



**T.C.
Harran Üniversitesi
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**DENG-FAN-ECKART POTANSİYELİNİ İÇEREN SCHRÖDİNGER
DENKLEMİNİN LAGUERRE SANKİ-SPEKTRAL YÖNTEMİYLE SAYISAL
ÇÖZÜMLERİ**

Seval ULUSOY

MATEMATİK ANABİLİM DALI

**Şanlıurfa
2025**

**T.C.
Harran Üniversitesi
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**DENG-FAN-ECKART POTANSİYELİNİ İÇEREN SCHRÖDİNGER
DENKLEMİNİN LAGUERRE SANKİ-SPEKTRAL YÖNTEMİYLE SAYISAL
ÇÖZÜMLERİ**

Seval ULUSOY

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Haydar ALICI

**Şanlıurfa
2025**

İÇİNDEKİLER

	Sayfa No
ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
ŞEKİLLER DİZİNİ	iv
ÇİZELGELER DİZİNİ	v
1. GİRİŞ	1
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR	3
3. MATERYAL ve YÖNTEM	5
3.1. Laguerre Polinomları ve Bazı Özellikleri	5
3.2. Sanki-spektral Yöntemler ve Türev Matrisleri	13
3.3. Yöntemin Denkleme Uygulanması	16
3.4. Laguerre Polinomları Üzerine İnşa Edilen Sanki-Spektral Yöntem	18
4. BULGULAR	23
4.1. Nümerik Özdeğerler ve Sonuçlar	23
5. TARTIŞMA	34
6. SONUÇLAR	36
7. ÖNERİLER	37
KAYNAKLAR	38

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

DENG-FAN-ECKART POTANSİYELİNİ İÇEREN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN LAGUERRE SANKİ-SPEKTRAL YÖNTEMİYLE SAYISAL ÇÖZÜMLERİ

Seval ULUSOY

**Harran Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Matematik Anabilim Dalı**

Danışman : Prof. Dr. Haydar ALICI

Yıl: 2025, sayfa: 39

Bu tezde, Deng-Fan-Eckart potansiyelini içeren Schrödinger denkleminin özdeğerleri ve özfonksiyonları, Laguerre sanki-spektral yöntemiyle yaklaşık olarak hesaplanacaktır. Bunun için, denklem önce daha kolay işlenebilir bir forma dönüştürülecektir. Daha sonra, bu denklemden faydalanarak, en uygun parametrelili Laguerre polinomları sanki-spektral şemada kullanılmak üzere baz fonksiyonları olarak seçilecektir. Hesaplanan yaklaşık özdeğerler ve özfonksiyonlar çizelgeler ve şekiller halinde rapor edilip literatürde var olan sonuçlarla karşılaştırılarak yöntemin verimliliği tartışılacaktır.

ANAHTAR KELİMELEER: Schrödinger denklemleri, Deng-Fan-Eckart potansiyeli, Laguerre sanki-spektral yöntemi, sayısal çözümler

ABSTRACT

MSc Thesis

NUMERICAL SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER EQUATION WITH THE DENG-FAN-ECKART POTENTIAL BY USING THE LAGUERRE PSEUDOSPECTRAL METHOD

Seval ULUSOY

Harran University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Mathematics

Supervisor : Prof. Dr. Haydar ALICI
Year: 2025, page: 39

In this thesis, numerical solution of the Schrödinger equation with the Deng- Fan-Eckart potential will be obtained by using the Laguerre pseudospectral method. To this end, first the problem will be transformed to a more tractable form. Then, by making use of the transformed equation, the Laguerre polynomials with the most suitable parameter will be chosen as a basis set in order to use in a pseudospectral scheme. The computed approximate eigenvalues and eigenfunctions will be reported in tables and figures. Finally, the efficiency of the method will be discussed by comparing with literature results.

KEYWORDS: Schrödinger equation, Deng-Fan-Eckart potential, Laguerre pseudospectral methods, numerical solutions.

TEŐEKKÜR

Çalıőmalarımız boyunca desteklerini esirgemeyen, engin bilgileriyle beni bilgilendiren çok kıymetli ve saygıdeđer hocam Prof. Dr. Haydar ALICI'ya teőekkür ederim.

Ayrıca, tez jürisinde bulunan ve tezin son halini almasında önemli katkıları bulunan Doç. Dr. Fatih ÖZBAĐ ve Dr. Öğr. Üyesi Hüseyin ALTUNDAĐ hocalarıma da teőekkürü borç bilirim.

Son olarak bana her koşulda ve her durumda destek olan çok deđerli aile bireylerime de teőekkür ederim.

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No

- Şekil 4.1. Optimizasyon parametresinin, $\Psi_{2,0}$ özfonksiyonu üzerindeki etkisini gösterir grafiklerdir. Parametre değerleri $D_e = 15, r_e = 0.4, a = 0.05, \hbar = \mu = 1$ olarak alınmıştır. Matris boyutu $N = 60$ değerinde sabit tutularak optimizasyon parametresinin etkisi incelenmiştir. 24
- Şekil 4.2. $D_e = 15, r_e = 0.4, a = 0.05, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $\ell = 1$ durumunda $\Psi_{2,1}$ ve $\Psi_{9,1}$ özfonksiyonlarıdır. 26
- Şekil 4.3. $D_e = 15, r_e = 0.8, a = 0.05, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{1,1}$ ve $E_{5,1}$ özdeğerlerine karşılık gelen $\Psi_{1,1}(r)$ ve $\Psi_{5,1}(r)$ özfonksiyonlarıdır. Matris boyutu $N = 100$ ve optimizasyon parametresi $c_{opt} = 10$ olarak alınmıştır. 27
- Şekil 4.4. $D_e = 15, r_e = 0.4, a = 0.10, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $\ell = 2$ durumunda $\Psi_{1,2}$ ve $\Psi_{6,2}$ özfonksiyonlarını içermektedir. 28
- Şekil 4.5. $D_e = 15, r_e = 0.4, a = 0.15, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{2,1}, E_{4,1}, E_{6,1}$ ve $E_{8,1}$ özdeğerlerine karşılık gelen $\Psi_{2,1}(r), \Psi_{4,1}(r), \Psi_{6,1}(r)$ ve $\Psi_{8,1}(r)$ özfonksiyonlarıdır. Matris boyutu $N = 100$ ve $N = 200$, optimizasyon parametresi $c_{opt} = 10$ olarak alınmıştır. 30
- Şekil 4.6. $D_e = 15, r_e = 0.8, a = 0.15, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{0,2}$ ve $E_{4,2}$ özdeğerlerine karşılık gelen $\Psi_{0,2}(r)$ ve $\Psi_{4,2}(r)$ özfonksiyonlarıdır. Matris boyutu $N = 110$ ve optimizasyon parametresi $c_{opt} = 10$ olarak alınmıştır. 31

ÇİZELGELER DİZİNİ

Sayfa No

Çizelge 4.1. $N = 60$ Matris boyutunda c optimizasyon parametresinin $E_{0,0}$ özdeğerinin yakınsamasına etkisi.	23
Çizelge 4.2. Optimizasyon parametresinin $E_{0,0}$ özdeğerinin yakınsama hızına etkisi.	25
Çizelge 4.3. $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,1}$ özdeğerleri.	25
Çizelge 4.4. $D_e = 15$, $r_e = 0.8$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,1}$ özdeğerleri.	26
Çizelge 4.5. $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.10$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,2}$ özdeğerleri.	27
Çizelge 4.6. $D_e = 15$, $r_e = 0.8$, $a = 0.10$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,3}$ özdeğerleri.	28
Çizelge 4.7. $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.15$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,1}$ özdeğerleri.	29
Çizelge 4.8. $D_e = 15$, $r_e = 0.8$, $a = 0.15$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,2}$ özdeğerleri.	29
Çizelge 4.9. CO molekülünün Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerleri. Bu molekülün spektroskopik parametreleri $D_e = 11.2256$ eV, $r_e = 1.1283$ Å, $a = 2.2994$ Å ⁻¹ , $\hbar = 1973.29$ eVÅ ve $\mu = 6.8606719 \times 9.31502 \times 10^8$ eV'dir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .5$ ve $V_2 = 5$ olarak seçilmiştir.	31
Çizelge 4.10 ScF molekülünün Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerleri. Bu molekülün spektroskopik parametreleri $D_e = 5.85$ eV, $r_e = 1.794$ Å, $a = 1.46102$ Å ⁻¹ , $\hbar = 1973.29$ eVÅ ve $\mu = 13.358942 \times 9.31502 \times 10^8$ eV'dir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .5$ ve $V_2 = 5$ olarak seçilmiştir.	32
Çizelge 4.11 LiH molekülünün Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerleri. Bu molekülün spektroskopik parametreleri $D_e = 2.5152672118$ eV, $r_e = 1.5956$ Å, $a = 1.1280$ Å ⁻¹ , $\hbar = 1973.29$ eVÅ ve $\mu = 0.8801221 \times 9.31502 \times 10^8$ eV'dir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .1$ ve $V_2 = 1$ olarak seçilmiştir.	32
Çizelge 4.12 ScH molekülünün Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerleri. Bu molekülün spektroskopik parametreleri $D_e = 2.25$ eV, $r_e = 1.776$ Å, $a = 1.41113$ Å ⁻¹ , $\hbar = 1973.29$ eVÅ ve $\mu = 0.986040 \times 9.31502 \times 10^8$ eV'dir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .5$ ve $V_2 = 5$ olarak seçilmiştir.	33

1. GİRİŞ

Bu çalışmada, Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında Schrödinger denkleminin nümerik çözümleri Laguerre spektral yöntemi ile elde edilecektir. Bu potansiyel iki atomlu moleküllerin atomik etkileşimlerinin incelenmesinde Morse potansiyeli kadar iyi bir modeldir. Merkezkaç teriminin varlığında, problemin tam çözümü elementer veya özel fonksiyonlar cinsinden ifade edilemediği için sayısal çözümleri önem arz etmektedir. Literatürde var olan bir çok yöntem merkezkaç terimi yerine uygun bir yaklaşım alıp, yeni denklemi analitik olarak çözerek özdeğerleri ve özfonksiyonları elde etmektedir. Fakat, burada özçiftlerin doğruluğu, en fazla merkezkaç terimine yapılan yaklaşımın doğruluğu ile sınırlıdır. Bu yüzden bu çalışma, merkezkaç terimin olduğu gibi bırakıp, özçiftleri sayısal olarak yüksek doğrulukta hesaplayan bir sayısal yöntem vermeyi amaçlamaktadır. Problemin çözümleri ve her mertebeden türevleri sürekli ise spektral yöntemlerin üstel mertebeden yakınsadığı bilinmektedir (Trefethen, 2008). Bu yüzden, problemin tanım aralığı $(0, \infty)$ göz önüne alınarak bu aralıkta ortogonal bir baz olan Laguerre polinomlarını kullanan sanki-spektral yöntem kullanılacaktır. Bu çalışmada

$$\frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E_{n\ell} - V(r) - \frac{\hbar^2\ell(\ell+2)}{2\mu r^2} \right] \psi(r) = 0 \quad (1.1)$$

radyal Schrödinger denklemi

$$V(r) = D_e \left(1 - \frac{e^{ar_e} - 1}{e^{ar} - 1} \right)^2 - \frac{V_1 e^{-ar}}{1 - e^{ar}} + \frac{V_2 e^{-ar}}{(1 - e^{ar})^2} \quad (1.2)$$

Deng-Fan-Eckart potansiyeli ile ele alınacaktır. Burada, r_e moleküler bağ uzunluğunu, D_e ayrışma enerjisini, r çekirdekler arası uzaklığı, a potansiyel kuyusunun menziline, \hbar indirgenmiş Plank sabitini, μ parçacığın kütlesini ve V_1 ve V_2 parametreleri potansiyel şiddetini temsil etmektedir. $V_1 = V_2 = 0$ durumu Deng-Fan, $D_e = 0$ hali ise Eckart potansiyeli olarak bilinmektedir. Bu denklemin çözümleri, merkezkaç teriminin varlığında ($\ell \neq 0$) kapalı formda elde edilemez. Bu çalışmada, $E_{n\ell}$ özdeğerleri (enerjileri) ve $\psi_{n\ell}(r) := \psi(r)$ özfonksiyonları Laguerre sanki-spektral yöntemi ile hesaplanacaktır.

İlk olarak (1.1) denklemi, bağımlı ve bağımsız değişken üzerinde yapılan bazı dönüşümlerle daha kolay ele alınabilir bir forma dönüştürülecektir. Ardından, dönüştürülmüş denkleme Laguerre sanki-spektral yöntemi uygulanarak özdeğerleri

ve özfonksiyonları sayısal olarak elde edilecektir. Bunun için gerekli bilgisayar programlarının Matlab ve Fortran kodları yazılacaktır. Sonuçlar çizelgeler ve şekiller halinde rapor edilecektir. Son olarak, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalar yapıp yöntemin verimliliği ve etkinliği tartışılacaktır.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Literatürde Deng-Fan-Eckart potansiyeli için bir çok çalışma mevcuttur. Oyewumi ve arkadaşları, merkezkaç (centrifugal) terimini Pekeris tipi yaklaşımla ele alarak Deng-Fan potansiyelini içeren Schrödinger denkleminin özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını asimptotik iterasyon yöntemi ile hesaplamışlardır (Oyewumi ve Ark., 2014). Dong ve Gu, dönen Deng-Fan moleküler potansiyelini içeren Schrödinger denkleminin, sınırlı (sonlu) ayrık enerjilerini ve özfonksiyonlarını yaklaşık olarak hesaplayıp bu çözümlerin genelleştirilmiş hipergeometrik fonksiyonlarla ifade edilebileceğini göstermişlerdir (Dong ve Gu, 2008). Falaye ve arkadaşları, Deng-Fan diatomik moleküler potansiyelini içeren radyal Schrödinger denkleminin yaklaşık analitik çözümlerini elde etmişlerdir (Falaye ve ark., 2014). Oyewumi ve arkadaşları, Merkezkaç terimine Pekeris tipi yaklaşım kullanarak Schrödinger denklemini Deng-Fan moleküler potansiyeli ile çözmüşlerdir (Oyewumi ve Ark., 2013). Hamzavi ve arkadaşları, kaydırılmış Deng-Fan potansiyelini içeren radyal Schrödinger denkleminin sonlu hal çözümlerini, merkezkaç terimine Pekeris tipi yaklaşım kullanarak, Nikiforov-Uvarov metodu ile elde etmişlerdir (Hamzavi ve Ark., 2013). Oluwadare ve Oyewumi, kaydırılmış Deng-Fan potansiyelini içeren Schrödinger denkleminin yaklaşık bağlı durum çözümlerini, uygun bir niceleme kuralıyla elde etmişlerdir (Oyewumi ve Ark., 2018). Edet ve arkadaşları, merkezkaç terimi için, geliştirilmiş Pekeris tipi yaklaşım kullanarak, radyal Schrödinger denkleminin bağlı durum çözümlerini faktörizasyon yöntemi ile elde etmişlerdir (Edet ve Ark., 2020). Farizky ve arkadaşları, Eckart ve Manning-Rosen potansiyelini içeren üç boyutlu Schrödinger denkleminin çözümünü asimptotik iterasyon yöntemi kullanılarak elde etmişlerdir (Farizky ve Ark., 2016). Suparmi ve arkadaşları, merkezi olmayan trigonometrik Pöschl-Teller potansiyeli ile birleştirilmiş Eckart potansiyeli için Schrödinger denkleminin yaklaşık analitik çözümünü Romanovski polinomu kullanılarak elde etmişlerdir (Suparmi ve Ark., 2013). Diaf ve Hachama, Rosen-Morse potansiyelini içeren Feynman denkleminin ile analitik çözümlerini elde etmişlerdir. Bunun için, keyfi bir ℓ açısız momentum durumu için merkezkaç terimine bir yaklaşım ve açısız yol integralleri için lineer olmayan uzay-zaman dönüşümleri kullanılmıştır. Ayrıca, Eckart potansiyeli de özel bir

durum olarak değerlendirilmiştir (Diaf ve Ark., 2013). Onate ve arkadaşları, Eckart-Manning-Rosen potansiyelini içeren Schrödinger denklemini keyfi açısal momentum durumu için belirli bir yaklaşımla çözmüşlerdir (Onate ve Ark., 2017). Hatami ve arkadaşları, deforme olmuş genelleştirilmiş Deng-Fan potansiyeli ve deforme olmuş Eckart potansiyelini içeren Klein-Gordon denkleminin yaklaşık analitik çözümlerini keyfi açısal momentum durumu için merkezkaç terimine bir yaklaşım şeması kullanarak Nikiforov-Uvarov yöntemi ile incelemiştir (Hatami ve Ark., 2019). Taşkın ve Koçak, Eckart potansiyelini içeren Schrödinger denkleminin yaklaşık analitik çözümlerini, merkezkaç terimine yeni bir yaklaşım kullanılarak keyfi açısal momentum durumu için hesaplamışlardır (Taşkın ve Koçak, 2010).

3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1. Laguerre Polinomları ve Bazı Özellikleri

Bu bölümde Laguerre polinomları tanımlanıp bazı özellikleri verilecektir. Önce bazı temel tanımları verelim.

Tanım 3.1 $\Gamma(x)$ ile gösterilen Euler Gamma fonksiyonu

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt, \quad x \neq 0, -1, -2, \dots \quad (3.1)$$

genelleştirilmiş integrali yardımıyla verilir (Artin, 1964).

Tanım 3.2 $\beta \in \mathbb{C}$, k negatif olmayan bir tamsayı olmak üzere

$$(\beta)_k = \beta(\beta + 1) \dots (\beta + k - 1), \quad (\beta)_0 = 1 \quad (3.2)$$

ifadesi Pochhammer sembolü olarak bilinir (Petojević, 2008).

Tanım 3.3 Kronecker delta

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} \quad (3.3)$$

şeklinde tanımlanır (Carbó ve Besalú, 1994).

İkinci mertebe lineer homojen

$$xy'' + (\gamma + 1 - x)y' + ny = 0 \quad (3.4)$$

denklemini Laguerre diferansiyel denklemi olarak bilinir (Bell, 2004). Burada, n negatif olmayan bir tamsayı olduğunda bu denklemin iki lineer bağımsız çözümünden biri genelleştirilmiş Laguerre polinomları olarak bilinir, $L_n^\gamma(x)$ şeklinde gösterilir ve aşağıdaki Rodrigues formülü ile tanımlanır.

Tanım 3.4 Genelleştirilmiş Laguerre polinomları

$$L_n^\gamma(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\gamma} D^n [e^{-x} x^{n+\gamma}], \quad D := \frac{d}{dx} \quad (3.5)$$

Rodrigues formülü ile tanımlanır. (Rasala, 1981)

Dikkat edilirse, (3.4) ile verilen Laguerre diferansiyel denklemi,

$$xy'' + (b - x)y' - ay = 0 \quad (3.6)$$

konfluent hipergeometrik denkleminin

$$a = -n, \quad b = \gamma + 1 \quad (3.7)$$

ile özel bir halidir. Öte yandan (3.6) konfluent hipergeometrik denkleminin bir çözümü

$$y_1(x) = {}_1F_1(a; b; x) \quad (3.8)$$

fonksiyonu olup Konfluent Hipergeometrik fonksiyon olarak adlandırılır ve bu fonksiyonun seri gösterimi

$${}_1F_1(a; b; x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n x^n}{(b)_n n!} \quad (3.9)$$

şeklindedir (Rainville, 1960). Öte yandan (3.5) ile verilen Rodrigues formülünde Leibniz kuralı uygulanırsa

$$\begin{aligned} D^n[e^{-x}x^{n+\gamma}] &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} D^k e^{-x} D^{n-k} x^{n+\gamma}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (-1)^k e^{-x} (n + \gamma)(n + \gamma - 1), \dots, (\gamma + k + 1)x^{\gamma+k} \quad (3.10) \\ &= e^{-x} x^{\gamma} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} \frac{\Gamma(n + \gamma + 1)}{\Gamma(k + \gamma + 1)} x^k \end{aligned}$$

elde edilir. Bu eşitlik (3.5) de yerine yazılırsa

$$L_n^{\gamma}(x) = \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} \frac{\Gamma(n + \gamma + 1)}{\Gamma(k + \gamma + 1)} x^k \quad (3.11)$$

bulunur. Ayrıca

$$\frac{1}{n!} \binom{n}{k} \frac{\Gamma(n + \gamma + 1)}{\Gamma(k + \gamma + 1)} = \frac{1}{n!} \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{\Gamma(n + \gamma + 1)}{\Gamma(k + \gamma + 1)} = \frac{1}{k!} \binom{n + \gamma}{n - k} \quad (3.12)$$

olduğundan

$$L_n^{\gamma}(x) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n + \gamma}{n - k} \frac{x^k}{k!}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.13)$$

halini alır ki bu $L_n^{\gamma}(x)$ ifadesinin gerçekten derecesi n olan bir polinom olduğunu gösterir. Öte yandan

$$(-1)^k \binom{n + \gamma}{n - k} = \frac{(-1)^k (\gamma + 1)_n}{(n - k)! (\gamma + 1)_k} = \frac{(\gamma + 1)_n}{n!} \frac{(-n)_k}{(\gamma + 1)_k}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n \quad (3.14)$$

olduğundan, Laguerre polinomları (3.9) yardımıyla

$$L_n^\gamma(x) = \frac{(\gamma+1)_n}{n!} \sum_{k=0}^n \frac{(-n)_k}{(\gamma+1)_k} \frac{x^k}{k!} = \binom{n+\gamma}{n} {}_1F_1 \left(\begin{matrix} -n \\ \gamma+1 \end{matrix}; x \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.15)$$

biçiminde ifade edilebilir. Bu ise Laguerre polinomlarının Konfluent Hipergeometrik fonksiyon cinsinden ifadesidir. Burada, $x = 0$ alınırsa

$$L_n^\gamma(0) = \binom{n+\gamma}{n} = \frac{(\gamma+1)_n}{n!} = \frac{\Gamma(n+\gamma+1)}{n! \Gamma(\gamma+1)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.16)$$

olarak bulunur. Laguerre polinomlarının başkatsayısı k_n , (3.15) eşitliğinde x^n li terimin katsayısı olup $k = n$ için

$$\begin{aligned} k_n &= \frac{(\gamma+1)_n}{n!} \frac{(-n)_n}{(\gamma+1)_n} \frac{1}{n!} \\ &= (-n)(-n+1)(-n+2) \dots (-n+n-1) \frac{1}{(n!)^2} \\ &= (-1)^n n! \frac{1}{(n!)^2} \\ &= \frac{(-1)^n}{n!} \end{aligned} \quad (3.17)$$

olduğundan

$$k_n = \frac{(-1)^n}{n!}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.18)$$

olarak bulunur. İlk dört Laguerre polinomunun açık gösterimi (3.5) Rodrigues formülünden

$$\begin{aligned} L_0^{(\gamma)}(x) &= 1 \\ L_1^{(\gamma)}(x) &= -x + \gamma + 1 \\ L_2^{(\gamma)}(x) &= \frac{x^2}{2} - (\gamma+2)x + \frac{(\gamma+1)(\gamma+2)}{2} \\ L_3^{(\gamma)}(x) &= -\frac{x^3}{6} + \frac{(\gamma+3)x^2}{2} - \frac{(\gamma+2)(\gamma+3)x}{2} + \frac{(\gamma+1)(\gamma+2)(\gamma+3)}{6} \end{aligned} \quad (3.19)$$

şeklinde elde edilir.

Teorem 3.5 (Bell, 2004) *Genelleştirilmiş Laguerre polinomları için üreteç (doğurucu) fonksiyon*

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(x) t^n = \frac{1}{(1-t)^{\gamma+1}} e^{-\frac{tx}{1-t}}, \quad |t| < 1 \quad (3.20)$$

şeklindedir.

İspat. (3.15) eşitliğinin her iki tarafı t^n ile çarpılıp k üzerinden toplam alınırsa

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(x)t^n &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\gamma+1)_n}{n!} t^n \sum_{k=0}^n \frac{(-n)_k}{(\gamma+1)_k} \frac{x^k}{k!} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=k}^{\infty} \frac{(\gamma+1)_n}{(\gamma+1)_k} \frac{(-1)^k x^k t^n}{k!(n-k)!} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\gamma+1)_{n+k}}{(\gamma+1)_k} \frac{(-1)^k x^k t^{n+k}}{k!n!} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-xt)^k}{k!} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\gamma+k+1)_n}{n!} t^n \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-xt)^k}{k!} (1-t)^{-\gamma-k-1} \\
&= (1-t)^{-\gamma-1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{xt}{1-t}\right)^k \\
&= \frac{1}{(1-t)^{\gamma+1}} e^{-\frac{tx}{1-t}},
\end{aligned} \tag{3.21}$$

ifadesine ulaşılır. Dolayısıyla ispat tamamlanmış olur. \square

Teorem 3.6 $\gamma > -1$ için Laguerre polinomları $I = (0, \infty)$ aralığında $\omega(x) = x^\gamma e^{-x}$ ağırlık fonksiyonu altında ortogonal (dik) bir sistem oluştururlar. Yani

$$(L_m, L_n)_\omega = \int_0^\infty x^\gamma e^{-x} L_m^{(\gamma)}(x) L_n^{(\gamma)}(x) dx = \frac{\Gamma(n+\gamma+1)}{n!} \delta_{mn} = h_n^2 \delta_{mn} \tag{3.22}$$

ortogonalite özelliğinin sağlar. Burada h_n normalizasyon sabiti olarak adlandırılır.

İspat. (3.22) de $L_n^{(\gamma)}(x)$ yerine (3.5) Rodrigues formülünden eşiti yazılıp

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\gamma L_m^{(\gamma)}(x) L_n^{(\gamma)}(x) dx = \frac{1}{n!} \int_0^\infty L_m^{(\gamma)}(x) D^n [e^{-x} x^{n+\gamma}] dx \tag{3.23}$$

n defa kısmi integrasyon yöntemi uygulanırsa

$$\int_0^\infty L_m^{(\gamma)}(x) D^n [e^{-x} x^{n+\gamma}] dx = (-1)^n \int_0^\infty D^n L_m^{(\gamma)}(x) e^{-x} x^{n+\gamma} dx \tag{3.24}$$

elde edilir ki bu $m < n$ için sıfırdır. $m = n$ için ise

$$\int_0^\infty D^n L_n^{(\gamma)}(x) e^{-x} x^{n+\gamma} dx = k_n n! \int_0^\infty e^{-x} x^{n+\gamma} dx = (-1)^n \Gamma(n+\gamma+1) \tag{3.25}$$

olduğundan ortogonalite özelliği ispatlanmış olur. \square

Teorem 3.7 Genelleştirilmiş Laguerre polinomları aşağıdaki rekürrens (yineleme) bağıntılarını gerçekleştirir (Bell, 2004).

- i) $L_{n-1}^\gamma(\xi) + L_n^{\gamma-1}(\xi) = L_n^\gamma(\xi)$
- ii) $(n+1)L_{n+1}^\gamma(\xi) = (2n+\gamma+1-\xi)L_n^\gamma(\xi) - (n+\gamma)L_{n-1}^\gamma(\xi)$
- iii) $\xi \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) = nL_n^\gamma(\xi) - (n+\gamma)L_{n-1}^\gamma(\xi)$
- iv) $\frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) = -\sum_{r=0}^{n-1} L_r^\gamma(\xi)$
- v) $\frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) = -L_{n-1}^{\gamma+1}(\xi)$
- vi) $L_n^{\gamma+1}(\xi) = \sum_{r=0}^n L_r^\gamma(\xi)$

İspat. İlk olarak (3.13) ifadesindeki kombinasyon terimi açılırsa

$$L_n^\gamma(\xi) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(n+\gamma)!}{(n-k)!(\gamma+k)!} \frac{\xi^k}{k!}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.26)$$

halini alır. Burada n yerine $n-1$

$$L_{n-1}^\gamma(\xi) = \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{(n-1+\gamma)!}{(n-1-k)!(\gamma+k)!} \frac{\xi^k}{k!} \quad (3.27)$$

ve γ yerine $\gamma-1$ yazılırsa

$$\begin{aligned} L_n^{\gamma-1}(\xi) &= \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(n+\gamma-1)!}{(n-k)!(\gamma-1+k)!} \frac{\xi^k}{k!}, \quad (k=0 \Rightarrow n-1) \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{(n+\gamma-1)!}{(n-k)!(\gamma-1+k)!} \frac{\xi^k}{k!} + \frac{(-1)^n (n+\gamma-1)}{(n-n)!(\gamma-1+n)!} \frac{\xi^n}{n!} \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{(n+\gamma-1)!}{(n-k)!(\gamma-1+k)!} \frac{\xi^k}{k!} + (-1)^n \frac{\xi^n}{n!} \end{aligned} \quad (3.28)$$

bulunur. Şimdi (3.27) ve (3.28) serileri toplanırsa

$$\begin{aligned} L_{n-1}^\gamma(\xi) + L_n^{\gamma-1}(\xi) &= \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{(n-1+\gamma)!}{(n-1-k)!(\gamma+k)!} \frac{\xi^k}{k!} \\ &\quad + \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{(n+\gamma-1)!}{(n-k)!(\gamma-1+k)!} \frac{\xi^k}{k!} + (-1)^n \frac{\xi^n}{n!} \end{aligned} \quad (3.29)$$

buradan yardımla

$$\begin{aligned} &\Rightarrow \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{(n-1+\gamma)!}{(n-1-k)!(\gamma+k-1)!} \frac{\xi^k}{k!} \left[\frac{1}{\gamma+k} + \frac{1}{n-k} \right] + (-1)^n \frac{\xi^n}{n!} \\ &\Rightarrow \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{(n-1+\gamma)!(n+\gamma)}{(n-1-k)!(\gamma+k-1)!(\gamma+k)(n-k)} \frac{\xi^k}{k!} + (-1)^n \frac{\xi^n}{n!} \\ &\Rightarrow \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(n+\gamma)!}{(n-k)!(\gamma+k)!} \frac{\xi^k}{k!} = L_n^\gamma(\xi) \end{aligned} \quad (3.30)$$

olup böylelikle ispat (i) yineleme bağıntısı için tamamlanmış olur.

Genelleştirilmiş Laguerre polinomu için üreteç fonksiyonu (3.20) ile verilen denklemde her iki tarafın t değişkenine göre kısmi türevi alınırsa

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} nL_n^\gamma(\xi)t^{n-1} &= (\gamma+1)(1-t)^{-\gamma-2}e^{-\frac{\xi t}{1-t}} - (1-t)^{-\gamma-1}\frac{\xi(1-t)+\xi t}{(1-t)^2}e^{-\frac{\xi t}{1-t}} \\ &= \frac{(\gamma+1)}{(1-t)} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(\xi)t^n - \frac{\xi}{(1-t)^2} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(\xi)t^n \end{aligned} \quad (3.31)$$

bulunur ve her iki tarafın $(1-t)^2$ ile çarpılıp yeniden düzenlenmesiyle

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} nL_n^\gamma(\xi)t^{n-1} - 2 \sum_{n=0}^{\infty} nL_n^\gamma(\xi)t^n + \sum_{n=0}^{\infty} nL_n^\gamma(\xi)t^{n+1} &= \gamma \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(\xi)t^n - \gamma \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(\xi)t^{n+1} \\ + \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(\xi)t^n - \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(\xi)t^{n+1} - \xi \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(\xi)t^n \end{aligned} \quad (3.32)$$

elde edilir. (3.32) denklemde her iki tarafın da t^n ile verilen katsayıları eşitlenirse

$$\begin{aligned} (n+1)L_{n+1}^\gamma(\xi) - 2nL_n^\gamma(\xi) + (n-1)L_{n-1}^\gamma(\xi) &= \gamma L_n^\gamma(\xi) - \gamma L_{n-1}^\gamma(\xi) \\ + L_n^\gamma(\xi) - nL_{n-1}^\gamma(\xi) - \xi L_n^\gamma(\xi) \end{aligned} \quad (3.33)$$

ifadesinin düzenlenmesiyle

$$(n+1)L_{n+1}^\gamma(\xi) = (2n+\gamma+1-\xi)L_n^\gamma(\xi) - (n+\gamma)L_{n-1}^\gamma(\xi) \quad (3.34)$$

(ii) yineleme bağıntısı elde edilir. Şimdi (3.20) denkleminin ξ değişkenine göre türevi alınırsa

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi)t^n &= -t(1-t)^{-\gamma-2}e^{-\frac{\xi t}{1-t}} \\ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi)t^n &= \frac{-t}{1-t} L_n^\gamma(\xi)t^n \\ (1-t) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi)t^n &= -tL_n^\gamma(\xi)t^n \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi)t^n - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi)t^{n+1} + \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\gamma(\xi)t^{n+1} &= 0 \end{aligned} \quad (3.35)$$

yazılabilir. İkinci ve üçüncü toplamda indis değiştirilip n yerine $n-1$ yazılırsa

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi)t^n - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{d\xi} L_{n-1}^\gamma(\xi)t^n + \sum_{n=0}^{\infty} L_{n-1}^\gamma(\xi)t^n = 0 \quad (3.36)$$

olur ve öte yandan

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) - \frac{d}{d\xi} L_{n-1}^\gamma(\xi) + L_{n-1}^\gamma(\xi) \right] t^n &= 0 \\ \Rightarrow \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) - \frac{d}{d\xi} L_{n-1}^\gamma(\xi) &= -L_{n-1}^\gamma(\xi) \end{aligned} \quad (3.37)$$

elde edilir. Buradan

$$\frac{d}{d\xi} L_{n-1}^\gamma(\xi) = \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) + L_{n-1}^\gamma(\xi) \quad (3.38)$$

ifadesine ulaşılır. Ayrıca n yerine $n + 1$ yazılırsa

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) &= \frac{d}{d\xi} L_{n+1}^\gamma(\xi) + L_n^\gamma(\xi) \\ \Rightarrow \frac{d}{d\xi} L_{n+1}^\gamma(\xi) &= \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) - L_n^\gamma(\xi) \end{aligned} \quad (3.39)$$

ifadesi elde edilir. Öte yandan (3.34) ile gösterilen (ii) bağıntısı

$$\xi L_n^\gamma(\xi) + (n + 1) [L_{n+1}^\gamma(\xi) - L_n^\gamma(\xi)] - (n + \gamma) [L_n^\gamma(\xi) - L_{n-1}^\gamma(\xi)] = 0 \quad (3.40)$$

formunda yazılabilir. Son eşitliğin ξ değişkenine göre türevi alınıp

$$L_n^\gamma(\xi) + \xi \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) + (n + 1) \left[\frac{d}{d\xi} L_{n+1}^\gamma(\xi) - \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) \right] - (n + \gamma) \left[\frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) - \frac{d}{d\xi} L_{n-1}^\gamma(\xi) \right] = 0 \quad (3.41)$$

(3.39) göz önüne alınırsa $\frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi)$, $L_n^\gamma(\xi)$ ve $L_{n-1}^\gamma(\xi)$ arasında

$$\xi \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) = n L_n^\gamma(\xi) - (n + \gamma) L_{n-1}^\gamma(\xi) \quad (3.42)$$

üç terimli (iii) yineleme bağıntısı elde edilir. Şimdi (3.20) ile verilen denklemde her iki tarafın ξ değişkenine göre kısmi türevi alınırsa

Ayrıca n yerine (3.13) ifadesinin ξ değişkenine göre türevinin alınmasıyla $n = 1, 2, 3, \dots$ için

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} L_n^\gamma(\xi) &= \frac{d}{d\xi} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n + \gamma}{n - k} \frac{\xi^k}{k!} \\ &= \sum_{k=1}^n (-1)^k \binom{n + \gamma}{n - k} \frac{\xi^{k-1}}{(k - 1)!} \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^{k-1} \binom{n + \gamma}{n - k - 1} \frac{\xi^k}{k!} = -L_{n-1}^{(\gamma+1)}(\xi) \end{aligned} \quad (3.43)$$

türev bağıntısına ulaşılır ve (v) ispatlanmış olur. \square

(ii) bağıntısında $L_n^\gamma(\xi)$ yerine $h_n\psi_n$ yazılırsa

$$(n+1)h_{n+1}\psi_{n+1} = (2n+\gamma+1-\xi)h_n\psi_n - (n+\gamma)h_{n-1}\psi_{n-1} \quad (3.44)$$

ulaşılır ve (3.44) denkleminde her iki tarafın h_n ile bölünüp gerekli ifadelerin yerine yazılmasıyla

$$(n+1)\frac{h_{n+1}}{h_n}\psi_{n+1} - (2n+\gamma+1-\xi)\frac{h_n}{h_n}\psi_n + (n+\gamma)\frac{h_{n-1}}{h_n}\psi_{n-1} = 0 \quad (3.45)$$

denklemine ulaşılır ve bu denklem (3.22) yardımıyla yeniden düzenlenirse

$$(n+1)\frac{h_{n+1}}{h_n} = (n+1)\sqrt{\frac{\Gamma(n+\gamma+2)}{(n+1)!} \frac{n!}{\Gamma(n+\gamma+1)}} = \sqrt{(n+1)(n+\gamma+1)} \quad (3.46)$$

ve

$$(n+\gamma)\frac{h_{n-1}}{h_n} = (n+\gamma)\sqrt{\frac{\Gamma(n+\gamma)}{(n-1)!} \frac{n!}{\Gamma(n+\gamma+1)}} = \sqrt{n(n+\gamma)} \quad (3.47)$$

ifadelerinin yerine yazılmasıyla

$$\sqrt{(n+1)(n+\gamma+1)}\psi_{n+1} - (2n+\gamma+1-\xi)\psi_n + \sqrt{n(n+\gamma)}\psi_{n-1} = 0 \quad (3.48)$$

elde edilir. Benzer şekilde (iii) için de aynı işlemlerin uygulanmasıyla

$$\xi \frac{d}{dx} \psi_n = n\psi_n - \sqrt{n(n+\gamma)}\psi_{n-1} \quad (3.49)$$

halini alır. O halde (3.48) ile gösterilen üç terimli ilişki $(N+1)$. derece normalize edilmiş Laguerre polinomları $n = 0, 1, \dots, N$ için homojen olmayan bir lineer denklem sistemi

$$(\xi I - R)\psi = b, \quad (3.50)$$

olup

$$R = \begin{bmatrix} \gamma+1 & -\sqrt{\gamma+1} & 0 & \dots & 0 \\ -\sqrt{\gamma+1} & \gamma+3 & -\sqrt{2(\gamma+2)} & \ddots & \vdots \\ 0 & -\sqrt{2(\gamma+2)} & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \gamma+2N-1 & -\sqrt{N(\gamma+N)} \\ 0 & \dots & 0 & -\sqrt{N(\gamma+N)} & \gamma+2N+1 \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

burada R , $(N + 1) \times (N + 1)$ üç bantlı köşegen bir matris, b vektörü

$$b = \left[0, 0, \dots, 0, \sqrt{(N + 1)(N + \gamma + 1)}\psi_{N+1}(\xi) \right]^T \quad (3.52)$$

sıfır olmayan yalnızca bir bileşen olup, I birim matrisidir. Burada $\psi_{N+1}(\xi) = 0$ olduğundan dikkat edilirse (3.50) sistemi $R\xi = \psi\xi$ biçiminde standart matris özdeğer problemidir. Dolayısıyla $\psi_{N+1}(\xi)$ polinomunun kökleri R matrisinin özdeğerleri olur. Bu yöntem Golub-Welsch algoritması olarak bilinir. (Golub ve Welsch, 1969)

3.2. Sanki-spektral Yöntemler ve Türev Matrisleri

Bu bölümde, birinci ve ikinci mertebeden sanki-spektral türev matrislerini yazacağız. Sanki-spektral yöntemler bir $y(\xi)$ fonksiyonunun $I_N y(\xi)$ olarak isimlendirilen ve

$$I_N y(\xi) = P_N(\xi) = \sum_{n=0}^N \ell_n(\xi) y_n \quad (3.53)$$

ile verilen N . derece polinom interpolasyonu üzerine kurulur. Burada önceden seçilmiş $\xi = \xi_n$, $y_n = y(\xi_n)$ değerleri $y(\xi)$ fonksiyonunun $n = 0, 1, \dots, N$ noktalarındaki reel değerleridir. Ayrıca $\ell_n(\xi)$ fonksiyonları

$$\ell_n(\xi) = \frac{\psi_{N+1}(\xi)}{(\xi - \xi_n)\psi'_{N+1}(\xi_n)} = \frac{L_{N+1}^\gamma(\xi)}{(\xi - \xi_n) \left[\frac{d}{d\xi} L_{N+1}^\gamma(\xi) \right]} \quad (3.54)$$

biçiminde tanımlanan Lagrange interpolasyon polinomlarıdır. (Taşeli ve Alıcı, 2007)

Burada

$$\psi_{N+1}(\xi) = \kappa \prod_{m=0}^N (\xi - \xi_m) \quad (3.55)$$

kökleri reel ve birbirinden farklı $(N + 1)$. derece polinomdur. (3.55) ifadesindeki κ sabiti teorik olarak bir anlam belirtmese de, nümerik yöntemlerde önemli bir rol teşkil eder. $P_N(\xi)$ interpolantını türevleri yardımıyla $y(\xi)$ fonksiyonunun türevlerini de yaklaşık olarak hesaplayabiliriz. Hatta $y(\xi)$ fonksiyonunun ξ_n noktalarındaki $y^k(\xi_m)$ türev değerleri $y(\xi_m) = P_N(\xi_m)$ fonksiyon değerleri türünden belirlenebilir. İlk olarak (3.53) ifadesinin k . mertebeden türevinin alınıp $x = x_m$ noktalarında hesaplanmasıyla

$$P_N^{(k)}(\xi_m) = \sum_{n=0}^N \ell_n^{(k)}(\xi) y_n, \quad m, n, k = 0, 1, \dots, N \quad (3.56)$$

eşitliği elde edilir. Şimdi bu son eşitlik

$$D^{(k)} = \left[d_{(mn)}^{(k)} \right] = \ell_n^{(k)}(\xi_m) \quad (3.57)$$

olmak üzere

$$y^{(k)} = D^{(k)}y \quad (3.58)$$

matris-vektör formunda verilebilir. Burada $y = [y_0, y_1, \dots, y_N]^T$ fonksiyon değerlerini ve $y^{(k)} = [P_N^{(k)}(\xi_0), P_N^{(k)}(\xi_1), \dots, P_N^{(k)}(\xi_n)]$ türevlerini içeren $(N + 1)$ boyutlu sütun vektörleridir. (3.57) ile ifade edilen $(N + 1) \times (N + 1)$ boyutlu $D^{(k)}$ kare matrisine "türev matrisi" denir. (Aytaç, 2017)

Şimdi (3.54) ifadesinin ξ değişkenine göre türevi alınarak birinci türev matrisinin elemanlarını hesaplanırsa

$$\ell'_n(\xi) = \frac{1}{\xi_m - \xi_n} \frac{\psi'_{N+1}(\xi_m)}{\psi'_{N+1}(\xi_n)} \quad (3.59)$$

eşitliği elde edilir. (3.49) denkleminde $\xi = \xi_m$ ve n yerine $(N + 1)$ yazılırsa

$$\xi_m \frac{d}{d\xi_m} \psi_{N+1}(\xi_m) = (N + 1)\psi_{N+1}(\xi_m) - \sqrt{(N + 1)(N + \gamma + 1)}\psi_N(\xi_m) \quad (3.60)$$

halini alır ki bu da (3.55) eşitliğinden $\psi_{N+1}(\xi_m) = 0$ olduğu göz önüne alınarak

$$\psi'_{N+1}(\xi_m) = -\frac{\sqrt{(N + 1)(N + \gamma + 1)}}{\xi_m} \psi_N(\xi_m) \quad (3.61)$$

olur. O halde birinci mertebe türev matrisinin köşegen dışı elemanı

$$\ell'_n(\xi_m) = d_{mn}^{(1)} = \frac{1}{\xi_m - \xi_n} \frac{\xi_n \psi_N(\xi_m)}{\xi_m \psi_N(\xi_n)}, \quad m \neq n \quad (3.62)$$

olarak bulunur. Köşegen elemanları ($m = n$) ise $\xi = \xi_n$ durumundaki belirsizlikten dolayı

$$d_{nn}^{(1)} = \lim_{\xi \rightarrow \xi_n} \ell'_n(\xi) \quad (3.63)$$

limiti yardımıyla bulunabilir. (3.63) ifadesinde belirsizliğin giderilmesiyle

$$d_{nn}^{(1)} = \lim_{\xi \rightarrow \xi_n} \frac{1}{2} \frac{\psi''_{N+1}(\xi)}{\psi'_{N+1}(\xi_n)} = \frac{1}{2} \frac{\psi''_{N+1}(\xi_n)}{\psi'_{N+1}(\xi_n)} \quad (3.64)$$

sonucuna varılır ve

$$\begin{aligned} d_{nn}^{(1)} &= \frac{1}{2} \frac{\psi''_{N+1}(\xi_n)}{\psi'_{N+1}(\xi_n)} \\ &= \frac{1}{2} \frac{(\gamma + 1 - \xi_n)(N + 1 - \gamma)}{(\xi_n)^2} \psi_N(\xi_n) \\ &= \frac{1}{2} \frac{(N + 1 - \gamma)}{\xi_n} \psi_N(\xi_n) \\ &= \frac{1}{2\xi_n} (\xi_n - \gamma - 1) \end{aligned} \quad (3.65)$$

elde edilir. Dolayısıyla birinci mertebeye türev matrisinin elemanları

$$d_{mn}^{(1)} = \frac{1}{2} \begin{cases} \frac{2}{\xi_m - \xi_n} \frac{\xi_n \psi_N(\xi_m)}{\xi_m \psi_N(\xi_n)}, & m \neq n \\ \frac{1}{\xi_n} (\xi_n - \gamma - 1), & m = n \end{cases} \quad (3.66)$$

şeklinde ifade edilir. Benzer şekilde Lagrange polinomunun ikinci mertebeye türevinin

$$\ell_n''(\xi_m) = \frac{1}{\psi'_{N+1}(\xi_n)} \left[\frac{\psi''_{N+1}(\xi)}{(\xi - \xi_n)} - 2 \frac{\psi'_{N+1}(\xi)}{(\xi - \xi_n)^2} + 2 \frac{\psi_{N+1}(\xi)}{(\xi - \xi_n)^3} \right] \quad (3.67)$$

$\xi = \xi_m$ noktalarında ($m \neq n$) hesaplanmasıyla ikinci mertebeye türev matrisinin köşegen dışı elemanları

$$\begin{aligned} d_{mn}^{(2)} &= \frac{1}{-\frac{(N+1-\gamma)}{\xi_n} \psi_N(\xi_n)} \left[\frac{(\gamma+1-\xi_m)(N+1-\gamma)}{(\xi_m)^2(\xi_m-\xi_n)} \psi_N(\xi_m) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2(N+1-\gamma)}{\xi_m(\xi_m-\xi_n)^2} \psi_N(\xi_m) \right] \\ &= \frac{1}{\xi_m - \xi_n} \left[\frac{1}{\xi_m} (\xi_m - \gamma - 1) - \frac{2}{\xi_m - \xi_n} \right] \frac{\xi_n \psi_N(\xi_m)}{\xi_m \psi_N(\xi_n)} \end{aligned} \quad (3.68)$$

ve

$$d_{nn}^{(2)} = \lim_{\xi \rightarrow \xi_n} \ell_n''(\xi) = \lim_{\xi \rightarrow \xi_n} \frac{1}{3} \frac{\psi'''_{N+1}(\xi)}{\psi'_{N+1}(\xi_n)} = \frac{1}{3} \frac{\psi'''_{N+1}(\xi_n)}{\psi'_{N+1}(\xi_n)} \quad (3.69)$$

limiti ile de ikinci mertebeye türev matrisinin köşegen elemanları bulunmuş olur. (3.4) ile verilen Laguerre diferansiyel denkleminin bir çözümü olan $(N+1)$. derece Laguerre polinomu

$$\xi \psi''_{N+1}(\xi) + (\gamma + 1 - \xi) \psi'_{N+1}(\xi) + (N+1) \psi_{N+1}(\xi) = 0 \quad (3.70)$$

olduğundan (3.70) ifadesinin ψ değişkenine göre türevinin alınmasıyla

$$\xi \psi'''_{N+1}(\xi) + \psi''_{N+1}(\xi) - \psi'_{N+1}(\xi) + (\gamma + 1 - \xi) \psi''_{N+1}(\xi) + (N+1) \psi'_{N+1}(\xi) = 0 \quad (3.71)$$

bulunur. Bu denklemin düzenlenmesiyle

$$\psi'''_{N+1}(\xi) = \frac{(\xi - \gamma - 2) \psi''_{N+1}(\xi) - N \psi'_{N+1}(\xi)}{\xi} \quad (3.72)$$

elde edilir ve burada ξ yerine ξ_n yazılarak (3.69) ifadesinde yerine konulmasıyla

$$d_{nn}^{(2)} = \frac{1}{3} \frac{1}{\xi_n} \left[\frac{1}{\xi_n} (\xi_n - \gamma - 2) (\xi_n - \gamma - 1) - N \right] \quad (3.73)$$

bulunur. Dolayısıyla ikinci mertebe türev matrisinin elemanları

$$d_{mn}^{(2)} = \frac{1}{3} \begin{cases} \frac{3}{\xi_m - \xi_n} \left[\frac{1}{\xi_m} (\xi_m - \gamma - 1) - \frac{2}{\xi_m - \xi_n} \right] \frac{\xi_n \psi_N(\xi_m)}{\xi_m \psi_N(\xi_n)}, & m \neq n \\ \frac{1}{\xi_n} \left[\frac{1}{\xi_n} (\xi_n - \gamma - 2)(\xi_n - \gamma - 1) - N \right], & m = n \end{cases} \quad (3.74)$$

şeklinde ifade edilir.

3.3. Yöntemin Denkleme Uygulanması

(1.1) eşitliği ile verilen radyal Schrödinger denkleminin özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını matematiksel fiziğin özel fonksiyonları cinsinden belirleyebilmek için bağımlı ve bağımsız değişken üzerinde dönüşümler yapılarak denklem uygun bir forma dönüştürülecektir. İlk olarak bağımsız değişken üzerinde

$$\xi = cr, \quad \xi \in (0, \infty) \quad (3.75)$$

dönüşümü yapılırsa

$$\frac{d}{dr} \equiv c \frac{d}{d\xi} \quad (3.76)$$

ve

$$\frac{d^2}{dr^2} \equiv c^2 \frac{d^2}{d\xi^2} \quad (3.77)$$

operasyonel denklemleri elde edilir ve bunların (1.1) denkleminde yerine yazılmasıyla

$$c^2 \psi'' + \frac{2\mu}{c^2 \hbar^2} \left[E_{nl} - V(\xi/c) - \frac{\hbar^2 c^2 \ell(\ell+1)}{2\mu \xi^2} \right] \psi = 0 \quad (3.78)$$

denkleminde ulaşılır. Son denklemin $\xi = 0$ noktasındaki düzgün tekilliği

$$\psi(\xi) = \xi^a e^{-\xi/2} y(\xi), \quad a \in \mathbb{R} \quad (3.79)$$

tipinde bir çözüm aramamızı önerir ki bu da denklemdaki $1/\xi^2$ ile orantılı terimlerin yok edilmesi için esnek a parametrelerinin seçilmesine imkan tanır. Şimdi (3.79) ifadesinde her iki tarafın doğal logaritması alınır

$$\ln \psi(\xi) = \ln[\xi^a e^{-\xi/2} y(\xi)], \quad a \in \mathbb{R} \quad (3.80)$$

ve bunun düzenlenmesiyle

$$\ln \psi(\xi) = a \ln \xi + \ln e^{-\xi/2} + \ln y(\xi) \quad (3.81)$$

elde edilir. Bu ifadenin ψ değişkenine göre birinci ve ikinci türevlerinin alınmasıyla

$$\frac{\psi'}{\psi} = \frac{y'}{y} + \frac{a}{\xi} - \frac{1}{2} \quad (3.82)$$

ve

$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{y''}{y} + \left(\frac{2a}{\xi} - 1\right) \frac{y'}{y} + \frac{a^2 - a}{\xi^2} - \frac{a}{\xi} + \frac{1}{4} \quad (3.83)$$

eşitlikleri bulunur. (3.78) denkleminde her iki tarafın ψ ile bölünüp (3.82) ve (3.83) ifadelerinin yerine yazılmasıyla

$$\frac{y''}{y} + \left(\frac{2a}{\xi} - 1\right) \frac{y'}{y} + \frac{a^2 - a}{\xi^2} - \frac{a}{\xi} + \frac{1}{4} + \frac{2\mu}{c^2 \hbar^2} [E_{nl} - V(\xi/c)] - \frac{\ell(\ell + 1)}{\xi^2} = 0 \quad (3.84)$$

denkleminde ulaşılr ve bu denklem yeniden düzenlenirse

$$\frac{y''}{y} + \left(\frac{2a}{\xi} - 1\right) \frac{y'}{y} + \frac{a^2 - a - \ell^2 - \ell}{\xi^2} - \frac{a}{\xi} + \frac{1}{4} + Q(\xi) = 0 \quad (3.85)$$

halini alır. Burada $Q(\xi)$ fonksiyonunu

$$Q = Q(\xi; \mu, c, \hbar) = \frac{2\mu}{c^2 \hbar^2} [E_{nl} - V(\xi/c)] \quad (3.86)$$

şeklinde tanımlayabiliriz. (3.85) denkleminde her iki tarafın ξy ile genişletilmesiyle

$$\xi y'' + (2a - \xi)y' + \left[\frac{\xi}{4} - a + \xi Q(\xi) + \frac{a^2 - a - \ell^2 - \ell}{\xi} \right] y = 0 \quad (3.87)$$

elde edilir. Şimdi

$$a^2 - a - \ell^2 - \ell = 0 \quad (3.88)$$

yani $a = -\ell$ veya $a = \ell + 1$ seçilirse $1/\xi$ ile orantılı terim yok edilebilir. Aslında (3.88) denkleminin pozitif kökü

$$a = \ell + 1 \quad (3.89)$$

seçilirse (3.87) denklemi

$$\xi y'' + (2\ell + 2 - \xi)y' + \left[\frac{\xi}{4} + \xi Q(\xi) - (\ell + 1) \right] y = 0 \quad (3.90)$$

denklemin

$$\gamma = 2\ell + 1 \quad (3.91)$$

olduğu özel halidir ve (3.90) denkleminde ℓ yerine $\frac{\gamma-1}{2}$ yazılmasıyla

$$\xi y'' + (\gamma + 1 - \xi)y' + \left[\frac{\xi}{4} - \frac{1}{2}(\gamma + 1) + \xi Q(\xi) \right] y = 0 \quad (3.92)$$

bulunur. O halde (3.86) ile verilen $Q(\xi)$ fonksiyonunun (3.92) denkleminde yerine yazılarak düzenlenmesiyle Schrödinger denklemi $\mathcal{H}\Psi = E_{nl}\Psi$ eşitliğindeki gibi matris-özdeğer problemi formunda

$$\xi y'' + (\gamma + 1 - \xi)y' + \left[\frac{\xi}{4} - \frac{1}{2}(\gamma + 1) - \frac{2\mu}{c^2\hbar^2}\xi V(\xi/c) \right] y = -\frac{2\mu}{c^2\hbar^2}E_{nl}\xi y \quad (3.93)$$

olarak yazılabilir ve c bir optimizasyon parametresidir. Burada (3.93) denklemi yeniden düzenlenerek

$$\xi y'' + (\gamma + 1 - \xi)y' + \hat{Q}(\xi)y = \lambda \xi y, \quad \xi \in (0, \infty) \quad (3.94)$$

elde edilir ki bu da benzer olarak (3.93)'deki genelleştirilmiş Laguerre polinomlarına karşılık gelen diferansiyel denklem olarak bilinir. Öte yandan $\hat{Q}(\xi)$ değiştirilmiş potansiyeli, λ ise özdeğer parametresini temsil eder.

$$\hat{Q} = \hat{Q}(\xi; \mu, c, \hbar) = \frac{\xi}{4} - \frac{1}{2}(\gamma + 1) - \frac{2\mu}{c^2\hbar^2}\xi V(\xi/c) \quad (3.95)$$

ve

$$\lambda = \lambda(\mu, c, \hbar) = -\frac{2\mu}{c^2\hbar^2}E_{nl} \quad (3.96)$$

olduğundan

$$E_{nl} = -\frac{c^2\hbar^2}{2\mu}\lambda \quad (3.97)$$

ile verilen E_{nl} özdeğerleri (enerjileri) kolayca görülür. Bir sonraki bölümde, Laguerre polinomları üzerine inşa edilen sanki-spektral yöntem anlatılıp, dönüştürülmüş (3.93) denkleminde uygulanacaktır (Taşeli ve Alıcı, 2015).

3.4. Laguerre Polinomları Üzerine İnşa Edilen Sanki-Spektral Yöntem

Bu bölümde (3.94) de verilen dönüştürülmüş (3.93) denkleminde Laguerre polinomları üzerine inşa edilen sanki-spektral yöntem anlatılacaktır. Şimdi (3.53) ifadesinden yararlanarak yaklaşık çözüm olarak

$$y \approx \sum_{n=0}^N \ell_n(\xi)y_n, \quad y_n = y(\xi_n) \quad (3.98)$$

alınacaktır. (3.98) ile gösterilen yaklaşık çözüm (3.94) de yerine yazılıp

$$\xi \sum_{n=0}^N \ell_n''(\xi)y_n + (\gamma + 1 - \xi) \sum_{n=0}^N \ell_n'(\xi)y_n - \hat{Q}(\xi)\ell_n(\xi)y_n = \lambda \xi \ell_n(\xi)y_n \quad (3.99)$$

cebirsel denklem sistemine ulaşılır ve bu denklem sistemini düzenlersek

$$\sum_{n=0}^N \left[\xi \ell_n''(\xi) + (\gamma + 1 - \xi) \ell_n'(\xi) + \hat{Q}(\xi) \ell_n(\xi) \right] y_n = \lambda \sum_{n=0}^N \xi \ell_n(\xi) y_n \quad (3.100)$$

olur. Burada $\xi = \xi_m$, $m = 0, 1, \dots, N$ alınır

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^N \left[\xi_0 \ell_n''(\xi_0) + (\gamma + 1 - \xi_0) \ell_n'(\xi_0) + \hat{Q}(\xi_0) \ell_n(\xi_0) \right] y_0 &= \lambda \sum_{n=0}^N \xi_0 \ell_n(\xi_0) y_0 \\ \sum_{n=0}^N \left[\xi_1 \ell_n''(\xi_1) + (\gamma + 1 - \xi_1) \ell_n'(\xi_1) + \hat{Q}(\xi_1) \ell_n(\xi_1) \right] y_1 &= \lambda \sum_{n=0}^N \xi_1 \ell_n(\xi_1) y_1 \\ &\vdots \\ \sum_{n=0}^N \left[\xi_N \ell_n''(\xi_N) + (\gamma + 1 - \xi_N) \ell_n'(\xi_N) + \hat{Q}(\xi_N) \ell_n(\xi_N) \right] y_N &= \lambda \sum_{n=0}^N \xi_N \ell_n(\xi_N) y_N \end{aligned} \quad (3.101)$$

ifadesine ulaşılır. O halde $\xi = \xi_m$ noktalarındaki denklem sistemi

$$\sum_{n=0}^N \left[\underbrace{\xi_m \ell_n''(\xi_m) + (\gamma + 1 - \xi_m) \ell_n'(\xi_m)}_{\hat{K}} + \underbrace{\hat{Q}(\xi_m) \ell_n(\xi_m)}_{\hat{Q}} \right] y_n = \lambda \sum_{n=0}^N \xi_m \ell_n(\xi_m) y_n \quad (3.102)$$

şeklindedir. (3.102) ile belirtilen sistem matris-vektör formunda yazılırsa

$$(\hat{K} + \hat{Q})y = \lambda B y \quad (3.103)$$

elde edilir ki bu bir genelleştirilmiş matris-özdeğer problemidir. Şimdi \hat{K} matrisinin $\xi = \xi_m$ noktalarında ($m \neq n$) hesaplanmasıyla

$$\begin{aligned} \hat{K}_{mn} &= \left[\xi_m \ell_n''(\xi_m) + (\gamma + 1 - \xi_m) \ell_n'(\xi_m) \right] \\ &= \xi_m \left[\frac{1}{\xi_m - \xi_n} \left(\frac{1}{\xi_m} (\xi_m - \gamma - 1) - \frac{2}{\xi_m - \xi_n} \right) \frac{\xi_n \psi_N(\xi_m)}{\xi_m \psi_N(\xi_n)} \right] \\ &\quad + (\gamma + 1 - \xi_m) \frac{1}{\xi_m - \xi_n} \frac{\xi_n \psi_N(\xi_m)}{\xi_m \psi_N(\xi_n)} \end{aligned} \quad (3.104)$$

elde edilir ve bu matrisin en son hali

$$\hat{K}_{mn} = \frac{-2\xi_n}{(\xi_m - \xi_n)^2} \frac{\psi_N(\xi_m)}{\psi_N(\xi_n)}, \quad m \neq n \quad (3.105)$$

biçimindedir. Benzer şekilde \widehat{K} matrisinin $m = n$ için köşegen elemanları

$$\begin{aligned}
\widehat{K}_{nn} &= [\xi_n \ell_n''(\xi_n) + (\gamma + 1 - \xi_n) \ell_n'(\xi_n)] \\
&= \xi_n \left[\frac{1}{3\xi_n} \left(\frac{1}{\xi_n} (\xi_n - \gamma - 2)(\xi_n - \gamma - 1) - N \right) + (\gamma + 1 - \xi_n) \frac{1}{2\xi_n} (\xi_n - \gamma - 1) \right] \\
&= \frac{\xi_n - \gamma - 1}{\xi_n} \left[\frac{1}{3} (\xi_n - \gamma - 2) + \frac{1}{2} (\gamma + 1 - \xi_n) \right] - \frac{N}{3} \\
&= \frac{\xi_n - \gamma - 1}{\xi_n} \left[-\frac{\xi_n}{6} + \frac{\gamma}{6} - \frac{1}{6} \right] - \frac{N}{3} \\
&= -\frac{1}{6\xi_n} (\xi_n - \gamma - 1)(\xi_n - \gamma + 1) - \frac{N}{3} \\
&= -\frac{1}{6\xi_n} [(\xi_n - \gamma)^2 - 1] - \frac{N}{3}
\end{aligned} \tag{3.106}$$

bulunur. Dolayısıyla \widehat{K} matrisinin elemanları

$$\widehat{K}_{mn} = -\frac{1}{6} \begin{cases} \frac{12\xi_n}{(\xi_m - \xi_n)^2} \frac{\psi_N(\xi_m)}{\psi_N(\xi_n)}, & m \neq n \\ \frac{1}{\xi_n} [(\xi_n - \gamma)^2 - 1] + 2N, & m = n \end{cases} \tag{3.107}$$

şeklinde ifade edilir. Öte yandan $\widehat{Q}(\xi)$ değiştirilmiş potansiyeli

$$\widehat{Q}_{mn} = \left(\frac{\xi_n}{4} - \frac{1}{2}(\gamma + 1) - \frac{2\mu}{c^2 \hbar^2} \xi_n V(\xi_n/c) \right) \delta_{mn} \tag{3.108}$$

ile gösterilebilir ve buradaki V parametresi (1.2) deki Deng-Fan-Eckart potansiyelini temsil eder. B köşegen matrisinin tersi

$$B_{mn}^{-1} = \frac{1}{\xi_m} \delta_{mn} \tag{3.109}$$

şeklinde yazılabilir. Böylece (3.107) ve (3.108) ifadelerinin soldan B köşegen matrisinin tersi ile çarpılmasıyla

$$\widehat{T} = (B^{-1} \widehat{K})_{mn} = -\frac{1}{6} \begin{cases} \frac{12}{(\xi_m - \xi_n)^2} \frac{\psi_N(\xi_m)}{\psi_N(\xi_n)}, & m \neq n \\ \frac{1}{\xi_n} \left\{ \frac{1}{\xi_n} [(\xi_n - \gamma)^2 - 1] + 2N \right\}, & m = n \end{cases} \tag{3.110}$$

ve

$$Q = (B^{-1} \widehat{Q})_{mn} = \left(\frac{1}{4} - \frac{\gamma + 1}{2\xi_n} + \frac{2\mu}{c^2 \hbar^2} V(\xi_n/c) \right) \delta_{mn} \tag{3.111}$$

elde edilir ki bu da (3.103) ile verilen genelleştirilmiş matris-özdeğer problemini

$$(\widehat{T} + Q)y = \lambda y \tag{3.112}$$

sıradan matris-özdeğer problemine dönüştürür.

Tanım 3.8 A ve B , $n \times n$ biçimindeki kare matrisler olmak üzere

$$B = P^{-1}AP \quad (3.113)$$

olacak şekilde terslenebilir bir P matrisi varsa A ve B matrisleri benzerdir denir (Lord, 1999)

Teorem 3.9 Benzer matrislerin özdeğerleri aynıdır (Robinson, 2006).

İspat. A ve B matrisleri benzer olsun. A matrisinin özdeğerleri $Ax = \lambda x$ eşitliğini sağlayan λ sayılarıdır. Burada A yerine (3.113) ifadesinden PBP^{-1} yazılabilir ve bu eşitliğin soldan P^{-1} ile çarpılmasıyla

$$\begin{aligned} PBP^{-1}x &= \lambda x \\ BP^{-1}x &= \lambda P^{-1}x \\ B(P^{-1}x) &= \lambda(P^{-1}x) \end{aligned} \quad (3.114)$$

olur. Yani x , A matrisinin λ özdeğerine karşılık gelen özvektörü ise $P^{-1}x$ vektörü, B matrisinin aynı λ özdeğerine karşılık gelen özvektörüdür. Dolayısıyla A matrisinin her özdeğeri B matrisinin de özdeğeridir. Bu işlemlerde A ve B matrislerinin rolü değiştirilebileceği için, B matrisinin her özdeğeri aynı zamanda A matrisinin de özdeğerleri olur. Sonuç olarak A ve B matrisleri benzer ise aynı özdeğerlere sahiptir.

□

Dikkat edilirse \hat{T} matrisi simetrik olmadığı için (3.112) lineer denklem sistemi simetrik değildir. Fakat, bu teoremden faydalanarak uygun bir benzerlik dönüşümü ile (3.112) lineer denklem sistemi simetrik hale getirilebilir. Eğer P matrisi

$$P = \text{diag} [L_N^{(\gamma)}(\xi_0), L_N^{(\gamma)}(\xi_1), \dots, L_N^{(\gamma)}(\xi_N)] \quad (3.115)$$

olarak seçilip, $P^{-1}\hat{T}P$ şeklinde \hat{T} matrisine uygulanırsa

$$T = P^{-1}\hat{T}P = -\frac{1}{6} \begin{cases} \frac{12}{(\xi_m - \xi_n)^2}, & m \neq n \\ \frac{1}{\xi_n} \left\{ \frac{1}{\xi_n} [(\xi_n - \gamma)^2 - 1] + 2N \right\}, & m = n \end{cases} \quad (3.116)$$

ifadesi elde edilir. Görüldüğü gibi T matrisi $T_{mn} = T_{nm}$ olduğundan simetriktir. Ayrıca, \hat{T} matrisinde nümerik açıdan fazladan hesap gerektiren $\psi_N(\xi_m)$ ve $\psi_N(\xi_n)$ terimleri de

yok edildi. Dolayısıyla

$$P^{-1}(\hat{T} + Q)P = P^{-1}\hat{T}P + P^{-1}QP = T + Q \quad (3.117)$$

olduğundan, (3.112) lineer denklem sistemi yerine

$$(T + Q)u = \lambda u \quad (3.118)$$

simetrik lineer denklem sistemi alınabilir. (3.112) ve (3.118) lineer denklem sistemlerinin katsayı matrisleri benzer matrisler olduğundan özdeğerleri aynıdır. Dolayısı ile simetrik olmayan ve fazladan terimler içeren (3.112) lineer denklem sistemi yerine, simetrik ve daha sade (3.118) lineer denklem sisteminin özdeğerlerini hesaplamak nümerik açıdan daha verimli olacaktır.

Öte yandan (3.112) lineer denklem sisteminin özvektörleri ile (3.118) simetrik lineer denklem sisteminin özvektörleri arasında

$$y = Pu \quad (3.119)$$

bağlantısının olduğu

$$(T + Q)u = \lambda u \Rightarrow P^{-1}(\hat{T} + Q)Pu = \lambda u \Rightarrow (\hat{T} + Q)(Pu) = \lambda(Pu) \quad (3.120)$$

ifadesinden açıktır. Sonraki bölümde (3.118) lineer denklem sistemini Laguerre sanki-spektral yöntemiyle çözerek nümerik özdeğerleri ve özfonksiyonları elde etmeye çalışacağız.

4. BULGULAR

4.1. Nümerik Özdeğerler ve Sonuçlar

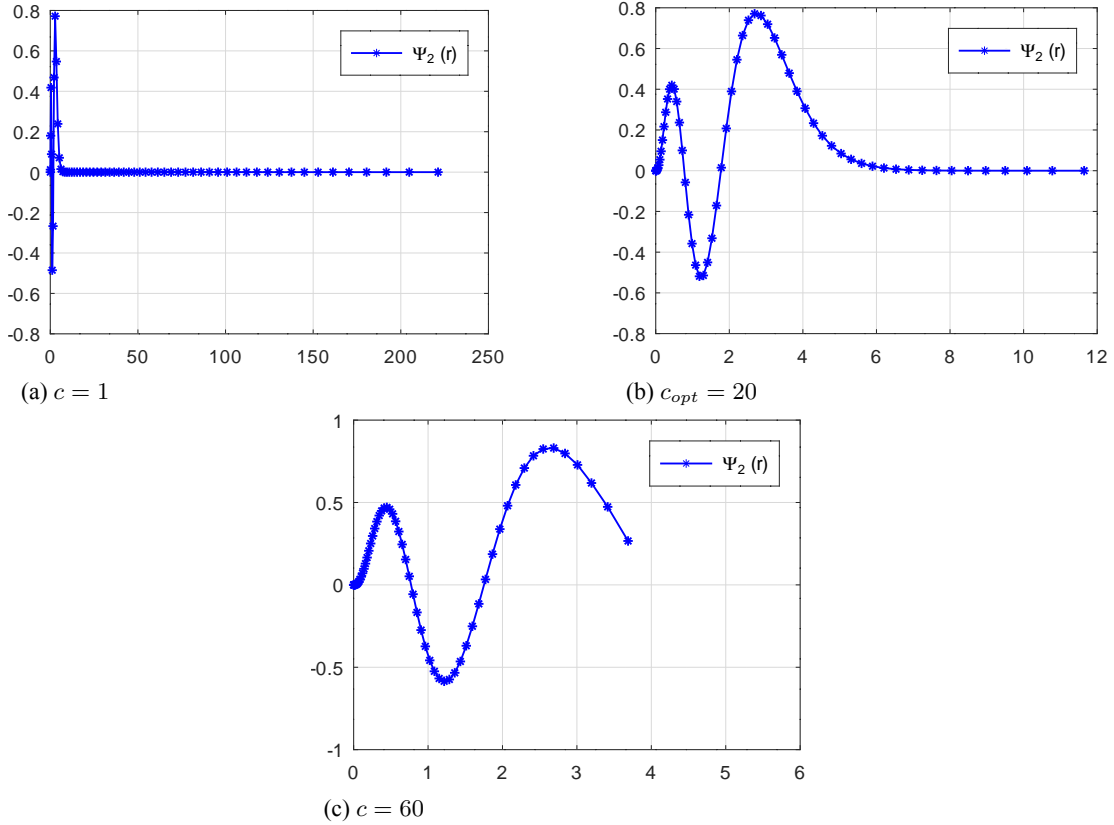
Bütün tablolarda n özdeğer indeksini, N matris boyutunu, c_{opt} istenilen doğruluğun en küçük matris boyutunda elde edilmesi için gereken optimizasyon parametresinin değerini, $E_{n,\ell}$ özdeğerleri temsil etmektedir.

Çizelge 4.1. $N = 60$ Matris boyutunda c optimizasyon parametresinin $E_{0,0}$ özdeğerinin yakınsamasına etkisi.

c_{opt}	$E_{0,0}$
1	5.5266
5	5.5267802
10	5.52678027
20	5.526780278
30	5.52678027802
40	5.5267802780
50	5.52678028
60	5.5267802
70	5.526780
80	5.5267

Çizelge 4.1., $N = 60$ matris boyutunda $E_{0,0}$ özdeğeri üzerinde c optimizasyon parametresinin yakınsama üzerindeki etkisini görmek için verilmiştir. Tablodan görüldüğü üzere c_{opt} değeri 25–35 aralığında olup yöntem optimizasyon parametresine hassas bir şekilde bağlı değildir. Yani, 25 – 35 aralığındaki herhangi bir değer optimizasyon parametresinin optimum değeri olarak alınabilir. Aslında optimizasyon parametresi, grid noktalarını özfonksiyonun değerlerinin sıfırdan uzak olduğu aralığa sıkıştırmaktadır. Böylece grid noktaları özfonksiyonun sıfıra çok yakın olduğu aralıkta zayi edilmemiş olur ve matris boyutu sabit kalmasına rağmen daha yüksek doğrulukta sonuçlar elde edilir (Bkz. Şekil 4.1.). Şekil 4.1., optimizasyon parametresinin, $\Psi_{2,0}$ özfonksiyonu üzerindeki etkisini göstermektedir. Parametre değerleri $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ olarak alınmıştır. Matris boyutu $N = 60$ değerinde sabit tutularak optimizasyon parametresinin etkisi incelenmiştir. Optimizasyon parametresi, optimum değerinden çok küçük olduğu zaman grid noktalarının büyük bir bölümü özfonksiyonun neredeyse sıfır olduğu aralık olan (10, 240) aralığında zayi olmaktadır

(Şekil 4.1.a). Optimizasyon parametresi, optimum değerinden çok büyük olduğu zaman ise özfonksiyonun sıfırdan uzak olduğu bazı kısımlarının elde edilmesi mümkün olmamaktadır (Şekil 4.1.c). Öte yandan, parametrenin optimum değeri $c_{opt} = 20$ için özfonksiyon yüksek doğrulukta elde edilmektedir (Şekil 4.1.b).



Şekil 4.1. Optimizasyon parametresinin, $\Psi_{2,0}$ özfonksiyonu üzerindeki etkisini gösterir grafiklerdir. Parametre değerleri $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ olarak alınmıştır. Matris boyutu $N = 60$ değerinde sabit tutularak optimizasyon parametresinin etkisi incelenmiştir.

Çizelge 4.2. optimizasyon parametresinin etkisini daha iyi görebilmek için verilmiştir. Grid noktaları ölçeklendirilmediğinde ($c = 1$) yakınsamanın çok yavaş olduğu görülmüştür. Nitekim, $N = 70$ ve $N = 120$ matris boyutları arasında yakınsayan basamak sayısı açısından bir fark bulunmamaktadır ve her ikisi için de 4 – 5 basamak doğruluk elde edilmiştir. Öte yandan, c parametresinin optimum değeri seçildiğinde ($c_{opt} = 10$), 4 – 5 basamak doğruluk sadece $N = 10$ matris boyutunda elde edilmiştir.

Bütün çizelgelerde verilen sayısal özdeğerler ardışık iki matris boyutu için

Çizelge 4.2. Optimizasyon parametresinin $E_{0,0}$ özdeğerinin yakınsama hızına etkisi.

$N (c = 1)$	$E_{0,0}$	$N (c = 10)$	$E_{0,0}$
70	5.52672	5	5.5266
80	5.52675	10	5.52677
90	5.52676	20	5.526780
100	5.526771	40	5.52678026
110	5.526775	60	5.526780276
120	5.526776	80	5.52678027765

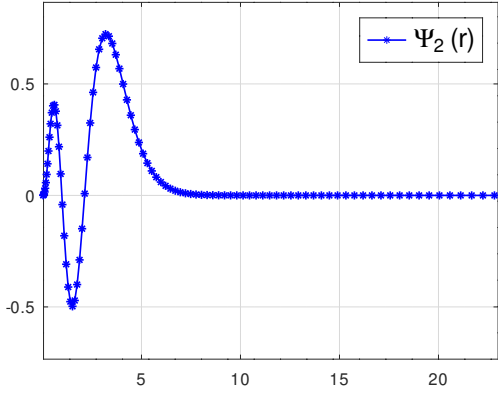
karşılaştırılmış ve sadece kararlı basamaklar rapor edilmiştir. Yuvarlamadan dolayı son basamak hariç hepsi doğrudur.

Çizelge 4.3., $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $\ell = 1$ durumunda ilk on özdeğerini içermektedir. Bu özdeğerleri çizelgede verilen doğrulukta elde etmek için $c_{opt} = 10$ ve matris boyutunun $N = 120$ alınması yeterli olmuştur. Son iki sütun karşılaştırma için literatür sonuçlarını içermektedir. Çizelge 4.3.'den anlaşılacağı üzere bu çalışmadaki sonuçlar literatür sonuçları ile oldukça uyumludur.

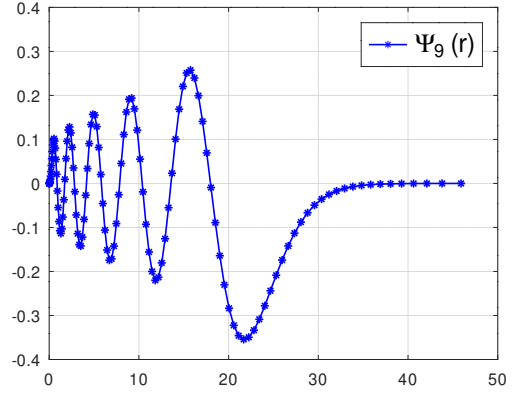
Çizelge 4.3. $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,1}$ özdeğerleri.

n	N	c_{opt}	$E_{n,1}$	Oyewumi ve Ark. (2013)	Oyewumi ve Ark. (2014)
0	120	10	7.860804466630	7.860804493	7.860804467
1			10.997762943920	10.99776305	10.99776302
2			12.497602157360	12.49760242	12.4976024
3			13.327798459761		
4			13.833706868550		
5			14.163507513689		
6			14.389352489277		
7			14.549790697778		
8			14.666937615480		
9			14.754217676197		

Şekil 4.2., $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $\ell = 1$ durumunda normalize edilmiş $\Psi_{2,1}(r)$ ve $\Psi_{9,1}(r)$ özfonksiyonlarını içermektedir.



(a) $E_{2,1} = 12.497602157360$ özdeğerine karşılık gelen $\Psi_{2,1}(r)$ özfonksiyonunun grafiği



(b) $E_{9,1} = 14.754217676197$ özdeğerine karşılık gelen $\Psi_{9,1}(r)$ özfonksiyonunun grafiği

Şekil 4.2. $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $\ell = 1$ durumunda $\Psi_{2,1}$ ve $\Psi_{9,1}$ özfonksiyonlarıdır.

Bu tezde özfonksiyonlar $L_2(0, \infty)$ anlamında, yani

$$\|\Psi_n(r)\|^2 = \int_0^\infty \Psi_n^2(r) dr = 1, \quad (4.1)$$

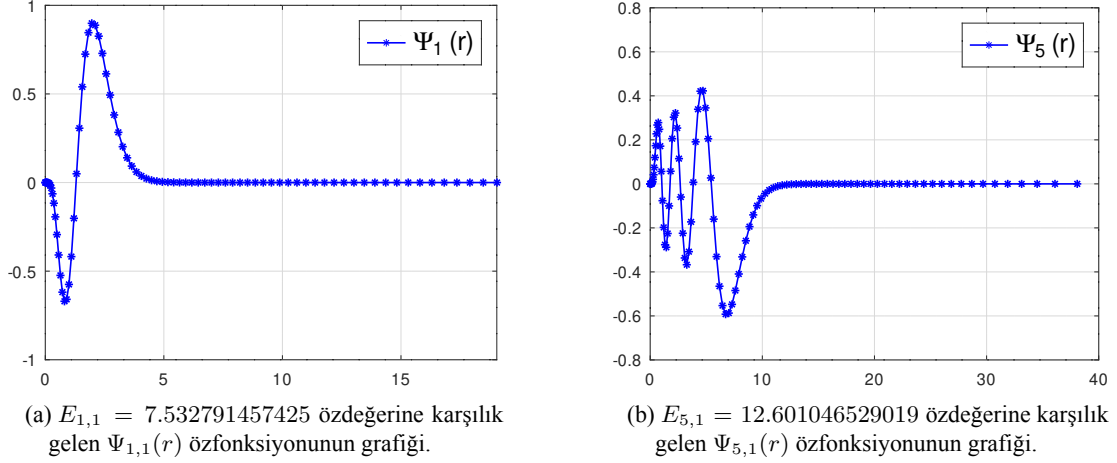
olacak şekilde normalize edilmiştir. Burada $L_2(0, \infty)$ karesi integrallenebilir fonksiyonların Hilbert uzayını temsil etmektedir.

Çizelge 4.4. $D_e = 15$, $r_e = 0.8$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,1}$ özdeğerleri.

n	N	c_{opt}	$E_{n,1}$	Oyewumi ve Ark. (2013)	Oyewumi ve Ark. (2014)
0	100	10	4.140887222544	4.140887263	4.140887237
1			7.532791457425	7.532791561	7.532791535
2			9.613012874348	9.613013087	9.613013061
3			10.978932189767		
4			11.922732348845		
5			12.601046529019		
6			13.103972739496		
7			13.486318352710		
8			13.782976152167		
9			14.017016337570		
10			14.204186927914		

Çizelge 4.4. ise Deng-Fan potansiyelinin $D_e = 15$, $r_e = 0.8$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için bazı özdeğerlerini içermektedir. Özdeğerleri, çizelgede verilen doğrulukta elde etmek için optimizasyon parametresi $c = 10$ seçildiğinde $N = 100$

matris boyutu yeterli olmaktadır. Son iki sütun literatür sonuçları olup karşılaştırma amaçlı verilmiştir. Bu çalışmadaki yöntemin literatür sonuçlarıyla uyumlu, hatta daha yüksek doğrulukta olduğu söylenebilir. Şekil 4.3., $D_e = 15$, $r_e = 0.8$, $a = 0.05$,



Şekil 4.3. $D_e = 15$, $r_e = 0.8$, $a = 0.05$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{1,1}$ ve $E_{5,1}$ özdeğerlerine karşılık gelen $\Psi_{1,1}(r)$ ve $\Psi_{5,1}(r)$ özfonksiyonlarıdır. Matris boyutu $N = 100$ ve optimizasyon parametresi $c_{opt} = 10$ olarak alınmıştır.

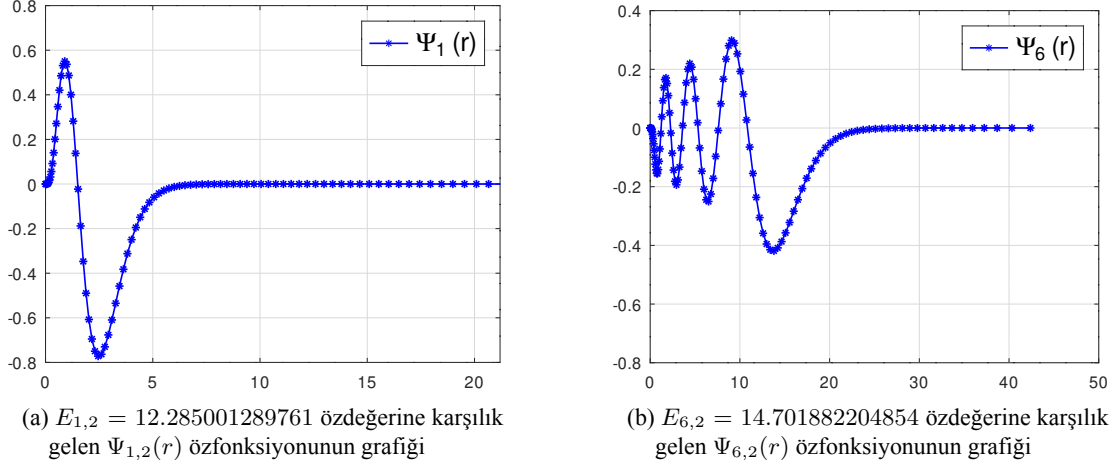
$\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{1,1}$ ve $E_{5,1}$ özdeğerlerine karşılık gelen $\Psi_{1,1}(r)$ ve $\Psi_{5,1}(r)$ özfonksiyonlarını içermektedir. Burada matris boyutu $N = 100$ ve optimizasyon parametresi $c_{opt} = 10$ olarak alınmıştır.

Çizelge 4.5. $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.10$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,2}$ özdeğerleri.

n	N	c_{opt}	$E_{n,2}$	Oyewumi ve Ark. (2013)	Oyewumi ve Ark. (2014)
0	200	10	10.353536951957	10.35353947	10.35353916
1			12.285001289761	12.28500942	12.2850091
2			13.306777642000	13.3067969	13.30679659
3			13.907009810749	13.90704846	13.90704815
4			14.284749288270		
5			14.533490379887		
6			14.701855444088		
7			14.817158348515		

Çizelge 4.5., $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.10$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,2}$ özdeğerlerini içermektedir. Ölçeklendirme parametresi

$c_{opt} = 10$ olarak alındığında, ilk sekiz özdeğeri tablodaki doğrulukta elde etmek için $N = 200$ matris boyutu yeterlidir.



Şekil 4.4. $D_e = 15, r_e = 0.4, a = 0.10, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $\ell = 2$ durumunda $\Psi_{1,2}$ ve $\Psi_{6,2}$ özfonksiyonlarını içermektedir.

Şekil 4.4. ise aynı potansiyel parametreleri için $E_{1,2}$ ve $E_{6,2}$ özdeğerlerine karşılık gelen normalize edilmiş $\Psi_{1,2}(r)$ ve $\Psi_{6,2}(r)$ özfonksiyonlarını içermektedir. Çizelge 4.6., $D_e = 15, r_e = 0.8, a = 0.10, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,3}$ sayısal özdeğerlerini sunmaktadır. Son iki tablodan görüldüğü gibi, bu çalışmada inşa edilen Laguerre sanki-spektral yöntemi $\ell \neq 0$ durumu için de yüksek doğrulukta sonuçlar vermektedir.

Çizelge 4.6. $D_e = 15, r_e = 0.8, a = 0.10, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,3}$ özdeğerleri.

n	N	c_{opt}	$E_{n,3}$	Oyewumi ve Ark. (2013)	Oyewumi ve Ark. (2014)
0	110	10	7.586411730386	7.586418806	7.586418181
1			9.796641911629	9.796658033	9.796657408
2			11.244784180191	11.24481492	11.2448143
3			12.240734447925		
4			12.951072423901		
5			13.471820439794		
6			13.861488502978		
7			14.157377679290		
8			14.384177790151		

Çizelge 4.7., Deng-Fan potansiyel fonksiyonunun $D_e = 15, r_e = 0.4, a = 0.15, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için $E_{n,1}$ özdeğerlerini içermektedir. Burada $c_{opt} = 10$

alındığında, çizelgedeki ilk altı özdeğer $N = 100$ matris boyutunda, son üç özdeğer ise $N = 200$ matris boyutunda 10 – 12 basamak doğrulukta elde edilmiştir.

Çizelge 4.7. $D_e = 15, r_e = 0.4, a = 0.15, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,1}$ özdeğerleri.

n	N	c_{opt}	$E_{n,1}$	Oyewumi ve Ark. (2013)	Oyewumi ve Ark. (2014)
0	100	10	8.045097775166	8.04509987	8.045099635
1			11.324240817562	11.32424872	11.32424848
2			12.888327591942	12.88834813	12.8883479
3			13.742511899574		
4			14.248618687569		
5			14.562755107118		
6	200	10	14.761229497880		
7			14.884923702054		
8			14.957327506524		

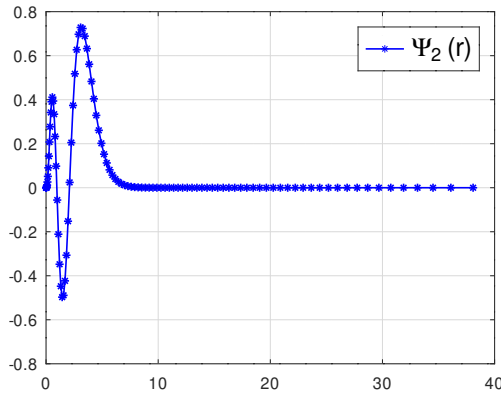
Benzer şekilde, $D_e = 15, r_e = 0.8, a = 0.15, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,2}$ özdeğerleri Çizelge 4.8.'de sunulmuştur. Yukarıdaki çizelgelerden de anlaşılacağı üzere, yöntem Deng-Fan potansiyel parametrelerinin farklı değerleri için yüksek doğrulukta sonuçlar üretmektedir. Öte yandan, $D_e = 15, a = 0.15, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için, Şekil 4.5. ve 4.6. sırasıyla $r_e = 0.8$ ve $r_e = 0.4$ değerleri için Deng-Fan potansiyelinin bazı normalize edilmiş özfonksiyonlarını içermektedir.

Çizelge 4.8. $D_e = 15, r_e = 0.8, a = 0.15, \hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{n,2}$ özdeğerleri.

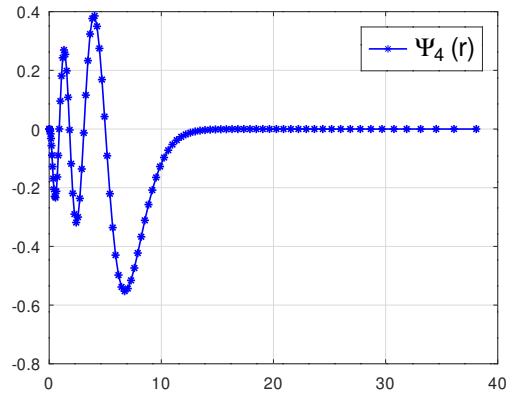
n	N	c_{opt}	$E_{n,2}$	Oyewumi ve Ark. (2013)	Oyewumi ve Ark. (2014)
0	110	10	5.950665807075	5.950678133	5.95067743
1			8.917778045988	8.917807599	8.917806896
2			10.798422095826		
3			12.055358165325		
4			12.927789856306		
5			13.549469885844		
6			13.999935502206		
7			14.328887929071		

Şimdi Deng-Fan-Eckart potansiyelinin CO, ScF, LiH ve ScH iki atomlu melokülleri için sayısal özdeğerlerini Laguerre sanki-spektral yöntemi ile elde etmeye çalışalım. CO molekülünün spektroskopik parametreleri $D_e = 11.2256 \text{ eV}, r_e =$

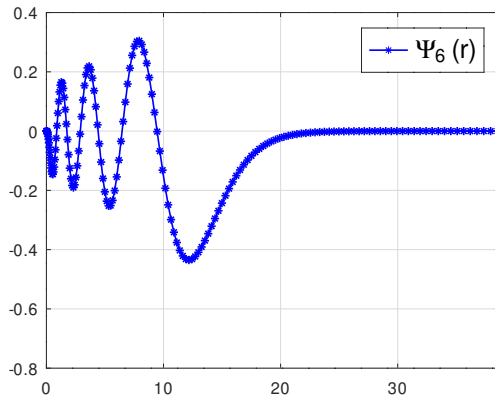
1.1283 Å, $a = 2.2994 \text{ Å}^{-1}$, $\hbar = 1973.29 \text{ eVÅ}$ ve $\mu = 6.8606719 \times 9.31502 \times 10^8 \text{ eV}$ şeklindedir (Edet ve Ark., 2020). Eckart potansiyel parametreleri $V_1 = .5$ ve $V_2 = 5$ olarak alındığında $\ell = 1$ için yaklaşık özdeğerler Çizelge 4.9.'da verilmiştir. Program farklı iki matris boyutunda çalıştırılarak kararlı yani yakınsayan basamaklar gözlemlenmiştir. Dikkat edilirse son basamak hariç (yuvarlamadan dolayı) bütün basamaklar aynıdır. Bu ise yöntemin yakınsadığını fakat rapor edilen doğruluğun Deng-Fan potansiyeline göre daha büyük matris boyutlarında elde edildiğini göstermektedir. Öte yandan, yine Deng-Fan potansiyeli ile karşılaştırıldığında ölçeklendirme parametresinin optimum değerinin de oldukça yükseldiği görülmektedir.



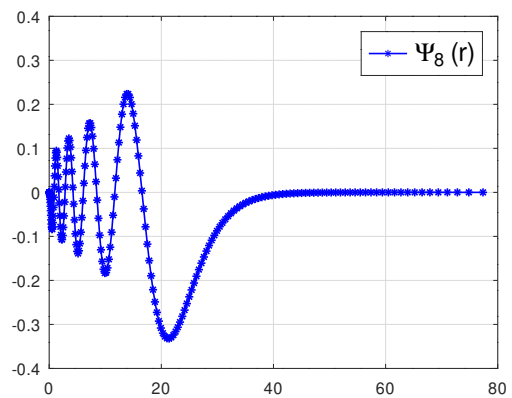
(a) $E_{2,1} = 12.888327591942$ özdeğerine karşılık gelen $\Psi_{2,1}(r)$ özfonksiyonunun grafiği



(b) $E_{4,1} = 14.248618687569$ özdeğerine karşılık gelen $\Psi_{4,1}(r)$ özfonksiyon grafiği

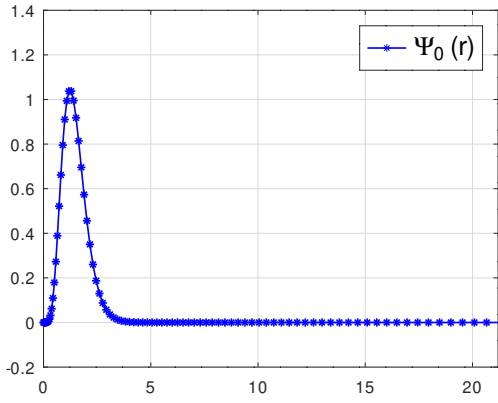


(c) $E_{6,1} = 14.761229497880$ özdeğerine karşılık gelen $\Psi_{6,1}(r)$ özfonksiyon grafiği

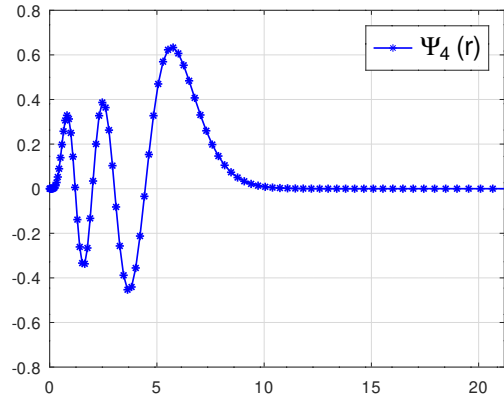


(d) $E_{8,1} = 14.957327506524$ özdeğerine karşılık gelen $\Psi_{8,1}(r)$ özfonksiyon grafiği

Şekil 4.5. $D_e = 15$, $r_e = 0.4$, $a = 0.15$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{2,1}, E_{4,1}, E_{6,1}$ ve $E_{8,1}$ özdeğerlerine karşılık gelen $\Psi_{2,1}(r), \Psi_{4,1}(r), \Psi_{6,1}(r)$ ve $\Psi_{8,1}(r)$ özfonksiyonlarıdır. Matris boyutu $N = 100$ ve $N = 200$, optimizasyon parametresi $c_{opt} = 10$ olarak alınmıştır.



(a) $E_{0,2} = 5.950665807075$ özdeğerine karşılık gelen $\Psi_{0,2}(r)$ özfonksiyonunun grafiği



(b) $E_{4,2} = 12.927789856306$ özdeğerine karşılık gelen $\Psi_{4,2}(r)$ özfonksiyonunun grafiği

Şekil 4.6. $D_e = 15$, $r_e = 0.8$, $a = 0.15$, $\hbar = \mu = 1$ parametre değerleri için Deng-Fan potansiyelinin $E_{0,2}$ ve $E_{4,2}$ özdeğerlerine karşılık gelen $\Psi_{0,2}(r)$ ve $\Psi_{4,2}(r)$ özfonksiyonlarıdır. Matris boyutu $N = 110$ ve optimizasyon parametresi $c_{opt} = 10$ olarak alınmıştır.

Çizelge 4.10.'da ScF molekülünün $\ell = 1$ durumunda Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında bazı yaklaşık özdeğerleri verilmiştir. Bu molekülün spektroskopik parametreleri ise $D_e = 5.85 \text{ eV}$, $r_e = 1.794 \text{ Å}$, $a = 1.46102 \text{ Å}^{-1}$, $\hbar = 1973.29 \text{ eVÅ}$ ve $\mu = 13.358942 \times 9.31502 \times 10^8 \text{ eV}$ şeklindedir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .5$ ve $V_2 = 5$ olarak alınmıştır. Çizelgeden anlaşılacağı üzere, bu tezde kullanılan Laguerre sanki-spektral yöntemi $N = 400$ matris boyutunda özdeğerleri 13 – 14 basamak doğrulukta elde edebilmektedir. Bu durumda ölçeklendirme parametresinin optimum değerinin $c_{opt} = 200$ civarında olduğu gözlemlenmiştir.

Çizelge 4.9. CO molekülünün Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerleri. Bu molekülün spektroskopik parametreleri $D_e = 11.2256 \text{ eV}$, $r_e = 1.1283 \text{ Å}$, $a = 2.2994 \text{ Å}^{-1}$, $\hbar = 1973.29 \text{ eVÅ}$ ve $\mu = 6.8606719 \times 9.31502 \times 10^8 \text{ eV}$ 'dir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .5$ ve $V_2 = 5$ olarak seçilmiştir.

n	N	c_{opt}	$E_{n,1}$	N	c_{opt}	$E_{n,1}$
0	300	200	0.534295347435141	305	200	0.534295347435140
1			0.815372295636478			0.815372295636507
2			1.092420575006037			1.092420575005931
3			1.365452585775235			1.365452585775129
4			1.634480668592699			1.634480668592796
5			1.899517104866792			1.899517104866793

Çizelge 4.10. ScF molekülünün Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerleri. Bu molekülün spektroskopik parametreleri $D_e = 5.85 \text{ eV}$, $r_e = 1.794 \text{ \AA}$, $a = 1.46102 \text{ \AA}^{-1}$, $\hbar = 1973.29 \text{ eV \AA}$ ve $\mu = 13.358942 \times 9.31502 \times 10^8 \text{ eV}$ 'dir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .5$ ve $V_2 = 5$ olarak seçilmiştir.

n	N	c_{opt}	$E_{n,1}$	N	c_{opt}	$E_{n,1}$
0	400	200	0.422370843022272	401	200	0.422370843022200
1			0.513521064331251			0.513521064331238
2			0.603842601762399			0.603842601762407
3			0.693337015958232			0.693337015958148
4			0.782005862962365			0.782005862962350
5			0.869850694236304			0.869850694236256
6			0.956873056675016			0.956873056674968
7			1.043074492623672			1.043074492623601
8			1.128456539893031			1.128456539892996
9			1.213020731775986			1.213020731775896
10			1.296768597063022			1.296768597063094

Çizelge 4.11. LiH molekülünün $\ell = 2$ durumunda Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında ilk bir kaç özdeğerini içermektedir. Bu molekülün spektroskopik parametreleri ise $D_e = 2.5152672118 \text{ eV}$, $r_e = 1.5956 \text{ \AA}$, $a = 1.1280 \text{ \AA}^{-1}$, $\hbar = 1973.29 \text{ eV \AA}$ ve $\mu = 0.8801221 \times 9.31502 \times 10^8 \text{ eV}$ şeklindedir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .1$ ve $V_2 = 1$ olarak seçilmiştir. Kullanılan nümerik yöntem LiH molekülü için de yüksek doğrulukta sonuçlar vermektedir. Bu örnekte ilk altı özdeğeri 13–14 basamak doğrulukta elde etmek için gerekli matris boyutu $N = 200$ ve optimum ölçeklendirme parametresi $c_{opt} = 100$ olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.11. LiH molekülünün Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerleri. Bu molekülün spektroskopik parametreleri $D_e = 2.5152672118 \text{ eV}$, $r_e = 1.5956 \text{ \AA}$, $a = 1.1280 \text{ \AA}^{-1}$, $\hbar = 1973.29 \text{ eV \AA}$ ve $\mu = 0.8801221 \times 9.31502 \times 10^8 \text{ eV}$ 'dir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .1$ ve $V_2 = 1$ olarak seçilmiştir.

n	N	c_{opt}	$E_{n,2}$	N	c_{opt}	$E_{n,2}$
0	200	100	0.314318230664095	201	100	0.314318230664130
1			0.502400241314631			0.502400241314629
2			0.680732184394523			0.680732184394590
3			0.849532502144972			0.849532502144989
4			1.009012434356141			1.009012434356103
5			1.159376299885305			1.159376299885313

Çizelge 4.12. ScH molekülünün Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerleri. Bu molekülün spektroskopik parametreleri $D_e = 2.25 \text{ eV}$, $r_e = 1.776 \text{ Å}$, $a = 1.41113 \text{ Å}^{-1}$, $\hbar = 1973.29 \text{ eVÅ}$ ve $\mu = 0.986040 \times 9.31502 \times 10^8 \text{ eV}$ 'dir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .5$ ve $V_2 = 5$ olarak seçilmiştir.

n	N	c_{opt}	$E_{n,5}$	N	c_{opt}	$E_{n,5}$
0	301	150	0.526174919629951	305	150	0.526174919629967
1			0.704945907449407			0.704945907449383
2			0.873291957282609			0.873291957282702
3			1.031337204589523			1.031337204589404
4			1.179203351298322			1.179203351298246
5			1.317009696421769			1.317009696421700
6			1.444873158750661			1.444873158750688
7			1.562908289015894			1.562908289015767
8			1.671227267520093			1.671227267520093

Son olarak, Çizelge 4.12. ScH molekülünün $\ell = 5$ durumunda Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerlerini göstermektedir. Bu molekülün spektroskopik parametreleri ise $D_e = 2.25 \text{ eV}$, $r_e = 1.776 \text{ Å}$, $a = 1.41113 \text{ Å}^{-1}$, $\hbar = 1973.29 \text{ eVÅ}$ ve $\mu = 0.986040 \times 9.31502 \times 10^8 \text{ eV}$ şeklindedir (Edet ve Ark., 2020). Potansiyel şiddetini temsil eden parametreler $V_1 = .5$ ve $V_2 = 5$ olarak seçilmiştir. Tezde kullanılan nümerik şema, bu molekül için de benzer yakınsama özelliklerine sahiptir. ScH molekülünün $\ell = 5$ durumunda ilk dokuz özdeğeri 13 – 14 basamak doğrulukta, $c_{opt} = 150$ seçildiğinde $N = 300$ matris boyutunda elde edilmiştir. Ölçeklendirme yapılmadığında ($c = 1$), $N = 300$ matris boyutunda yakınsama gözlemlenmemiştir. Bu ise ölçeklendirme parametresinin önemini bir kez daha ortaya koymaktadır.

5. TARTIŞMA

Bir önceki bölümde araştırma bulguları çizelgeler ve şekiller halinde rapor edilip yorumlandığı için bu bölümde bulguların genel bir tartışması yapılacaktır.

Bulgular bölümünde, Schrödinger denkleminin Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında yaklaşık özdeğerleri ve bunlara karşılık gelen özfonksiyonları verilmiştir. Özfonksiyonlar, karesi integrallenebilir fonksiyonların Hilbert uzayında $L_2(0, \infty)$ normalize edilmiştir. Yaklaşık özdeğerler ve karşılık gelen özfonksiyonlar, hem merkezkaç teriminin $\ell(\ell + 1)/r^2$ yokluğunda ($\ell = 0$), hem de varlığında ($\ell \neq 0$) hesaplanmıştır. Her iki durumda da yüksek doğrulukta sonuçlar elde edilmiştir.

Nümerik metot olarak, Laguerre sanki-spektral yöntemi kullanılmıştır. Fakat, yöntemi denkleme doğrudan uygulama yoluna gidilmemiş, önce denklem bağımlı ve bağımsız değişkenleri üzerinde yapılan dönüşümlerle daha kolay ele alınabilir hale getirilmiş, ardından yöntem dönüştürülmüş denkleme uygulanmıştır. Elde edilen sonuçlardan geri dönüşümlerle orijinal denklemin yaklaşık özdeğerleri ve özfonksiyonlarına ulaşılmıştır. Dönüşümlerle, denklemdaki $1/r^2$ ile orantılı merkezkaç terimi denklemin içine yedirilmiş ve orijinal denklem nümerik açıdan daha kolay işlenebilir bir hale getirilmiştir.

Sonsuz ve yarı sonsuz aralıklarda tanımlı problemlerde, ölçeklendirme dönüşümü ($r = c\xi$) aralığı kendi üzerine göndermektedir. Bu dönüşümün teorik açıdan bir getirisi olmasa da nümerik açıdan faydalı olabilir. Laguerre sanki-spektral yönteminde ızgara noktaları olarak derecesi $N + 1$ olan Laguerre polinomunun kökleri kullanılmaktadır. Ölçeklendirme parametresi ile bu noktalar, denklemin özfonksiyonlarının sıfırdan uzak olduğu aralığa gönderilebilir. Böylece, kesme değeri N artırılmadan, özfonksiyonları nümerik olarak çözümlenmek için yeterince nokta elde edilmiş olur. İşte bu değere, ölçeklendirme parametresinin optimum değeri denir. Ölçeklendirme parametresinin optimum değeri seçildiğinde, özçiftler istenilen toleransta mümkün olan en küçük N matris boyutunda elde edilir. Optimizasyon parametresinin yokluğunda ($c = 1$) istenilen doğruluğu elde etmek için gerekli matris boyutu çarpıcı biçimde artmaktadır (bkz. Çizelge 4.2.). Optimizasyon parametresinin özfonksiyonlar üzerindeki etkisi ise Şekil 4.1.'den açıkça görülmektedir. Ölçeklendirme yapılmadığı zaman, ızgara

noktaları özfonksiyonun sıfıra çok yakın olduğu aralıkta zayi edilmektedir (bkz.Şekil 4.1.a), ölçeklendirme parametresi çok büyük olduğunda ise özfonksiyon tam olarak elde edilememektedir (bkz. Şekil 4.1.c).

Çizelgelerde hem Deng-Fan hem de Deng-Fan-Eckart potansiyeli için özdeğerler verilmiş ve mümkün olan durumlarda literatür sonuçları ile karşılaştırmalar yapılmıştır. Mümkün olmayan durumlarda ise ardışık iki matris boyutunda elde edilen sonuçlar karşılaştırılarak yakınsayan basamaklar rapor edilmiştir. Tezdeki sonuçların literatür sonuçları ile uyumlu hatta daha yüksek doğrulukta olduğu görülmüştür.

Sonuç olarak, bu tezde denkleme uygulanan bağımlı ve bağımsız değişkenler üzerindeki dönüşümler ve ardından dönüştürülmüş denkleme uygulanan Laguerre sanki-spektral yönteminin problemin özçiftlerini elde etmede oldukça verimli olduğu görülmüştür.

6. SONUÇLAR

Bu tezde Schrödinger denkleminin Deng-Fan-Eckart potansiyeli altında özdeğerleri ve özfonksiyonları Laguerre sanki-spektral yöntemi ile hesaplanmıştır. Bunun için denklem önce bağımsız ve bağımlı değişkenler üzerinde yapılan dönüşümler ile daha kolay ele alınabilir bir hale getirilmiştir. Ardından Laguerre polinomları üzerine inşa edilen sanki-spektral yöntem kullanılarak özdeğer ve özfonksiyonlar için sayısal sonuçlar elde edilmiştir. Sonuçlar çizelgeler ve şekiller halinde sunulmuştur. Literatür sonuçları ile yapılan karşılaştırmalar yöntemin oldukça verimli ve kararlı olduğunu ortaya koymaktadır.

Bağımsız değişken üzerinde yapılan ölçeklendirme dönüşümünün sonsuz aralıkta tanımlı ve çözümü üstel olarak azalan problemler için kritik öneme sahip olduğu görülmüştür. Ölçeklendirme parametresinin optimum değeri girildiğinde yöntemin çok daha hızlı yakınsadığı dolayısıyla yüksek doğrulukta sonuçların çok daha küçük matris boyutlarında elde edildiği gözlenmiştir. Bağımlı değişken üzerinde yapılan dönüşümün ise denklemin ayrık sisteminin, orijinal denklemin ayrık sistemine göre daha iyi koşullandırılmış olmasını sağlamıştır. Bu ise yöntemin daha büyük matris boyutlarında da sorunsuz çalışmasını sağlamış, dolayısıyla büyük indisli özdeğerler rahatlıkla hesaplanabilmiştir.

7. ÖNERİLER

Son olarak, yöntem yarı sonsuz aralıkta Morse, Gaussian, Manning-Rosen ve Rosen-Morse gibi potansiyellere de rahatlıkla uygulanabilir. Bu ise ileriye dönük bir çalışma olarak düşünülebilir.

KAYNAKLAR

- Trefethen, L.N., 2008. Is Gauss quadrature better than Clenshaw-Curtis?. *SIAM Rev.*, 50(1):67-87.
- Taşeli, H. and Alici, H., 2015. The Laguerre pseudospectral method for the radial Schrödinger equation. *Applied Numerical Mathematics*, 87, 87-99.
- Bell, W., 2004. *Special Functions for Scientists and Engineers* Lecturer in Theoretical Physics, Department of Natural Philosophy, University of Aberdeen, pp. 168-185, Aberdeen, London.
- Oyewumi, K. J., Falaye, B. J., Onate, C. A., Oluwadare, O. J., and Yahya, W. A. 2014. Thermodynamic properties and the approximate solutions of the Schrödinger equation with the shifted Deng–Fan potential model. *Molecular Physics*, 112(1), 127-141.
- Dong, S. H., and Gu, X. Y. 2008. Arbitrary l state solutions of the Schrödinger equation with the Deng-Fan molecular potential. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 96, No. 1, p. 012109). IOP Publishing.
- Falaye, B. J., Oyewumi, K. J., Ikhdair, S. M., and Hamzavi, M. , 2014. Eigensolution techniques, their applications and Fisher's information entropy of the Tietz–Wei diatomic molecular model. *Physica Scripta*, 89(11), 115204.
- Oyewumi, K. J., Oluwadare, O. J., Sen, K. D., and Babalola, O. A. , 2013. Bound state solutions of the Deng–Fan molecular potential with the Pekeris-type approximation using the Nikiforov–Uvarov (N–U) method. *Journal of Mathematical Chemistry*, 51(3), 976-991.
- Hamzavi, M., Ikhdair, S. M., and Thylwe, K. E. , 2013. Equivalence of the empirical shifted Deng–Fan oscillator potential for diatomic molecules. *Journal of Mathematical Chemistry*, 51(1), 227-238.
- Oluwadare, O. J., and Oyewumi, K. J. , 2018. Energy spectra and the expectation values of diatomic molecules confined by the shifted Deng-Fan potential. *he European Physical Journal Plus*, 133(10), 422.
- Farizky, M. N., Suparmi, A., Cari, C., and Yunianto, M. , 2016. Solution of three dimensional Schrodinger equation for Eckart and Manning-Rosen non-central potential using asymptotic iteration method. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 776, No. 1, p. 012085). IOP Publishing.
- Suparmi, A., Cari, C., and Handhika, J. , 2013. Approximate solution of Schrodinger equation for Eckart potential combined with Trigonometric Poschl-teller non-central potential using Romanovski polynomials. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 423, No. 1, p. 012039). IOP Publishing.
- Diaf, A., and Hachama, M. , 2013. Feynman integral treatment of the Rosen–Morse potential with a centrifugal term approximation. *Canadian Journal of Physics*, 91(12), 1081-1085.
- Onate, C. A., Onyeaju, M. C., Ikot, A. N., Idiodi, J. O. A., and Ojonubah, J. O , 2017. Eigen solutions, Shannon entropy and fisher information under the Eckart Manning Rosen potential model. *Journal of the korean physical society*, 70(4), 339-347.
- Hatami, N., Naji, J., and Pananeh, M. , 2019. Analytical solutions of the Klein-Gordon

- equation for the deformed generalized Deng-Fan potential plus deformed Eckart potential. *The European Physical Journal Plus*, 134(3), 90.
- Taşkın, F., and Koçak, G. , 2010. Approximate solutions of Schrödinger equation for Eckart potential with centrifugal term. *Chinese Physics B*, 19(9), 090314.
- Artin, E. , 1964. *The gamma function*. Holt. Rinehart, New York.
- Petojević, A. , 2008. A note about the Pochhammer symbol. *Mathematica Moravica*, (12-1), 37-42.
- Carbó, Ramon., Besalú, Emili. , 1994. Definition, mathematical examples and quantum chemical applications of nested summation symbols and logical kronecker deltas. *Computers and Chemistry*, 18(2), 117-126.
- Rasala, R. (1981). The Rodrigues formula and polynomial differential operators. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 84(2), 443-482.
- Taşeli, H., and Alici, H. (2007). The Laguerre pseudospectral method for the reflection symmetric Hamiltonians on the real line. *Journal of mathematical chemistry*, 41, 407-416.
- Aytar, H. (2017). Numerical solution of the spheroidal wave equation by using pseudospectral methods. (Doctoral dissertation).
- Johnson, R. M. (1966). The minimal transformation to orthonormality. *Psychometrika*, 31(1), 61-66.
- Edet, C. O., Okorie, U. S., Osonbonye, G., Ikot, A. N., Rampho, G. J., and Sever, R. , 2020. Thermal properties of Deng–Fan–Eckart potential model using Poisson summation approach. *Journal of Mathematical Chemistry*, 58(5), 989-1013.
- Golub, G. H., and Welsch, J. H. (1969). Calculation of Gauss quadrature rules. *Mathematics of computation*, 23(106), 221-230.
- Lord, N. (1999). *Matrix computations*, by GH Golub and CF Van Loan. (Johns Hopkins University Press).
- Rainville, E. D. (1960), *Special Functions*, Macmillan Company, New York.
- Robinson, D. J. (2006). *Course In Linear Algebra With Applications A*. World Scientific.