. Bu teknik basit formdaki potansiyeller için, uygulanabilir ancak genelde büyük güçlüklerle yol açar. Çalışmalar, bu güçlüğü yenebilmek amacıyla yönelik olarak, çözülebilen potansiyel sayısını artırmak doğrultusundadır. Genel olarak dalga denkleminin çözümü cebir işlemlerine dayandırıldığı zaman zorlukların minimuma indirilebileceği fikri ağırlık kazanmıştır.

Bir potansiyel içindeki parçacığın karakteristik davranışını ve enerjisini belirleyebilmek için dalga fonksiyonunun tam olarak bilinmesi gerekir. Dalga fonksiyonu

parçacığın konumunun ve zamanın tek değerli bir fonksiyonudur. Aynı zamanda sonlu, sürekli ve tüm uzay üzerinden integre edilebilir olmalıdır. Polinom şeklindeki potansiyeller için dalga fonksiyonları genellikle, exponansiyel bir kısım ile seri şeklinde bir polinomun çarpımı olarak alınır (11,52).

Kuvvet serisi şeklindeki potansiyeller için Schrödinger denkleminin tam çözümlerinde, son yıllarda yaygın olarak, kuvvet serisi metodları (örneğin, Hill-determinantı metodu, sürekli kesirler metodu,...) ve süpersimetrik kuantum mekaniği (SSKM) metodu kullanılmaktadır. Bu metodlarla yapılan çözümler, doğrudan diferansiyel denklem çözümü yapılmadan, sadece cebirik işlemlere dayanır. Kullanılan çözüm tekniklerinin bu çalışmada geliştirilen metoda yakınlıkları açısından, Hill determinantı ve SSKM metodlarını kısaca tanıtalım:

2.1. Hill-Determinantı Metodu

Hill-determinantı metodu (11), verilen bir potansiyel için dalga fonksiyonunu önceden kestirme temeline dayanır. Dalga fonksiyonu genel olarak $\tilde{\psi}(r) = \psi(r) \exp[i f(r)]$ şeklinde seçilir. Burada $\psi(r) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n r^n$ şeklinde bir serisi olarak

ele alınır. $f(r)$ fonksiyonu verilen bir potansiyel için kestirilerek $\Phi(r)$ dalga fonksiyonu, radyal Schrödinger denkleminde kullanılır. Böylece A_n katsayılarına bağlı

$$\dots + b_n A_{n+1} + a_n A_n + c_n A_{n-1} + d_n A_{n-2} + \dots = 0, \quad n \geq 0. \quad (18)$$

şeklinde bir tekrarlama bağıntısı elde edilir (11). Buradaki $a_n, b_n, c_n, d_n, \dots$ değerleri $f(r)$ fonksiyonunun ve ele alınan potansiyelin katsayıları ile enerji değerine bağlıdır. Tekrarlama bağıntısının katsayılarından

$$D_N = \begin{vmatrix} a_0 & b_0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ c_1 & a_1 & b_1 & 0 & \dots & \dots \\ d_2 & c_2 & a_2 & b_2 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & d_{N-1} & c_{N-1} & a_{N-1} \end{vmatrix} \quad (19)$$

determinantı (Hill determinantı) yazılabilir. Hill determinantının $\det D_N = 0$ özdeğer şartı kullanılarak, sistemin özdeğerleri elde edilir (11).

2.2 Süpersimetrik Kuantum Mekaniğinin Kullanıldığı Metod

Süpersimetrik Kuantum Mekaniğinde (SSKM), ele alınan sistem bir boyutta,

$$H_{\pm} = - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\pm}(x) \quad (20)$$

şeklinde bir hamiltonien çifti ile karakterize edilir (4).

Burada

$$V_{+}(x) = V_{-}(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{d}{dx} \left[\frac{\Psi'(0)}{\Psi(0)} \right] \quad (21)$$

dir ve $V_{\pm}(x)$ potansiyelleri, süpersimetrik eş potansiyeller olarak bilinir. $\Psi_0(x)$ sistemin temel-durum dalga fonksiyonu olmak üzere; $E_0^- = 0$ için H_{+} 'nin spektrumu ile H_{-} 'nin spektrumu özdeştir (herhangi bir n değeri için $E_{n+1}^- = E_n^+$ dir). SSKM'de H_{-} 'nin temel-durum dalga fonksiyonundan daha çok, $W(x)$ süperpotansiyeli kullanılır. $W(x)$ ile $\Psi_0(x)$ arasındaki ilişki

$$W(x) = - \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left[\frac{\Psi'_0(x)}{\Psi_0(x)} \right] \quad (22a)$$

ve

$$\Psi_0(x) = \exp \left[- \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int^x W(x) dx \right] \quad (22b)$$

şeklindedir ve süpersimetrik eş potansiyeller $V_{\pm}(x)$, süperpotansiyele

$$V_{\pm}(x) = W^2(x) \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} W'(x) \quad (23)$$

şeklinde bağlıdır (4,16). Şekil değişmezliği (shape invariant) özelliğine sahip potansiyeller (örneğin; Coulomb, harmonik osilatör, Morse,...) için $V_+(x)$ ve $V_-(x)$ potansiyelleri arasında bir sabit kadar fark vardır ve sözkonusu ilişki

$$\begin{aligned} V_+(x) &= W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} W'(x) + R \\ &= V_-(x) + R \end{aligned} \quad (24)$$

olarak verilebilir (18). $E_0^- = 0$ olduğu dikkate alınır, H_- 'nin tüm spektrumu $E_s = E_n^- = \sum_{i=1}^n R_i$ şeklindedir (16). Şekil değişmezliği özelliğine sahip olmayan potansiyellerde V_+ ve V_- potansiyelleri arasında denk.(24) ile verilen ilişki geçerli değildir. Bu tür potansiyellerin enerjilerinin bulunması için süpersimetrik WKB (SWKB) yaklaşımının (3) kullanılması gerekir. Süpersimetrik kuantum mekaniğinde ele alınan sistemin gerçek potansiyeli $V(x)$ olmak üzere

$$V(x) - E = V_-(x) - E_s \quad (25)$$

dir. Burada E sistemin enerjisine E_s ise süpersimetrik enerjiye karşılık gelir ve temel durum için (25) denklemi

$V(x) - E = V_{-}(x)$ olur (4,18,53,54).

SSKM metodunda önemli olan, verilen bir potansiyel için $W(x)$ süperpotansiyelini tayin edebilmektir. $W(x)$, denk.(23) ile verilen Riccati denkleminin çözümü ile belirlenebilir. Genellikle, diferansiyel denklem çözmek yerine, uygun bir süperpotansiyel seçimi yapılarak, sadece cebirik işlemlerle, enerji değerlerinin belirlenebilmesi tercih edilmiştir(16,18).

Bu metodların yanısıra, özdeğer problemlerinin tam olarak çözülebildiği ve bir çok araştırmacı tarafından kullanılan Yol İntegrali metodu aşağıda kısaca özetlenmiştir.

2.3 Yol (Path) İntegral Metodu

Yol integrali metodu ilk olarak Feynman tarafından geliştirilmiştir (15).

Zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$H\Psi(x) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial t} \quad (26)$$

ve Hamiltoniyen

$$H = T + V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (27)$$

şeklindedir. Serbest parçacığın t_0 anındaki dalga fonksiyonu

$\Psi(t_0)$ olmak üzere, t anındaki dalga fonksiyonu

$$\Psi(t) = G(t, t_0) \Psi(t_0) \quad (28)$$

olarak $G(t, t_0)$ Green fonksiyonu yardımıyla bulunabilir. $G(t, t_0)$ fonksiyonu, üretici fonksiyon (propagator) olarak da adlandırılır. Üretici fonksiyon,

$$\left[H_x - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = -i\hbar \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) \delta(t - t_0) \quad (29)$$

denklemini sağlar (15). Zamandan bağımsız H operatörü için (29) denklemini sağlayan üretici fonksiyon

$$G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \Theta(t - t_0) \exp \left[-iH(t - t_0) \right] \quad (30)$$

şeklindedir. Burada $\Theta(t - t_0)$, düzeltme (adım) fonksiyonudur.

Denklem (27) ile tanımlanan Hamiltoniyen için üretici fonksiyon

$$G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \Theta(t - t_0) \exp \left[-iV(t - t_0) \right] \exp \left[-iT(t - t_0) \right] \exp \left[\frac{i}{2} [T, V](t - t_0) \right] \delta(t - t_0) \quad (31)$$

ile verilir. $[T, V]$ teriminin zorluğundan kurtulabilmek için t

zamanı N eşit parçaya bölünür. Böylece parçacık x_0 'dan x 'e kadar; $x_1, x_2, \dots, x_{N-1}$ basamaklardan geçer. $G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0)$ fonksiyonu, her ara basamaktaki G değerlerinin çarpımlarının toplamı olarak gösterilebilir:

$$G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_{N-1} G(\vec{x}, t; \vec{x}_{N-1}, t_{N-1}) \\ G(\vec{x}_{N-1}, t_{N-1}; \vec{x}_{N-2}, t_{N-2}) \dots G(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0) \quad (32)$$

Zaman aralığı $\epsilon = t_{j+1} - t_j$ ile tanımlanırsa üretici fonksiyon

$$G(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}; \vec{x}_j, t_j) = \exp \left[-i \epsilon V(\vec{x}_j) \right] \exp \left[-i \epsilon T_{j+1} \right] \\ \exp \left[\frac{1}{2} \epsilon^2 [T, V] \right] \delta(\vec{x}_{j+1} - \vec{x}_j) \quad (33)$$

olarak elde edilebilir . N çok büyük ise $\epsilon = (t_N - t_0)/N$ küçüleceğinden $\exp \left[\frac{1}{2} \epsilon^2 [T, V] \right] \cong 1$ alınabilir. Denk.(32)'den konum ve zaman için $N \rightarrow \infty$ limiti alındığında

$$G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = C \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_{N-1} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right] \right] \quad (34)$$

yazılabilir(15). Burada $C = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{N/2}$ normalizasyon sabitidir.

Klasik mekanikte Lagrangian

$$L = \frac{1}{2} m \left[\frac{dx}{dt} \right]^2 - V(x) \quad (35)$$

dir ve sistemin eylemi

$$S = \int L dt \quad (36)$$

olduğu dikkate alınırsa propagatör

$$G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \int D^3 x(t) \exp \left[(i/\hbar) S \right] \quad (37)$$

olarak yazılabilir.

U_n normalize özfonksiyonlar olmak üzere, tamlik bağıntısı

$$\sum_n U_n^*(\vec{x}_0) U_n(\vec{x}) = \delta(x - x_0) \quad (38)$$

dır. $H U_n(x) = E_n U_n(x)$ özdeğer denklemi dikkate alınıp denk.(30)

kullanılarak tüm x 'ler üzerinden integral alınırsa

$$\int d^3x G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \sum_n \exp \left[(i/\hbar) E_n t \right] \quad (39)$$

olur. τ 'nın büyük değerleri ($\tau = (i/\hbar)t$) için denk.(39)'daki toplama en büyük katkı temel durum enerjisinden gelir.

$\tau \rightarrow \infty$ limiti alınırsa

$$E_0 = -\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \ln \int d^3x \, G(\vec{x}, -i\hbar\tau; \vec{x}, 0) \quad (40)$$

elde edilir. Denk.(40), temel-durum enerji seviyesinin hesabı için Feynman-Kac formülüdür (15).

Yol integrali metodunda önemli olan verilen bir potansiyel için üretici fonksiyonu belirleyebilmektir. Örneğin, harmonik osilatör için Lagrangien basit olduğundan üretici fonksiyonu bulmak zor değildir. Bununla birlikte bazı problemler için bu fonksiyonun belirlenmesinde zorluklar ortaya çıkmaktadır.

Bir çok potansiyel için özdeğerlerin tam olarak elde edilebildiği bu metodların yanısıra, çok sayıda potansiyele uygulanabilen ve yaklaşık sonuçlar veren metodlarla yapılan çalışmalar güncelliğini korumaktadır (1,2,5-10,13,,55). Bu metodlardan Rasyonel Fonksiyon Yaklaşdırma metodu, $1/N$ ve Kaydırılmış $1/N$ Açılımı metodları kuvvet serisi şeklindeki potansiyeller için kullanışlı bir metod olmaları açısından aşağıda kısaca tanıtılacaktır.

2.4 Rasyonel Fonksiyon Yaklaşdırma (Pade) Metodu

Relativistik olmayan Schrödinger denkleminin enerji özdeğerlerini yaklaşık olarak hesaplamak için geliştirilen bu

metod, Riccati denkleminin çözümü olan dalga fonksiyonunun logaritmik türevi için bir rasyonel fonksiyon yaklaştırması temeline dayanır (5,56).

Bir boyutta parite-invaryant potansiyeller $[V(-x)=V(x)]$ için Hamiltoniyen $H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ olmak üzere ($\hbar=2\mu=1$) dalga fonksiyonu $\Phi(x) = x^{-s}\Psi(x)$ şeklinde tanımlanabilir ($s=0$ ve $s=1$, çift ve tek durumlara karşılık gelir). $\Phi(0) \neq 0$ için dalga fonksiyonunun logaritmik türevi $f(x) = -\Phi'(x)/\Phi(x)$ dir. $\Phi(x)$ ve $f(x)$ fonksiyonları, $H\Psi(x) = E\Psi(x)$ Schrödinger denkleminde kullanılırsa

$$f'(x) - f(x)^2 + 2sf(x)/x = E - V(x) \quad (41)$$

Riccati denklemi elde edilir. $f(x)$, $x=0$ civarında Taylor serisine açılırsa

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j x^{2j+1} \quad (42)$$

olur. Eğer $V(x)$ potansiyeli $V(x) = \sum_{j=0}^{\infty} V_j x^{2j}$ şeklinde ise ve (42) ifadesiyle Denk.(41)'de kullanılırsa

$$f_j = (2j+2s+1)^{-1} \left[\sum_{i=0}^{j-1} f_i f_{j-i-1} + E\delta_{j0} - V_j \right], \quad j=0,1,\dots \quad (43)$$

elde edilir. $f(x)$ logaritmik türevine, $g(x) = A(x)/B(x)$ şeklinde bir rasyonel fonksiyonu yaklaşıtırlabilir (5,56).

Burada $A(x) = \sum_{j=0}^M a_j x^{2j+1}$ ve $B(x) = \sum_{j=0}^N b_j x^{2j}$, $b_0 \neq 0$ dir.

W sistemin yaklaşık enerji özdeğeri olmak üzere

$$g(x) = \sum_{j=0}^{M+N+1} f_j(W) x^{2j+1} + O(x^{2(M+N+5)}), \quad (44)$$

olur. Ayrıca, $\sum_{i=0}^n b_i f_{n-i} = a_n$, $n=0,1,\dots,M$ ve $\sum_{i=0}^n b_i f_{n-i} = 0$, $n=M+1,M+2,\dots,M+N+1$ dir. $i>N$ için $b_i = 0$ dir. Elde edilen bu denklem sisteminden

$$H_D^d \equiv \begin{vmatrix} f_{d+1} & f_{d+2} & \dots & f_{d+D} \\ f_{d+2} & f_{d+3} & \dots & f_{d+D+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_{d+D} & f_{d+D+1} & \dots & f_{d+2D-1} \end{vmatrix} \quad (45)$$

determinantı elde edilir. Burada $d = M-N \geq 0$ ve $D = N+1$ dir.

H_D^d determinantının köklerinden W enejji değeri elde edilebilir(5).

Bu metod, merkezi kuvvet problemlerine de uygulanabilir. Bu durumda dalga fonksiyonu $\Phi(r) = r^{-\ell} \Psi(r)$ alınır ve $f(r) = -\Phi'(r)/\Phi(r)$ değeri üç boyutta radyal Schrödinger denkleminde kullanılırsa

$$f'(r) = f(r)^2 - \frac{2(l+1)}{r} f(r) + E - V(r) \quad (46)$$

Riccati denklemi elde edilir (56). Burada $V(r) = \sum_{j=1}^{\infty} V_j r^j$ ve $f(r) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j r^j$ dir. $f_0 = -V_{-1}/(l+1)$ olmak üzere diğer f_j değerleri

$$f_{j+1} = (2l+j+3)^{-1} \left[\sum_{i=0}^j f_i f_{j-i} + E \delta_{j0} - V_j \right], \quad j=0,1,\dots \quad (47)$$

ifadesinden bulunabilir. Bu durumda da yaklaşık enerji değerleri, denk.(45) ile verilen H_D^d determinantının kökleri ile belirlenebilir (5).

2.5 1/N Açılımı Metodu

Büyük N açılımı, bir kuantum mekanik sistemin düşük enerji seviyeleri ve karşılık gelen dalga fonksiyonlarının belirlenmesi amacıyla ilk olarak Ferrel ve Scalapino tarafından geliştirilmiş bir methodtur (57). Burada N uzay boyutudur. Bu yaklaşım, geliştirilen bir perturbasyon serisi civarında, klasik hareket denkleminin bir çözümüne dayanır(13a).

Küresel simetrik bir $V(r)$ potansiyeli için radyal

Schrödinger denklemi N-boyutta ($\hbar=\mu=1$)

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{N-1}{r} \frac{d}{dr} \right] + \frac{\ell(\ell+N-2)}{2r^2} + \tilde{V}(r) \right\} \phi(r) = E\phi(r) \quad (48)$$

şeklindedir. Burada $\tilde{V}(r)$, N-boyutlu potansiyeldir. (48) denklemi $\Psi(r) = r^{(N-1)/2} \phi(r)$ dönüşümü altında

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\Psi}{dr^2} + k^2 \left[\frac{(1-1/k)(1-3/k)}{8r^2} + V(r) \right] \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (49)$$

olarak yazılabilir. Burada $k = N + 2\ell$, $\tilde{V}(r) = k^2 V(r)$ ve $1/k$ açılım parametresidir. $N \rightarrow \infty$ için $k \rightarrow \infty$ olmaktadır. k 'nın çok büyük değerleri için $(k-1)(k-3)/k^2 \rightarrow 1$ olur ve (49) denklemi

$$-\frac{1}{2k^2} \frac{d^2\Psi}{dr^2} + \left[\frac{1}{8r^2} + \frac{V(r)}{k^2} \right] \Psi(r) = (E/k^2) \Psi(r) \quad (50)$$

şekline döndürür. Bu ise bir-boyutlu uzayda k^2 kütleli bir parçacık problemidir. Burada efektif potansiyel

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{1}{8r^2} + \tilde{V}(r), \quad \tilde{V}(r) = \frac{V(r)}{k^2} \quad (51)$$

dir. Potansiyelin $r=r_0$ minimum noktası civarında $\Psi(r)$ dalga fonksiyonu bir pik verir (büyük k limitinde) ve bu nokta için özdeğer spektrumu

$$E^{(-2)} = \frac{1}{8} r_0^{-2} + V(r_0) \quad (52)$$

olur (13a).

Temel-durum için $1/k$ 'nın kuvvetleri şeklindeki perturbasyon serileri şu şekilde hesaplanır: Dalga fonksiyonu

$$\Psi(r) = e^{U(x)} \quad (53)$$

olarak tanımlanır. Burada $x = r - r_0$ 'dır. $V_{\text{eff}}(x)$ potansiyelinin minimumu sıfır olacak şekilde seçilirse efektif potansiyel, denk.(51)'de tanımlanandan bir sabit kadar farklı olarak

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{1}{8r(x)^2} + \tilde{V}(r(x)) - E^{(-2)}, \quad (54)$$

şeklinde tanımlanabilir. Denk.(49) kullanılırsa

$$-\frac{1}{2} \left[U''(x) + U'(x)^2 \right] + k^2 V_{\text{eff}}(x) + \left[-\frac{1}{2} k + \frac{3}{8} \right] r(x)^{-2} = \varepsilon \quad (55)$$

$$\varepsilon = E - k^2 E^{(-2)}, \quad U'(x) = \frac{dU(x)}{dx}$$

bulunur. Tekrar eden çözümler, enerji ve dalga fonksiyonunun seri açılımıyla elde edilebilir:

$$\varepsilon = \sum_{n=-1}^{\infty} E^{(n)} k^{-n}, \quad U'(x) = \sum_{n=-1}^{\infty} U^{(n)}(x) k^{-n} \quad (56)$$

Böylece

$$U^{(-1)}(x) = \sqrt{2V_{\text{eff}}(x)} \quad (57a)$$

$$\sqrt{2V_{\text{eff}}(x)} U^{(0)}(x) = E^{(-1)} + \frac{1}{2} r(x)^{-2} + \frac{1}{2} U^{(-1)'}(x) \quad (57b)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{2V_{\text{eff}}(x)} U^{(1)}(x) = E^{(0)} - \frac{3}{8} r(x)^{-2} + \frac{1}{2} \left[U^{(0)'}(x) \right. \\ \left. + U^{(0)}(x) U^{(0)}(x) \right] \quad (57c) \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned} \sqrt{2V_{\text{eff}}(x)} U^{(n+1)}(x) = E^{(n)} + \frac{1}{2} \left[U^{(n)'}(x) \right. \\ \left. + \sum_{m=0}^n U^{(m)}(x) U^{(n-m)}(x) \right], \quad n \geq 0 \quad (57d) \end{aligned}$$

elde edilebilir. Denk.(57a), dalga fonksiyonu için bir yaklaşım verir. Çünkü $V_{\text{eff}}(0) = 0$ ve $U^{(0)}(0) < \infty$ dur. Denklem (57b)'den

$$E^{(-1)} = \frac{1}{2} r_0^{-2} - \frac{1}{2} U^{(-1)'}(0) \quad (58a)$$

bulunur. Benzer şekilde, yüksek mertebeden enerji düzeltmeleri

$$E^{(-1)} = \frac{3}{8} r_0^{-2} - \frac{1}{2} \left[U^{(0)'}(0) + U^{(0)}(0) U^{(0)}(0) \right] \quad (58b)$$

$$E^{(n)} = - \frac{1}{2} \left[U^{(n)'}(0) + \sum_{m=0}^n U^{(m)}(0) U^{(n-m)}(0) \right], \quad n > 0 \quad (58c)$$

şeklindedir. Dalga fonksiyonları

$$\Psi(r) = \exp \left[\int \sum_{n=-1}^{\infty} U^{(n)}(y) k^{-n} dy \right] \quad (59)$$

ile verilir.

Uyarılmış seviyeler için (n. uyarılmış durum için) dalga fonksiyonu

$$\Psi(r) = \left[\prod_{n=-1}^{\infty} (x - A_1) \exp \left(U_n(x) \right) \right] \quad (60)$$

$$A_1 = a_1^{(1)} k^{-1} + a_1^{(2)} k^{-2} + \dots$$

şeklinde seçilir. Denk.(60) ile tanımlanan dalga fonksiyonu denk.(49)'da kullanılarak; denk.(56) ve denk.(57)'deki benzer

işlemlerin yapılmasıyla uyarılmış seviyelerin enerji değerleri belirlenebilir (13a).

2.6 Kaydırılmış $1/N$ Açılımı

$1/N$ açılımı ilk ortaya atıldığından beri çok sayıda araştırmacının dikkatini çekmiştir. Son zamanlarda $1/N$ açılımının geliştirilmesiyle, kaydırılmış $1/N$ açılımı adı ile anılan yeni bir metod geliştirildi (13b). Bu metod, küresel simetrik potansiyellerin enerji özdeğerleri için, $1/\bar{k}$ açılım parametresine bağlı basit bir analitik açılım sağlar. Burada $\bar{k} = k - a = N + 2\ell - a$ ve a ise kaydırma parametresidir.

Denklem (49) ile verilen radyal denklem, $\bar{k}$ cinsinden yazılarak düzenlenirse

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dr^2} + \bar{k}^2 \left[\frac{(1 - (1-a)/\bar{k})(1 - (3-a)/\bar{k}) \hbar^2}{8mr^2} + \frac{V(r)}{Q} \right] \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (61)$$

haline gelir. Burada Q bir sabittir. Kaydırılmış $1/N$ açılımı metodu, $1/\bar{k}$ açılım parametresine göre sistematik olarak (61) denklemini çözmekten ibarettir. Burada efektif potansiyel

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2}{8mr^2} + \frac{V(r)}{Q} \quad (62)$$

dir. V_{eff} potansiyeli $r = r_0$ 'da bir minimuma sahiptir ve r_0 değeri için

$$4mr_0^3 V'(r_0) = \hbar^2 Q \quad (63)$$

ilişkisi mevcuttur(13b). Burada r_0 değeri

$$N+2l-2 + (2n+1) \left[3 + \frac{r_0 V''(r_0)}{V'(r_0)} \right]^{1/2} = \left[\frac{4mr_0^3 V(r_0)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad (64)$$

ifadesinden bulunabilir ve Q değeri ise Denk.(63) yardımıyla belirlenebilir. Böylece enerji terimleri

$$\bar{k} V_{\text{eff}}(r_0) = \frac{\bar{k}^2}{r_0^2} \left(\frac{\hbar^2}{8m} + \frac{r_0^2 V(r_0)}{Q} \right) \quad (65)$$

ile verilir. $\bar{k}$ 'ya bağlı başka bir dağılım ise

$$\frac{\bar{k}}{r_0^2} \left[(n + 1/2)\hbar\omega - \frac{(2 - a)\hbar^2}{4m} \right] \quad (66)$$

dir. Bu ifadenin sıfırlanmasıyla a kaydırma parametresi

$$a = 2 - 2(2n + 1)m\omega/\hbar \quad (67)$$

olarak bulunur.

$x \equiv (\bar{k})^{-1/2} (r-r_0)/r_0$ değişken değiştirilmesi yapılarak (61) denklemi $x=0$ civarında seriye açılır ve katsayılar arasında karşılaştırma yapılırsa, enerji özdeğerleri $1/\bar{k}$ 'ın kuvvet serisi cinsinden

$$E_{nl} \equiv \frac{\bar{k}}{r_0} \left[\frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{8m} + \frac{r_0^2 \bar{k} V(r_0)}{Q} + \frac{\lambda_1}{\bar{k}} + \frac{\lambda_2}{\bar{k}^2} + O\left(\frac{1}{\bar{k}^3}\right) \right] \quad (68)$$

olarak yazılabilir (13b). Burada

$$\lambda_1 = \frac{\hbar^2 (1-a)(3-a)}{8m} + (1+2n) \tilde{\epsilon}_2 + 3(1+2n+2n^2) \tilde{\epsilon}_4 - \frac{1}{\hbar\omega} \left[\tilde{\epsilon}_1^2 + 6(1+2n) \tilde{\epsilon}_1 \tilde{\epsilon}_3 + (11+30n+30n^2) \tilde{\epsilon}_3^2 \right] \quad (69)$$

$$\begin{aligned} \lambda_2 = & (1+2n) \tilde{\delta}_2 + 3(1+2n+2n^2) \tilde{\delta}_4 + 5(3+8n+6n^2+4n^3) \tilde{\delta}_6 \\ & - \frac{1}{\hbar\omega} \left[(1+2n) \tilde{\epsilon}_2^2 + 12(1+2n+2n^2) \tilde{\epsilon}_2 \tilde{\epsilon}_4 + 2(21+59n+51n^2+34n^3) \tilde{\epsilon}_4^2 \right. \\ & \left. + \tilde{\epsilon}_1 \tilde{\epsilon}_3 + 6(1+2n) \tilde{\epsilon}_1 \tilde{\delta}_3 + 30(1+2n+2n^2) \tilde{\epsilon}_1 \tilde{\delta}_5 + 6(1+2n) \tilde{\epsilon}_3 \tilde{\delta}_1 \right. \\ & \left. + 2(11+30n+30n^2) \tilde{\epsilon}_3 \tilde{\delta}_3 + 10(13+40n+42n^2+28n^3) \tilde{\epsilon}_3 \tilde{\delta}_5 \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \left[4\tilde{\epsilon}_1^2 \tilde{\epsilon}_2^2 + 36(1+2n)\tilde{\epsilon}_1 \tilde{\epsilon}_2 \tilde{\epsilon}_3 + 8(11+30n+30n^2)\tilde{\epsilon}_2^2 \tilde{\epsilon}_3^2 \right. \\
& + 24(1+2n)\tilde{\epsilon}_1 \tilde{\epsilon}_4^2 + 8(31+78n+78n^2)\tilde{\epsilon}_1 \tilde{\epsilon}_3 \tilde{\epsilon}_4 \\
& + \left. 12(57+189n+225n^2+150n^3)\tilde{\epsilon}_3^2 \tilde{\epsilon}_4^2 \right] - \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \left[8\tilde{\epsilon}_1^3 \tilde{\epsilon}_3^3 \right. \\
& + 108(1+2n)\tilde{\epsilon}_1^2 \tilde{\epsilon}_3^2 + 48(11+30n+30n^2)\tilde{\epsilon}_1 \tilde{\epsilon}_3^3 \\
& + \left. 30(31+109n+141n^2+94n^3)\tilde{\epsilon}_3^4 \right] \quad (70)
\end{aligned}$$

ve

$$\tilde{\epsilon}_j = \frac{\epsilon}{(2m\omega/\hbar)^{3/2}}, \quad \tilde{\delta}_j = \frac{\delta}{(2m\omega/\hbar)^{3/2}} \quad (j=1, 2, 3, \dots) \quad (71)$$

dir. Burada

$$w = \frac{\hbar}{2m} \left[3 + \frac{r_0 V''(r_0)}{V'(r_0)} \right] \quad (72)$$

$$\epsilon_1 = \frac{(2-a)\hbar^2}{2m}, \quad \epsilon_2 = \frac{3(2-a)\hbar^2}{4m} \quad (73)$$

$$\epsilon_3 = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{r_0^5 V^{(111)}(r_0)}{6Q}, \quad \epsilon_4 = \frac{5\hbar^2}{8m} + \frac{r_0^6 V^{(1V)}(r_0)}{24Q}$$

$$\begin{aligned}\delta_1 &= \frac{(1-a)(3-a)h^2}{4m}, & \delta_2 &= \frac{3(1-a)(3-a)h^2}{8m} \\ \delta_3 &= \frac{(2-a)h^2}{m}, & \delta_4 &= \frac{5(2-a)h^2}{4m}\end{aligned}\quad (74)$$

$$\delta_5 = \frac{3h^2}{4m} + \frac{r_0^7 V^{(v)}(r_0)}{120 Q}, \quad \delta_6 = \frac{7h^2}{8m} + \frac{r_0^8 V^{(v1)}(r_0)}{720 Q}$$

şeklindedir (13b).

Kaydırılmış $1/N$ açılımı metodu, bazı potansiyeller için tam sonuçlara iyi bir şekilde yaklaştığı için, ilgi çekici bir metoddur.

Schrödinger denkleminin tam çözümleri için şimdiye kadar Hill determinantı metodu, SSKM'nin kullanıldığı metodlar, Sürekli Kesirler Metodu gibi metodlar geliştirilmesine rağmen, daha basit işlemlere dayalı çözüm metodlarına ihtiyaç duyulmaktadır. Metodların, tam sonuçlar vermesi ve sadece basit cebirik işlemlere bağlı olması önemlerini artırmaktadır. Yukarıdaki amaca yönelik olarak, bu çalışmada, Schrödinger denkleminin sadece cebirik işlemlere dayalı çözümü için aşağıdaki metod geliştirildi.

2.7. Radyal Schrödinger Denkleminin Çözümü için Cebirik

Metod

Radyal Schrödinger dalga denklemi, Hamiltoniyen

$$H = -(\hbar^2/2\mu)\nabla^2 + V(r) \text{ olmak üzere}$$

$$H\psi(r) = E\psi(r) \quad (75)$$

şeklindedir. Küresel koordinatlarda küresel simetrik potansiyeller için üç boyutta Schrödinger denkleminin radyal kısmı

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\tilde{\psi}(r)}{dr} \right) + \left(V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - E \right) \tilde{\psi}(r) = 0 \quad (76)$$

olarak yazılabilir.

$$\phi(r) = r\tilde{\psi}(r) \quad (77)$$

dönüştürme ile (76) denkleminde

$$\phi''(r) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - E \right) \phi(r) \quad (78)$$

denklemi kolayca elde edilebilir. $\phi(r)$ radyal dalga fonksiyonu

$$\phi(0) = 0, \quad \phi'(0) = \phi(0), \quad \phi(\infty) = 0 \quad (79)$$

sınır şartlarını sağlamalı ve

$$\int_0^{\infty} [\phi(r)]^2 dr = 1 \quad (80)$$

şeklinde normalize edilebilir olmalıdır.

Dalga fonksiyonunun, bir seri polinom ile üstel bir fonksiyonun çarpımı şeklinde seçilebilmesi ile (78) denkleminin çözüm fonksiyonu

$$\phi_n(r) = f_n(r) \exp[g(r)] \quad (81)$$

formunda tanımlanabilir. Denk.(81) ile verilen dalga fonksiyonu radyal schrödinger denkleminde yerine konursa

$$\phi''(r) = \left[g''(r) + g'(r)^2 + \frac{f_n''(r) + 2g'(r)f_n'(r)}{f_n(r)} \right] \phi(r) \quad (82)$$

elde edilir. Bu ifadenin ve denk.(78)'de verilen radyal denklemin sağ tarafları birbirine eşit olacağı için bu denklemlerden kolayca

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - E \right] = g''(r) + g'(r)^2 + \frac{f_n''(r) + 2g'(r)f_n'(r)}{f_n(r)} \quad (83)$$

eşitliği elde edilir. Bu son ifade, radyal Schrödinger

denkleminin Denk.(81) ile tanımlanan dalga fonksiyonuna göre yeniden düzenlenmiş şeklidir. Burada temel amaç verilen bir $V(r)$ potansiyeli içindeki parçacığın enerjisini ve potansiyelini karşılayacak olan denk.(83)'ün sağ tarafını dolayısı ile $g(r)$ ve $f(r)$ fonksiyonlarını belirleyebilmektir. Burada unutulmaması gereken husus, $\phi(r)=f(r)\exp(g(r))$ olduğu ve bulunacak $f(r)$ ve $g(r)$ 'nin dalga fonksiyonunun bütün özelliklerini ortaklaşa taşıyacak şekilde parametrelendirilmesi gerektiğidir. Öncelikle $g(r)$ 'nin formunu belirlemeye çalışalım: Eğer $f_n(r)$ 'yi sabit ($f_n(r)=sbt$) alır ve $\phi(r)$ 'yi (83) denkleminde yerine koyarsak

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} \left[V(r) + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} - E \right] = g''(r) + g'(r)^2 \quad (84)$$

ifadesi elde edilir. Bu ifade, $g'(r)$ fonksiyonu için Riccati denklemine döndürür. Riccati denklemi, uygun bir özel çözüm fonksiyonunun belirlenmesiyle lineer diferansiyel denklemlere döndürülerek çözülebilir (58a). Ayrıca bu denklemi çözmeden; SSKM'de süperpotansiyelin seçimi düşüncesinde olduğu gibi verilen bir $V(r)$ potansiyel fonksiyonu için denklemin çözümü olacak şekilde bir $g(r)$ fonksiyonu seçilebilir. $g(r)$ fonksiyonunun formu,

r 'nin bir polinomu şeklindedir ve $g(r)$ fonksiyonu, $\phi(r)$ dalga fonksiyonunun normalizasyonunu ($r \rightarrow \infty$ için $\phi(r) = 0$) sağlayacak şekilde olmalıdır. Verilen bir potansiyel için $g(r)$ 'nin formu, $r \rightarrow \infty$ bölgesinde $\phi(r)$ dalga fonksiyonunun davranışı incelenerek belirlenebilir. Örneğin, hamonik osilatör için radyal denklem $d^2\psi(x)/dx^2 + (\lambda - x^2)\psi(x) = 0$ dir. $x \rightarrow \infty$ bölgesinde; x^2 'nin yanında λ değeri ihmal edilebilir. Elde edilen denklemin $\propto \exp(\mp x^2/2)$ formunda çözümlere sahip olduğu bulunur (58b). Dalga fonksiyonu, her yerde sonlu olması gerektiğinden r arttıkça üstel olarak azalması gerekir. Bu nedenle üstel kısım negatif olmalıdır. Dolayısı ile harmonik osilatör için $g(r) = ar^2$, $a < 0$ alınabilir. Aynı şekilde Coulomb problemi için dalga fonksiyonunun $r \rightarrow \infty$ bölgesinde asimtotik davranışı incelenirse, $g(r) = ar + b \ln r$, $a < 0$, $b > 0$ şeklinde seçilmesi gerektiği görülür.

Verilen bir potansiyel için uygun bir $g(r)$ fonksiyonu belirlenerek (83) denkleminde yerine konursa, (83) denklemi sadece $f_n(r)$ 'ye bağlı ikinci dereceden bir diferansiyel denkleme dönüşür. Elde edilen bu denklemin çözümünden, $f_n(r)$ bir kuvvet serisi olarak ortaya çıkar. Bu seri fonksiyonun kökleri, $r \rightarrow \infty$ limiti haricinde dalga fonksiyonunun kökleridir. Bu köklerin daha açık görülebilmesi amacıyla $f_n(r)$,

$$f_n(r) = \prod_{i=1}^n \left(r - a_i^{(n)} \right) \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (85)$$

$$= 1 \quad n = 0$$

formunda bir çarpım serisi şeklinde, r 'nin bir polinomu olarak seçilebilir. $f_n(r)=1$ değeri için $\phi(r)$ dalga fonksiyonu, temel-duruma karşılık gelir. Çünkü temel durumda dalga fonksiyonu, koordinat eksenini kesmemelidir. Buradaki $a_i^{(n)}$ değerleri, $n=1,2,3,\dots$ için $\phi(r)$ dalga fonksiyonunun koordinat eksenini kestiği noktalara (köklere) karşılık gelir ve $f_n(r)$ 'nin kökleriyle belirlenebilir. $f_n(r)$ 'nin denk.(85)'teki şekilde seçimi, diğer kuvvet seri metodlarındaki (veya Hill determinantındaki) dalga fonksiyonu seçimine benzerdir. Böylece, üç boyutta her ℓ değerine karşılık n tane özfonksiyon ve bunlara karşılık n tane özdeğer elde edilebilir.

Bir $V(r)$ potansiyel için; denk.(84) ile, ℓ açısal momentum kuantum sayısının bir değerine karşılık en düşük enerji seviyeleri için özdeğer ve özfonksiyon elde edilir. Yüksek enerji seviyeleri (uyarılmış seviyeler) için özdeğerler ve özfonksiyonlar ise denk.(83)'ün kullanılması ile belirlenebilir. Fakat diğer kuvvet serileri metodlarında da olduğu gibi bu seviyelerin hesapları alt seviyeler kadar kolay

değildir. Çünkü üst seviyelerin hesaplanması için yüksek dereceden denklem sistemlerinin çözülmesi gerekmektedir.

Dalga fonksiyonlarının karşılaştırılmasıyla, geliştirilen bu cebirik metodun, şekil değişmezliği gösteren potansiyeller için SSKM'nin kullanıldığı metodlara benzediği gösterilebilir: Yukarıdaki metodda temel-durum dalga fonksiyonu $\phi(r) = \exp(g(r))$ dir ve bu durumun enerji özdeğerleri (84) denklemiyle elde edilir. SSKM metodunda ise temel-durum dalga fonksiyonu $\Psi_-(r) = \exp\left[-\int W(r)dr\right]$ dir ve özdeğerler denk.(25)'den belirlenir. Dalga fonksiyonlarının karşılaştırılması ile $g(r)$ polinomu ve $W(r)$ süperpotansiyeli arasında

$$g'(r) = W(r) \quad (86)$$

bağıntısı elde edilir. (86) ifadesi, (25) denkleminde kullanılırsa,

$$\begin{aligned} V(r) - E &= W^2(r) - W'(r) \\ &= g'(r)^2 + g''(r) \end{aligned} \quad (87)$$

olur. (87) denklemi denk.(84) ile verilen ifadenin aynısıdır. Böylece, geliştirilen metodun şekil değişmezliği gösteren potansiyeller için SSKM'nin kullanıldığı metodlar ile aynı

özüm kolaylığına sahip olduđu görölür. Bununla birlikte metod, SSKM'nin kullanıldıđı metodların yaklaşık sonuçlar verebildiđi, řekil deđişmezliğine sahip olmayan potansiyellerin çözümünde de kullanılabilir.



BÖLÜM III

METODUN UYGULAMALARI

Bu bölümde, Bölüm.2.7'de geliştirilen metod bazı potansiyeller için enerji özdeğerlerinin ve özfonksiyonlarının belirlenmesinde kullanılacaktır.

Metodun uygulamasına basit bir örnek olarak önce harmonik osilatör (bir ve üç boyutta) ve Coulomb potansiyelleri ele alınarak tam enerji özdeğerleri elde edildi. Harmonik osilatör için elde edilen sonuçlardan basit bir dönüşümle, harmonik osilatör + lineer potansiyelinin çözümleri belirlendi. Metod daha sonra, kuvvet serisi şeklindeki; üç boyutta altıncı mertebe harmonik osilatör potansiyeli (simetrik), denk.(8)'den $j=k=1$ için elde edilen üç boyutta Coulomb + harmonik osilatör + lineer potansiyeli, $j=1, k=2$ için r 'nin dördüncü kuvveti ile perturbe Coulomb potansiyeli ve (11) denklemleri ile verilen ters-kuvvet ($1/r^n$) potansiyelleri için enerji spektrumunun ve dalga fonksiyonlarının elde edilmesinde kullanıldı.

3.1. Bir Boyutlu Harmonik Osilatör:

Bir boyutlu harmonik osilatör potansiyeli.

$$V(x) = Ax^2 \quad (88)$$

şeklindedir. Burada önemli olan verilen potansiyel için uygun bir $g(x)$ fonksiyonu seçmektir. Denk.(88) ile verilen osilatör potansiyeli için uygun $g(x)$ fonksiyonu

$$g(x) = ax^2 \quad (89)$$

şeklinde alınabilir. Denk.(85) ile verilen $f_n(x)$ fonksiyonundan, $n=0$ için $f_0(x) = 1$ alınarak (89) ifadesi denk.(84) da kullanılırsa

$$V(x) - E = 4a^2 x^2 + 2a \quad (90)$$

olur ve böylece

$$V(x) = 4a^2 x^2 \quad \text{ve} \quad E_0 = -2a \quad (91)$$

elde edilir. Denk.(91) ile denk.(88)'in karşılaştırılması ile

$$A = 4a^2 \quad (92)$$

şeklinde, potansiyel parametresi ile fonksiyonun parametresi arasındaki ilişki bulunur. Böylece temel durum enerjisi (sıfır-nokta enerjisi)

$$E_0 = \sqrt{A} \quad (93)$$

ve buna karşılık gelen dalga fonksiyonu da

$$\phi_0(x) = \exp\left[-(\sqrt{A}/2) x^2\right] \quad (94)$$

olur. Birinci seviyenin ($n=1$) hesaplanması için $f_1(x) = x - \alpha_1^{(1)}$ alınır. Denk.(89)'daki $g(x)$ ve $f_1(x)$, (83) denkleminde kullanılırsa

$$V(x) - E = 4a^2 x^2 + 2a + \frac{4ax}{x - \alpha_1^{(1)}} \quad (95)$$

olur. (95) denkleminin son terimi düzenlenirse

$$V(x) - E = 4a^2 x^2 + 6a + \frac{4a\alpha_1^{(1)}}{x - \alpha_1^{(1)}} \quad (96)$$

yazılabilir. Böylece denk.(88) dikkate alındığında

$$E_1 = 3\sqrt{A} \quad \text{ve} \quad \alpha_1^{(1)} = 0 \quad (97)$$

elde edilir. Bu duruma (n=1) karşılık gelen dalga fonksiyonu

$$\phi_1(x) = x \exp\left[-(\sqrt{A}/2) x^2\right] \quad (98)$$

olur. İkinci seviye (n=2) için $f_2(x) = (x - \alpha_1^{(2)})(x - \alpha_2^{(2)})$ ve denk.(89)'da verilen $g(x)$ kullanılarak (83) denklemi çözümlirse

$$V(x) - E = 4a^2 x^2 + 2a + \frac{4ax \left[(x - \alpha_1^{(2)}) + (x - \alpha_2^{(2)}) \right] + 2}{(x - \alpha_1^{(2)})(x - \alpha_2^{(2)})} \quad (99)$$

bulunur ve son terim düzenlenirse

$$V(x) - E = 4a^2 x^2 + 10a + \frac{4a(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)})x - 8a\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} + 2}{(x - \alpha_1^{(2)})(x - \alpha_2^{(2)})} \quad (100)$$

elde edilir. (100) denkleminde (88) potansiyeli için (n=2)

$$E_2 = 5\sqrt{A}$$

ve

$$(101)$$

$$\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} = 0 \quad \text{ve} \quad \alpha_1^{(2)} \alpha_2^{(2)} = -\frac{1}{2\sqrt{A}}$$

ifadeleri bulunur. Dalga fonksiyonu ise

$$\phi_2(x) = \left[x^2 - \frac{1}{2\sqrt{A}} \right] \exp \left[-(\sqrt{A}/2)x^2 \right] \quad (102)$$

şeklinde verilebilir.

Genel durumda, denk.(88) ile verilen harmonik osilatör potansiyeli için enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları, yukarıdaki ilişkilerden (denk.(88)-denk.(102))

$$E_n = \sqrt{A} (2n + 1), \quad n=0,1,2,\dots \quad (103)$$

$$\phi_n(x) = \left[\prod_{i=1}^n (x - \alpha_i^{(n)}) \right] \exp \left[-(\sqrt{A}/2)x^2 \right] \quad n=1,2,\dots \quad (104)$$

şeklinde elde edilir. Denk.(103) ile verilen enerji özdeğerleri, bir boyutlu harmonik osilatörün 'tam' enerji özdeğerleridir. Denklem (104) ile verilen dalga fonksiyonundaki $\alpha_i^{(n)}$ katsayıları (ilk üç set için)

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} = 0, \quad \sum_{i < j}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} = -n(n-1)/(4\sqrt{A}), \quad (105)$$

$$\sum_{i < j < k}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} \alpha_k^{(n)} = 0$$

ifadeleri kullanılarak belirlenebilir. $\alpha_1^{(n)}$ 'ler için belirlenen bu ifadelerin denk.(85)'de kullanılması ile $f_n(r)$ 'nin Hermite polinomlarına (58b) dönüştüğü görülebilir.

Harmonik osilatör + lineer potansiyeli (bir boyutta)

$$V(x) = Ax^2 + Bx \quad (106)$$

şeklindedir. Denklem (88) ile verilen harmonik osilatör ve denk.(106)'da tanımlanan Harmonik osilatör + lineer potansiyelinin, A ve B parametrelerinin belli değerleri için x'e göre değişimi Şekil-1'deki gibidir.

Denk.(106) ile verilen potansiyel için çözümler

$$x \longrightarrow x + \frac{b}{2a} \quad a < 0, b < 0 \quad (107)$$

dönüştürme ile harmonik osilatör sonuçlarından kolayca elde edilebilir. Böylece parametrik potansiyel

$$V(x) = 4a^2 x^2 + 4abx \quad (108)$$

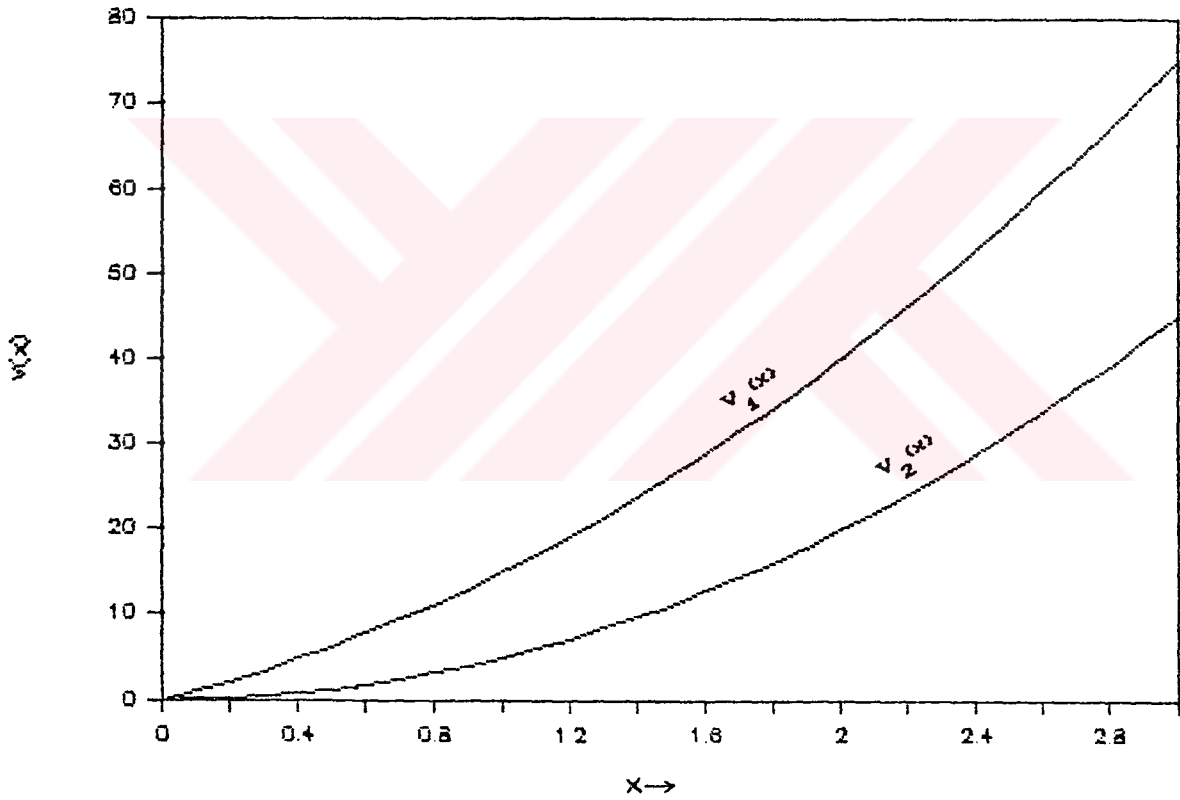
şeklinde olur. Burada

$$A = 4a^2, \quad B = 4ab \quad (109)$$

ve her n değeri için enerji özdeğerleri,

$$E_n = - \left[\frac{B^2}{4A} - \sqrt{A} (2n + 1) \right], \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (110)$$

olarak bulunur. Denk.(103) ve denk.(110) karşılaştırılırsa,



Şekil-1. $V_1(x) = 5x^2$ ve $V_2(x) = 5x^2 + 10x$ potansiyellerinin grafikleri ($\hbar=2\mu=1$ birim sisteminde).

harmonik osilatöre lineer terimin eklenmesiyle aynı A parametresi için enerjinin aşağıya kaydığı görülmektedir.

Genel duruma karşılık gelen dalga fonksiyonları

$$\phi_0(x) = \exp\left[-(\sqrt{A}/2)x^2 - (B/2\sqrt{A})x - B^2/8A^{3/2}\right], \quad (n=0 \text{ için})$$

$$\phi_n(x) = \left[\prod_{i=1}^n (x - \alpha_i^{(n)}) \right] \exp\left[-(\sqrt{A}/2)x^2 - (B/2\sqrt{A})x - B^2/8A^{3/2}\right]$$

$$n=1, 2, 3, \dots \quad (111)$$

şeklinde olur. Denk.(111)'deki $\alpha_i^{(n)}$ değerleri (ilk üç set için)

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} = -\frac{nB}{2\sqrt{A}}, \quad \sum_{i < j}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} = -\frac{n(n-1)(A^2 - B/2A)}{A}, \quad (112)$$

$$\sum_{i < j < k}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} \alpha_k^{(n)} = -\frac{n! B(3\sqrt{A} - B^2/2A)}{(n-3)! 24A^{5/2}} \quad n=1, 2, \dots$$

eşitliklerinden belirlenir.

3.2. Üç-Boyutta Harmonik Osilatör:

Üç Boyutta etkin harmonik osilatör potansiyeli

$$V_{\text{eff}}(r) = Ar^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \quad (113)$$

dir. Bu potansiyel için uygun $g(r)$ fonksiyonu,

$$g(r) = ar^2 + b \ln r \quad a < 0, b > 0 \quad (114)$$

şeklinde seçilebilir. Denk.(85) ile tanımlanan $f_n(r)$ fonksiyonundan $f_0(r) = 1$ seçilir ve denk.(114) ile birlikte (84) denkleminde kullanılırsa,

$$V(r) - E = 4a^2 r^2 + \frac{b(b-1)}{r^2} + 2a(2b+1) \quad (115)$$

elde edilir. Bu parametrik ifade ile denk.(113) karşılaştırıldığında

$$V_{\text{eff}}(r) = 4a^2 r^2 + \frac{b(b-1)}{r^2}, \quad E_0 = -2a(2b+1) \quad (116)$$

ve

$$A = 4a^2 \quad \text{ve} \quad \ell+1 = b \quad (117)$$

bulunur. Böylece temel-durum için enerji özdeğeri

$$E_{0\ell} = \sqrt{A} (2\ell+3) \quad (118)$$

ve bu durum için özfonksiyon

$$\phi_{0\ell}(r) = r^{\ell+1} \exp\left[-(\sqrt{A}/2)r^2\right] \quad (119)$$

şeklinde yazılır.

$f_1(r) = r - \alpha_1^{(1)}$ ile denk.(114) ile verilen $g(r)$ ifadesi (83) denkleminde kullanıldığında; $\alpha_1^{(1)} = 0$ ve $b=0$ şartları ortaya çıkar. $b=0$ olması durumunda $\ell=-1$ olur ve bu da $f_1(r)$ 'nin, üç-boyutta harmonik osilatör için geçersiz olduğunu ifade eder.

$f_2(r) = (r - \alpha_1^{(2)})(r - \alpha_2^{(2)})$ seçilerek $g(r)$ (denk.(114)) ile birlikte denk.(83)'de kullanılır ve gerekli düzeltmeler yapılırsa

$$\begin{aligned} V(r) - E = & 4a^2 r^2 + \frac{b(b-1)}{r^2} + 2a(2b+5) \\ & + \frac{4a(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)})x - \left[8a\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} - 2(2b+1)\right]}{(x - \alpha_1^{(2)})(x - \alpha_2^{(2)})} \end{aligned} \quad (120)$$

parametrik ifadesi elde edilir. (120) ifadesi ile denk.(113) karşılaştırılırsa

$$A = 4a^2, \quad b = l+1, \quad E_1 = -2a(2b+5) \quad (121)$$

$$\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} = 0, \quad \alpha_1^{(2)} \alpha_2^{(2)} = -\frac{2l+3}{2\sqrt{A}} \quad (122)$$

elde edilir. Bu ifadelerden (113) potansiyelinin birinci seviyesi için

$$E_{1l} = \sqrt{A} (2l + 7) \quad (123)$$

özdeğeri ve bunlara karşılık gelen

$$f_{1l}(r) = (r-\alpha_1^{(2)})(r-\alpha_2^{(2)}) r^{l+1} \exp\left[-(\sqrt{A}/2)r^2\right] \quad (124)$$

özfonksiyonu belirlenir. $f_3(r) = (r-\alpha_1^{(3)})(r-\alpha_2^{(3)})(r-\alpha_3^{(3)})$ seçimi, (83) denkleminin çözümünü $b=-1$ veya 0 değerine (bu durumda $l=0$ veya -1 olur) sınırladığı için denk.(113) ile verilen potansiyelin çözümünde kullanılamaz.

$f_4(r) = (r-\alpha_1^{(4)})(r-\alpha_2^{(4)})(r-\alpha_3^{(4)})(r-\alpha_4^{(4)})$ alınır ve $g(r)$ fonksiyonu (denk.(114)) ile denk.(83)'da kullanılıp elde edilen parametrik ifade denk(113) ile karşılaştırılırsa parametreler arasında

$$A = 4a^2, \quad l+1 = b, \quad E_2 = -2a(2b+9) \quad (125)$$

$$\alpha_1^{(4)} + \alpha_2^{(4)} + \alpha_3^{(4)} + \alpha_4^{(4)} = 0$$

$$\alpha_1^{(4)} \alpha_2^{(4)} + \alpha_1^{(4)} \alpha_3^{(4)} + \alpha_1^{(4)} \alpha_4^{(4)} + \alpha_2^{(4)} \alpha_3^{(4)} + \alpha_2^{(4)} \alpha_4^{(4)} + \alpha_3^{(4)} \alpha_4^{(4)} = - \frac{2l+5}{\sqrt{A}}$$

$$\alpha_1^{(4)} \alpha_2^{(4)} \alpha_3^{(4)} + \alpha_1^{(4)} \alpha_2^{(4)} \alpha_4^{(4)} + \alpha_1^{(4)} \alpha_3^{(4)} \alpha_4^{(4)} + \alpha_2^{(4)} \alpha_3^{(4)} \alpha_4^{(4)} = 0 \quad (126)$$

$$\alpha_1^{(4)} + \alpha_2^{(4)} + \alpha_3^{(4)} + \alpha_4^{(4)} = \frac{(2l+3)(2l+5)}{4A}$$

ilişkileri bulunur. (125) ve (126) ifadelerinden ikinci seviyenin enerjisi

$$E_{2l} = \sqrt{A} (2l + 11) \quad (127)$$

ve bu seviyenin dalga fonksiyonu

$$\phi_{2l}(r) = \left((r - \alpha_1^{(4)}) (r - \alpha_2^{(4)}) (r - \alpha_3^{(4)}) (r - \alpha_4^{(4)}) \right) r^{l+1} \exp\left(-\frac{\sqrt{A}}{2} r^2\right) \quad (128)$$

şeklinde bulunur.

Genel durumda, denk.(113) ile verilen harmonik osilatör potansiyelinin 'tam' enerji spektrumu ve dalga fonksiyonları

$$E_{nl} = \sqrt{A} (4n + 2l + 3), \quad n=0,1,2,\dots, \quad l=0,1,2,\dots \quad (129)$$

$$\phi_{n\ell}(r) = \left[\prod_{i=1}^n (r - \alpha_i^{(2n)}) \right] r^{\ell+1} \exp\left[-(\sqrt{A}/2)r^2\right], \quad n=1,2,\dots \quad (130)$$

şeklinde olur ($n=0$ için $\phi_{0\ell}$ denk.(119) ile verildi). Burada $\alpha_1^{(2n)}$ değerleri (ilk üç durum için)

$$\sum_{i=1}^{2n} \alpha_i^{(2n)} = 0, \quad \sum_{i<j}^{2n} \alpha_i^{(2n)} \alpha_j^{(2n)} = -\frac{n(2n+2\ell+1)}{2\sqrt{A}}$$

$$\sum_{1<j<k}^{2n} \alpha_i^{(2n)} \alpha_j^{(2n)} \alpha_k^{(2n)} = 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (131)$$

$$\sum_{1<j<k<l}^{2n} \alpha_i^{(2n)} \alpha_j^{(2n)} \alpha_k^{(2n)} \alpha_l^{(2n)} = \left[\sum_{i<j}^{2n} \alpha_i^{(2n)} \alpha_j^{(2n)} \right] \left[\sum_{i<j}^{2n-2} \alpha_i^{(2n)} \alpha_j^{(2n)} \right]$$

ifadelerinden elde edilebilir. $\alpha_i^{(n)}$ 'lerin denk.(131) ile verilen değerleriyle $f_n(r)$ fonksiyonu, Laguerre polinomlarına (58c) özdeşdir ve üç-boyutta harmonik osilatör için bulunan bu sonuçlar diğer çalışmalarda elde edilen sonuçlarla (58b,c) uyum içindedir.

3.3. Uç Boyutta Coulomb Potansiyeli:

Uç boyutta etkin Coulomb potansiyeli

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{A}{r} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}, \quad A < 0 \quad (132)$$

şeklindedir. Bu potansiyele çözüm teşkil edecek $g(r)$ fonksiyonu

$$g(r) = ar + b \ln r, \quad a < 0, b > 0 \quad (133)$$

şeklinde seçilebilir. $f_n(r)$ burada da denk.(85)'de tanımlandığı formdadır. $n=0$ için denk.(133) ile tanımlanan $g(r)$ ve $f_0(r)=1$ değerleri, denk.(84)'ü çözmek için kullanılırsa

$$V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E = \frac{2ab}{r} + \frac{b(b-1)}{r^2} + a^2 \quad (134)$$

elde edilir. Denk.(134) ile denk.(132) karşılaştırılırsa

$$A = 2ab, \quad \ell+1 = b \quad \text{ve} \quad E_0 = -a^2 \quad (135)$$

bulunur. Bu durumun dalga fonksiyonu

$$\phi_{0\ell}(r) = r^{\ell+1} \exp(ar) \quad (136)$$

olur.

Birinci seviye ($n=1$) için, denk.(85)'den $f_1(r)=r-\alpha_1^{(1)}$

olur ve $g(r)$ ile, denk.(83)'de kullanılırsa

$$V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - E = \frac{2a(b+1)}{r} + \frac{b(b-1)}{r^2} + a^2 + \frac{2a\alpha_1^{(1)} + 2b}{r(r-\alpha_1^{(1)})} \quad (137)$$

bulunur. Denk.(137) ile denk.(132) karşılaştırılırsa

$$A = 2a(b+1), \quad l+1 = b \quad \text{ve} \quad E_1 = -a^2 \quad (138)$$

ve

$$\alpha_1^{(1)} = -\frac{b}{a} \quad (139)$$

elde edilir. Bu duruma karşılık gelen dalga fonksiyonu

$$\phi_{1l}(r) = (r-\alpha_1^{(1)}) r^{l+1} \exp(ar) \quad (140)$$

dir.

$n=2$ (ikinci seviye) için $f_2(r)=(r-\alpha_1^{(2)})(r-\alpha_2^{(2)})$ olur.

$f_2(r)$ ve denk.(133)'de verilen $g(r)$, (83) denkleminde kullanılır ve

$$V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - E = \frac{2a(b+2)}{r} + \frac{b(b-1)}{r^2} + a^2$$

$$+ \frac{\left[2a(\alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(2)}) + 2(2b+1)\right]r - 4a\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} + 2b(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)})}{r(r-\alpha_1^{(2)})(r-\alpha_2^{(2)})} \quad (141)$$

elde edilir. Bu ifadeden, son terimin payının sıfırlanmasıyla elde edilebilen denklem, denk.(132) ile karşılaştırıldığında

$$A = 2a(b+2), \quad \ell+1 = b \quad \text{ve} \quad E_2 = -a^2 \quad (142)$$

ve

$$\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} = -\frac{2b+1}{a} \quad (143)$$

$$\alpha_1^{(2)} \alpha_2^{(2)} = \frac{b(2b+1)}{2a^2}$$

eşitlikleri elde edilebilir.

Genel durumda, potansiyel parametreleri ve $g(r)$ fonksiyonunun katsayıları arasında

$$A = 2a(b+n), \quad \ell+1 = b \quad \text{ve} \quad E_2 = -a^2 \quad (144)$$

ilişkileri bulunur. Burada A sabit fakat b her n için farklıdır. Her n ve ℓ değeri için denk(132)'deki potansiyelin enerji spektrumu,

$$E_{nl} = \frac{A^2}{4(n+l+1)^2} \quad (145)$$

şeklinde olur. Karşılık gelen dalga fonksiyonu ($n=0$ için ϕ_{0l} denk.(136)'de verildi),

$$\phi_{nl}(r) = \left[\prod_{i=1}^n (r - \alpha_i^{(n)}) \right] r^{l+1} \exp(ar), \quad n=1, 2, \dots \quad (146)$$

dir. Burada $\alpha_1^{(n)}$ değerleri

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} = - \frac{n(2b + n - 1)}{2a}, \quad n=1, 2, 3, \dots \quad (147)$$

$$\prod_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} = (-1)^n \frac{\beta_n}{2^{n-1} a^n}, \quad \beta_1 = b, \quad \beta_n = \beta_{n-1} (2b+n-1), \quad n=2, 3, \dots$$

ifadelerinden bulunur.

3.4. Üç Boyutta Altıncı Mertebe Anharmonik Osilatör Potansiyeli

Altıncı mertebe anharmonik osilatör potansiyeli üç boyutta ,

$$V_{\text{eff}}(r) = Ar^6 + Br^4 + Cr^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \quad (148)$$

şeklindedir. Bu potansiyel son yıllarda bir çok araştırmacı tarafından çeşitli metodlarla çözülmüştür (9,11,12,52,59-67). Denk.(148) ile verilen potansiyel için

$$g(r) = \frac{a}{4} r^4 + \frac{b}{2} r^2 + c \ln r, \quad a < 0, \quad b < 0, \quad c > 0 \quad (149)$$

olacak şekilde bir $g(r)$ fonksiyonu tanımlayalım.

r^* 'nin çift kuvvetlerinin fonksiyonu olan potansiyeller için $f_n(r)$ yerine $f_n(r^2)$ almak çözümleri kolaylaştırır ($n=0$ için $f_0(r^2)=1$). Temel-durum için ($n=0$) denk.(149)'da verilen $g(r)$ ve $f_0(r^2)=1$ değerleri (84) denkleminin çözümü için kullanılırsa

$$V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E = a^2 r^6 + 2abr^4 + (b^2 + 2ac + 3a)r^2 + \frac{c(c-1)}{r^2} + b(2c+1) \quad (150)$$

parametrik ifadesi elde edilir. Bu ifade denk.(148) ile karşılaştırılırsa, katsayılar arasında

$$A = a^2, \quad B = 2ab, \quad C = b^2 + a(2c+3), \quad l+1 = c \quad \text{ve}$$

$$E_0 = -b(2c+1) \quad (151)$$

ilişkileri bulunur. Denk.(148) ile verilen potansiyelin parametreleri arasında,

$$C = \frac{B^2}{4A} - \sqrt{A} (2l+5) \quad (152)$$

şeklinde bir sınırlama mevcuttur ve temel-durumun enerjisi

$$E_{0l} = \frac{B}{2\sqrt{A}} (2l+3) \quad (153)$$

dir. Birinci seviye ($n=1$) için $f_1(r) = r^2 - \alpha_1^{(1)}$ alınır ve denk.(149)'daki $g(r)$ ile birlikte denk.(83)'de kullanılırsa

$$\begin{aligned} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - E = a^2 r^6 + 2abr^4 + (b^2 + a(2c+7))r^2 + \frac{c(c-1)}{r^2} \\ + b(2c+5) + 4a\alpha_1^{(1)} + \frac{4a\alpha_1^{(1)2} + 4b\alpha_1^{(1)} + 2(2c+1)}{r^2 + \alpha_1^{(1)}} \end{aligned} \quad (154)$$

ifadesi bulunur. Bu ifade ile denk.(148) kıyaslanırsa

$$A = a^2, \quad B = 2ab, \quad C = b^2 + a(2c+7), \quad \ell+1 = c \quad \text{ve}$$

$$E_1 = -b(2c+5) - 4a\alpha_1^{(1)} \quad (155)$$

elde edilir ve $\alpha_1^{(1)}$ değerleri

$$2a\alpha_1^{(1)2} + 2b\alpha_1^{(1)} + 2c+1 = 0 \quad (156)$$

eşitliğinden belirlenebilir. Bu durumda potansiyel parametreleri arasındaki kısıtlama

$$C = \frac{B^2}{4A} - \sqrt{A} (2\ell+9) \quad (157)$$

olur ve bu seviyenin enerji özdeğeri

$$E_{1\ell}^{\pm} = \frac{B}{2\sqrt{A}} (2\ell+7) - \frac{B}{8A} \pm \frac{1}{\sqrt{A}} \left[\frac{B^2}{4A} + 8\sqrt{A}(2\ell+3) \right]^{1/2} \quad (158)$$

şeklinde elde edilir.

İkinci seviye ($n=2$) için, $f_2(r^2) = (r^2 - \alpha_1^{(2)})(r^2 - \alpha_2^{(2)})$ olur ve $g(r)$ ile denk.(83)'de kullanılırsa

$$V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E = a^2 r^6 + 2abr^4 + (b^2 + a(2c+9))r^2 + \frac{c(c-1)}{r^2} + 2b(2c+5)$$

$$\begin{aligned}
& + 4a(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) + \frac{\left[4a \left(\alpha_1^{(2)2} + \alpha_2^{(2)2} \right) + 4b(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) + 4(2c+3) \right] r^2}{(r^2 - \alpha_1^{(2)})(r - \alpha_2^{(2)})} \\
& - \frac{4a \left[\alpha_1^{(2)2} \alpha_2^{(2)} + \alpha_1^{(2)} \alpha_2^{(2)2} \right] + 8b\alpha_1^{(2)} \alpha_2^{(2)} + 2(2c+1)(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)})}{(r^2 - \alpha_1^{(2)})(r^2 - \alpha_2^{(2)})} \quad (105)
\end{aligned}$$

parametrik ifade elde edilir. Denk.(159) ile denk.(148) karşılaştırılırsa

$$A = a^2, \quad B = 2ab, \quad C = b^2 + a(2c+1), \quad l+1 = c \quad \text{ve}$$

$$E_2 = -b(2c+9) - 4a(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) \quad (160)$$

eşitlikleri bulunur. $\alpha_1^{(2)}$ ve $\alpha_2^{(2)}$ değerleri

$$a \left(\alpha_1^{(2)2} + \alpha_2^{(2)2} \right) + b(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) + 2c+3 = 0 \quad (161)$$

$$2a(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)})\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} + 4b\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} + (2c+1)(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) = 0$$

bağıntılarından elde edilebilir. Potansiyel parametreleri arasında ise

$$C = \frac{B^2}{4A} - \sqrt{A} (2l+9) \quad (162)$$

şeklinde bir sınırlama yazılabilir. Böylece bu seviyenin ($n=2$) enerji özdeğeri

$$E_{2l} = \frac{B}{2\sqrt{A}} (2l+1) + 4\sqrt{A} (\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) \quad (163)$$

olur. $n=3$ için $f_3(r^2) = (r^2 - \alpha_1^{(3)})(r^2 - \alpha_2^{(3)})(r^2 - \alpha_3^{(3)})$ olur. Bu seviye için diğer seviyelerin hesaplanmasında yapılan işlemlerin benzerleri yapılırsa; potansiyel parametreleri ile fonksiyon katsayıları arasında

$$A = a^2, \quad B = 2ab, \quad C = b^2 + a(2c+15), \quad l+1 = c \quad \text{ve}$$

$$E_3 = -b(2c+13) - 4a(\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)}) \quad (164)$$

eşitlikleri bulunur. $\alpha_1^{(3)}$, $\alpha_2^{(3)}$ ve $\alpha_3^{(3)}$ katsayıları için

$$2a(\alpha_1^{(3)2} + \alpha_2^{(3)2} + \alpha_3^{(3)2}) + 2b(\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)}) + 6c+15 = 0$$

$$a \left[(\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)})\alpha_1^{(3)}\alpha_2^{(3)} + (\alpha_1^{(3)} + \alpha_3^{(3)})\alpha_1^{(3)}\alpha_3^{(3)} + (\alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)})\alpha_2^{(3)}\alpha_3^{(3)} \right]$$

$$+ 2b \left[\alpha_1^{(3)}\alpha_2^{(3)} + \alpha_1^{(3)}\alpha_3^{(3)} + \alpha_2^{(3)}\alpha_3^{(3)} \right] + (2c+6)(\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)}) = 0 \quad (165)$$

ilişkilerinden elde edilir.

Genel durumda, denk.(148) ile verilen altıncı mertebe

anharmonik osilatörün spektrumu

$$E_{n\ell} = \frac{B}{2\sqrt{A}} (4n + 2\ell + 3) + 4\sqrt{A} \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \quad (166)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

şeklinde elde edilir. Genel durum için potansiyel parametreleri arasındaki sınırlama

$$C = \frac{B^2}{4A} - \sqrt{A} (4n + 2\ell + 5) \quad (167)$$

olur. Buradan, potansiyel parametreleri arasında her n ve ℓ değerleri için sadece bir sınırlama olduğu görülmüştür.

Her n ve ℓ değerlerine karşılık, denk.(148) ile verilen altıncı mertebe anharmonik osilatör potansiyelinin dalga fonksiyonları

$$\phi_{0\ell}(r) = r^{\ell+1} \exp \left[-\frac{\sqrt{A}}{4} r^4 - \frac{B}{4\sqrt{A}} r^2 \right]$$

$$\phi_{n\ell}(r) = \left[\prod_{i=1}^n (r^2 - \alpha_i^{(n)}) \right] r^{\ell+1} \exp \left[-\frac{\sqrt{A}}{4} r^4 - \frac{B}{4\sqrt{A}} r^2 \right], \quad n=1, 2, \dots \quad (168)$$

şeklinde elde edilir. Bu metodla, altıncı mertebe osilatör için elde edilen yukarıdaki sonuçlar; $n=0$ ve $n=1$ ($\ell=0$) için

(64), $n=0$ ($l=0$) için (66), $n=0$ ve $n=1$ ($l \neq 0$) için (52) nolu referanslarda yapılan çalışmalarla uyum içindedir.

3.5. Üç Boyutta Coulomb + Harmonik Osilatör + Linear Potansiyeli

Çok sayıda araştırmacı tarafından farklı metodlarla çözülen (17, 21, 27-35, 68-73) Coulomb + harmonik osilatör + + lineer potansiyeli üç boyutta

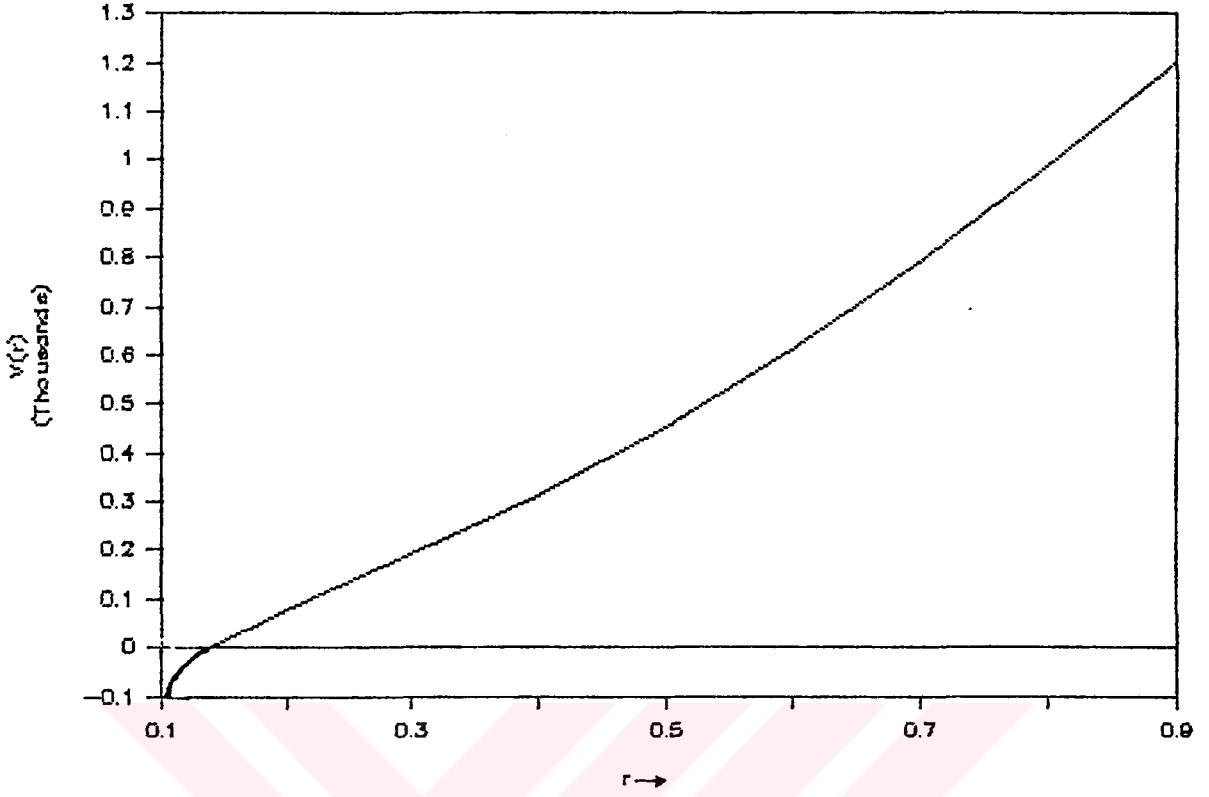
$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{A}{r} + Br^2 + Cr + \frac{K(l+1)}{r^2} \quad (169)$$

şeklindedir ve A'nın B'den çok büyük olduğu durumlarda Coulomb, B'nin A'dan çok büyük olduğu durumlarda ise harmonik osilatör potansiyeli gibi davranır. Bu durum Şekil.2 ve Şekil.3'de daha açık olarak görülmektedir.

Burada da potansiyelin temel durumu ve diğer seviyeleri için

$$g(r) = ar^2 + br + c \text{ dir, } a < 0, b < 0, c > 0 \quad (170)$$

şeklinde bir kabul yapılacaktır ve denk.(85) ile tanımlanan $f_n(r)$ 'nin de kullanılması ile özdeğer ve özfonksiyonlar elde edilecektir:

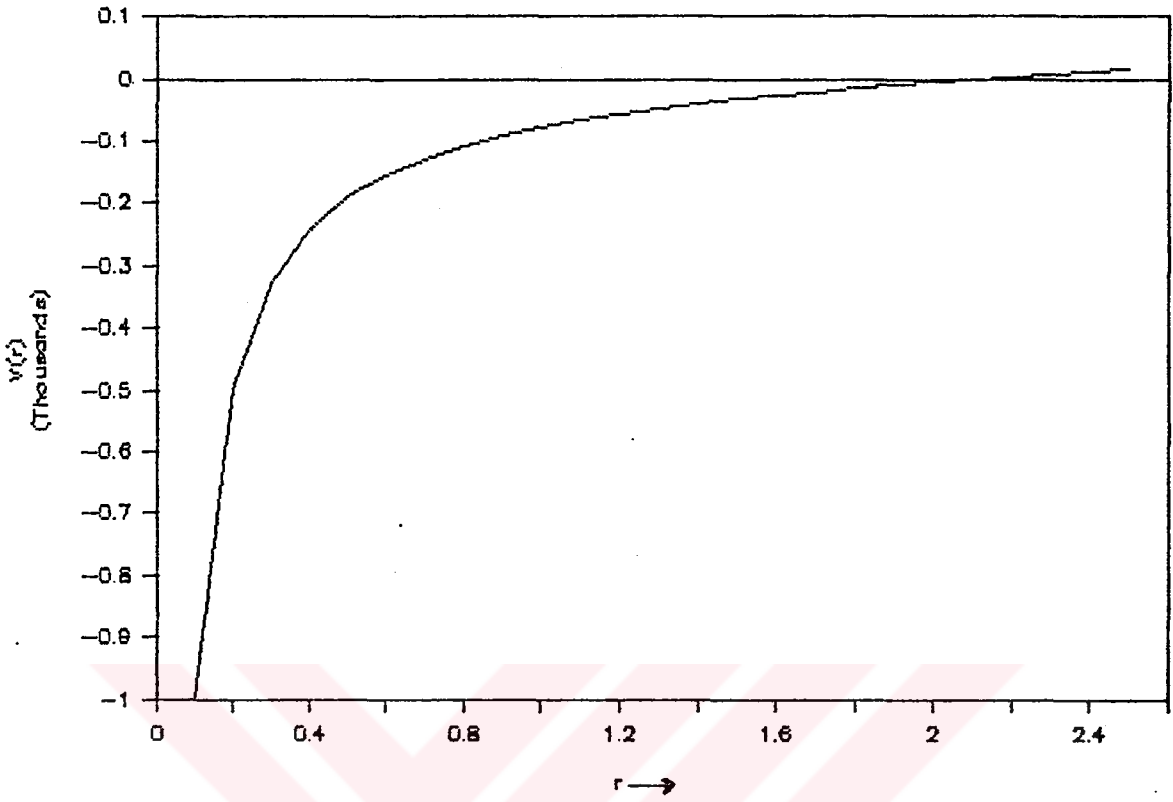


Şekil-2. $V(r) = -10/r + 1000r^2 + 447.2136r$ potansiyelinin grafiği ($\hbar=\mu=1$ birim sisteminde)

İlk olarak $f_0(r) \equiv 1$ alırız ve denk.(170)'de tanımlanan $g(r)$ ile beraber denk.(84)'de kullanırız. Böylece

$$\begin{aligned}
 V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - E &= 4a^2 r^2 + 4abr + \frac{2bc}{r} + \frac{c(c-1)}{r^2} \\
 &+ b^2 + 2a(2c+1)
 \end{aligned} \tag{171}$$

parametrik ifade elde edilir. Bu ifade ile denk.(169) ile



Şekil-3. $-100/r + 0.1r^2 + 22.35910r$ potansiyelinin grafiği ($\hbar=\mu=1$ birim sisteminde)

verilen efektif potansiyel karşılaştırılırsa

$$A = 2bc, B = 4a^2, C = 4ab, l+1 = c$$

$$\text{ve } E_0 = -(b^2 + 2a(2c+1)) \quad (172)$$

elde edilir. Böylece temel durum dalga fonksiyonu da

$$\phi_{0l}(r) = r^{l+1} \exp\left\{(-\sqrt{B}/2)r^2 - (C/2\sqrt{B})r\right\} \quad (173)$$

olarak verilebilir.

İkinci olarak, birinci seviye ($n=1$) için, $f_1(r) = r - \alpha_1^{(1)}$

alınırsa (83) denkleminde kullanılırsa

$$V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E = 4a^2 r^2 + 4abr + \frac{2b(c+1) + 4a\alpha_1^{(1)}}{r} + \frac{c(c-1)}{r^2} + \frac{4\alpha_1^{(1)2} + 2b\alpha_1^{(1)} + 2c}{r - \alpha_1^{(1)}} + b^2 + 2a(2c + 3) \quad (174)$$

bulunur. (174) ifadesi, denk.(169)'da verilen potansiyel ile karşılaştırılırsa; a , b , c ve $\alpha_1^{(1)}$ katsayıları ile potansiyel parametreleri ve enerji arasında

$$A = 2b(c+1) + 4a\alpha_1^{(1)}, \quad B = 4a^2, \quad C = 4ab, \quad \ell+1 = c$$

$$E_1 = -\left[b^2 + 2a(2c+3)\right] \quad (175)$$

ilişkileri bulunur. $\alpha_1^{(1)}$ değerleri

$$2a\alpha_1^{(1)2} + b\alpha_1^{(1)} + c = 0 \quad (176)$$

ifadesinden elde edilebilir. $n=1$ durumuna karşılık gelen dalga fonksiyonu da

$$\phi_{1\ell}(r) = (r - \alpha_1^{(1)}) r^{\ell+1} \exp\left[(-\sqrt{B}/2)r^2 - (C/2\sqrt{B})r\right] \quad (177)$$

olarak elde edilir.

İkinci seviye ($n=2$) için, $f_2(r)=(r-\alpha_1^{(2)})(r-\alpha_2^{(2)})$ ve denk.(170) ile verilen $g(r)$ fonksiyonları denk.(83)'de kullanılır ve

$$\begin{aligned}
 V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E &= 4a^2 r^2 + 4abr + \frac{2b(c+2) + 4a(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)})}{r} \\
 &+ \frac{c(c-1)}{r} + \frac{4a\left[\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}\right] + 2b(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) + 2(2c+1)}{(r - \alpha_1^{(2)})(r - \alpha_2^{(2)})} \\
 &+ \frac{\left[4a\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)}\left[\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}\right] + 4b(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) + 2c(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)})\right]r}{(r - \alpha_1^{(2)})(r - \alpha_2^{(2)})} \\
 &+ b^2 + 2a(2c+5) \tag{178}
 \end{aligned}$$

elde edilir. Bu ifadenin denk.(169) ile karşılaştırılmasıyla

$$A = 2b(c+2) + 4a(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}), \quad B = 4a^2, \quad C = 4ab, \tag{179}$$

$$\ell+1 = c \quad \text{ve} \quad E_2 = -(b^2 + 2a(2c+5))$$

bulunur. Burada $\alpha_1^{(2)}$ ve $\alpha_2^{(2)}$ değerleri

$$2a\left[\alpha_1^{(2)2} + \alpha_2^{(2)2}\right] + b(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) + 2c + 1 = 0 \quad (180)$$

$$2a\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)}(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) + 2b\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} + c(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)}) = 0$$

ifadelerinden belirlenir. Bu seviyeye (n=2) karşılık gelen dalga fonksiyonu,

$$\phi_{2\ell}(r) = (r-\alpha_1^{(2)})(r-\alpha_2^{(2)})r^{\ell+1} \exp\left[(-\sqrt{E}/2)r^2 - (C/2\sqrt{E})r\right] \quad (181)$$

şeklindedir.

Üçüncü seviye (n=3) için, $f_3(r) = (r-\alpha_1^{(3)})(r-\alpha_2^{(3)})(r-\alpha_3^{(3)})$ ve denk.(170) ile verilen $g(r)$ 'nin denk.(83)'de kullanılması ile ve yukarıda yapılan işlemler takip edilerek; katsayılar arasındaki ilişkiler ve enerji değeri için

$$A = 2b(c+3) + 4a(\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)}), \quad B = 4a^2, \quad C = 4ab, \quad (182)$$

$$\ell+1 = c \quad \text{ve} \quad E_3 = -(b^2 + 2a(2c+7))$$

elde edilir. $\alpha_1^{(3)}$, $\alpha_2^{(3)}$ ve $\alpha_3^{(3)}$ değerleri

$$2a(\alpha_1^{(3)2} + \alpha_2^{(3)2} + \alpha_3^{(3)2}) + b(\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)}) + 3(c+1) = 0$$

$$\begin{aligned}
& 2a \left[(\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)}) \alpha_1^{(3)} \alpha_2^{(3)} + (\alpha_1^{(3)} + \alpha_3^{(3)}) \alpha_1^{(3)} \alpha_3^{(3)} + (\alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)}) \alpha_2^{(3)} \alpha_3^{(3)} \right] \\
& + 2b \left[\alpha_1^{(3)} \alpha_2^{(3)} + \alpha_1^{(3)} \alpha_3^{(3)} + \alpha_2^{(3)} \alpha_3^{(3)} \right] + (2c+1) (\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)}) = 0 \\
& 2a \alpha_1^{(3)} \alpha_2^{(3)} \alpha_3^{(3)} (\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)}) + 2b \left[\alpha_1^{(3)} \alpha_2^{(3)} + \alpha_1^{(3)} \alpha_3^{(3)} + \alpha_2^{(3)} \alpha_3^{(3)} \right] \\
& + (2c+1) (\alpha_1^{(3)} + \alpha_2^{(3)} + \alpha_3^{(3)}) = 0 \tag{183}
\end{aligned}$$

eşitliklerinden belirlenebilir.

Genel durum için, a , b , c ve $\alpha_1^{(n)}$ katsayıları ile denk.(169)'da verilen potansiyel parametreleri arasındaki ilişkiler

$$\begin{aligned}
A &= 2b(c+n) + 4a \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)}, \quad n=0 \text{ için } \alpha_1^{(n)} = 0 \\
\ell+1 &= c \quad \text{ve} \quad B = 4a^2, \quad C = 4ab \quad \text{ve} \tag{184}
\end{aligned}$$

$$E_n = - \left[b^2 + 2a(2c + 2n + 1) \right]$$

şeklinde olur. Denk.(184)'teki A ile potansiyelin diğer parametreleri arasında, n . durum için

$$A = - \frac{C}{\sqrt{B}} (\ell+n+1) - 2\sqrt{B} \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)}, \quad n=0 \text{ için } \alpha_1^{(n)} = 0 \tag{185}$$

şeklinde bir sınırlama mevcuttur. Şayet A, B ve C parametrelerinden herhangi ikisinden biri diğeri cinsinden ifade edilirse; üçüncüsü den.(185) ile verildiği gibi bir değer alabilir. $n=0$ olduğunda, katsayılar arasında sadece $A = -\frac{C}{\sqrt{B}} (\ell + 1)$ şeklinde bir sınırlama vardır. Bununla birlikte $n>0$ durumları için, bu kısıtlamalarda bir çoğalma olur. Örneğin; $n=1$ için (176) ve (185) denklemlerinden, verilen bir B ve C değerleri için A'nın, $A = -\frac{C}{\sqrt{B}} \left[\ell + \frac{3}{2} \right] \pm \left[\frac{C^2}{4B} + 4\sqrt{B} (\ell+1) \right]^{1/2}$ şeklinde iki değer alabileceği bulunabilir. Böylece, verilen herhangi bir n değeri ve B, C parametreleri için A parametresinin (veya verilen iki parametre için üçüncü parametrenin) mümkün değerleri, denk.(185) ile belirlenebilir.

Her n ve ℓ değerleri için denk.(169) ile verilen Coulomb + harmonik osilatör + lineer potansiyelinin 'tam' enerji spektrumu

$$E_{n\ell} = - \left[\frac{C^2}{4B} - \sqrt{B} (2n + 2\ell + 3) \right], \quad \begin{matrix} n=0, 1, 2, \dots \\ \ell=0, 1, 2, \dots \end{matrix} \quad (186)$$

şeklinde elde edilir. Bu genel duruma karşılık gelen dalga fonksiyonu ($n=0$ için $\phi_{0\ell}(r)$ temel durum dalga fonksiyonu

denk.(173) verildi)

$$\phi_{n\ell}(r) = \left[\prod_{i=1}^n \left(r - \alpha_i^{(n)} \right) \right] r^{\ell+1} \exp \left[(-\sqrt{B}/2) r^2 - (C/2\sqrt{B}) r \right]$$

$$n=1, 2, 3, \dots \quad (187)$$

olarak yazılabilir. Denklem (169) ile verilen potansiyel için elde edilen sonuçlar; farklı metodlarla bulunan sonuçlarla (28, 29, 31, 68) uyum içindedir.

Denk.(115) ile verilen Coulomb + harmonik osilatör + lineer potansiyeli Rasyonel Fonksiyon Yaklaştırma (Pade) (5) metodu ile de çözüldü. Bu metodla A, B ve C parametrelerinin çeşitli değerleri için bulunan sonuçlar, denk.(186) kullanılarak elde edilen 'tam' çözümlerle birlikte (n=0 ve n=1 için) Tablo.1'de görülmektedir. Ayrıca referans (31)'de aynı potansiyel için kaydırılmış 1/N açılım ile elde edilen sonuçlar, karşılaştırma açısından tabloya konulmuştur. Pade metodunun, kaydırılmış 1/N açılımına göre daha hassas sonuçlar verdiği tablodan görülmektedir. Pade metodu ile yapılan hesaplamalarda üçüncü mertebeden determinant kullanıldı. Elde edilen sonuçlar altıncı basamağa kadar, 'tam'

Tablo.1. $V(r)=A'/r + B'r^2 + C'r$ potansiyelinin geliştirilen yeni metodla elde edilen enerji özdeğerleri (denk. 169), Pade metodu ile elde edilen özdeğerler ve kaydırılmış $1/N$ açılımına göre elde edilen özdeğerler (31) (Burada $\hbar=\mu=1$ birim sistemi kullanıldı; $A'=A/2$, $B'=B/2$ ve $C'=C/2$ dir).

No	n	l	A'	B'	C'	E Bu Çalışma	E Pade Metodu	E Kaydırılmış 1/N Açılımı
1	0	0	-1	0.1	0.44721	0.17082	0.17082	0.17186
2	0	1	-1	0.1	0.22361	0.99303	0.99304	0.99337
3	0	2	-1	0.1	0.14907	1.50969	1.50970	1.50979
4	0	3	-1	0.1	0.11180	1.98121	1.98120	1.98124
5	0	0	-1	10.0	4.42714	6.20820	6.20821	6.22680
6	0	1	-1	10.0	2.23607	11.05534	11.05534	11.05719
7	0	2	-1	10.0	1.49071	15.59732	15.59732	15.59692
8	0	3	-1	10.0	1.11803	20.09336	20.09336	20.09349
9	0	0	-10	0.1	4.47214	-49.32918	-49.32918	-49.32918
10	0	1	-10	0.1	2.23607	-11.38197	-11.38197	-11.38196
11	0	2	-10	0.1	1.49071	-3.99031	-3.99031	-3.99030
12	0	3	-10	0.1	1.11803	-1.11254	-1.11254	-1.11253
13	0	0	-10	1000	447.2136	17.08204	17.08204	17.16639
14	0	1	-10	1000	223.6068	99.30340	99.30340	99.33672
15	1	0	-1	0.1	0.09620	1.09490	1.09490	1.15840
16	1	1	-1	0.1	0.00969	1.56501	1.56500	1.57947
17	1	2	-1	0.1	-0.02025	2.01144	2.01145	2.01632
18	1	3	-1	0.1	-0.03359	2.45685	2.45685	2.45893
19	1	0	-1	10.0	-3.42612	10.88688	10.88688	10.88688
20	1	1	-1	10.0	-3.60956	15.32675	15.32676	15.37990
21	1	0	-100	0.1	22.35910	-1248.70537	-1248.70538	—————
22	1	1	-100	0.1	14.90275	-553.66464	-553.66466	—————

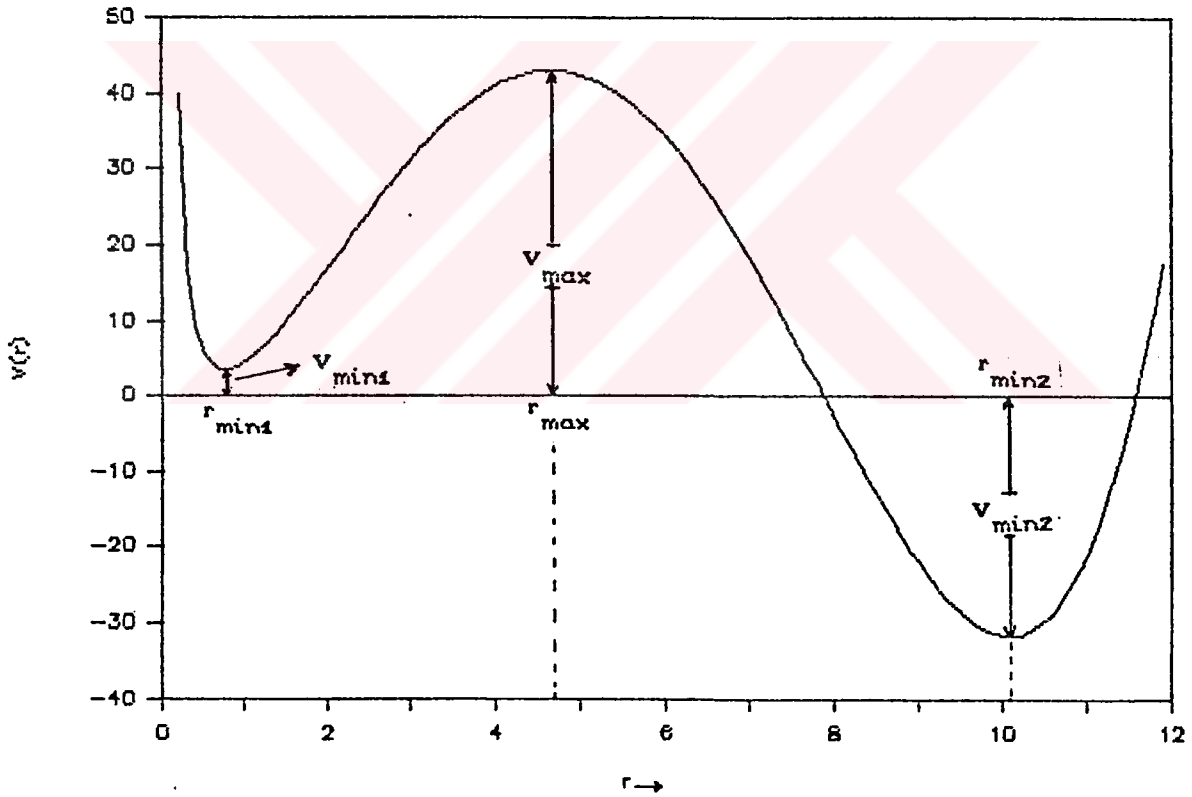
sonuçlarla uyum içinde olduğundan yüksek mertebeli determinant kullanmaya gerek görülmemiştir.

3.6. r'nin Kuvvetleri Şeklinde Perturbe Coulomb Potansiyeli:

r'nin dördüncü kuvvetiyle perturbe etkin Coulomb potansiyeli

$$V(r)_{\text{eff}} = \frac{A}{r} + Br + Cr^2 + Dr^3 + Fr^4 + \frac{k(l+1)}{r^2} \quad (188)$$

farklı metodlarla metodlarla çözülmüştür (18,50,70). A, B, C, D ve F parametrelerinin çeşitli değerlerine göre potansiyelin değişimi, şek. 4a,b'de görülmektedir.

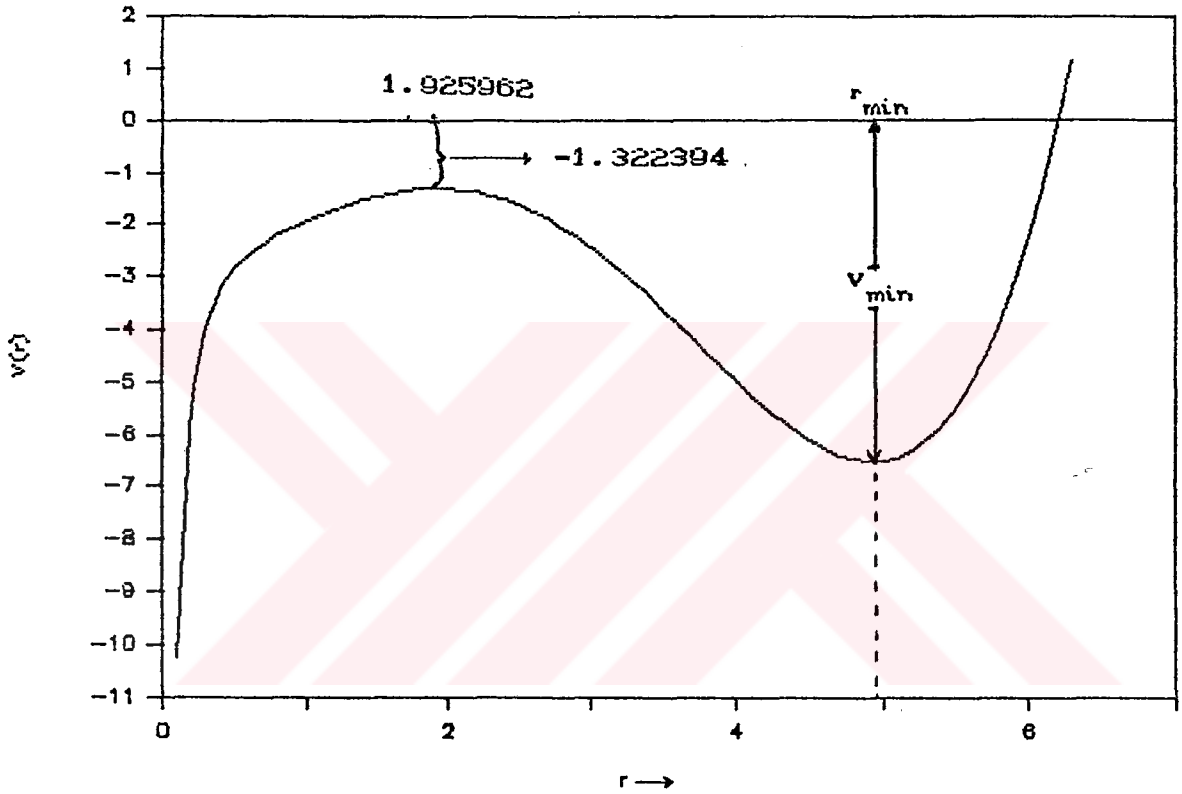


Şekil-4a $V(r) = -1/r - 4.74342r + 10.15811r^2 - 2r^3 + 0.1r^4 + 2/r^2$ potansiyelinin grafiği. $V(r)$ ve r $h=2\mu=1$ birim sistemindedir. Şekilde görülen çift kuyu potansiyeli için karakteris-
değerler: $r_{\min 1} = 0.7594$, $V_{\min 1} = 3.5645$; $r_{\min 2} = 10.0802$,
 $V_{\min 2} = -31.7633$; $r_{\max} = 4.6732$, $V_{\max} = 43.1307$ dir.

Bu potansiyel için $g(r)$ fonksiyonu

$$g(r) = ar^3 + br^2 + cr + d \ln r \quad (189)$$

olarak alınabilir. $f_n(r)$ ise denk.(85) ile tanımlandığı formdadır.



Şekil-4b $V(r) = -1/r - 2.84605r + 2.81623r^2 - r^3 + 0.1r^4$ potansiyelinin grafiği. $V(r)$ ve r , $h=2\mu=1$ birim sistemindedir ve karakteristik değerler $r_{min} = 4.9346$ ve $V_{min} = -6.5361$ dir.

Denk.(189)'de verilen $g(r)$ ile $f_n(r)$ fonksiyonları, (83,84) denklemlerini çözmek için kullanılır ve Bölüm .3'ün 3.5 kısmındaki adımlar takip edilirse, potansiyel

parametreleri ile fonksiyon katsayıları arasında (genel durum için)

$$l+1 = d, \quad A = 2cd + 6a \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)2} + 4b \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} + 2nc,$$

$$B = 6ad + 4bc + 6(n+1)a, \quad C = 4b^2 + 6ac \quad (190)$$

$$D = 12ab \text{ ve } F = 9a^2$$

eşitlikleri belirlenebilir. Genel duruma karşılık gelen dalga fonksiyonunun katsayıları arasında (ilk üç durum için)

$$6a \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)3} + 4b \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)2} + 2c \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} + n(2d + n - 1) = 0$$

$$6 \sum_{i < j}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} (\alpha_i^{(n)2} + \alpha_j^{(n)2}) + 4b \sum_{i < j}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} (\alpha_i^{(n)} + \alpha_j^{(n)})$$

$$+ 4c \sum_{i < j}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} + (n-1)(2d + n - 3) = 0 \quad (191a)$$

$$6a \sum_{i < j < k}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} \alpha_k^{(n)} (\alpha_i^{(n)2} + \alpha_j^{(n)2} + \alpha_k^{(n)2})$$

$$4b \sum_{1 \leq j < k}^n \alpha_1^{(n)} \alpha_j^{(n)} \alpha_k^{(n)} \left[\alpha_1^{(n)} + \alpha_j^{(n)} + \alpha_k^{(n)} \right] \quad (191b)$$

$$+ 4c \sum_{1 \leq j < k}^n \alpha_1^{(n)} \alpha_j^{(n)} \alpha_k^{(n)} + (n-2)(2d+n-2) \sum_{1 \leq j}^n \alpha_1^{(n)} \alpha_j^{(n)} = 0$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

bağıntıları vardır ($n=0$ için $\alpha_1^{(n)} = 0$). Denk.(190)'daki ilişkilerden, denk.(188) ile tanımlanan potansiyelin parametreleri arasında sınırlamalar vardır. Örneğin B ve C üzerindeki sınırlamalar

$$B = -2\sqrt{F}(\ell+n+2) - \frac{AD}{2(\ell+n+1)\sqrt{F}} - \frac{D}{(\ell+n+1)} \left[\sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)2} - \frac{D}{2\sqrt{F}} \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \right] \quad (192)$$

ve

$$C = \frac{D^2}{4F} - \frac{A\sqrt{F}}{\ell+n+1} - \frac{2F}{\ell+n+1} \left[\sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)2} - \frac{D}{2F} \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \right] \quad (193)$$

şeklindedir. $n=0$ için B ve C parametreleri üzerindeki sınırlamalar

$$B = -2\sqrt{F}(\ell+2) - \frac{AD}{2(\ell+1)\sqrt{F}} \quad (194)$$

$$C = \frac{D^2}{4F} - \frac{A\sqrt{F}}{\ell + 1} \quad (195)$$

şeklinde verilebilir. Bununla birlikte; $n > 0$ durumları için B ve C'deki sınırlamalar, $\alpha_1^{(n)}$ 'lerin değerlerine göre çoğalır.

Denk.(188) ile verilen r'nin dördüncü kuvvetiyle perturbe efektif Coulomb potansiyelinin, her bir n ve ℓ değeri için 'tam' enerji özdeğerleri basit cebirik işlemlerden sonra

$$E_{n\ell} = - \left[\frac{(C - D^2/4F)^2}{4F} - \frac{D}{2\sqrt{F}} (2n+2\ell+3) - 2\sqrt{F} \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \right] \quad (196)$$

$n=0,1,2,\dots, \ell=0,1,2,\dots$

olarak elde edilebilir. Bu enerji A parametresine bağlı olarak da

$$E_{n\ell} = - \left[\frac{A}{2(\ell+n+1)} + \frac{\sqrt{F}}{\ell+n+1} \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)2} + \frac{D}{2F} \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \right) \right]^2$$

$$+ \frac{D}{2\sqrt{F}} (2n+2\ell+3) + 2\sqrt{F} \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \quad (197)$$

şeklinde yazılabilir. Burada elde edilen sonuçlar, $n=0$ için ref.(18 ve 74)'de, $n=0$ ve $n=1$ için ref.(53)'de yapılan çalışmalarla uyum içindedir.

Denk.(190)'da $a=0$ ve $b=0$ alınır, denk.(197)'den perturbe olmayan Coulomb potansiyelinin enerji değerleri elde edilebilir. Bu durum için (197) ifadesi $E_{nl} = -A^2/4(n+l+1)^2$ e döndür.

Ayrıca bu kesimde denk.(188) ile verilen peturbe Coulomb potansiyeli Bölüm.2-4'de tanıtılan Rasyonel Fonksiyon Yaklaşırma metodu ile çözüldü. Bulunan sonuçlar ve kaydırılmış $1/N$ açılımı sonuçları (53), Denk.(196)'dan edilen ve bu çalışma sütununda verilen 'tam' enerji özdeğerleri ile birlikte Tablo.2'de görülmektedir.

Tabloda görüldüğü gibi, 3×3 'lük determinant kullanılarak bulunan Pade metodu sonuçları 'tam' değerlere oldukça iyi yaklaşmaktadır. Daha uzun işlemler gerektiren ve özellikle uyarılmış seviyelerin hesabında önemli zorlukları ortaya çıkan kaydırılmış $1/N$ açılımı sonuçları, Pade sonuçları ile kıyaslandığında, Pade metodunun daha hassas sonuçlar verdiği görülmüştür.

Tablo.2 $V(r)=A/r+Br+Cr^2+Dr^3+Fr^4$ potansiyelinin, yeni metodla elde edilen 'tam' enerji özdeğerleri (denk.196), Pade yaklaşımıyla elde edilen sonuçlar ve Referans 53'de kaydırılmış $1/N$ açılımıyla elde edilen enerji özdeğerleri ($\hbar=2\mu=1$ birim sisteminde)

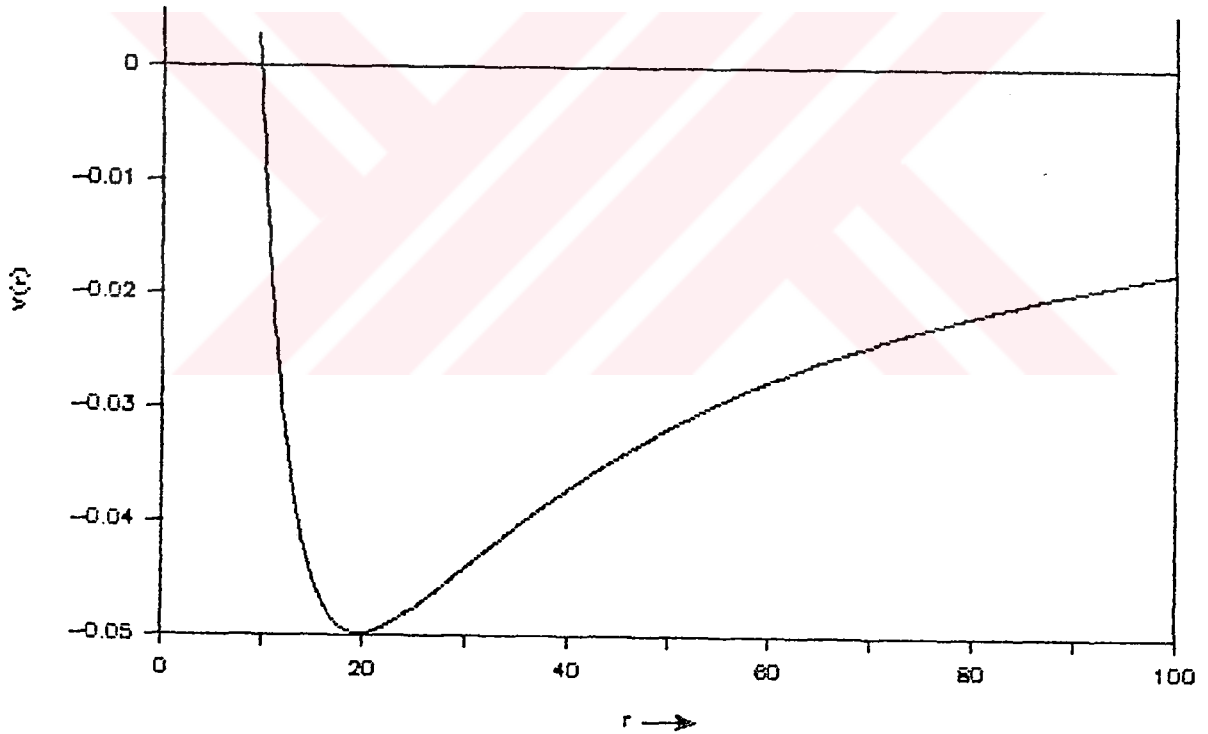
No	l	A	F	D	C	B	E (n=0) Bu Çalışma	E (n=0) Pade Metodu	(E n=0) . 1/N Açılımı
1	0	-1	0.1	-0.2	0.41623	-1.58114	-1.19868	-1.19868	-1.15471
2	1	-1	0.1	-0.2	0.25811	-2.05548	-1.64363	-1.64363	-1.63874
3	2	-1	0.1	-0.2	0.20541	-2.63523	-2.24137	-2.24137	-2.24025
4	3	-1	0.1	-0.2	0.17906	-3.24133	-2.86167	-2.86166	-2.86133
5	0	-1	0.1	-1.0	2.81623	-2.84605	-4.99342	-4.99342	-121.6233
6	1	-1	0.1	-1.0	2.65811	-2.68794	-7.96819	-7.96819	-7.97546
7	2	-1	0.1	-1.0	2.60541	-3.05687	-11.09575	-11.09575	—————
8	3	-1	0.1	-1.0	2.57906	-3.55756	-14.24587	-14.24588	—————
9	0	-1	0.1	1.0	2.81623	0.31623	4.49342	4.49342	4.51243
10	1	-1	0.1	1.0	2.65811	-1.10680	7.84319	7.84319	7.84517
11	2	-1	0.1	1.0	2.60541	-2.00780	11.04019	11.04019	11.04064
12	3	-1	0.1	1.0	2.57906	-2.76669	14.21462	14.21463	14.21477
13	0	-5	0.1	-1.0	4.08114	-9.17061	-10.99342	-10.99342	-11.14319
14	1	-5	0.1	-1.0	3.29057	-5.85021	-9.46819	-9.46820	-9.47367
15	2	-5	0.1	-1.0	3.02705	-5.16505	-11.76242	-11.76243	-11.76719
16	3	-5	0.1	-1.0	2.89528	-5.13870	-14.62087	-14.62087	-14.62423
17	0	-5	0.1	2.0	11.58114	14.54648	3.23683	3.23683	3.25520
18	1	-5	0.1	2.0	10.79057	6.00833	14.24889	14.24889	14.25518
19	2	-5	0.1	2.0	10.52705	2.74064	21.44150	21.44150	21.44329
20	3	-5	0.1	2.0	10.39528	0.79057	28.06987	28.06987	28.07052
21	0	-10	1.0	-0.6	10.09000	-11.0000	-27.10000	-27.09508	-27.09383
22	1	-10	1.0	-2.0	6.00000	-15.0000	-15.25000	-15.25000	-15.14801
23	2	-10	1.0	-4.2	7.74333	-19.0000	-25.87778	-25.87778	-25.87240
24	3	-10	1.0	-7.2	15.46000	-23.0000	-48.36250	-48.36250	—————

3.7. Ters-Kuvvet Potansiyeli ($1/r^n$)

Bu kısımda, r 'nin dördüncü kuvvetiyle ters orantılı

$$V(r) = \frac{A}{r^4} + \frac{B}{r^3} + \frac{C}{r^2} + \frac{D}{r} \quad (198)$$

formundaki bir $r \rightarrow 0$ 'da singuler (ters-kuvvet) potansiyelinin (75,76) çözümleri yapılacaktır. Bu potansiyelin r 'ye bağlı değişimi Şekil-5'de görülmektedir. Burada $A \geq 0$ ve $D \leq 0$ dır.



Şekil-5. $V(r) = 25/r^4 - 15/r^3 + 20.75r^2 - 2/r$ potansiyelinin grafiği ($\hbar=2\mu=1$ birim sisteminde)

Denk.(198)'deki potansiyel için; $f_n(r)$ denk.(85)'de

tanımlandığı formda ve $g(r)$

$$g(r) = \frac{a}{r} + br + c\ell r, \quad a < 0, \quad b < 0 \quad (199)$$

şeklinde seçilebilir (76). $f_0(r)=1$ ve denk.(199) ile verilen $g(r)$ 'nin denk.(84)'ün çözümü için kullanılmasıyla ($n=0$ için)

$$V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E = \frac{a^2}{r^4} - \frac{2a(c-1)}{r^3} + \frac{c(c-1)-2ab}{r^2} + \frac{2bc}{r} + b^2 \quad (200)$$

elde edilir. Bu parametrik ifadenin (198) denklemiyle karşılaştırılması ile katsayılar arasında

$$A = a^2, \quad B = -2a(c-1) \quad D = 2cb \quad (201)$$

$$C = c(c-1) - 2ab - \ell(\ell+1) \quad \text{ve} \quad E = -b^2$$

ilişkileri elde edilir. Burada (198) potansiyelinin katsayıları arasında,

$$C = \frac{B^2}{4A} + \frac{B}{2\sqrt{A}} + \frac{2AD}{B+2\sqrt{A}} - \ell(\ell+1) \quad (202)$$

şeklinde bir sınırlama vardır. Temel-durum enerjisi

$$E_0^{\pm} = -\frac{1}{16A} \left[c + \ell(\ell+1) \pm \left[(c + \ell(\ell+1))^2 - 2BD \right]^{1/2} \right]^2 \quad (203)$$

olarak bulunur ve buna karşılık gelen normalize dalga fonksiyonu

$$\phi_0(r) = N_0 r^c \exp \left[a/r + br \right]$$

$$N_0 = \left[2(a/b)^{\nu} K_{\nu}(t) \right]^{-1/2} \quad (204)$$

olur. Burada $\nu=2c+1$, $t=\sqrt{ab}$ olmak üzere $K_{\nu}(t)$ Bessel fonksiyonunun imajiner argümentidir (77).

Birinci seviye ($n=1$) için $f_1(r) = r^{-\alpha_1^{(1)}}$ seçilir ve denk.(199)'daki $g(r)$, denk.(83)'de kullanılırsa

$$\begin{aligned} V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E &= \frac{a^2}{r^4} - \frac{2a(c-1)}{r^3} + \frac{c(c+1)-2b \left[2a-\alpha_1^{(1)} \right]}{r^2} \\ &+ \frac{2b(c+1)}{r} + b^2 + \frac{2b\alpha_1^{(1)2} + 2c\alpha_1^{(1)} - 2a}{r-\alpha_1^{(1)}} \end{aligned} \quad (205)$$

parametrik ifadesi elde edilir. a, b, c ve $\alpha_1^{(n)}$ katsayıları ile denklem (198)'deki potansiyelin parametreleri arasındaki ilişkiler

$$A = a^2, \quad B = -2a(c-1), \quad D = 2b(c+1) \quad (206)$$

$$C = c(c+1) - 2b \left[a - \alpha_1^{(1)} \right] - \ell(\ell+1) \quad \text{ve} \quad E = -b^2$$

şeklindedir. $\alpha_1^{(1)}$ değeri

$$b\alpha_1^{(1)2} + c\alpha_1^{(1)} - a = 0 \quad (207)$$

ile bulunabilir. Denk.(206)'daki C ile potansiyel parametreleri arasındaki kısıtlama

$$C = \left[\frac{B}{2\sqrt{A}} + 1 \right] \left[\frac{B}{2\sqrt{A}} + 2 \right] + \frac{2D\sqrt{A}}{B + 2\sqrt{A}} \left[\sqrt{A} + \alpha_1^{(1)} \right] - \ell(\ell+1) \quad (208)$$

olarak elde edilir. Denk.(206) ve (207)'den $n=1$ için enerji özdeğerleri

$$E_1^{\pm} = - \left\{ \frac{C + \ell(\ell+1) \pm \left[\left[C + \ell(\ell+1) \right]^2 - 4D \left[\sqrt{A} + \alpha_1^{(1)} \right] \left[1 + B/\sqrt{4A} \right] \right]^{1/2}}{4 \left[\sqrt{A} + \alpha_1^{(1)} \right]} \right\}^2 \quad (209)$$

şeklinde bulunur. Bu duruma karşılık gelen normalize özfonksiyon

$$\phi_1(r) = N_1 \left[r - \alpha_1^{(1)} \right] r^c \exp(a/b + br) \quad (210)$$

$$N_1 = \left[2(a/b)^{\nu_1/2} K_{\nu_1}(t) - 4\alpha_1^{(1)2} (a/b)^{\nu_2/2} K_{\nu_2}(t) + 2\alpha_1^{(1)} (a/b)^{\nu_3/2} K_{\nu_3}(t) \right]^{-1/2}$$

olur. Burada $\nu_1=2c+5$, $\nu_2=2c+4$, $\nu_3=2c+3$ ve $t=4\sqrt{ab}$ dir ve $K_\nu(t)$ ise denklem (204)'de verilen ile aynıdır.

İkinci seviye ($n=2$) için, $f_2(r)=(r-\alpha_1^{(1)})(r-\alpha_2^{(2)})$ alınırsa denk.(83)'den

$$\begin{aligned} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - E &= \frac{a^2}{r^4} - \frac{2a(c-1)}{r^3} + \frac{2b(c+2)}{r} + b^2 \\ &+ \frac{c(c+3) + 2 - 2b \left[a - \left(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right) \right]}{r^2} \\ &+ \frac{2b \left(\alpha_1^{(2)2} + \alpha_2^{(2)2} \right) + 2(c+1) \left(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right) - 4a}{\left(r - \alpha_1^{(2)} \right) \left(r - \alpha_2^{(2)} \right)} \\ &+ \frac{\left[2b\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} \left(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right) + 2(2c+1)\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} - 2a \left(\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right) \right] r}{\left(r - \alpha_1^{(2)} \right) \left(r - \alpha_2^{(2)} \right)} \quad (211) \end{aligned}$$

parametrik ifadesi elde edilir. (211) denkleminin son iki teriminin payının sıfırlanmasıyla elde edilen denklem, denk.(198) ile karşılaştırılırsa; a , b , c , $\alpha_1^{(2)}$ ve $\alpha_2^{(2)}$ katsayıları ile potansiyel parametreleri arasında

$$A=a^2, \quad B=-2a(c-1), \quad D=2b(c+2), \quad E=-b^2 \quad (212)$$

$$C = c(c+3) + 2 - 2ab + 2b \left[\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right] - \kappa(l+1)$$

ilişkileri bulunur. $\alpha_1^{(2)}$ ve $\alpha_2^{(2)}$ katsayıları,

$$b \left[\alpha_1^{(2)2} + \alpha_2^{(2)2} \right] + (c+1) \left[\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right] - 2a = 0 \quad (213)$$

$$b\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} \left[\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right] + (2c+1)\alpha_1^{(2)}\alpha_2^{(2)} - a \left[\alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right] = 0$$

ifadelerinden belirlenebilir. Denk.(212) ile verilen potansiyel katsayıları arasındaki sınırlama

$$C = \left[\frac{B}{2\sqrt{A}} + 1 \right] \left[\frac{B}{2\sqrt{A}} + 4 \right] + 2 + \frac{2D\sqrt{A}}{B+2\sqrt{A}} \left[\sqrt{A} + \alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right] - \kappa(l+1) \quad (214)$$

şeklinde olur. Denklem (212) ve (213)'dan enerji özdeğerleri

$$E_2^{\pm} = - \left[\frac{W \pm \left[W^2 - 4D \left(4 + B/\sqrt{4A} \right) \left(\sqrt{A} + \alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right) \right]}{4 \left(\sqrt{A} + \alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} \right)} \right]^2 \quad (215)$$

olarak elde edilir. Burada $W = C + \mathcal{K}(l+1) + 2(4+B/\sqrt{4a})-2$ dir.

Benzer işlemler yapılarak genel durum için a , b , c ve $\alpha_1^{(n)}$ ile (198) ifadesi ile verilen ters-kuvvet potansiyelinin parametreleri arasında

$$A=a^2, \quad B=-2a(c-1), \quad D=2b(c+n) \quad (216)$$

$$C=c(c+2n-1) + n(n-1) - 2b \left[a - \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \right] - \mathcal{K}(l+1)$$

ilişkileri bulunur. Burada D , n 'ye bağımlı değildir. Bununla birlikte b her n için farklı bir değere sahiptir. $\alpha_1^{(n)}$ değerleri (ilk üç durum için),

$$b \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)2} + (c+n-1) \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} - na = 0$$

$$b \sum_{i < j}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} (\alpha_i^{(n)} + \alpha_j^{(n)}) + (c+2n-3) \sum_{i < j}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} - (n-1)a \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} = 0$$

$$b \sum_{i < j < k}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} \alpha_k^{(n)} (\alpha_i^{(n)} + \alpha_j^{(n)} + \alpha_k^{(n)}) + 3(c+n-2) \sum_{i < j < k}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} \alpha_k^{(n)}$$

$$- (n-2)a \sum_{i < j}^n \alpha_i^{(n)} \alpha_j^{(n)} = 0 \quad (217)$$

ifadelerinden elde edilebilir. Denk.(216) ile verilen potansiyel parametreleri arasındaki kısıtlama ise

$$C = \left[\frac{B}{2\sqrt{A}} + 1 \right] \left[\frac{B}{2\sqrt{A}} + 2n \right] + n(n-1) - \kappa(l+1) + \frac{D\sqrt{A}}{B+2\sqrt{A}} \left(\sqrt{A} + \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \right) \quad (218)$$

şeklinde ortaya çıkar. C parametresi bu kısıtlama ile, $n=0$ için, verilen l , A, B ve D değerleri cinsinden bir değer alabilir. $n>0$ olduğunda C'nin alabileceği değerler birden fazla olacaktır. Bu durum, $\alpha_i^{(n)}$ katsayısının $n>0$ için birden fazla değere sahip olmasından kaynaklanır.

Sonuç olarak denk.(198) ile verilen ters-kuvvet potansiyelinin 'tam' spektrumu

$$E_n^{\pm} = - \left\{ \frac{W \pm \left[W^2 - 4D \left(2n + \frac{B}{\sqrt{4A}} \right) \left(\sqrt{A} + \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \right) \right]^2}{4 \left(\sqrt{A} + \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} \right)} \right\}^2$$

$n=0, 1, 2, \dots$ (219)

ifadesinden bulunur. Burada

$$W = C + \kappa(l+1) + n(2n+B/\sqrt{4A}) - n(n-1) \quad (220)$$

dir. Genel durum dalga fonksiyonu da ($n=0$ için $\phi_0(r)$ denk.(204) ile verildi)

$$\phi_n(r) = \left[\prod_{i=1}^n (r - \alpha_1^{(n)}) \right] r^c \exp \left[a/r + br \right] \quad (221)$$

olur.

Denk.(198) ile verilen ters-kuvvet potansiyeli uygun parametre seçimleri ile bazı potansiyellere indirgenebilir:

a) Denk.(216) ile tanımlanan $D = 2b(c+n)$ ifadesinde; $c=-n$ seçilirse, denk.(198)'deki potansiyelde Coulomb terimi düşer ve

$$V(r) = \frac{A}{r^4} + \frac{B}{r^3} + \frac{C}{r^2} \quad (222)$$

şekline döndürür. Burada parametreler arasında sadece

$$B = -2\sqrt{A}(n+1) \quad (223)$$

kısıtlaması mevcuttur. Böylece (216), (217) ve (219) ifadelerinden, denk.(222) ile verilen potansiyel için

$$E_n = - \frac{1}{4A} \left[\frac{C + \ell(\ell+1)}{n+1} \right]^2 \quad (224)$$

özdeğerleri elde edilir (76). Bu sonuçlar $n=0$ ve $n=1$ için, (51) nolu referansta yapılan çalışmalarla uyum içindedir.

b) Denk.(216)'da $a = 0$ seçilirse $C > 0$ olmak üzere; (198) ile verilen potansiyel

$$V(r) = \frac{C}{r^2} + \frac{D}{r} \quad (225)$$

şekline dönüştür. Bu bir Mie-tipi potansiyeldir (41). Bu potansiyelin temel durumu $n=0$ için, denk.(201) ile verilen ifadeler

$$\begin{aligned} A &= 0, \quad B = 0, \quad C = c(c-1) - \ell(\ell+1) \\ D &= 2bc \quad \text{ve} \quad E = -b^2 \end{aligned} \quad (226)$$

şekline dönüştürler. Buradan temel-durumun enerjisi

$$E_0 = - \left\{ \frac{D}{1 + \left[1 + 4(C + \ell(\ell+1)) \right]^{1/2}} \right\}^2 \quad (227)$$

olarak bulunur. İkinci adım olarak $n=1$ için

$$\begin{aligned} A &= 0, \quad B = 0, \quad C = c(c-1) + 2b\alpha_1^{(1)} - \ell(\ell+1) \\ D &= 2b(c+1), \quad E = -b^2 \quad \text{ve} \quad \alpha_1^{(1)} = -c/b \end{aligned} \quad (228)$$

elde edilir. Böylece, birinci seviyenin enerjisi

$$E_1 = - \left\{ \frac{D}{3 + \left[1 + 4(C + \ell(\ell+1)) \right]^{1/2}} \right\}^2 \quad (229)$$

olur.

Genel durumda, (216) ve (217) ifadeleri dikkate alınırsa parametreler arasında

$$A = 0, \quad B = 0, \quad C = c(c-1) + 2b \sum_{i=1}^n \alpha_i^{(1)} - \ell(\ell+1) \\ \text{ve} \quad D = 2b(c+n), \quad (230)$$

ilişkileri elde edilir.

Genel durum için, denk.(225) ile verilen Mie tipi potansiyelin 'tam' enerji spektrumu

$$E_n = - \left\{ \frac{D}{2n+1 + \left[1 + 4(C + \ell(\ell+1)) \right]^{1/2}} \right\}^2 \quad (231)$$

şeklinde elde edilir (76). Bu sonuçlar farklı metodlarla elde edilen değerlerle uyum içerisindedir (20,40,78). Bu duruma karşılık gelen dalga fonksiyonları

$$\phi_0(r) = r^c \exp(br), \quad (n=0 \text{ için}), \quad b < 0, \quad c > 0 \quad (232)$$

$$\phi_n(r) = \left[\prod_{i=1}^n (r - \alpha_i^{(n)}) \right] r^c \exp(br), \quad n=1, 2, \dots, \quad (233)$$

olarak bulunur.. Burada $\alpha_1^{(n)}$ 'ler

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} = -\frac{n(2c + n - 1)}{2b}, \quad n=1, 2, 3, \dots$$

ve

(234)

$$\prod_{i=1}^n \alpha_i^{(n)} = (-1)^n \frac{\beta}{2^{n-1} b^n}, \quad \beta_1 = c; \quad \beta_n = \beta_{n-1}(2c+n-1), \quad n=2, 3, \dots$$

ifadelerinden elde edilebilir.

c) $a = 0$ ve $C = 0$ için denk.(198)'deki potansiyel, $V(r) = D/r + \ell(\ell+1)/r^2$ Coulomb potansiyeline dönüştür ve tam enerji spektrumu $E_n = -D^2/4(n+\ell+1)^2$ olarak elde edilir (76). Bu potansiyel için $\alpha_i^{(n)}$ katsayıları, denk.(234)'de verilenler ile aynıdır (76). $f_n(r)$ fonksiyonu denk.(234) ile verilen şartlar altında Laguerre polinomlarına (79) dönüştür.

BÖLÜM 4

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, kuvvet serisi şeklindeki etkileşme potansiyelleri için radyal Schrödinger denkleminin çözümlerinin cebirik işlemlerle elde edilebildiği bir metod geliştirildi. Metod, bu gruba dahil olan harmonik osilatör, altıncı mertebe anharmonik osilatör, Coulomb ve perturbe Coulomb potansiyelleri ile dördüncü mertebeden ters-kuvvet potansiyellerine uygulandı. Bu potansiyeller için 'tam' enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlar, sadece basit cebirik işlemlerle elde edilebilmektedir.

Geliştirilen bu metod, çok sayıda potansiyele uygulanabilmesi, enerji özdeğerlerinin 'tam' olarak elde edilebilmesi ve normalize dalga fonksiyonlarının belirlenebilmesi açısından tercih edilebilir. Bazı potansiyeller (örneğin, harmonik osilatör, Coulomb, Mie-tipi potansiyeller,...) için dalga fonksiyonlarındaki parametrelerin belirlenmesi oldukça kolaydır. Diğer kuvvet serisi şeklindeki potansiyellerin alt seviyeleri için bu parametrelerin elde edilmesi yine basit cebirik işlemlerle yapılabilmekte ise de üst seviyeler

için üçüncü veya daha fazla dereceden denklemlerini çözmek gerekmektedir.

Bölüm 3.'den de görüldüğü gibi çözülen potansiyeller için, potansiyel parametreleri arasındaki mevcut sınırlamalar ve bu parametrelerle dalga fonksiyonlarının katsayıları arasındaki ilişkiler muhtelif denklemlerle verilmiştir:

Altıncı mertebe anharmonik osilatör potansiyelinin (denk.(148)) A , B , C parametreleri arasında her n ve l değeri için denk.(167) ile verilen sadece bir sınırlama mevcuttur. Coulomb + harmonik osilatör + lineer potansiyeli (denk.(169)) için; üç parametreden biri, diğerleri cinsinden ifade edilirse (denk.185) $n=0$ için tek bir değer alabilirken $n>0$ için alabileceği mümkün değerler birden fazla olur. Bu ise aynı n ve l durumunda, birden fazla enerji değerinin varlığına yol açar. Denk.(169) ile verilen Coulomb + harmonik osilatör+lineer potansiyelinin, $|A| \gg B$ değerleri için Coulomb potansiyeli, $B \gg |A|$ için harmonik osilatör potansiyeli gibi davrandığı şek.2 ve şek.3' den görülmektedir. Ayrıca Tablo-1' deki 13,14 ($B \gg |A|$) ve 21,22 ($|A| \gg B$) nolu verilerden elde edilen enerjilerin sırasıyla pozitif ve negatif değer alması bu davranışa örnek olarak alınabilir. Denk.(188) ile verilen r 'nin dördüncü kuvvetiyle perturbe Coulomb potansiyelinin

beş parametresi arasında denk.(192) ve denk.(193) ile verilen, B ve C parametreleri için sınırlamalar mevcuttur. Bu parametreler, diğer serbest parametrelerin verilen değerleri için, $n=0$ durumunda sadece birer değer, $n>0$ olduğunda ise için birden fazla değer alabilirler. Bu değerlere karşılık, denk.(196) veya denk.(197) ile her n ve l değeri için 'tam' enerji özdeğerleri belirlenebilir.

Bölüm 3.5 ve 3.6'da Coulomb + harmonik osilatör+lineer ve r 'nin dördüncü kuvvetiyle perturbe Coulomb potansiyelleri, Rasyonel Fonksiyon Yaklaşırma (Pade) metodu ile de çözüldü (80). Potansiyel parametrelerinin çeşitli değerleri için elde edilen yaklaşık sonuçlar, 'tam' değerler ile birlikte Tablo.1 ve Tablo.2'de verilmiştir. Ayrıca tablolara, sözkonusu potansiyeller için başka bir yaklaşık çözüm metodu olan kaydırılmış $1/N$ açılımıyla (aynı parametre değerleri için) Roychoudhury ve Varshni tarafından elde edilen sonuçlar (31,53) da eklenmiştir. Tabloların incelenmesi ile Pade metodunun, kullanım kolaylığının yanısıra sonuçların 'tam' değerlere iyi bir şekilde yaklaşması açısından da kuvvet serisi şeklindeki potansiyeller için tercih edilebilirdiği bu iki örnekle gösterilmiştir.

r 'nin dördüncü kuvvetiyle ters orantılı (genel singular)

potansiyellerin (denk.(198)) dört parametresi arasında ise denk.(218) ile verilen sadece bir sınırlama vardır. Bu potansiyel için elde edilen sonuçlardan $c=-n$ seçimiyle denk.(222) ile verilen singular potansiyel, $a=0$ seçimiyle ($C>0$ için) bir Mie-tipi potansiyel (denk.(225)) ve $a=0$, $C=0$ seçimi ile de Coulomb potansiyeli için 'tam' enerji özdeğerleri elde edilebilmektedir. Ayrıca denk.(198) ile verilen ters-kuvvet potansiyelinin ilk iki durumu için dalga fonksiyonları, denk.(204) ve (210)'da görüldüğü gibi normalize edilmiştir.

Bölüm 2.1'de özetlenen Hill determinantı metodu ile, Denk.(19)'da verilen determinantın mertebesine bağlı sayıda enerji özdeğerleri elde edilebilir. Alt seviyelerin enerji değerlerinin hesaplanmasının kolay olduğu bu metodla; determinant mertebesinin büyük olduğu durumlarda (üst seviyeler için) güçlükler ortaya çıkmaktadır. Bunlara ilave olarak Hill determinantı metodunun 'tam' çözümler verebilmesi, potansiyel parametreleri arasında bazı sınırlamaların varlığına bağlıdır (52). Bölüm 2.7'de verilen yeni metodla enerji özdeğerleri 'tam' olarak belirlenebilmekte ancak burada da parametreler arasında sınırlamalar ortaya çıkmaktadır. Bu sınırlamaların varlığı metodların dezavantajıdır.

Bölüm 2.2'de tanıtılan SSKM'ne dayalı çözüm tekniği, sadece şekil değişmezliği özelliğine sahip potansiyeller için kesin analitik sonuçlar ('tam' değerler) vermesi ve genellikle alt seviyeler için az işlem gerektirmesi açılarından tercih edilmektedir. Fakat, şekil değişmezliği özelliğine sahip olmayan potansiyeller için 'tam' sonuçlar verememektedir. Bu tür potansiyeller için yüksek mertebeden düzeltme terimlerinin hesaplanmasıyla sadece yaklaşık sonuçlar verilmektedir (4). Geliştirilen yeni metodla ise, potansiyellerde şekil değişmezliği özelliği gözetmeksizin 'tam' sonuçlar elde edilebilmektedir. SSKM'nin kullanıldığı metodlarla yapılan çözümlerde de diğer metodlarda olduğu gibi potansiyel parametreleri arasında bazı sınırlamalar ortaya çıkmaktadır (53). Radyal denklemin tam çözümlerini veren Yol İntegrali metodunda ise, bazı potansiyeller için üretici fonksiyonu belirlemede zorluklar ortaya çıkmaktadır. Bu durum Yol integrali tekniğinin bir dez avantajıdır. Radyal Schrödinger denkleminin tam analitik çözümleri için geliştirilmiş olan ve Bölüm 2.'de tanıtılan, tam sonuçlar veren Hill-determinantı metodu, SSKM metodu ve bu çalışmada geliştirilen metodun karşılaştırılmaları sonucunda, temelde benzer oldukları görülmüştür. Ancak bazı potansiyeller için

özüm kolaylıkları saęlamaları aısından farklılıkları tartıřmaya aıktır.

Bu alıřmada geliřtirilen metod, kuvvet serisi řeklindeki potansiyellerden bařka, $f(r)$ ve $g(r)$ fonksiyonlarının uygun seimleri ile, Morse ve Hulthen potansiyelleri gibi üstel olarak ifade edilen potansiyeller iin radyal Schrödinger denkleminin özümlelerinde kullanılabilir (81).



REFERANSLAR

1. Powell, J.L., and Creasemann, B., Quantum Mechanics, Addison Wesley Company, London, p.140,1962
2. Seefharman, M., Vasan. S.S., "Higher-order JKWB approximations for radial problems :I. Modification of the effective potantail", J.Phys.A: Math. Gen.,17,2485(1984).
3. Dutt, R., Khare, A. Sukhatme, U.P., "Exactness of supersymmetric WKB spectra for shape-invariant potential", Phys. Lett.B, 181,295(1986)
- Adhikari, R., Dutt, R., Khare, A., Sukhatme, U.P.
"Higer-order WKB appromations in supersymmetric quantum mechanics", Phys. Rev. A, 38,1679(1988).
4. Cooper, F., Ginocchio, J. N., "Relationship between supersymmetry and solvable potantials", Phys. Rev. D, 36, 2458(1987).
5. Fernandez, F.M., Ma, Q., Tipping, R.H., "Tight upper and lower bounds for energy eigenvalues of the Scrodinger equation", Phys. Rev. A, 39,1605(1989).
6. Merzbacher, E., Quantum Mechanics, Wiley International Edition, New York, 1970.
7. Roychoudhury, R. K., and Roy, B., "An algebra approach to the exponential cosine screened Coulomb potantail", J. Math. Phys., 27,229(1986).
- Jatkar, D.P., Kumar, C.N., and Khare, A., "A quasi-exactly solvable problem without $SO(2)$ simmetry", Phys. Lett. A., 142,200,1989
8. Mlodinow, L. D., and Papanicolaou, N., " $SO(2,1)$ Algebra

- and large N Expansion in Quantum Mechanics", Ann. Phys., 128, 314(1980).
9. Turbier, A. V., "Quasi-exactly solvable problems and $Sl(2)$ algebra", Commun. Math. Phys., 118, 467(1988).
 10. Vrscaj, E. R., "Algebraic methods, Bender-Wu formulas, and continued fractions at large order for charmonium", Phys. Rev. A, 31, 2054(1985).
 11. Biswas, S.N., Datta, K., Saxena, R.P., Srivastava, P.K., and Varma, V.S., "The Hill determinant: An application to the anharmonic oscillator ", Phys. Rev. D, 4, 3617(1971).
- Hautod, A., "On the Hill-determinant Method", Phys. Rev. D, 33, 437(1986).
- Chaudhuri, R. N., and Mondal, M., "Hill determinant method with a variational parameter", Phys. Rev. A, 40, 6080(1989).
12. Singh, V., Biswas, S.N., and Datta, K., "Anharmonic oscillator and analytic theory of Continued fractions", Phys. Rev. D, 18, 1901(1978).
 13. a) Mladinow, L.D., Shatz, M.P., "Solving the Schrödinger equation with use of $1/N$ perturbation theory", J. Math. Phys., 25, 943(1984)
 - b) Imbo, T., Pagnamenta, A., Sukhatme, U., "Energy eigenstates of spherically symmetric potentials using the shifted $1/N$ expansion", Phys. Rev. D, 29, 1669(1984)
- Roy, B., " Shifted $1/N$ expansion for energy eigenvalues of the exponential cosine screened Coulomb potential", Phys. Rev. A, 34, 5108(1986)

- Christiasen, H., Epele, L.N., Fanchiotti, H., Carcia Canal, C.A., "Improved shifted $1/N$ expansion", Phys. Rev. A, 40,1760(1989)
14. Roy, P., Roy, B., and Roychoudhury, J., "Partial Algebraization of spectral problems and Supersymmetry", Phys. Lett. A, 139,427(1989).
 15. Feynman, R. P., and Hibbs, A. R., Quantum Mechanics and Path Integrals, Mc. Graw-Hill, New York, 1965
 16. Dutt, R., Khare, A., and Sukhatme, U. P., "Supersymmetry, shape invariance, and exactly solable potentials", Am. J. Phys., 56,163(1988).
 17. Fernandez, F. M., Meson, A. M., and Castro, E. A., "Energy eigenvalues from a modified operator method", Phys. Lett. A, 111,104(1985).
 18. Adhikari, R., Dutt, R., "Exact solutions for polynomial potentials using supersymmetry inspired factorization method", Phys. Lett. A, 141,1(1989).
 19. Scherrer, H., Risken, H., and Leiber, T., "Eigenvalues of Schrödinger equation with the rational potentials", Phys. Rev. A, 38,3949(1988)
 20. Flügge, S., Practical Quantum Mechanics, Springer-Verlag, Berlin, 1971
 21. Znojil, M. "Continued fractions and the potential models of confinement-reply to a comment", J. Phys. A: Math. Gen., 16,213(1983).
 22. Friedman, R.S., and Jamieson, M.J., "Model potentials for multichannel eigenvalue problems", Computer Phys.

Comm., 55,137(1989)

Valance, A., Bergeron, H., "Supersymmetry and molecular effective hamiltonians", Phys. Lett. A, 135,276(1989)

Hua, W., "Four-parameter exactly solvable potential for diatomic molecules", Phys. Rev. A, 42,2524(1990)

Chhajlany, S.C., "Exact results for the potentials $V(x) = -ax^{2s} + bx^{4s+2}$ ", J. Phys.A: Math. Gen., 24,L269(1991)

23. Maitland, G.C., Rigby, M., Smith, E.B., and Wakeham, W.A., Intermolecular Forces, Clarendon Press, Oxford, p.420,531,1980

24. Znojil, M., "A new treatment of singular potentials", Phys. Lett. A, 101,66(1984)

25. Hall, R.L., "Spectral geometry of the power law potentials in quantum mechanics", Phys. Rev. A, 39,5500(1989)

Rosetti, C., "On the bound states of power law central potentials", Riv. Del Nuo. Cim., 12,1(1989)

26. a) Reid, C.E., " Energy eigenvalues and matrix elements for quartic oscillator" J.Mol.Spectrosc., 36,183(1970)

b) Bender, C.M., Wu, T.T., "Statistical analysis of Feynman Diagrams" Phys. Rev. Lett., 37,117(1976)

27. Killingbeck, J., "A polynomial Perturbation Problem", Phys. Lett. A, 67,13(1978).

28. Saxena, R. P., Varma, V. S., "Some exact solutions for the potantail $-r^{-1}+2\lambda r+2\lambda^2 r^2$ ", J. Phys. A: Math. Gen., 15,L221(1982).

29. Saxena, R. P., Varma, V. S., "polynomial perturbation of a hydrogen atom", J. Phys. A: Math. Gen., 15,L419(1982).

30. Bessiy, D., Vrscay, E.R., Handy, C. R., "Hydrogenic atoms

- in the external potential $V(r)=gr+\lambda r^2$: exact solutions and ground state eigenvalue bounds using moment methods", J. Phys. A: Math. Gen., 20, 419(1987).
31. Roychoudhury, R. K., Varshni, Y. P., "Shifted $1/N$ expansion and exact solutions for the potential $V(r)=-Z/r+gr+\lambda r^2$ ", J. Phys. A: Math. Gen., 21, 3025(1988).
 32. Müller-Kirsten, H. J. W., Hite, G. E., and Bose, S. K., "Explicit solution of the wave equation for arbitrary power potentials with application to charmonium spectroscopy", J. Math. Phys., 20, 1878(1979).
 33. Datta, D. P., and Mukherjee, S., "Analytic continued fraction technique for bound and confined states for a class of confinement potentials", J. Phys. A: Math. Gen., 13, 3161(1980).
 34. Vrscay, E. R., "Perturbation theory in high order for generalized charmonium potentials", Phys. Rev. Lett., 53, 2521(1984).
 35. Gerry, C. C., "Nonperturbative dynamical-group approach to the charmonium potential", Phys. Lett. A, 115, 9(1986).
 36. Churchill, R.V., Brown, J.W., and Verhey, R.F., Complex Variables and Applications, McGraw-Hill, 1974
 37. Newton, R.G., Scattering Theory of Waves and Fields, McGraw-Hill, New York 1966
 38. Graeber, R., and Dürr, H.P., "Singular potentials and the divergence problem in quantum field theory", Il Nuovo Cim., 40A, 11, (1977)
 39. Quigg, C., and Rosner, J.L., "Quantum mechanics with application to quarkonium", Fermi-Lab.-Pub-79/22-THY,

February 1979

40. Lifitz, L.D., and Landau, E.M., Quantum Mechanincs, Vol.3, 3rd. Ed, Pergamon Oxford, 1977
41. Mie, G., Ann. Phys. (Leipzig), 11,657(1903)
42. Lennard-Jones, J.E., Proc. Roy. Soc., 106,441(1924)
43. Dymond, J.H., Rigby, M., and Smith, E.B., J. Chem. Phys., 42,2801(1965)
44. Maitland, G.C., Smith, E.B., "A simplified representation of intermolecular potential energy", Chem.Phys.Lett., 22,443(1973)
45. Viehland, L.A., Mason, E.A., Morrison, W.F., and Flannery M.R., Atomic Data and Nuclear Data Tables, 16,495(1975)
46. Murrel, J.N., "Bound vibrational states for weakly attractive potentials", Mol. Phys., 16,601(1969)
Dutt, R., Khare, A., Varshni, Y.P., "How good is the Supersymmetry-inspired higher-order WKB approximation ?" Phys. Lett. A, 123,375(1987)
47. LeRoy, R.J., Bernstein, R.B., "Dissociation enegy and long-range potential of diatomic molecules from vibrational spacings of higer levels", J. Chem. Phys., 52,3869 (1970)
48. Klein, M.L., Venables, T.A., Rare Gas Solids, Vol.1, Academic Press, New Yor, 1976
49. Margenau, H., and Kestner, N.R., Teheory of Intermolecular Forces, Pergamon Press, Oxford, 1971
50. Vogt, E., Wannier, G.H., "Scattering of ions by polarization forces", Phys. Rev., 95,1190(1954)
51. Barut, A. O., Berrondo, M., and Garcia-Calderon, G.,

"Narrow resonances as an eigenvalue problem and applications to high energy magnetic resonances: An exactly solvable model", J. Math. Phys., 21,1851(1980).

Barut, A.O., "Physics of strong fields", Nato ASI Series B, Vol.153,601(1986)

52. Singh, C. N., Singh, S. B., and Singh, K. D., "Quantum mechanical sextic oscillator: Normalisability of wavefunctions and some exact eigenvalues", Phys. Lett. A, 148, 389(1990).

53. Roychoudhury, R., and Varshni, Y. P. "Family exact solutions for the Coulomb potential perturbed by a polynomial in r ", Phys. Rev. A, 42,184(1990).

54. Roy, P., Roy, B., and Roychoudhury, R. "Hill determinants, supersymmetry, and partial algebraization", Phys. Lett. A, 144, 55(1990).

55. Sever, R., and Tezcan, C., "1/N expansion for the exponential-cosine-screened Coulombic potential", Phys. Rev. A, 35, 2725(1987)

Erkoç, Ş., and Sever, R., "Path-integral solution for pseudoharmonic potential", Phys. Rev. A, 37, 2687(1988)

Atağ, S., "Application of the shifted 1/N expansion to the rotational-vibrational states of the H_2^+ molecule" Phys. Rev. A, 37, 2280(1988)

Şimşek, M., Kasap, E., and Özçelik, S., "Lower bound solutions of sextic oscillator", J. Inst. Sci. and Tech. Gazi Univ. 1990

56. Fernandez, F. M., and Castro, E. A., "Eigenvalues from the Riccati equation", J.Phys.A:Math.Gen., 20,5541(1990) (1990).
57. Ferrel, R.A., Scalapino, D.J., "Statistical mechanics of one-dimensional Ginzburg-Landau fields. II. A test of the screening approximation (n^{-1} expansion)", Phys. Rev. A, 9,846(1974)
58. a) Yaşar, İ.B., Diferansiyel Denklemler, Gazi Univ. Yayını Ankara, 1987
 b) Messiah, A., Quantum Mechanics, North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1975
 c) de-Shalit, A., and Talmi, I., Nuclear Shell Theory, Academic Press, New York, 1963
59. Khare, A., "Some comments about the exact solutions for the doubly anharmonic oscillator", Phys. Lett. A, 83,237 (1981).
60. Flessans, G. P., and Anagnostatos, G. S., "On the applicability of the Hill determinant and the analytic continued fraction method to anharmonic oscillators", J. Phys. A: Math. Gen., 15,L537(1982).
61. Shamra, G. S., and Shamra, L. K., "Anharmonic oscillator with general polynomial potential", J. Math. Phys., 25,2947(1984).
62. Fernandez, F. M., Meson, A. M., and Castro, E. A., "A simple iterative solution of the Schrödinger equation in matrix representation from", J. Phys. A: Math. Gen., 18, 1389(1985).
63. Chaudhuri, R. N., "Comment on the anharmonic oscillator

- and analytic theory of continued fractions", Phys. Rev. D, 31,2687(1985).
64. Turbiner, A. V., and Ushveridze, A. G., "Spectral singularities and quasi-exactly solvable quantal problem", Phys. Lett. A, 126,181(1987).
 65. Dutta, A. K., Willey, R. S., "Exact analytic solution for the quantum mechanical sextic anharmonic oscillator", J. Math. Phys., 29,892(1988).
 66. Kaushal, R. S., "An exact solution of the Schrödinger wave equation for a sextic potential", Phys. Lett. A, 142,57(1989).
 67. Chhajlany, S. C., and Malnev V. N., "Bound states of anharmonic potentials", Phys. Rev. A, 42,311(1990).
 68. Hautot, A. P., "Schrödinger equation and special radial electric fields", Phys. Lett. A, 38,305(1972).
 69. Fliess, G., "Comments on a paper concerning the analytic continued fraction technique for bound states", J. Phys. A: Math. Gen., 15,L1(1982).
 70. Chaudhuri, R. N., "The Hill determinant: an application to a class of confinement potentials", J. Phys. A: Math. Gen., 16,209(1983).
 71. Killinbeck, J., "Direct expectation value calculations", J. Phys. A: Math. Gen., 18,245(1985).
 72. Killinbeck, J., "On the Hill determinant method", J. Phys. A: Math. Gen., 19,2903(1986).
 73. Chaudhuri, R. N., "False eigenvalues of the Hill determinant method", J. Phys. A: Math. Gen., 21,567(1988).

74. Dutra, A. de S., "Exact solutions of the Schrödinger equation for coulombian atoms in the presence of some anharmonic oscilator potantials", Phys. Lett. A, 131, 319(1988).
75. Aly, H.H., and Barut, A.O., " Methods of solution of the Schrödinger equations for class of harmonic and singular potentials", Phys. Lett. A, 145, 299(1990)
76. Özçelik, S., Şimşek, M., "Exact solutions of the radial Schrödinger equation for inverse-power potantials", Phys. Lett. A, 152, 145(1991).
77. Gradshteyn, I. S., and Ryzhik, I. M., Table of integrals, series and products, Academic Press, New York, 1965
78. Erkoç, Ş., and Sever, R., "Path-integral solution for a Mie-type potantial", Phys. Rev. D, 30, 2117(1984).
- Kasap, E., Gönül, B., Şimşek, M., "Supersymmetric WKB soluations for p pseudoharmonic and Mie-type potantials", Chem. Phys. Lett., 172, 499(1990).
79. Erdelyi, A., Magnus, W., Oberhettinger, F., and Tricomi, F., Beteman Manuscript Project, Higher Transcendental Fonctions, McGraw-Hill, New York, 1953
- Şimşek, M., Kasap, E., and Özçelik, S., "Lower bound solutions of sextic oscillator", J. Inst. Sci. and Tech. Gazi Univ. 1990
80. Özçelik, S., Şimşek, M., "R'nin kuvvetleriyle perturbe Coulomb potansiyelinin Rasyonel Fonksiyon Yaklaştırma (Pade) metodu ile çözümleri", (Yayınlanmamış Çalışma)
81. Özçelik, S., Şimşek, M., "Exact solutions of the radyal Schrödinger equation for Morse and Hulthen potentials", (Yayınlanmamış çalışma).

ÖZGEÇMİŞ

ÖZGEÇMİŞ

1961 yılında Trabzon'nun Araklı ilçesinde doğdu. İlk ve Orta eğitimini Araklı'da tamamladı. 1980 yılında girmiş olduğu Karadeniz Teknik Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nden 1984 yılında mezun oldu. Aynı yıl Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans programına girdi. 1985 yılında aynı enstitüde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başladı. 1987 yılında Yüksek Lisans programını tamamlayarak aynı yıl doktora programına kaydoldu. Halen Gazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nde Araştırma Görevlisi olarak görev yapmaktadır.