EGE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

(DOKTORA TEZİ)

NIKIFOROV-UVAROV YÖNTEMİYLE MATEMATİKSEL FİZİĞİN BAZI DENKLEMLERİNİN ÇÖZÜMLERİNİN İNCELENMESİ

H. Hale KARAYER

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Doğan DEMİRHAN

Fizik Anabilim Dalı

Sunuş Tarihi : 17.08.2016

Bornova - İZMİR

2016

H. Hale KARAYER tarafından *doktora* tezi olarak sunulan "*Nikiforov-Uvarov Yöntemiyle Matematiksel Fiziğin Bazı Denklemlerinin Çözümlerinin İncelenmesi*" başlıklı bu çalışma Ege Üniversitesi Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği ile Ege Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Eğitim ve Öğretim Yönergesi'nin ilgili hükümleri uyarınca tarafımızdan değerlendirilerek savunmaya değer bulunmuş ve *17 Ağustos 2016* tarihinde yapılan tez savunma sınavında aday oybirliği/oyçokluğu ile başarılı bulunmuştur.

Jüri Üyeleri			**İmza**
Jüri Başkanı	:	Prof.Dr. İsmail SÖKMEN	
Raportör Üye	:	Prof.Dr. Doğan DEMİRHAN	
Üye	:	Prof.Dr. Fevzi BÜYÜKKILIÇ	
Üye	:	Prof. Dr. Uğur TIRNAKLI	
Üye	:	Doç. Dr. Gül GÜLPINAR	

EGE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ETİK KURALLARA UYGUNLUK BEYANI

EÜ Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin ilgili hükümleri uyarınca Doktora Tezi olarak sunduğum "Nikiforov-Uvarov Yöntemiyle Matematiksel Fiziğin Bazı Denklemlerinin Çözümlerinin İncelenmesi" başlıklı bu tezin kendi çalışmam olduğunu, sunduğum tüm sonuç, doküman, bilgi ve belgeleri bizzat ve bu tez çalışması kapsamında elde ettiğimi, bu tez çalışmasıyla elde edilmeyen bütün bilgi ve yorumlara atıf yaptığımı ve bunları kaynaklar listesinde usulüne uygun olarak verdiğimi, tez çalışması ve yazımı sırasında patent ve telif haklarını ihlal edici bir davranışımın olmadığını, bu tezin herhangi bir bölümünü bu üniversite veya diğer bir üniversitede başka bir tez çalışması içinde sunmadığımı, bu tezin planlanmasından yazımına kadar bütün safhalarda bilimsel etik kurallarına uygun olarak davrandığımı ve aksinin ortaya çıkması durumunda her türlü yasal sonucu kabul edeceğimi beyan ederim.

21.07.2016

H. Hale KARAYER

ÖZET

NIKIFOROV-UVAROV YÖNTEMİYLE MATEMATİKSEL FİZİĞİN BAZI DENKLEMLERİNİN ÇÖZÜMLERİNİN İNCELENMESİ

KARAYER, H. Hale

Doktora Tezi, Fizik Anabilim Dalı
Tez Danışmanı : Prof. Dr. Doğan DEMİRHAN
Ağustos 2016, 71 sayfa

Bu tez çalışmasında ikinci dereceden lineer diferansiyel denklemleri çözmek için kullanılan analitik yöntemlerden biri olan Nikiforov-Uvarov (NU) yöntemi çalışıldı. Bu yöntem ile fizikçilerin birçok alanda karşılaştığı Heun denkleminin özel bir çözümü elde edildi. NU yönteminin temeli, çözülecek diferansiyel denklemin genelleştirilmiş bir denkleme indirgenebilmesine dayanır ve en genel ifade ile bu yöntemle en fazla üç tane tekil noktaya sahip olan diferansiyel denklemler çözülebilir. Bu çözülebilir denklemlerin kapsamını genişletmek amacıyla NU yönteminin genişletilmiş bir formu türetildi. Elde edilen bu yöntem ile Heun denklemi ve üç önemli konfluent formunun özdeğer ve özfonksiyon çözümleri analitik olarak elde edildi. Fiziksel bir sistemin özdurumlarını veren Schrödinger denklemi belirli potansiyel fonksiyonları için NU yöntemi ile analitik olarak çözülebilmektedir. Tezin kalan kısmında NU yönteminin tam sayı matematiğindeki başarısının kesirsel matematikte de geçerli olup olmadığı araştırıldı. Bunun için "konformal kesirsel türev" tanımı kullanılarak NU yönteminin kesirsel formu türetildi. Elde edilen yöntemin doğruluğunu göstermek için sonuçları tam sayı matematiğindeki bilinen sonuçlara indirgenebilen üç farklı fiziksel problem incelendi.

Anahtar Kelimeler : Nikiforov-Uvarov Yöntemi, Heun Denklemi, Genişletilmiş Nikiforov-Uvarov Yöntemi, Kesirsel Nikiforov-Uvarov Yöntemi.

ABSTRACT

INVESTIGATION OF SOLUTIONS OF SOME EQUATIONS IN MATHEMATICAL PHYSICS USING NIKIFIROV-UVAROV METHOD

KARAYER, H. Hale

PhD in Physics
Supervisor: Prof. Dr. Doğan DEMİRHAN
August 2016, 71 pages

In this thesis, Nikiforov-Uvarov (NU) method which is used to solve second order linear differential equations, is studied. A particular solution of Heun equation which is encountered by physicists in many fields, is obtained by the NU method. The NU method is based on reducing the differential equation to a generalized hypergoemetric-type differential equation. In this context, the NU method is succeed only differential equations which have at most three singular points. In order to extend the range of equations which are solvable with the NU method, the boundary conditions of the method are changed and its extended form is obtained. It is presented that eigenvalue and eigenfunction solutions of Heun equation and its three confluent forms are attained by the extended NU method. The eigenstates of a physical system are determined from the solutions of the Schrödinger equation. The NU method can be used in order to solve Schrödinger equation for some given potential functions. In the remaining part of this thesis, it is searched whether the validity of the achievement of NU method in the integer calculus is conserved in the non-integer calculus. For this purpose, fractional NU method is derived by means of "conformable fractional derivative" definition and three different physical applications are handled in order to present the accuracy of this fractional method.

Keywords: Nikiforov-Uvarov Method, Heun Equation, Extended Nikiforov-Uvarov Method, Fractional Nikiforov-Uvarov Method.

TEŞEKKÜR

Doktora çalışmam süresince değerli bilgi ve görüşleriyle her zaman yanımda olan danışman hocam Prof. Dr. Doğan DEMİRHAN'a, tez izleme jürisinde bulunan değerli öğretim üyeleri Prof. Dr. Fevzi BÜYÜKKILIÇ ve Prof. Dr. İsmail SÖKMEN'e teşekkür ederim.

Dostluklarını esirgemeyen Fizik Bölümü arkadaşlarıma,

Yaşamım boyunca desteklerini arkamda hissettiğim, maddi manevi her türlü özveride bulunan annem Güler YILMAZ, babam Bilal YILMAZ ve kardeşim Aslı YILMAZ'a,

Ayrıca her konuda sabırla yardımcı olan sevgili eşim Engin KARAYER'e ve küçücük dünyaları ile huzur ve mutluluk veren oğullarım Batu KARAYER ve Utku KARAYER'e teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

İÇİNDEKİLER (Devam)

Sayfa

ÇİZELGELER DİZİNİ

Sayfa

KISALTMALAR DİZİNİ

Kisaltmalar

BHD	Bikonfluent Heun Denklemi
KHD	Konfluent Heun Denklemi
NU	Nikiforov-Uvarov Yöntemi
THD	Trikonfluent Heun Denklemi

1. GİRİŞ

Doğayı ve evreni anlamak için yapılan sayısız gözlem ve deneyler sonucu ortaya atılan teoriler, belirli fizik yasaları ile desteklenmektedir. Bu noktada fiziksel olayların matematiksel modellemesi olan diferansiyel denklemlerin çözümleri önem kazanmaktadır. Bu şekilde modellenen fiziksel bir sistem için gerekli olan gerçek bilgilere ulaşmak için, denklemlerin analitik olarak çözülmesi gerekmektedir. Özel olarak kuantum mekaniğinde küresel simetrik bir potansiyelde hareket eden bir parçacığa ait enerji özdeğer ve özfonksiyon spektrumlarını veren radyal Schrödinger denklemi ikinci dereceden bir diferansiyel denklemdir ve bu denklemi analitik olarak çözebilmek için başvurulan geleneksel yöntem kuvvet serisi yöntemidir (Flügge, 1971). 1988 yılında A. F. Nikiforov ve V. B. Uvarov tarafından ikinci dereceden lineer diferansiyel denklemleri çözmek için, Nikiforov-Uvarov (NU) yöntemi olarak adlandırılan analitik bir çözüm yöntemi geliştirilmiştir (Nikiforov and Uvarov, 1988). Schrödinger denklemini çözmek için de başvurulan bu yöntemin temeli, ikinci dereceden olan hipergeometrik lineer bir diferansiyel denklemi özel ortogonal fonksiyonlar ile çözmeye dayanır. Yöntemin diğer analitik çözüm yöntemlerine göre üstünlüğü, yöntemde cebirsel işlemlerde büyük kolaylık sağlayan bu özel fonksiyonların kullanılmasıdır.

Bir diferansiyel denklemin NU yöntemi ile çözülebilmesi için, çözümü aranan denklemin uygun koordinat dönüşümleri ile aşağıdaki hipergeometrik denkleme indirgenebiliyor olması gerekmektedir.

$$\psi''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}\psi'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}\psi(z) = 0$$

NU yönteminin temel denklemi olan bu denklemde, $\widetilde{\tau}(z)$ en fazla birinci dereceden, $\sigma(z)$ ve $\widetilde{\sigma}(z)$ en fazla ikinci dereceden olabilen polinomlardır ve bu polinomların dereceleri yöntemin sınır koşullarını oluşturmaktadır. Buna göre NU yöntemi en genel ifade ile en fazla 3 tane tekil noktaya sahip olan diferansiyel denklemleri çözmek için başvurulan bir yöntemdir. Bu durumda, söz konusu yöntem ile Schrödinger denkleminin analitik çözümleri sadece belirli potansiyel fonksiyonları için elde edilebilmektedir ve bu potansiyeller için NU yönteminin gerçek özdeğer ve özfonksiyon çözümlerini verdiği literatürdeki çalışmalar ile kanıtlanmaktadır. Parabolik potansiyeller (Barton, 1986), Eckart potansiyeli (Flügge, 1971; Landau and Lifshitz, 1958), Rosen-Morse potansiyeli (Morse and Feshbach, 1953), Ginocchio potansiyeli (Sahu et al., 2002) , Scarf potansiyelleri (Khare and Sukhatme, 1988), Morse potansiyeli (Ahmed, 1991), üstel (eksponansiyel) potansiyeller (Jia et al., 2002; Levai and Zinojil, 2002; Yeşiltaş et al., 2003; Zinojil, 1999), q deforme potansiyeller (Egrifes et al., 1999a,b).

Bu çalışmada, özel olarak ele alınan bir diğer ikinci dereceden lineer diferansiyel denklem de fizikçilerin son zamanlarda "ilgi çekici bir denklem" olarak tanımladığı Heun denklemidir. Bu denklem; Gauss hipergeometrik, konfluent hipergeometrik, Lame, Mathieu, Ince, Bessel, Legendre, Laguerre diferansiyel denklemlerinin tümünü içinde barındıran genelleştirilmiş bir denklemdir ve matematiksel fizikte karadeliklerden, kuantum ringlere kadar geniş bir alanda çalışılmaktadır (Gurappa and Panigrahi, 2004; Hortacsu, 2011).

Bu tezde NU yöntemi ile Heun denkleminin özel bir çözümünün elde edilmesi, NU yönteminin genişletilmiş formunun ve kesirsel formunun türetilmesi amaçlanmıştır ve anlatım akışı açısından aşağıdaki gibi planlanmıştır;

Bölüm-2'de NU yöntemi ve Heun denklemi hakkında literatür bilgisi paylaşılarak, Heun denkleminin özel bir çözümünün NU yöntemi ile analitik olarak elde edilebileceği gösterildi. Bunun için Heun denklemi, tekil noktalarından biri sıfır alınarak modifiye edildi. Modifiye Heun denklemi olarak adlandırılan bu denklemin, küresel simetrik potansiyeller için yazılmış olan radyal Schrödinger denklemi ile ilişkisi araştırıldı.

Bölüm-3'de NU yönteminin en fazla dört tane tekil noktaya sahip olan ikinci dereceden lineer diferansiyel denklemleri çözmek için genişletilebileceği üzerine çalışıldı. Bunun için NU yönteminin temel denklemindeki katsayı polinomlarının dereceleri değiştirilerek, çözümü aranan denklem için özdeğer ve özfonksiyon çözümlerinin varlığı incelendi. Önerilen genişletilmiş NU yöntemi ile Heun denklemi, konfluent Heun denklemi, bikonfluent Heun denklemi ve trikonfluent Heun denkleminin çözümlerine analitik olarak ulaşılabileceği gösterildi. Bunlara ek olarak Heun denklemi ve konfluent formları ile doğrudan karşılaşılan fizik problemleri için genişletilmiş NU yönteminin ne ölçüde yarar sağlayacağı araştırıldı.

Bölüm-4'de kesirsel matematik teorisi ile ilgili literatür bilgisi verilerek tam sayı mertebeli türevler için yazılan ikinci dereceden diferansiyel denklemleri çözmek için başvurulan NU yönteminin kesirsel mertebeli diferansiyel denklemler için de kullanılabileceği üzerine çalışıldı. 1695 yılında M. L'Hospital 'in, G. W. Leibniz'e d^n/dx^n türev tanımındaki n doğal sayısı 1/2 gibi kesirsel bir sayıya eşit olabilir mi sorusuna dayanan bu teorinin gelişimi boyunca kesirsel matematik, özel olarak da kesirsel diferansiyel denklemler bir çok alana uygulanmıştır (Leibniz, 1853). Literatürde yaygın bir şekilde çalışılmakta olan bu teori için daha sonra "konformal kesirsel türev" olarak adlandırılan yeni bir kesirsel türev tanımı öne sürülmüştür (Khalil et al., 2014). Bu tanımdaki kesirsel türev operatörü, mevcut kesirsel türev operatörlerinden farklı olarak çarpım kuralı, zincir kuralı, bölüm kuralı gibi cebirsel kuralları sağlamaktadır. Bu nedenle analitik çözümler için tercih edilmektedir. Kesirsel NU yönteminin kurulabilmesi için, konformal kesirsel türev tanımı kullanılarak NU yönteminin temel denklemi kesirsel formda yazıldı ve çözümü araştırıldı. Önerilen kesirsel NU yönteminin, kesirsel Schrödinger denklemi için de bir çözüm yöntemi olabileceği üzerine çalışıldı. Bunun için tam sayı matematiğinde özdeğer ve özfonksiyon spektrumları bilinen harmonik osilatör potansiyeli, Woods-Saxon potansiyeli ve Hulthen potansiyeli için kesirsel Schrödinger denklemi bu yöntem ile çözüldü ve elde edilen sonuçların limit durumları kontrol edildi.

Son olarak Bölüm-5'de bu tez çalışmasında elde edilen sonuçlar verildi.

2. NIKIFOROV-UVAROV YÖNTEMİ ve HEUN DENKLEMİ

2.1 Nikiforov-Uvarov (NU) Yöntemi

NU yönteminin temeli, çözümü aranan ikinci dereceden lineer diferansiyel denklemi uygun koordinat dönüşümleri ile ikinci dereceden hipergeometrik bir diferansiyel denkleme indirgemeye ve indirgenen denklemi özel ortogonal fonksiyonlar yardımıyla çözmeye dayanır (Nikiforov and Uvarov, 1988). Bu genelleştirilmiş hipergeometrik denklem;

$$\psi''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}\psi'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}\psi(z) = 0 \tag{2.1}$$

ile verilir ve yöntemin temel denklemi olarak adlandırılır. Denklem (2.1)'deki katsayı polinomlarının dereceleri yöntemin sınır koşullarını oluşturmaktadır. Şöyle ki; $\widetilde{\tau}(z)$ en fazla birinci dereceden, $\sigma(z)$ ve $\widetilde{\sigma}(z)$ en fazla ikinci dereceden olabilen polinomlardır. Denklemin çözümünden klasik ortogonal polinomlar, küresel harmonikler, Bessel fonksiyonları ve hipergeometrik fonksiyonlar gibi özel fonksiyonlar elde edilir (Egrifes et al., 1999b). NU yönteminin diğer çözüm yöntemlerine göre üstünlüğü, çözümde cebirsel işlemlerde kolaylık sağlayan bu özel fonksiyonların kullanılması kaynaklıdır.

Denklem (2.1)'in çözümü için aşağıda anlatılan sistematik yol izlenir:

İlk olarak Denklem (2.1)'de $\psi(z) = \phi(z)y(z)$ dönüşümü yapılır,

$$y''(z) + (2\frac{\phi'(z)}{\phi(z)} + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)})y'(z) + (\frac{\phi''(z)}{\phi(z)} + \frac{\phi'(z)}{\phi(z)}\frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)})y(z) = 0. \tag{2.2}$$

Bu denklemi daha sade bir biçimde yazabilmek için, $y'(z)$ ve $y(z)$ terimlerinin katsayıları yeni polinomlar tanımlanarak düzenlenir. $y'(z)$'nin katsayısı, $\tau(z)$ en fazla birinci dereceden olabilen bir polinom olmak üzere;

$$2\frac{\phi'(z)}{\phi(z)} + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} = \frac{\tau(z)}{\sigma(z)} \tag{2.3}$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifade biraz daha düzenlenirse,

$$\frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)} \tag{2.4}$$

özfonksiyon çözümündeki $\phi(z)$ fonksiyonu,

$$\pi(z) = \frac{1}{2}(\tau(z) - \widetilde{\tau}(z)) \tag{2.5}$$

ile verilen ve en fazla birinci dereceden olabilen $\pi(z)$ polinomuna bağlı olarak elde edilir. Benzer olarak Denklem (2.1)'deki $y(z)$'nin katsayısı da aşağıdaki şekilde düzenlenir:

$$\frac{\phi''(z)}{\phi(z)} + \frac{\phi'(z)}{\phi(z)}\frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} = \frac{\bar{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} \tag{2.6}$$

Burada

$$\bar{\sigma}(z) = \widetilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi(z)(\widetilde{\tau}(z) - \sigma'(z)) + \pi'(z)\sigma(z) \tag{2.7}$$

dir. Denklem (2.3) ve Denklem (2.6)'nın sağ tarafları Denklem (2.2)'de yazıldığında;

$$y''(z) + \frac{\tau(z)}{\sigma(z)}y'(z) + \frac{\bar{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}y(z) = 0 \tag{2.8}$$

hipergeometrik denklemi elde edilir. Bu denklemde $\bar{\sigma}(z)$'nin $\sigma(z)$ polinomuna bölünebilir olduğu kabul edildiğinde,

$$\bar{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z) \tag{2.9}$$

λ bir sabit olmak üzere; Denklem (2.8);

$$\sigma(z)y''(z) + \tau(z)y'(z) + \lambda y(z) = 0. \tag{2.10}$$

ile verilen hipergeometrik denkleme indirgenmiş olur. Bu denklemin çözümü genelleştirilmeden önce yeni tanımlanan polinomlar belirlenir; $\pi(z)$ polinomu için Denklem (2.7) ile Denklem (2.9) karşılaştırılır ve aşağıdaki ikinci dereceden denklem elde edilir.

$$\pi^2(z) + \pi(z)(\widetilde{\tau}(z) - \sigma'(z)) + \widetilde{\sigma}(z) - k\sigma(z) = 0 \tag{2.11}$$

Burada;

$$k = \lambda - \pi'(z). \tag{2.12}$$

olup k bir sabittir. Denklem (2.11)'deki ikinci dereceden olan homojen denklemin $\pi(z)$ için çözümünden aşağıdaki eşitlik elde edilebilir:

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2})^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}. \tag{2.13}$$

Bu denklemde pozitif ve negatif işarete göre olası tüm çözümleri bulabilmek için, karekök içindeki k parametresinin biliniyor olması gerekmektedir. $\pi(z)$ en fazla birinci dereceden olabilen bir polinom olduğundan, karekök içindeki ifade bir polinomun tam karesine eşit olmalıdır. Bunun için karekök içindeki ifadenin diskriminantı sıfıra eşitlenir ve k sabiti için ikinci dereceden homojen bir denklem elde edilir. Bu denklemin köklerinden de k sabiti belirlenir (Pahlavani, 2012). Bundan sonra $\pi(z)$ polinom çözümleri Denklem (2.13)'ten bulunabilir. Bu çözümlerin fiziksel olarak geçerli olabilmesi için, Denklem (2.5)'te verilen $\tau(z)$ polinomunun birinci türevinin sıfırdan küçük olması gerekliliği sağlanmalıdır (Buyukkilic et al., 1997). Artık $\pi(z)$ ve $\tau(z)$ polinomları bilindiğine göre, λ parametresi de Denklem (2.12)'den elde edilebilir.

Denklem (2.10)'un çözümünün genelleştirilmesi için, hipergeometrik fonksiyonların tüm türevlerinin yine hipergeometrik fonksiyonlar olduğu özelliği kullanılarak $v_1(z) = y'(z)$ temsili için Denklem (2.10)'un bir kez türevi alınır.

$$\sigma(z)v_1''(z) + \tau_1(z)v_1'(z) + \mu_1 v_1(z) = 0. \tag{2.14}$$

Burada $\tau_1(z)$ en fazla birinci dereceden olabilen bir polinom ve μ_1, z değişkeninden bağımsız bir parametre olmak üzere, $\tau_1(z) = \tau(z) + \sigma'(z)$ ve $\mu_1 = \lambda + \tau'(z)$'dir. Buna göre, Denklem (15)'in hipergeometrik bir denklem olduğu açıkça görülmektedir. $v_2(z) = y''(z)$ alınarak Denklem (2.14)'ün ikinci türevi de şu şekilde yazılabilir:

$$\sigma(z)v_2''(z) + \tau_2(z)v_2'(z) + \mu_2 v_2(z) = 0. \tag{2.15}$$

Burada

$$\tau_2(z) = \tau_1(z) + \sigma'(z) = \tau(z) + 2\sigma'(z) \tag{2.16}$$

$$\mu_2 = \mu_1 + \tau_1'(z) = \lambda + 2\tau'(z) + \sigma''(z) \tag{2.17}$$

eşitlikleri sağlanır. Benzer şekilde $v_n(z) = y^{(n)}(z)$ alınarak hipergeometrik bir denklem, Denklem (2.10)'un özel çözümlerinin bir takımı olarak yazılabilir:

$$\sigma(z)v_n''(z) + \tau_n(z)v_n'(z) + \mu_n v_n(z) = 0. \tag{2.18}$$

$\tau_n(z)$ ve μ_n için tekrarlama bağıntıları da sırasıyla şu şekilde elde edilir:

$$\tau_n(z) = \tau(z) + n\sigma'(z) \tag{2.19}$$

$$\mu_n = \lambda + n\tau'(z) + \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(z) \tag{2.20}$$

$\mu_n = 0$ olduğunda Denklem (2.20);

$$\lambda_n = -n\tau'(z) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(z) \quad (n = 0, 1, 2, ...). \tag{2.21}$$

denklemine dönüşür. Bu durumda Denklem (2.18)'in $v_n(z) = y^{(n)}(z) = sabit$ olacak şekilde bir çözümü, Denklem (2.10)'un da $y(z) = y_n(z)$ şeklinde n. dereceden bir polinom olan özel bir çözümü vardır.

NU yöntemi ile özdeğer çözümünü elde etmek için, Denklem (2.12) ile Denklem (2.21) verilen λ ve λ_n parametreleri eşitlenir. $y_n(z)$ polinom çözümleri ise;

$$y_n(z) = \frac{B_n}{\rho(z)}\frac{d^n}{dz^n}[\sigma^n(z)\rho(z)], \tag{2.22}$$

ile verilen Rodrigues bağıntısından bulunur (Nikiforov and Uvarov, 1988). Burada B_n normalizasyon sabitidir. $\rho(z)$ ise;

$$(\sigma(z)\rho(z))' = \tau(z)\rho(z) \tag{2.23}$$

bağıntısını sağlayan ağırlık fonksiyonudur (Nikiforov and Uvarov, 1988). Son olarak, Denklem (2.4) ve Denklem (2.22), $\psi(z) = \phi(z)y(z)$ dönüşümünde yerine yazılarak denklemin özfonksiyon spektrumu tam olarak elde edilir.

2.2 Heun Denklemi

Heun denklemi:

$$\frac{d^2w}{dz^2} + [\frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1} + \frac{\epsilon}{z-a}]\frac{dw}{dz} + \frac{\alpha\beta z - q}{z(z-1)(z-a)}w = 0, \tag{2.24}$$

dört tane düzgün tekil noktası olan ikinci dereceden bir diferansiyel denklemdir. Bu tekil noktalar $z = 0$, $z = 1$, $z = a$ ve $z = \infty$ olup bu noktalardaki exponentler sırasıyla $(0, 1-\gamma)$, $(0, 1-\delta)$, $(0, 1-\epsilon)$ ve (α, β)'dır (Ferreira and Lopez, 2000). Burada γ, δ, ϵ, α ve β genellikle kompleks olan ve $\epsilon = \alpha + \beta - \gamma - \delta + 1$ ile verilen Fuchsian koşulunu sağlayan sabit parametrelerdir, q ise yardımcı parametre olarak adlandırılır.

Heun denkleminin çözümleri ve matematiksel fizikteki bazı uygulamalarda doğrudan karşılaşılan üç önemli konfluent formu aşağıdaki başlıklar altında incelenmiştir.

2.2.1 Heun denkleminin çözümleri

Heun denkleminin çözümlerini elde etmek için, önce geleneksel bir hipergeometrik denklemin nasıl çözülebileceği araştırılır. Bunun için aşağıdaki hipergeometrik denklem ele alınabilir;

$$y'' + [\frac{\gamma}{z} - \frac{\delta}{z-1}]y' + \frac{\alpha\beta}{z(z-1)}y = 0 \tag{2.25}$$

Bu denklemin $z = 0, 1, \infty$ olmak üzere toplam üç tane düzgün tekil noktası vardır ve bu tekil noktalardaki exponentler sırasıyla $(0, 1-\gamma)$; $(0, 1-\delta)$; (α, β)'dır. Denklemi oluşturan parametreler arasında $\gamma + \delta = \alpha + \beta + 1$ bağıntısı vardır. Bu denklemin en temel çözümü hipergeometrik seri çözümüdür ve $\gamma \neq 0, -1, -2....$ olmak üzere;

$$_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma 1!}z + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)2!}z^2 + ... = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n(\beta)_n}{(\gamma)_n}\frac{z^n}{n!} \tag{2.26}$$

ile verilir. α ya da β parametrelerinden biri $-m$ gibi pozitif olmayan bir tam sayıya eşit olduğunda bu seri m. dereceden bir polinoma eşit olur.

Denklem (2.25)'in çözümleri lokal çözümler ve iki tekillikte geçerli olan çözümler olarak sınıflandırılabilir:

Lokal Çözümler: Bu çözümler sadece bir tekilliğin komşuluğunda geçerlidir ve diğer tekilliklerde geçerli olan çözümlere analitik olarak dönüştürülebilirler.

- $z = 0$'daki çözümler

$$\begin{aligned} y_{00}(z) &= {}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z) \\ y_{01}(z) &= z^{1-\gamma}{}_2F_1(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 2-\gamma; z) \end{aligned} \tag{2.27}$$

- $z = 1$'deki çözümler

$$\begin{aligned} y_{10}(z) &= {}_2F_1(\alpha, \beta; \delta; 1-z) \\ y_{11}(z) &= (1-z)^{1-\delta}{}_2F_1(\gamma-\beta, \gamma-\alpha; 2-\delta; 1-z) \end{aligned} \tag{2.28}$$

- $z = \infty$'daki çözümler

$$\begin{aligned} &z^{-\alpha}{}_2F_1(\alpha, \alpha-\gamma+1; \alpha-\beta+1; z^{-1}) \\ &z^{-\beta}{}_2F_1(\beta, \beta-\gamma+1; \beta-\alpha+1; z^{-1}) \end{aligned} \tag{2.29}$$

Bu altı çözüm, tek bir gösterim ile temsil edilebilir;

$$z^{\sigma_1}(1-z)^{\sigma_2}{}_2F_1(\alpha^*,\beta^*;\gamma^*;\zeta(z)) \tag{2.30}$$

Burada σ_1 ve σ_2 exponentleri, $\zeta(z)$ ise $0,1,\infty$ tekil noktalarını aynı bırakan uygun bir dönüşümü temsil etmektedir. $\alpha^*,\beta^*,\gamma^*$ da α,β,γ 'nın lineer fonksiyonları olan yeni parametrelerdir.

İki Tekillikte Geçerli Olan Çözümler: Yukarıda çiftler halinde yazılan lokal çözümler genel olarak birbirinden farklıdır. Ancak bazı durumlarda bir çiftteki bir çözüm ile diğer bir çiftteki bir çözüm çakışabilir. Özel olarak Denklem (2.27) ve Denklem (2.28)'de verilen çözümlerden herhangi ikisinin çakıştığı durumu ele alalım. Böyle çözümlere dejenere hipergeometrik fonksiyonlar adı verilir ve şu formda gösterilir:

$$z^{\sigma_1}(1-z)^{\sigma_2}p_n(z) \tag{2.31}$$

Burada $\sigma_1 = 0$ ya da $1-\gamma$, $\sigma_2 = 0$ ya da $1-\delta$ ve $p_n(z)$, n. dereceden bir polinomdur. σ_1 ve σ_2'nin alabileceği değerlere göre bu çözümler dört sınıfta toplanır:

I $\sigma_1 = \sigma_2 = 0$

II $\sigma_1 = 1-\gamma$, $\sigma_2 = 0$

III $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 1-\delta$

IV $\sigma_1 = 1-\gamma$, $\sigma_2 = 1-\delta$.

Yukarıda anlatılan geleneksel hipergeometrik denklemin çözümleri Heun denkleminin çözümleri için şu şekilde genişletilebilir;

2.2.1.1 Lokal çözümler

Heun denkleminin lokal çözümlerini elde etmek için, Denklem (2.24)'ün

$$y = \sum_{r=0}^{\infty} c_r z^r \qquad c_0 \neq 0 \tag{2.32}$$

şeklinde bir kuvvet serisi çözümü aranır ve z'nin kuvvetinin katsayısı sıfıra eşitlenerek tekrarlama bağıntıları elde edilir;

$$-qc_0 + a\gamma c_1 = 0 \tag{2.33}$$

$$P_r c_{r-1} - (Q_r + q)c_r + R_r c_{r+1} = 0. \tag{2.34}$$

Burada

$$P_r = (r - 1 + \alpha)(r - 1 + \beta) \tag{2.35}$$

$$Q_r = r[(r - 1 + \gamma)(1 + a) + a\delta + \epsilon] \tag{2.36}$$

$$R_r = (r + 1)(r + \gamma)a \tag{2.37}$$

dır. $c_0 = 1$ normalizasyonu alınır ve diğer katsayılar da Denklem (2.33) ve Denklem (2.34)'deki tekrarlama bağıntılarından bulunursa, Denklem (2.32)'deki seri,

$$F(a, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; z) \tag{2.38}$$

şeklinde sembolize edilebilir. F sembolü genellikle hipergeometrik fonksiyonlar için kullanıldığından, Heun denkleminin lokal çözümleri için Hl sembolü kullanılır. Buna göre Denklem (2.32)'deki seri yine $c_0 = 1$ normalizasyonu için şu şekilde yazılır;

$$Hl(a, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; z) \tag{2.39}$$

2.2.1.2 Heun fonksiyonları

Hf sembolü ile gösterilen Heun fonksiyonları, denklemin z_1 ve z_2 gibi herhangi iki tekil noktasını içeren bir bölgedeki çözümlerdir. Bu durum z_1 noktasında, bu noktadaki herhangi bir exponente göre yazılan bir Frobenius çözümü ile z_2 noktasında, bu noktadaki herhangi bir exponente göre yazılmış bir Frobenius çözümünün aynı anda var olması durumudur. Böyle bir çözüm için (z_1, z_2) 'ye bağlı Heun fonksiyonu ifadesi kullanılır. Buna göre Hf fonksiyonunu belirlemek için, önce tekil noktalar ve bu noktalardaki hangi exponentlere göre çözüm yapıldığı belirlenmelidir. Notasyon olarak önce (z_1, z_2) tekillikleri, sonra Hf sembolü ve üst indis olarak da Bölüm-2.2.1'de tanımlanan sınıf numaraları yazılır:

$$(z_1, z_2)Hf^{(X)} \tag{2.40}$$

2.2.1.3 Heun polinomları

Bir Heun polinomu, Heun denkleminin üç tekil noktasında da aynı anda geçerli olan çözümüdür. Bu durumda her bir tekil noktada aynı anda bir Frobenius çözümü vardır. Böyle bir çözüm şu formda gösterilebilir:

$$Hp(z) = z^{\sigma_1}(z-1)^{\sigma_2}(z-a)^{\sigma_3}p(z) \tag{2.41}$$

Burada $p(z)$ bir polinom, $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ de ilgili tekil noktadaki her iki exponentten birini göstermektedir.

$z \to \infty$ için Heun polinomları, $Hp(z) = z^k$ gibi davranır. Burada n , $p(z)$ polinomunun derecesini göstermek üzere $k = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + n$ 'dir. Buna göre ∞'daki exponentlerden biri $-k$ olmalıdır. Bu exponenti belirleyebilmek için, α parametresinin bu exponente eşit olduğu durum ele alınır. Bu durumda β parametresi Fuchsian bağıntısına göre;

$$\beta = k + \epsilon + \gamma + \delta - 1 \tag{2.42}$$

şeklinde belirlenir ve Heun polinomları Çizelge-2.1'de gösterildiği gibi $I, II, III, ..., VIII$ ile isimlendirilen sekiz sınıfta toplanabilir:

Çizelge 2.1: Heun polinomlarının sınıflandırılması

Sınıf	σ_1	σ_2	σ_3	α	β
I	0	0	0	$-n$	$\epsilon+\gamma+\delta+n-1$
II	$1-\gamma$	0	0	$\gamma-n-1$	$n+\delta+\epsilon$
III	0	$1-\delta$	0	$\delta-n-1$	$\epsilon+\gamma+n$
IV	$1-\gamma$	$1-\delta$	0	$\delta+\gamma-n-2$	$\epsilon+n+1$
V	0	0	$1-\epsilon$	$\epsilon-n-1$	$\delta+\gamma+n$
VI	$1-\gamma$	0	$1-\epsilon$	$\epsilon+\gamma-n-2$	$\delta+n+1$
VII	0	$1-\delta$	$1-\epsilon$	$\delta+\epsilon-n-2$	$\gamma+n+1$
VIII	$1-\gamma$	$1-\delta$	$1-\epsilon$	$\epsilon+\gamma+\delta-n-3$	$n+2$

Heun denkleminin en fazla karşılaşılan çözümleri Heun polinomlarıdır ve $Hp_n^{(X)}$ sembolü ile temsil edilirler. Burada n $p(z)$ polinomunun derecesini, X ise Çizelge-2.1'de verilen sınıfları göstermektedir.

2.2.2 Heun denkleminin konfluent formları

Bir diferansiyel denklemin konfluent formu, bu denklemin (z_1, z_2) gibi iki tekil noktasının birleştirilmesi işlemi ile elde edilir. Bu şekilde iki tekil noktası olan bir denklemden tek tekil noktası olan bir denklem elde edilir (Ince, 1926). Denklemin konfluent formunun çözümü, genel denklemin çözümünün limit durumu olarak ele alınabilir. Ancak, fiziksel problemlerde bir denklemin konfluent formları ile doğrudan karşılaşılabileceğinden, bu denklemlerin çalışılması ve çözümlerinin türetilmesi gerekir (Ronveaux, 1995).

Burada Heun denkleminin üç önemli konfluent formu incelenecektir;

1) Konfluent Heun Denklemi (KHD): $z = a$'daki tekil nokta ile $z = \infty$'daki tekil noktanın birleştirilmesi ile elde edilir. Elde edilen denklemde $z = 0$ ve $z = 1$ düzenli tekil noktalar olarak kalırken, $z = \infty$ düzensiz tekil nokta olur.

   Heun denkleminin konfluent formunun türetilmesi için aşağıdaki işlemler takip edilir: Denklem (2.24) ile verilen Heun denklemi a'ya bölünür:

$$z(z-1)(\frac{z}{a}-1)y''(z) + \big[\gamma(z-1)(\frac{z}{a}-1) + \delta z(\frac{z}{a}-1) + \frac{\epsilon}{a}z(z-1)\big]y'(z) + \big(\alpha\frac{\beta}{a}z - \frac{q}{a}\big)y(z) = 0 \tag{2.43}$$

   $a \to \infty$ olsun ve aynı anda

$$\frac{\beta}{a} \to \frac{\epsilon}{a} \to -\nu, \quad \frac{q}{a} \to -\sigma \tag{2.44}$$

   olacak şekilde $\beta, \epsilon, q \to \infty$ olsun. Bu durumda Denklem (2.43);

$$y''(z) + \left(\nu + \frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1}\right)y'(z) + \left(\frac{\alpha\nu z - \sigma}{z(z-1)}\right)y(z) = 0, \tag{2.45}$$

   ifadesine indirgenir. Burada γ, δ, α Heun denklemindeki orjinal parametreler, ν, σ ise yeni tanımlanan parametrelerdir (Ronveaux, 1995).

2) Bikonfluent Heun Denklemi (BHD): $z = 1$'deki tekil nokta $z = b$ gibi bir noktaya taşınır. $a \to \infty$ ve $b \to \infty$ için elde edilen denklemin $z = 0$'da düzgün bir tekil noktası, $z = \infty$'da düzensiz bir tekil noktası olur (Ronveaux, 1995).

3) Trikonfluent Heun Denklemi (THD): Bu denklem Heun denkleminin standart formundan doğrudan elde edilemez. Bunun için tekil noktaları a_1,

a_2,a_3,∞ olan bir denklem ele alınır. $a_1 \to a_2 \to a_3 \to \infty$ için elde edilen THD'nin sadece $z = \infty$'da düzensiz bir tekil noktası olur (Ronveaux, 1995).

2.3 Heun Denkleminin Nikiforov-Uvarov Yöntemi ile Özel Bir Çözümü

Denklem (2.24) ile verilen Heun denkleminin tekil noktalarından biri olan a parametresi sıfır alındığında, Heun denklemi

$$\frac{d^2w}{dz^2} + [\frac{(\gamma+\delta+\epsilon)z-(\gamma+\epsilon)}{z(z-1)}]\frac{dw}{dz} + \frac{(\alpha\beta z-q)(z-1)}{z^2(z-1)^2}w = 0. \tag{2.46}$$

formuna dönüşür. Bu çalışma için "modifiye Heun denklemi" olarak isimlendirilen bu denklemin NU yöntemi ile çözülebilirliğini araştırmak için, yöntemin sınır koşullarını sağlayıp sağlamadığı kontrol edilir. Bunun için, Denklem (2.1) ile Denklem (2.46) karşılaştırılır ve aşağıdaki polinomlar elde edilir:

$$\widetilde{\tau}(z) = \gamma(z-1)+\delta z+\epsilon(z-1) \tag{2.47}$$

$$\sigma(z) = z(z-1) \tag{2.48}$$

$$\widetilde{\sigma}(z) = (\alpha\beta z-q)(z-1). \tag{2.49}$$

Burada $\widetilde{\tau}(z)$ birinci dereceden, $\sigma(z)$ ve $\widetilde{\sigma}(z)$ ikinci dereceden polinomlar olarak bulunduğundan, modifiye edilmiş Heun denklemi, NU yöntemi ile çözülebilir (Karayer et al., 2014). Modifiye Heun denklemindeki parametrelere bağlı olarak elde edilen NU yönteminin temel denklemindeki katsayı polinomları, Denklem (2.13)'de yerine yazıldığında, $\pi(z)$ polinomu;

$$\pi(z) = \frac{(1-\gamma+\epsilon)(z-1)+(1+\delta)z}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{[(1-\gamma+\epsilon)(z-1)+(1+\delta)z]^2-4(\alpha\beta z-q)(z-1)+4kz(z-1)}. \tag{2.50}$$

olarak bulunur. Bu polinomun belirlenebilmesi için, k sabitinin biliniyor olması gerekmektedir. Bunun için, karekökün içindeki ifadenin diskriminantı sıfıra eşitlenerek, k sabiti için ikinci dereceden bir denklem elde edilir. Bu denklemin köklerinden k sabiti,

$$k = \frac{1}{2}[-(1-\gamma+\epsilon)(1+\delta)-2(q-\alpha\beta)\pm(1+\delta)\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q}]. \tag{2.51}$$

olarak bulunur. Bu k değerleri için karekök içindeki ifade, birinci dereceden bir polinomun tam karesine eşit olacağından, $\pi(z)$'nin en fazla birinci dereceden olabilen bir polinom olması gerekliliği sağlanmış olur. Bu durumda Denklem (2.51)'de elde edilen iki farklı k sabiti için aşağıdaki dört farklı $\pi(z)$ polinomuna ulaşılır:

$$k = \frac{1}{2}[-(1-\gamma+\epsilon)(1+\delta) - 2(q-\alpha\beta) + (1+\delta)\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2 - 4q}] \quad \text{için;}$$
$$\pi(z) = \frac{1}{2}\{(1-\gamma+\epsilon)(z-1) + (1+\delta)z \pm [(\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q})(z-1) + (1+\delta)z]\}$$
$$k = -\frac{1}{2}[(1-\gamma+\epsilon)(1+\delta) + 2(q-\alpha\beta) + (1+\delta)\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2 - 4q}] \quad \text{için;}$$
$$\pi(z) = \frac{1}{2}\{(1-\gamma+\epsilon)(z-1) + (1+\delta)z \pm [(\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q})(z-1) - (1+\delta)z]\}$$

Çözümün fiziksel olarak geçerli olabilmesi için, $k = -\frac{1}{2}[(1-\gamma+\epsilon)(1+\delta) + 2(q-\alpha\beta) + (1+\delta)\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q}]$ değeri için yazılan

$$\pi(z) = \frac{1}{2}(z-1)[(1-\gamma+\epsilon) - \sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q}] + (1+\delta)z \tag{2.52}$$

$\pi(z)$ polinomu seçilir. Bundan sonra, özdeğer çözümü Denklem (2.12) ve Denklem (2.21)'de verilen λ ve λ_n parametreleri için $\lambda = \lambda_n$ eşitliği kurularak bulunabilir:

$$-n[2\epsilon + 3\delta + 2 - \sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q} + n] = \frac{1}{2}\delta[1+\gamma-\epsilon-\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q}] - \sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q} - (q-\alpha\beta) + 1 \tag{2.53}$$

Sırasıyla Denklem (2.4), Denklem (2.23) ve Denklem (2.22) kullanılarak, $\psi(z) = \phi(z)y(z)$'den özfonksiyon spektrumu da aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\phi(z) = z^{\frac{(1-\gamma+\epsilon)-\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q}}{2}}(z-1)^{(1+\delta)} \tag{2.54}$$

$$\begin{aligned}
\rho(z) &= z^{(2\epsilon-\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q})}(z-1)^{(1+3\delta)}, \\
y_n(z) &= B_n(-1)^n z^{-(2\epsilon-\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q})}(1-z)^{-(1+3\delta)} \\
&\quad \frac{d^n}{dz^n}[z^{(n+2\epsilon-\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q})}(1-z)^{(n+1+3\delta)}], \\
y_n(z) &= (-1)^n P_n^{[(2\epsilon-\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q})),(1+3\delta)]}(1-2z)
\end{aligned} \tag{2.55}$$

$$\psi(z) = N z^{\frac{(1-\gamma+\epsilon)-\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q}}{2}}(1-z)^{(1+\delta)} P_n^{[(2\epsilon-\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q}),(1+3\delta)]}(1-2z). \tag{2.56}$$

Burada N normalizasyon sabiti, $P_n^{[(2\epsilon-\sqrt{(1-\gamma+\epsilon)^2-4q})),(1+3\delta)]}(1-2z)$ ise Jacobi polinomlarıdır (Szego, 1939).

2.3.1 Modifiye Heun denklemi ve Schrödinger denklemi

Modifiye Heun denklemi ve radyal Schrödinger denklemi ile bazı merkezi potansiyeller için birebir örtüşen özdeğer ve özfonksiyon çözümleri elde edilmektedir. Bu potansiyeller için radyal Schrödinger denklemini çözmek yerine, modifiye Heun denkleminin NU yöntemi ile elde edilmiş olan özdeğer ve özfonksiyon çözümleri doğrudan kullanılabilmektedir. Bunun için radyal Schrödinger denklemi ile Eq.(2.46) karşılaştırılır ve NU yöntemindeki polinomlar ile fiziksel parametreler ilişkilendirilir. Modifiye Heun denklemi için elde edilen parametrik özdeğer ve özfonksiyon çözümünde bu fiziksel parametreler yerine yazılarak sonuca ulaşılır.

Burada Woods-Saxon ve Hulthen potansiyelleri için özdeğer ve özfonksiyon spektrumlarının modifiye Heun denkleminin çözümünden nasıl elde edileceği gösterilmiştir.

2.3.2 Modifiye Heun denkleminin Woods-Saxon potansiyeli için çözümü

Ağır iyon reaksiyonlarının analizinde kullanılan ve nükleer fizikte oldukça önemli bir potansiyel olan Woods-Saxon potansiyeli;

$$V(r)=\frac{-V_0}{1+e^{\frac{r-R_0}{a}}}, \tag{2.57}$$

formundadır (Ikhdair and Sever, 2007). Burada V_0 potansiyel derinliği, R_0 potansiyel genişliği ve a ise yüzey kalınlığıdır (Berkdemir, 2006). Bu potansiyel için boyutsuz radyal Schrödinger denklemi:

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}+\frac{(1-z)}{z(1-z)}\frac{d\psi(z)}{dz}+\frac{1}{z^2(1-z)^2}[-Az^2+(2A-B)z+B-A]\psi(z)=0, \tag{2.58}$$

ile verilir. Burada $1/a=2\alpha$ olmak üzere, A ve B parametreleri

$$A = -\frac{mE}{2\hbar^2\alpha^2}>0, \tag{2.59}$$

$$B = \frac{mV_0}{2\hbar^2\alpha^2}. \tag{2.60}$$

olarak tanımlanmıştır. Denklem (2.58)'in özdeğer ve özfonksiyon çözümlerini elde etmek için modifiye Heun denkleminin NU yöntemi ile elde edilmiş sonuçları kullanılır. Bunun için Denklem (2.46)'da verilen modifiye Heun denklemi ile Denklem (2.58) karşılaştırılır ve parametreler şu şekilde ilişkilendirilir:

$$\begin{aligned}
\gamma+\epsilon &= 1 \\
\gamma+\epsilon+\delta &= 1 \rightarrow \delta=0 \\
\alpha\beta &= -A \\
\alpha\beta+q &= -2A+B \rightarrow -A+q=-2A+B \rightarrow q=B-A \\
q &= B-A.
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Bu parametreler Denklem (2.53) 'de yerine yazıldığında;

$$B-2\sqrt{A-B}-1=n(2+2\sqrt{A-B}+n) \tag{2.62}$$

özdeğer denklemine ulaşılır ve daha önce tanımlanan A ve B sabitleri yerine yazılarak, Woods-Saxon potansiyelinin $l=0$ için enerji spektrumu elde edilebilir:

$$E_n=-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left[\left(\frac{ma^2V_0}{\hbar^2(n+1)}\right)^2+\left(\frac{n+1}{2}\right)^2+\frac{ma^2V_0}{\hbar^2}\right]. \tag{2.63}$$

Özfonksiyon çözümü için ise, Denklem (2.61)'da bulunan parametreler Denklem (2.56)'da yerine yazılır;

$$\psi_n(z)=C_n(1-z)z^{\sqrt{A-B}}P_n^{(2\sqrt{A-B},1)}(1-2z) \tag{2.64}$$

Burada C_n normalizasyon sabiti ve $P_n^{(2\sqrt{A-B},1)}(1-2z)$ Jacobi polinomlarıdır. Denklem (2.63) ve Denklem (2.64) Woods Saxon potansiyeli için özdeğer ve özfonksiyon spektrumlarını vermektedir. Modifiye Heun denkleminden elde edilen bu çözümler, Woods-Saxon potansiyeli için literatürdeki özdeğer ve özfonksiyon spektrumları ile birebir uyuşmaktadır (Berkdemir, 2006).

2.3.3 Modifiye Heun denkleminin Hulthen potansiyeli için çözümü

Nükleer fizik, atom fiziği, katı hal fiziği gibi birçok alanda karşılaşılan ve kısa menzilli bir potansiyel olan Hulthen potansiyeli;

$$V(r)=-\frac{K}{\kappa}\frac{1}{e^{\frac{r}{\kappa}}-1} \tag{2.65}$$

ile verilir (Pahlavani, 2012). Burada K ve κ sırasıyla dayanım ve menzile bağlı parametrelerdir. Hulthen potansiyelinde hareket eden bir parçacık için Schrödinger denkleminin analitik olarak çözümü sadece $l = 0$ için mümkün olmaktadır (Flügge, 1971). Bu potansiyel için boyutsuz radyal Schrödinger denklemi;

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}+\frac{(1-z)}{z(1-z)}\frac{d\psi(z)}{dz}+\frac{1}{z^2(1-z)^2}[-(A+B)z^2+(2A+B-C)z-A]\psi(z)=0 \tag{2.66}$$

ile verilir. Burada

$$\begin{aligned} A &= -\frac{2\mu E\kappa}{\hbar^2}, &(2.67)\\ B &= \frac{2\mu K\kappa}{\hbar^2}, &(2.68)\\ C &= l(l+1). &(2.69)\end{aligned}$$

olarak tanımlanmıştır (Pahlavani, 2012). Modifiye Heun denkleminden elde edilen parametrik özdurum çözümlerini kullanmak için Denklem (2.46) ile Denklem (2.66) karşılaştırılır ve özdeğer ve özfonksiyon spektrumlarındaki parametreler bu potansiyel için belirlenir;

$$\begin{aligned} \gamma+\epsilon &= 1\\ \gamma+\epsilon+\delta &= 1 \rightarrow \delta = 0\\ \alpha\beta &= -A-B\\ \alpha\beta+q &= -2A-B+C \rightarrow -A-B+q=-2A-B+C \rightarrow q=-A+C\\ q &= -A \rightarrow C=0. \end{aligned} \tag{2.70}$$

Bu parametreler sırasıyla Denklem (2.53) ve Denklem (2.56)'de yazılırsa

$$\begin{aligned} B-1-2\sqrt{A} &= n(2+2\sqrt{A}+n), n=0,1,2.... &(2.71)\\ \psi(s) &= N_{nl}s^{\sqrt{A}}(1-s)P_n^{[2\sqrt{A},1]}(1-2s). &(2.72)\end{aligned}$$

sonuçları elde edilir. Burada N_n normalizasyon sabiti ve $P_n^{(2\sqrt{A-B},1)}(1-2z)$ Jacobi polinomlarıdır. Daha önce tanımlanan A ve B parametreleri Denklem (2.71)'de yazılırsa, Hulthen potansiyelinde hareket eden parçacığın $l = 0$ için enerji spektrumu şu şekilde elde edilir;

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{K\mu/\hbar^2}{n+1}-\frac{n+1}{2\kappa})^2. \tag{2.73}$$

Bu şekilde modifiye Heun denklemi kullanılarak literatürdeki sonuçlara ulaşılabileceği gösterilmiştir (Pahlavani, 2012).

3. GENİŞLETİLMİŞ NIKIFOROV-UVAROV YÖNTEMİ ve UYGULAMALARI

3.1 Genişletilmiş NU Yöntemi

Bu yöntem en fazla dört tane tekil noktaya sahip ikinci dereceden lineer diferansiyel denklemleri çözmek için NU yönteminin sınır koşullarının değiştirilmesi ile elde edilmiştir. Çözümü aranan denklem uygun bir koordinat dönüşümü ile aşağıdaki forma dönüştürülür ve NU yönteminde olduğu gibi sistematik bir şekilde çözüm aranır.

$$\psi''(z) + \frac{\widetilde{\tau}_e(z)}{\sigma_e(z)}\psi'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}_e(z)}{\sigma_e^2(z)}\psi(z) = 0 \tag{3.1}$$

Burada $\widetilde{\tau}_e(z)$ en fazla ikinci dereceden olabilen, $\sigma_e(z)$ ve $\widetilde{\sigma}_e(z)$ de sırasıyla en fazla üçüncü ve dördüncü dereceden olabilen polinomlar olarak tanımlanmıştır. Bu denklemde $\phi_e(z)$ uygun olarak seçilen bir fonksiyon olmak üzere;

$$\psi(z) = \phi_e(z)y(z) \tag{3.2}$$

dönüşümü yapılırsa Denklem (3.1)'den,

$$y''(z) + (2\frac{\phi_e'(z)}{\phi_e(z)} + \frac{\widetilde{\tau}_e(z)}{\sigma_e(z)})y'(z) + (\frac{\phi_e''(z)}{\phi_e(z)} + \frac{\phi_e'(z)}{\phi_e(z)}\frac{\widetilde{\tau}_e(z)}{\sigma_e(z)} + \frac{\widetilde{\sigma}_e(z)}{\sigma_e^2(z)})y(z) = 0 \tag{3.3}$$

denklemine ulaşılır. Bu denklemi biraz daha yalın hale getirmek için $y(z)$ ve $y'(z)$ terimlerinin katsayıları yeni polinomlar tanımlanarak düzenlenir. Bunun için $\tau_e(z)$ en fazla ikinci dereceden olabilen bir polinom olmak üzere, $y'(z)$'nin katsayısı $\tau_e(z)/\sigma_e(z)$ ifadesine eşitlenebilir;

$$2\frac{\phi_e'(z)}{\phi_e(z)} + \frac{\widetilde{\tau}_e(z)}{\sigma_e(z)} = \frac{\tau_e(z)}{\sigma_e(z)}. \tag{3.4}$$

Buradan $\pi_e(z)$;

$$\tau_e(z) = \widetilde{\tau}_e(z) + 2\pi_e(z) \tag{3.5}$$

denklemini sağlayan en fazla ikinci dereceden olabilen bir polinom olmak üzere;

$$\frac{\phi_e'(z)}{\phi_e(z)} = \frac{\pi_e(z)}{\sigma_e(z)} \tag{3.6}$$

ifadesine ulaşılabilir. Benzer şekilde $y(z)$'nin katsayısı da şu şekilde düzenlenir:

$$\frac{\phi_e''(z)}{\phi_e(z)}+\frac{\phi_e'(z)}{\phi_e(z)}\frac{\widetilde{\tau}_e(z)}{\sigma_e(z)}+\frac{\widetilde{\sigma}_e(z)}{\sigma_e^2(z)}=\frac{\bar{\sigma}_e(z)}{\sigma_e^2(z)}. \tag{3.7}$$

Burada $\bar{\sigma}_e(z)$ en fazla dördüncü dereceden olabilen bir polinom olmak üzere;

$$\bar{\sigma}_e(z)=\widetilde{\sigma}_e(z)+\pi_e^2(z)+\pi_e(z)(\widetilde{\tau}_e(z)-\sigma_e'(z))+\pi_e'(z)\sigma_e(z) \tag{3.8}$$

şeklinde tanımlanır. Bu yeni polinomlar kullanılarak yapılan düzenlemelerle Denklem (3.3);

$$y''(z)+\frac{\tau_e(z)}{\sigma_e(z)}y'(z)+\frac{\bar{\sigma}_e(z)}{\sigma_e^2(z)}y(z)=0 \tag{3.9}$$

denklemine indirgenir. Burada $\bar{\sigma}_e(z)/\sigma_e(z)$ ifadesi $h(z)$ gibi birinci dereceden bir polinoma eşit olsun. Buna göre;

$$\sigma_e(z)y''(z)+\tau_e(z)y'(z)+h(z)y(z)=0 \tag{3.10}$$

denklemine ulaşılabilir. $\bar{\sigma}_e(z)/\sigma_e(z)=h(z)$ tanımı Denklem (3.8)'de kullanılırsa;

$$h(z)-\pi_e'(z)=g(z) \tag{3.11}$$

olmak üzere $\pi_e(z)$ polinomuna göre ikinci dereceden homojen bir denklem elde edilir:

$$\pi_e^2(z)+\pi_e(z)(\widetilde{\tau}_e(z)-\sigma_e'(z))+\widetilde{\sigma}_e(z)-(h(z)-\pi_e'(z))\sigma_e(z)=0. \tag{3.12}$$

Bu denklemin köklerinden $\pi_e(z)$ polinomu bulunabilir;

$$\pi_e(z)=\frac{\sigma_e'(z)-\widetilde{\tau}_e(z)}{2}\pm\sqrt{(\frac{\sigma_e'(z)-\widetilde{\tau}_e(z)}{2})^2-\widetilde{\sigma}_e(z)+g(z)\sigma_e(z)} \tag{3.13}$$

$\pi_e(z)$ polinomunun olası tüm çözümlerini belirleyebilmek için karekök içindeki $g(z)$ polinomunun biliniyor olması gerekir. Bunun için, $\pi_e(z)$ en fazla ikinci dereceden bir polinom olabileceğinden karekök içindeki ifade bir polinomun tam karesine eşit olmalıdır. Örneğin; çözüm aranan diferansiyel denklemde $\pi_e(z)$ ikinci dereceden bir polinom oluyorsa, bu durumda karekök içindeki ifadenin ikinci dereceden bir polinomun tam karesine eşit olması gerekir ve çözüm için bu koşulu sağlayan $g(z)$ polinomları seçilir. $g(z)$ polinomları belirlendikten sonra Denklem (3.13)'ten $\pi_e(z)$ polinomu bulunur. Bundan sonra sırasıyla $\tau_e(z)$ ve $h(z)$ polinomları Denklem (3.5) ve Denklem (3.11)'den elde edilir.

Denklem (3.10)'un çözümlerini genelleştirmek için, denklemin önce birinci türevi alınır ve katsayı polinomlarının dereceleri, çarpanı olduğu fonksiyonun türev mertebesini geçmeyen bir formu elde edilir:

$$\sigma_e(z)y^{(3)}(z)+(\tau_e(z)+\sigma_e'(z))y''(z)+(\tau_e'(z)+h(z))y'(z)+h'(z)y(z)=0. \quad (3.14)$$

Bu denklemin tüm türevleri yine aynı formda olacağından, Denklem (3.14)'ün n kez türevi alınabilir ve tekrarlama bağıntıları bulunur. Buna göre $y^{(n)}(z) = v_n(z)$ temsili ile n. türev için aşağıdaki denkleme ulaşılır:

$$\begin{aligned} \sigma_e(z)v_n^{(3)}(z) + (\tau_e(z) + (n+1)\sigma_e'(z))v_n''(z) \\ +((n+1)\tau_e'(z) + \frac{n(n+1)}{2}\sigma_e''(z) + h(z))v_n'(z) \\ +((n+1)h'(z) + \frac{n(n+1)}{2}\tau_e''(z) + \frac{n(n+1)(n-1)}{6}\sigma_e^{(3)}(z))v_n(z) = 0 \end{aligned} \quad (3.15)$$

$v_n(z)$'nin katsayısı sıfır olduğunda;

$$(n+1)h'(z) = -\frac{n(n+1)}{2}\tau_e''(z) - \frac{n(n+1)(n-1)}{6}\sigma_e^{(3)}(z) \quad (3.16)$$

bulunur. Buradan n doğal sayısına bağlı olan $h_n(z)$ polinomuna ulaşılabilir:

$$h_n(z) = -\frac{n}{2}\tau_e'(z) - \frac{n(n-1)}{6}\sigma_e''(z) + C_n. \quad (3.17)$$

Burada C_n integral sabitidir. Bu durumda Denklem (3.15) aşağıdaki forma indirgenir:

$$\begin{aligned} \sigma_e(z)v_n^{(3)}(z) + \Big[\tau_e(z) + (n+1)\sigma_e'(z)\Big]v_n''(z) + \\ \Big[(\frac{n}{2}+1)\tau_e'(z) + \frac{n(n+2)}{3}\sigma_e''(z) + C_n\Big]v_n'(z) = 0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Bu durumda Denklem (3.10)'un $y(z) = y_n(z)$ şeklinde n. dereceden bir polinom çözümü vardır (Karayer et al., 2015a,b).

Buna göre genişletilmiş NU yöntemi ile, Denklem (3.11)'den elde edilen $h(z)$ polinomu ile Denklem (3.17)'den elde edilen $h_n(z)$ polinomu eşitlenerek problemin özdeğer çözümüne, Denklem (3.10)'un polinom çözümü ile Denklem (3.6)'dan elde edilen $\phi(z)$ fonksiyonu çarpılarak $\psi(z)$ özfonksiyon çözümüne ulaşılır. NU yönteminin genişletilmiş formu ile özdeğer ve özfonksiyon spektrumları elde edilebildiğine göre, önerilen yöntemin çalıştığı söylenebilir. Ancak önerilen bu analitik çözüm yönteminin uygulanabilirliği de araştırılmalıdır. Bunun için Bölüm-2.2'de anlatılan Heun, konfluent Heun, bikonfluent Heun ve trikonfluent Heun denklemleri bu çözüm yöntemi ile incelendi.

3.2 Genişletilmiş NU Yöntemi ile Heun Denkleminin Çözümü

Bölüm-2.2, Denklem (2.24)'te,

$$\frac{d^2w}{dz^2}+[\frac{\gamma}{z}+\frac{\delta}{z-1}+\frac{\epsilon}{z-a}]\frac{dw}{dz}+\frac{\alpha\beta z-q}{z(z-1)(z-a)}w=0.$$

ile verilen Heun denkleminin $z=0$, $z=1$, $z=\infty$ ve $z=a$ olmak üzere dört tane düzgün tekil noktası vardır ve bu denklem genişletilmiş NU yönteminin sınır koşullarını sağlamaktadır. Denklem (2.24) ve Denklem (3.1) karşılaştırıldığında, genelleştirilmiş NU yöntemindeki polinomlar ile Heun denklemindeki parametreler şu şekilde ilişkilendirilebilir:

$$\widetilde{\tau}_e(z) = \gamma(z-1)(z-a)+\delta z(z-a)+\epsilon z(z-1) \tag{3.19}$$

$$\sigma_e(z) = z(z-1)(z-a) \tag{3.20}$$

$$\widetilde{\sigma}_e(z) = (\alpha\beta z-q)z(z-1)(z-a). \tag{3.21}$$

Bu polinomlar Denklem (3.13)'te yerine yazıldığında;

$$\pi_e(z)=\frac{(1-\gamma)(z-1)(z-a)+(1-\delta)z(z-a)+(1-\epsilon)z(z-1)}{2}\pm \frac{1}{2}\Big\{[(1-\gamma)(z-1)(z-a)+(1-\delta)z(z-a)+(1-\epsilon)z(z-1)]^2- 4(\alpha\beta z-q)z(z-1)(z-a)+4g(z)z(z-1)(z-a)\Big\}^{\frac{1}{2}}$$

ifadesine ulaşılır. $\pi_e(z)$ ikinci dereceden bir polinom olarak tanımlandığından karekök içindeki ifade ikinci dereceden bir polinomun tam karesine eşit olmalıdır. Bunun için $g(z)$ polinomlarının alabileceği belirli değerlere karşılık gelen olası tüm $\pi_e(z)$ çözümleri elde edilmiştir:

$$g_1(z)=\alpha\beta z-q \qquad \text{için;} \tag{3.22}$$

$$\pi_{e1}(z)=(1-\gamma)(z-1)(z-a)+(1-\delta)z(z-a)+(1-\epsilon)z(z-1) \tag{3.23}$$

$$\pi_{e2}(z)=0 \tag{3.24}$$

$$g_2(z)=\alpha\beta z-q-(1-\gamma)[(1-\delta)(z-a)+(1-\epsilon)(z-1)] \qquad \text{için;} \tag{3.25}$$

$$\pi_{e3}(z) = (1-\gamma)(z-1)(z-a) \tag{3.26}$$
$$\pi_{e4}(z) = (1-\delta)z(z-a) + (1-\epsilon)z(z-1) \tag{3.27}$$

$$g_3(z) = \alpha\beta z - q - (1-\epsilon)[(1-\gamma)(z-1) + (1-\delta)z] \qquad \text{için;} \tag{3.28}$$

$$\pi_{e5}(z) = (1-\gamma)(z-1)(z-a) + (1-\delta)z(z-a) \tag{3.29}$$
$$\pi_{e6}(z) = (1-\epsilon)z(z-1) \tag{3.30}$$

$$g_4(z) = \alpha\beta z - q - (1-\delta)[(1-\gamma)(z-a) + (1-\epsilon)z] \qquad \text{için;} \tag{3.31}$$

$$\pi_{e7}(z) = (1-\gamma)(z-1)(z-a) + (1-\epsilon)z(z-1) \tag{3.32}$$
$$\pi_{e8}(z) = (1-\delta)z(z-a) \tag{3.33}$$

Denklem (3.23)'te verilen $\pi_{e1}(z)$ polinomu için çözüm detaylarıyla şu şekilde verilebilir: Denklem (3.11)'den $h(z)$ polinomu bulunur;

$$h(z) = \alpha\beta z - q + 2z[3-(\epsilon+\gamma+\delta)] - (1-\gamma)(a+1) - (1-\delta)a - (1-\epsilon), \tag{3.34}$$

ve Denklem (3.17)'den bulunan;

$$\begin{aligned} h_n(z) = -n[n+5-(\epsilon+\gamma+\delta)]z + \\ \frac{n}{2}[(a+1)(2-\gamma) + a(2-\delta) + (2-\epsilon) + \frac{2}{3}(n-1)(a+1)] + C_{n1}, \end{aligned} \tag{3.35}$$

$h_n(z)$ polinomu birbirine eşitlenirse n sayısına bağlı özdeğer denklemi ile q yardımcı parametresini veren çözümler elde edilir:

$$\alpha\beta = (n+2)(\epsilon+\gamma+\delta-n-3) \tag{3.36}$$
$$\begin{aligned} -q = \frac{n}{2}[(a+1)(2-\gamma) + a(2-\delta) + (2-\epsilon) + \frac{2}{3}(n-1)(a+1)] + \\ (1-\gamma)(a+1) + (1-\delta)a + (1-\epsilon) + C_{n1}. \end{aligned} \tag{3.37}$$

Özfonksiyon çözümü için ise önce Denklem (3.6)'dan $\phi_e(z)$ fonksiyonu elde edilir:

$$\phi_e(z) = z^{1-\gamma}(z-1)^{1-\delta}(z-a)^{1-\epsilon}. \tag{3.38}$$

Daha sonra da $h(z) = h_n(z)$ için Denklem (3.10)'un n. dereceden bir polinom çözümü elde edilir. Bu çözüm $p_1(z)$ ile gösterilirse;

$$\psi_1(z) = \phi_e(z)y(z) = z^{1-\gamma}(z-1)^{1-\delta}(z-a)^{1-\epsilon}p_1(z) \tag{3.39}$$

çözümüne ulaşılır. Bu çözüm VIII. sınıf Heun polinomlarına (Bkz. Çizelge-2.1) karşılık gelen çözümdür (Ronveaux, 1995).

Denklem (3.24-3.33)'te verilen tüm $\pi_e(z)$ polinomları için çözüm yolu aynı olduğundan özdeğer ve özfonksiyon sonuçları doğrudan verilebilir:

Denklem (3.24) için;

$$\alpha\beta = -n(\epsilon+\gamma+\delta+n-1) \tag{3.40}$$

$$-q = \frac{n}{2}[(a+1)\gamma + a\delta + \epsilon + \frac{2}{3}(n-1)(a+1)] + C_{n2} \tag{3.41}$$

$$\psi_2(z) = z^0(z-1)^0(z-a)^0p_2(z) \tag{3.42}$$

Bu çözüm I. sınıf Heun polinomlarına (Bkz. Çizelge-2.1) karşılık gelen çözümdür (Ronveaux, 1995).

Denklem (3.26) için;

$$\alpha\beta = (n+\delta+\epsilon)(\gamma-n-1) \tag{3.43}$$

$$\begin{aligned}-q = \frac{n}{2}[(a+1)(2-\gamma) + a\delta + \epsilon + \frac{2}{3}(n-1)(a+1)] + \\ (1-\gamma)(a\delta-\epsilon) + C_{n3}\end{aligned} \tag{3.44}$$

$$\psi_3(z) = z^{1-\gamma}(z-1)^0(z-a)^0p_3(z) \tag{3.45}$$

Bu çözüm II. sınıf Heun polinomlarına (Bkz. Çizelge-2.1) karşılık gelen çözümdür (Ronveaux, 1995).

Denklem (3.27) için;

$$\alpha\beta = (\delta+\epsilon-n-2)(\gamma+n+1) \tag{3.46}$$

$$\begin{aligned}-q = \frac{n}{2}[(a+1)\gamma + a(2-\delta) + (2-\epsilon) + \frac{2}{3}(n-1)(a+1)] + \\ \gamma[a(1-\delta)-(1-\epsilon)] + C_{n4}\end{aligned} \tag{3.47}$$

$$\psi_4(z) = z^0(z-1)^{1-\delta}(z-a)^{1-\epsilon}p_4(z) \tag{3.48}$$

Bu çözüm VII. sınıf Heun polinomlarına (Bkz. Çizelge-2.1) karşılık gelen çözümdür (Ronveaux, 1995).

Denklem (3.29) için;

$$\alpha\beta = (\delta+\gamma-n-2)(\epsilon+n+1) \tag{3.49}$$

$$-q = \frac{n}{2}[(a+1)(2-\gamma)+a(2-\delta)+\epsilon+\frac{2}{3}(n-1)(a+1)]+ \\ (1-\gamma)(a+\epsilon)+(1-\delta)a+C_{n5} \tag{3.50}$$

$$\psi_5(z) = z^{1-\gamma}(z-1)^{1-\delta}(z-a)^0 p_5(z) \tag{3.51}$$

Bu çözüm IV. sınıf Heun polinomlarına (Bkz. Çizelge-2.1) karşılık gelen çözümdür (Ronveaux, 1995).

Denklem (3.30) için;

$$\alpha\beta = (\delta+\gamma+n)(\epsilon-n-1) \tag{3.52}$$

$$-q = \frac{n}{2}[(a+1)\gamma+a\delta+\epsilon-2+\frac{2}{3}(n-1)(a+1)]- \\ (2-\gamma)(1-\epsilon)+C_{n6} \tag{3.53}$$

$$\psi_6(z) = z^0(z-1)^0(z-a)^{1-\epsilon}p_6(z) \tag{3.54}$$

Bu çözüm V. sınıf Heun polinomlarına (Bkz. Çizelge-2.1) karşılık gelen çözümdür (Ronveaux, 1995).

Denklem (3.32) için;

$$\alpha\beta = (\epsilon+\gamma-n-2)(\delta+n+1) \tag{3.55}$$

$$-q = \frac{n}{2}[(a+1)(2-\gamma)+a\delta+(2-\epsilon)+\frac{2}{3}(n-1)(a+1)]+ \\ (1-\gamma)(a+\delta)+(1-\epsilon)a+C_{n7} \tag{3.56}$$

$$\psi_7(z) = z^{1-\gamma}(z-1)^0(z-a)^{1-\epsilon}p_7(z) \tag{3.57}$$

Bu çözüm VI. sınıf Heun polinomlarına (Bkz. Çizelge-2.1) karşılık gelen çözümdür (Ronveaux, 1995).

Denklem (3.33) için;

$$\alpha\beta = (\epsilon + \gamma + n)(\delta - n - 1) \tag{3.58}$$

$$-q = \frac{n}{2}[(a+1)\gamma + a(2-\delta) + \epsilon + \frac{2}{3}(n-1)(a+1)] - (2-\gamma)(1-\delta)a + C_{n8} \tag{3.59}$$

$$\psi_8(z) = z^0(z-1)^{1-\delta}(z-a)^0 p_8(z) \tag{3.60}$$

Bu çözüm III. sınıf Heun polinomlarına (Bkz. Çizelge-2.1) karşılık gelen çözümdür (Ronveaux, 1995).

Heun denkleminin polinom çözümlerinin varlığı için α ya da β parametrelerinden birinin uygun olarak seçilmesi gerekmektedir. Kalan parametre ise Fuchsian bağıntısı yardımıyla seçilen parametre cinsinden yazılır. Örneğin VIII. sınıf Heun polinomları için $\alpha = \epsilon + \gamma + \delta - n - 3$ ve $\beta = n + 2$ olmalıdır (Ronveaux, 1995). Genişletilmiş NU yöntemi ile elde edilen çözümde, bu α ve β parametreleri doğrudan elde edilebilmektedir. Bu sonuçlar ayrıca ilgili sınıf polinomlarının varlığının göstergesidir (Karayer et al., 2015a). Heun denkleminin tüm polinom çözümleri genişletilmiş NU yöntemi ile elde edilebildiğine göre, Heun denklemi ile karşılaşılan herhangi bir fiziksel problemde bu çözümler doğrudan kullanılabilir olmalıdır. Bunun için 3-küre üzerinde Coulomb problemi ve küre üzerinde Coulomb itmesi ile etkileşen iki elektron problemi ele alındı.

3.2.1 3-küre üzerinde Coulomb problemi

Stefano Bellucci ve Vahagn Yeghikyan tarafında yazılan "The Coulomb problem on a 3-sphere and Heun polynomials" adlı makalede 3-küre üzerinde Coulomb potansiyeli için Schrödinger denkleminin çözümü analitik olarak verilmiştir (Bellucci and Yeghikyan, 2013). Genelleştirilmiş parabolik koordinatlarda $\xi = r+z, \eta = r-z, \tan\varphi = y/z$ olmak üzere bu sistem için Hamiltonyen;

$$H = \frac{2(1+\xi^2)\xi}{\xi+\eta}p_\xi^2 + \frac{2(1+\eta^2)\eta}{\xi+\eta}p_\eta^2 + \frac{p_\varphi^2}{2\xi\eta} - \frac{\gamma}{2}\frac{\sqrt{1-\xi^2}+\sqrt{1-\eta^2}}{\xi+\eta} \tag{3.61}$$

ile verilir. Burada φ_1 ve φ_2 yeni tanımlanan açısal koordinatlar olmak üzere $\xi = \sin\varphi_1, \eta = -\sin\varphi_2$ 'dir. Bu Hamiltonyen için $\hat{H}\psi = E\psi$ Schrödinger denklemi yazılır. Özfonksiyon için;

$$\psi(\xi,\eta,\varphi) = f(\xi)g(\eta)e^{im\varphi}, m \in N \tag{3.62}$$

dönüşümü kullanılır ve (φ_1, φ_2) açısal koordinatları yerine

$$z_1 = e^{i\varphi_1}, z_2 = e^{i\varphi_2} \Rightarrow \xi = i\frac{z_1^2 - 1}{2z_1}, \eta = -i\frac{z_2^2 - 1}{2z_2} \tag{3.63}$$

kompleks koordinatlar tanımlanır. Buna göre;

$$z_1(z_1^2 - 1)f'' + 2z_1^2 f' + (m^2\frac{z_1}{z_1^2 - 1} + E\frac{1 - z_1^2}{4z_1} + i\gamma\frac{1 + z_1^2}{4z_1} + \frac{\beta}{2})f = 0 \tag{3.64}$$

$$z_2(z_2^2 - 1)g'' + 2z_2^2 g' + (m^2\frac{z_2}{z_2^2 - 1} + E\frac{1 - z_2^2}{4z_2} + i\gamma\frac{1 + z_2^2}{4z_2} + \frac{\beta}{2})g = 0. \tag{3.65}$$

özdeş denklemleri elde edilir. Birinci denklem için;

$$f = (z^2 - 1)^{\frac{|m|}{2}} z^{\frac{1}{2}(1-\sqrt{1+E+i\gamma})} Hl \tag{3.66}$$

şeklinde bir çözüm aranırsa, aşağıdaki ikinci dereceden diferansiyel denkleme ulaşılır:

$$Hl'' + (\frac{\Gamma}{z} + \frac{\Delta}{z - 1} + \frac{\epsilon}{z + 1})Hl' + \frac{abz - q}{z(z - 1)(z + 1)}Hl = 0. \tag{3.67}$$

Bu denklem;

$$\begin{aligned} \Gamma &= 1 - \sqrt{1 + E + i\gamma}, \\ \Delta_m &= \epsilon_m =\mid m \mid +1 \\ a &= 1+ \mid m \mid + \frac{\sqrt{1 + E - i\gamma} - \sqrt{1 + E + i\gamma}}{2}, \\ b &= 1+ \mid m \mid - \frac{\sqrt{1 + E - i\gamma} + \sqrt{1 + E + i\gamma}}{2} \end{aligned} \tag{3.68}$$

olmak üzere, parametreler arasında Fuchsian bağıntısının sağlandığı Heun denklemidir ve çözümü $Hl(-1, q, a, b, \Gamma, \Delta, z)$ ile gösterilen Heun fonksiyonları olarak verilir. Çözüm için $\mid z \mid < 1$ için Maclaurin seri açılımı $\sum_{k=0}^{\infty} C_k x^k$ yapılır ve tekrarlama bağıntıları elde edilir. Çözümün $z = 1$ sınırında da analitik olması ve normalize edilebilir olması için seri $k = n + 1$ değerinde kesilir ve Heun polinomlarına ulaşılır. Buna göre $a = -n$ değeri elde edilir ve buradan da enerji spektrumuna ulaşılabilir:

$$E_n = (n+ \mid m \mid)(n+ \mid m \mid +2) - \frac{\gamma^2}{4(n+ \mid m \mid +1)^2}. \tag{3.69}$$

Aynı sonuç genişletilmiş NU yöntemi ile elde edilen özdeğer çözümlerin-den Denklem (3.40) ve Denklem (3.43)’ten şu şekilde elde edilebilir:

$$
\begin{aligned}
ab &= -n(\epsilon + \Gamma + \Delta + n - 1) \\
E_n &= (n+\mid m \mid)(n+\mid m \mid +2) - \frac{\gamma^2}{4(n+\mid m \mid +1)^2}
\end{aligned} \tag{3.70}
$$

$$
\begin{aligned}
ab &= (n + \Delta + \epsilon)(\Gamma - n - 1) \\
E_n &= (n+\mid m \mid)(n+\mid m \mid +2) - \frac{\gamma^2}{4(n+\mid m \mid +1)^2}
\end{aligned} \tag{3.71}
$$

3.2.2 Bir küre üzerinde Coulomb itmesi ile etkileşen iki elektron problemi

Zhang tarafından yazılan "Exact polynomial solutions of second order differential equations and their applications" isimli makalede, R yarıçaplı D boyutlu bir küre yüzeyinde sınırlandırılmış, Coulomb potansiyeli ile etkileşen iki elektron problemi incelenmiş ve $z = u/2R$ boyutsuz değişkeni tanımlanarak elektronlar arası dalga fonksiyonu için Heun denklemi elde edilmiştir (Zhang, 2012);

$$
\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left[\frac{\frac{1}{\gamma}}{z} + \frac{\frac{1}{2}\left(\delta - \frac{1}{\gamma}\right)}{z+1} + \frac{\frac{1}{2}\left(\delta - \frac{1}{\gamma}\right)}{z-1}\right]\frac{d\psi}{dz} + \frac{-4R^2Ez + 2R}{z(z+1)(z-1)}\psi = 0. \tag{3.72}
$$

Bu denklemin,

$$
\begin{aligned}
E &= \frac{n}{4R^2}(n + \delta - 1) \\
R &= -\frac{1}{2}[2(n-1) + \delta]\sum_{i=1}^{n} z_i
\end{aligned} \tag{3.73}
$$

koşulları sağlandığında

$$
\psi(z) = \prod_{i=1}^{n}(z - z_i). \tag{3.74}
$$

şeklinde bir polinom çözümü olduğu gösterilmiştir. Burada $z_1, z_2, ...z_n$;

$$
\sum_{j\neq i}^{n} \frac{2}{z_i - z_j} + \frac{\frac{1}{\gamma}}{z_i} + \frac{\frac{1}{2}\left(\delta - \frac{1}{\gamma}\right)}{z_i + 1} + \frac{\frac{1}{2}\left(\delta - \frac{1}{\gamma}\right)}{z_i - 1} = 0. \tag{3.75}
$$

ile verilen Bethe ansatz denklemlerinden elde edilmektedir. Buna ek olarak sırasıyla $n = 1$ ve $n = 2$ halleri için R yarıçapı ve E enerjisi, $R = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\delta}{\gamma}}$, $E = \gamma$

ve $R = \frac{1}{2}\sqrt{2(\delta+2)+\frac{4\delta+6}{\gamma}}$, $E = \frac{\gamma(\delta+1)}{\gamma(\delta+1+2\delta+3)}$ olarak hesaplanmıştır (Zhang, 2012).

Bu problemi genişletilmiş NU yöntemi ile çözebilmek için; Denklem (2.24)' teki γ, δ, ϵ, $\alpha\beta$, q,a parametrelerinin yerine sırasıyla $1/\gamma$, $1/2(\delta-1/\gamma)$, $1/2(\delta-1/\gamma)$, $-4R^2E$, $-2R$, -1 parametreleri yazılır ve Denklem (3.72) kolayca elde edilebilir. Bundan sonra sırasıyla Denklem (3.40) ve Denklem (3.41)'de yeni parametreler yazılarak R yarıçapı ve E enerjisine ulaşılabilir:

$$
\begin{aligned}
-4R^2E = -n(1/\gamma+1/2(\delta-1/\gamma)+1/2(\delta-1/\gamma)+n-1) \\
E = \frac{n}{4R^2}(n+\delta-1) \qquad (3.76) \\
2R = C_n. \qquad (3.77)
\end{aligned}
$$

$n=1$ için $q=2R$ yardımcı parametresi, Heun denkleminin polinom çözümlerinin varlığı için gerekli olan determinant çözümünü sağlamalıdır (Ciftci et al., 2010):

$$
\begin{vmatrix} q & -a\gamma \\ -\alpha\beta & q+a(\delta+\gamma)+\epsilon+\gamma. \end{vmatrix} = 0.
$$

İlgili determinant bu problem için düzenlenirse aşağıdaki forma indirgenir:

$$
\begin{vmatrix} C_1 & 1/\gamma \\ \delta & C_1 \end{vmatrix} = 0.
$$

Determinantın çözümünden C_1 sabiti;

$$
C_1^2 = \delta/\gamma. \qquad (3.78)
$$

olarak bulunur. Böylece $R = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\delta}{\gamma}}$ yarıçapı ve $E=\gamma$ enerjisi elde edilir ve bu sonuçlar ilgili referansta elde edilen sonuçlarla birebir uyuşmaktadır.

$n=2$ durumu için de benzer olarak, $q=2R$ yardımcı parametresi

$$
\begin{vmatrix} q & -a\gamma & 0 \\ -\alpha\beta & q+a(\delta+\gamma)+\epsilon+\gamma & -2a(1+\gamma) \\ 0 & -\alpha\beta-(\gamma+\epsilon+\delta) & q+2(a+1)+2(a(\delta+\gamma)+\epsilon+\gamma) \end{vmatrix} = 0
$$

determinantından bulunur. Yeni parametreler yerine yazıldığında bu determinant aşağıdaki forma indirgenir:

$$
\begin{vmatrix} C_2 & 1/\gamma & 0 \\ 2(1+\delta) & C_2 & 2(1+\gamma) \\ 0 & 2+\delta & C_2 \end{vmatrix} = 0.
$$

C_2 sabiti için bu determinantın çözümünden

$$C_2^2 = 2(\delta+2) + \frac{4\delta+6}{\gamma}. \tag{3.79}$$

bulunur. Buna göre $n = 2$ için literatür ile birebir uyuşan $R = \frac{1}{2}\sqrt{2(\delta+2)+\frac{4\delta+6}{\gamma}}$ yarıçapı ve $E = \frac{\gamma(\delta+1)}{\gamma(\delta+1+2\delta+3)}$ enerjisi bulunur.

Yukarıda verilen iki örnekte görüldüğü gibi, Heun denklemine indirgenen bir problem için kuvvet serisi çözümü aramak yerine, genişletilmiş NU yöntemi ile elde edilen çözümler takımını kullanmak problemin çözümünü önemli ölçüde kolaylaştırmaktadır.

3.3 Genişletilmiş NU Yöntemi ile Konfluent Heun Denkleminin Çözümü

Konfluent Heun denklemi (KHD), Heun denklemindeki $z = a$ ve $z = \infty$'daki tekil noktaların birleştirilmesi ile elde edilir ve en genel formu şu şekilde verilir (Ronveaux, 1995):

$$\psi''(z) + \left(\sum_{i=1}^{2}\frac{A_i}{z-z_i} + \sum_{j=1}^{2}\frac{E_{3j}}{(z-z_3)^j}\right)\psi'(z) +$$
$$\left(\sum_{i=1}^{2}\frac{C_i}{z-z_i} + \sum_{i=1}^{2}\frac{B_i}{(z-z_i)^2} + \sum_{j=1}^{4}\frac{D_{3j}}{(z-z_3)^j}\right)\psi(z) = 0 \tag{3.80}$$

Burada katsayılar ve tekil noktalar keyfi olarak seçilebilir. Denklem (3.80)'in en kolay formu

$$y''(z) + \left(\alpha + \frac{\beta+1}{z} + \frac{\gamma+1}{z-1}\right)y'(z) + \left(\frac{\mu}{z} + \frac{\nu}{z-1}\right)y(z) = 0. \tag{3.81}$$

ile verilir (Ciftci et al., 2010). Bu denklemin $z = 0$ ve $z = 1$'de iki tane düzgün tekil noktası ve $z = \infty$'da düzgün olmayan bir tekil noktası vardır. Denklem (3.81)'in $z = 0$ tekilliği civarındaki çözümü konfluent Heun fonksiyonları ile verilir (Fiziev, 2010);

$$H_C(\alpha,\beta,\gamma,\delta,\eta,z) = \sum_{n=0}^{\infty} v_n(\alpha,\beta,\gamma,\delta,\eta,z)z^n, \tag{3.82}$$

burada

$$
\begin{aligned}
\delta &= \mu + \nu - \frac{\alpha}{2}(\beta + \gamma + 2) \\
\eta &= \frac{\alpha}{2}(\beta + 1) - \mu - \frac{1}{2}(\beta + \gamma + \beta\gamma)
\end{aligned} \tag{3.83}
$$

olur ve v_n katsayıları tekrarlama bağıntısından elde edilir (Ronveaux, 1995). Bu çözümün n. dereceden bir konfluent Heun polinomuna indirgenmesi için aşağıdaki koşullar sağlanmalıdır:

$$
\mu + \nu = -n\alpha \tag{3.84}
$$

$$
\begin{vmatrix}
\mu - q_1 & (1+\beta) & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
n\alpha & \mu - q_2 + \alpha & 2(2+\beta) & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
0 & (n-1)\alpha & \mu - q_3 + 2\alpha & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & \mu - q_{n-1} + (n-2)\alpha & (n-1)(n-1+\beta) & 0 \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 2\alpha & \mu - q_n + (n-1)\alpha & n(n+\beta) \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \alpha & \mu - q_{n+1} + n\alpha
\end{vmatrix} = 0.
$$

Bu determinant $(n+1)$x$(n+1)$ boyutlu tridiagonal bir determinanttır (Downing, 2013).

Denklem (3.81) ile verilen KHD genişletilmiş NU yöntemi ile analitik olarak çözülebilir. Bunun için genişletilmiş NU yönteminin temel denklemi ile KHD karşılaştırılır ve katsayı polinomları ile KHD'ndeki parametreler ilişkilendirilir:

$$
\widetilde{\tau}_e(z) = \alpha z(z-1) + (\beta+1)(z-1) + (\gamma+1)z \tag{3.85}
$$

$$
\sigma_e(z) = z(z-1) \tag{3.86}
$$

$$
\widetilde{\sigma}_e(z) = [(\mu+\nu)z - \mu]z(z-1). \tag{3.87}
$$

Bu polinomlar Denklem (3.13)'te yerine yazıldığında, $\pi_e(z)$ polinomu için;

$$
\pi_e(z) = \frac{-\alpha z(z-1) - \beta(z-1) - \gamma z}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(-\alpha z(z-1) - \beta(z-1) - \gamma z)^2 - 4[(\mu+\nu)z - \mu]z(z-1) + 4g(z)z(z-1)} \tag{3.88}
$$

eşitliği bulunur. $\pi_e(z)$ polinomu ikinci dereceden bir polinom olduğundan, buradaki karekök içindeki ifade ikinci dereceden bir polinomun tam karesine eşit olmalıdır. Bu koşulun sağlanması için seçilen $g(z)$ polinomları ve bu polinomlar için hesaplanan $\pi_e(z)$ polinomları şu şekilde listelenebilir:

$g_1(z) = (\mu + \nu)z - \mu$ için;

$$\pi_{e1}(z) = -\alpha z(z-1) - \beta(z-1) - \gamma z \tag{3.89}$$

$$\pi_{e2}(z) = 0 \tag{3.90}$$

$g_2(z) = (\mu + \nu - \gamma\alpha)z - \mu - \gamma\beta$ için;

$$\pi_{e3}(z) = -\gamma z \tag{3.91}$$

$$\pi_{e4}(z) = -\alpha z(z-1) - \beta(z-1) \tag{3.92}$$

$g_3(z) = (\mu + \nu - \alpha\beta - \gamma\alpha)z - \mu - \alpha\beta$ için;

$$\pi_{e5}(z) = -\beta(z-1) - \gamma z \tag{3.93}$$

$$\pi_{e6}(z) = -\alpha z(z-1) \tag{3.94}$$

$g_4(z) = (\mu + \nu - \alpha\beta)z - \mu + \alpha\beta - \beta\gamma$ için;

$$\pi_{e7}(z) = -\beta(z-1) \tag{3.95}$$

$$\pi_{e8}(z) = -\alpha z(z-1) - \gamma z \tag{3.96}$$

Burada elde edilen tüm $\pi_e(z)$ polinomları için çözüm aranmalıdır. Örnek olarak, Denklem (3.89)'daki $\pi_{e1}(z)$ polinomu için çözüm detayları ile verilebilir: Denklem (3.11)'den $h(z)$ polinomu bulunur;

$$h(z) = (\mu + \nu - 2\alpha)z - \mu + \alpha - \beta - \gamma. \tag{3.97}$$

Bölüm-3.1'de anlatıldığı gibi Denklem (3.15)'teki $v_n(z)$'nin katsayısı sıfır olduğunda $h_n(z)$ polinomuna ulaşılır. Ancak KHD'nde $\sigma(z)$ ikinci dereceden bir polinom olduğundan $v_n(z)$'nin katsayısındaki $\sigma^{(3)}(z)$ terimi sıfır olacağından $h_n(z)$ polinomu burada;

$$h_n(z) = -\frac{n}{2}\tau'(z) + C_n = -\frac{n}{2}(2\alpha z + 2 - \alpha + \beta + \gamma) + C_n. \tag{3.98}$$

olarak elde edilir. Denklem (3.97) ile Denklem (3.98)'in sağ tarafları eşitlendiğinde, özdeğer çözümü ve μ parametresi (bir integral sabiti kadar farkla) belirlenir:

$$\mu + \nu - 2\alpha = n\alpha \tag{3.99}$$
$$-\mu = -\frac{n}{2}(2 + \alpha + \beta - \gamma) - \alpha + \beta + \gamma + C_{n1}. \tag{3.100}$$

KHD'nin özfonksiyon çözümü için ise $\phi_e(z)$ ve polinom çözümü sırasıyla Denklem (3.6) ile Denklem (3.15)'ten bulunur. $\phi_e(z)$ fonksiyonu;

$$\phi_e(z) = e^{-\alpha z} z^{-\beta}(z-1)^{-\gamma}. \tag{3.101}$$

Polinom çözümü de $p_1(z)$ ile gösterilirse; Denklem (3.2)'den özfonksiyon çözümü şu şekilde elde edilir:

$$\psi_1(z) = \phi_e(z) y(z) = e^{-\alpha z} z^{-\beta}(z-1)^{-\gamma} p_1(z). \tag{3.102}$$

Denklem (3.90-3.96)'daki $\pi_e(z)$ polinomları için de aynı yol izlenerek seçilen özdeğer ve özfonksiyon çözümleri belirlenebilir:

Denklem (3.90) için;

$$\mu + \nu = -n\alpha \tag{3.103}$$
$$\mu = \frac{n}{2}(2 - \alpha + \beta + \gamma) + C_{n2} \tag{3.104}$$
$$\psi_2(z) = p_2(z). \tag{3.105}$$

Denklem (3.91) için;

$$\mu + \nu - \gamma\alpha = -n\alpha \tag{3.106}$$
$$-\mu = -\frac{n}{2}(2 - \alpha + \beta - \gamma) + \gamma(1 + \beta) + C_{n3} \tag{3.107}$$
$$\psi_3(z) = (z-1)^{-\gamma} p_3(z). \tag{3.108}$$

Denklem (3.92) için;

$$\mu + \nu - \gamma\alpha - 2\alpha = n\alpha \tag{3.109}$$
$$-\mu = -\frac{n}{2}(2 + \alpha - \beta + \gamma) - \alpha + \beta + \gamma\beta + C_{n4} \tag{3.110}$$
$$\psi_4(z) = e^{-\alpha z} z^{-\beta} p_4(z). \tag{3.111}$$

Denklem (3.93) için;

$$\mu+\nu-\gamma\alpha-\beta\alpha=-n\alpha \tag{3.112}$$
$$-\mu=-\frac{n}{2}(2+\alpha-\beta+\gamma)-\alpha+\beta+\gamma\beta+C_{n5} \tag{3.113}$$
$$\psi_5(z)=z^{-\beta}(z-1)^{-\gamma}p_5(z). \tag{3.114}$$

Denklem (3.94) için;

$$\mu+\nu-\gamma\alpha-\beta\alpha-2\alpha=n\alpha \tag{3.115}$$
$$-\mu=-\frac{n}{2}(2+\alpha+\beta+\gamma)-\alpha-\alpha\beta+C_{n6} \tag{3.116}$$
$$\psi_6(z)=e^{-\alpha z}p_6(z). \tag{3.117}$$

Denklem (3.95) için;

$$\mu+\nu-\beta\alpha=n\alpha \tag{3.118}$$
$$-\mu=-\frac{n}{2}(2+\alpha-\beta+\gamma)-\alpha\beta+\beta(\gamma+1)+C_{n7} \tag{3.119}$$
$$\psi_7(z)=z^{-\beta}p_7(z). \tag{3.120}$$

Denklem (3.96) için;

$$\mu+\nu-\beta\alpha-2\alpha=n\alpha \tag{3.121}$$
$$-\mu=-\frac{n}{2}(2+\alpha+\beta-\gamma)-\alpha-\alpha\beta+\gamma(1+\beta)+C_{n8} \tag{3.122}$$
$$\psi_8(z)=e^{-\alpha z}(z-1)^{-\gamma}p_8(z). \tag{3.123}$$

Buradan görüldüğü gibi seri çözümü yapılarak bulunan Denklem (3.84)'teki koşul ile genişletilmiş NU yöntemi ile elde edilen Denklem (3.103)'teki sonuç aynıdır. Bu durumda KHD'nin genişletilmiş NU yöntemi ile çözümü parametrik olarak elde edilmiş olur ve bu çözüm fiziksel uygulamalarda karşılaşılan KHD için kolaylık sağlamaktadır. Öyle ki çözüm aranacak denklem uygun bir dönüşüm ile KHD'ne indirgenebiliyorsa, çözüm yeni parametreler cinsinden düzenlenir ve sonuca kısa ve kolay bir yoldan ulaşılır (Karayer et al., 2015a).

3.3.1 Hiperbolik çift-kuyu potansiyeli

$V(x) = -V_0 \frac{sinh^4(x/d)}{cosh^6(x/d)}$ potansiyelinde hareket eden kütlesi m, enerjisi E olan bir parçacık için, bir boyutlu Schrödinger denklemi;

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + \left(\epsilon d^2 + U_0 d^2 \frac{sinh^4(z)}{cosh^6(z)}\right)\psi(z) = 0 \tag{3.124}$$

ile verilir. Burada $\epsilon = 2mE/\hbar^2$, $U_0 = 2mV_0/\hbar^2$ ve $z = x/d$'dır. Bu denklemin KHD'ne dönüştürülebileceği literatürde çalışılmıştır (Downing, 2013):

$$\frac{d^2}{d\xi^2}y(\xi) + \left(\alpha + \frac{\beta+1}{\xi} + \frac{\gamma+1}{\xi-1}\right)\frac{d}{d\xi}y(\xi) + \left(\frac{\mu}{\xi} + \frac{\nu}{\xi-1}\right)y(\xi) = 0. \tag{3.125}$$

Burada $\alpha = -d\sqrt{U_0}$, $\beta = -id\sqrt{\epsilon}$, $\gamma = -1/2$, $\mu = \frac{1}{4}\big(\alpha(\alpha+2)+2\alpha\beta-\beta(\beta-1)\big)$, $\nu = \frac{1}{4}\big(\alpha+\beta(\beta+1)\big)$'dır. İlgili referansta Denklem (3.125)'in N. dereceden bir polinom çözümünü elde etmek için, Bölüm-3.3'ün ilk paragrafında anlatılan yol izlenmiş ve sınır koşulları belirlendikten sonra simetrik (s) ve antisimetrik (a) özdeğer spektrumları şu şekilde elde edilmiştir:

$$\epsilon_N^s = -\frac{1}{4d^2}\left(3 + 4N - d\sqrt{U_0}\right)^2 \tag{3.126}$$

$$\epsilon_N^a = -\frac{1}{4d^2}\left(5 + 4N - d\sqrt{U_0}\right)^2. \tag{3.127}$$

Bu problem daha basit bir yolla genişletilmiş NU yöntemi kullanılarak çözülebilir. Denklem (3.125) ve Denklem (3.81) aynı formda olduklarından, Bölüm-3.3'te genişletilmiş NU yöntemi ile elde edilen sonuçlar bu potansiyelin özdeğer spektrumu çözümüne doğrudan uygulanabilir. Buna göre simetrik enerji spektrumu Denklem (3.103) veya Denklem (3.118)'den bulunabilir. Bunun için, bu problemde tanımlanan μ ve ν parametreleri, Denklem (3.103)'te yazılır;

$$\frac{\alpha}{4}(\alpha + 3 + 2\beta) = -n\alpha. \tag{3.128}$$

Burada $\alpha = -d\sqrt{U_0}$ ve $\beta = -id\sqrt{\epsilon}$ eşitlikleri kullanılarak simetrik özdeğer spektrumu kolaylıkla elde edilir:

$$\epsilon_N^s = -\frac{1}{4d^2}\left(3 + 4N - d\sqrt{U_0}\right)^2. \tag{3.129}$$

Denklem (3.104)'te genişletilmiş NU yöntemiyle elde edilen μ parametresi, bu problemde $N = 1$ için şu şekilde bulunur:

$$\mu = \frac{1}{2}(2 - \alpha + \beta + \gamma) + C_{12}. \tag{3.130}$$

Bu sonuçtan görüldüğü gibi μ parametresi, C_{12} bir integral sabiti kadar farkla bulunmuş olur. Bölüm-3.3'te verilen determinant $N = 1$ durumu için düzenlenir ve çözülürse μ parametresi;

$$\mu = \frac{1}{2}(2 - \alpha + \beta + \gamma) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(2 - \alpha + \beta + \gamma)^2 - 4\alpha(1 + \beta)}. \tag{3.131}$$

olarak bulunur. Buna göre C_{12} integral sabiti $\pm\frac{1}{2}\sqrt{(2 - \alpha + \beta + \gamma)^2 - 4\alpha(1 + \beta)}$ ifadesine eşit olduğunda μ parametresi tam olarak elde edilmektedir.

Aynı şekilde antisimetrik enerji spektrumu da Denklem (3.106) veya Denklem (3.112)'den bulunabilir. μ ve ν parametreleri Denklem (3.106)'de yerine yazıldığında;

$$\frac{\alpha}{4}(\alpha + 3 + 2\beta) - \gamma\alpha = -n\alpha. \tag{3.132}$$

$$\epsilon_N^a = -\frac{1}{4d^2}\left(5 + 4N - d\sqrt{U_0}\right)^2. \tag{3.133}$$

sonucuna ulaşılır. Buna göre hiperbolik çift-kuyu potansiyelindeki bir parçacığın enerji spektrumu için genişletilmiş NU yöntemiyle literatürdeki sonuçlar ile birebir uyuşan sonuçlar bulunabilmektedir (Karayer et al., 2015a).

3.4 Genişletilmiş NU Yöntemi ile Bikonfluent Heun Denkleminin Çözümü

Bikonfluent Heun denklemi (BHD), Heun denkleminin iki sonlu tekil noktasının, sonsuzdaki tekil nokta ile birleştirilmesi ile türetilir ve en genel formu şu şekilde verilir (Ronveaux, 1995):

$$xy'' + (1 + \alpha - \beta x - 2x^2)y' + \left((\gamma - \alpha - 2)x - \frac{1}{2}[\delta + (1 + \alpha)\beta]\right)y = 0 \tag{3.134}$$

Bu denklem, genişletilmiş NU yönteminin sınır koşullarını sağladığından bu yöntem ile çözülebilir olmalıdır. Buna göre genişletilmiş NU yönteminin temel denklemi ile BHD'nin genel formu karşılaştırılır ve Denklem (3.1)'deki katsayı polinomlar ile Denklem (3.134)'teki parametreler aşağıdaki gibi ilişkilendirilir:

$$\widetilde{\tau}_e(x) = 1+\alpha-\beta x-2x^2 \tag{3.135}$$

$$\sigma_e(x) = x \tag{3.136}$$

$$\widetilde{\sigma}_e(x) = (\gamma-\alpha-2)x^2-\frac{1}{2}[\delta+(1+\alpha)\beta]x. \tag{3.137}$$

Bu polinomlar Denklem (3.13)'te yerine yazılırsa $\pi_e(z)$ polinomu elde edilir:

$$\pi_e(x) = \frac{2x^2+\beta x-\alpha}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(2x^2+\beta x-\alpha)^2-4\big((\gamma-\alpha-2)x^2-\frac{1}{2}[\delta+(1+\alpha)\beta]x\big)+4g(x)x} \tag{3.138}$$

$\pi_e(x)$ polinomunun ikinci dereceden bir polinom olması gerekliliği için, karekök işareti altındaki ifade ikinci dereceden bir polinomun tam karesine eşit olmalıdır. Bu koşulun sağlanması için, uygun $g(x)$ polinomları seçilmelidir. Seçilen $g(x)$ polinomları ve bu polinomlar için hesaplanan $\pi_e(x)$ polinomları aşağıdaki gibi listelenebilir;

$g_1(x) = (\gamma-\alpha-2)x-\frac{1}{2}[\delta+(1+\alpha)\beta]$ için;

$$\pi_{e1}(x) = 2x^2+\beta x-\alpha \tag{3.139}$$

$$\pi_{e2}(x) = 0 \tag{3.140}$$

$g_2(x) = (\gamma-\alpha-2)x-\frac{1}{2}[\delta+(1+\alpha)\beta]+(2x+\beta)\alpha$ için;

$$\pi_{e3}(x) = 2x^2+\beta x \tag{3.141}$$

$$\pi_{e4}(x) = -\alpha \tag{3.142}$$

$g_3(x) = (\gamma-\alpha-2)x-\frac{1}{2}[\delta+(1+\alpha)\beta]-2x(\beta x-\alpha)$ için;

$$\pi_{e5}(x) = 2x^2 \tag{3.143}$$

$$\pi_{e6}(x) = \beta x-\alpha \tag{3.144}$$

$g_4(x) = (\gamma-\alpha-2)x-\frac{1}{2}[\delta+(1+\alpha)\beta]-(2x^2-\alpha)\beta$ için;

$$\pi_{e7}(x) = 2x^2-\alpha \tag{3.145}$$

$$\pi_{e8}(x) = \beta x \tag{3.146}$$

Burada listelenen tüm $\pi_{e1}(x)$ polinomları için çözüm aranır. Örnek olarak

Denklem (3.139)'da bulunan $\pi_{e1}(x)$ polinomu için analitik çözüm verilebilir: Denklem (3.11)'den $h(x)$ polinomu bulunur;

$$h(x) = (\gamma - \alpha + 2)x - \frac{1}{2}[\delta + (1+\alpha)\beta] + \beta. \tag{3.147}$$

Denklem (3.15)'te $v_n(x)$'nin katsayısı sıfır olduğunda $h_n(x)$ polinomu şu şekilde bulunur:

$$h_n(x) = -\frac{n}{2}\tau'(x) + C_n = -2nx - \frac{n\beta}{2} + C_n. \tag{3.148}$$

Denklem (3.147) ve Denklem (3.148)'in sağ tarafları eşitlendiğinde, özdeğer denklemi ve δ parametresine ulaşılabilir:

$$\gamma - \alpha + 2 = -2n \tag{3.149}$$

$$\delta = (n+1-\alpha)\beta - 2C_{n1}. \tag{3.150}$$

BHD'nin özfonksiyon çözümü için $\phi_e(x)$ ve çözümün polinom kısmı sırasıyla Denklem (3.6) ve Denklem (3.10)'dan bulunur. Buna göre $\phi_e(x)$ fonksiyonu;

$$\phi_e(x) = e^{x^2} e^{\beta x} x^{-\alpha} \tag{3.151}$$

olur. Özfonksiyon çözümünün polinom çarpanı ise $p_1(x)$ gibi bir polinoma eşit ise, Denklem (3.2) kullanılarak özfonksiyon spektrumuna ulaşılabilir:

$$\psi_1(x) = \phi_e(x)y(x) = e^{x^2} e^{\beta x} x^{-\alpha} p_1(x). \tag{3.152}$$

Denklem (3.140-3.146)'da verilen diğer $\pi_e(x)$ polinomları için de yukarıdaki işlemler yapılarak aşağıdaki özdeğer ve özfonksiyon çözümlerine ulaşılır:

Denklem (3.140) için;

$$\gamma - \alpha - 2 = 2n \tag{3.153}$$

$$\delta = -(n+1+\alpha)\beta - 2C_{n2} \tag{3.154}$$

$$\psi_2(x) = p_2(x). \tag{3.155}$$

Denklem (3.141) için;

$$\gamma + \alpha + 2 = -2n \tag{3.156}$$

$$\delta = (n+1+\alpha)\beta - 2C_{n3} \tag{3.157}$$

$$\psi_3(x) = e^{x^2} e^{\beta x} p_3(x). \tag{3.158}$$

Denklem (3.142) için;

$$\gamma + \alpha - 2 = 2n \tag{3.159}$$

$$\delta = (-n - 1 + \alpha)\beta - 2C_{n4} \tag{3.160}$$

$$\psi_4(x) = x^{-\alpha} p_4(x). \tag{3.161}$$

Denklem (3.143) için;

$$2\beta = 0 \tag{3.162}$$

$$\gamma + \alpha + 2 = -2n \tag{3.163}$$

$$-\delta = 2C_{n5} \tag{3.164}$$

$$\psi_5(x) = e^{x^2} p_5(x). \tag{3.165}$$

Denklem (3.144) için;

$$2\beta = 0 \tag{3.166}$$

$$\gamma + \alpha - 2 = 2n \tag{3.167}$$

$$-\delta = 2C_{n6} \tag{3.168}$$

$$\psi_6(x) = x^{-\alpha} p_6(x). \tag{3.169}$$

Denklem (3.145) için;

$$2\beta = 0 \tag{3.170}$$

$$\gamma - \alpha + 2 = -2n \tag{3.171}$$

$$-\delta = 2C_{n7} \tag{3.172}$$

$$\psi_7(x) = e^{x^2} x^{-\alpha} p_7(x). \tag{3.173}$$

Denklem (3.146) için;

$$2\beta = 0 \tag{3.174}$$

$$\gamma - \alpha - 2 = 2n \tag{3.175}$$

$$-\delta = 2C_{n8} \tag{3.176}$$

$$\psi_8(x) = e^{\beta x} p_8(x) = p_8(x). \tag{3.177}$$

Burada $i = 2, 3, ..., 8$ olmak üzere C_{ni} ve $p_i(x)$ integral sabitleri ve n. dereceden polinomları göstermektedir (Karayer et al., 2015b).

Burada elde edilen sonuçların doğrudan kullanılabileceği fiziksel bir uygulama olarak iki elektronlu kuantum dot modeli problemi incelenmiştir.

3.4.1 İki-elektronlu kuantum dot modeli

Literatürde, frekansı Ω olan dış bir harmonik osilatör potansiyelinde hapsolmuş iki elektron problemi için radyal Schrödinger denkleminin,

$$xy''(x) + (1 + \alpha - 2x^2)y'(x) + \left(-\frac{\delta}{2} + (\gamma - \alpha - 2)x \right) y(x) = 0 \quad (3.178)$$

ile verilen BHD'ne eşdeğer olduğu gösterilmiş ve bu eşdeğerlik kullanılarak kuvvet serisi yöntemi ile özdeğer ve özfonksiyon çözümlerine ulaşılmıştır (Caruso et al., 2014). Burada $\alpha = (2l + 1)\sqrt{w} - 1$, $\gamma = \frac{2\eta}{w} + (2l + 1)(\sqrt{w} - 1)$, $\delta = -\frac{1}{\sqrt{w}}$'dir ve w, η, l parametreleri sırasıyla frekans, enerji, açısal momentum kuantum sayısına karşılık gelmektedir.

Denklem (3.134) ile verilen BHD, $\beta = 0$ için Denklem (3.178)'e indirgenmektedir. Buna göre, bu problemi genişletilmiş NU yöntemi ile tekrar çözmek yerine, Bölüm-3.4'de elde edilen BHD'nin özdurum çözümleri $\beta = 0$ için düzenlenir ve aşağıdaki sonuçlara kolaylıkla ulaşılır;

$\beta = 0$ için Denklem (3.139) veya Denklem (3.145)'ten;

$$\gamma - \alpha + 2 = -2n \quad (3.179)$$

$$\delta = -2C_{n1} \quad (3.180)$$

$$\psi_1(x) = e^{x^2} x^{-\alpha} p_1(x). \quad (3.181)$$

$\beta = 0$ için Denklem (3.140) veya Denklem (3.146)'dan;

$$\gamma - \alpha - 2 = 2n \quad (3.182)$$

$$\delta = -2C_{n2} \quad (3.183)$$

$$\psi_2(x) = p_2(x). \quad (3.184)$$

$\beta = 0$ için Denklem (3.141) veya Denklem (3.143)'ten;

$$\gamma + \alpha + 2 = -2n \quad (3.185)$$

$$\delta = -2C_{n3} \quad (3.186)$$

$$\psi_3(x) = e^{x^2} p_3(x). \quad (3.187)$$

$\beta = 0$ için Denklem (3.142) veya Denklem (3.144)'ten;

$$\gamma + \alpha - 2 = 2n \tag{3.188}$$

$$\delta = -2C_{n4} \tag{3.189}$$

$$\psi_4(x) = x^{-\alpha} p_4(x). \tag{3.190}$$

Kuvvet serisi yönteminde, $\gamma - \alpha - 2 = 2n$ olduğunda n. dereceden bir polinomun varlığından bahsedilebilir (Caruso et al., 2014). Tekrarlama bağıntısından bulunan bu koşul genişletilmiş NU yöntemi ile Denklem (3.182)'den doğrudan elde edilir ve bu denklem enerji ile frekans arasında fiziksel bir bağıntıya karşılık gelir:

$$2\frac{\eta}{w} - 2l - 2 = 2n$$
$$\eta = (n + l + 1)w. \tag{3.191}$$

3.5 Genişletilmiş NU Yöntemi ile Trikonfluent Heun Denkleminin Çözümü

Trikonfluent Heun denklemi (THD)'nin genel formu;

$$y'' - (\gamma + 3x^2)y' + [\alpha + (\beta - 3)x]y = 0 \tag{3.192}$$

ile verilir. Bu denklem $x = \infty$'da düzgün olmayan bir tekil noktaya sahiptir ve hiçbir sonlu tekil noktası yoktur.

THD'ni genişletilmiş NU yöntemi ile çözebilmek için THD ile genişletilmiş NU yönteminin temel denklemi karşılaştırılır ve Denklem (3.1)'deki katsayı polinomları ile THD'ndeki parametreler ilişkilendirilir:

$$\widetilde{\tau}_e(x) = -\gamma - 3x^2 \tag{3.193}$$

$$\sigma_e(x) = 1 \tag{3.194}$$

$$\widetilde{\sigma}_e(x) = \alpha + (\beta - 3)x. \tag{3.195}$$

Buna göre polinomların dereceleri genişletilmiş NU yönteminin sınır koşullarını sağladığından, Heun denkleminin trikonfluent formu da genişletilmiş NU yöntemi ile çözülebilir. Bu polinomlar Denklem (3.13)'te yerine yazıldığında

$\pi_e(z)$ polinomu bulunur;

$$\pi_e(x) = \frac{\gamma + 3x^2}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\gamma + 3x^2)^2 - 4[\alpha + (\beta - 3)x] + 4g(x)}. \qquad (3.196)$$

$\pi_e(x)$ polinomu ikinci dereceden bir polinom olduğundan karekök içindeki $g(x)$ polinomlarının, bu koşulu sağlayacak polinomlar olarak seçilmeleri gerekir. Seçilen bu polinomlar ve bunlara karşılık gelen $\pi_e(x)$ polinomları aşağıdaki gibi listelenebilir.

$g_1(x) = \alpha + (\beta - 3)x$ için;

$$\pi_{e1}(x) = \gamma + 3x^2 \qquad (3.197)$$

$$\pi_{e2}(x) = 0 \qquad (3.198)$$

$g_2(x) = \alpha + (\beta - 3)x - 12\gamma x^2$ için;

$$\pi_{e3}(x) = \gamma \qquad (3.199)$$

$$\pi_{e4}(x) = 3x^2 \qquad (3.200)$$

Denklem (3.197)'deki $\pi_{e1}(x)$ polinomu için çözüm şu şekilde verilir: Denklem (3.11)'den $h(x)$ polinomu bulunur;

$$h(x) = \alpha + (\beta + 3)x. \qquad (3.201)$$

Denklem (3.15) THD'ndeki parametreler için düzenlenir ve $v_n(x)$'in katsayısı sıfır alınırsa, $h_n(x)$ polinomu;

$$h_n(x) = -\frac{n}{2}\tau'(x) + C_n = -3nx + C_n \qquad (3.202)$$

olur. Denklem (3.201) ve Denklem (3.202)'nin sağ tarafları eşitlendiğinde özdeğer çözümü ve integral sabiti C_{n1}'e eşit olan α parametresine ulaşılır:

$$\beta + 3 = -3n \qquad (3.203)$$

$$\alpha = C_{n1}. \qquad (3.204)$$

THD'nin özfonksiyon çözümü için Denklem (3.6)'dan $\phi_e(x)$ fonksiyonu;

$$\phi_e(x) = e^{x^3} e^{\gamma x}. \qquad (3.205)$$

ve Denklem (3.15)'ten çözümün polinom kısmı bulunur. Polinom çözümü $p_1(x)$

ile gösterilirse, Denklem (3.2)'den özfonksiyon çözümüne tam olarak ulaşılabilir:

$$\psi_1(x) = \phi_e(x)y(x) = e^{x^3}e^{\gamma x}p_1(x). \tag{3.206}$$

Denklem (3.198-3.200)'de verilen diğer $\pi_e(x)$ polinomları için özdeğer ve özfonksiyon çözümlerine ulaşmak için de benzer işlemler yapıldığında aşağıdaki sonuçlara ulaşılır:

Denklem (3.198) için;

$$\beta - 3 = 3n \tag{3.207}$$

$$\alpha = C_{n2} \tag{3.208}$$

$$\psi_2(x) = p_2(x). \tag{3.209}$$

Denklem (3.199) için;

$$12\gamma = 0 \tag{3.210}$$

$$\beta - 3 = 3n \tag{3.211}$$

$$\alpha = C_{n3} \tag{3.212}$$

$$\psi_3(x) = e^{\gamma x}p_3(x) = p_3(x). \tag{3.213}$$

Denklem (3.200) için;

$$12\gamma = 0 \tag{3.214}$$

$$\beta + 3 = -3n \tag{3.215}$$

$$\alpha = C_{n4} \tag{3.216}$$

$$\psi_4(x) = e^{x^3}p_4(x). \tag{3.217}$$

Burada $i = 2, 3, 4$ olmak üzere C_{ni} ve $p_i(x)$ sırasıyla integral sabitleri ve n. dereceden olan polinomları göstermektedir (Karayer et al., 2015b).

4. KESİRSEL NIKIFOROV-UVAROV YÖNTEMİ

4.1 Kesirsel Matematiğe Giriş

Kesirsel matematik alanında incelenen tam sayı olmayan mertebeden türev ve integral operatörleri teorisinin başlangıcında n katlı Cauchy integrali yer almaktadır:

$$\begin{aligned} J^n y(x) &= \int_0^x \int_0^{x_{n-1}} ... \int_0^{x_1} y(x_0)dx_0...dx_{n-2}dx_{n-1} \\ &= \frac{1}{(n-1)!}\int_0^x \frac{1}{(x-t)^{1-n}} y(t)dt, \quad n \in N, x \in R_+ \end{aligned} \tag{4.1}$$

Burada $J^0 y(x) = y(x)$ olmak üzere J^n; n katlı integral operatörüdür. $(n-1)!$ kesikli faktoriyeli, $n \in N$ olmak üzere $(n-1)! = \Gamma(n)$ ifadesini sağlayan sürekli Gamma fonksiyonu ile yer değiştirdiğinde tam sayı olmayan mertebeden integral tanımı elde edilir:

$$J^\alpha y(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_0^x \frac{1}{(x-t)^{1-\alpha}} y(t)dt, \quad \alpha, x \in R_+, \tag{4.2}$$

Kesirsel matematiğin birçok önemli özelliği, tam sayı mertebeden türev ve tam sayı olmayan mertebeden integral operatörlerinin birbirine bağlanması ile kolaylıkla elde edilebilen tam sayı olmayan mertebeden türevler ile belirlenir:

$$D^\alpha y(x) = D^n J^{n-\alpha} y(x) \qquad ya\, da \qquad D_*^\alpha y(x) = J^{n-\alpha} D^n y(x). \tag{4.3}$$

Burada $\alpha \leq n < \alpha + 1$ olmak üzere n bir tam sayıdır ve $n \in N$ için D^n; $D^0 y(x) = y(x)$ olmak üzere n katlı türev operatörünü temsil etmektedir. Ayrıca D^α Riemann-Liouville türev operatörünü ve D_*^α Caputo türev operatörünü göstermektedir (Herrmann, 2014).

Tam sayı olmayan mertebeden türev tanımındaki integral, bu türev operatörlerinin lokal olmadığını gösterir. Uzay ya da zamanda bir fonksiyonun belirli bir noktadaki tam sayı olmayan mertebeden türevi, o fonksiyonun sırasıyla uzay ya da zamanda daha önceki noktalardaki bilgisini içermektedir. Buna göre tam sayı olmayan mertebeli türevler hafıza etkisine sahiplerdir. Bu konuda literatürde; difüzyon için (Oldham and Spainer, 1974; Olmstead and Handelsman, 1976), viskoelastik materyallerin modellenmesi için (Bagley and

Torvik, 1983; Caputo, 1967; Caputo and Mainardi, 1971), sinyal işleme alanındaki uygulamalar (Marks and Hall, 1981) için örnekler bulunmaktadır.

4.1.1 Kesirsel integral ve türev

Riemann-Liouville kesirsel türev ve integral operatörlerinin özellikleri aşağıda detayları ile verilmektedir;
Önerme 4.1: f; $[a, b]$ aralığında Riemann integrallenebilir bir fonksiyon olsun. Buna göre $a \leq x \leq b$ ve $n \in N$ için;

$$J_a^\alpha f(x) = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} f(t)dt, \tag{4.4}$$

olur. Bu önermedeki $n \in N$ ve faktoriyel sırasıyla $\alpha \in R$ ve Gama fonksiyonu ile değiştirirse aşağıdaki tanıma ulaşılabilir:
Tanım 4.1: $\alpha \in R_+$ olsun. $L_1[a, b]$'de J_a^α operatörü;

$$J_a^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} f(t)dt. \tag{4.5}$$

Bu tanım $a \leq x \leq b$ için α. dereceden Riemann-Liouville integral operatörüdür ve $\alpha = 0$ için $J_a^0 = I$ birim operatörünü verir. Burada $L_1[a, b]$ temsili, genel formu $1 \leq p \leq \infty$ olmak üzere;

$$L_p[a, b] = \{f : (a, b) \to R; f[a, b] \int_a^b \mid f(x) \mid^p dx < \infty\}, \tag{4.6}$$

ile verilen Lebesgue uzayını göstermektedir.

Bu dönüşüm ile tanım kümesi Riemann integrallenebilir fonksiyonlardan Lebesgue integrallenebilir fonksiyonlara genişletilmiştir. Denklem (4.5)'deki integralin varlığı, integrallenebilir bir f fonksiyonu ve $(x - .)^{\alpha-1}$ sürekli fonksiyonunun çarpımın integrali alınacağından $\alpha \geq 1$ durumunda kesindir. $\alpha \in (0, 1)$ için bu integralin geçerliliği aşağıdaki teorem ile açıklanabilir:
Teorem 4.1: $f \in L_1[a, b]$ ve $\alpha > 0$ olsun. $J_a^\alpha f(x)$ integrali tüm $x \in [a, b]$ için vardır ve $J_a^\alpha f$ fonksiyonu da $L_1[a, b]$'nin elemanıdır.

Bu şekilde Denklem (4.5)'teki integralin varlığı garantiye alındıktan sonra, tam sayı mertebeli integraller için bilinen özelliklerin, hangi açılardan kesirsel mertebeli integrallere taşınabileceğine bakılabilir:
Teorem 4.2: $\{J_a^\alpha : L_1[a, b] \to L_1[a, b]; \alpha \geq 0\}$ operatörleri birleşme özelliğine göre komütatif bir yarı grup oluştururlar. $J_a^0 = I$ birim operatörü bu grubun nötr elemanıdır.

Buna göre $f \in L_1[a,b], \alpha, \beta \in R_+$ için;

$$J_a^\alpha J_a^\beta f = J_a^{\alpha+\beta} f = J_a^{\beta+\alpha} f = J_a^\beta J_a^\alpha f \tag{4.7}$$

tam sayı matematiğinde bilinen cebirsel sonuca ulaşılır.

Klasik durumda yani $\alpha \in N$ için limit işlemi ve integral işleminin yer değiştirebilme özelliğinin kesirsel matematikteki geçerliliği şu şekilde incelenebilir:
Teorem 4.3: $\alpha > 0$ olsun. $(f_k)_{k=1}^\infty$; $[a,b]$ aralığındaki sürekli fonksiyonların yakınsak bir dizilimi olduğu kabul edilsin. Bu durumda kesirsel integral operatörü ile limit işlemi yer değiştirebilir.

$$\big(J_a^\alpha \lim_{k\to\infty} f_k\big)(x) = \big(\lim_{k\to\infty} J_a^\alpha f_k\big)(x) \tag{4.8}$$

Bu teoremin sonucu ile analitik bir fonksiyonun kesirsel integrali ile tam sayı mertebeli türev tanımı arasında bir bağlantı kurulabilir:
Sonuç 4.1: $h > 0$ için f; $(a-h, a+h)$'de analitik olsun. $\alpha > 0$ olmak üzere $a \leq x < a + h/2$ için;

$$J_a^\alpha f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (x-a)^{k+\alpha}}{k!(\alpha+k)\Gamma(\alpha)} D^k f(x) \tag{4.9}$$

ve $a \leq x < a+h$ için;

$$J_a^\alpha f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x-a)^{k+\alpha}}{\Gamma(k+1+\alpha)} D^k f(a) \tag{4.10}$$

bulunur. Özel olarak $J_a^\alpha f$, $(a, a+h)$ aralığında analitiktir.

Yukarıda verilen Riemann-Liouville integral operatörünün tanım ve özelliklerinden sonra, m ve n tam sayılar olmak üzere;

$$D^n f = D^m J_a^{m-n} f, \tag{4.11}$$

bağıntısının kesirsel matematiğe genelleştirilmesi ile elde edilen kesirsel türev operatörünün tanım ve özellikleri de incelenebilir;
Tanım 4.2: $\alpha \in R$ ve $n = \lceil \alpha \rceil$ olmak üzere $a \leq x \leq b$ için D_a^α operatörü şu şekilde tanımlanır:

$$D_a^\alpha f(x) = D^n J^{n-\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \big(\frac{d}{dx}\big)^n \int_a^x (x-t)^{n-\alpha-1} f(t) dt, \tag{4.12}$$

ve α. mertebeden Riemann-Liouville diferansiyel operatörü adını alır. $\alpha = 0$ için $D_a^0 = I$ birim operatörü elde edilir. Bu tanımdan yola çıkarak, $\alpha \in N$ olduğunda klasik diferansiyel operatörü D^n bulunur. Ayrıca aşağıdaki önermede yazılan klasik matematikte iyi bilinen bir sonuç kesirsel matematikte de geçerli olur;

Önerme 4.2: $\alpha \in R$ ve $n > \alpha$ olmak üzere $n \in N$ olsun. Bu durumda;

$$D_a^\alpha f(x) = D^n J^{n-\alpha}, \tag{4.13}$$

olur. Riemann-Lioville integral operatöründe olduğu gibi bir fonksiyonun Riemann-Liouville türevinin varlığından da belirli koşullar altında bahsedilebilir:

Önerme 4.3: $f \in A^1[a,b]$ ve $0 < \alpha < 1$ olsun. Buna göre $D_a^\alpha f$; $[a,b]$'de her yerde vardır. Ayrıca $1 \leq p < 1/\alpha$ için $D_a^\alpha f \in L_p[a,b]$'dir ve

$$D_a^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\left(\frac{f(a)}{(x-a)^\alpha} + \int_a^x (x-t)^{-\alpha} f'(t)dt\right) \tag{4.14}$$

olur. Burada $A^1[a,b]$, genel formu A^n ya da $A^n[a,b]$ ile gösterilen $(n-1)$. türevi sürekli olan fonksiyonlar uzayıdır. Bu uzayda $g \in L_1[a,b]$ için f fonksiyonları $f^{(n-1)}(x) = f^{(n-1)}(a) + \int_a^x g(t)dt$ olarak ifade edilebilir. Burada g, f'nin n. türevini göstermektedir.

Riemann-Liouville diferansiyel operatörleri de Riemann-Liouville integral operatörleri gibi yarı grup özelliği gösterir:

Teorem 4.4: $\alpha_1, \alpha_2 \geq 0$ olsun. $g \in L_1[a,b]$ ve $f = J^{\alpha_1+\alpha_2} g$ olmak üzere;

$$D_a^{\alpha_1} D_a^{\alpha_2} f = D_a^{\alpha_1+\alpha_2} f. \tag{4.15}$$

özelliği vardır.

Teorem 4.5: $\alpha > 0$ olsun. $(f_k)_{k=1}^\infty$; $[a,b]$ aralığındaki sürekli fonksiyonların yakınsak bir dizilimi olduğu kabul edilsin ve $D_a^\alpha f_k$; her k için tanımlı olsun. Ayrıca her $\epsilon > 0$ için $(D_a^\alpha f_k)_{k=1}^\infty$, $[a+\epsilon, b]$ aralığında yakınsak ise;

$$\big(\lim_{k\to\infty} D_a^\alpha f_k\big)(x) = \big(D_a^\alpha \lim_{k\to\infty} f_k\big)(x), \tag{4.16}$$

limit işlemi ile Riemann-Liouville diferansiyel operatörünün yer değiştirebilme özelliği gösterilebilir ve bu teoremden aşağıdaki sonuca ulaşılabilir:

Sonuç 4.2: $h > 0$ için f $(a-h, a+h)$ aralığında analitik olsun. $\alpha > 0$ ve $\alpha \notin N$ olmak üzere $a < x < a + h/2$ için;

$$D_a^\alpha f(x) = \sum_{k=0}^\infty \binom{\alpha}{k} \frac{(x-a)^{k-\alpha}}{\Gamma(k+1-\alpha)} D^k f(x) \tag{4.17}$$

ve $a < x < a + h$ için;

$$D_a^\alpha f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x-a)^{k-\alpha}}{\Gamma(k+1-\alpha)} D^k f(a) \tag{4.18}$$

bulunur. Özel olarak $D_a^\alpha f$, $(a, a+h)$ aralığında analitiktir.
Teorem 4.6: f_1, f_2 fonksiyonları ile $D_a^\alpha f_1, D_a^\alpha f_2$ türevleri $[a, b]$ aralığında her yerde tanımlı olsun. Bu durumda $c_1, c_2 \in R$ için $D_a^\alpha(c_1 f_1 + c_2 f_2)$ türevi de her yerde tanımlı olur ve

$$D_a^\alpha(c_1 f_1 + c_2 f_2) = c_1 D_a^\alpha f_1 + c_2 D_a^\alpha f_2 \tag{4.19}$$

Riemann-Liouville diferansiyel operatörleri için lineerlik özelliği doğrulanır.
Teorem 4.7: (Riemann-Liouville operatörleri için Leibniz formülü): $\alpha > 0$ olsun. f ve g'nin $(a-h, a+h)$ aralığında analitik olduğu kabul edilirse, $a < x < a+h/2$ için;

$$D_a^\alpha [fg](x) = \sum_{k=0}^{\lfloor \alpha \rfloor} \binom{\alpha}{k} (D^k f)(x)(D_a^{\alpha-k} g)(x) + \sum_{k=\lfloor \alpha \rfloor+1}^{\infty} \binom{\alpha}{k} (D^k f)(x)(J_a^{k-\alpha} g)(x) \tag{4.20}$$

çarpım kuralı elde edilir.

Buradan sonra Riemann-Liouville integral ve türev operatörlerinin birbirleri ile etkileşmelerine bakılabilir:
Teorem 4.8: $\alpha > 0$ olsun. Her $f \in L_1[a, b]$ için

$$D_a^\alpha J_a^\alpha f = f \tag{4.21}$$

eşitliği her yerde vardır. Ayrıca $f = J_a^\alpha g$ olacak şekilde bir $g \in L_1[a, b]$ fonksiyonu varsa;

$$J_a^\alpha D_a^\alpha f = f, \tag{4.22}$$

eşitliği de her yerde vardır. Eğer f fonksiyonu $f = J_a^\alpha g$ koşulunu sağlamıyorsa, bu durumda aşağıdaki teoreme başvurulur:
Teorem 4.9: $\alpha > 0$ ve $n = \lceil \alpha \rceil$ olsun. f fonksiyonu için $J_a^{n-\alpha} f \in A^n[a, b]$ koşulu sağlansın. Bu durumda;

$$J_a^\alpha D_a^\alpha f(x) = f(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(x-a)^{\alpha-k-1}}{\Gamma(\alpha-k)} \lim_{z \to a+} D^{n-k-1} J_a^{n-\alpha} f(z) \tag{4.23}$$

olur. Özel olarak $0 < \alpha < 1$ için;

$$J_a^{\alpha} D_a^{\alpha} f(x) = f(x) - \frac{(x-a)^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} \lim_{z \to a+} J_a^{1-\alpha} f(z) \tag{4.24}$$

bulunur. Bu teoremin sonucundan kesirsel Taylor açılımı yazılabilir:
Teorem 4.10: Kesirsel Taylor Açılımı: $\alpha > 0$ ve $n = \lceil \alpha \rceil$ olmak üzere, f fonksiyonu için $J_a^{n-\alpha} f \in A^n[a,b]$ koşulu sağlansın. Bu durumda;

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{(x-a)^{\alpha-n}}{\Gamma(\alpha-n+1)} \lim_{z \to a+} D^{n-k-1} J_a^{n-\alpha} f(z) \\ &+ \sum_{k=1}^{n-1} \frac{(x-a)^{k+\alpha-n}}{\Gamma(k+\alpha-n+1)} \lim_{z \to a+} D_a^{k+\alpha-n} f(z) + J_a^{\alpha} D_a^{\alpha} f(x). \end{aligned} \tag{4.25}$$

4.1.2 Konformal kesirsel türev

Literatürde yaygın bir şekilde çalışılmakta olan kesirsel matematik teorisi için, Khalil *et al.* tarafından "konformal kesirsel türev" olarak adlandırılan yeni bir kesirsel türev tanımı önerilmiştir. Bu tanım limit işlemine dayalı kesirsel bir türevdir ve diğer kesirsel türev operatörlerinden farklı olarak tam sayı mertebeli türev operatörlerinin sağladığı zincir kuralı, çarpım kuralı ve bölüm kurallarını sağlamaktadır. $0 < \alpha \leq 1$ için D^{α} konformal kesirsel türev şu şekilde tanımlanır:

$$D^{\alpha}[f(t)] = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(t+\epsilon t^{1-\alpha}) - f(t)}{\epsilon}, \quad t > 0 \tag{4.26}$$

$$f^{(\alpha)}(0) = \lim_{t \to 0^+} f^{(\alpha)}(t) \tag{4.27}$$

f, g; $t > 0$ noktasında α-türevlenebilir fonksiyonlar olsun. $0 < \alpha \leq 1$ olmak üzere; konformal kesirsel türev için aşağıdaki cebirsel özellikler sağlanmaktadır (Khalil et al., 2014; Anderson and Ulness, 2015; Abdaljawad, 2015):

- $D^{\alpha}[af + bg] = aD^{\alpha}[f] + bD^{\alpha}[g]$ (Lineerlik)
- $D^{\alpha}[fg] = fD^{\alpha}[g] + gD^{\alpha}[f]$ (Çarpım kuralı)
- $D^{\alpha}[f(g)] = \frac{df}{dg} D^{\alpha}[g]$ (Zincir kuralı)
- $D^{\alpha}[f(t)] = t^{1-\alpha} f'(t) = t^{1-\alpha} \frac{df}{dt}$
- $D^{\alpha} D^{\beta}[f] \neq D^{\alpha+\beta}[f]$
- $D^{\gamma}[f(t)] = t^{2-\gamma} \frac{d^2 f}{dt^2}, \quad 1 < \gamma \leq 2$

4.2 Kesirsel NU Yöntemi

Tam sayı matematiğinden kesirsel matematiğe geçiş için şöyle bir strateji geliştirilmiştir (Herrmann, 2014); Tam sayı mertebeli bir diferansiyel denklem için,

- $n \in N$ için geçerli olan bir kural geliştirilir.
- n yerine $\alpha \in C$ sayısı yazılır.

Bu stratejiye göre; Denklem (2.1)'de verilen NU yönteminin temel denkleminin kesirsel formu şu şekilde yazılabilir:

$$D^{\alpha}D^{\alpha}\psi(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}D^{\alpha}\psi(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}\psi(z) = 0 \tag{4.28}$$

Burada $\widetilde{\tau}(z)$ en fazla α. dereceden (bu parametre bir sabite de eşit olabilir), $\sigma(z)$ ve $\widetilde{\sigma}(z)$ de en fazla 2α. dereceden (bu parametrelerin dereceleri 0 ya da α da olabilir) olabilen kesirsel fonksiyonlardır. Bu denklemde konformal kesirsel türevin $D^{\alpha}[f(t)] = t^{1-\alpha}f'(t)$ ile verilen temel özelliği kullanılırsa,

$$D^{\alpha}[\psi(z)] = z^{1-\alpha}\psi'(z), \tag{4.29}$$

$$D^{\alpha}[D^{\alpha}[\psi(z)]] = (1-\alpha)z^{1-2\alpha}\psi'(z) + z^{2-2\alpha}\psi''(z). \tag{4.30}$$

tanımları elde edilir. Bu tanımlar Denklem (4.28)'de yerine yazıldığında aşağıdaki ikinci dereceden diferansiyel denkleme ulaşılır;

$$\psi''(z) + \frac{(1-\alpha)\sigma(z)z^{-\alpha} + \widetilde{\tau}(z)}{z^{1-\alpha}\sigma(z)}\psi'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{z^{2-2\alpha}\sigma^2(z)}\psi(z) = 0 \tag{4.31}$$

Burada $\widetilde{\tau}_f(z) = (1-\alpha)z^{-\alpha}\sigma(z) + \widetilde{\tau}(z)$ ve $\sigma_f(z) = z^{1-\alpha}\sigma(z)$ şeklinde yeni fonksiyonlar tanımlanarak kesirsel NU yönteminin temel denklemi elde edilir:

$$\psi''(z) + \frac{\widetilde{\tau}_f(z)}{\sigma_f(z)}\psi'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma_f^2(z)}\psi(z) = 0. \tag{4.32}$$

Böylece Denklem (4.28)'deki kesirsel mertebeli türevler içeren diferansiyel denklem tam sayı mertebeli türevler içeren bir diferansiyel denkleme indirgenir. Ayrıca bu denklemin $\alpha = 1$ için standart NU yönteminin sınır koşullarını sağladığı kolayca görülebilir.

Standart NU yönteminde yapılan çözüme benzer olarak, Denklem (4.28)'de $\psi(z) = \phi(z)y(z)$ dönüşümü yapılır;

$$y''(z) + (2\frac{\phi'(z)}{\phi(z)} + \frac{\widetilde{\tau}_f(z)}{\sigma_f(z)})y'(z) + (\frac{\phi''(z)}{\phi(z)} + \frac{\phi'(z)}{\phi(z)}\frac{\widetilde{\tau}_f(z)}{\sigma_f(z)} + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma_f^2(z)})y(z) = 0. \quad (4.33)$$

ve bu denklemde $y(z)$ ve $y'(z)$'nin katsayıları yeni parametreler tanımlanarak düzenlenir: $y'(z)$'nin katsayısı için;

$$2\frac{\phi'(z)}{\phi(z)} + \frac{\widetilde{\tau}_f(z)}{\sigma_f(z)} = \frac{\tau_f(z)}{\sigma_f(z)} \quad (4.34)$$

$$\frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi_f(z)}{\sigma_f(z)}, \quad (4.35)$$

düzenlemesi yapılır. Burada en fazla α. dereceden olan $\pi_f(z)$ fonksiyonu için;

$$\pi_f(z) = \frac{1}{2}(\tau(z) - \widetilde{\tau}_f(z)). \quad (4.36)$$

bağıntısı sağlanır.

Denklem (4.33)'teki $y(z)$'nin katsayısı da şu şekilde düzenlenebilir;

$$\bar{\sigma}(z) = \widetilde{\sigma}(z) + \pi_f^2(z) + \pi_f(z)(\widetilde{\tau}_f(z) - \sigma_f'(z)) + \pi_f'(z)\sigma_f(z) \quad (4.37)$$

olmak üzere

$$\frac{\phi''(z)}{\phi(z)} + \frac{\phi'(z)}{\phi(z)}\frac{\widetilde{\tau}_f(z)}{\sigma_f(z)} + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma_f^2(z)} = \frac{\bar{\sigma}(z)}{\sigma_f^2(z)}, \quad (4.38)$$

Denklem (4.34) ve Denklem (4.38)'in sağ tarafları, Denklem (4.33)'te yerine yazıldığında;

$$y''(z) + \frac{\tau(z)}{\sigma_f(z)}y'(z) + \frac{\bar{\sigma}(z)}{\sigma_f^2(z)}y(z) = 0. \quad (4.39)$$

bulunur. Denklem (4.39)'da verilen $\bar{\sigma}(z)$ fonksiyonunun $\sigma_f(z)$ ile bölünebilir olduğu durumda,

$$\bar{\sigma}(z) = \lambda(z)\sigma_f(z) \quad (4.40)$$

ifadesi yazılabilir. Burada $\lambda(z)$, $(\alpha - 1)$. dereceden bir fonksiyondur. Bu durumda Denklem (4.39) aşağıdaki forma dönüşür;

$$\sigma_f(z)y''(z) + \tau(z)y'(z) + \lambda(z)y(z) = 0. \quad (4.41)$$

$\pi_f(z)$ fonksiyonunu belirlemek için Denklem (4.40)'taki eşitlik Denklem (4.37)'de yerine yazılır ve $\pi_f(z)$ parametresine göre ikinci dereceden olan aşağıdaki homojen denklem elde edilir:

$$\pi_f^2(z) + \pi_f(z)(\widetilde{\tau}_f(z) - \sigma'_f(z)) + \widetilde{\sigma}(z) - k(z)\sigma_f(z) = 0. \tag{4.42}$$

Burada

$$k(z) = \lambda(z) - \pi'_f(z). \tag{4.43}$$

dır. Denklem (4.42)'nin $\pi_f(z)$ için çözümleri kök bulma yöntemi ile elde edilebilir;

$$\pi_f(z) = \frac{\sigma'_f(z) - \widetilde{\tau}_f(z)}{2} \pm \sqrt{(\frac{\sigma'_f(z) - \widetilde{\tau}_f(z)}{2})^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma_f(z)}. \tag{4.44}$$

$\pi_f(z)$'nin olası tüm çözümlerini belirleyebilmek için önce karekök içindeki $k(z)$ parametresi bulunur. Sonra sırasıyla $\pi_f(z)$, $\tau(z)$ ve $\lambda(z)$ parametreleri Denklem (4.44), Denklem (4.40) ve Denklem (4.43)'ten bulunabilir.

Denklem (4.41)'in çözümlerinin genelleştirilmesi için; n kez kesirsel türev alınır ve tekrarlama bağıntıları elde edilir. Denklem (4.41)'in α. türevi, sağdan soldan limitte süreksiz olan fonksiyonların α. türevi sıfır alındığında Denklem (4.41)'in 1. türevine indirgenir. Buna göre Denklem (4.41)'in $v(z) = y'(z)$ temsili için α. türevi;

$$\sigma_f(z)v_1''(z) + \tau_1(z)v_1'(z) + \mu_1 v_1(z) = 0 \tag{4.45}$$

olur. Burada $\tau_1(z) = \tau(z) + \sigma'_f(z)$ ve $\mu_1 = \lambda(z) + \tau'(z)$'dır. $\sigma_f(z)$, $(\alpha+1)$. dereceden, $\tau(z)$, α. dereceden ve $\lambda(z)$, $(\alpha-1)$. dereceden olduğundan, $\tau_1(z)$ ve μ_1 sırasıyla α. ve $(\alpha-1)$. dereceden kesirsel fonksiyonlardır. Benzer olarak, Denklem (4.41)'de D^α türev operatörü iki kez uygulandığında $v_2(z) = y''(z)$ temsili için aşağıdaki denklem elde edilir:

$$\sigma_f(z)v_2''(z) + \tau_2(z)v_2'(z) + \mu_2 v_2(z) = 0. \tag{4.46}$$

Burada

$$\tau_2(z) = \tau_1(z) + \sigma'_f(z) = \tau(z) + 2\sigma'_f(z) \tag{4.47}$$

$$\mu_2 = \mu_1 + \tau_1'(z) = \lambda(z) + 2\tau'(z) + \sigma''_f(z). \tag{4.48}$$

dır. Son olarak D^α türev operatörü n kez uygulanır ve $v_n(z) = y^{(n)}(z)$ temsili kullanılırsa; Denklem (4.41)'in n. türevi şu şekilde bulunur:

$$\sigma_f(z)v_n''(z) + \tau_n(z)v_n'(z) + \mu_n v_n(z) = 0, \tag{4.49}$$

Burada

$$\tau_n(z) = \tau(z) + n\sigma_f'(z) \tag{4.50}$$
$$\mu_n = \lambda(z) + n\tau'(z) + \frac{n(n-1)}{2}\sigma_f''(z) \tag{4.51}$$

dır. $\mu_n = 0$ olduğunda Denklem (4.51)'den $\lambda(z)$ parametresi n doğal sayısına bağlı olarak elde edilir;

$$\lambda_n(z) = -n\tau'(z) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma_f''(z) \quad (n = 0, 1, 2, ...). \tag{4.52}$$

Bu durumda Denklem (4.49)'un $y(z) = sabit$, Denklem (4.41)'in da $y(z) = y_n(z)$ şeklinde çözümleri bulunabilir

$$y_n(z) = \frac{B_n}{\rho(z)}\frac{d^n}{dz^n}[\sigma_f^n(z)\rho(z)], \tag{4.53}$$

Burada B_n normalizasyon sabiti ve $\rho(z)$ aşağıdaki bağıntıyı sağlayan ağırlık fonksiyonudur;

$$(\sigma_f(z)\rho(z))' = \tau(z)\rho(z). \tag{4.54}$$

Kesirsel mertebeli bir diferansiyel denklemin özdeğer çözümü $\lambda(z)$ ve $\lambda_n(z)$ parametreleri birbirine eşitlenerek, özfonksiyon çözümü ise $\phi(z)$ fonksiyonu ve $y_n(z)$ çözümü $\psi(z) = \phi(z)y(z)$ bağıntısında yerine yazılarak elde edilebilir. Buna göre kesirsel NU yöntemi ile kesirsel mertebeli bir diferansiyel denklemin özdeğer ve özfonksiyon spektrumlarına analitik olarak ulaşılabilmektedir (Karayer et al., 2016).

4.3 Kesirsel NU Yönteminin Uygulamaları

Fiziksel bir sistemin özdurumları,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \tag{4.55}$$

ile verilen Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilir. Bu denklemin çözümü $V(\mathbf{r})$ potansiyel fonksiyonuna ve koordinat sistemine bağlıdır. Eğer potansiyel küresel simetrik bir potansiyel ise ($V(\mathbf{r}) = V(r,\theta,\phi) \equiv V(r)$ fonksiyonu sadece küresel koordinatlardaki r değişkenine bağlıysa) $\psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonu $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi)$ şeklinde çarpanlarına ayrılabilir. Burada $R(r)$ bilinmeyen radyal dalga fonksiyonu $Y(\theta,\phi)$ ise küresel harmoniklerdir (Pahlavani, 2012). Buna göre bu formdaki potansiyeller için radyal Schrödinger denklemini çözmek sistemi tamamen açıklayabilmek için yeterli olacaktır;

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R(r) = 0, \tag{4.56}$$

Bu denklemin kesirsel formu Bölüm-4.2'de anlatılan tam sayı mertebeden, kesirsel mertebeye geçiş stratejisi kullanılarak elde edilebilir;

$$D^\alpha D^\alpha R(r) + \frac{2}{r^\alpha}D^\alpha R(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^{2\alpha}}\right]R(r) = 0, \tag{4.57}$$

Burada D^α, $0 < \alpha \leq 1$ olmak üzere konformal kesirsel türev operatörüdür. Bu denklem belirli potansiyel fonksiyonları için kesirsel NU yöntemi ile analitik olarak çözülebilir. Burada Denklem (4.57) sırasıyla harmonik osilatör, Woods-Saxon ve Hulthen potansiyelleri için çözüldü.

4.3.1 Kesirsel Schrödinger Denkleminin Harmonik Osilatör Potansiyeli İçin Çözümü

Harmonik osilatör potansiyeli, w osilatörün frekansı olmak üzere,

$$V(r) = \frac{1}{2}mw^2r^2, \tag{4.58}$$

ile verilir. Bu potansiyel için Denklem (4.56)'da verilen radyal Schrödinger denklemi;

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \frac{1}{2z}\frac{d\psi(z)}{dz} + \frac{(-z^2 + \beta^2 z - l(l+1))}{4z^2}\psi(z) = 0, \tag{4.59}$$

olur. Burada $\beta^2 = 2E/\hbar w$ ve $0 \leq z \leq \infty$'dır (Pahlavani, 2012). Türev mertebesinin $n \in N$'den $\alpha \in C$'ye genişletilmesiyle Denklem (4.59) kesirsel formda yazılabilir;

$$D^\alpha D^\alpha \psi(z) + \frac{1}{2z^\alpha}D^\alpha\psi(z) + \frac{(-z^{2\alpha} + \beta^2 z^\alpha - l(l+1))}{4z^{2\alpha}}\psi(z) = 0. \tag{4.60}$$

Bu denklem ile kesirsel NU yönteminin temel denklemi karşılaştırılır ve Denklem (4.28)'deki parametreler belirlenir;

$$\begin{aligned}\widetilde{\tau}(z) &= 1\\ \sigma(z) &= 2z^{\alpha}\\ \widetilde{\sigma}(z) &= -z^{2\alpha}+\beta^2 z^{\alpha}-l(l+1)\end{aligned}$$

Denklem (4.29) ve Denklem (4.30)'daki tanımlar Denklem (4.60)'ta kullanıldığında, Denklem (4.32) ile verilen kesirsel NU yönteminin temel denklemindeki katsayılar elde edilir;

$$\begin{aligned}\widetilde{\tau}_f(z) &= (1-\alpha)z^{-\alpha}\sigma(z)+\widetilde{\tau}(z) = 3-2\alpha\\ \sigma_f(z) &= z^{1-\alpha}\sigma(z) = 2z\\ \widetilde{\sigma}(z) &= -z^{2\alpha}+\beta^2 z^{\alpha}-l(l+1).\end{aligned}$$

Bu parametreler Denklem (4.44)'te yerine yazılır ve k parametresinin alabileceği iki farklı değer için $\pi_f(z)$ çözümleri bulunur:

$$\pi_f(z)=\frac{2\alpha-1}{2}\pm\begin{cases} z^{\alpha}+\frac{1}{2}\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}, & k_1=\frac{(\beta^2+\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)})}{2}z^{\alpha-1} \quad \text{için}\\ z^{\alpha}-\frac{1}{2}\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}, & k_2=\frac{(\beta^2-\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)})}{2}z^{\alpha-1} \quad \text{için}\end{cases}$$

Standart NU yönteminde bağlı durum çözümlerini elde etmek için, Denklem (4.36) ile verilen $\tau(z)$'nin birinci türevi sıfırdan küçük olmalıdır. Bunun için $\pi_f(z)$ fonksiyonu bu kriteri sağlayacak şekilde seçilmelidir. $k_2 = \frac{(\beta^2-\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)})}{2}z^{\alpha-1}$ için

$$\pi_f(z) = \frac{2\alpha-1}{2}-z^{\alpha}+\frac{1}{2}\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}, \tag{4.61}$$

fonksiyonu için $\tau'(z) < 0$'dır. $\pi_f(z)$ fonksiyonu belirlendikten sonra, Denklem (4.36)'dan $\tau(z)$ fonksiyonuna ulaşılabilir;

$$\tau(z) = 2+\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}-2z^{\alpha}. \tag{4.62}$$

Bundan sonra $\lambda(z)$ ve $\lambda_n(z)$ sırasıyla Denklem (4.43) ve Denklem (4.52)'den bulunabilir;

$$\lambda(z) = \frac{1}{2}(\beta^2-\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}-2\alpha)z^{\alpha-1} \tag{4.63}$$

$$\lambda_n(z) = 2\alpha n z^{\alpha-1}. \tag{4.64}$$

Özdeğer çözümü $\lambda(z) = \lambda_n(z)$ için hem n tam sayısına hem de keyfi α sayısına bağlı olarak elde edilir.

$$E_n = \hbar w\alpha(1+2n) + \frac{\hbar w}{2}\sqrt{(2\alpha-1)^2 + 4l(l+1)}. \qquad (4.65)$$

Kesirsel NU yöntemi ile elde edilen bu özdeğer çözümü $\alpha = 1$ için tam sayı matematiğinde NU yöntemi ile bulunan sonuca indirgenmektedir (Pahlavani, 2012). Özfonksiyon çözümü için ise önce Denklem (4.35)'ten $\phi(z)$ fonksiyonu bulunur;

$$\phi(z) = z^{\frac{1}{4}(2\alpha-1+\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)})}e^{-\frac{z^\alpha}{2\alpha}}. \qquad (4.66)$$

$\rho(z)$ ve $y_n(z)$ de sırasıyla Denklem (4.54) ve Denklem (4.53)'ten bulunur;

$$\rho(z) = z^{\frac{1}{2}(\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)})}e^{-\frac{z^\alpha}{\alpha}}, \qquad (4.67)$$

$$y_n(z) = 2^n B_n z^{-\frac{1}{2}\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}}e^{\frac{z^\alpha}{\alpha}}\frac{d^n}{dz^n}\left[z^{n+\frac{1}{2}\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}}e^{-\frac{z^\alpha}{\alpha}}\right] \qquad (4.68)$$

Son olarak $\psi(z) = \phi(z)y(z)$ bağıntısından özfonksiyon spektrumuna ulaşılabilir;

$$\begin{aligned}\psi(z) &= N_n z^{\frac{1}{4}\left(2\alpha-1+\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}\right)}e^{-\frac{z^\alpha}{2\alpha}} \\ &z^{-\frac{1}{2}\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}}e^{\frac{z^\alpha}{\alpha}}\frac{d^n}{dz^n}\left[z^{n+\frac{1}{2}\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}}e^{-\frac{z^\alpha}{\alpha}}\right]. \qquad (4.69)\end{aligned}$$

$\alpha = 1$ limitinde bu özfonksiyon standart NU yöntemi ile elde edilen özfonksiyona karşılık gelir (Pahlavani, 2012). Ayrıca bu özfonksiyon $0 \leq z \leq \infty$ için,

$$\int_0^\infty |\ \psi(z)\ |^2 dz = 1 \qquad (4.70)$$

ile verilen normalizasyon koşulunu da sağlamaktadır. N_n normalizasyon sabiti bu koşul kullanılarak hesaplanabilir. $n = 0$ için;

$$N_0 = \frac{1}{\sqrt{\alpha^{\frac{1+\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}}{2\alpha}}\Gamma(\frac{1+2\alpha+\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}}{2\alpha})}}, \qquad (4.71)$$

Burada $\Gamma(\frac{1+2\alpha+\sqrt{(2\alpha-1)^2+4l(l+1)}}{2\alpha})$ Gamma fonksiyonudur. $n = 1$ için ise normalizasyon sabiti

$$N_1 = \frac{1}{\sqrt{\alpha^{\frac{1+2A}{2\alpha}}\frac{2\alpha(2\alpha-1+2A)+1}{4}\Gamma(\frac{1+2\alpha+2A}{2\alpha})}}, \qquad (4.72)$$

olarak bulunur. Burada $2A = \sqrt{(2\alpha-1)^2 + 4l(l+1)}$'dır.

4.3.2 Kesirsel Schrödinger Denkleminin Woods-Saxon Potansiyeli İçin Çözümü

Bölüm-2.3.2'de Woods-Saxon potansiyelinde hareket eden m kütleli bir parçacık için radyal Schrödinger denklemi Denklem (2.58) ile verilmişti. Bu denklemin, konformal kesirsel türev tanımı kullanılarak kesirsel formu elde edilebilir;

$$D^{\alpha}D^{\alpha}\psi(z)+\frac{1-z^{\alpha}}{z^{\alpha}(1-z^{\alpha})}D^{\alpha}\psi(z)+\frac{[-Az^{2\alpha}+(2A-B)z^{\alpha}+B-A]}{z^{2\alpha}(1-z^{\alpha})^2}\psi(z)=0. \tag{4.73}$$

Burada Denklem (4.29) ve Denklem (4.30) kullanıldığında, aşağıdaki ikinci dereceden diferansiyel denklem elde edilir;

$$\psi''(z)+\frac{(2-\alpha)(1-z^{\alpha})}{z(1-z^{\alpha})}\psi'(z)+\frac{[-Az^{2\alpha}+(2A-B)z^{\alpha}+B-A]}{z^{2}(1-z^{\alpha})^2}\psi(z)=0 \tag{4.74}$$

Bu denklem, Denklem (4.32)'de verilen kesirsel NU yönteminin temel denklemi ile karşılaştırılarak kesirsel NU yöntemindeki parametreler bulunur;

$$\begin{aligned}\widetilde{\tau}_f(z)&=(2-\alpha)(1-z^{\alpha})\\ \sigma_f(z)&=z(1-z^{\alpha})\\ \widetilde{\sigma}(z)&=-Az^{2\alpha}+(2A-B)z^{\alpha}+B-A.\end{aligned}$$

Bundan sonra Denklem (4.44)'ten $\pi_f(z)$ fonksiyonu için aşağıdaki dört farklı çözüm elde edilir;

$$\pi_f(z)=\frac{\alpha-1+(1-2\alpha)z^{\alpha}}{2}\pm\begin{cases}\frac{1}{2}[(\alpha z^{\alpha}-\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)})(z^{\alpha}+1)], & \\ \quad k_1=\frac{1}{2}[\alpha(\alpha-1)+2B+\alpha\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}]z^{\alpha-1} & \text{için}\\ \frac{1}{2}[(\alpha z^{\alpha}+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)})(z^{\alpha}-1)], & \\ \quad k_2=\frac{1}{2}[\alpha(\alpha-1)+2B-\alpha\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}]z^{\alpha-1} & \text{için}\end{cases}$$

$\pi_f(z)$ fonksiyonu, bu fonksiyona bağlı olan $\tau(z)$ fonksiyonunun birinci türevini negatif yapacak şekilde seçilmelidir. Bu koşulu
$k_2=\frac{1}{2}[\alpha(\alpha-1)+2B-\alpha\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}]z^{\alpha-1}$ için bulunan

$$\pi_f(z)=\frac{1}{2}\{\alpha-1+(1-2\alpha)z^{\alpha}-[\alpha z^{\alpha}+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}(z^{\alpha}-1)]\}, \tag{4.75}$$

fonksiyonu sağlamaktadır. $\pi_f(z)$ fonksiyonu belirlendikten sonra sistematik bir şekilde özdeğer ve özfonksiyon çözümlerine ulaşılabilir. Bunun için önce Denklem (4.36)'dan $\tau(z)$ fonksiyonu belirlenir;

$$\tau(z) = 1+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}-[1+2\alpha+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}]z^{\alpha}. \quad (4.76)$$

Denklem (4.43) ve Denklem (4.52)'den de $\lambda(z)$ ve $\lambda_n(z)$ parametreleri

$$\lambda(z) = [B-\alpha^2-\alpha\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}]z^{\alpha-1} \quad (4.77)$$

$$\lambda_n(z) = n\alpha[1+2\alpha+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}+\frac{1}{2}(n-1)(1+\alpha)]z^{\alpha-1}. \quad (4.78)$$

bulunur. Bu iki denklem birbirine eşitlenerek özdeğer çözümünü veren denklem kurulur;

$$B-\alpha^2-\alpha\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)} = \quad (4.79)$$
$$n\alpha[1+2\alpha+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}+\frac{(n-1)(1+\alpha)}{2}].$$

Denklem (2.59) ve Denklem (2.60)'ta verilen A ve B tanımları burada yerine yazılarak aşağıdaki özdeğer spektrumuna ulaşılır;

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left\{\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}-\frac{(\alpha-1)^2}{4}+\right.$$
$$\left.\frac{1}{4\alpha^2(n+1)^2}\left[\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}-\alpha^2-n\alpha\Big(1+2\alpha+\frac{(n-1)(\alpha+1)}{2}\Big)\right]^2\right\}. \quad (4.80)$$

Bu özdeğer çözümü sadece n tam sayısına değil α sayısına da bağlıdır ve $\alpha = 1$ limitinde NU yöntemi ile elde edilen özdeğer çözümüne indirgenir (Berkdemir, 2006).

$\psi(z) = \phi(z)y(z)$ ile verilen özfonksiyon çözümü için de önce Denklem (4.35)'ten $\phi(z)$ fonksiyonu belirlenir;

$$\phi(z) = z^{\frac{1}{2}(\alpha-1+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)})}(1-z^{\alpha}). \quad (4.81)$$

Daha sonra $\rho(z)$ ve $y_n(z)$ sırasıyla Denklem (4.54) ve Denklem (4.53)'ten şu şekilde bulunur;

$$\rho(z) = z^{\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}}(1-z^{\alpha}), \quad (4.82)$$

$$y_n(z) = B_n z^{-\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}}(1-z^{\alpha})^{-1}$$
$$\frac{d^n}{dz^n}\left[z^{n+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}}(1-z^{\alpha})^{n+1}\right] \quad (4.83)$$

Son olarak $\alpha = 1$ için tam sayı matematiğinde bulunan sonuca indirgenen $\psi(z)$ özfonksiyon spektrumu;

$$\psi(z) = N_n z^{\frac{1}{2}(\alpha-1+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)})}(1-z^\alpha)z^{-\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}}(1-z^\alpha)^{-1} \frac{d^n}{dz^n}\left[z^{n+\sqrt{(\alpha-1)^2+4(A-B)}}(1-z^\alpha)^{n+1}\right]. \tag{4.84}$$

analitik olarak elde edilir.

4.3.3 Kesirsel Schrödinger Denkleminin Hulthen Potansiyeli İçin Çözümü

Hulthen potansiyeli için radyal Schrödinger denklemi Bölüm-2.3.3'de Denklem (2.66) ile verilmişti. Hulthen potansiyeli için enerji özdurumlarını kesirsel matematik ile incelemek için, bu denklemin konformal kesirsel türev operatörü kullanılarak elde edilen kesirsel formu ele alınır;

$$D^\alpha D^\alpha \psi(z) + \frac{1-z^\alpha}{z^\alpha(1-z^\alpha)} D^\alpha \psi(z) + \frac{[-(A+B)z^{2\alpha} + (2A+B-C)z^\alpha - A]}{z^{2\alpha}(1-z^\alpha)^2}\psi(z) = 0. \tag{4.85}$$

Burada;

$$A = -\frac{2\mu E\kappa}{\hbar^2}, \tag{4.86}$$

$$B = \frac{2\mu K\kappa}{\hbar^2}, \tag{4.87}$$

$$C = l(l+1). \tag{4.88}$$

olarak tanımlanmıştı. Denklem (4.29) ve Denklem (4.30)'da verilen tanımlar bu denklemde kullanılır ve Denklem (4.32) formunda ikinci dereceden bir diferansiyel denklem elde edilir. Bu diferansiyel denklemdeki katsayılar;

$$\widetilde{\tau}_f(z) = (2-\alpha)(1-z^\alpha)$$
$$\sigma_f(z) = z(1-z^\alpha)$$
$$\widetilde{\sigma}(z) = -(A+B)z^{2\alpha} + (2A+B-C)z^\alpha - A.$$

olarak bulunur ve Denklem (4.44)'te yerine yazılarak $\pi_f(z)$ fonksiyonu belirlenir;

$$\pi_f(z)=\frac{\alpha-1+(1-2\alpha)z^\alpha}{2}\pm\begin{cases}\frac{1}{2}\Big[\Big(\sqrt{(\alpha-1)^2+4A}-\sqrt{\alpha^2+4C}\Big)z^\alpha-\sqrt{(\alpha-1)^2+4A}\Big], \\ \qquad k_1=\frac{1}{2}[\alpha(\alpha-1)+2(B-C)+\sqrt{[(\alpha-1)^2+4A](\alpha^2+4C)}]z^{\alpha-1} \quad \text{için} \\ \frac{1}{2}\Big[\Big(\sqrt{(\alpha-1)^2+4A}+\sqrt{\alpha^2+4C}\Big)z^\alpha-\sqrt{(\alpha-1)^2+4A}\Big], \\ \qquad k_2=\frac{1}{2}[\alpha(\alpha-1)+2(B-C)-\sqrt{[(\alpha-1)^2+4A](\alpha^2+4C)}]z^{\alpha-1} \quad \text{için}\end{cases}$$

Özdeğer ve özfonksiyon çözümüne ulaşmak için $\pi_f(z)$ fonksiyonu, $\tau(z)$ fonksiyonunun birinci türevi sıfırdan küçük olacak şekilde seçilir. Buna göre, $k_2=\frac{1}{2}[\alpha(\alpha-1)+2(B-C)-\sqrt{[(\alpha-1)^2+4A](\alpha^2+4C)}]z^{\alpha-1}$ için

$$\pi_f(z)=\frac{1}{2}\big\{\big(1-2\alpha-\sqrt{(\alpha-1)^2+4A}-\sqrt{\alpha^2+4C}\big)z^\alpha+\alpha-1+\sqrt{(\alpha-1)^2+4A}\big\}, \tag{4.89}$$

fonksiyonu için ilgili koşul sağlanmaktadır. Buradan sonra harmonik osilatör ve Woods-Saxon potansiyelleri için yapılan çözümdeki yol izlenerek aşağıdaki özdeğer ve özfonksiyon spektrumlarına analitik olarak ulaşılabilmektedir;

$$\begin{aligned}E_n=-\frac{\hbar^2}{8\mu\kappa^2}\Bigg\{&\frac{1}{[n\alpha+\frac{1}{2}(\alpha+\sqrt{\alpha^2+4l(l+1)})]^2}\Bigg[\frac{2\mu K\kappa}{\hbar^2}-l(l+1)- \\ &\frac{\alpha}{2}(\alpha+\sqrt{\alpha^2+4l(l+1)})-n\alpha\big((\alpha+1)(\frac{n+1}{2})+ \\ &\sqrt{\alpha^2+4l(l+1)}\big)\Bigg]^2-(\alpha-1)^2\Bigg\}.\end{aligned} \tag{4.90}$$

$$\begin{aligned}\psi(z)=N_n z^{\frac{1}{2}(\alpha-1+\sqrt{(\alpha-1)^2+4A})}(1-z^\alpha)^{\frac{\alpha+\sqrt{\alpha^2+4C}}{2\alpha}} \\ z^{-\sqrt{(\alpha-1)^2+4A}}(1-z^\alpha)^{-\frac{\sqrt{\alpha^2+4C}}{\alpha}}\frac{d^n}{dz^n}\big[z^{n+\sqrt{(\alpha-1)^2+4A}}(1-z^\alpha)^{n+\frac{\sqrt{\alpha^2+4C}}{\alpha}}\big].\end{aligned} \tag{4.91}$$

Her iki çözüm $\alpha=1$ limitinde tam sayı matematiğinde elde edilen sonuçlara indirgenmektedir (Berkdemir, 2006).

5. SONUÇLAR

Fizikte karşılaşılan ikinci dereceden lineer diferansiyel denklemler, fiziksel olayların matematiksel olarak ifadesidir. Bu nedenle fiziksel olayları anlamlandırabilmek için bu denklemlerin çözümleri büyük önem taşımaktadır. Bu denklemleri çözmek için analitik çözüm yöntemleri, numerik analiz teknikleri ve yaklaşım yöntemleri geliştirilmiştir. Ancak numerik analiz teknikleri ya da yaklaşım yöntemleri ile elde edilen sonuçlar, ilgilenen sistemi yaklaşık olarak açıklamaktadır. Bu nedenle analitik çözüm yöntemlerinin bir sistemi açıklamak için diğer yöntemlere göre üstünlüğü tartışılmazdır. NU yöntemi matematiksel fizikte de sıklıkla karşılaşılan ikinci dereceden lineer diferansiyel denklemleri çözmek için geliştirilmiş sistematik bir çözüm yöntemidir. Bu tez çalışmasında NU yöntemi ile Heun denkleminin özel bir çözümü elde edilmiştir. Bunun için fizikte birçok alanda karşılaşılan Heun denkleminin tekil noktalarından biri sıfır alınarak elde edilen modifiye Heun denkleminin özdeğer ve özfonksiyon çözümleri, ilgili denklemdeki parametrelere bağlı olarak elde edildi. Bu çözümün fiziksel uygulamalarda nasıl kullanılacağını araştırmak için modifiye Heun denklemi ile radyal Schrödinger denklemi arasındaki ilişki incelendi. Woods-Saxon ve Hulthen potansiyelleri için modifiye Heun denkleminin çözümünün Schrödinger denklemi ile birebir uyuşan sonuçlar verdiği gösterildi. Bunun için her iki potansiyel için modifiye Heun denklemindeki parametreler, Schrödinger denklemindeki fiziksel parametreler ile kimliklendirildi. Sonrasında modifiye Heun denkleminin parametrik özdeğer ve özfonksiyon çözümlerinde doğrudan fiziksel parametreler yazılarak Woods-Saxon ve Hulthen potansiyelleri için özdurum spektrumlarının kısa ve kolay bir yolla elde edilebileceği Bölüm-2'de detayları ile anlatıldı.

Bölüm-3'de NU yönteminin sınır koşulları değiştirilerek elde edilen genişletilmiş NU yöntemi tanıtıldı. Bu yöntem ile en fazla dört tekil noktaya sahip olan ikinci dereceden lineer diferansiyel denklemler için de çözüm aranabileceği gösterildi. Standart NU yönteminin temel denklemindeki sınırlar genişletilerek, genişletilmiş NU yöntemi için temel olan bir denklem yazıldı ve bu denklemin özdeğer ve özfonksiyon çözümlerine ulaşıldı. Buna göre eğer bir diferansiyel denklem genişletilmiş NU yönteminin temel denklemine indirgenebiliyorsa, özdeğer ve özfonksiyon çözümleri analitik olarak önerilen bu yöntemle çözülebilir olmalıdır. Bunun için, polinom çözümlerinin varlığı için kuvvet seri çözüm yöntemi ile elde edilen koşulların biliniyor olduğu Heun denklemi ve üç konfluent formu için genişletilmiş NU yöntemi ile çözüm arandı ve elde edilen tüm çözümler için literatürdeki koşulların sağlandığı sonucuna varıldı. Örneğin sekiz sınıfta toplanan Heun polinomlarının tümüne genişletilmiş NU yöntemi ile analitik olarak ulaşıldı. Heun, konfluent Heun, bikonfluent Heun denklemleri ile doğrudan karşılaşılan fiziksel problemlerde de genişletilmiş NU yöntemi ile elde edilen çözümlerin doğrudan kullanılabileceği 3-küre üzerinde Coulomb problemi, bir küre üzerinde Coulomb itmesi ile etkileşen iki elektron problemi, hiperbolik çift-kuyu potansiyeli, iki elektronlu kuantum dot modeli problemi gibi uygulamalar için gösterildi. Sonuç olarak genişletilmiş NU yönteminin sınır koşullarını sağlayan denklemler için analitik bir çözüm yöntemi önerilmiş ve bu yöntemle elde edilen çözümlerin fiziksel uygulamalarda doğrudan kullanılabileceği örneklerle gösterilmiştir.

Bölüm-4'de standart NU yönteminin kesirsel matematikte de kullanılabileceği öngörüsü doğrultusunda konformal kesirsel türev tanımı ile NU yönteminin kesirsel formu önerildi. Konformal kesirsel türev operatörü için mevcut olan kesirsel türev operatörlerinden farklı olarak, cebirsel işlemlerde kolaylık sağlayan çarpım kuralı, bölüm kuralı, zincir kuralı gibi özellikler sağlandığından, kesirsel NU yönteminin kurulması için bu türev operatörü ile çalışıldı. Kesirsel formda önerilen bir temel denklemin, NU yönteminin kesirsel formu ile özdeğer ve özfonksiyon çözümlerine ulaşılabildiği gösterildi. Bu çözümler, kesirsel türevin mertebesini gösteren α sayısına bağlı olarak elde edildi. Yöntemin doğruluğunu göstermek için kesirsel radyal Schrödinger denklemi harmonik osilatör potansiyeli, Woods-Saxon potansiyeli ve Hulthen potansiyeli için çözüldü. Klasik matematikte özdeğer ve özfonksiyon çözümlerinin bilindiği bu üç potansiyel için, kesirsel matematikte elde edilen sonuçların $\alpha = 1$ limitinde bilinen sonuçlara indirgendiği gösterilmiştir. Bu durumda kesirsel NU yöntemi, yöntemin temel denklemine indirgenebilen kesirsel diferansiyel denklemler için analitik bir çözüm yöntemidir.

KAYNAKLAR DİZİNİ

Abdaljawad, T., 2015, On conformable fractional calculus, *J Comput Appl Math*, **279**, 57–66. 52

Ahmed, Z., 1991, Tunnelling through the Morse barrier, *Phys Lett A*, **157**,1. 2

Anderson, D. R. and **Ulness, D. J.**, 2015, Propertiesof the Katugampola fractional derivative with potential application in quantum mechanics, *J Math Phys*, **56**,063502. 52

Bagley, R. and **Torvik, P. J.**, 1983, A theoretical basis for the application of fractional calculus to viscoelasticity, *Journal of Rheology*, **27**, 201-210. 47

Barton, G., 1986, Quantum mechanics of the inverted oscillator potential, *Ann Phys*, **166**,322. 1

Bellucci, S. and **Yeghikyan, V.**, 2013, The Coulomb problem on a 3-sphere and Heun polynomials, *J Math Phys*, **54**, 082103. 28

Berkdemir, A., **Berkdemir, C.** and **Sever, R.**, 2006, Eigenvalues and eigenfunctions of Woods-Saxon potential in PT-symmetric quantum mechanics, *Mod Phys Lett A*, **21**,2087. 16, 17, 61, 63

Buyukkilic, F., **Egrifes, H.** and **Demirhan, D.**, 1997 Solution of the Schrödinger Equation for two different molecular potentials by the Nikiforov-Uvarov Method, *Theo Chem Acc*, **98**, 192—196. 7

Caputo, M., 1967, Linear models of dissipation whose Q is almost frequency independent II, *Geophys J Royalastr Soc*, **13**, 529-539. 48

Caputo, M. and **Mainardi, F.**, 1971, Linear models of dissipation in anelastic solids, *Rivista del Nuovo Cimento*, **1**,161-198. 48

Caruso, F., **Martins, J.** and **Oguri, V.**, 2014, Solving a two-electron quantum dot model in terms of polynomial solutions of a Biconfluent Heun equation, *Ann Phys*, **347**, 130. 42, 43

KAYNAKLAR DİZİNİ (Devam)

Ciftci, H., **Hall, R. L.**, **Saad, N.** and **Dogu, E.**, 2010, Physical applications of second-order linear differential equations that admit polynomial solutions, *J. Phys. A: Math. Theor*, **43**,415206. 31, 32

Downing, C. A., 2013, On a solution of the Schrödinger equation with a hyperbolic double-well potential, *J Math Phys*,**54**,072101. 33, 37

Egrifes, H., **Demirhan, D.** and **Buyukkilic, F.**, 1999a, Polynomial Solutions of the Schrödinger Equation for the "deformed" hyperbolic potentials by Nikiforov-Uvarov Method, *Phys Scripta*, **59**,90. 2

Egrifes, H., **Demirhan, D.** and **Buyukkilic, F.**, 1999b, Exact solutions of the Schrödinger Equation for two deformed hyperbolic molecular potentials, *Phys Scripta*, **60**,195. 2, 5

Ferreira, C. and **Lopez, J. L.**, 2000, The Liouville-Neumann approximation of the regular solutions of the Heun's equations, *Integr Transf Spec F*, **21**,839. 8

Fiziev, P. P., 2010, Novel relations and new properties of confluent Heun's functions and their derivatives of arbitrary order, *J. Phys. A: Math. Theor*, **43**,035203. 32

Flügge, S., 1971, Practical Quantum Mechanics II, Springer, Berlin. 1, 18

Gurappa, N. and **Panigrahi, P. K.**, 2004, On polynomial solutions of the Heun equation, *J Phys A-Math Gen*, **37**,605. 2

Herrmann, R., 2014, Fractional Calculus, World Scientific, Germany. 47, 53

Hortacsu, M., 2011, Heun Functions and their uses in Physics, arXiv:1101.0471v1. 2

Ince, E. L., 1926, Ordinary Differential Equations, Dower, New York. 13

Ikhdair,S. M. and **Sever, R.**, 2007, Polynomial solution of non-central potentials, *Int J Theor Phys*, **46**,2384. 16

Jia, C. S., **Zeng, X. L.** and **Sun, L. T.**, 2002, PT symmetry and shape invariance for a potential well with a barrier, *Phys Lett A*, **294**,185. 2

Khalil, R., **Horani, M. A.**, **Yousef, A.** and **Sababheh, M.**, 2014, A new definition of fractional derivative, *J Comput Appl Math*, **264**,65-70. 3, 52

KAYNAKLAR DİZİNİ (Devam)

Khare, A. and **Sukhatme, U. P.**, 1988, Scattering amplitudes for supersymmetric shape-invariant potentials by operator methods, *J Phys A-Math Gen*, **21**,501. 2

Karayer, H., **Demirhan, D.** and **Buyukkilic, F.**, 2014, A particular solution of Heun equation for Hulthen and Woods-Saxon potentials, *Ann Phys*, **526**, 527. 14

Karayer, H., **Demirhan, D.** and **Buyukkilic, F.**, 2015a, Extension of Nikiforov-Uvarov Method for the solution of Heun equation, *J Math Phys*, **56**, 063504. 23, 28, 36, 38

Karayer, H., **Demirhan, D.** and **Buyukkilic, F.**, 2015b, Some Special Solutions of Biconfluent and Triconfluent Heun Equations in elementary functions by Extended Nikiforov–Uvarov Method , *Rep Math Phys*, **76**(3), 271-281. 23, 41, 45

Karayer, H., **Demirhan, D.** and **Buyukkilic, F.**, 2016, Conformable fractional Nikiforov–Uvarov Method, *Commun Theor Phys*, **66**(1), 12–18. 56

Landau, L. D. and **Lifshitz, E. M.**, 1958, Quantum Mechanics, Pergamon Press, London. 1

Leibniz, G. W., 1853, Oeuvres Mathematiques de Leibniz. Correpondence de leibniz avec Huygens, van Zulichem et le Marquis de L'Hospital Part 1, Libr de A Franck, Paris, France. 3

Lévai, G. and **Znojil, M.**, 2002, The interplay of supersymmetry and PT symmetry in quantum mechanics: a case study for the Scarf II potential, *J Phys A-Math Gen*, **35**,8793. 2

Marks, R. J. and **Hall, M. W.**, 1981, Differintegral interpolation from a handlimited signal's samples, *IEEE Transactions on Accoustics and Speech and Signal Processing*, **29**,872-877. 48

Morse, P. M. and **Feshbach, H.**, 1953, Methods of Theoretical Physics, McGraw-Hill Book Company, New York. 2

Nikiforov, A. V. and **Uvarov, V. B.**, 1988, Special Functions of Mathematical Physics, Birkhauser, Boston. 1, 5, 8

Oldham, K. B. and **Spainer, J.**, 1974, The Fractional Calculus, Academic Press, New York, London. 47

KAYNAKLAR DİZİNİ (Devam)

Olmstead, W. E. and **Handelsman, R. A.**, 1976, Diffusion in a semi-infinite region with nonlinear surface dissipation, *SIAM Rev*, **18(2)**, 275-291. 47

Pahlavani, M. R., 2012, Theoretical Concepts of Quantum Mechanics, Rijeka, Croatia. 7, 18, 19, 57, 59

Ronveaux, A., 1995, Heun's Differential Equations, Oxford University Press, New York. 13, 14, 26, 27, 28, 32, 33, 38

Sahu, B. S., **Agarwalla, K.** and **Shastry, C. S.**, 2002, Above-barrier resonances: analytical expressions for energy and width, *J Phys A-Math Gen*, **35**,4349. 2

Szego, G., 1939, Orthogonal Polynomials, American Mathematical Society, New York. 16

Yeşiltaş, Ö., **Şimşek, M.**, **Sever, R.** and **Tezcan, C.**, 2003, Exponential type complex and non-Hermitian potentials in PT-symmetric quantum mechanics, *Phys Scripta*, **67**,472. 2

Zhang, Y-Z., 2012, Exact polynomial solutions of second order differential equations and their applications, *J Phys A Math Theor*, **45**,065206. 30, 31

Znojil, M., 1999, Exact solution for Morse oscillator PJ-symmetric quantum mechanics, *Phys Lett A*, **264**,108. 2

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER	Adı Soyadı: **H. Hale KARAYER**
	Doğum Tarihi: 1 Temmuz 1983
	Doğum Yeri: Çorlu/TEKİRDAĞ
	Yabancı Dil: İngilizce
EĞİTİM	
Doktora	Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, *Matematiksel Fizik ABD*, 2016
Y.Lisans	Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü,*Matematiksel Fizik ABD*, 2009
Lisans	Ege Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 2006
YAYINLAR	
	Hale Yılmaz, Doğan Demirhan, Fevzi Büyükkılıç, *Solution of the Schrödinger equation for two q-deformed potentials by the SWKB method*, J Math Chem, **47**, 539-547, 2010.
	Hale Karayer, Doğan Demirhan, Fevzi Büyükkılıç, *A particular solution of Heun equation for Hulthen and Woods-Saxon potentials*, Ann Phys **526**, 527, 2014.
	Hale Karayer, Doğan Demirhan, Fevzi Büyükkılıç, *Extension of Nikiforov-Uvarov Method for the solution of Heun equation*, J Math Phys, **56**, 063504, 2015.
	Hale Karayer, Doğan Demirhan, Fevzi Büyükkılıç, *Some Special Solutions of Biconfluent and Triconfluent Heun Equations in elementary functions by Extended Nikiforov–Uvarov Method*, Rep Math Phys, **76**(3), 271-281, 2015.
	Hale Karayer, Doğan Demirhan, Fevzi Büyükkılıç, *Conformable fractional Nikiforov–Uvarov Method*, Commun. Theor. Phys. **66**(1), 12–18, 2016.