

Asimtotik İterasyon Metodu Yardımıyla Bir Boyutlu Bazı Çift Kuvvet Potansiyelleri için Özdeğer Denklem Çözümleri

Zeynel Yalçın¹ Zeki Tatlı²

¹Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, VAN
²Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, VAN

Özet: Bu çalışmada; asimtotik iterasyon metodunu bir boyutlu $V(x)=Ax^2+Bx^{2k}$ ($k=2,3,4$) şeklindeki potansiyellerin enerji özdeğerlerini elde etmek amacıyla, ikinci dereceden bazı homojen diferansiyel denklemlere uyguladık. Bazı enerji özdeğerleri elde ettik ve yapılmış diğer bazı hesaplamalarla karşılaştırdık.

Anahtar Kelimeler: Anharmonik osilatör, Schrödinger denklemi, enerji özdeğerleri

The Solutions of Eigenvalue Problems for some One-dimensional Potentials with Even Power by Asymptotic Iteration Method

Abstract: In this study, we have applied asymptotic iteration method(AIM) to some second order differential equation to obtain eigenenergies of one dimensional potential like $V(x)=Ax^2+Bx^{2k}$ ($k=2,3,4$). We have calculated some eigenenergies and compared with some other calculations.

Keyword: Anharmonic oscillator, Schrödinger equation, energy eigenvalues

Giriş

Matematiksel fiziğin bir çok alanında $y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y$ şeklindeki ikinci mertebeden homojen bir diferansiyel denklemle karşılaşılır. Hermite, Laguerre, Bessel, Jacobi, Legendre diferansiyel denklemleri bunlardan bazılarıdır. Relativistik olmayan kuantum mekaniğinde fiziksel sistemlerin anlaşılması için o sisteme ait Schrödinger dalga denkleminin çözülmesi gerekir. Schrödinger dalga denkleminin asimtotik çözümleri verildikten sonra, denklem ikinci dereceden bir homojen diferansiyel denkleme indirgenir. Bu tür diferansiyel denklemlerin çözümünde bir çok metod kullanılmaktadır. WKB (Krieger ve ark. 1967), Süpersimetrik kuantum mekaniği(Cooper ve Freedman 1983), $1/N$ açılımı(Mlodinow ve Shatz 1984), Hill-determinant (Hautot 1986) ve Levai metodu(Levai 1989) bunlardan bazılarıdır. Potansiyel çözümleri için, son zamanlarda Çiftçi ve arkadaşları (2003) Asimtotik İterasyon Metodu (AIM) adıyla anılan yeni bir metod önerdiler. Şu ana kadar bu metodun bir çok uygulaması yapılmıştır. Aşağıda bu metodu kısaca vereceğiz.

Materyal ve Yöntem

Bu bölümde, asimtotik iterasyon metodunu kısaca vereceğiz. Asimtotik iterasyon metodu

$$y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y \quad (1)$$

şeklinde verilen ikinci dereceden homojen bir diferansiyel denklemin sağ tarafındaki terimlerin simetrisi üzerine bina ediliyor. Eğer (1) denkleminin her iki tarafının türevi alınır

$$y''' = \lambda_1(x)y' + s_1(x)y \quad (2)$$

elde edilir. Buradaki $\lambda_1(x)$ ve $s_1(x)$ ifadeleri aşağıdaki gibidir :

$$\lambda_1(x) = \lambda_0'(x) + s_0(x) + \lambda_0^2(x) \quad (3)$$

$$s_1(x) = s_0'(x) + s_0(x)\lambda_0(x) \quad (4)$$

Yine; (1) ile verilen denklemin ikinci türevi alınır

$$y'''' = \lambda_2(x)y' + s_2(x)y \quad (5)$$

elde edilir. Burada da

$$\lambda_2 = \lambda_1' + s_1 + \lambda_0\lambda_1 \quad (6)$$

$$s_2 = s_1' + s_0\lambda_1 \quad (7)$$

şeklinde dir. Bu şekilde devam edilerek (1)'in (n+1) ve (n+2)'inci türevi alınır

$$y^{(n+1)} = \lambda_{n-1}(x)y' + s_{n-1}(x)y \quad (8)$$

$$y^{(n+2)} = \lambda_n(x)y' + s_n(x)y \quad (9)$$

ifadeleri elde edilir. Böylece λ_n ve s_n katsayıları

$$\lambda_n = \lambda_{n-1}' + s_{n-1} + \lambda_0\lambda_{n-1} \quad (10)$$

$$s_n = s_{n-1}' + s_0\lambda_{n-1} \quad (11)$$

olarak elde edilir. (9) denkleminde verilen (n+2)'inci türevi (8) denkleminde verilen (n+1)'ci türeve oranlanırsa

$$\frac{d}{dx} \ln(y^{(n+1)}) = \frac{y^{(n+2)}}{y^{(n+1)}} = \frac{\lambda_n(y' + \frac{s_n}{\lambda_n}y)}{\lambda_{n-1}(y' + \frac{s_{n-1}}{\lambda_{n-1}}y)} \quad (12)$$

elde edilir. Eğer n yeterince büyükse

$$\frac{s_n}{\lambda_n} = \frac{s_{n-1}}{\lambda_{n-1}} := \alpha \quad (13)$$

olacaktır. Böylece (12) ile verilen eşitlik

$$\frac{d}{dx} \ln(y^{(n+1)}) = \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} \quad (14)$$

şeklinde indirgenecektir. Buradan C_1 integral sabiti olmak üzere

$$y^{(n+1)}(x) = C_1 \exp\left(\int \frac{\lambda_n(t)}{\lambda_n(t)} dt\right) = C_1 \lambda_{n-1} \exp\left(\int (\alpha + \lambda_0) dt\right) \quad (15)$$

elde edilir. (15) (8)'de yerine konulursa

$$y' + \alpha y = C_1 \exp\left(\int (\alpha + \lambda_0) dt\right) \quad (16)$$

ifadesi elde edilir. (16)'nın çözülmesi ile

$$y(x) = \exp\left(-\int \alpha(t) dt\right) \times \left[C_2 + C_1 \int \exp\left(\int (\lambda_0(\tau) + 2\alpha(\tau) d\tau)\right) dt \right] \quad (17)$$

şeklindeki genel çözüme ulaşılır. Diğer yandan özdeğerleri elde etmek için

$$\delta_n(x, E_n) = \lambda_{n-1}(x) s_n(x) - \lambda_n(x) s_{n+1}(x) = 0 \quad (18)$$

şartını sağlayan hassas E_n enerji özdeğerleri değerleri bulunur. Söz konusu hassasiyet dalga fonksiyonunun seçimine ve iterasyon sayısına bağlıdır. Uygun bir iterasyon sayısına gelindiğinde E_n değerleri yakınsar.

Metodun bir uygulaması olarak $V(x) = Ax^2 + Bx^{2k}$, ($k = 2, 3, 4$) şeklinde verilen bir boyutlu bazı potansiyeller için çözümler verilecektir. Böyle bir sisteme ait Hamiltoniyen ($2\mu = \hbar = 1$),

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + Ax^2 + Bx^{2k} \quad (19)$$

şeklinde dir. Çözülecek olan özdeğer denklemi ise

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad (20)$$

dir. $\psi(x \rightarrow \pm\infty) = 0$ şartını sağlayan dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = e^{-\beta x^2} f(x) \quad (21)$$

formunda aranabilir. Çiftçi

$V(x) = x^2 + \lambda x^4$ potansiyelin yakınsaklığını hızlandırmak için dalda fonksiyonunu

$$\psi(x) = e^{-\left(\frac{1}{2}\alpha x^2 + \frac{1}{4}\beta x^4\right)} f(x)$$

şekline almıştır. Çok sayıda iterasyon göze alınırsa (21) ile verilen fonksiyon da uygundur. Burada β 'ya yakınsama parametresi olarak bakılabilir. Potansiyelin kuvveti arttıkça β uygun bir biçimde artırılarak yakınsama hızı düzenlenebilir. (21) ile verilen dalga fonksiyonun x 'e göre ikinci türevi alınırsa

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \left[\frac{d^2 f}{dx^2} - 4\beta x \frac{df}{dx} + (4\beta^2 x^2 - 2\beta) f \right] e^{-\beta x^2} \quad (22)$$

elde edilir. (22) ile verilen ifade (20)'de yerine yazıldıktan sonra $e^{-\beta x^2}$ terimleri sadeleştirilir ve $y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y$ formatında düzenlenirse

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = 4\beta x \frac{df(x)}{dx} + (Bx^{2k} + (A - 4\beta^2)x^2 + 2\beta - E_n) f(x) \quad (23)$$

elde edilir. Böylece λ_0 ve s_0 için

$$\lambda_0 = 4\beta x \quad (24)$$

$$s_0 = Bx^{2k} + (A - 4\beta^2)x^2 + 2\beta - E_n \quad (25)$$

ifadelerine ulaşılır. (24) ve (25) ile verilen başlangıç değerleri $\lambda_n(x)$ ve $s_n(x)$ 'i elde etmek için (10) ve (11)'deki tekrarlama bağıntılarında tekrar tekrar kullanılacaktır.

Bulgular ve Tartışma

İlk olarak harmonik osilatör potansiyeli için çözümler verilecektir. Bir boyutlu harmonik osilatör potansiyeli matematiksel fizikte analitik çözümü olan problemlerden biridir. Harmonik osilatör potansiyelin ilk 7 enerji özdeğerini bulmak için 6 iterasyon adımı yeterlidir. Bütün sonuçlar tamdır.

Çizelge 1. $V(x) = Ax^2$ potansiyelinin hesaplanmış ilk 7 enerji özdeğerleri $E(a,b)$ ($A=1, B=0$)

n	E_n
0	1.0
1	3.0
2	5.0
3	7.0
4	9.0
5	11.0
6	13.0

İkinci örnek olarak $V(x) = Bx^4$ potansiyeli için çözümler verilecektir. β 'nin değerlerine bağlı olarak 80 iterasyon kullanılarak hesaplamalar yapılmış ve sonuçlar Çizelge 2'de verilmiştir.

Çizelge 2. $V(x) = Bx^4$ potansiyelinin hesaplanmış ilk 7 enerji özdeğerleri ($B=1$)

n	E_n
0	1.06036
1	3.79967
2	7.45570
3	11.6447
4	16.2618
5	21.2384
6	26.5285

Üçüncü uygulama olarak $V(x) = Bx^6$ potansiyeli için çözümler verilecektir. β 'nin değerlerine bağlı olarak 80 iterasyon kullanılarak hesaplamalar yapılmış ve sonuçlar Çizelge 3'de verilmiştir. Uyarılmış düzeylerin daha hassas değerleri için daha çok iterasyon gerekir

Çizelge 3. $V(x) = Bx^6$ potansiyelinin hesaplanmış ilk 7 enerji özdeğerleri $E(a,b)(A=0, B=1)$

n	E_n
0	1.1448
1	4.3386
2	9.07308
3	14.9352
4	21.7141
5	29.2998
6	37.6132

Dördüncü bir uygulama olarak $V(x) = Bx^8$ potansiyeli için çözümler verilecektir. Bu tipteki bir potansiyel artan x değerleriyle hızla büyür. Böylece yakınsama daha yavaş olur. 100 iterasyon kullanılarak hesaplamalar yapılmış ve elde edilen enerji özdeğerleri Çizelge 4'de verilmiştir. Burada da pratik olması açısından yine $B=1$ alınmıştır.

Daha hassas enerji özdeğerleri elde etmek için daha çok iterasyon gerekir. Bu da hesaplama zamanını arttırır.

Çizelge 4. $V(x) = Bx^8$ potansiyelinin hesaplanmış ilk 7 enerji özdeğerleri $E(a,b)(A=0, B=1)$

n	E_n
0	1.22582
1	4.75588
2	10.2449
3	17.3431
4	25.8089
5	35.4977
6	46.3119

Beşinci bir uygulama olarak $V(x) = Ax^2 + Bx^4$ şeklindeki potansiyelin bazı çözümleri verilecektir. Bu uygulamada B 'nin hem küçük hem de büyük değerleri için hesaplamalar yapılarak sonuçlar Çizelge 5'te verilmiştir. Aynı metotla

$\psi(x) = e^{-\left(\frac{1}{2}\alpha x^2 + \frac{1}{4}\beta x^4\right)} f(x)$ şeklinde dalga fonksiyonları kullanılarak Çiftçi(2007) tarafından daha hassas olarak elde edilen taban durum enerjileri de aynı çizelgede verilmiştir. Ayrıca Tabarak (2005) $A < 0$ ve $B > 0$ için bazı hesaplamalar yapmıştır. Söz konusu

çalışmada $\psi(x) = e^{-\gamma x^{\alpha+1}} f(x)$ formundaki dalga fonksiyonlarını kullanmış, taban ve birinci uyarılmış enerji düzeylerini hesaplamıştır. Bu çalışmada $A=1$ ve $A=-1$ değerleri için bazı hesaplamalar yapılmış ve sonuçlar Çizelge 5'te verilmiştir.

Çizelge 5. $V(x) = Ax^2 + Bx^4$ potansiyelinin değişik A ve B değerleri için hesaplanmış ilk 5 enerji özdeğerleri $E(a,b)$

A	B	E_0	E_0	E_1	E_2	E_3	E_4
1	0.0	1.00000		3.00000	5.00000	7.00000	9.00000
	0.00001	1.00001		3.00004	5.00010	7.00019	9.00031
	0.0001	1.00007		3.00037	5.00097	7.00187	9.00307
	0.001	1.00185		3.01278	5.04480	7.11009	9.21858
	0.01	1.00737		3.03653	5.09394	7.17857	9.28948
	0.1	1.06529	1.0652855 ^a	3.30687	5.74796	8.35268	11.0986
	1	1.39235	1.3923519 ^a 1.3923515 ^b	4.64881	8.65507	13.1565	18.0666
	10	2.44916		8.59894	16.635	25.7936	35.9901
	100	4.99938	4.9991429 ^a 4.9994176 ^b	17.830	34.8699	54.3405	76.1606
	1000	10.6397		38.0864	74.6713	116.496	163.436
-1	2000	13.3883	13.388719 ^a	47.9439	94.0217	146.702	205.834
	40000	36.2742		129.972	254.982	397.915	558.387
		36.275234 ^a					
	1	0.65757		2.83436	6.16437	10.0414	14.3746
		0.675922 ^c		3.22548 ^c			
	10	2.11289		7.76165	15.4803	24.3437	34.0522
	100	4.84343		17.4415	34.3372	53.6956	74.9163
	1000	10.5674		37.9061	74.4314	116.257	162.110

^a Çiftçi(2007) tarafından aynı metotla hesaplanan taban durum enerjileri

^b Freitas ve ark.(2007), simetrik açılım metodu ile hesaplanan taban durum enerjileri

^c Barakat(2005) tarafından aynı metotla hesaplanan taban durum enerjileri

Son uygulama olarak $V(x) = Ax^2 + Bx^6$ potansiyeli için $A=1$ değerine karşılık B 'nin sadece küçük

Son uygulama olarak $V(x) = Ax^2 + Bx^6$ potansiyeli için $A=1$ değerine karşılık B 'nin sadece küçük değerleri için hesap yapılmıştır. Böylece Bx^6 potansiyelinin katkısı bir pertürbe terim gibi hesaba katılmıştır. 60 iterasyon kullanılarak elde edilen enerji değerleri Çizelge 6'da verilmiştir. B 'nin büyük değerleri için aynı metotla yapılan hesaplamalarda elde edilen sonuçlar da literatürde mevcuttur (Barakat 2005; Freitas ve ark. 2007)

Çizelge 6. $V(x) = Ax^2 + Bx^6$ potansiyelinin hesaplanmış ilk dört enerji özdeğerleri $E(a,b)$

A	B	E_0	E_1	E_2	E_3
0		1.00000	3.00000	5.00000	7.00000
1	10^{-5}	1.00002	3.00013	5.00047	7.00118
	10^{-4}	1.00019	3.00131	5.00466	7.01172
	10^{-3}	1.00185	3.01278	5.04480	7.11009
	10^{-2}	1.01674	3.10792	5.34739	7.77746

Sonuç

Bu çalışmada, asimtotik iterasyon metodu bazı kuvvet potansiyellerine uygulandı. Söz konusu potansiyeller için bazı enerji özdeğerleri elde edildi. Yakınsamaları yavaş olmakla birlikte, elde edilen enerji özdeğerleri, yapılmış diğer çalışmalarla uyum içerisindedir. Hesaplamalarda >100 iterasyon kullanıldı. Daha hassas hesaplamalar için daha çok iterasyon gerekir. Genelde hesaplanan uyarılmış enerji düzeyleri taban duruma göre daha az hassastır. Hassaslık düzeyi uyarılmışlık düzeyi artarken, azalmaktadır. Kuvvet potansiyelleri fizikte güçlü sınırlama problemleriyle, örneğin yayla bağlı moleküller, dış manyetik alandaki yükler gibi, bağlantılı olduğundan oldukça önemlidir. Kuvvet potansiyellerinin birkaç teriminin birlikte ele alınması, problemin zorluğunu arttırmaktadır.

Kaynaklar

- Cooper, F., Freedman, B., 1983. Aspects of Supersymmetric Quantum mechanics. *Annals of Physics*. 146: 262-288.
- Çiftçi, H., Hall, R.L., Saad, N., 2003. Asymptotic iteration method for eigenvalue problems. *J Phys. A*. 36: 11807-11816.
- Çiftçi, H., 2008. Anharmonic oscillator energies by the asymptotic iteration method. *Modern phys. Letters A*. 23: 261-267.
- Friates, A., Martin, P., Paz, J.L., 2006. Eigenvalues and eigenfunctions for the ground state of polynomial potentials. *Phys. Letters A*. 362: 371-376.
- Hautot, A., 1986. On the Hill-determinant method. *Phys Rev D*. 33:437-443.
- Kreiger, J.B., 1967. Use of the WKB method for obtaining energy eigenvalues. *J Chem Phys*. 47: 2942-2945.
- Levai, G., 1989. A search for shape-invariant solvable potential. *J Phys. A*. 22: 689-697.
- Mlodinow, L.D., Shatz, M.P., 1984. Solving the Schrödinger equation with use of $1/N$ perturbation theory. *J Math Phys*. 25:943-950.
- Tabarak, T., 2005. The asymptotic iteration method for eigenvalues of the anharmonic oscillator potential $V(x) = Ax^{2\alpha} + Bx^2$. *Phys. Letters A*. 344: 411-417.