

K.O.	
REKTÖR'Ü	
KÜTÜPHANE VE DÜZÜNTÜ	
DAİRESİ BAŞKANLIĞI	
DEM. NO.	11662/2
FIAT	2000

K. Ü.
F - E. F. KİTAPLIĞI
DEM. NO: f3194/2
FIAT : 200, -

HELYUMUN ENERJİ SEVİYELERİ
VE
DALGA FONKSİYONLARININ HESAPLANMASI

Hüseyin Karal

Fizik Dalında

'Doktor'

Onvanı İçin

Karadeniz Teknik Üniversitesi
Temel Bilimler Fakültesi Dekanlığına
Sunulan Tez'dir

TRABZON, 1978



Prof. Dr. Yavuz Gündüzalp Tarafından
Bağışlanmıştır.

Doktorayı Yöneten

Öğretim Üyesi:

Doç. Dr. İskender ÜKSÖZ

Jüri Üyesi:

Jüri Üyesi:

Onaylayan:

K.T.O.

Temel Bilimler Fakültesi Dekanı

Prof. Dr. Yavuz GONDÖZALP



TEŞEKKÖRLER

Bu araştırmada rehberliği kabul edip yürüten, geliştirmekte oldukları teorik usulleri ve bunlarla ilgili FORTRAN programlarını faydalanmama açan sayın hocam Doç. Dr. İskender Üksüz'e ; rezonans olayları üzerinde sayısız tartışma, bilgisayar programının hazırlanması, çalıştırılması ve O.D.T.Ü. kütüphanesinden faydalanma konularındaki çok kıymetli yardımlarından dolayı Dr. Şakir Erkoç'a yürekten teşekkürlerimi arz ederim.

Yine O.D.T.Ü. Teorik Kimya Bölümü öğretim üyelerinden sayın Doç. Dr. F. Bayrakçıken'e ve Doç. Dr. Ü. Pamuk'a doktora dersleri, spektroskopi terimleri ve ayrıca bölümde gösterdikleri ilgi için ; K.T.Ü. Fizik Bölümü'nden sayın Doç. Dr. S. Durmaz'a kitap yardımı, konu ve tezin içindekileri hakkındaki görüşlerinden ; sayın Doç. Dr. A. Çoban'a tez üzerindeki bazı düzeltmelerinden dolayı ; başta Bölüm başkanı sayın Doç. Dr. N. Üzalp olmak üzere Fizik Bölümü'nün öğretim üye ve yardımcılarına iki yıl süreyle öğretim yükümü aralarında paylaşarak çalışmama zaman sağladıklarından dolayı ; ve nihayet sayın Dekan Prof. Dr. Yavuz Gündüzalp'e gösterdikleri idari ve mali kolaylıklar için burada teşekkür etmek en samimi bir borç olmuştur.



Ö Z E T

Elektron-Atom Etkileşmelerinde Rezonans Olayları ile ilgili olan bu araştırma, deneysel bir proje olarak, Edinburgh Üniversitesinde başlamıştır. Böylece, yüksek şiddet ve düşük enerjilerde, momentum ve enerjice dağılmamış bir elektron demeti elde etmek üzere bir elektron 'birrenkleştirici'sinin yapılması plânlanmıştır. Bu düzeneğin çalışma ilkeleri İkinci Bölümde verilmiştir. Araştırma t e o r i k olarak ve Orta Doğu Teknik Üniversitesinde sürdürülmüş ve tamamlanmıştır.

Atomların 'Rezonans Halleri' ilk iyonlaşma enerji sınırlarının yukarısında yer alırlar ve bazı deneylerle gözlenmektedirler. Bu hallerin niteliği ve diğer atomik 'gözlenebilirler' arasındaki konumu, genel hesaplama teknikleriyle birlikte, Birinci Bölümde ele alınmıştır. Rezonans hallerinin incelenmesinde kullanılan önemli deney yöntemleri İkinci Bölümde özetlenmiştir. Teorik açıdan, rezonans hallerinin Schrödinger denklemini çözmekle bulunamayacağı hesaplamalarla görülmüştür. Adı geçen halle-



rin enerji ve 'çizgi' özelliklerinin elde edilmesi için bazı teorik modeller ve hesaplama usulleri geliştirilmiş ve uygulanmaktadır. Bunlar da Üçüncü Bölümde verilmişlerdir. İkinci ve üçüncü bölümlerde rezonans olaylarının mahiyeti ve 'Kendiliğinden İyonlaşan Haller' le olan yakınlığı tamamen belirlenmiş olmaktadır.

Teorik usullerden 'Türev Yöntemi' ODTÜ Teorik Kimya Bölümü'nde geliştirilmiş ve iki elektronlu sistemlerden H^- ve He' un birçok 'S' kendiliğinden iyonlaşan halleri için uygulanarak iyi sonuçlar elde edildiği görülmüştü. Bu hesaplamalarda Kinoshita tipi fonksiyonlar kullanılmıştı. Kinoshita yöntemi, benzeri olduğu Hylleraas yönteminin birçok sınırlamalarını taşımakta, ikiden fazla elektronlu atom sistemlerine veya her simetri türüne genişletilmesi çok zor veya imkânsız olmaktadır. Buna karşılık, Hylleraas yönteminin genel alternatifi olarak kabul edilen 'Konum Etkileşme Yöntemi', ağır yakınsama kusuruna rağmen, her büyüklükteki atom ve simetri halleri için uygulanabilmektedir.

Şimdiki çalışma, Konum Etkileşme Teorisi ve Türev Yöntemi'nin birleştirilmesiyle çok elektronlu ve herhangi simetrideki atom rezonans hallerinin hesaplanması için yürütülebilecek geniş bir projenin ilk basamağını teşkil etmektedir. Bu çalışmada helyum atomunun temel hali ve altı rezonans hali konu alınmış, bunların enerji ve dalga fonksiyonlarını, Sturmian baz cümlesi kullanılarak, verebilecek bir elektronik hesap programı FORTRAN IV dilinde hazırlanıp IBM 370/145 sistemi makinelerde çalıştırıl-



mıştır. Hesaplamaların kuantum fiziği ve cebir esasları Dördüncü Bölümde, kompüter programının tanıtılması Beşinci Bölümde, sonuçlar ise Altıncı Bölümde sunulmuşlardır. Kompüter programının kendisi Ek I olarak verilmiştir.

Bu çalışmada hesaplamaları yapılan helyumun yedi kuantum halinden altısında, bulunan enerji değerleri, kullanılmış olan baz fonksiyonlarının sayıları ölçülerinde deneylerle ve diğer teorik hesaplama sonuçlarıyla uyushmaktadır. Bunların dışında ki bir hal'in enerjisi deneylerinkinden farklı bulunmuştur. Bunun nedenleriyle ilgili tartışma Altıncı Bölümde yapılmıştır.

Tez metninde kullanılan ve yeni veya değişik karşılanabilecek bazı terimler için hazırlanması uygun görülen kısa bir sözlük Ek II olarak verilmiştir.



ABSTRACT

This work, which is related to the resonances in electron-atom collisions, was initiated as an experimental project at the University of Edinburgh. For this purpose, an electron monochromator to obtain electron beams of high intensity and low energy but of limited spread in energy and momentum was planned for construction. The principles of operation of this device are given in Chapter 2. The work has continued and has been completed as a theoretical project at Middle East Technical University.

The resonance states of atoms lie above the first ionization limits and can be observed by various experiments. The nature of these states and their position among other atomic observables, together with general calculational techniques, are discussed in Chapter 1. The most common experimental methods for the investigation of resonance states are summarized in Chapter 2. Theoretical calculations show that resonance states can not be explored by solving the Schroedinger equation. To obtain energies



and line characteristics of these states some theoretical models and methods of calculation have been developed and applied. These are given in Chapter 3. In the second and third chapters, therefore, the nature of the resonance effects and their relation to auto-ionizing states have been explained.

A theoretical technique called the Derivative Method was developed in the Department of Theoretical Chemistry, M.E.T.U. and was shown to give satisfactory results when applied to several S autoionizing states of H^- and He which are two-electron systems. Kinoshita-type functions were used in these calculations. Since the Kinoshita method shares the restrictions of the Hylleraas method, which are in fact similar, its extension to systems of three or more electrons or to an arbitrary symmetry type becomes very difficult or impossible. On the other hand, the Method of Configuration Interaction, which has been considered to be the general alternative to the Hylleraas method can be applied to any atom of arbitrary size and symmetry state, though it suffers from slow convergence.

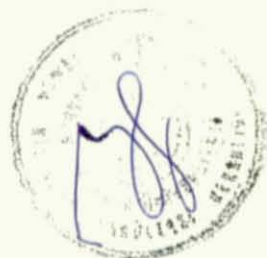
The present work constitutes the first stage of a larger program which could be carried out for the calculation of the resonance states of atoms with several electrons and of an arbitrary symmetry using the combination of the Configuration Interaction Theory and the Derivative Method.

In this work, the ground state and six resonance states of the helium atom have been studied using the above mentioned method. A FORTRAN program for the computation of energies and wave functions has been prepared using the Sturmian basis set and it was run on the



IBM 370/ 145 series machines. The quantum mechanics and algebra of the calculations have been given in Chapter 4. The details of the computer program have been given in Chapter 5, and the results in Chapter 6. The computer program itself is given in Appendix I.

The energies of six of the seven quantum states of He have been shown to agree with the experimental measurements and other theoretical calculations to the order expected from the number of basis functions used. Disagreement has been observed for the other state and the discussion of this case has been given in Chapter 6.



İÇİNDEKİLER

Teşekkürler	i
Özet	ii
Abstract	v
İçindekiler	viii

BİRİNCİ BÖLÜM : GİRİŞ. ATOMLARLA İLGİLİ GENEL YÖNTEMLER,

NİCELİKLER VE SAÇILMA REZONANSLARI 1

1.1	Elektrostatik Enerji, Korelasyon Enerjisi	2
1.1a	Rayleigh-Ritz Yaklaşımı (Değişim İlkesi)	2
1.1b	Tedirginlik Teorisi (Perturbations)	3
1.1c	Hartree-Fock Üzüyümlü Alan Yöntemi	4
1.1d	Korelasyon Enerjisi	5
1.1e	Hylleraas Yöntemi	5
1.1f	Konum Etkileşme (KE) Teorisi	6
1.1g	Çok-elektron Teorileri	9
1.2	Elektron İlginliği (Elektron Çekimi, Electron affinity)	9
1.3	Terim Oranları	10
1.4	Geçiş İhtimalleri (Osilatör Kuvvetleri)	10



1.5	İnce Yapı ve Çok İnce Yapı	11
1.6	Elektron Saçılma Rezonansları ve Kendiliğinden İyonlaşma Olayı	12
İKİNCİ BÖLÜM:	REZONANS HALLERİNİN DENEYLERLE İNCELENMESİ	14
2.1	İki Tanecikğin Çarpışması	15
2.2	Tesir Kesiti Yapıları ve Rezonanslar	16
2.3	Auger'in Sis Odası Deneyleri	18
2.4	Gazların Morüstü Foton Soğurma Tayfı	19
2.5	Elektron-Atom Saçılma Deneyleri	21
2.6	Trokoid Birrenkleştirici	24
ÜÇÜNCÜ BÖLÜM:	REZONANS HALLERİNİN TEORİK İNCELENMESİ	28
3.1	Yakın Eşlenme (close-coupling) Yaklaşımı	29
3.2	Sürekli Bölgenin Kesikli Hallerle Etkileşmesi	32
3.3	Fano'nun Konum Etkileşme Formüllemesi	34
3.4	Rezonanslar İçin Feshbach Formalizmi	38
3.5	Kök Kararlılaştırma Yöntemi	39
3.6	Rezonansların Zaman Kararlılığı Teorisi(ZKT)	40
3.7	Türev Yöntemi	43
DÖRDÜNCÜ BÖLÜM:	HESAPLAMA ESASLARI	47
4.1	Sturmian Fonksiyonlar ve Lineer Olmayan Parametre	48
4.2	Helyum Dalga Fonksiyonu	51
4.3	Hamiltonien ve Bindirme(overlap) Matrisleri	55
4.4	Elemanter İntegraller	65
4.5	Matris Denklemi	68
4.6	Matris Denkleminin Çözümü, Kuvvet Yöntemi	69



BEŞİNCİ BÖLÜM :	KOMPUTER PROGRAMI (AÇIKLAMALAR)	72
5.1	MAIN -ana- PROGRAM	73
5.2	FUNCTION SIGMA	75
5.3	SUBROUTINE SEC	75
5.4	SUBROUTINE UCSEC(Y1,Y2,Y3,X1,X2,X3)	76
5.5	SUBROUTINE DMINVH(A,N,D)	76
5.6	SUBROUTINE POWER(A,S,EV,V,OZ,INDIM,PREC)	78
5.7	FUNCTION SH(L,IS,ALFA,i1,L1,i2,L2,iu1,LU1, iu2,LU2)	79
5.8	FUNCTION TH	80
5.9-10	FUNCTION RH, FUNCTION TH	80
5.11-12	FUNCTION H12, FUNCTION TH12	80
5.13-14	FUNCTION RK(K,i1,L1,...), FUNCTION TK	80
5.15	FUNCTION RI1(IP,IG,A,i,L,iu,LU)	80
5.16-18	FUNCTION RI2, FUNCTION RI3, FUNCTION RI4	80
5.19	FUNCTION RI40(IP,G,A,i,L,iu,LU)	81
5.20-24	FUNCTION RTI1, FUNCTION RTI2, FUNCTION- RTI3, FUNCTION RTI4, FUNCTION RTI40	81
5.25	FUNCTION CLEBG(I,J,L)	81
5.26	FUNCTION RACAH(L1,L2,L3,L3,L4,L5,L6)	82
5.27	FUNCTION FLAM(LA,L,L1,L2,LU1,LU2)	83
5.28-30	FUNCTION G1(IQ,N,L), FUNCTION G2(IQ,JQ, IP,iu,LU), FUNCTION FUN(I,L,iu,LU),	83
5.31	FUNCTION LAMDA(L1,LU1,L2,LU2,LAMINI,LAMMAX)	83
5.32	FUNCTION DELTA(I,J)	83
5.33	SUBROUTINE STATE(i1,L1,i2,L2,L1MAX, N1MAX,i2MAX,i1)	



-Kıymetli Eşime-

. Çalışma süresince en büyük destek ve teşvikçin
olduğu için.



BİRİNCİ BÖLÜM

GİRİŞ:

ATOMLARLA İLGİLİ GENEL YÖNTEMLER, NİCELİKLER VE SAÇILMA REZONANSLARI

Birinci Bölüm'e Giriş :

Bu bölüm genel giriş mahiyetinde hazırlanmıştır. Burada, Elektron-Atom Saçılma Rezonansları ile doğrudan veya dolaylı olarak ilgisi bulunan genel teorik yöntemler ve bu çalışmanın konusu olan niceliklerin atomlara ait diğer önemli gözlenebilirler arasındaki yerlerini daha iyi değerlendirebilmek için bu gözlenebilirler'in teorik ve deneysel karakterleri çok kısa bir tarzda özetlenmek istenmiştir. İlerideki bölümlerde kullanılacak olan 'Konum Etkileşmesi' kavramına biraz daha geniş yer ayrılmış, fakat atomun dış elektrik ve magnetik alanlarla etkileşmesinden doğan Zeeman ve Stark olaylarından bahsedilmemiştir. Bu gibi genel giriş bölümlerinin çok sayıda kaynak numarası vermeye elverişli oldukları açıktır. Burada, bu sayının mümkün olduğu kadar küçük tutulmasına çalışılmıştır. Bölümün, diğer bölümleri izlemekte ve Altıncı Bölümdeki 'Sonuç ve Düşünceler' kısmını daha iyi değerlendirmekte etkili olacağı umulmaktadır.

A handwritten signature in blue ink is visible in the bottom right corner, accompanied by a faint circular stamp or seal.

1.1 Elektrostatik Enerji, Korelasyon Enerjisi

Bir kuantum sistemin dinamik özellikleri Schrödinger denklemi ile araştırılır. Sistem yalıtılmış ise bu denklem zaman parametresini içine almayan duraklı hal özdeğer denklemi

$$H\Psi = E\Psi \quad (1.1)$$

den ibaret olur. Burada H sistemin Hamilton işlemcisi, Ψ dalga fonksiyonu ve E toplam enerjiye eşit olan 'özdeğer'dir. Ψ özfonksiyonu ilgili yaklaşımda sisteme ait bilgileri taşır. N elektronlu bir atomun relâtivistik olmayan Hamiltonien'i sadece elektrostatik etkileşmelerden kurulur. Atom birimleri, (a.b.), cinsinden bu işlemci

$$H = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right\} - \sum_{i>j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (1.2)$$

ile verilir. Burada Z atomun çekirdek yükü, r_i "i" yinci elektronun çekirdeğe uzaklığı, r_{ij} de iki elektron arasındaki uzaklığı gösterir. (1.2) nin son terimi hidrojen atomunda yoktur, bu bakımdan, değişkenlerin ayrılmasıyla, (1.1) denklemi 'tam' olarak çözülebilir. Fakat iki ve daha fazla sayıda elektronlu sistemlerde bu kolaylık ve tam çözüm imkânı ortadan kalkar. Bu takdirde tutulacak yol, (1.1) i "yaklaştırma yöntemleri" ile çözmektir. En çok kullanılan yaklaşık çözüm teknikleri aşağıda özetlenmektedir:

1.1a Rayleigh-Ritz Yaklaşımı (Değişim İlkesi)

Toplam dalga fonksiyonu için birleşme şartı $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ sağlanmış olmak üzere $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ enerji fonksiyoneli Ψ deki küçük değişmelere karşı kararlı, yani ancak ikinci ve daha yüksek mertebelerden değişen, hale getirilme yönüne gidilirse, diğer yazıyla

$$\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0 \quad (1.3)$$

sağlanırsa Schrödinger denkleminde varılır(1). Uygulamada bir veya daha çok sayıda $\{\alpha_i\}$ parametrelerine bağlı bir deneme fonksiyonu seçilerek bununla bir deneme enerjisi hesaplanır:

$$E_d = \{ \langle \Psi_d | H | \Psi_d \rangle \} / \{ \langle \Psi_d | \Psi_d \rangle \} . \quad (1.4)$$

Bu enerji ile deneme fonksiyonu simetrisindeki bir atom halinin hakiki enerjisi E arasında

$$E_d \geq E$$

üst sınır bağıntısı vardır. En iyi deneme fonksiyonu, değişim ilkesine göre

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} E_d = 0, \quad i = 1, 2, \dots \quad (1.5)$$

şartlarıyla bulunacaktır. Anlatılmış olan şekliyle bu ilke temel seviyeler için uygundur. Uyarılmış enerji seviyeleri için alınacak deneme fonksiyonları, aynı simetrideki daha aşağı enerji hallerinin hakiki dalga fonksiyonlarına dik olma şartını da sağlamalıdır.(2). Açıkta ki bu ancak belirli hallerde mümkündür, çünkü aşağı enerji seviyelerinin doğru dalga fonksiyonları her zaman bilinemez. Değişim yöntemi hakkında diğer bilgiler de 'konum etkileşmesi' başlığı altında sunulacaktır.

1.1b Tedirginlik Teorisi(perturbations)

Bu yöntemde Hamiltonian iki veya daha çok sayıda kısma ayrılır:

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad (1.6)$$

Burada H_0 , H' nin iyi bir yaklaşımı olmalı, özdeğeri ve özfonksiyonu kolayca ve duyarlılıkla elde edilebilmelidir:

$$H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0 \quad (1.7)$$

λ ise bir sabittir. Bu şartlar altında dalga fonksiyonu ve enerji için şu açılımlar yapılır:

$$\Psi = \Psi_0 + \lambda \Psi_1 + \lambda^2 \Psi_2 + \dots$$

$$E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \dots$$

Bunların yardımıyla (1.1) denkleminde 1., 2., ..., ve n . mertebede tedirginlik fonksiyon ve enerjileri elde edilebilir(1). Örnek olarak $\lambda = 1$, $\Psi_0 = |0\rangle$ gösterimi ile, birinci mertebeden tedirgin fonksiyon için



$$\psi_0^1 = |0\rangle + \sum |n\rangle \frac{\langle n|H_1|0\rangle}{E_0 - E_n^0} \quad n \neq 0, \quad (1.8)$$

hali verilebilir. Atom enerji hesaplarında tedirginlik işlemcileri olarak elektronlar arası itme, ince yapı, çok ince yapı v.s. Hamiltonien'leri alınmaktadır. Kendiliğinden iyonlaşma olayı ile tedirginlik teorisi arasında yakın ilişki vardır.

1.1c Hartree-Fock Özuyumlu Alan Yöntemi

Değişim ve tedirginlik yöntemleri, elektron sayısı üçü aşınca güçleşir ve doğruluktan uzaklaşırlar. Bunlar yerine, önce Hartree tarafından öne sürülmüş ve daha sonra birçok fizikçi tarafından geliştirilen Hartree-Fock (H-F) yöntemleri kullanılabilir. Bu yöntemde her elektronun diğerinden habersiz, yarıçapa bağlı bir potansiyel alanı içinde hareket ettiği, toplam dalga fonksiyonunun tek elektron spinyörüngemsileri

$$\dot{S}_i(i) = \phi_i(i) \chi(m_{S_i}) \quad (1.9)$$

nin

$$\Psi = (N!)^{1/2} \det |S_1(1) S_2(2) \dots S_N(N)| \quad (1.10)$$

antisimetrikleştirilmiş çarpımlarından kurulacağı kabul edilir. Eğer atom kapalı kabuk değilse bu gibi determinant dalga fonksiyonlarının lineer toplamını almak da gerekebilir. Bu kabuller değişim ilkesi ile birleştirilerek

$$F_i S_i = \sum_{j=1}^N \epsilon_{ij} S_j \quad (1.11)$$

ile verilen integro-diferansiyel denklem sistemlerine varılır. ϵ_{ij} Lagrange çarpanları, F_i , tek elektron işlemcisi, 'direk işlemci', ve 'değiştirmeli' (exchange) işlemcilerin toplamı olan Fock işlemcisidir.

Hartree-Fock denklemleri iteratif yolla veya tedirginlik yöntemi ile çözülebilirler. İteratif yaklaşımda uzay yörüngemsileri

$$\phi_i = f_{n_i l_i}(r) Y_{l_i}^{m_i}(\theta, \psi) \quad (1.1.2)$$



için uygun $f(r)$ fonksiyonları tahmin edilir, direk ve deęiřtirmeli potansiyeller hesaplanır. Bu sonuçlar H-F denklemlerine alınarak yeni $f(r)$ ler bulunur. Uyum saęlanana kadar böylece devam edilir, ve sonuçlar sayı tabloları halinde verilir. Tedirginlik yöntemi uygulandıęı hallerde ise merkezi alan Hamiltonien'i sıfırıncı mertebe enerji işlemcisi olarak alınır, geri kalan işlemciler tedirginlik muamelesi görür. Genellikle (1.6) daki λ yerine çekirdek yükünün tersi, $1/Z$, alınır.

Hartree-Fock yöntemleri çok geniş uygulama görmüş ve elektronik hesap makinelerine uygun tarzda deęişik programlamaları yapılmaktadır. Üzerindeki birçok kısıtlamaların kaldırılması ile elde edilen "Sınırlanmamış Hartree-Fock Yöntemleri" ile daha iyi sonuçlar alınıyorsa da birçok maksatlar için bunlar yeterli deęillerdir. Daha sıhhatli yöntemler bundan sonra konu edilecektir.

1.1d Korelasyon Enerjisi

Hartree-Fock yöntemleri antisimetrik dalga fonksiyonları kullanarak paralel spinli iki elektron arasındaki etkileşmeyi hesaba katmış olmakla beraber zıt yönelmiş spinler halini ihmal etmektedir(3). Bu yüzden enerji farkları, geçiř ihtimalleri ve izafi (relativistik) katkıların hesabı gibi birçok hallerde gereken duyarlılıkta dalga fonksiyonları ve enerjiler H-F la elde edilemez. Bir atom veya molekülün izafi olmayan hakiki enerjisi ile H-F enerjisi arasındaki farka "korelasyon Enerjisi" denir. Bu enerji, toplam enerjinin % 1-5 i gibi küçük bir miktardır. Bu farkı hesaba katmak için geliştirilen yöntemlere "korelasyon yöntemleri" adı verilmiştir. Bunların en önemli iki tanesi Hylleraas Yöntemi ve Konum Etkileşme Yöntemleri'dir.

1.1e Hylleraas Yöntemi

Elektronlararası etkileşmeyi hesaba katmak üzere Hylleraas(4), elektronlar arası uzaklığı, $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, doğrudan dalga fonksiyonuna sokmayı düşündü. "Hylleraas fonksiyonu" diye adlandırılan



$$\Psi(r_1, r_2, r_{12}) = \exp\left\{-\frac{1}{2}k(r_1+r_2)\right\}$$

$$\cdot \sum_n \sum_l \sum_m C_{nlm} \{k(r_1+r_2)\}^n \{k(r_2-r_1)\}^l (kr_{12})^m \quad (1.13)$$

yi ve deęişim yöntemini kullanarak He için birkaç terimle çok iyi enerjiler elde etmiştir. Hylleraas yöntemi sonraları daha da geliştirilmiştir(5-6). Bu yöntemle üç elektronlu atomlara gidildiğinde hesaplanması pek zor olan

$$\int \exp\{-(ar_1+br_2+cr_3)\} r_1^d r_2^e r_3^f r_{12}^g r_{23}^j r_{13}^h d\tau \quad (1.14)$$

tipinde integrallerle karşılaşılmasıdır. Bunlar ancak son yılların hızlı elektronik makinalarıyla yeterli sayıda hesaplanabiliyorlar. Daha büyük atomlara gelince Hylleraas yöntemi imkânsız denecek kadar zorlaşmaktadır. Bu yöntemin kendiliğinden iyonlaşan hallere uygulanmasından kesim 3.6 da bahsedilecektir.

1.1f Konum Etkileşme (KE) Teorisi

Küçük atomlarda Hylleraas, herhangi atom veya molekülde H-F, sınırlandırılmamış H-F, H-F Tedirginlik vs. yöntemlerinin genel alternatifini "konum etkileşme yöntemleri" dir. Aynı yöntemler için başka isimler de kullanılmaktadır: Konumların Süperpozisyonu, (SOC), Konumların Karışımı, (CM), gibi. Bu yöntemler her sisteme uygulanabilecek genellik, doğrudanlık ve kavram sadeliği ile tanınırlar. Bunların yanında yavaş yakınsama ve dolayısıyla uzun hesaplama zamanları gerektirme özelliğine sahiptirler. Konum etkileşme yöntemlerinin tayfın sürekli bölgedeki yüksek enerjili hallere uygulanmasında parlak sonuçlar alınamayacağı iddiasına (7) karşılık, He gibi küçük bir atomda üst seviyeleri taban seviyesine göre daha doğru verebildiği Green ve arkadaşlarınınca yapılan hesaplardan anlaşılmaktadır(8).

Konum etkileşme yönteminde önce, yörüngemsi yaklaşımının elektron korelasyonunu işlemekteki kusuru giderilmek üzere, bir



$|\pi LS\rangle$ multipler (çokkatlı) ini veren birçok "konum fonksiyonları" toplanarak

$$\Psi(LS) = \sum_{i=1}^M a_i (\alpha_i LS), \quad M = 1, 2, \dots \quad (1.15)$$

"konum etkileşme fonksiyonu (KEF) " teşkil edilir. Bu ifadede α_i konumların parite ve eşlenme modellerini, a_i de genel olarak kompleks sayıları gösterir. K ve K' gibi iki konumun etkileşmesi için gerekli şart

$$\langle \Phi(K) | H | \Phi(K') \rangle = 0 \quad (1.16)$$

dır(9). Bu, iki konumun paritelerinin aynı olması demektir. İkinci adım olarak bu KEF ile (1.4) enerji fonksiyoneli lineer değişim ilkesine göre minimumlaştırmak ve a_i katsayılarını tayin etmektir. Enerjinin duraklı olma şartı, bilindiği gibi

$$\sum_{j=1}^M (H_{ij} - E S_{ij}) a_j = 0, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (1.17)$$

denklemler sistemini veya

$$\tilde{H} \tilde{a} - E \tilde{S} \tilde{a} = 0 \quad (1.18)$$

genel matris özdeğer denklemini verir. Burada Hamiltonien matrisi

$$H_{ij} = \langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle \quad (1.19)$$

ve bindirme (overlap) matrisi de

$$S_{ij} = \langle \Phi_i | \Phi_j \rangle \quad (1.20)$$

ile tanımlanmışlardır. E Lagrange çarpanı, $\tilde{a}$ ise özvektördür. $\{\Phi_i\}$ nin ortonormal bir cümle olduğu hallerde $S_{ij} = \delta_{ij}$ dir. Eğer enerji matrisi $M \times M$ boyutlu ise ve M tane özdeğer

$$E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_m$$

sıralamasına tabi tutulursa E_p , sistemin p yinci sıradaki hakiki e-



nerjisine bir üst sınırdır. Açılıma bir terim daha eklenirse sıralama bağıntısı

$$E_{p-1}^{(M)} \leq E_p^{(M+1)} \leq E_p^{(M)}$$

ile uyum halinde kalır. Bu demektir ki $\{\phi_i\}$ cümlesi "tam" lığa yaklaştıkça $E_p^{(M)}$ de yukarıdan hakiki E_p ye yaklaşır.

ϕ_i konum fonksiyonlarının sağlaması gereken spin ve uzay simetri şartları grup teorisi, izdüşüm işlemcileri veya vektör toplama yöntemleri ile yerine getirilebilir. Toplam dalga fonksiyonu Ψ nin bütün simetri özellikleri ϕ lerde olmayabilir. Fakat anti-simetri ilkesi genellikle şart koşulur ve bu da ϕ_i deki spinyörüngemsilerinin çarpımlarını Slater determinantlarında toplamak veya gerekirse, spin ve uzay simetri şartlarını da sağlamak üzere, bunların lineer toplamını almakla yerine getirilir. Spin işlemcileri S^2 ve S_z nin istenen özdeğerli özfonksiyonları olan ϕ_i lere "spince uymuş konum fonksiyonları" denir. Eğer ayrıca uzay simetri şartlarını da sağlıyorlarsa "simetrice uymuş" (symmetry adapted) oldukları söylenir.

Uygulamalarda çoğu kez Hartree-Fock çözümü ϕ_{HF} konum etkileşme fonksiyonuna dahil edilir, fakat yeni "eniyeleştirme" (optimizasyon) işlemlerine alınmayabilir. Eğer önce H-F problemi çözülürse "tamam konum etkileşmesi" yaptırmaktan kurtulunabilir.

K E yönteminin yavaş yakınsama derdini giderecek etkili konumlar seçmek için belirli kurallar yoktur. Löwdin tarafından teklif edilen "tabii yörüngemsiler" (10), yoğunluk matrislerinin özfonksiyonları olarak tayin edilebilirse bunlarla hızlı yakınsama sağlanır(11). Aksi halde yüzlerce terimli KEF ile hesaplamalar gerekebilir.

Konum etkileşmesi ile Hylleraas yöntemlerini birleştiren son zamanlardaki bazı çalışmaların(12) çok ümit verici olduğu görülmektedir. Bu yöntemde konum fonksiyonları şöyle alınmaktadır:



$$\Phi_k = o(L^2) \wedge \{ \chi_k r_{ij}^{v_k} \cdot \prod \phi_{ks}(\vec{r}_s) \} .$$

Burada $o(L^2)$ yörünge açısal momentum izdüşüm işlemcisi, $\wedge$ antisimetrikleme işlemcisi, χ_k spin fonksiyonudur. Bu yöntem KE nin ya - vaş yakınsama kusurunu gidermektedir.

1.1g Çok-elektron Teorileri

Bu teorilerin gayesi elektronlar arası etkileşmeyi iki elektron fonksiyonları u_{ij} lerle toplam dalga fonksiyonuna sokmaktır. Bu teorilerin birçoğu arasında en çok bilinen birisi Sinanoğlu'na aittir(13). Sinanoğlu, kapalı kabuk bir atomun dalga fonksiyonu Ψ yi aşağıdaki şekilde tanımlar:

$$\Psi = \Phi + \chi , \quad \langle \Phi | \Phi \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle = 1, \quad \langle \Phi | \chi \rangle = 0 \quad (1.21)$$

Burada Φ , H-F çözümü olup, korelasyon kısmı χ

$$\chi = A \{ (12 \dots N) \{ \sum_{i=1}^N \frac{f_i}{(i)} + \sum_{ij} \frac{u_{ij}}{(ij)} + \sum_{ijk} \frac{u_{ijk}}{(ijk)} + \dots + \frac{u_{12 \dots N}}{12 \dots N} \} \}$$

dir. Sinanoğlu, tek sayıda indisli "U" ların önemsiz olduğunu, diğerlerinin de "bağlantılı kümeler" (linked clusters) ve "bağlantısız kümeler" olarak u_{ij} lere indirgenebileceğini ispatlar, ve bunların da değişim yöntemi ile nasıl bulunacağını gösterir. Bu teorianın açık kabuk atomlara genişletilmesi ise Üksüz tarafından incelenmiştir.(14). Üksüz, korelasyon fonksiyonunu ve dolayısıyla korelasyon enerjisini

a) İç, b) Kutuplanma ve Yarı-iç, c) Tüm Dış

olmak üzere üçe ayırır, ilk ikisini sonlu KE ile, üçüncüsünü de yarı deneysel yöntemlerle hesaplar. Açık kabuk sistemlerde tek elektron yerdeğiştirmeleri artık ihmal edilemez

1.2 Elektron İlginliği (Elektron Çekimi, electron affinity)

Şimdiye kadar anlatılan yöntemlerle atomun 'multiplet'



denilen $2S+1L$ halinin kaba denebilecek enerji hesapları yapılır. Bu hesaplar spektroskopi gözlemleri ile karşılaştırılır ve doğruluklarına bakılır. Enerjiden başka atomlara ait bazı gözlenebilirler de araştırma konusudur. Fakat bunlar bir bakıma enerji özdeğer probleminin çözümünün uygulamaları sayılabilir. Bunların hesap duyarlıkları enerjideki duyarlılıkla aynı olmak zorunda değildir. Bu gözlenebilirlerin teori ve deney taraflarına kısaca değinilecektir. Bunlardan biri olan "saçılma rezonansları" veya "kendiliğinden iyonlaşma olayı" sonuncu kesimin konusu olacaktır.

Bir A atomunun elektron çekimi, A atomunun ve negatif iyonu (A^-) nun temel seviyeleri enerjilerinin farkı olarak tanımlanır. Kararlı bir negatif iyon için elektron çekimi'nin pozitif olması gerekir. Deneylerle hangi elementin negatif iyon yaptığı bulunarak hesap sonuçları ile karşılaştırılabilir. H-F yöntemiyle olmasa bile korelasyon yöntemleriyle deney sonuçları doğrulanabilmektedir.

1.3 Terim Oranları

Bir konumun terimlerinin ayrılma miktarı deneylerde hassas olarak gözlenebilir. İyi teorik sonuçları ise KE yöntemleri vermektedir. Sayılarla şu örnek verilebilir:

Karbon için:

$$\begin{aligned} E(^3P-^1D)/E(^1D-^1S) &= 0.8989 \text{ ab.} \quad \dots\dots\text{teori.} \\ &0.89 \quad \text{ab.} \quad \dots\dots\text{deney.} \end{aligned}$$

1.4 Geçiş İhtimalleri (osilator kuvvetleri)

Bir atomun kendiliğinden veya bir dış tesirle enerji alarak veya vererek daha yüksek veya daha düşük enerjili bir kuantum haline geçme ihtimali, eğer dejenerelik yoksa, tek elektron hali ve "uzunluk" şekliyle

$$f_{ij} \propto (E_j - E_i) |\langle j | \vec{r} | i \rangle|^2$$

dir. Çok elektronlu bir atomda $\vec{r}$ yerine $\sum \vec{r}$ alınmalıdır. Elektrik dipol yaklaşımında çizgi şiddeti ise



$$S_{ij} = \sum_{m_i} \sum_{m_j} |\langle j m_j | e^{\vec{r}} | i m_i \rangle|^2$$

yani f_{ij} ile orantılıdır. Karşılaştırılacak deney sonuçları "demet-yaprak spektroskopisi" den alınabilir. İnce bir levhadan geçen atom demeti şiddetinde v demetin hızı olmak üzere,

$$I(x) = C \exp(-x/vt_j)$$

bağıntısına göre bir azalma olur. Bir salma olayında da üst seviyedeki halin nüfusunun

$$N_j(t) = N_0 \exp(-A_{ji}t)$$

olduğu bilinmektedir. Karşılaştırma sonucu

$$t_j = 1/A_{ji}, \quad t_j = \sum_i 1/A_{ji}$$

bağıntılarından ortalama ömür bulunabilir. Teorik hesap yönünden ise küçük atomlarda Hylleraas ve Tedirginlik yöntemleri iyi bulunmuştur. Genel olarak kapalı kabuk çokelektron teorisinde 'tüm dış' katkısı ihmal edilen KE fonksiyonlarının verimli olduğu söylenebilir. (13).

1.5 İnce Yapı ve Çok İnce Yapı

Yarı izafi bir teori ile elektron spin ve magnetik momenti Schrödinger denkleminde sokulabilir. Bu takdirde birinci mertebe enerji katkısı

$$\Delta E = \langle \gamma L S J M_j | \xi(L, S) \vec{L}_{op} \cdot \vec{S}_{op} | \gamma L S J M_j \rangle$$

ile hesaplanır. "iyi kuantum sayıları" olan J, M_j , her multipleti $2J + 1$ tane "seviye" ye ayırır. LS eşlenmesinde aralık kuralı

$$\Delta E(J) - \Delta E(J-1) = \xi \cdot J$$

deney sonuçları ile kolayca karşılaştırılabilir.

Eğer çekirdek spin ve magnetik momentleri ile elektronların hareketi arasındaki magnetik dipol ve elektrik kuadrupol etkileşimleri de hesaba alınırsa seviye'lerin de yeniden ayrıldığı çok duyarlı aletlerle görülmektedir. LS eşlenmesinde magnetik dipol çok ince yapı aralık kuralı, F, çekirdek spini dahil, toplam açısal momentum kuantum sayısını göstermek üzere

$$E(F) - E(F-1) = \lambda F$$

$$\lambda = hA_J$$

bağıntıları ile belirlenir. A_J nin hesaplanmasına giren ve literatürde değerleri verilen üç büyüklüğün sembolleri ve adları şöyledir: (21)

- a_ℓ : Yörünge terimi
- a_d : Spin dipolar terimi
- a_c : Fermi temas terimi.

Böylece aralık kuralı deneylerle karşılaştırılır. Hesaplama sahasında en verimli yöntemin 'çokcisim tedirginlik teorisi' olduğu görüşü kuvvetlidir.

1.6 Elektron Saçılma Rezonansları ve Kendiliğinden İyonlaşma Olayı

Bu bölümde tezimizin konusu olan saçılma rezonanslarına temas etmekteki gaye onların atomlara ait diğer gözlenebilirler cümlesindeki yerinin belirtilmesidir. Bu kesimde söylenecekler ilerideki bölümlerde fazlasıyla inceleneceğinden daha geniş kaynaklar listesi de oralarda verilecektir.

Atomların ve moleküllerin 'rezonans' veya 'kendiliğinden iyonlaşan' hallerini ilkönce Auger, Wilson sis odası deneylerinde, X-ışınları soğuran bir gazın saldırdığı elektron izleri yardımıyla tesbit etmişti. Ayrıca bazı elementlerin tayf çizgilerinin sıra, genişlik ve keskinliği, şiddetlerindeki simetri özellikleri, ve bunların kaynağın elektron yük yoğunluğuna bağlılığı dik katleri çekmişti.(16-18). Bazı asal gazların morüstü foton soğurma



tayflarında da bu gibi hususiyetler görüldü(19). Diğer taraftan elektron-atom-molekül saçılma tesir kesitlerinde, elektron enerjisinin fonksiyonu olarak, gözlenen sivri yapı'ların (structure) izahı gerekti. Bu bulgular astrofizik ve uzay çalışmalarında, elektron spektrometri'de önemlidir. Hatta NASA bu konuda geniş bir simpozyum düzenlemiştir(20). Adı geçen gözlemler genellikle atomların yukarı enerji seviyelerini ilgilendirmekte, ve Schrödinger denklemi ile normal olarak açıklanamamaktadır. Atom ve moleküllerin sözkonusu bu hallerine "Kendiliğinden İyonlaşma" veya "Rezonans Saçılma" olaylarının sebeb olduğu anlaşılmıştır. Bu hallere ise "Kendiliğinden İyonlaşan Haller" veya "Rezonanslar" denmektedir. Rezonans hallerinin (ışınım-sız bozunmaya karşı) ömür süreleri izinli geçişlere nispetle binlerce defa küçüktür: $10^{-11} - 10^{-15}$ sn.

Atomların rezonans hallerinin enerji ve diğer özelliklerini bulmak için değişik teoriler geliştirilmiştir. Çok duyarlı dalga fonksiyonları gerektiğinden H-F yöntemleri yetersizdir. Önemli teorik modeller ve referansları üçüncü bölüme konu yapılmıştır. Teorik yöntemler "bağlı haller" ve "saçılma" diye başlıca iki bakış açısına ayrılabilirler. En önemli olanlar arasında Fano'nun 'konum etkileşme teorisi', 'Feshbach izdüşüm işlemcisi yöntemi', 'saçılma-yakın eşlenme', 'zaman kararlılığı' ve 'çok konumlu enerji sınırı' usulleri sayılabilir.

Bu çalışmada "Türev yöntemi" diye adlandırılan yeni yeni denenmekte olan bir yöntem ve "konum etkileşme dalga fonksiyonları" kullanılarak helyum atomu için kendiliğinden iyonlaşan seviyelere ait enerji ve vektör hesapları yapılmıştır. Hesaplama esasları dördüncü bölümde, sonuçlar altıncı bölümde sunulmuştur.



İKİNCİ BÖLÜM

REZONANS HALLERİNİN
DENEYLERLE İNCELENMESİ

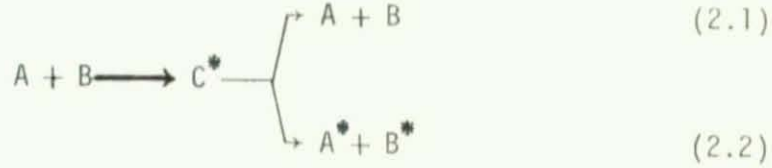
İkinci Bölüme Giriş:

Rezonans olayları üzerinde yapılan deneyler bir taraftan hesap sonuçlarını kontrol etmek, diğer taraftan bu olayların mahiyetini açıklamak için gerekli olduklarından ayrı bir bölüme konu edilmişlerdir. Deneyler daha çok düşük enerjili haller için yapılabilmekte, çok yüksek enerjili rezonanslar hakkındaki bilgiler ise yalnızca teorik çalışmalardan gelmektedir.

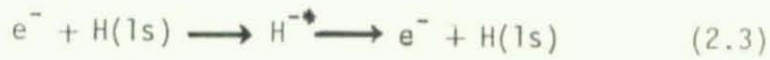
Diğer bir husus da bu araştırmanın ilkönce deneysel bir proje olarak başlatılmış olmasıdır. Projenin ilk basamağı elektron demeti için iyi bir kaynak ve 'birrenkleştirici' (monokromatör) inşa edilmesi, daha sonra çarpıştırma odası ile detektör düzeneğinin bunlara eklenmesi idi. Yapılan hazırlıklara rağmen tamamlanıp çalıştırılmamış olan bu aletlerden sadece Prof. Farago ile birlikte plânlanan 'trokoid birrenkleştirici' nin elektron optiği yönünden kısa teorisi verilecektir. Bölümün geriye kalan hepsi başka araştırmacıların deneylerine ayrılmıştır.

2.1 İki Tanecğin Çarpışması

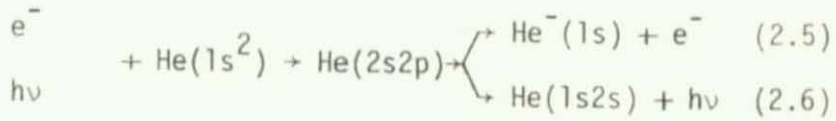
A, B iki kuantum tanecik (atom, molekül, iyon vs.) olsun. Bunların rol aldığı bir çarpışma olayında çeşitli sonuçlar doğar:



(2.1) olayı esnek bir çarpışmadır. Daha açık iki örnek verilebilir:



Bu reaksiyonların ara ürünleri (*) sembolü ile gösterildiği üzere 'uyarılmış' haldedirler ve "k a r a r s ı z" dırlar. Diğer bir deyişle 'rezonans halinde' dirler. Elektron atarak bozundukları için bunların 'kendiliğinden iyonlaşan' haller oldukları da doğrudur. Şimdi de



olayına bakalım. Temel seviyesindeki helyum atomu elektron veya fotonla vurularak ilk iyonlaşma enerjisinin yukarısındaki yarı dayanıklı bir kuantum haline sokulur. Bu halin iki bozunma kanalı, "ışınımsız bozunma" (kendiliğinden iyonlaşma), (2.5), ile ışımlı bozunma, (2.6), birbiri ile yarış halindedir. Fakat bu özel misalde ve birçok hafif atomlarda kendiliğinden iyonlaşma olayı daha kuvvetli ihtimaldir. $He(2s2p)$ için ikinci bir bozunma kanalının varlığı ışımlı bozunma tayf çizgi genişliğine ayrıca bir katkıda bulunur ve onu beklenenden büyük yapar.

Başka bir deneyde şu durum meydana gelebilir:





Bu bir "esnek olmayan çarpışma" örneğidir. Çarpışmalarda hangi çeşit sonuçların doğacağı parçacıkların enerjilerine bağlıdır. Ölçülen kesimiyetler de muhtelif olabilir. Meselâ (2.7) için reaksiyon tesir kesiti B^* nin üretim genliğiyle ölçülür ve tabiatıyla bu, B^* nin bozunma genliğinden farklı bir şeydir(22).

2.2 Tesir Kesiti Yapıları ve Rezonanslar

Bir elektron demeti atomlarla çarpıştırılırsa ölçülen reaksiyon tesir kesitinin grafikleri karışık yapılar gösterir, maksimum ve minimumlardan geçer. Tanım itibarıyla bu yapı(structure)ların herbiri rezonans olarak alınmamaktadır. Rezonans tesirlerini en başta "kırınım" tesirlerinden ayırmak gerekmektedir(23). Her rezonansın faz kayması tek bir "kısmi dalga" ya bağlıdır(üçüncü böl.) Bu kısmi dalga da saçılma açılarından tayin edilir. Kırınım olayları ise birçok kısmi dalganın ortak sonucudur. Başka bir ölçü de

$$k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$$

ve a_0 atomun çapı olmak üzere, rezonans dışı olayların

$$a_0(\Delta k) \ll 1$$

şartına uyan bölgelerde hızlı bir tesir kesiti değişmesine uğramayacaklarıdır. Meselâ $\Delta k = 0.01$ atomik birimler sahasında $E = 20$ eV ise $\Delta E = 0.5$ eV olur ki, bu, gözlenmiş rezonansların genişliğinde veya daha fazladır. Bir rezonansın genişliği, rezonans eden ve 'birleşik yarı-kararlı ara hal' diye adlandırılabilir halin ömrünün tersi ile orantılıdır. Bu ömür de yarı kararlı ara halin bozunabileceği modlara eşlenme kuvvetine göre çok kısa veya çok uzun olabilir. Bu da seçim kurallarına bağlıdır.

Rezonans eden veya etmeyen haller farklı reaksiyon kanallarındaki davranışlarıyla da ayrılabilirler.(Reaksiyon kanalla-



rından üçüncü bölümde bahsedilecektir). İkincilerde, bir reaksiyon kanalındaki davranışın diğerindeki ile irtibatlı olması umulmaz, fakat rezonans olaylarında, tek bir faz kayması olduğundan, enerjice girilebilir her reaksiyon kanalında aynı toplam enerji ve çizgi genişliğinde yapılara raslanması beklenir.

Özel bir örnek alalım. Elektronların He atomundan esnek saçılma deneylerinde(24) 19.3 eV ta yaklaşık 0.1 eV ($\Delta k=0.002$ ab) genişliğinde bir yapı elde edilmiştir. Bunun $\text{He}^-(1s2s^2)^2S_{1/2}$ seviyesi ile bir rezonanslaşmayı gösterdiği kabul edilmektedir. He^- nin bu seviyesi kendiliğinden iyonlaşabilir, yani sonsuz değil sonlu bir ömrü vardır. Dolayısıyla He^- gerçek(reel) değil, kompleks enerjili bir haldir, fakat grafiklerde görülen bunun gerçek olan kısmıdır. Adı geçen rezonans yapının yarı genişliği 0.1 eV yaklaşık 10^{-14} sn lik ömre karşılık gelir. Rezonans eğrisinin şekli, derince bir minimum, sonra küçük bir maksimum ile bir dağılım eğrisini andırır ve Fano çizgi şekillerine (üçüncü bölüm) uyar.

Tesir kesitlerindeki bazı sivri yapılar da birçok rezonansın 'girişimi' nden meydana gelebilir. Böylelerinin teşhis edilmesi oldukça zordur. Fano profilleri ve S dalga rezonansı için geçerli tek seviye Breit-Wigner formülü de izah için yetmeyebilir.

Adi bir saçılma olayında vuran taneciğin çarpışma bölgesinde geçirdiği zaman, bölgenin çapı ve hızının tersi ile orantılı olmasına karşılık rezonans çarpışmasında bu zaman uzun ve ortalama anlamda rezonanslaşan halin ömrü kadardır. Eğer bu iki zaman ölçülebilselerdi bize iki tip saçılmanın en güzel ayırımını vereceklerdi. Fakat normal deneylerde ölçülenler bunlar olmayıp bu iki etkileşmenin hızla değişerek karakteristik rezonans biçimini veren girişim tesirleridir(23). Bir defa vurulan atom, enerjisi artıp vuran elektronu yakalayınca, onu salması için, yeni oluşan kuantum halinin kendine has "ömrü" sonunda "kendiliğinden iyonlaşmasını" beklemek gerekir. Mutlak anlamda her zaman olmasa bile, bu durum saçılma rezonansları ile kendiliğinden iyonlaşmanın alâkasını ve iki terimin birbiri yerine kullanılmasıdaki uygunluğu izah eder.



Bu kesime rezonansların kalitatif bir tartışmasına ait olduğu görünüşü verilmişken bunların iki çeşide ayrılacaklarından de sözedilebilir(22). Birinci grupta 'kapalı kanal rezonansları' söylenirse bunlar, gelen parçacıkla hedefin uyarılmış hali arasındaki etkileşme potansiyeli bir 'bağlı hal' verecek ölçüde kuvvetli ise ortaya çıkanlardır. Böyle bir hal, enerjice, gelen tane- ciğin sonsuzda olduğu hedefin temel halinden yukarıdaysa ve Hamil- tonien'deki terimlerle bu sürekli tayf haline eşlenmiş ise, gelen parçacığı atarak bozunacaktır. Hedefin uyarılması bir atomun elek- tronik yapısında, bir molekülün ise elektronik, titreşme ve dönme kuantum özelliklerinde değişikliklere sebeb olabilir. Bunlara daya- narak 'elektronik', 'titreşme' ve 'dönme' kendiliğinden iyonlaşma deyimleri kullanılmaktadır. Birinci grup rezonansların en önemli bozunma modları enerjice yasaklanmış olduğundan, çizgi genişlikleri azdır. Bu yasaklanmanın sebebi, muhtemel eşlenme kanallarına nispet- le enerjice düşüklüktür. Kapalı kanal rezonanslarına daha çok atom fiziğinde rastlanır.

İkinci grupta ise 'şekil rezonansları' veya 'potansi- yel rezonansları' vardır. Etkileşme potansiyeli bir 'ara bağlı hal' verecek fakat hedefin kuantum halinde değişiklik yapmayacak cinsten, genellikle merkezci kuvvetten doğan itici 'engel kuyrukları' dır. Bu rezonanslar enerjice bozunma modlarının yukarısında yer alırlar. Çizgi genişlikleri diğer guruptakilere göre fazladır. Şekil rezo- nanslarına en çok molekülde rastlanır. Molekül spektroskopisinde kullanılan 'önayırışma'-predissociation- deyimini de rezonanslar için- dir ve en iyi şekilde potansiyel eğrileri ile izah edilmektedir(25).

2.3 Auger'in Sis Odası Deneyleri

Kendiliğinden iyonlaşan haller'in ilk delilleri, Wilson sis odasındaki bir gazın X-ışınları alması halinde, bir noktadan ay- rılan elektron izlerinin Auger tarafından araştırılması sonucu el- de edilmiştir. Bu izlerden biri uzun olup ışık kuantumunun K kabu- ğundan söktüğü fotoelektrona ait olarak yorumlandı. Diğer bir iz



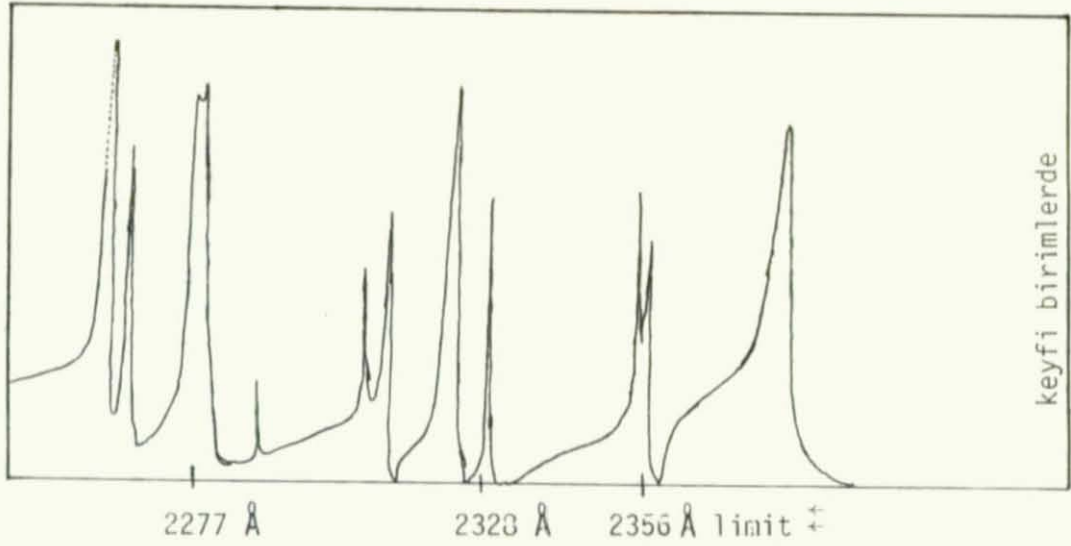
ise ilgili gaz atomunun karşılık uyarılma enerjileri K ve L cinsinden K-2L kinetik enerjili bir elektrona uygun uzunlukta idi. Bu çizginin kuantum izahı, K kabuğu ile aynı enerjide bir $1s^2 2s^0$ Es sürekli bölge konumunun bulunduğu, ve elektronun atılarak $1s^2 2s^0$ a kendiliğinden iyonlaştığı şeklinde yapıldı. Bu ilke olarak doğru fakat teferruatta kaba bir yaklaşımdı(17). Gözlenen daha kısa elektron izleri de $1s^2 2s^0$ konumlu iyonun kendiliğinden iyonlaşmalarına bağlanabilir. İlk anlatılan olay, yani bir iç kabuk elektronunun iyonlaşmasıyla oluşan halin ikinci bir elektron daha atarak ışımasız bozunması, Auger Olayı olarak alınmaktadır.

2.4 Gazların Morüstü Foton Soğurma Tayfı

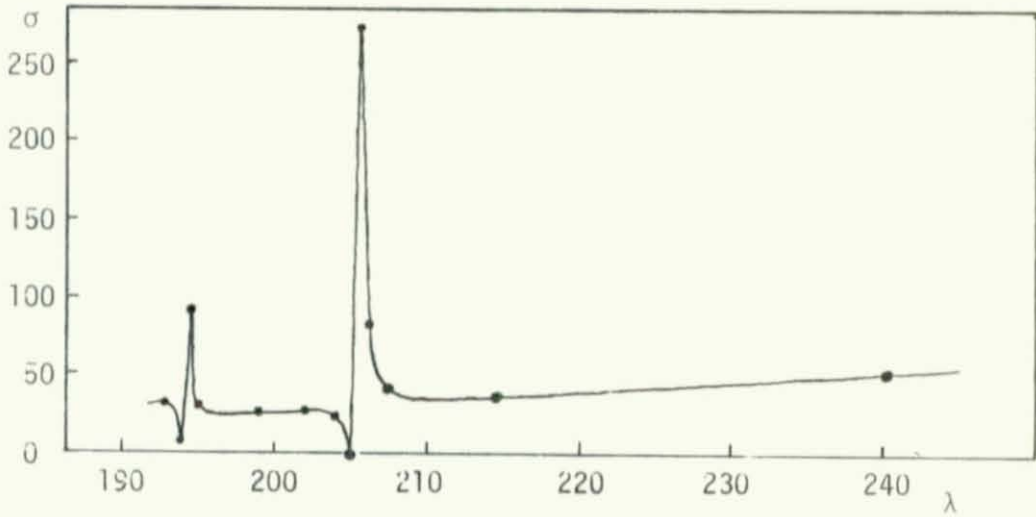
Oda sıcaklığı veya daha yüksek sıcaklıklardaki gazların ilk iyonlaşma sınırı üstündeki enerjilerde foton soğurma tayfları, radyasyon kaynağı ve ölçü duyarlılığı gereklerinden anca yakın zamanlarda iyice araştırılabilmektedir. Daha önceleri CuI in salma tayfını inceleyen Allen(18), bazı çizgilerin fazlasıyla geniş ve yaygın (diffuse) olduğunu gözlemiş ve "kendiliğinden iyonlaşma" yı sebep ve isim olarak ileri sürmüştü. Çünkü Allen bu çizgilerin özelliklerinin kaynağın plâzma yoğunluğuna bağlı olduğunu anlamıştı. Garton tarafından BaI üzerinde yapılan başka bir araştırmada(26) ise kendiliğinden iyonlaşmanın pay aldığı soğurma tayf çizgilerinin genişliği, simetrisizliği ve şiddet özellikleri Şek.2.1 de de görüldüğü gibi açıkça elde edilmişti. Bu çalışma, plâzma tesirlerini değerlendirmek için, hem 'fırın' da hem de 'şok tüpünde' tekrarlanmıştır.

En önemli foton soğurma deneylerinin bir kısmı da Madden ve Codling'e aittir(19). Bu önemli araştırmada radyasyon kaynağı olarak ışınımı sürekli, güçlü ve uygun kutuplanmış olan 180 MeV elektron sinkrotronu kullanılmıştı. Spetrografın aralığı 0.06 Å^0 ve ağı 3 m çapında, 600 mm^{-1} çizgi yoğunluğunda ve geliş açısı 84.5^0 idi. Ölçüler $0.06-0.3 \text{ mm Hg}$ basınç sahasında alınmıştı. He için $165 - 200 \text{ Å}^0$ bölgesinde yirmiden fazla rezonans gözlenmişti. Bunların dört seri teşkil ettikleri ve He temel seviyesinden iki elektron uyarılma seviyelerine geçişler oldukları anlaşıldı. Serilerin ikisi HeII nin $n = 2$ haline, diğer ikisi de $n = 3$ ve $n = 4$ hal-





Şek. 2.1 İki elektron geçişlerinin kendiliğinden iyonlaşma genişlemesi ve ilk iyonlaşma sınırı (okla gösterilen limit) civarındaki Beutler-Fano olaylarını gösteren BaI soğurma tayfının densitometre izlenişi. (Kaynak (25) dan büyütülerek alınmıştır.)



Şek.2.2 Helyumun $190\text{\AA} - 245\text{\AA}$ sahasında soğurma katsayısı.
 σ : STP şartlarında cm^{-1} olarak soğurma katsayısı.
 λ : Angström olarak dalga boyu.
 (Kaynak (19) dan alınmıştır.)

Handwritten signature and stamp.

lerine yakınsıyorlardı. Soğurma katsayısı grafiği Şek.2.2 de verilmektedir. Çizgi biçimleri, aralık fonksiyonu düzeltmeleri (aralık genişliği rezonans çizgi genişliğine göre belirli büyüklüğe sahipse gereklidir) de gözönüne alınınca teorik Fano profillerine (üçüncü bölüm) uymaktadır.

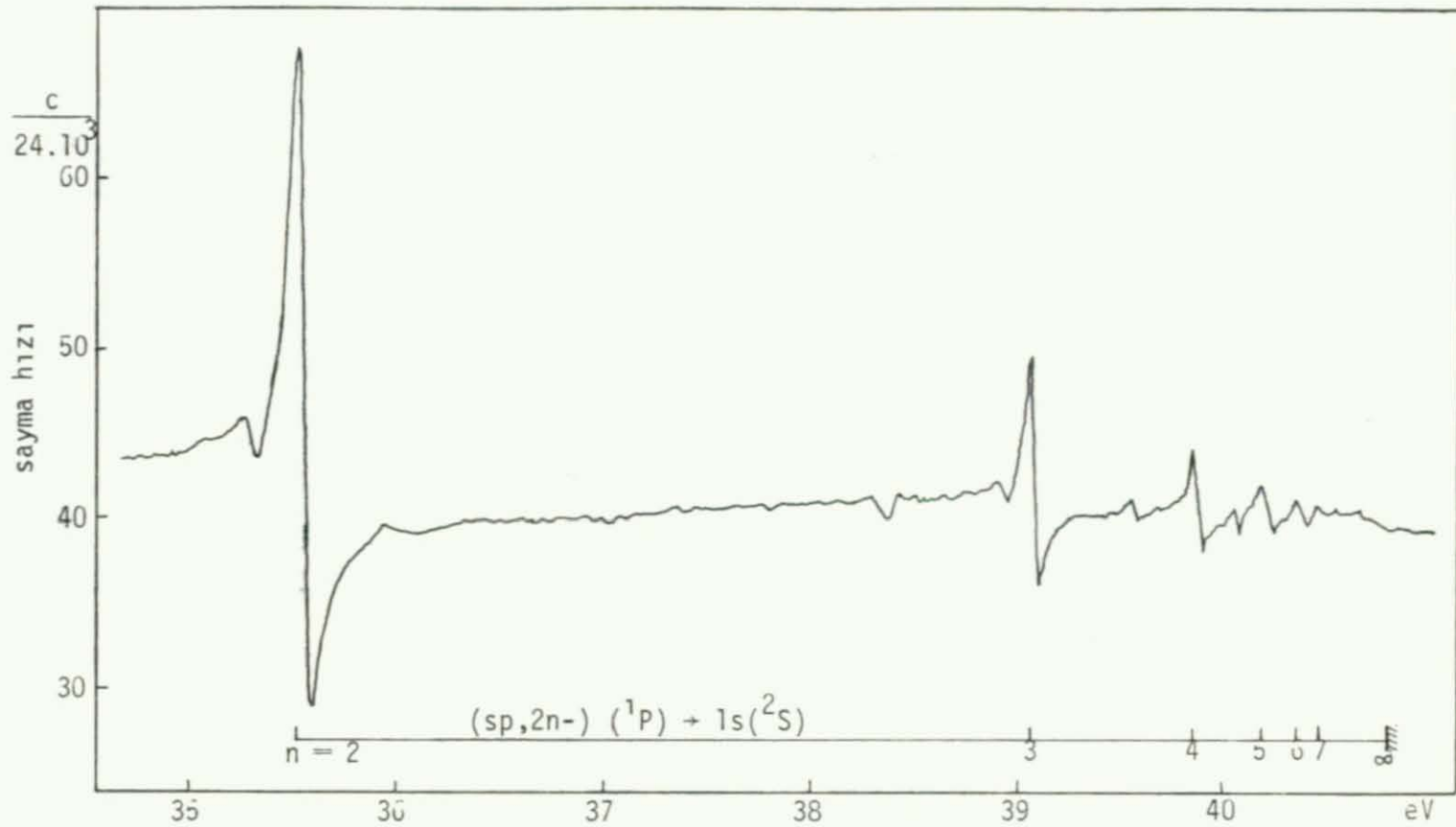
Bu kesimde atom ve molekül rezonans hallerinin incelenmesi için özel ışınım kaynaklarına ihtiyaç olduğu anlaşılmış olmaktadır. Son zamanlarda gelişen 'Lazer' teknolojisinin bu açıdan ümit verici bir durumda olduğu ifade edilmektedir(27).

2.5 Elektron-Atom Saçılma Deneyleri

Çok yüksek vakum teknolojisi, zayıf akım ölçme teknikleri ve elektron optiğinin ilerlediği son yirmi yılda, fotonla atomları enerjilendirmeye bir alternatif olarak, "elektronla vurma" yöntemleri gelişmiştir. Artık modern elektron spektrometreleri ile 0.04 eV'un altında bir çözme gücü elde edilebilmektedir.

Çok değişik uygulamalı olan saçılma deneylerinde, gerekli şiddette bir elektron demeti, bir monokromatör (birrenkleştirici), bir çarpışma (etkileşme) odası ve çeşitli uzay konumlarına getirilebilecek bir analizleyici-kaydedici (dedektör) ortak unsurlar sayılabilir. Genel bir şema Şek. 2.3 te sunulmuştur. Bu deneylerde ölçülen özellikler ise çok değişiktir.

Elektron demetini enerjice aynı yapmak, yani 'birrenkleştirmek, ve açısal dağılmasını önlemek için elektrik ve magnetik alanların muhtelif kombinezonları kullanılır, veya 'birrenk' (monokromatik) fotonlardan faydalanarak istenen demet elde edilebilir. Magnetik alanın istenmediği yerlere, meselâ çarpışma bölgesine, magnetik perdeleme veya Helmholtz bobinleri uygulanır. En yaygın birrenkleştiriciler 180^0 veya 127^0 silindirik veya küresel 'elektrostatik' tiplerdir. 2.6 da ise özel, elektromagnetik bir monokromatörün teorik esasları üzerinde durulacaktır. Şimdi bazı önemli cihaz, teknik ve 'ölçülen'ler sıralanacaktır(29).



Şek. 2.4 Elektron vurması ile uyarılan helyumdan 35-41 eV enerji sahasında alınan kendiliğinden iyonlaşan elektron spektrumu. (Kaynak (31) den alınmıştır)



"İletme Yöntemi" ile "toplam tesir kesiti" nde rezonans ölçmeleri:Hedef gazın içinden geçen fakat hiç çarpışma yapmayan elektronların akımını (İletilen Akım) veya bu akımın türevini ölçmek çok kullanılan duyarlı bir yöntemdir. Yalnız bunda çarpışma yapmış bütün elektronların tutulması şarttır.

"Ramsauer" yöntemi ile toplam tesir kesiti ölçmeleri: E-lektrostatik ve magnetik tesirlerle enerjice seçilmiş elektronların iletim akımı gazın yoğunluğuna bağlı olarak incelenir. Zor bir deneydir.

"Tuzaklanmış Elektron yöntemi" :Çarpışma bölgesi boyunca bir potansiyel çukuru devam ettirilir. Esnek olmayan çarpışma yaparak çok enerji kaybeden elektronlar bu çukurda tuzaklanır ve ölçülür. Ayrıca, durgun elektronlar için yakalama tesir kesiti büyük olan bazı maddeler, meselâ SF_6 , de tuzak olarak kullanılmaktadır.

Işıma tesirleri: Bir kısım deneylerde elektron çarpması iyonlaşma enerjileri civarındaki "ışıcı" hallere yolaçabilirler ve ölçülen rezonanslar verirler. Burada yarı kararlı bir ürünün teşekkülü de ölçülebilir.

"Pozitif iyon ölçmeleri": İyonlaşma potansiyelinin üzerindeki enerjilerde, kendiliğinden iyonlaşma olayı ile oluşan pozitif iyon üretim tesir kesiti ölçmelerindeki yapılar normal atomun veya negatif iyonun enerji seviyeleri-hakkında bilgi verir. Bu ölçmeler, adi iyonlaşmanın da varlığı sebebiyle, detaylı elektronik yöntemler gerektirir.

"Atılan Elektron Spetrokopisi": Herhangi enerjili vurucu elektronla 'kendiliğinden iyonlaşan hal'e çıkarılan bir atomun takibedeceği bozunmada iki serbest elektron doğar. Birincisi "esnek olmayarak saçılan" yani "enerji kaybeden elektron", ikincisi atomun kendinden "atılan elektron" dur. Atılan elektronun enerjisi, bazı durumlar hariç, uyarıcı elektronun enerjisine bağlı değildir. Bu itibarla yüksek (keV) ve düşük (0.1 eV) vurucu elektron enerji bölgelerinde çalışmak mümkündür. Enerji kaybeden elektronu 'tuzaklayıp' ölçmek ye-

rine atılmış elektronlarla ilgilenmek vuran elektron demetini birrenkleştirme çabalarını kolaylaştırır ve aynı çözme gücündeki rakip spektrometreye göre kat kat şiddetli bir demet sağlar. Karşılık olarak daha büyük sinyal alımları ve daha kısa ölçme zamanları gelir. Bu şartlarla yapılmış bir çalışmada (30) Hicks ve Comer "demet kesiştirme" tekniği, düşük elektron enerjileri, hareketli elektrostatik analizleyici ve Faraday fincanı detektör kullanarak He rezonanslarını incelemişlerdir. Elde ettikleri rezonans yapılarından çok sıhhatli, meselâ,

$$(2p^2) ^1S \quad \text{ için } \quad E_{\text{rezonans}} = 62.06 \pm 0.03 \text{ eV ,}$$

enerji değerleri bulmuşlardır.

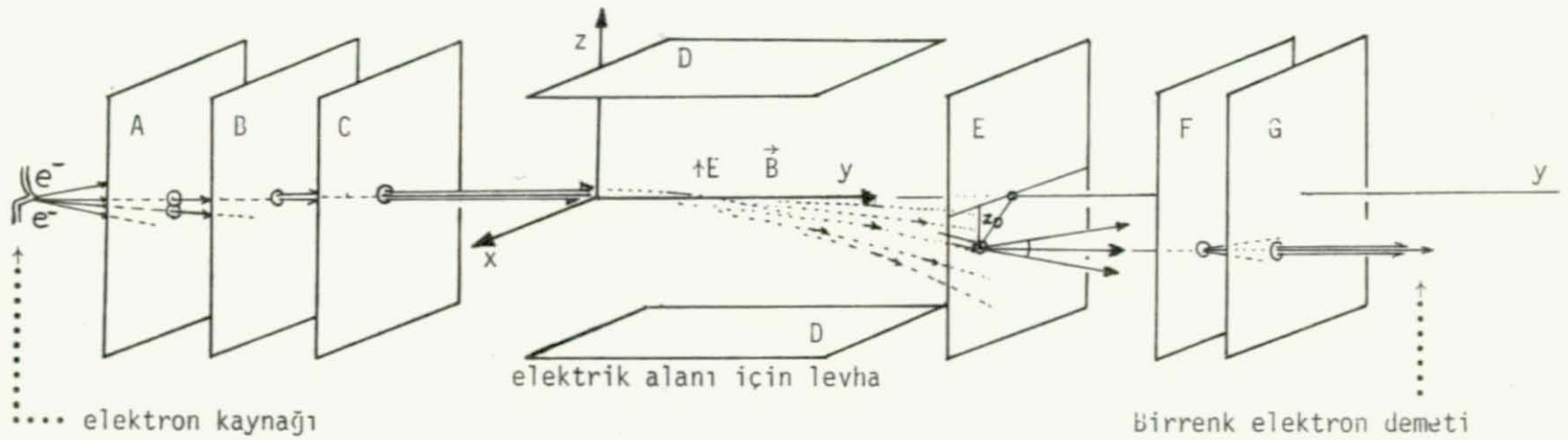
Rezonans tesir kesiti eğrilerine aynı zamanda Beutler-Fano Çizgileri de denir. Bu çizgilerin deneyde elde edilmişleri arasında en tipik birisi Şek. 2.4 te sunulmuştur. Bu eğrilerde görülen ani genlik düşüşleri rezonansların teşhisinde iyi birer ölçü hedefleridir.

2.6 Trokoid Birrenkleştirici

Bir bütün olarak bu tezde sunulan çalışmanın ilk devrelerinde, atom rezonanslarının deneyde araştırılması için gerekli, enerji ve uzay koordinatlarındaki belirsizliklerin (klâsik fizik açısından) sınırlı ölçülere indirildiği fakat istenen 'şiddetin' de muhafaza edildiği, bir elektron demeti verecek bir düzeneğin yapılması üzerinde durulmuştur. Bu gayelerle kullanılan deney cihazlarına "birrenkleştirici" (monokromatör) denmektedir. Bu aletlerin teorisi ve pratiği 'elektron optiği' nin konusudur(64). Elektron demetinin birleştirilmiş elektrik ve magnetik alanlar içindeki hareketleri, genel şartlarda fevkelâde karmaşıktır. Özel hallerde, meselâ alanların 'durgun' ve belirli açılarda olmaları halinde, bu karmaşıklık azalmaktadır.

Yapılması plânlanan birrenkleştirici'de elektronların enerji ve momentum bakımından seçilmeleri, birbirine dik elektrik ve magnetik alanlar ve peşpeşe delikli levhalar yardımıyla gerçekleştiril-





Şek. 2.5

TROKOID Birrenkleştirici Şeması.

A, B, C levhaları ilk açısız 'demetleme', D levhaları elektrik alanı meydana getirmek içindir. Manyetik alan B de elektrik alanının bulunduğu bölgede ve ona diktir. Elektron demeti alanlar bölgesinde kinetik enerjilerine göre dağılıma uğrar. E levhasının merkezi dışında z_0 uzaklıktaki bir pencereden alınan enerjiler seçilmiş elektronların açısız dağılımı F ve G levhalarınca sağlanır.



rilecekti. Farago tarafından da gösterildiği gibi(65), v_0 ilk hızı ile bu konumdaki alanların tesirine giren bir elektron 'trokoid' denen bir uzay yörüngesinde hareket edecektir. Bu şartlarla çalışacak birrenkleştirici'ye de 'trokoid birrenkleştirici' denecektir(66).

Şek. 2.5 te trokoid birrenkleştirici şeması anahatları ile çizilmiştir. Elektronun yükü, kütlesi ve alanlar için keyfi birimler alınarak, elektrona etki eden kuvvetin

$$\vec{F} = \vec{v} \times \vec{B} + \vec{E} \quad (2.9)$$

olacağı bilinmektedir. Şekilde verilen koordinat sistemine göre

$$\vec{B} = B \vec{j}, \quad \vec{E} = E \vec{k}$$

olduğundan (2.9) vektör eşitliği

$$\frac{d^2x}{dt^2} = B v_z \quad (2.10)$$

$$\frac{d^2y}{dt^2} = 0 \quad (2.11)$$

$$\frac{d^2z}{dt^2} = E + v_x \quad (2.12)$$

diferansiyel denklem sistemine özdeştir. Bu denklemler uzayın sonlu bir kısmında geçerlidirler. Bu bölgenin sınırları arasında (2.10-13) denklemlerinin integrallenmesi mümkündür. (2.11) den zamanın "0" ve "t" aralığında integral alınarak

$$v_y(t) = v_0 \quad (2.13)$$

$$y(t) = v_0 t = a \quad (2.14)$$

bulunur. Burada a ile D levhasının uzunluğu gösterilmiştir. (2.12) kullanılarak



$$v_z(t) - v_z(0) = E t \quad (2.15)$$

elde edilir. Elektronun alanlar bölgesine girdiği an zaman başlangıcı olarak alınmıştır. (2.10) dan, $v_x(0) = 0$ alınarak

$$v_x(t) = B z(t) \quad (2.16)$$

bulunur. (2.13-16) dan elektron kinetik enerjisi için

$$E(t) \propto v_0^2 + \left(E \frac{a}{v_0}\right)^2 + B^2 z(t)^2 \quad (2.17)$$

ye varılır.

Bu sonuca göre E düzleminin herhangi bir yerinde açılacak bir pencereden geçen elektronların kinetik enerjisi pencerenin 'z' koordinatına bağlı olacaktır.

Elektronların momentum bakımından seçilmeleri de yine şekilde A, B, ..., G levhaları tarafından 'belirli' büyüklükteki pencereler yardımıyla, açısal dağılımı gidermek suretiyle başarılabilir.



ÜÇÜNCÜ BÖLÜM

REZONANS HALLERİNİN TEORİK İNCELENMESİ

Üçüncü Bölüm Giriş:

Atomların rezonans hallerinin matematik araştırılmasından bazı teoriler gelişmiştir. Bu teoriler herşeyden önce rezonansın "enerji konumu"nu ve daha sonra "çizgi genişliği" ve çizginin şiddet "profilini" ni hesaplamak durumundadırlar. Genel olarak çizgi genişliği enerjiden daha duyarlı fonksiyonlar gerektirmektedir. Bu bölümde bellibaşlı rezonans teorileri konu olarak alınmaktadır. Bunlardan ikisi, Yakın Eşleşme (Close-Coupling) ve Fano Konum Etkileşme formülleri, rezonans olaylarını 'saçılma' açısından, Feshbach, Kök Kararlılaştırma, Zaman Kararlılığı ve Türev Yöntemleri ise 'bağlı hal' (bound state) açısından değerlendirmektedirler.

Bu çalışmada "Türev Yöntemi" kullanılmıştır. Türev yönteminin fizik ve matematik mahiyeti bölümün son kesimi olan 3.7 de işlenmiştir. Zaman Kararlılığı ve Türev yöntemleri Üksüz ve Erkoç tarafından geliştirilmişlerdir(45, 47, 49). Bu yöntemlerin yeniliği gözönüne alınırsa, şimdiki araştırmanın sonuçlarının türev yöntemi için birer 'test' görevi yapacakları anlaşılmaktadır.



3.1 Yakın Eşlenme (close-coupling) Yaklaşımı

Kuantum mekanik 'saçılma' olayı teorisi de Schrödinger denklemini çözmek zorundadır. 'Çok Kanallı' saçılma problemlerinde en şöhretli bir yöntem "yakın eşlenme yaklaşımı"dır(22). Bu yaklaşımda 'vuran elektron artı N elektronlu hedef atom' dan oluşan N+1 elektronlu kuantum sistemin dalga fonksiyonu hedef atom özfonksiyonları 'tam cümle'sine açılmaktadır:

$$\Psi(\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{X}_{N+1}) = \sum \phi_i(\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_N) F_i(\vec{X}_{N+1}) \quad (3.1)$$

Bu fonksiyon ve Schrödinger denkleminden yarıçap koordinatlı fonksiyonların

$$\frac{d^2 F_i(r)}{dr^2} \approx \sum_{j=1}^M \left\{ \delta_{ij} \left\{ \frac{\ell_i(\ell_i+1)}{r^2} - k_i^2 - \frac{2(Z-1)}{r} \right\} + \sum_{t=1}^t \frac{a_{ij}}{r^{t+1}} \right\} F_j(r) \quad (3.2)$$

eşlenmiş diferansiyel denklemler sistemiyle belirleneceği anlaşılar. Bu denklemlerde r nin büyük değerleri ve potansiyelin üslü azalan terimlerinin yokluğu kabul edilmiştir. i indisi vuran (N+1) inci elektrona ait kuantum halini, k dalga sayısını, ℓ yörünge açısal momentumunu gösterir. M 'kanal sayısı'dır, ve hedef atomun hallerinden kaç tanesinin gözönüne alındığına ve seçilen eşlenme modeline bağlıdır. k_i^2 nin pozitif veya negatif olmasına göre, F_i bir sürekli veya kesikli yörüngemsi gibi düşünülebilir. F_i nin asimtotik davranışı 'titreşen' karakterde ise "bu kanal açıktır" ve üslü azalıyorsa "kanal kapalıdır" denir. Bu durum k_i ye bağlıdır. En sondaki toplam "çoklu kutup terimleri" nden oluşmakta ve M-kanal irtibatını sağlamaktadır. a katsayıları hedef atom Hamiltonien'inin konum etkileşme matris elemanları cinsinden tayin edilirler(32).

Bu modele göre rezonans hallerin nasıl ortaya çıkacağı pozitif iyonlar için, herhangi bir kanallar arası eşlenme olmadan bile bir k_1^2 mermi enerjisi için bazı k_i 'lerin negatif olması ve denkle-



min normal bir Coulomb bağılı hal denkleminde dönüşmesiyle izah edilebilir. Fakat nötr atomla çarpışma tasarısında rezonans tuzak potansiyelinin kaynağı Coulomb cinsi olmayıp kanalları irtibatlandıran "dipol" potansiyel terimleridir. Gerçekte $\ell_i(\ell_i+1)/r^2$ de bir dipol potansiyelidir. Bazı hallerde bunlara "dipol kuyrukları" da eklenir.

Rezonans hallerinin diğer karakteristiklerinin yakın eşlenme modeline göre tartışılması "tek kanal" saçılma denkleminde daha rahat izlenebilir: Bu takdirde

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - 2U(r) \right\} F_\ell(kr) = 0 \quad (3.3)$$

denkleminin asimtotik çözümleri, $r = \rho/a_0$ olmak üzere

$$F_\ell(\rho) \approx C \sin\left(k\rho - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell(k)\right) \quad (3.4)$$

şeklindedir. Buradaki δ_ℓ , " ℓ yinci kısmi dalga fonksiyonu faz kayması" adını alır ve diferansiyel denklemin genellikle nümerik çözümlerinden hesaplanır. Faz kaymasına bağlı olarak "saçılma genliği"

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(S_\ell - 1)P_\ell(\cos\theta) \quad (3.5)$$

verilir. $S_\ell = \exp(2i\delta_\ell)$ ye "S-matris" denir. Saçılan dalga

$$\psi \approx f(\theta) \frac{e^{ik\rho}}{\rho} \quad (3.6)$$

nun karesinin bütün açılar üzerinden integrali de "toplam saçılma tesir kesiti" ni verecektir:

$$\sigma(k^2) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) |S_\ell - 1|^2 \quad (3.7)$$

Asimtotik mesafelerde ve $\ell = 0$ için $k = \pm i\kappa$ (κ pozitif) alınması halinde radyal fonksiyon

$$F(r) = e^{-\kappa r} - S(-i\kappa)e^{\kappa r}$$



olur ve sınır şartlarından

$$S(-ik) = 0$$

olması gerekir. Bu çözüm "bağlı hal" verir, yani rezonanslar S-matrisin "kutupları"na karşılık gelirler. Bir de

$$S(k) = S(-k_0 + ik_1) = 0$$

denklemini sağlayan durumlar düşünülebilir ki enerji "kompleks" ve şöyle olur:

$$E = k^2 (\hbar^2/2m) = (-k_0 + ik_1)^2 \hbar^2/2m = E_0 - i\Gamma/2 \quad (3.8)$$

Bu durumda

$$\text{ihtimal yoğunluğu } e^{-t/\tau}, \tau \equiv \hbar/\Gamma, \text{ çizgi genişliği } \equiv \Gamma$$

olacağından bunlara "bozunan haller" denmektedir. Kompleks enerji kavramı Hamiltonien'in Hermitik olması sebebiyle çapraşık ve imkânsız gözükebilir. Eğer bunun gerçek kısmı 'özdeğer' olarak alınırsa uygunluk sağlanır. Böyle durumlar klâsik dalga hareketinde impedansları (yoğunlukları) çok farklı eşlenmiş iki ip parçasında bile ortaya çıkmaktadır. Bu eşlenme kuantum mekanik elektron-atom etkileşmesine benzerdir ve özfrekanslar ve özfrekanslar kesikli bir tayf meydana getirebilir(23).

S-matrisin kutup özellikleri faz kayması terimleri ile yazılırsa

$$\text{tg} \delta_\ell(E) = \frac{\Gamma}{2} \frac{1}{E_r - E} \quad (3.9)$$

nin değeri, E bir rezonans kutbundan geçerken işaret değiştirir. Toplam faz kayması π kadar artar. Toplam tesir kesitinin rezonans kısmının ℓ yinci kısmi dalga değeri, tanımından,

$$\sigma_\ell = 4 \frac{(2\ell+1)}{k^2} \sin^2 \delta_\ell \quad (3.10)$$



ifadesi gereğince bir hörgüç (yapı) çizer, ve rezonansın teşhisini sağlar.

3.2 Sürekli Bölgenin Kesikli Hallerle Etkileşmesi

Atomların tayflarında $\sigma = R/n^2$ gibi düzenli seri gidişlerinden ayrılımlar, tedirginlikler, yani hesaplanan bazı çizgilerin yer değiştirmeleri veya hiç bulunamamaları, bazılarının ise genişlik ve yaygınlıklarının özellikler göstermelerinin sebebi, Bağımsız Parçacık Modeli Konumları'nın enerjice yakınlıkları ölçüsünde ve tedirginlik teorisi çerçevesinde(1.1b) birbirleriyle etkileşmeleridir(16). Bu etkileşme ve onun kendiliğinden iyonlaşma ile alakası ref.:(17) de genişçe tartışılmıştır.

İki elektronlu helyum atomunu düşünelim: Bu sistemin bağımsız parçacık modeli hesaplama enerjileri Şek.3.1 de çizilmiştir. Sol sütunda, 1s elektronlarından birinin, enerji verilerek, 2s, 3s, 2p,... seviyelerine çıkarılırken 24.6 eV ta sıfır kinetik enerji ile serbest kalması görülmektedir. 24.6 eV üzerindeki enerji seviyeleri "sürekli tayfı" (continuum) teşkil ederler. Burada bir elektronun konum'u (lskL) olur. İki elektron uyarılmaları ise sağdaki sütunda gösterilmişlerdir. Her iki elektronu 2s yörüngemsisine oturtmak için gerekli enerji 57.8 eV tur. Daha yukarı enerjilerde, baş kuantum sayısı (n) iki olan bir He^+ (pozitif iyon) verecek şekilde diğer elektronu ayırmak 65.4 eV ta olur. 79 eV ta da her iki elektron ayrılır.

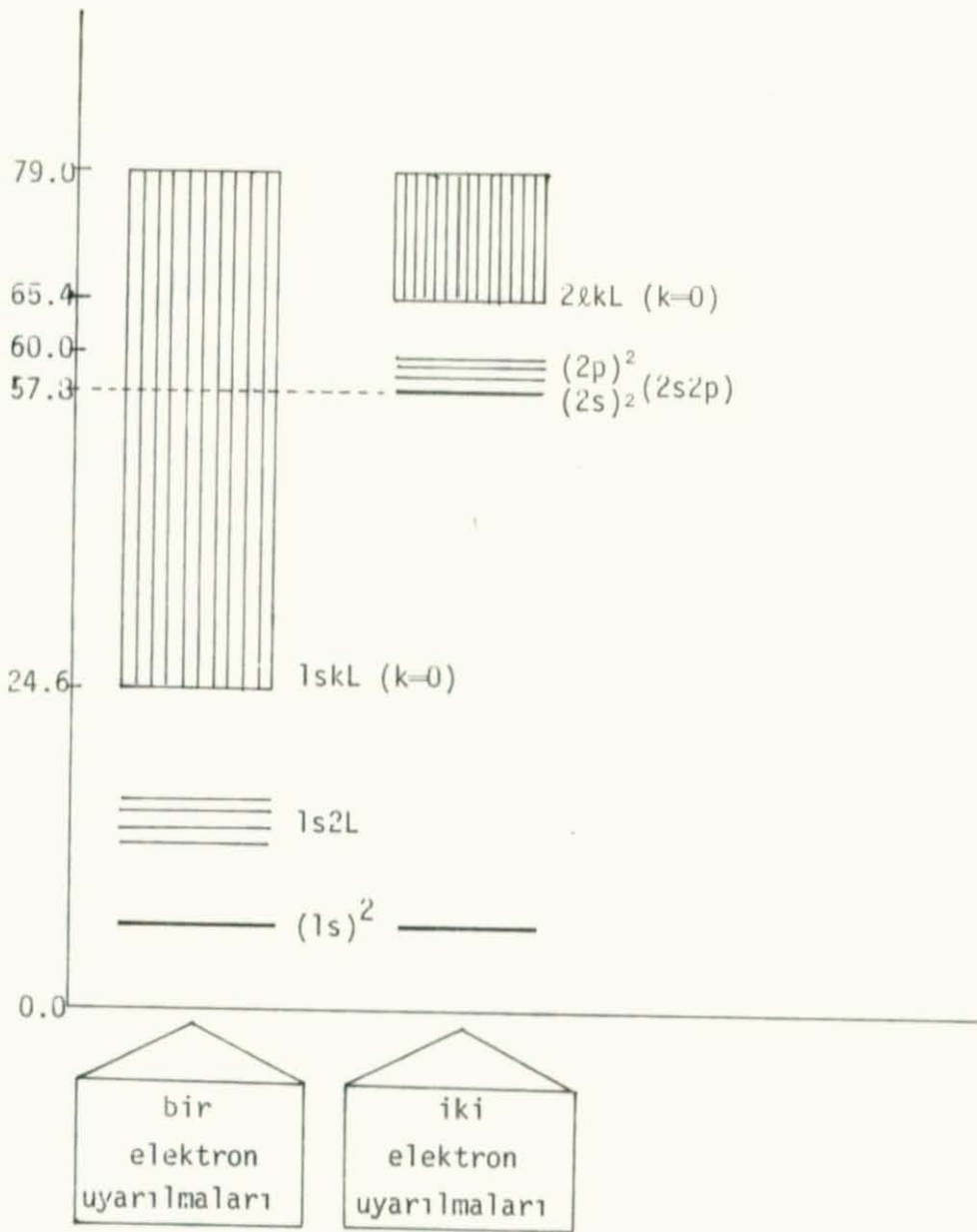
Bu modele göre, meselâ, 58 eV enerjide çelişen iki terim vardır: (lskL) sürekli tayf hali ve $(2\ell_1 2\ell_2)$ kesikli hali. Bu durum, ısımalı bozunmaya fırsat kalmadan



sürekli bölgeye bozunmayı, yani kendiliğinden iyonlaşmayı izaheder. Bu olayda enerji, aşağıda yazıldığı üzere, korunmaktadır:

$$E(2\ell_1 2\ell_2) = E(1skL) + E_{kin}$$





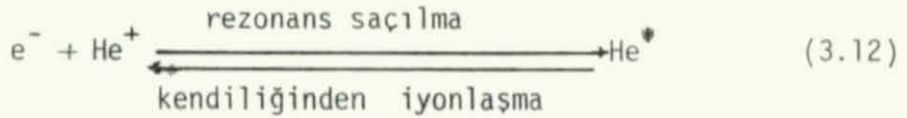
Şek. 3.1 Helyum atomlarının 'birli' ve 'ikili' uyarılmalarında $He(1s)^2$ ye göre enerji seviyeleri şeması. (Kaynak (32) den).



(3.11) olayında elektron ayrıldıktan sonra geri kalan iyon 24.6 eV seviyesine iner. İki elektronlu atom için burada söylenenler daha büyük atomlara genelleştirilebilir. Otakdirde sürekli bölgelerin sayısı ve etkileşme ihtimalleri de çoğalır.

Konum etkileşme kuralları 1.1f paragrafında tartışılmıştı. Parite ve toplam açısal momentum, sürekli bölgeye kendiliğinden iyonlaşma dahil, herhangi bir geçiş için değişmez. Russell-Saunders eşlenmesinin geçerli olduğu yaklaşımlarda bu ikisine ilâveten L ve S de aynı kalır(16).

Bu kesimde söylenenler, 2.1 ve 2.2 de belirtilen görüşleri daha da açıklığa kavuşturacak niteliktedirler. Bunlar aşağıdaki gibi özetlenebilir: Bağımsız parçacık modelinin sürekli bölgesi içindeki kesikli kuantum seviyeleri, elektron-iyon çarpışması tarzında etkileşerek, (2.3), atomun rezonans halini meydana getirmekte ve bu birleşik hal tipik bir ömür ile kendiliğinden iyonlaşmaktadır. Bu olay tersinir bir reaksiyon denklemi ile en toplu şekilde



olarak gösterilebilir.

3.3 Fano'nun Konum Etkileşme Formüllemesi

Kesikli hallerin sürekli bölge ile etkileşme olayının matematik bir tahlilini de Fano vermiştir(33). Kesikli kuantum halleri $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$ ve sürekliler de $\psi_E, \psi_{E'}, \dots$ ile gösterilmiş olsun. Yapılacak iş Hamiltonien' in bu haller cümlesine ait kısmını köşegenleştirmekten ibarettir. En sâde örnek olarak tek bir ϕ nin tek bir ψ_E ile etkileşmesini düşünelim. Önce dik olma şartını koyalım:

$$\langle \phi | \psi_E \rangle = 0 \quad (3.13)$$

Hamilton işlemcisinin beklenen değeri

$$\langle \phi | H | \phi \rangle = E_\phi \quad (3.14)$$



$$\langle \psi_E | H | \phi \rangle = V_E \quad (3.15)$$

$$\langle \psi_{E''} | H | \psi_{E'} \rangle = E' \delta(E'' - E') \quad (3.16)$$

eşitlikleri ile belirlenir. Son eşitlikteki ψ_E alt haller cümlesinin önceden köşegenleştirilmiş olduğu ima edilmektedir. Bu örneğe uygun olan toplam Hamiltonien matrisinin şeması da aşağıdaki gibidir:

	ϕ	ψ_E									
ϕ	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
ψ_E	x										
		x									
			x								
				x							
					x						
						x					
							x				
								x			
									x		
										x	
											x

Hamiltonien'in özfonksiyonunu

$$\psi_E = a\phi + \int dE' b_{E'} \psi_{E'} \quad (3.17)$$

olarak almak iyi bir düşüncedir. Bu gösterimde Hamiltonien'in köşegen olması şu iki şarta bağlıdır:

$$E_\phi + \int dE' V_{E'}^* b_{E'} = E a \quad (3.18)$$

$$V_{E'} a + E' b_{E'} = E b_{E'} \quad (3.19)$$

Burada (*) sembolü kompleks eşlenik alınacağını göstermek için kullanılmıştır. Aynı sembol daha önce atomun 'uyarılmış' durumları için de kullanılmıştı.

Eşitliklerin ikincisinden, formal çözümle

$$b_E = \{P(1/(E-E') + Z(E)\delta(E-E'))\}V_E, a \quad (3.20)$$

elde olunur. P işlemcisi 'baş' değerini alınacağını gösterir. ψ için asimtotik ifade, δ_0 'potansiyel faz kayması' olmak üzere

$$\psi_E \approx \sin\{k(E)r + \delta_0(E)\}$$

alındığı takdirde ve toplam dalga fonksiyonunun 'hemen hemen' bundan ibaret kalacağı da hatırlanarak, b kullanılırsa, ayrıca

$$\delta_r(E) = -\arctg\{\pi/Z(E)\} \quad (3.21)$$

"rezonans faz kayması" tanımı da yapılarak

$$\psi_E \approx \sin\{k(E)r + \delta_0(E) + \delta_r(E)\}$$

yazılabilir. Z nin değeri (3.18) ve (3.19) dan çıkarılır:

$$Z(E) = \{E - E_\phi - \Delta(E)\}/|V_E|^2.$$

Bu bağıntılar yardımıyla δ_r nin $E = E_\phi + \Delta(E) = E_r$ rezonansı civarında hızlıca π den geçtiği görülmektedir. Ayrıca, yukarıda kullanıldığı şekliyle $|V_E|^2$ nin konum etkileşme derecesini gösterebileceği düşünülmelidir. Rezonans 'çizgi genişliği' Fano teorisinde

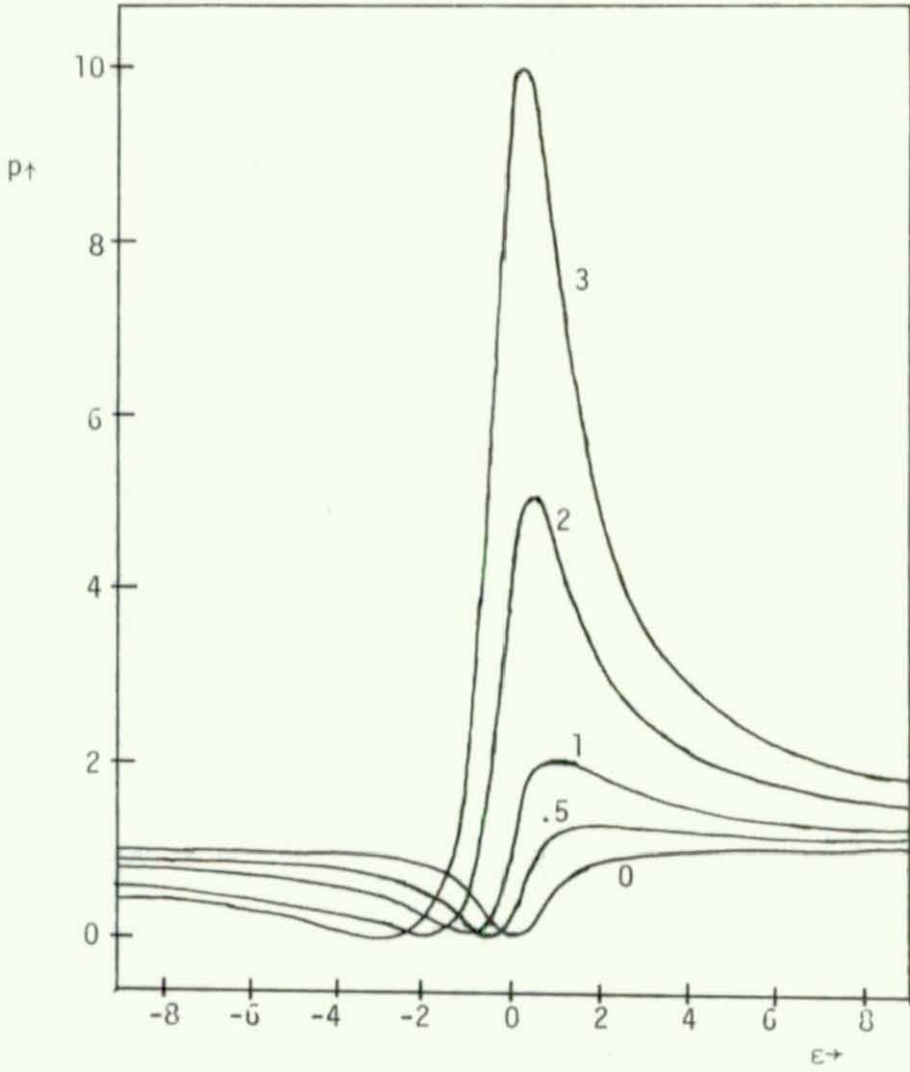
$$\Gamma = 2\pi|V_E|^2 = 2\pi|\langle\psi_E|H|\phi\rangle|^2 \quad (3.22)$$

ile hesaplanmaktadır. Fakat uygulamaların büyük bir kısmında H Hamiltonien'i yerine sadece $(1/r_{ij})$ işlemcisi kullanılmaktadır(34). Kendiliğinden iyonlaşma ihtimali ise

$$P = 2\pi|V_E|^2 / \hbar^2 \quad (3.23)$$

den hesaplanabilir.

Rezonansların konumu ve ihtimal hesaplarından başka fo-



Şek. 3.2 q parametresinin eğriler üzerindeki değerleri Fano profilleri. p koordinatları (3.25) fonksiyonunun değerleridir. (Kaynak (29) dan alınmıştır)



tosoğurma ve fotoiyonlaşma tesir kesitlerinin(19) enerjiye bağlı grafikleri de araştırma konusudur. Herhangibir ilk hal $|i\rangle$ den bir uyarma mekanizması ile yukarıda bahsedilen $|\psi_E\rangle$ kararlı haline geçiş ihtimali, uygun bir 'geçiş işlemcisi' T nin ikisi arasındaki matris elemanının karesi ile orantılıdır. O halde

$$|\langle\psi_E|T|i\rangle|^2/|\langle\psi_E|T|i\rangle|^2 \quad (3.24)$$

ifadesi , rezonans sürekli bölgesine geçiş için fotoiyonlaşma tesir kesitinin enerjiye göre değişimini aksettirecektir(33). Fano, a, b, ve δ dan hareket ederek bu oranı iki parametreye bağlı olarak

$$(q + \epsilon)^2/(1 + \epsilon^2) \quad (3.25)$$

şeklinde ifade etmiş ve q nun muhtelif değerleri için 'Fano profilleri'ni çizmiştir. Bu grafiklerden bazıları Şek. 3.2 de toplanmıştır. İkinci bölümde verilen elektron-atom saçılma ve foton soğurma tesir kesitlerinin bu çizgilerle karşılaştırılması deney ve teorinin karşılaştırılması için kullanılan ölçülerden birini teşkil etmektedir.

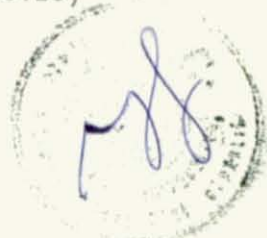
Fano'nun teorisi birden fazla kesikli ve sürekli seviyenin aynı anda etkileşmesi hallerine de genişletilmiştir. Teori genel olarak çizgi şekillerini iyi vermektedir, fakat çizgi genişlikleri için aynı şey söylenememektedir.

3.4 Rezonanslar İçin Feshbach Formalizmi (36)

Saçılma teorisi kadar 'duraklı hal' yaklaşımları da rezonanslara uygulanmış ve başarılı olmuşlardır. Bu kesimde ve bundan sonraki kesimlerde bu guruba giren yöntemlerden bahsedilecektir.

Feshbach Q işlemcisi yönteminde, N tanesi hedef atoma ait olmak üzere, $N + 1$ elektronlu sistemin Hamiltonien'inden kendiliğinden iyonlaşmaya sebep olacak kısım izdüşüm işlemcileri ile süzülme çalışılır. Böyle bir işlemcinin tanımlanması oldukça keyfidir. (37). Bundan sonra (1.1) Schrödinger denklemi, ϵ_n sürekli bölgede olmak üzere

$$(Q_{N+1}Q)\phi_n = \epsilon_n\phi_n \quad (3.26)$$



özdeğer denklemi ile yaklaştırılır. Şimdi buradaki ϕ_n ler, kendiliğinden iyonlaşan hallerin özfonksiyonları olarak ileri sürülebilirler(38) Tamamlayıcı Hilbert alt uzayına , yani hedefin enerjice girilebilir özhallere, izdüşüren işlemci ise $P = 1 - Q$ olur. $Q H_{N+1} Q$ işlemcisinin özdeğerleri, H_{N+1} işlemcisinin özdeğerlerinin aksine, ilgili enerji sahasında kesikli olduklarından (3.26) denklemi değişim yöntemi ile çözülebilir. Fakat eğer herhangi bir deneme fonksiyonu ψ_d daha önceden Q ile işlenmişse

$$\langle \phi_n | Q H_{N+1} Q | \phi_n \rangle = \langle Q \phi_n | H_{N+1} | Q \phi_n \rangle = \epsilon_n \langle Q \phi_n | Q \phi_n \rangle$$

bağıntısı gereğince sadece H_{N+1} işlemcisinin özdeğerleriyle ilgilenmek yetecektir. Q ile işlenmiş bir dalga fonksiyonu olarak

$$\psi_d(\vec{X}_1, \vec{X}_2) = \sum_{i,j=n+1}^M c_{ij} v_i(\vec{X}_1) v_j(\vec{X}_2)$$

yi gözönüne alalım. Burada X , spin ve uzay koordinatlarını temsil eder. n sayısı hedefin ilgili 'eşik' e kadar enerjice girilebilir hallerin sayısıdır. v_i yörüngemsileri en basit halde hedef özfonksiyonları ve genel halde bunlara dik olan herhangi yörüngemsilerdir. Bu şekilde kurulan deneme fonksiyonu ile varılan seküler denklemin aşağı mertebelerden kökleri, fizik açısından, bağlı hallere yaklaşırlar ve bu itibarla ele alınmazlar. Burke' e göre(22) r yinci halin hakiki rezonans enerjisi, ΔS 'girişim katkısı' (rezonans kayması) olmak üzere

$$E_r = \epsilon_r + \Delta S \quad (3.27)$$

dir. ΔS katkısı küçük atomlarda ihmal edilebilecek kadar küçüktür ve ϵ_r rezonans enerjisine iyi bir yaklaşım değeri olarak alınabilir.

Q işlemcisi yönteminde, anlaşıldığı gibi, hedef özhalleri'ni duyarlılıkla bilmeye ihtiyaç olmaktadır. Bu haller ancak tek elektronlu sistemlerde doğru olarak bilindiklerinden, Feshbach formalizmi iki elektronlu atomlardan daha büyükleri için uygun değildir.

3.5 Kök Kararlılaştırma Yöntemi

Bir önceki kesimde ileri sürülen 'Q uzayında olma' sınır-

laması kaldırılmış, lineer bağımsız kare-integrallenir fonksiyonlar $\{\phi_i\}$ la teşkil edilen bir deneme fonksiyonu

$$\psi_d(\vec{X}_1, \vec{X}_2) = \sum_{i,j=1}^M C'_{ij} \phi_i(\vec{X}_1) \phi_j(\vec{X}_2)$$

olsun ve

$$\sum_{i=1}^M T_{ki} \phi_i, \quad k = 1, \dots, M$$

fonksiyonlarının diklik şartı koşulsun. Kök kararlılaştırma yönteminde, hedefin özallerini bilmeye lüzum kalmadan, değişim hesabı yapılır ve QHQ işlemcisi köşegenleştirilir. Seküler denklem köklerinin açılıma 'terim ekleme ve çıkarma' işlemine göre değişimi incelenir. Bu tip araştırmalarda bazı köklerin kararlı oldukları ve bunların bazıları ile rezonans enerjileri arasında ilgi kurulabileceği görülmüştür(39). Böyle bir ilişki ancak deney veya diğer hesaplamaların rehberliğinde kurulabilmekte, yani her kararlı kökün mutlaka bir rezonansı göstereceği söylenememektedir. Dolayısıyla bu yöntem de büyük atomlar için fazla bir önem taşımamaktadır. Fakat bundaki düşünceden hareket edilerek, kendiliğinden iyonlaşan hallere "tabii özdeğer" açısından bakıp, uygun ve tamam bir fonksiyon cümlesi ve ölçekleme parametresi kullanılarak, kararlılaşan kökle rezonans enerjisi arsında "birebir" karşılık kurulabileceği gösterilmiştir(40-41). Bu yaklaşım 'çok konumlu enerji sınırı usulü, ÇKESU' olarak adlandırılmakta ve beş elektronlu atomlara kadar uygulanabilmektedir(42).

3.6 Rezonansların Zaman Kararlılığı Teorisi (ZKT)

Üksüz'e göre (43), hazırlanan kuantum mekanik bir sistemin aynı kalması veya bozunması arasında yavaş hızlarla oluşan olayı 'kendiliğinden iyonlaşan hal' olarak düşünmek ve şu tanımlayıcı postulayı yapmak mümkündür:

"Kendiliğinden iyonlaşan haller(rezonanslar), bağlı haller cümlesi içinde zaman kararlılığı maksimumlarına karşılıktır".

Zaman başlangıcında $|0\rangle$ ile verilen bir halin gelişmesi Schrödinger gösteriminde zaman evrim işlemcisi u ile belirlenir:



$$|t\rangle = u(t,0)|0\rangle$$

Stone teoremine göre

$$u(t,0) = \exp(-iHt)$$

dir ve eğer Hamiltonien zamana bağlı değilse aşağıdaki açılım yapılabilir:

$$u(t,0) = 1 - iHt - \frac{1}{2} H^2 t^2 + O(t^3)$$

Zaman içinde kararlılığın ölçüsü olan $|\langle 0|t\rangle|^2$, "0" la 1 arasındadır. Birleme ve beklenen değer tanımları kullanılarak

$$|\langle 0|t\rangle|^2 = 1 + (\langle H \rangle^2 - \langle H^2 \rangle) t^2 + O(t^4)$$

elde edilir. Kendiliğinden iyonlaşan haller postula gereğince

$$\delta |\langle 0|t\rangle|^2 = \delta (\langle H \rangle^2 - \langle H^2 \rangle) = 0$$

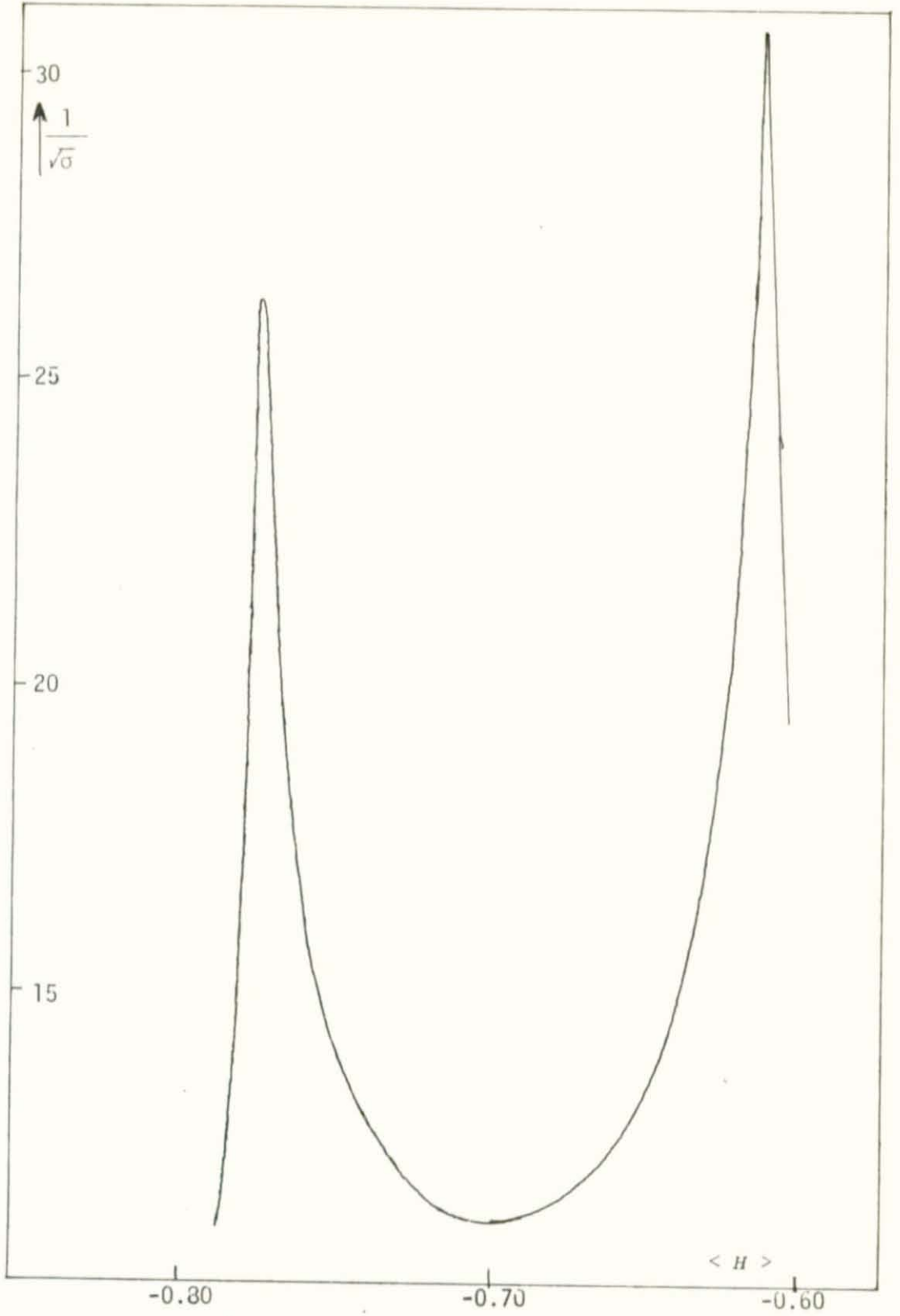
bağıntısı ile bulunacaklardır. δ işlemcisi uygulanır ve $\delta|0\rangle \neq 0$ olduğu dikkate alınırsa son denklemin gerçek kısmı için

$$\{ (H^2 - 2\langle H \rangle H) - (\langle H^2 \rangle - 2\langle H \rangle^2) \} |0\rangle = 0$$

elde edilir. Bu 'sözde' bir özdeğer denklemdir ve lineerlik özelliği yoktur. Bu tip denklemlerin çözümü, 1.1c de söylendiği gibi, genellikle iteratif yöntemler kullanılarak yapılır. İterasyona girilince $\langle H \rangle$ için alınacak değer çeşitli şekillerde seçilebilir. Meselâ, deney sonuçları veya önceki hesaplamalardan faydalanılabilir. En çok başvurulan yol ise (44),

$$\sigma = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$$

olmak üzere, karakteristik ömür $\tau = 1/(\sigma)^{1/2}$ nin kabaca, yani az sayıda fonksiyonla, hesaplanması ve bir "zaman kararlılığı tayfı" çizilmesidir. Böyle bir grafik Şek. 3.3 te görülmektedir. Bu grafikte maksimumlara karşılık olan $\langle H \rangle$ değerleri iterasyonlara başlangıç olarak seçilir ve yakınsama sağlandıktan sonra en doğru özdeğer ve özvektör



Şek.3.3 : Helyum ^1S Zaman Kararlılığı Tayfı(ab. cinsinden). (47).



bulunur.

Zaman kararlılığı teorisi şimdiye kadar He ve H^- sistemlerinin birçok S hallerine uygulanmıştır(43-47). Bu hesaplamalarda

$$\psi(\alpha, s, t, u) = \exp\left(-\frac{\alpha}{2} s\right) \sum_{lmn} C_{lmn} s^l (u/s)^m (t/u)^n$$

Kinoshita fonksiyonlarından seksen terime kadar alınarak deneyler ve başkalarının hesaplamalarıyla uyuşan sonuçlara varılmıştır. Bu fonksiyonda $s = r_1 + r_2$, $t = r_2 - r_1$, $u = r_{12}$ ve α 'eniyileştirme' parametresidir. Bu yöntem ve fonksiyonlarla rezonans çizgi genişlikleri de hesaplanmıştır(47). Li^+ nın rezonansları üzerindeki hesaplamalar da iyi sonuçlar vermektedir(48).

Zaman kararlılığı yaklaşımının en önemli avantajı, diğer yöntemlerde ve bilhassa Feshbach' ınkinden olduğu gibi, kendiliğinden iyonlaşan halin bozunacağı hallerin özfonksiyonlarını gerektirmeyişidir. Bu itibarla ikiden fazla elektronlu atomlara uygulanması ilke olarak mümkün olacaktır. Diğer yandan H integrallerine ilâve olarak H^2 matrisinin kurulmak mecburiyeti güçlükler gösterebilir. Bu yöntemin diğer bağlı hal rezonans teorileri ile geniş bir karşılaştırması ref. (43) te yapılmıştır.

3.7 Türev Yöntemi

Bu yöntem de Üksüz tarafından rezonanslar için teklif edilmiş(49) ve tatbikatı He ve H^- üzerinde yapılmıştır(50). Bu teknik, enerjinin değil fakat onun herhangi bir parametreye göre 'türevi' olan fonksiyonel'in 'eniyileştirilmesi' (optimization) ne ve koordinat ölçeklemesine dayanır. Ölçekleme, Virial Teorem ve enerjinin birinci mertebeden türevi üzerinde daha önceden araştırmalar yapılmıştır(51). Bu kesimde türev yönteminin bu araştırmalarla irtibatı kurulmaya çalışılacak uygulanma esası verilecektir.

Toplam dalga fonksiyonu, bir tam cümle fonksiyon serisine



$$\Psi = \sum_r a_r \phi_r(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (3.28)$$

şeklinde, sonlu m mertebesinde kırıpılarak açılmış olsun. Hamiltonien'in beklenen değeri, $\tilde{a}$ vektör ve $\tilde{S}$ bindirme matrisi olmak üzere

$$\langle H \rangle = \frac{\tilde{a}^\dagger \tilde{H} \tilde{a}}{\tilde{a}^\dagger \tilde{S} \tilde{a}} \quad (3.29)$$

ile verilir. Schrödinger denkleminin değişim ilkesine göre alacağı şekil ise (1.18) de gösterilmiştir.

Bir $\tilde{M}$ matrisi

$$\tilde{M}_{pq} = H_{pq} - E S_{pq} \quad (3.30)$$

ile tarif edilirse aşağıdaki eşitlikler gösterilebilir:

$$\tilde{M} \tilde{a} = 0, \quad \tilde{a}^\dagger \tilde{M} = 0 \quad (3.31)$$

Şimdi, $\tilde{S}$ nin de bağlı olabileceği herhangi bir α parametresine göre

$$\frac{\partial \tilde{M}}{\partial \alpha} = \frac{\partial H}{\partial \alpha} - E \frac{\partial S}{\partial \alpha} - \frac{\partial E}{\partial \alpha} \tilde{S} \quad (3.32)$$

bağıntısı ve buradan da

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \alpha} - E \frac{\partial S}{\partial \alpha} \right\rangle \quad (3.33)$$

elde edileceği gösterilebilir.

Bu sonuçlardan faydalanma imkânları araştırılırken önce dalga fonksiyonunun ölçeklenmesi ve bunun daha iyi enerjiler elde etmedeki tesiri hatırlanmalıdır. Bir ölçekleme işleminde hedef Virial Teorem'in sağlanmasıdır. Sadece 'bir' konum ile uğraşıldığı durumun aksine (3.28) ile verilen 'konum etkileşmesi' deneme fonksiyonuyla çalışıldığı zaman iki değişik ölçekleme imkânı söz konusudur. Bunların birincisi, ölçekleme (scaling) parametresi $k = k_1$ ve ölçeklemesiz hal $k = 1$ ile gösterilmek üzere, yeni konum fonksiyonları ve ağırlık katsa-



yılarının sırasıyla

$$\phi_p(k_1) = \phi_p(k_1 \vec{r}_1, \dots, k_1 \vec{r}_N)$$

ve

$$a_p(k_1) = a_p(1), \quad S_{pq}(k_1) = S_{pq}(1) \quad (3.34)$$

bağıntılarıyla alındığı seçimdir. Böylece katsayılar eskileri olmakla birlikte yeni bir Hamiltonien matrisi $H(k_1)$ elde edileceğinden enerjinin iyileşmesi sağlanabilir. İkinci bir alternatifte, öncekinde yapılan ilâve olarak, $a_p(k_1)$ ölçeklenmiş katsayılarıyla işlem yapılır ve Virial teorem'i sağlayacak manada en iyi $k = k_0$ değerini bulmak üzere iterasyonlara gidilir. Şüphesiz bu pahalı bir işlemdir. Bu bakımdan birinci usulle (3.33) denklemini birleştirmek akla gelebilir. Eğer α olarak ölçekleme parametresi 'k' alınacak olur ve $\underline{S}$ nin k ya bağılı olmadığı da dikkate alınırsa (3-33) ten

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \left(\frac{\partial}{\partial k} H \right)_k \quad (3.35)$$

bağıntısı elde edilir. Parantezin alt indisi k, beklenen değer ölçekleme gözönüne alınarak hesaplanacağına işaret etmektedir.

(3.35) ile ifade edilen fonksiyonelin değeri k parametresine göre incelenebilir. Çünkü bazı hallerde bu fonksiyonelin yapısı 'enerjinin kendisi'ne göre daha basit olabilir. Gerçekten, bahsedilen fonksiyonelin minimumlarının atomların 'bağılı' ve 'rezonans' durumlarına karşılık geldiği, iki elektronlu atomların bazı S halleri için yapılan hesaplamalardan anlaşılmıştır(47). Bu düşünce ile atomik hallerin incelenmesine "Türev Yöntemi" adı verilmiştir(52). Enerjinin birinci türevinin duraklı yapılması anlamına gelen bu yöntemin kalitatif olarak anlaşılması için ölçeklenmiş ve ölçeklenmemiş matrisler arasındaki

$$I(k) = k^2 I(1), \quad V(k) = k V(1), \quad \underline{S}(k) = \underline{S}(1) \quad (3.36)$$



bağıntıları hatırlanmalıdır. Burada T ve V ile kinetik enerji ve potansiyel enerji işlemcileri kastedilmektedir. Bu takdirde (3.35) ifadesinin

$$\frac{\partial E}{\partial k} = 2k \langle T(1) \rangle_k + \langle V(1) \rangle_k$$

vereceği açıktır. Bu yazılıştaki işlemcilerin kendileri ölçeklenmemiş koordinatlarda verilmektedir. k değiştirilerek bu ifadenin en küçük değerine $k = k_0$ da varılması ile en küçük değer "sıfır" ve k nın "bir" e eşit olması halleri birbirinin benzeri durumlardır. Daha açık olarak, ölçeklenmemiş koordinatlardaki 'eniyeleştirme' işlemi bu koordinatlarda Virial Teorem'i sağlamak görevi yapmaktadır.

Bu çalışmada türev yöntemi helyum atomunun bazı kendiliğinden iyonlaşan (rezonans) S ve P hallerine uygulanmaktadır. Problemin pratik yönleri ve sonuçları bundan sonraki bölümlerde takdir edilmiştir. Bu çalışmada türev yöntemi çok genel olan 'konum etkileşmesi yöntemi' ile birleştirildiğinden, varılacak hükümlerin, atom halinin simetri türü ve elektron sayısı bakımından, S halleri üzerindeki uygulamalarından daha geniş mana taşımaları tabiidir.



DÖRDÜNCÜ BÖLÜM

HESAPLAMA ESASLARI

Dördüncü Bölüm Giriş:

Bu bölüm helyumun rezonans hallerinin enerji ve dalga fonksiyonlarını hesaplamak için çözülmesi gereken kuantum mekanik problemin, fonksiyon bazı ve parametresi, toplam dalga fonksiyonu, cebir denklemi ve ona esas olan matris elemanları ve denklemin kompüterle çözülmesi için kullanılan yöntem gibi, ana esaslarını içermektedir. Analitik diferansiyel ve integral işlemlerinin hepsi, sayılarının çokluğu sebebiyle, yazılmamış, önemlilerden temsilci verilmiştir. Matris elemanlarının türev işlemleri ve sonuçları verilmemişlerdir. Bunların, ihtiyaç halinde, tezinde sonundaki kompüter derleme çıkışlarından izlenmeleri mümkündür.



4.1 Sturmian Fonksiyonlar Ve Lineer Olmayan Parametre

Konumların Eklenmesi ve Ritz değişim yöntemi ile yapılacak herhangi bir hesaplamada hakiki dalga fonksiyonunun uygun, tam bir fonksiyon cümlesine açıldığından bahsedilmişti (Birinci Bölüm). Eğer toplama son sınıra kadar yürütülürse bu cümlelerin herhangi cümle olarak seçilmesi mümkündür. Fakat uygulamada sonlu açılımların yapılması, hesaplama ve yorumlar için arzu edilir. Sonlu bir toplamın çabuk yakınsaması ise seçilen fonksiyon ailesine bağlıdır. Ayrıca, fonksiyonların asimtotik karakterlerinin kolayca belirlenebilmesi gereklidir. Eğer açılım fonksiyonları tam bir cümle teşkil etmiyorsa sürekli bölge fonksiyonlarının da açılıma dahil edilmeleri icabeder. Hidrojen ve Hartree-Fock tipi radyal atomik fonksiyonların tamam bir cümle teşkil etmeleri uyarılmış hallerin de eklenmesiyle mümkün olmaktadır. H-F uyarılmış çözümlerinin uzay boyutları n kuantum sayısı ile devamlı büyümektedir. Halbuki biz, ana özellikleri küçük yarıçaplarda toplanmış, uzaklarda 'sıfır'a giden yörüngemsiler aramaktayız (3). Hidrojen ve H-F yörüngemsilerinin

$$R_{n\ell}(r) = \text{polinom}(r) \cdot \exp(-Zr/n)$$

şeklinde n arttıkça e-üslü terim yüzünden yayılmaya uğrayacakları düşünülürse, bu aksaklığı olmayan fonksiyonların

$$\text{polinom}(r) \cdot e^{-\text{sabit} \cdot r}$$

yapısını taşıyacakları tahmin edilir. Rotenberg (53), bu özelliklere sahip fonksiyonların

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2\alpha_{n\ell}}{r} \right\} S_{n\ell}(r) = \epsilon_0 S_{n\ell}(r)$$

diferansiyel denkleminin $\alpha_{n\ell} = n$ özdeğerli özfonksiyonları olduğunu anlatmış ve Sturmian Fonksiyonlar diye adlandırmıştı. Bu fonksiyon ailesinin Laguerre fonksiyonlarıyla yakın akrabalıkları vardır. Fakat koordinat başlangıcına yakın yerlerde onlardan daha yoğunurlar. Yakınsama ve asimtotik özellikleri iyidir ve işlenmeye elverişlidirler.

Rotenberg'in tanımları hidrojen için ve ölçeklemesiz radyal koordinatlara göre idi. Ona göre $\alpha_{nl} = n$, $\alpha = 1$ ve $\epsilon_0 = -1$ oluyordu. Helyum için $r \rightarrow \alpha r$, $\alpha_{nl} \rightarrow n\alpha$ veya daha genel olarak $Z_{nl}(\alpha)$ yazmak uygun olur. ϵ_0 yerine de α^2 gelir. Böylece yukarıdaki diferansiyel denklem

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2Z_{nl}(\alpha)}{r} \right\} S_{nl}(\alpha r) = \alpha^2 S_{nl}(\alpha r) \quad (4.1)$$

haline döner. Z_{nl} fonksiyonunun ℓ ye göre bir dejenerelik gösterebileceği hakkındaki Rotenberg'in ifadelerine dayanarak, sadelik açısından

$$Z_{nl}(\alpha) = Z(n, \alpha) = \alpha n \quad (4.2)$$

alınacaktır. Burada α , kesim 3.7 de bahsedilen 'ölçekleme parametresi' dir.

Sturmian fonksiyonların Laguerre fonksiyonları ile ilişkileri

$$S_{nl}(r) = B(n, \ell) e^{-r} (2r)^{\ell+1} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2r)$$

şeklindedir(53). Birleme (normalization) özelliği

$$\int \{S_{nl}(\alpha r)\}^2 dr = 1 \quad (4.3)$$

olarak seçilirse, radyal fonksiyonların en açık ifadesi

$$S_{nl}(\alpha r) = (-)^{\ell} \left\{ \frac{\alpha \Gamma(n-\ell)}{n(\Gamma(n+\ell+1))^3} \right\}^{1/2} e^{-\alpha r} \sum_{k=\ell+1}^n \frac{(-2\alpha r)^k}{\Gamma(\ell+k+1)\Gamma(k-\ell)\Gamma(n-k+1)} \quad (4.4)$$

olur(54). Söylenebilir ki bu fonksiyon bazının en tipik özelliği, lineer olmayan α parametresinin n ve ℓ kuantum sayılarına bağlı olmaması, yani her yörüngemsi için aynı olmasıdır. Türev yönteminin kullanılması bu özellik sayesinde mümkün olmuştur.

Sturmian fonksiyonların hidrojen tipi dalga denkleminin



özfonksiyonları

$$P_{nl} = -(2n)^{-1/2} (2\xi)^{3/2} \{(n+l)!\}^{-3/2} \{(n-l-1)!\}^{1/2} \\ \cdot (2\xi r)^l L_{n+2l}^{2l+1} (2\xi r) \exp(-\xi r) \quad (4.5)$$

lere göre yakınsama ve bütünlük (tamamlık, completeness) özelliklerini değerlendirmek için S_{2s} fonksiyonu P_{nl} serisine açılmıştır(55).

$$S_{2s} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n P_{n0}$$

Açılım katsayıları

$$C_n = \int_0^{\infty} S_{20} \cdot P_{n0} \cdot r^2 dr = \frac{16}{\sqrt{3}} \frac{n^{5/2} (n-1)^{n-2}}{(n+1)^{n+2}}$$

olarak bulunur. Bunlarının karelerinin toplamı, $n \rightarrow \infty$ limiti için, hesaplanınca 0.57 civarında bir değer bulunmuştur. P_{nl} cümlesi tamam olsaydı bu limit '1' olacaktı. Diğer bir deyişle S_{ns} yi elde etmek için hidrojen tipi yörüngemsilerin sürekli bölge üyelerini de açılıma dahil etmek gerekir. Sturmianlar'ın, sürekli bölge kısımlarına lüzum göstermeden, bütün, kesikli bir cümle kurdukları ve uygun bir açılım bazı teşkil ettikleri bu suretle anlaşılmaktadır.

Şimdi lineer olmayan parametreye dönelim. Tek elektron Coulomb potansiyeli için özfonksiyonların e-üslerinin Z/n ile orantılı olduğundan bahsedilmişti. Çok elektron sistemlerinde de her yörüngemsiye buna benzer bir şekil vermek, fakat perdeleme olayını hesaba katmak üzere, Z yi çekirdek yüküne eşit olmayan bir parametre gibi işleyerek değişim hesapları yapmak çok uygulanan bir usuldür. (56). He için herbir elektrona bir parametre bağlanması, yani

$$\alpha \rightarrow Z_1/n_1, \quad \beta \rightarrow Z_2/n_2$$

almak düşünülebilir. Bir parametreye inmek hesapları daima kolaylaştırdığından ve türev yöntemi henüz bir parametre ötesine geliştiril-

miş olmadığından, β parametresi α cinsinden uygun bir tarzda elde edilebilmelidir. Bunun için hidrojenik enerjinin

$$E_n = (-1/2) Z^2/n^2$$

olduğu ve helyumun, elektronları etkileşmeksizin, enerjisinin yaklaşık

$$|E_{He}| \approx \frac{1}{2}(Z_1^2/n_1^2 + Z_2^2/n_2^2) = \frac{1}{2}(\alpha^2 + \beta^2)$$

olacağı anlaşılabılır. Bu takdirde ikinci parametre

$$\beta = \{|2E_{He}| - \alpha^2\}^{1/2} \quad (4.6)$$

denklemleri uyarınca yokedilebilir. Geriye kalan tek parametre, ℓ yörünge açısal momentum kuantum sayısından müstakildir. Bizim çalışmalarımızda α değişken bir parametre alınacağından n sayısına bağıllılığı da kaldırılacaktır. Böylece konumların etkileşmesi tekniğinde her konum için aynı perdeleme sabiti öngörülmektedir. Hesaplanacak bir konum için α nın ilk tahmini "hakim konum" a ait iç elektron için $\alpha = Z/n$ bağıntısı yardımıyla yapılabilir: Meselâ He temel seviyesi ($1s^2$) için $\alpha = 2/1 = 2$ alınması gibi. α nın gerçek değeri ise eniyileştirme ile bulunacaktır. Hesaplamalarda E , ilgili terim'in deney enerjisi, yaklaşık olarak bilindiğinden, α üzerinde karekök içi negatif olmayacak şekilde bir sınırlama dikkatten kaçırılmamalıdır.

4.2 Helyum Dalga Fonksiyonu

İki elektronlu atom sisteminin toplam spin açısal momentumu '0' veya '1', yani S^2 işlemcisinin özdeğerleri 1 ve 3, S_z özdeğerleri 0, 1 ve -1 olabilir. Antisimetri özelliğini de sağlamak üzere dört tane determinant dalga fonksiyonu, (1.10), teşkil edilebilir. Helyuma ait bir avantaj olarak, bu fonksiyonların spin ve uzay kısımları ayrılmakta ve işlemler kolaylaşmaktadır. İki elektronun 'özdeş' olmadığı genel bir $(n_1\ell_1n_2\ell_2)$ konumu (configuration) için He problemi, herhangi atomun kapalı kabuk dışında iki elektronu olması haline özdeştir ve Seaton(9) takibedilerek dalga fonksiyonu



$$\begin{aligned}
\psi(n_1 \ell_1 n_2 \ell_2, S M_S M_L | \vec{X}_1, \vec{X}_2) &= \chi \cdot \Phi \\
&= \chi(S M_S | \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) \cdot \frac{1}{2} \{ \Phi(n_1 \ell_1 n_2 \ell_2, L M_L | \vec{r}_1, \vec{r}_2) \\
&\quad + (-1)^S \Phi(n_1 \ell_1 n_2 \ell_2, L M_L | \vec{r}_2, \vec{r}_1) \}
\end{aligned} \quad (4.7)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\vec{X}_1$ birinci elektrona ait spin ve uzay koordinatlarını, $\vec{\sigma}_1$ birinci elektronun spin koordinatlarını, $\vec{r}_1$ de uzay koordinatlarını gösterir. Toplam spin fonksiyonu χ , iki spin açısal momentumdan vektör toplama kurallarına göre teşkil edilir. Yani, δ 'bir elektron' spin fonksiyonu olmak üzere

$$\chi(S M_S | \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) = \sum_{m_{S_1}} \sum_{m_{S_2}} C_{m_{S_1} m_{S_2}}^{1/2 \ 1/2 \ S} \delta(m_{S_1} | \vec{\sigma}_1) \delta(m_{S_2} | \vec{\sigma}_2) \quad (4.8)$$

dir. Uzay koordinatlı fonksiyon da radyal ve açısal kısımlara ayrılır:

$$\begin{aligned}
\Phi(n_1 \ell_1 n_2 \ell_2 L M_L | \vec{r}_1, \vec{r}_2) &= R_{n_1 \ell_1}(r_1) \cdot R_{n_2 \ell_2}(r_2) \\
&\quad \cdot \Phi(\ell_1 \ell_2 L M_L | \hat{r}_1, \hat{r}_2)
\end{aligned} \quad (4.9)$$

Ayrıca buradaki Legendre fonksiyonu da Y küresel harmoniklere açılır:

$$\begin{aligned}
\Phi(\ell_1 \ell_2 L M_L | \hat{r}_1, \hat{r}_2) &= \sum_{m_{\ell_1}} \sum_{m_{\ell_2}} C_{m_{\ell_1} m_{\ell_2}}^{\ell_1 \ \ell_2 \ L} M_L \\
&\quad \cdot Y_{\ell_1}^{m_{\ell_1}}(\hat{r}_1) \cdot Y_{\ell_2}^{m_{\ell_2}}(\hat{r}_2)
\end{aligned} \quad (4.10)$$

(4.8) ve (4.10) açılımlarında görülen C ler, açık ifadeleri (6.2) de özel haller için verilen Clebsh-Gordan katsayılarıdır.

"Konum dalga fonksiyonları" diyebileceğimiz ψ lerden, "Konum etkileşme dalga fonksiyonu" nun nasıl teşkil edileceği birinci bölümde tartışılmıştı. Ayrıca Kaynak(3) te özel tartışma vardır. (1.15) e göre toplam dalga fonksiyonu, (4.7) ile birlikte,



$$\Psi(LM_L SM_S | \vec{X}_1, \vec{X}_2) = \sum_i a_i \psi_i(LM_L SM_S | \vec{X}_1, \vec{X}_2) \quad (4.11)$$

olarak alınmalıdır. Burada i konumları, yani $(n_1 l_1 n_2 l_2)_i$ leri göstermektedir. Nihayet radyal fonksiyonların 'birleşme' özellikleri (4.3) ve $R_{nl}(r) = (1/r) \cdot S_{nl}(\alpha r)$ gözönüne alınarak toplam dalga fonksiyonu için

$$\begin{aligned} \Psi = \chi \cdot \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{l_1} \sum_{l_2} a(n_1 n_2 l_1 l_2) \cdot (r_1 r_2)^{-1} \\ \cdot \{ \phi(l_1 l_2 LM_L | \hat{r}_1, \hat{r}_2) \cdot S_{n_1 l_1}(\alpha r_1) \cdot S_{n_2 l_2}(\beta r_2) \\ + (-1)^S \phi(l_2 l_1 LM_L | \hat{r}_2, \hat{r}_1) \cdot S_{n_1 l_1}(\alpha r_2) \cdot S_{n_2 l_2}(\beta r_1) \} \end{aligned} \quad (4.12)$$

ifadesine varılır. a katsayıları konumların ağırlıklarını gösterir ve değişim metodu ile tayin edileceklerdir.

Toplam dalga fonksiyonunun (4.12) açılımında toplama indisleri için alt ve üst sınırlar düşünülmelidir. ' l ' nin değil de ' n ' nin sınırlandırılması daha kestirme bir yoldur, çünkü

$$n_1 > l_1, \quad n_2 > l_2 \quad (4.13)$$

şartları ile ' l ' de bir derece sınırlandırılmış olur. Ne kadar çok konum toplanırsa bulunan enerji gerçeğe o nispette yaklaşır, fakat matrislerin boyutları, hesaplama zaman ve problemleri de artar. Herşeyden önce hesaplanmış bir multipletin enerjisinin hangi konuma ait olduğu problemi vardır. Bu probleme bir çözüm olarak Green ve arkadaşlarının görüşü gösterilebilir(8): Deney spektroskopistleri birçok spektroskopi terimlerine 'merkezi alan yaklaşımı' çerçevesinde birer 'konum' atfetmişlerdir. Buna 'hâkim konum' denilsin. Açılımda buna karşılık olan konum bununla aynı radyal özellikleri gösterecek şekilde n ler artırılabilir, veya lineer olmayan parametre değiştirilebilir. Böyle bir güçlük bizde $(3d^2)^3S$ konumu hesaplanırken ortaya çıkmıştır ve tartışması altıncı bölümde yapılmıştır. Diğer bir husus da n_1 ve n_2 nin aralarındaki ilişkidir. n_1 ile 'iç elektron' gösterildiğine ve bu elektron dıştakinden daha 'sıkı bağlı' olacağına göre, daha gevşek olan



dış elektronu belirleyen radyal terimlerin sayısı diğerinden az olmalıdır. Bütün bu faktörlerin tesirini hesaplamalarda incelemenin çok pahalıya malolacağı meydandadır. Bizim durumumuzda, etkileşen konumların seçimi otomatik bir rutinle (beşinci bölümde, STATE altprogramı) yapıldığından bu tesirlerin izahı üzerinde durulamamıştır. n ve ℓ lerin değişim sahasının büyüklüğü baz büyüklüğünü tayin edeceğinden matris tersleme (inversion) ve kök bulma işlemleri yuvarlama hatalarını artırabilir. Hernekadar programımızda kullanılan matris tersleme rutini (DMINVH) 80x80 boyutlarına göre hazırlanmış ve denenmişse de bizim kullandığımız fonksiyon cümlesinde, türetilmiş fonksiyonların da tesiriyle, çok daha küçük boyutlarda güçlükler görülebilmektedir.

Yörünge açısal momentum kuantum sayılarının sağlayacağı şartlardan biri, incelenmekte olan multipletin toplam açısal momentumuna bağlı olan

$$|\ell_1 + \ell_2| \leq L \leq \ell_1 + \ell_2 \quad (4.14)$$

üçgen bağıntısı ve paritenin korunacağını gösteren

$$(-1)^{\ell_1 + \ell_2} = \text{sabit} \quad (4.15)$$

bağıntısıdır. Eğer ℓ_1 için bir üst sınır konmuşsa ℓ_2 için ayrıca konmasına lüzum kalmamaktadır. Burada sıralanan kaideler State rutini- nin incelenmesiyle daha da açık olarak görülecektir.

Burada tasvir edilen konum etkileşmesi tekniğinden ayrı olarak, her konum için Schrödinger denkleminin muayyen bir ölçüde çözümlerinin elde edilmesi ve bunların toplanmasından ibaret konum etkileşme hesapları da yapılmaktadır. Şüphesiz bu çok daha sınırlı anlamda bir 'konum etkileşmesi' dir(8).

(4.12) toplam dalga fonksiyonu, elektron koordinatlarının yer değiştirmesine karşı antisimetrik olmalıdır. Bu özellik spin ve uzay fonksiyonlarının zıt simetrikli olmalarıyla sağlanır. Triplet için uzay fonksiyonu tek, spin fonksiyonu çift simetriye sahiptir.



Singlet için durum bunun tersidir. Özdeş iki elektron için triplet fonksiyonu sıfır olur. (4.12) de triplet-singlet ayırımı $(-1)^S$ ifadesi kullanılarak yapılmaktadır. Spin fonksiyonunun simetri durumu da, bir sonraki kesimde de görüleceği gibi, (4.8) gereğince spin izdüşüm işlemcileri yardımıyla, yani, C katsayıları kullanılarak ayarlanmaktadır. Dalga fonksiyonlarının simetri özellikleri daha başka yöntemlerle de sağlanmakla beraber atom fiziğinde en yaygın olan 'vektör toplanma' ve 'izdüşüm işlemcileri kullanma' usulleridir.

4.3 Hamiltonien ve Bindirme(overlap) Matrisleri

Spinsiz iki elektron elektrostatik Hamiltonien, H ,

$$H(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = H_1(\vec{r}_1) + H_2(\vec{r}_2) + H(r_{12}) \quad (4.16)$$

ile verilir. Bunun 'bir elektron' kısmı, $\vec{r}$ uzay koordinatlarını göstereceğine göre

$$H_1(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \quad (4.17)$$

dir. Z çekirdek yüküdür ve Laplacen'in kutupsal koordinatlardaki ifadesi, yörünge açısal momentum vektör işlemcisi $\vec{L}$ olarak,

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\vec{L}^2}{r^2} \quad (4.18)$$

şeklindedir. Toplam Hamiltonien'in iki elektron kısmı ise şudur:

$$H(r_{12}) = 1/r_{12} \quad (4.19)$$

Bütün bu ifadelerde atom birimleri (ab) kullanılmaktadır: $e = \hbar = c = 1$. Değişim hesaplarımızda (1.19) ve (1.20) ile tanımlanan

$$\langle \Psi | H(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \Psi \rangle, \quad \langle \Psi | \Psi \rangle$$

Hamiltonien ve Bindirme matrisleri kurulmalıdır. Burada Ψ (4.12) ile verilen konum etkileşme dalga fonksiyonudur. Bunun daha anlamlı ifadesi



$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_i a_i A \chi_i(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) \cdot \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (4.20)$$

olacaktır. Burada A antisimetrikleyici operatör, χ_i ve ϕ_i "ilkel" spin ve uzay fonksiyonlarıdır. Hamiltonien matris elemanı

$$\langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle = \sum_i \sum_j a_i^* a_j \langle \chi_i \phi_i | H | \chi_j \phi_j \rangle \quad (4.21)$$

tarzında ifade edilebilir. Antisimetrikleyici operatör permütasyon operatörüne bağlıdır ve helyum için

$$A = (2!)^{-1/2} \sum_P \epsilon(P) P \quad (4.22)$$

den ibarettir. Buradaki A bir izdüşüm işlemcisi değildir, fakat bir izdüşüm işlemcisi olan

$$O_A = (2!)^{-1/2} A$$

ile orantılıdır. Böylece, H nin spin koordinatsız olduğu da dikkate alınarak, (4.21) in ikinci yanındaki eleman

$$\sum_P \epsilon(P) \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle \langle \chi_i | O_S | P \chi_j \rangle \quad (4.23)$$

ifadesine döndürülür. Spin fonksiyon kısmı integralinin Sanibel katsayısına eşit olduğu bilinmektedir. Fakat bizim fonksiyonlarımız spin izdüşüm işlemcileri ile 'spince uymuş' hale getirildiğinden Clebsh-Gordan katsayıları, (4.8), kullanılacaktır. Spin uzayında integralleme

$$\begin{aligned} & \langle \chi_i(SM_S | \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) | \chi_j(SM_S | \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) = \\ & \sum_i \sum_j C_{m_{s1i} m_{s2i}}^{1/2 \ 1/2 \ S} \cdot C_{m_{s1j} m_{s2j}}^{1/2 \ 1/2 \ S} \cdot \delta(m_{s1i} | \sigma_1) \\ & \cdot \delta(m_{s2i} | \sigma_2) \cdot \delta(m_{s1j} | \sigma_1) \cdot \delta(m_{s2j} | \sigma_2) \end{aligned} \quad (4.24)$$

olur. Bir elektron spin fonksiyonları aşağıdaki bağıntıyı sağlarlar:

$$\sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} \delta(m_{s_i}|\sigma) \cdot \delta(m_{s_j}|\sigma) = \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \quad (4.25)$$

Vektör toplama katsayıları C ler de reel(gerçek) ve

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{m_1 m_2 m}^{j_1 j_2 j} \cdot C_{m_1 m_2 m'}^{j_1 j_2 j'} = \delta_{jj'} \cdot \delta_{mm'} \quad (4.26)$$

birleşme özelliğine sahip olduklarından (4.24) "1" verir.

Φ uzay fonksiyonu üzerine uygulanan simetri adaptasyonlarından sonra alacağı şekil ise (4.7) de gösterildiği gibidir. Bu mutalâalardan varılan sonuç odur ki, konum etkileşme fonksiyonu ile kurulacak matrisler, ayrı ayrı konum fonksiyonları ile kurulacak elemanlara indirgenmiş olmaktadırlar. K ve K' gibi iki konum fonksiyonu varsa (4.21) yerine şimdi

$$\langle \Phi(K|\vec{r}_1, \vec{r}_2) | H(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \Phi(K'|\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (4.27)$$

ve bindirme matris elemanı için de

$$\langle \Phi(K|\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \Phi(K'|\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (4.28)$$

integralleri hesaplanmalıdır. Konum tarifinden anlaşılacağı üzere K ile $(n_1 l_1 n_2 l_2)$ ve K' ile $(n'_1 l'_1 n'_2 l'_2)$ kastedilmektedir. Φ lerin belirlenmesinde L ve M_L yi de belirtmek mümkündür, fakat bundan sonra, kısalık bakımından, zaruri olmadıkları yerlerde, bu ikisi yazılmayacaklardır. Ayrıca, baz fonksiyonlarımız ölçeklenmiş olduklarından, integrallerin ölçekleme parametreleri α ve β ya bağlı oldukları açıkça yazılabilecektir.

Bu düşüncelerin ışığı altında ilkin (4.17) ve (4.27) ifadelerinden hareketle bir elektron enerji işlemcisinin matris elemanları için, 58 inci sayfanın sonundaki not beraberliğinde,

$$H_1(K, K', \alpha, \beta) = \langle \Phi(l_1 l_2 | \vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot S_{n_1 l_1}(\alpha r_1) \cdot S_{n_2 l_2}(\beta r_2)$$

$$| H_1 | \Phi(l'_1 l'_2 | \vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot S_{n'_1 l'_1}(\alpha r_1) \cdot S_{n'_2 l'_2}(\beta r_2) \rangle$$



$$\begin{aligned}
& + (-1)^{S_{\langle \ell_1 \ell_2 | \hat{r}_1, \hat{r}_2 \rangle}} \cdot S_{n_1 \ell_1}(\alpha r_1) S_{n_2 \ell_2}(\beta r_2) \\
& |H_1 | \phi(\ell_2' \ell_1' | \hat{r}_2, \hat{r}_1) \cdot S_{n_1' \ell_1'}(\alpha r_2) \cdot S_{n_2' \ell_2'}(\beta r_1) \rangle \\
& + (-1)^{S_{\langle \ell_2 \ell_1 | \hat{r}_2, \hat{r}_1 \rangle}} \cdot S_{n_1 \ell_1}(\alpha r_2) \cdot S_{n_2 \ell_2}(\beta r_1) \\
& |H_1 | \phi(\ell_1' \ell_2' | \hat{r}_1, \hat{r}_2) \cdot S_{n_1' \ell_1'}(\alpha r_1) \cdot S_{n_2' \ell_2'}(\beta r_2) \rangle \\
& + (-1)^{2S_{\langle \ell_2 \ell_1 | \hat{r}_2, \hat{r}_1 \rangle}} \cdot S_{n_1 \ell_1}(\alpha r_2) \cdot S_{n_2 \ell_2}(\beta r_1) \\
& |H_1 | \phi(\ell_2' \ell_1' | \hat{r}_2, \hat{r}_1) \cdot S_{n_1' \ell_1'}(\alpha r_2) \cdot S_{n_2' \ell_2'}(\beta r_1) \rangle
\end{aligned} \tag{4.29}$$

ifadesi bulunur. Bu yazılıştaki indis-indisleri için küçük boy rakamlar ve baştanberi yapıldığı gibi, işlemciler için italik harfler kullanılmıştır.

H_1 işlemcisi açı koordinatlarına bağlı olmadığından bunlar üzerinden yapılacak integrallemeler ayrılır. Toplamın birinci ve dördüncü terimlerdeki açı integralleri, genel şekli daha sonra verilecek olan integrallerde işlemci $P_\lambda = 1$ alınmış özel hallerden ibarettir ve

$$f_{\lambda=0} = f_0(\ell_1 \ell_2 \ell_1' \ell_2') = \langle \ell_1 \ell_2 L | \ell_1' \ell_2' L \rangle \tag{4.30}$$

ile, toplamın ikinci ve üçüncü terimlerdeki ise

$$g_{\lambda=0} = g_0(\ell_1 \ell_2 \ell_1' \ell_2') = \langle \ell_1 \ell_2 L | \ell_2' \ell_1' L \rangle \tag{4.31}$$

ile gösterilmektedirler(57). r değişkenlerine bağlı integraller de dört terimde vardır. H_1 sadece r_1 e bağlı olduğundan birinci terim aşağıdaki şekilde ayrılır: ((4.29) ifadesi dalga fonksiyonunun (4.12) ile verilen şeklindeki $(r_1 r_2)^{-1}$ çarpanını ihtiva etmemektedir. Doğru matris elemanları, bu çarpanın ket ve bra kısımlarına ayrı ayrı yazılmasıyla kolayca elde edilecektir. Bundan sonraki ifadeler ona göre yazılmışlardır.)



$$\langle r_2^{-2} S_{n_2 \ell_2}(\beta r_2) S_{n_2' \ell_2'}(\beta r_2) \cdot \langle r_1^{-1} S_{n_1 \ell_1}(\alpha r_1) | H_1 | S_{n_1' \ell_1'}(\alpha r_1) \cdot r_1^{-1} \rangle \quad (4.32)$$

(4.32) deki ilk çarpan, hacim elemanının $d\tau = r^2 dr$ olduğu da gözönüne alınarak

$$\begin{aligned} \langle r^{-2} S_{n\ell}(\alpha r) | S_{n'\ell'}(\beta r) \rangle &= \int_0^\infty (1/r^2) \cdot S_{n\ell}(\alpha r) S_{n'\ell'}(\beta r) d\tau \\ &= \int_0^\infty S_{n\ell}(\alpha r) \cdot S_{n'\ell'}(\beta r) dr \quad (.32') \end{aligned}$$

sade haline gelir.

(4.32) deki ikinci çarpan, (4.29) daki diğer terimlerdeki benzerleri gibi, genel haliyle

$$\langle r^{-1} S_{n\ell}(\alpha r) | H_1(r) | S_{n'\ell'}(\beta r) r^{-1} \rangle \quad (4.33)'$$

şeklinde olup, analitik ifadelerine varmak için $H_1(r)$ işlemcisinin etkileştirilmesi gerekir. Kısmi türevler adi türüvlere çevrilerek, (4.17) ve (4.18) den

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right) r^{-1} \cdot S_{n\ell}(\alpha r) \\ &= - \left(\frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^3} + \frac{Z}{r^2} \right) S_{n\ell}(\alpha r) \end{aligned} \quad (4.33)$$

elde edilir. Böylece (4.33)' ifadesi, bazı düzenlemelerden sonra

$$-\frac{1}{2} \int dr S_{n\ell}(\alpha r) \left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} \right\} S_{n'\ell'}(\beta r) \quad (4.34)$$

haline gelir. (4.1) denkleminde elde edilecek

$$\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} = \alpha^2 - \frac{2Z(n, \alpha)}{r}$$



de kullanılarak istenen integral için, elemanter integrallere bağlı

$$-\frac{1}{2\beta^2} \int dr S_{n\ell}(\alpha r) S_{n'\ell}(\beta r) - \{ Z - Z(n', \beta) \} \\ \cdot \int dr S_{n\ell}(\alpha r) \cdot r^{-1} S_{n'\ell}(\beta r) \quad (4.35)$$

bağıntısı elde edilir. (4.29) daki diğer üç terimden de benzer ifadeler, n, ℓ, α ve β nın farklı konumlarıyla ortaya çıkmışlardır.

İki noktaya hemen işaret etmek belki uygundur. Birincisi Sturmian fonksiyonların ortonormallik durumları, yani (4.32') nün '1' e eşit olmayışı, ikincisi, konum fonksiyonlarının yörünge açısı momenti işlemcisinin $\ell(\ell+1)$ özdeğerli özfonksiyonları olmalarıdır.

Toplam Hamiltonien matris elemanına H_1 den gelene eşit bir katkı da H_2 den gelecektir, (4.16). Onu ayrıca hesaplamaya lüzum yoktur ve H_1 in katkısını iki ile çarpmak yetecektir.

Şimdi elektron-elektron etkileşme işlemcisi matris elemanlarının formüllerine gelinmiştir. Bu işlemcinin, (4.19), Legendre Polinomlarına açılımı

$$H_{12} \equiv \frac{1}{r_{12}} = \sum_{\lambda} \gamma_{\lambda}(r_1, r_2) P_{\lambda}(\cos \omega) \quad (4.36)$$

bilinmektedir. Burada $\cos \omega = \hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2$ dir ve γ

$$\gamma_{\lambda}(r_1, r_2) = \begin{cases} r_1^{\lambda}/r_2^{\lambda+1} & r_1 < r_2 \quad \text{ için} \\ r_2^{\lambda}/r_1^{\lambda+1} & r_2 < r_1 \quad \text{ için} \end{cases} \quad (4.37)$$

bağıntılarıyla tanımlanır. Spin koordinatları üzerinden integraller için (4.23) denkleminin arkasından söylenenler burada da geçerlidir, ve yine sadece konum fonksiyonları ile ilgilenmek yetecektir. K ve K' gibi iki konum için, H_1 de olduğu gibi, dört terimli toplamda ikisi



$(-1)^S$ çarpanlı olur. Bunlar deęiřtirmeli terimler, dięer ikisi direkt integrallerdir. Örnek olarak birinci terim ele alınsın:

$$\begin{aligned}
 & \langle \phi(l_1 l_2 | \hat{r}_1, \hat{r}_2) \cdot S_{n_1 l_1}(\alpha r_1) \cdot S_{n_2 l_2}(\beta r_2) \\
 & \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi(l'_1 l'_2 | \hat{r}_1, \hat{r}_2) \cdot S_{n'_1 l'_1}(\alpha r_1) \cdot S_{n'_2 l'_2}(\beta r_2) \rangle \\
 & = \sum \langle \phi(l_1 l_2 | \hat{r}_1, \hat{r}_2) | P_\lambda(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2) | \phi(l'_1 l'_2 | \hat{r}_1, \hat{r}_2) \rangle \\
 & \cdot \langle S_{n_1 l_1}(\alpha r_1) S_{n_2 l_2}(\beta r_2) | \gamma_\lambda(r_1, r_2) | S_{n'_1 l'_1}(\alpha r_1) S_{n'_2 l'_2}(\beta r_2) \rangle
 \end{aligned}
 \tag{4.38}$$

Bunda da önce ikinci element düşünölsün: Bu tip integrale 'Slater İntegrali' denir ve en genel řekli, (4.37) nin de kullanılmasıyla, ařağıdaki gibi dönöřtürölür:

$$\begin{aligned}
 R_\lambda(abcd) = \int_0^\infty S_a(r_1) \cdot S_c(r_1) \left\{ \frac{1}{r_1^{\lambda+1}} \int_0^{r_1} S_b(r_2) \cdot S_d(r_2) r_2^\lambda dr_2 \right. \\
 \left. + r_1^\lambda \int_{r_1}^\infty S_b(r_2) \cdot S_d(r_2) \frac{1}{r_2^{\lambda+1}} dr_2 \right\} dr_1
 \end{aligned}
 \tag{4.39}$$

Burada a, b, c ve d kuantum sayılarını ve ölçekleme parametresini temsil eder. Löwdin'in sadeleřtirmesi (58) kullanılarak

$$\begin{aligned}
 R_\lambda(abcd) = 2 \int_0^\infty dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 (r_2^\lambda / r_1^{\lambda+1}) \\
 \cdot S_a(r_1) \cdot S_c(r_1) \cdot S_b(r_2) \cdot S_d(r_2)
 \end{aligned}
 \tag{4.40}$$

a varılır. (4.38) deki birinci element atomik yapı hesaplarında çok karřılařılan bir katsayı olup Percival ve Seaton tarafından(57),

$$f_\lambda(l_a l_b, l_c l_d, L) = \langle l_a l_b L | P_\lambda(\cos \omega) | l_c l_d L \rangle
 \tag{4.41}$$



şeklinde verilmektedir. Burada

$$\phi(\ell_a \ell_b L | \hat{r}_1, \hat{r}_2) \rightarrow |\ell_a \ell_b L\rangle$$

kullanılmaktadır. (4.41) katsayısının genel ifadesi

$$\langle \ell_a \ell_b L | P_\lambda(\cos \omega) | \ell_c \ell_d L \rangle = (-1)^{\ell_a + \ell_c - L} \{1/(2\lambda + 1)\}$$

$$\cdot C_{0 \ 0 \ 0}^{\ell_a \ \ell_c \ \lambda} \cdot C_{0 \ 0 \ 0}^{\ell_b \ \ell_d \ \lambda} \{ (2\ell_a + 1)(2\ell_b + 1)(2\ell_c + 1)$$

$$\cdot (2\ell_d + 1) \}^{1/2} \cdot W(\ell_a \ell_b \ell_c \ell_d, L, \lambda) \quad (4.42)$$

bağıntısıyla verilmektedir. Burada C ler Vektör Toplama Katsayıları, W ise Racah-W-Katsayısıdır. Bu tanımlara göre birinci terimin (4.38) açılı koordinatlı integrali

$$f_\lambda(\ell_1 \ell_2, \ell'_1 \ell'_2, L)$$

den ibarettir. Direkt integral olan dördüncü terim de bunun aynıdır, fakat ikinci ve üçüncü terimlerde, değiştirmeli koordinatlar sebebiyle

$$\langle \phi(\ell_1 \ell_2 | \hat{r}_1, \hat{r}_2) | P_\lambda(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2) | \phi(\ell'_1 \ell'_2 | \hat{r}_2, \hat{r}_1) \rangle \quad (4.43)$$

kullanılacaktır. Bu katsayılar da

$$g_\lambda(\ell_a \ell_b, \ell_c \ell_d, L) = (-1)^{\ell_a + \ell_b - L} \cdot f_\lambda(\ell_a \ell_b, \ell_d \ell_c, L) \quad (4.44)$$

olarak hesaplanmaktadır (57). Bu bakımdan ikinci terimin açılı integrali

$$(-1)^S \cdot (-1)^{\ell_1 + \ell_2 - L} \cdot f_\lambda(\ell_1 \ell_2, \ell'_2 \ell'_1, L) \quad (4.45)$$

olur. Üçüncü teriminki ise,



$$g_{\lambda}(l_1 l_2, l'_1 l'_2, L) = g_{\lambda}(l'_1 l'_2, l_1 l_2, L) \quad (4.46)$$

simetri özelliğinden dolayı, ikinci teriminkine eşittir. Dört terimin toplanmasında $\sum_{\lambda}$ ortak olduğundan, $1/r_{12}$ nin matris elemanı

$$\begin{aligned} & \sum_{\lambda} \{ f_{\lambda}(l_1 l_2, l'_1 l'_2, L) \cdot \{ R_{\lambda}(n_1 l_1 \alpha, n_2 l_2 \beta, n'_1 l'_1 \alpha, n'_2 l'_2 \beta) \\ & \quad + R_{\lambda}(n_2 l_2 \beta, n_1 l_1 \alpha, n'_2 l'_2 \beta, n'_1 l'_1 \alpha) \} \\ & + (-1)^{l_1 + l_2 - L + S} f_{\lambda}(l_1 l_2, l'_2 l'_1, L) \\ & \quad \cdot \{ R_{\lambda}(n_1 l_1 \alpha, n_2 l_2 \beta, n'_2 l'_2 \beta, n'_1 l'_1 \alpha) \\ & \quad + R_{\lambda}(n_2 l_2 \beta, n_1 l_1 \alpha, n'_1 l'_1 \alpha, n'_2 l'_2 \beta) \} \} \end{aligned} \quad (4.47)$$

olarak elde edilmiştir. R nin tanımı ve abcd sıralamasına dikkat edilmelidir. Ayrıca bazı simetri özellikleri de görülmektedir. Meselâ,

$$R_{\lambda}(abcd) = R_{\lambda}(bdac) ,$$

$$f_{\lambda}(l_1 l_2, l'_2 l'_1, L) = f_{\lambda}(l_2 l_1, l'_1 l'_2, L)$$

gibi. Sonuncu eşitlik, $W(abcd, ef)$ katsayısının $W(badc, ef)$ ye eşit olması(59) ve parite korunması ile anlaşılabilir.

λ nın sıfırdan sonsuza kadar tamsayılar olacağı teorik olarak düşünülmelidir, fakat pratikte sayıları birkaçı geçmez. Bizim durumumuzda λ şu tarzda sınırlanmıştır(60):

$$|l_i - l'_i| \leq \lambda \leq l_i + l'_i , \quad i = 1, 2$$

$\lambda = 0$ özel hali için f ve g katsayıları tek elektron integrallerinde görülmüştü. Bunların değerleri de



$$f_0(l_a l_b, l_c l_d, L) = \delta(l_a l_b, l_c l_d) \quad (4.48)$$

bağıntısı ve (4.44) yardımıyla belirlenip kullanılmıştır(57).

Tek elektron Hamiltonien'inin toplu olarak yazmadan önce gösterim kolaylığı için (4.35) te görülen integralleri ve daha sonra da R de ortaya çıkacakları içine alacak genel bir üslü-e integral fonksiyonu tanımlamak uygun görülmüştür:

$$\int_0^\infty e^{-tr} r^p S_{n\ell}(ar) \cdot S_{n'\ell'}(br) dr \equiv I(p, t, n, \ell, a, n', \ell', b) \quad (4.49)$$

Bu şekildeki tanımlar programlama sırasında da Function alt programları için uygun düşmektedir. K ve K' gibi iki konumda α ve β sadece elektron etiketine bağlıdır, bu yüzden tanımlanacak fonksiyonda onları kuantum sayılarından ayrı göstermek ve α'_i olması beklenen yere α_i v.s. yazmak gerekmiştir. Böylece, programdaki sembolü ile, tek elektron enerji işlemcisi matris elemanı RH için aşağıdaki sonuca varılmıştır:

$$\begin{aligned} RH(K, K', \alpha, \beta) = & \\ & -\langle l_1 l_2 L | l'_1 l'_2 L \rangle \{ (\alpha^2 + \beta^2) \cdot I(0, 0, n_1, l_1, \alpha, n'_1, l'_1, \alpha) \\ & \cdot I(0, 0, n_2, l_2, \beta, n'_2, l'_2, \beta) + 2\{Z - Z(n'_1, \alpha)\} \\ & \cdot I(0, 0, n_2, l_2, \beta, n'_2, l'_2, \beta) \cdot I(-1, 0, n_1, l_1, \alpha, n'_1, l'_1, \alpha) \\ & + 2\{Z - Z(n'_2, \beta)\} \cdot I(0, 0, n_1, l_1, \alpha, n'_1, l'_1, \alpha) \\ & \cdot I(-1, 0, n_2, l_2, \beta, n'_2, l'_2, \beta) \} - \langle l_1 l_2 L | l'_2 l'_1 L \rangle \{ (\alpha^2 + \beta^2) \\ & \cdot I(0, 0, n_1, l_1, \alpha, n'_2, l'_2, \beta) \cdot I(0, 0, n_2, l_2, \beta, n'_1, l'_1, \alpha) \} \end{aligned} \quad \rightarrow \rightarrow \rightarrow \rightarrow$$



$$\begin{aligned}
& + 2\{Z - Z(n'_1, \alpha)\} \cdot I(0, 0, n_1, \ell_1, \alpha, n'_2, \ell'_2, \beta) \\
& \cdot I(-1, 0, n_2, \ell_2, \beta, n'_1, \ell'_1, \alpha) + 2\{Z - Z(n'_2, \beta) \\
& \cdot I(0, 0, n_2, \ell_2, \beta, n'_1, \ell'_1, \alpha) \cdot I(-1, 0, n_1, \ell_1, \alpha, n'_2, \ell'_2, \beta)\} \cdot (4.50)
\end{aligned}$$

(4.23) bindirme integrali için H_1 elemanları ifadele-
rinden gidilerek dört terim yazılmış ve neticede

$$\begin{aligned}
SN(K, K', \alpha, \beta) &= 2 \langle \ell_1 \ell_2 L | \ell'_1 \ell'_2 L \rangle I(0, 0, n_1, \ell_1, \alpha, n'_1, \ell'_1, \alpha) \\
&\cdot I(0, 0, n_2, \ell_2, \beta, n'_2, \ell'_2, \beta) \\
&+ 2(-1)^{\ell_1 + \ell_2 - L + S} \cdot \langle \ell_1 \ell_2 L | \ell'_2 \ell'_1 L \rangle \\
&\cdot I(0, 0, n_1, \ell_1, \alpha, n'_2, \ell'_2, \beta) \cdot \\
&\cdot I(0, 0, n_2, \ell_2, \beta, n'_1, \ell'_1, \beta) \quad (4.51)
\end{aligned}$$

elde edilmiştir.

4.4 Elemanter Integraller

Sturmian fonksiyonlar analitik yöntemlerin kullanılması-
na imkân verir nitelikte olduklarından nümerik integralleme işlemleri
ile karşılaşılmamıştır. Önce (4.49) ile verilen I tipi integral ele
alınmıştır. Bu integral, birleme çarpanlarının $C(n, \ell, a)$ ve $C'(n', \ell', b)$
olarak alındığı (4.44) ifadesi kullanılarak ve

$$B(k, n, \ell) = \Gamma(\ell + 1 + k) \Gamma(k - \ell) \Gamma(n + 1 - k)$$

kısaltması ile

$$I(p, t, n, \ell, a, n', \ell', b) = \int_0^\infty r^p e^{-tr} \cdot C(n, \ell, a)$$

→ → →

$$\sum_{k=\ell+1}^n \frac{(-2ar)^k}{B(k,n,\ell)} e^{-ar} \cdot C'(n',\ell',b).$$

$$\sum_{k'=\ell'+1}^{n'} \frac{(-2br)^{k'}}{B'(k',n',\ell')} \cdot e^{-br} \cdot dr$$

$$= \frac{C \cdot C'}{(a+b+t)^{p+1}} \cdot \sum_{k=\ell+1}^n \frac{(-2a)^k}{B(k)} \cdot \sum_{k'=\ell'+1}^{n'} \frac{(-2b)^{k'}}{B'(k')} \cdot (4.52)$$

bulunmuştur. İkinci eşitlikten sonra B ve C, B' ve C' ifadeleri kısaltılmıştır.

Slater integrali R, (4.39), için (a,b,c,d) açık olarak gösterilmek suretiyle

$$R(\ell, n_1, \ell_1, a, n_2, \ell_2, b, n'_1, \ell'_1, a, n'_2, \ell'_2, b)$$

$$= \int_0^\infty dr_1 \cdot r_1^{-(\ell+1)} \cdot C_1(n_1, \ell_1, a) \cdot e^{-ar_1}$$

$$\cdot \sum_{k_1=\ell_1+1}^{n_1} \frac{(-2ar_1)^{k_1} e^{-ar_1}}{B_1(k_1, n_1, \ell_1)} \cdot C'_1(n'_1, \ell'_1, a) \sum_{k'_1=\ell'_1+1}^{n'_1} \frac{(-2ar_1)^{k'_1}}{B'_1(k'_1, n'_1, \ell'_1)}$$

$$\cdot \int_0^1 dr_2 r_2^\ell C_2(n_2, \ell_2, b) e^{-br_2} \cdot \sum_{k_2=\ell_2+1}^{n_2} \frac{(-2br_2)^{k_2}}{B_2(k_2, n_2, \ell_2)}$$

$$\cdot C'_2(n'_2, \ell'_2, b) \cdot e^{-br_2} \cdot \sum_{k'_2=\ell'_2+1}^{n'_2} \frac{(-2br_2)^{k'_2}}{B'_2(k'_2, n'_2, \ell'_2)}$$

$$= C_1 C'_1 \cdot \sum_{k_1=\ell_1+1}^{n_1} \frac{(-2a)^{k_1}}{B_1} \cdot \sum_{k'_1=\ell'_1+1}^{n'_1} \frac{(-2a)^{k'_1}}{B'_1}$$

$$\cdot \int_0^\infty r_1^{-\ell+k_1+k'_1-1} \cdot e^{-2ar_1} \cdot dr_1 \cdot C_2 \cdot C'_2 \cdot \sum_{k_2=\ell_2+1}^{n_2} \frac{(-2b)^{k_2}}{B_2}$$



$$\sum_{k_2'=l_2'+1}^{n_2'} \frac{(-2b)^{k_2'}}{B_2'} \cdot \int_0^{r_1} dr_2 \cdot r_2^{\ell+k_2+k_2'} \cdot e^{-2br_2} \quad (4.53)$$

elde edilmiştir. (4.39) da λ ile gösterilmiş olan değişken burada ℓ ile gösterilmektedir. İfadenin en sonunda görülen integral, r_2 nin üssü tam sayı olduğundan, 'Tamam Olmayan Gama Fonksiyonu' yardımıyla (61) seriye açılır:

$$\begin{aligned} \gamma(n+1, x) &= \int_0^x e^{-t} t^n dt \\ &= \Gamma(n+1) \{1 - e^{-x} \sum_{m=0}^n \frac{x^m}{\Gamma(m+1)}\} \end{aligned}$$

Bu ifadede ortaya çıkan integraller daha önce tartışılan I integral-leridir ve neticede $\int_0^n$ integral çarpanı

$$\begin{aligned} &\Gamma(\ell + k_2 + k_2' - 1) \cdot \{I(-\ell - 1, 0, n_2, \ell_2, a, n_2', \ell_2', a) \\ &- \sum_{m=0}^{\ell+k_2+k_2'} \frac{I(m - \ell - 1, 2a, n_2, \ell_2, b, n_2', \ell_2', b)}{(2a)^{-m} (m+1)}\} \quad (4.53') \end{aligned}$$

olarak elde edilmiştir. (4.53') için bu ifade ve (4.53) teki $\int_0^\infty$ in-egralinin (4.49) ile verilen fonksiyonu (4.53) e aktarılarak R in-tegrali programlanabilir hale getirilmiştir.

I ve R nin dışında analitik ifadelerine ihtiyaç duyulan fonksiyonlar, I, R, f, RH gibi, ölçekleme parametreleri α ve β yı içeren bütün fonksiyonların 'türevleri' dir. Bunlar programda genel-likle 'T' harfi ile başlayan adlar almışlardır. Bu fonksiyonlar ge-nellikle α ve β parametrelerine bağlı olarak verilmiş, tek paramet-reye indirgenerek türevleri alınmıştır. Hernekadar türevleme cebiri elemanter olsa da varılan ifadeler çok sayıda ve uzun olduklarından tez metninde gösterilmeleri pratik görülmemiştir. Bu ifadelerin açık şekilleri kompüter 'derleme çıkış' larında, ve haklarında ana bilgi beşinci bölümdeki program açıklamalarında gösterilmiştir.



4.5 Matris Denklemi

Üçüncü Bölümde anlatılmış olan Türev Yöntemi ışığında toplam Hamiltonien (4.50) ve (4.47) nin toplamı olarak

$$\tilde{H} \equiv \tilde{H}_T = \tilde{R}_H + \tilde{H}_{I2} \quad (4.54)$$

alınmıştır. Enerji işlemcisi ölçeklenmemiş fakat toplam dalga fonksiyonu ölçeklenmiş olmak üzere

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left\{ \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right\} \quad (4.55)$$

fonksiyoneli değişim ilkesine tabi tutulmuştur. (4.55) programlama sırasında THT ile gösterilmiştir. O halde

$$THT \equiv \frac{1}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle \Psi | \Psi \rangle \right\} \quad (4.56)$$

ifadesinin kararlı hale getirilmesi gerekmektedir. Genel bir pratik olarak THT deki $\langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ bir Lagrange çarpanı gibi düşünülmüş ve E giriş enerjisi olarak alınmıştır. E deney enerjisi veya ilgili spektrumun, meselâ Şek.3.3. maksimumlarına karşılık gelen enerji olarak alınabilir. Bizim hesaplamalarımızda E diğer teorik çalışmalar-dan(47) alınmıştır. Konum etkileşme fonksiyonu (1.15) ile ve ilgili matrisler aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$\langle \Phi_p | R_H | \Phi_q \rangle = (RH)_{pq}$$

$$\langle \Phi_p | H_{I2} | \Phi_q \rangle = (H_{I2})_{pq}$$

$$\langle \Phi_p | \Phi_q \rangle = (SN)_{pq}$$

$$TH = \sum_{pq} a_p^* \cdot a_q \frac{\partial}{\partial \alpha} (RH)_{pq}$$

$$TH_{I2} = \sum_{p,q} a_p^* \cdot a_q \frac{\partial}{\partial \alpha} (H_{I2})_{pq}$$



$$SN = \sum_{p,q} a_p^* \cdot a_q (SN)_{pq}$$

$$TN = \frac{\partial}{\partial \alpha} (SIL) \quad (4.57)$$

Bu takdirde (4.56), FORTRAN programındaki harflendirmeye uygun olarak (4.56) için

$$THT = \{TH - TH12 - E.(TN)\}/(SN) \quad (4.58)$$

şekli kullanılmıştır.

Uygulama sırasında THT ile birlikte toplam enerji

$$OZEN \equiv E(\alpha_i) = \langle H(\alpha_i) \rangle = \sum_{p,q} a_p^* a_q H_{pq}(\alpha_i) / (SN)_{pq}(\alpha_i) \quad (4.59)$$

ve vektör

$$a_{ip}(\alpha_i), \quad p = 1, 2, \dots, NDIM \quad (4.60)$$

de elde edilmişlerdir. α , (ALFA), değişkenine karşılık THT nin grafiği 'el' ile çizilmiş ve extremumlara karşılık gelen enerji ve fonksiyonlar alınmıştır. (4.60) ifadesindeki NDIM bazın büyüklüğüdür.

4.6 Matris Denkleminin Çözümü: Kuvvet Yöntemi

(4.56) veya (4.58) matris denkleminin çözümü birçok yöntemlerle yapılabilir. Bizim kullandığımız 'kuvvet yöntemi', (power yöntemi), sade bir yöntemdir ve mutlak değerce en büyük, (ters matris açısından bakılınca en küçük), özdeğer arandığı zaman bilhassa kullanışlıdır. Bu 'iteratif' bir yöntemdir ve büyük, seyrek(sparse) matrisler için etkilidir(62).

Gerçek, kare ve simetrik bir matris A, özdeğer ve özvektörleri sırasıyla



$$|\lambda_1| < |\lambda_2| < \dots < |\lambda_n| \quad (4.61)$$

$$\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_n, \quad \underline{x}_i = (x_{i1} \ x_{i2} \dots x_{in})^T \quad (4.62)$$

bağıntılarıyla belirlenmiş olsun. Herhangibir $\underline{y}_0$ vektörü, bu özvektör-
ler cinsinden, α ların hepsi sıfır olmamak ve $\alpha_1 \neq 0$ kaydıyla

$$\underline{y}_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \underline{x}_i \quad (4.63)$$

şeklinde yazılabilir. A işlemcisi ile peşpeşe aşağıdaki işlemler ya-
pılsın:

$$\underline{y}_1 = A\underline{y}_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \underline{x}_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i \underline{x}_i \quad (4.64)$$

$$\underline{y}_2 = A\underline{y}_1 = \sum_{i=1}^n \alpha_i A^2 \underline{x}_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^2 \underline{x}_i$$

.....

$$\underline{y}_k = A\underline{y}_{k-1} = A^k \underline{y}_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k \underline{x}_i \quad (4.65)$$

Son eşitlik ve (4.63) eşitliğinden

$$\underline{y}_{kp} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k \underline{x}_{ip}, \quad p = 1, 2, \dots, n \quad (4.66)$$

$$\underline{y}_{k+1,p} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^{k+1} \underline{x}_{ip}$$

yazılabilir. $\underline{y}_{kp} \neq 0$ olan her p için aşağıdaki oran bulunur:

$$\frac{\underline{y}_{k+1,p}}{\underline{y}_{kp}} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^{k+1} \cdot \underline{x}_{ip}}{\sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k \cdot \underline{x}_{ip}} = \lambda_1 \left(\frac{\alpha_1 \lambda_1^{k+1} \underline{x}_{1p} + \sum_{i=2}^n \alpha_i (\lambda_i / \lambda_1)^{k+1} \cdot \underline{x}_{ip}}{\alpha_1 \lambda_1^k \underline{x}_{1p} + \sum_{i=2}^n \alpha_i (\lambda_i / \lambda_1)^k \cdot \underline{x}_{ip}} \right).$$



(4.67)

Bu ifadede $k \rightarrow \infty$ limitine gidilirse

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{y_{k+1,p}}{y_{kp}} = \lambda_1, \quad y_{k+1} \approx \lambda_1 y_k \quad (4.68)$$

bulunur, çünkü parantez içindeki toplamın her terimi sıfıra gider. (4.67) bağıntısı komputerle hesaplanabilen bir bağıntıdır. En son vektör $\underline{y}_k$ da istenen özvektördür. Pratikte bu tekniğin uygulamasında λ_1 in "1" den farklı olmamasına dikkat edilir. Bunun için ayrıca

$$\bar{y}_k = \beta \underline{y}_k, \quad 1/\beta_k = \max\{|y_{kp}|\} \quad p = 1, 2, \dots, n$$

ve

$$\underline{y}_{k+1} = \bar{\underline{y}}_k$$

değerleri de hesaplanır. Böylece $\bar{\underline{y}}_{k+1}$ ve $\bar{\underline{y}}_k$ vektörlerinin bileşenlerinin boyları daima '1' e eşit veya '1' den küçük yapılır, ve en az bir tanesinin boyu '1' e eşit olur. (Beşinci Bölümde verilen sonuçlarda vektör olarak yazılan sayılar incelendiğinde bu durum görülecektir, fakat orada ilk bileşen '1' olarak ayarlanmıştır.).

Son değişiklikler de gözönüne alınarak en büyük özdeğer ve ona karşılık gelen özvektör

$$\lambda_1 = \frac{y_{k+1,p}}{\bar{y}_{kp}} \quad (4.69)$$

$$\underline{x}_1 = \underline{y}_{k+1} \quad (4.70)$$

ifadeleriyle verilmiş olacaktırlar. Bu yöntemin programlanması POWER altprogramı ile gerçekleştirilmiştir(Kesim 6.7).



BEŞİNCİ BÖLÜM

KOMPÜTER PROGRAMI
(AÇIKLAMALAR)

Beşinci Bölüm Giriş:

Dördüncü Bölümde öngörülen kuantum mekanik hesaplamaların kompüterle yapılabilmesi için FORTRAN IV lisanında bir elektronik hesaplama programı hazırlanmış ve Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Elektronik Hesap Merkezi'nde kurulmuş bulunan IBM 370 / 145 sisteminde çalıştırılmıştır. Makineye giriş 'kart okuyucu', çıkış ise 'satır basıcı' ile sağlanmıştır. Toplam kart sayısı 900 civarındadır. Program bir 'ana -MAIN- program', 6 SUBROUTINE altprogram ve 26 FUNCTION altprogramdan meydana gelmiştir. Bütün hesaplar DOUBLE PRECISION (REAL-8) aritmetik ile yürütülmüştür. Gerekli hafıza, matrislerin tabii-iki boyutlu- halleri için 280 K, bir boyutlu hale indirilişlerinden sonra 200 K civarındadır. Programın 'derlenme' (compilation) zamanı 2 dakikadan fazladır. Sekizlik bir fonksiyon bazı için helyumun tek bir ALFA parametresi kullanılarak enerji hesaplanması 3-7 dk. arasında değişebilmektedir.



Kullanılmış olan atomik programın bazı önemli altprogramları başkaları tarafından hazırlandığı şekilleriyle veya bazı değişikliklerden sonra uygulanmışlardır. Bu durum sırası gelince ilgili kesimlerde belirtilecektir. Kompüter programı toplam çalışmanın önemli bir kısmı olarak görüldüğünden tam olarak tezin sonuna eklenmiştir. Bu yüzden şimdiki bölümde söylenenler orada daha geniş bir tarzda izlenebilirler. Bundan sonraki kesimlerde FORTRAN programının 'bileşenleri' ayrı ayrı ele alınacaktır.

5.1 MAIN-ana- PROGRAM

Ana programda giriş parametreleri okutulur. Bunların neler olduğu Şek. 5.1 'akış diyagramı' nda ve anlamları Ek I 'derleme çıkışı'nda belirtilmişlerdir. Gama fonksiyonu burada hesaplanır ve bir boyutlu GAMA tablosuna yüklenir. STATE ve SEC rutinleri çağrılır. İlkinden sağlanan kuantum sayıları tabloları $IL1(I)$, $IL1(I)$, $IL2(I)$, $IL2(I)$ ve I nin maksimum değeri $INDIM$ ile birlikte okutulan değerler yazdırılır ve durdurulur.

MAIN deki birçok değişken, COMMON larla altprogramlara aktarılır. Bu değişkenler ve adları şöyledir: (adlar " " içinde)

IVECT, "VECT" ,

E, "EI" ,

$IL1(I)$, $IL1(I)$, $IL2(I)$, $IL2(I)$, $I = 1, \dots, 80$, "ARRAY",

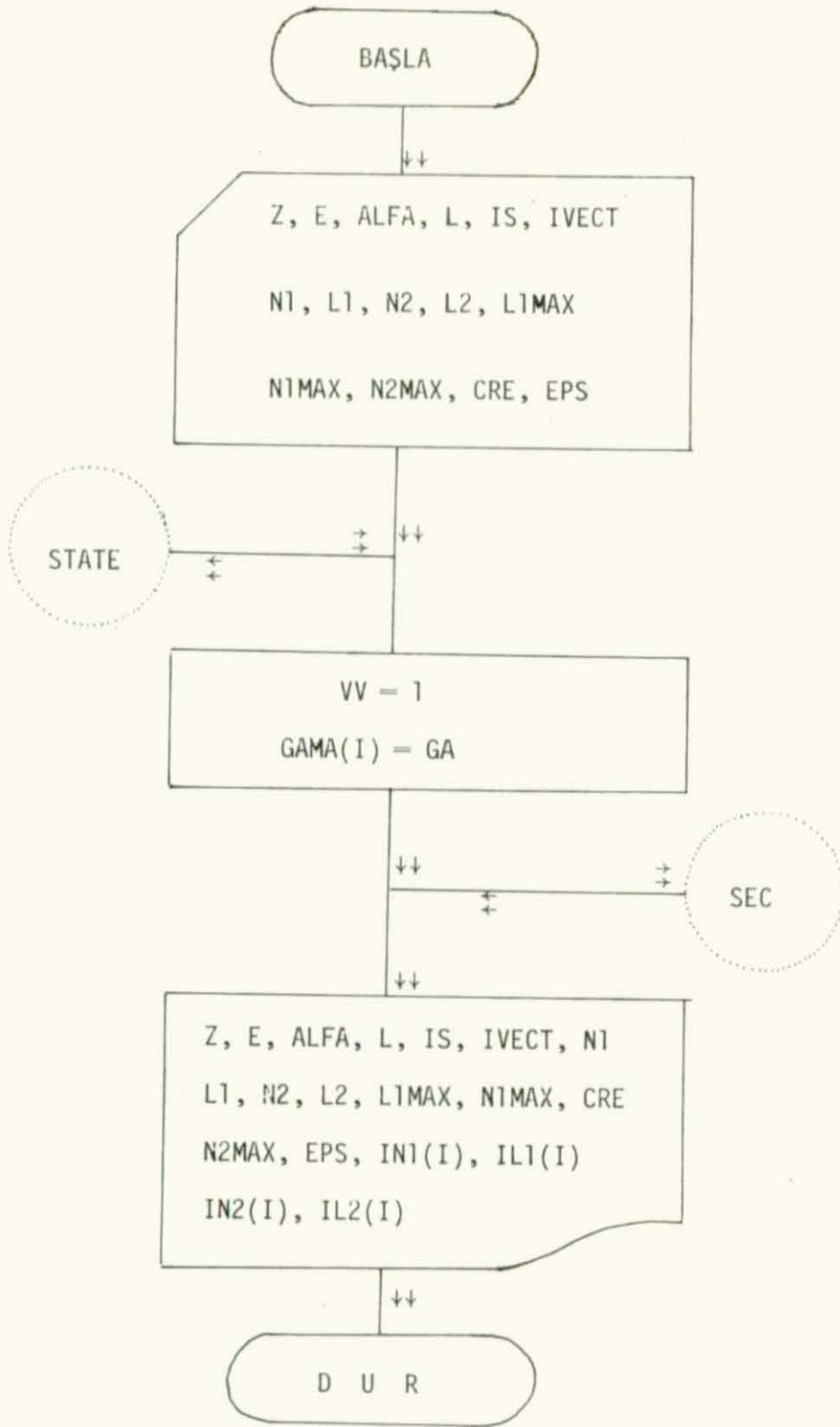
$GA(I)$, $I = 1, \dots, 40$, "GAMA" .

İterasyonla çözülecek özdeğer problemlerindeki genel pratiğe uyularak ilk vektör VV nin bütün bileşenleri 1.0 olmak üzere DATA ifadesi ile programa dahil edilmiştir. Programlamanın ilk zamanlarında matrisler (80,80) olarak açılmış, fakat daha sonra hızlılık ve hafıza tasarrufu için , bir boyutlu (3240) elemanlı tablolara çevrilmişlerdir. Böylece "CLASS C" kodlamasından kurtarılmıştır. Bu çevirme, Hamiltonien ve bindirme matrislerinin gerçek ve simetrik olmalarından ve

$$INDTRA(I,J) = J(J - 1)/2 + I \quad (5.1)$$

fonksiyonu yardımıyla yapılmıştır.





Şek. 5.1 : MAIN PROGRAM 'ın akış diyagramı.



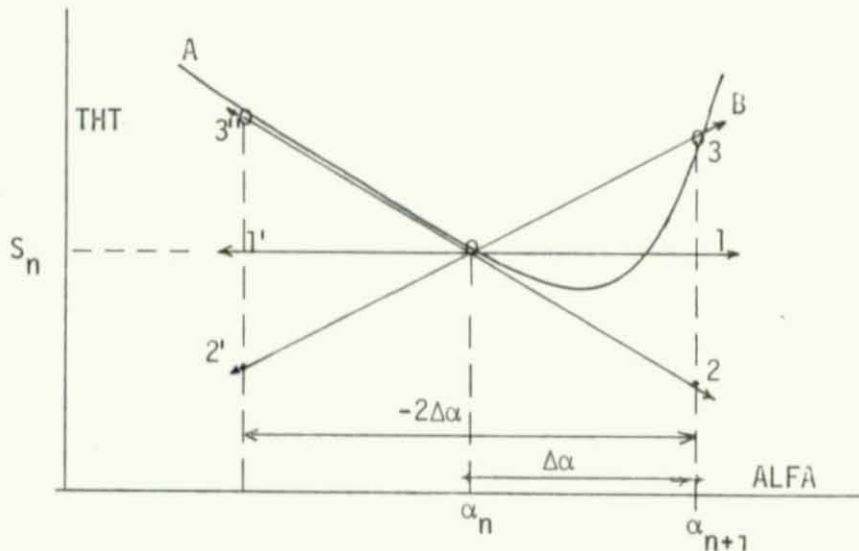
5.2 FUNCTION SIGMA

Bu rutin çağrıldığı zaman MAIN deki bütün gerekli bilgiler argüman listesi ile aktarılmış olur. Başlıkta argüman listesi verilmemiştir ve bundan sonraki birçok çağrılan programda da verilmeyecektir. Diğer bazılarında ise, önemlerine ve ilk karşılaşımla durumlarına dayanarak verilmişlerdir. Verilmeyen argümanlar hakkında çağırılan programdan ve Ek I den malumat sağlanabilecektir.

Bu rutinde INDTRA fonksiyonu tanımlanır. Hamiltonien ve bindirme matrisleri burada doldurulur. POWER çağrılarak özvektör bulunur. Enerji, bindirme (overlap) integrali ve THT $-(4.56)-$ hesaplanır ve yazdırılırlar. Bu itibarla programın en önemli bir parçasıdır. SIGMA matrisleri doldurduktan sonra DMIIIVH yi çağırır. Eğer enerji matrisinin determinantı 'sıfır' ise bunu bildiren bir mesaj vererek bütün programı durdurur.

5.3 SUBROUTINE SEC

Bu rutin THT nin minimumlarından birini IVECT ve CRE yi kullanarak bulmak içindir. Üksüz tarafından yazılmıştır(43). Buna göre minimum araştırmanın geometrik mantığı Şek.5.2 de gösterilmiştir.



Şek.5.2 SEC rutini ile minimum aranması.



ALFA ilk değerinden başlayarak CRE adımlarıyla artarken α_n gibi bir noktaya geldiği düşünölsün. Buna karşılık THT S_n olsun. ALFA $\rightarrow \alpha_n + \Delta\alpha = \alpha_{n+1}$ e artırılınca S_{n+1} için değışik ihtimaller doğar:

$$S_{n+1} = S_n, \quad S_{n+1} < S_n, \quad S_{n+1} > S_n.$$

Eğrinin gidişı üç yönde olabilir: Sırasıyla, 1, 2, 3. İkinci etapta birden $-2\Delta\alpha$ değıştirme yapılır, yani α_n ye yeniden uğranmaz. Yeni imkânlar 1', 2' ve 3' dür. Eğer 3' + 3 durumunda bulunuluyorsa S_n kabaca minimumlanmıştır. Kabaca denmesinin sebebi SEC te, eksenin kolayca taranması için CRE büyük alınır. Eğer 3' - 2 durumu varsa pozitif alfalar yönünde, 3 + 2' durumu varsa negatif alfalar yönünde aramaya devam edilir. Şu halde problem, 3, 3' ve S_n yi ve ayrıca onlara karşılık gelen α_1, α_2 , ve α_n leri bulmaktır. Bulunacak böyle altı değır aracılığıyla UCSEC çağırılmaktadır. SEC için bir akış diyagramı Şek. 5.3 te görölmektedir.

5.4 SUBROUTINE UCSEC(Y1,Y2,Y3,X1,X2,X3,...)

SEC de yakalanan minimumu istenen duyarlığa çıkarmak içindir. Argüman listesinde gösterilmiş olan altı parametreyi SEC den, gösterilmeyen diğerlerini MAİL den sağlar. Duyarlık mertebesi PRE burada konur. UCSEC in geometrik çalışma ilkesi Şek.5.4 te çizilmeye çalışılmıştır.

$(Y1/Y2 - 1)$ ve $(Y1/Y3 - 1)$ büyüklükleri gerçık minimuma yaklaşıldıkça küçölürler, PRE ye yaklaşırlar. Bu, apsis çemberi $(X1 + X2)/2$ veya $(X1 + X3)/2$ yeni değırleriyle daraltılarak sağlanır. Bunlardan hangisinin alınacağı $(Y2 - Y3)$ e göre kararlaştırılır.

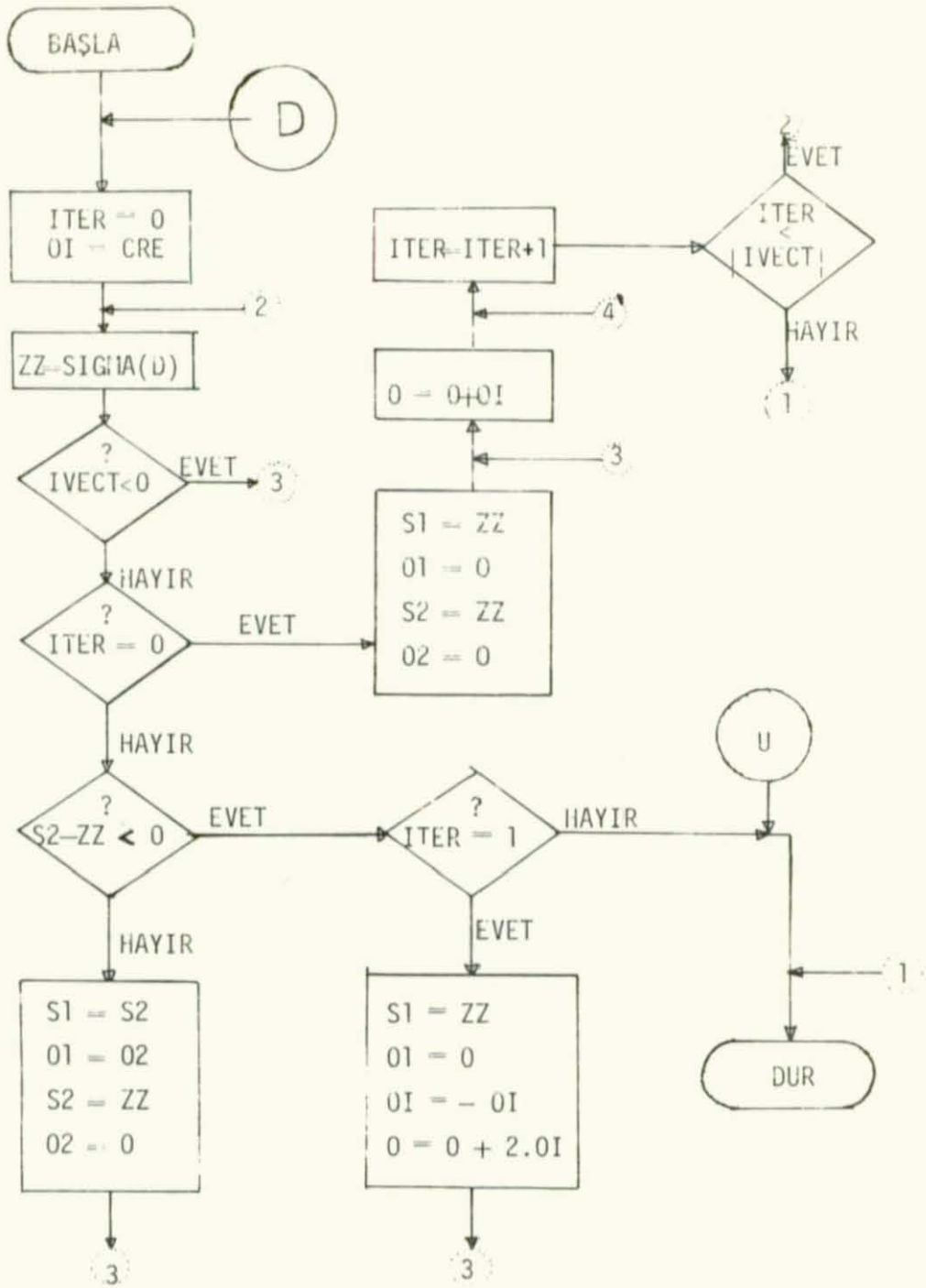
5.5 SUBROUTINE DMIIIVH (A,N,D)

IBM kütüphane programlarından matris inversi alan birisidir. Argümanlarının anlamları şöyledir:

A : Inversi alınacak kare matris. Çağırılma sırasında HAMAL ile değışir. HAMAL, SIGMA da Hamiltonien matrisine bağılı olarak tanımlanmakta ve DMIIIVH çağırılmaktadır.

N, D : Sırasıyla, matrisin boyu ve determinantı.



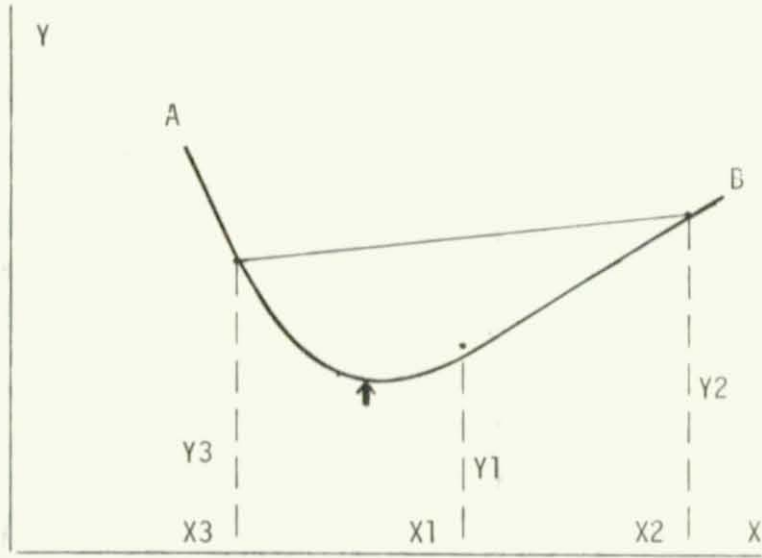


Şek.5.3 : SEC altprogramı için akış diyagramı.

D : SEC 'adı' ile HAIİ programdan aktarılan datayı,

U : UCSEC altprogramının çağrıldığını göstermektedir.





Şek.5.4 : UCSEC ile duyarlı minimum bulunması

5.6 SUBROUTINE POWER(A,S,EV,V,OZ,NDIM,PREC)

Bu rutin ODTÜ. Teorik Kimya Bölümü'nde kullanıldığı şekliyle alınmış, tez metninde anlatılan Kuvvet yöntemi ile matris özdeğer problemlerinde en büyük (invers matris açısından bakılınca en küçük) özdeğeri bulmak için kullanılmıştır.(43,47). Listesindeki argümanlar şu şekilde belirlenmektedir:

Giriş parametreleri(SIGMA aracılığı ile sağlanırlar):

A : İşlemcinin matrisi. Gerçek ve simetrik ve tek boyutlu hale getirilmiş bir tablodur. WORK böyle bir tanesidir ve INDTRA yardımıyla HAMAL dan türetilmektedir.

S : Ortonormal olmayan bir baz (bizim durumumuzda Sturmian bazı) için bindirme(overlap) matrisi. A matrisi için verilen sınırlamalar geçerlidir.

PREC : Duyarlık.

NDIM : Bazın büyüklüğünü gösteren tamsayı

Handwritten signature and stamp.

V : Değişken boyutlanmış giriş vektörü. MAIN de VV ile verilir. Aşağıdaki iki parametre de 'çıkış' parametreleridir:

EV : Hesaplanan yeni özvektör.

OZ : Hesaplanan yeni özdeğer.

POWER da yeni ve eski özdeğerlerin oranı PREC ile karşılaştırılır. İstenen sonuç elde edilinceye kadar iterasyona devam edilir. Kaçınıcı iterasyonda olunduğunu gösteren sayı ITER tanımlanır. Böylece

$$\frac{OZ_{n+1}}{OZ_n} - 1 \begin{cases} \leq PREC & \text{ise } \rightarrow 1000 \\ > PREC & \text{ise } \rightarrow 11 \end{cases}$$

işlemi yapılır. Burada 'ok' la gösterilen sayılar kumandanın gideceği ifade numaralarını belirtmektedirler. Bu iki ifade,

1000 : "POWER YAKINSADI, ITER = ... " yazdır,

11 : "yeni özdeğerle iterasyona gir"

emirlerini içermektedirler.

5.7 FUNCTION SN(L,IS,ALFA,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2)

5.7-5.23 arasındaki altprogramlar Hamiltonien ve türev matris elemanları için gereken işlemleri yaparlar. Sil bindirme (overlap) matris elemanları, yani (4.51) değerlerini, verir. Giriş parametreleri şöyledir:

L, IS, ALFA : MAIN de aynı adlarla tanımlanan parametreler olup orada tanımlanmışlardır.

i1, L1, N2, L2 : MAIN de ARRAY diye adlandırılan tablonun bir elemanı.

NU1, LU1, NU2, LU2 : ARRAY in başka bir elemanı. Bunlar hakkında 5.33 STATE rutininde ve Kesim 4.3 te açıklama geniştir.

Bu alt rutinde DELTA(I,J) rutini çağrılarak DELTA1 ve DELTA2 fonksiyonları tanımlanır. Zamandan tasarruf için Sil bu iki delta fonksiyonlarınının çarpan oldukları iki kısma ayrılmış, sıfır olan kısım özel komutlarla hesap dışı bırakılmıştır.



5.3 FUNCTION TN

SN fonksiyonunun türevini, aynı parametrelere bağlı olarak hesaplar.

5.9-10 FUNCTION RH, FUNCTION TH

Birincisi Hamiltonien' in tek elektron kısmı (4.50) yi, RI integrallerine bağlı olarak kurar. Bu maksatla A1,..., A3 fonksiyonlarını tanımlar. RH nin türevi ise TH fonksiyon rutini ile RTI alt-rutinleri kullanılarak hesaplanır.

5.11-12 FUNCTION H12, FUNCTION TH12

Etkileşme Hamiltonien'i matris elemanları (4.47) leri hesaplar. LAHDA yi çağırarak toplama indisi λ için alt ve üst sınırlar (LAHMIN, LAHMAX) bulur. FLAII ve RK fonksiyonlarını kullanır. TH12, ayrıca TK fonksiyonlarını da kullanarak, H12 nin türevini bulur.

5.13-14 FUNCTION RK(K,N1,L1,...), FUNCTION TK(...)

(4.53) ile verilen Slater Integralini, GA, FUH ve RI40 fonksiyonlarını çağırarak hesaplar. Argüman K, (4.53) teki ℓ yörünge açısal momentum kuantum sayısı yerine kullanılmakta, geri kalan parametreler de SII de yazılanlar alınmaktadır. TK ise RK nin türevini, ayrıca RTI4, RTI40 RI40 fonksiyonlarını kullanarak hesaplar.

5.15 FUNCTION RI1(IP,IG,A,N,L,NU,LU)

Metinde (4.52) formülüyle verilen integrallemeleri yapar. Yalnız, buradaki, b'nin a terimlerinde yokedilmesiyle elde edilen özel haldir. Çağrılan rutin sadece FUH dur.

5.16-18 FUNCTION RI2, FUNCTION RI3, FUNCTION RI4

Bu üçü RI1 le benzerdirler, fakat a ve b nin birbirine bağıllık ve yokedilmelerindeki farklılıklardan ortaya çıkmışlardır.

5.19 FUNCTION RI40(IP,G,A,H,L,NU,LU)

(4.53') de görülen I fonksiyonları için hazırlanmıştır. Burada G reel bir sayıdır.

5.20-24 FUNCTION RTI1, FUNCTION RTI2, FUNCTION RTI3, FUNCTION RTI4, FUNCTION RTI40

5.15-5.19 paragraflarında hesaplanmakta olan fonksiyonların perdeleme sabiti görevindeki ALFA parametresine göre türevlerini hesaplamaya yararlar. Parametre listeleri de onlarla aynıdır.

5.25 FUNCTION CLEBG(I,J,L)

(4.42) bağıntısında görülen C Clebsh-Gordan katsayılarını hesaplar. Genel ifadeleri iyi bilinen(59) bu katsayılarda spin-spin eşlenmesinin kapalı kabuk ve S nin tamsayı olması halleri için üst parametreler tamsayılardır. Bu takdirde şu bağıntıya varılır:

$$C_{0 \ 0 \ 0}^{I \ J \ L} = \{(2L+1)(I+J-L)!(L+I-J)!(L+J-I)! \\ \cdot (I!)^2 (J!)^2 (L!)^2 / (I+J+L+1)!\}^{1/2} \\ \cdot \sum_K (-1)^K K! \{(I+J-L-K)!(I-K)!(J-K)! \\ \cdot (L-J+K)!(L-I+K)!\}^{-1} \quad (5.2)$$

Buradaki K üzerinden toplamın alt ve üst sınırlarını belirlemek için dikkat gerekmiştir. 'Overflow' ve 'Underflow' durumlarının meydana çıkmaması için çarpma ve bölme işlemleri guruplanmıştır. CLEBG rutini için gerekli faktöriyel değerleri HAIH den COMMON ile aktarılmışlardır. Gama fonksiyonunun tanımsız olduğu I,J ve L değerleri hesaplamalar atlatılmıştır. Clebsh-Gordan ve bir sonraki paragrafta verilecek olan Racah katsayıları için hazırlanan rutinler müstakil



olarak çalıştırılıp kontrol edilmişlerdir.

5.26 FUNCTION RACAH(L1,L2,L3,L4,L5,L6)

(4.42) de görülen W katsayılarını hesaplamak için hazırlanmıştır. Bütün argümanlar tamsayıdır, çünkü spin açısal momentumlarının eşlenmesi problemimiz olmamıştır. W katsayılarının kullanılan ifadesi Racah tarafından(63) şu şekilde verilmiştir:

$$W(L1,L2,L3,L4,L5,L6)$$

$$\begin{aligned}
 &= \{(L1 + L2 - L5)!(L1 - L2 + L5)!(L2 - L1 + L5)! \\
 &\quad .(L3 - L4 + L5)!(L3 + L4 - L5)!(L4 - L3 + L5)! \\
 &\quad .(L1 + L3 - L6)!(L1 - L3 + L6)!(L3 - L1 + L6)! \\
 &\quad .(L2 + L4 - L6)!(L2 - L4 + L6)!(L4 - L2 + L6)! \\
 &\quad /((L1 + L2 + L5 + 1)!(L3 + L4 + L5 + 1)! \\
 &\quad .(L1 + L3 + L6 + 1)!(L2 + L4 + L6 + 1)!)^{1/2} \\
 &\quad . \sum_K (-1)^K (L1 + L2 + L3 + L4 + 1 - K)! / (K! \\
 &\quad .(L1 + L2 - L5 - K)!(L3 + L4 - L5 - K)! \\
 &\quad .(L1 + L3 - L6 - K)!(L2 + L4 - L6 - K)! \\
 &\quad .(L5 + L6 - L1 - L4 + K)!(L5 + L6 - L2 - L3 + K)!)
 \end{aligned}$$

(5.3)

Bu uzun ifade sebebi ile çarpan ve bölenlerin gruplandırılması, C katsayıları hesabında yapılandan daha fazla önem kazanmaktadır. Böy-

lece $R_1, \dots, R_4$ değişkenleri tanımlanmıştır. Toplamın alt ve üst sınırlarını tayin ve Gama fonksiyonunun tanımsız olduğu değerleri süzme amacıyla $K_1, \dots, K_{12}$ ve $I_1, \dots, I_7$ fonksiyonları tanımlanmıştır. Gama fonksiyonunun reel olarak adlandırılmış olması 'tam sayı ile bölme' tehlikesini ortadan kaldırmıştır.

5.27 FUNCTION FLAH(LA, L, L1, L2, LU1, LU2)

(4.41) ve (4.42) ile belirlenen f fonksiyonlarını hesaplayarak CLEBG ve RACAH rutinlerine verir. İlk parametre λ , ikincisi toplam yörünge açısal momentum L için kullanılmaktadır. FLAH fonksiyonu aşağıdaki bağıntılara uyarak çalışmaktadır:

$$|L_1 - LU_1| \leq LA \leq L_1 + LU_1,$$

$$|L_2 - LU_2| \leq LA \leq L_2 + LU_2.$$

5.28-30 FUNCTION G1(IQ, H, L), FUNCTION G2(IQ, JQ, IP, HU, LU), FUNCTION FUN(H, L, NU, LU)

Bu üç rutin (4.53) ifadelerindeki C ve C' sabitlerini hesaplarlar.

5.31 FUNCTION LAMDA(L1, LU1, L2, LU2, LAMH1H, LAMH1AX)

H12 ve TH12 fonksiyonlarında gerekli olan λ , λ , değerlerinin en küçük ve en büyük değerlerini (4.14) bağıntılarına uyarak tayin eder.

5.32 FUNCTION DELTA(I, J)

Kronecker deltasının değerlerini verir. Bu ve bunun gibi basit bazı fonksiyonlar için ayrıca alt programlar yapılmasının sebebi bunların pek çok yerde işe karışmalarıdır.

5.33 SUBROUTINE STATE(H1, L1, H2, L2, L1MAX, H1MAX, H2MAX, H)

Konum etkileşme fonksiyonu (4.20) ye katılacak konumları atomun vektör modeline göre, Kesim 4.2 de anlatılan kurallar çerçevesinde tayin eder. Giriş parametreleri şunlardır:



$N1, L1, N2$, ve $L2$: Hakim konumun birinci(iç) elektronunun ve ikinci(dış) elektronunun baş ve yörünge açısal momentum kuantum sayıları.

$N1MAX$: İç elektronu tasvir edecek radyal fonksiyonların sayısını, n_1 e üst sınır olarak, sınırlayan parametre, tamsayı.

$N2MAX$: Dış elektronu belirleyecek olan radyal fonksiyonların n_2 baş kuantum sayısı için üst sınır.

$L1MAX$: İç elektronun yörünge açısal momentum kuantum sayısı üst sınırı.

M : Çıkış parametresidir. Giriş şartlarına göre etkileşen konumların sayısını, yani MAI deki $NDIM$ i, verir.

Seçilen konumların kuantum sayıları bir boyutlu listelere (array) depo edilir:

$$NN1(I), LL1(I), NN2(I), LL2(I), I = 1, \dots, M.$$

Böylece herhangi bir K konumunu belirlemek için dört tane kuantum sayısı yerine bir tek I değerini belirtmek yetecektir. Başka bir konum K' ise o da J gibi tek bir indisle belirlenir ve bu iki konum arası matris elemanları sekiz boyutlu tablo(dizi) lar halinden çıkarılarak iki boyutlu tablolar (matrisler) haline dönüşeceklerdir. Örnek:

$$\begin{aligned} & H(N1, L1, N2, L2, N1', L1', N2', L2') \\ & = H(N1(I), L1(I), N2(I), L2(I), N1(J), L1(J), N2(J), L2(J)) \\ & = H(I, J). \end{aligned}$$

Bunun uygulaması ayrıca $SIGMA$ rutininin dokuzuncu 'ifade'sinde ve $STATE$ rutini çıkışında (EK I) görülebilmektedir.



ALTINCI BÖLÜM

SONUÇLAR

Altıncı Bölüme Giriş:

Bu araştırmada helyum atomunun Temel Seviyesi-Ground State- ve üç tane 'singlet S ', bir tane 'triplet S ', bir tane 'singlet P', bir tane de 'triplet P' olmak üzere toplam altı tane "rezonans" - kendiliğinden iyonlaşan - hali konu alınmıştır. Bu yedi kuantum hali, hesaplamalar sırasında, A dan I ya kadar büyük harflerle adlandırılmışlardır. Bunların 'konum' ve 'multipllet' durumları ve programlama sırasında belirlendikleri parametreler Tablo 6.1 de gösterilmiştir. Tablolar A-I , lineer olmayan parametre olarak kullanılan α (alfa) 'perdelene sabiti' veya 'düzeltilmiş çekirdek yükü' nün muhtelif değerlerine karşılık toplam Hamiltonien'in beklenen değerlerini ve THT büyüklüğünün $-(4.56)$ - mutlak değerlerini göstermek için hazırlanmışlardır. ENERJİ sütunu, A - II halleri için FORTRAN programının çıkış parametresi olan OZEN, I hali için diğer bir çıkış parametresi olan ENEKSI değerlerinden, THT ise HTUREV çıkış değerlerinden uygun 'yuvarlamalar' yapılarak



aktarılmışlardır. ALFA değerleri, (4.6) bağıntısının emrettiği 'üst sınır' dan aşağıya doğru CRE program giriş parametresi kadar azaltılarak elde edilmişlerdir. CRE değeri denemelerin ışığında yeniden ayarlanmıştır. Bu yüzden ALFA sütununun yazılışındaki manalı rakamlar belirli bir düzende kalmamışlardır. THT değerleri de grafiğe aktarılmaya elverişli olacağı tasarlanan şekilde verilmişlerdir. Rezonans hallerinin ENERJİ'si, helyum temel seviye enerjisi 'sıfır' kabul edildiği hale 'göre' ve atom birimlerinde verilmiştir. Araştırmanın gayesi 'duyarlı enerjiler' elde etmek olmadığına göre sayılar virgülden sonra üç basamaklı olarak yazılmışlardır. Bu durum dışında kalan H ve I halleri ayrıca belirtilmişlerdir.

Şekiller 6A-6I tabloların grafiklerle gösterilişleridir. Grafikler 'minimum' veya 'maksimum' lar açısından değerlendirilmişlerdir. Bu değerlendirmelerin sonuçları da Tablolar 6AA-6II larda incelenen özel halin enerjisi eV biriminde verilerek ve başka araştırmaların sonuçlarıyla karşılaştırılarak sunulmuştur.



sıra ve ad		Konum ve Multiplet	ALFA üst sınırı	program giriş parametreleri									
				E (ab)	L	S	N1	L1	N2	L2	L1MAX	N1MAX	N2MAX
1	H	$(1s^2) \ ^1S$	2,20	2,90372	0	0	1	0	1	0	1	2	2
2	G	$(2s^2) \ ^1S$	1,24	0,77797	0	0	2	0	2	0	1	3	3
3	C	$(2s3s) \ ^1S$	1,086	0,590	0	0	2	0	3	0	1	3	4
4	D	$(3s4s) \ ^1S$	0,841	0,3543	0	0	3	0	3	0	1	4	4
5	B	$(2s2p) \ ^1P$	1,176	0,6924	1	0	2	0	2	1	1	3	3
6	A	$(2s2p) \ ^3P$	1,220	0,7601	1	1	2	0	2	1	1	3	3
7	I	$(3d^2) \ ^3S$	1,097	0,6026	0	1	2	1	2	1	2	3	3

Tablo 6.1 Ozerinde hesaplamalar yapılan dört tane ^1S , birer tane ^1P , ^3P ve ^3S halleri için bilgiler. E, helyum temel seviyesine nispetle enerjiyi gösterir. Programa verilen diğer dokuz parametre hakkında IIAIN de ve STATE altprogramında açıklamalar yapılmıştır.

6.1 H : $(1s^2)^1S$: Helyumun Temel Seviyesi

Elektronik hesap programının denendiği ve en çok çalıştırıldığı hal olarak $(1s^2)^1S$ seçilmiştir. Böylece matris elemanları ve türevlerin formüllerinin doğruluğuna kanaat getirilmiştir. Baz büyüklüğü 5 alınarak virgülden sonra dokuz haneye kadar inilmiştir. Tablo H nin ikinci yarısındaki değerler UCSEC altprogramına girildikten sonra hesaplananlardır. THT nin minimumuna karşılık gelen enerji virgülden sonra üç rakamlı olarak Tablo GIII de verilmiştir. Bu değer, kullanılan terim sayısı gözönüne alındığında doğruluk itibariyle tatminkâr görülmüştür. Helyum temel seviyesi için vektör çıkarılmamıştır, bunun nedeni ilgili hesaplamalar safhasında SIGMA ya gerekli vektör yazdırma komutunun konulmuş olmaması ve daha sonra da sırf vektör için kompüter zamanı harcanmak istenmeyişidir.

He temel seviyesi üzerine beş terimle yapılan Hylleraas tipi hesaplamalarla buradaki konum etkileşme hesaplarını karşılaştırmaya gerek olmadığı, çünkü birincilerin yakınsama üstünlüğü bilinmektedir. Diğer bir husus da, Kesim 4.2 de belirtildiği gibi, etkileşen konumların özel ve titiz düşüncelerle değil, otomatik STATE programı ile alınmış olmalarıdır. Deneme yoluyla daha iyi sonuçlar verecek başka bir beşli takım seçilmesi de mümkündür. Bizim hesaplamalarımızda alınan konumlar şunlardır:

$$(1,0,1,0), (1,0,2,0), (2,0,1,0), (2,0,2,0) \\ (2,1,2,1).$$

Bu yazılıştaki gösterim (n_1, l_1, n_2, l_2) konum gösterimidir.

6.2 I : $(3d^2)^3S$

Bu çalışmada hesaplanan tek 'triplet S' hali budur. Başlangıçta $(2p^2)^3S$ hali hesaplanmak istenmiş ve giriş enerjisi pozitif olarak 0,602577 ab olarak verilmiştir. Fakat altı konumlu etkileşme-fonksiyonlarının ağırlık katsayılarının minimum THT civarındaki hesaplanan değerlerine bakılınca $(3,2,3,2)$ nin 'hakim' konum olduğu görülmüştür. Böylece enerjisi 0,260 ab olan tripletin $(3d^2)$ konumundan ileri geldiği yorumuna varılmıştır. Bu yorum, vektörün 'birlenme' ölçüsünde önem kazanabilir. Adı geçen mal-

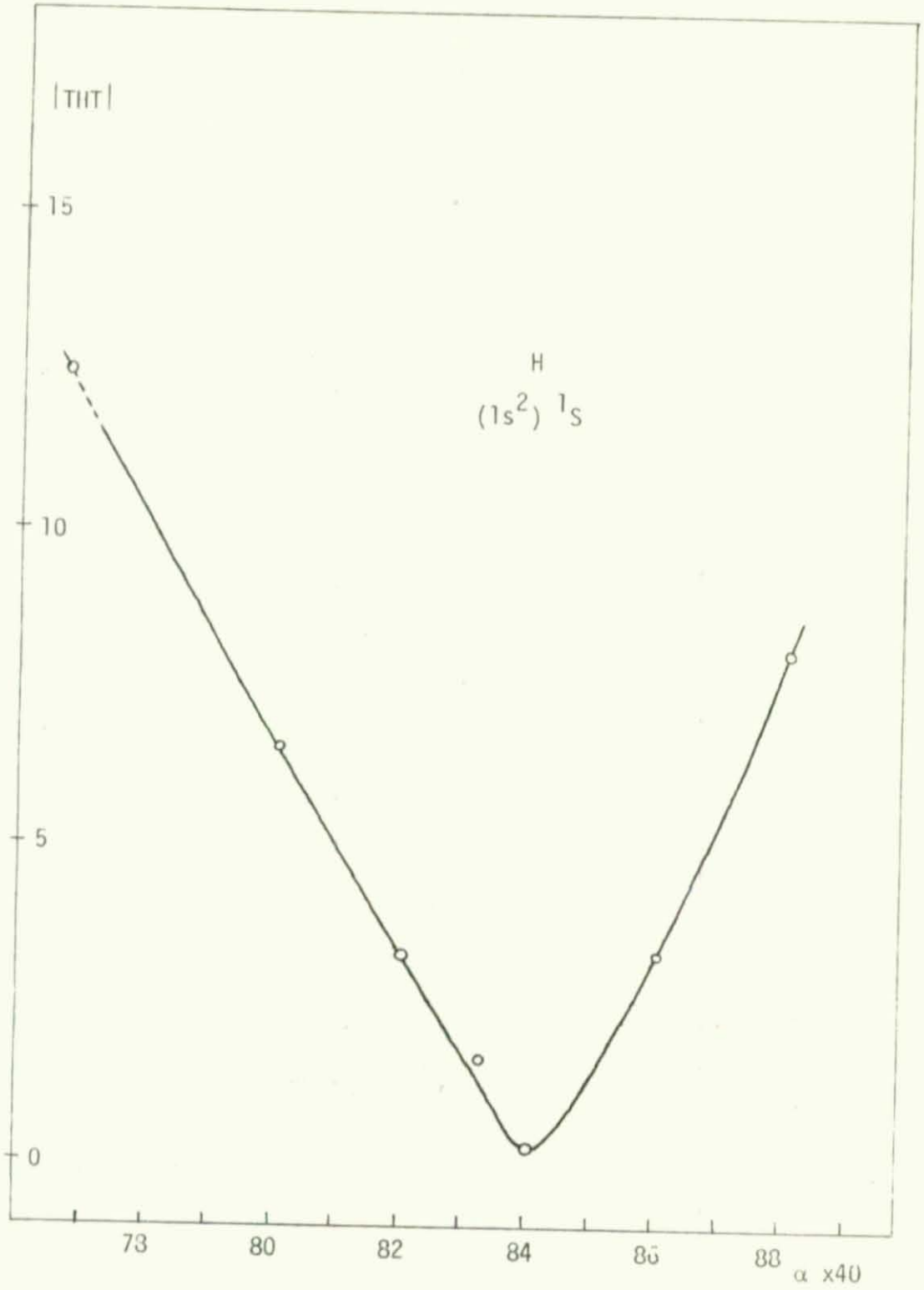


TABLO H

Kullanılan semboller üzerinde açıklamalar 96. sayfada verilmiştir. $a = 2,10265$ tir.

A L F A	THT	E N E R J I (ab)
1,80	25,8	-2,48
2,20	8,1	-2,84
2,00	6,6	-2,90
2,05	3,3	-2,89
2,08	1,6	-2,89
2,10	0,2	-2,88
2,15	3,3	-2,86
2,102654402	34xD(-07)	-2,877317690
2,102654409	10xD(-07)	-2,877317659
2,102654405	19xD(-07)	-2,877317680
a+393xD(-08)	0,6xD(-04)	-2,877317710
a+410xD(-08)	0,1xD(-04)	-2,877317659
a+412xD(-08)	0,3xD(-04)	-2,877317650





Şek. 6H : Helyum Temel Seviyesi için $|THT|$ 'nin α 'ya göre değişmesi.



TABLO 6HH

H : $(1s^2) \ ^1S$, He Temel Hali

Araştırma	Enerji (ab)	Konum Sayısı [†]
Bu Çalışma	-2,877	5
(17)	-2,875	4
(17)	-2,899	10
(18)	-2,860	3
(18)	-2,878	6
Kesin Değer (20)	-2,903724	1075
Deney (21)	-2,90372 ± 0,00001	

[†] : Konum etkileşme fonksiyonundaki terim sayısı; bizim programımızda NDIH olarak verilmektedir.

(17) : R T Brown, P R Fontana, J. Chem. Phys. 45,4248(1966)

(18) : H Shull, P O Löwdin, J. Chem. Phys. 30,617(1959)

(20) : C L Pekeris, Phys. Rev. 112,1649(1959)

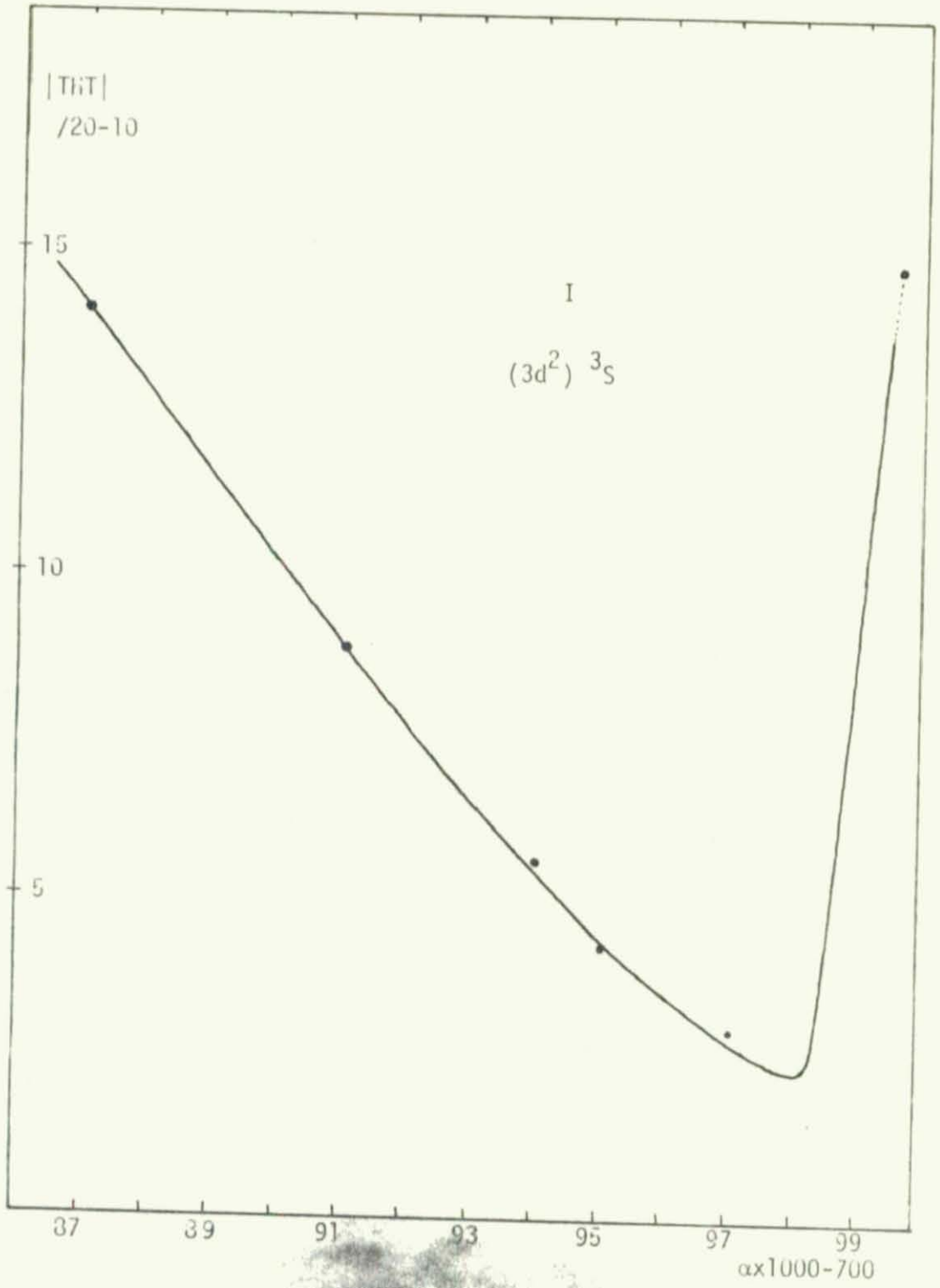
(21) : Genel Kaynaklar (3) ten alınmıştır. Kaynak (3) te değerlerini Genel Kaynaklar (67) den almıştır.

TABLO I

Üçüncü sütunda verilen ENERJİ, Hel-
yum temel seviyesine göre ve atomik
birimlerde dir. Diğer açıklamalar 9ü.
sayfadaki Tablo A da yapılmıştır.

A L F A	THT	ENERJİ
1,00	4208	-0,720
0,950	70	-0,722
0,900	228xD(05)	-0,579
0,850	450xD(05)	-0,528
0,825	737xD(05)	-0,444
0,300	863xD(04)	-0,180
0,798	246	-0,26056
0,797	264	-0,26052
0,795	286	-0,26048
0,794	311	-0,26045
0,791	378	-0,26039
0,787	482	-0,26034
0,775	1xD(03)	-0,496





Şek. 6I : $\alpha = 0,798$ için maksimum vardır. Grafik Tablo I daki değerlere göre çizilmiştir.

Handwritten signature or initials.

TABLO GII

I : $(3d^2) {}^3S$: Triplet S

E N E R J İ

(eV)[†]

Deney	Bu Çalışma	(1)	(2)
-----	71,92	71,66	71,20

V E K T Ö R :

$$a(2,1,2,1) = 1,000 \times D(0)$$

$$a(3,1,3,1) = -2,104 \times D(0)$$

$$a(2,1,3,1) = -0,069 \times D(0)$$

$$a(3,2,3,2) = 0,143 \times D(26)$$

$$a(3,1,2,1) = 0,010 \times D(0)$$

$$a(4,3,4,3) = 0,195 \times D(14)$$

† : Enerjinin atom birimleri(ab)nden eV ta çevrilmesi için

$$\text{Enerji(eV)} = 2xR_{\infty} \times \{ |E_t(\text{ab})| - |\text{Enerji(ab)}| \}$$

bağıntısı kullanılmıştır. Helyum temel halinin enerjisi ve R_{∞}

$$E_t = -2,903724 \text{ ab}, \quad 2xR_{\infty} = 27,211652 \text{ ab}$$

alınmışlardır.

(1) : Ş Erkoç, T Uzer, İ Üksüz, Phys. Rev.A15,1805(1977)

(2) : Genel Kaynaklar (22) de P G Burke tarafından verilmektedir.



tipletin Şek. 6I da gösterilen ALFA-THT grafiği, Tablo I daki değerlerin sadece bir kısmına göre çizilmiştir. Bu değerler, programdaki minimum bulma rutini UCSEC e girildikten sonra bulunmuşlardır. Tayfın $\alpha = 0,825$ civarında bir maksimum vardır ve ≈ 67 . eV luk bir enerjiye karşılıktır. En büyük katsayı ($2p^2$) konumundadır. Başka bir minimum daha 59,3 eV civarında görülmüştür. Fakat bu ikisi sadece kaba ekstremumlardır ve ayrıca rezonansları temsil ettikleri hususunda deney ve teori sonuçları elimizde bulunmamaktadır. Bu itibarla I gurubundaki hesaplamalardan yalnız $(3d^2)^3S$ rezonansının durumu açıklığa kavuşmaktadır. Bu halin enerjisi ve dalga fonksiyonu Tablo GII da verilmektedir.

G.3 A : $(2s2p)^3P$

Altı terimli bir fonksiyonla bulunan değerler Tablo A ve Şek. 6A da gösterilmişlerdir. Alfa'nın 0,90 ve 0,975 değerleri arasında belirli minimum bulunamamıştır. Enerji 53,69 eV tan 59,24 eV a kadar değişen değerler almıştır. Küçükten itibaren dördüncü alfa için hesaplanan 59,24 eV değeri alınacak olursa deneyle ≈ 1 eV gibi bir aykırılık ortaya çıkmaktadır. Bu hali ile alındığında triplet P için bulunan değer tatminkâr değildir. Bu durumu Türev yöntemi ve fonksiyon bazına bağlamak düşünülebilirse de bu düşünce isabetli olmasa gerektir. Aksine, daha küçük alfa parametresi değerleri için yeni hesaplamaların iyi sonuçlar vereceği, bir sonraki paragraftaki singlet P tartışmasından da anlaşılabileceği gibi, ihtimal dahilindedir.

G.4 B : $(2s2p)^1P$

Altılık bir bazla yapılan hesaplamalarda açık bir minimum bulunmuş, iki grafikte Şek. 6B1 ve 6B2 de bu durum gösterilmiştir. Bunların çizimine esas olan veriler Tablo B den alınmış olanlardır. Enerji için bulunan değer deney ve diğer teorik hesap sonuçlarıyla karşılaştırılabilir duyarlılığa yakın görülmüştür. Karşılaştırma Tablo GBB de yapılmaktadır. Uyuşma S halleri için



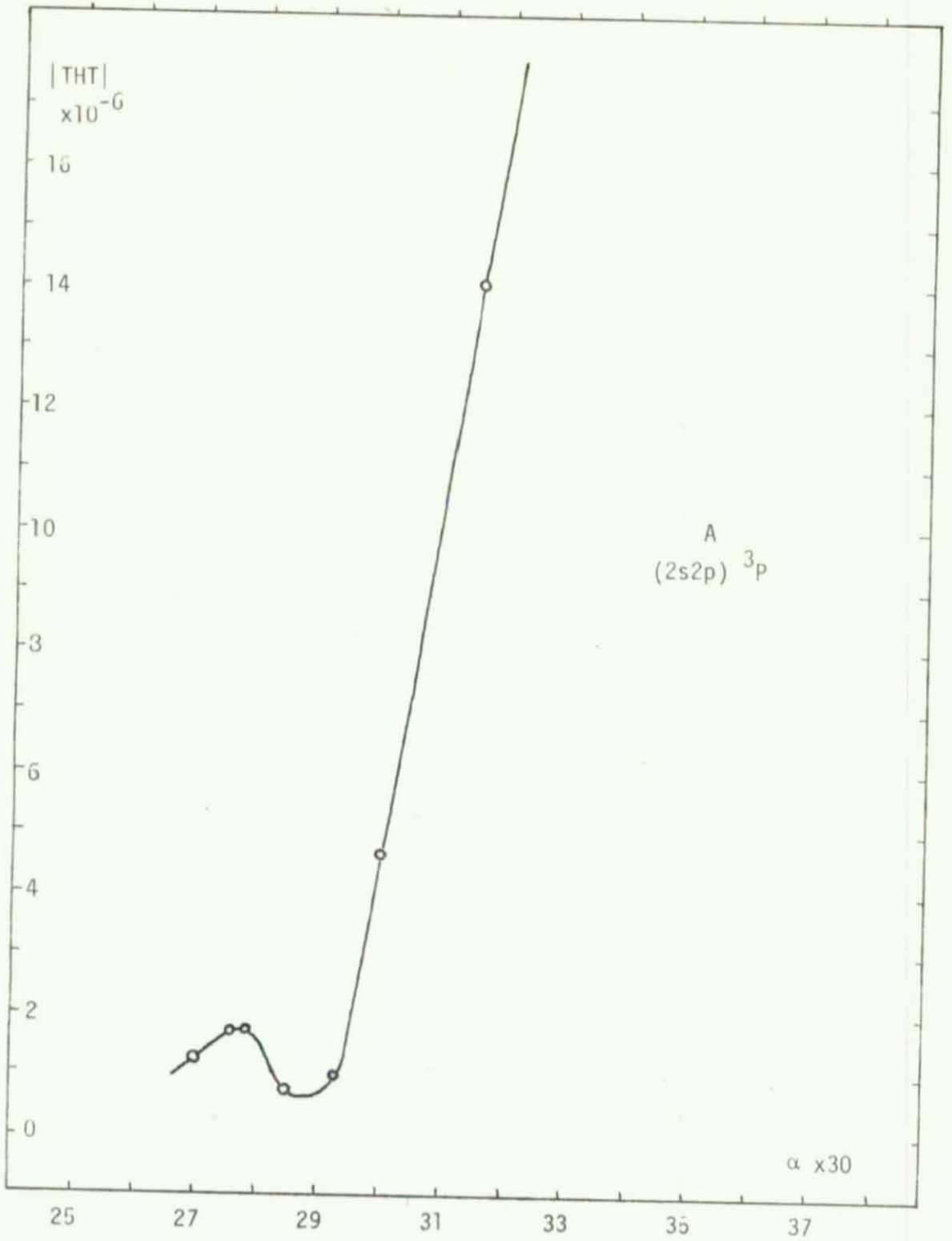
TABLO A

Bu tabloda sol sütunu teşkil eden ALFA değerleri, Kesim 4.2 de bahsedilen parametre, yani, 'Düzeltilmiş Çekirdek Yüğü' nün Tablo 6.1 de verilen üst sınırın altında aldığı değerlerdir. Enerjinin bu parametreye duyarlı bir şekilde bağlı olduğu görülmüştür. İkinci sütun (45G) ile verilen THT değerlerinin mutlak ölçülerini göstermektedir. ENERJİ sütunu FORTRAN programının OZEN çıkış parametre değerleri olup helyum temel seviyesi enerjisine 'göre' ve atom birimlerinde ifade edilmişlerdir.

Bu tablo A adı ile adlandırılan ^3P haline aittir. D(c) gösterimi 10^C için kullanılmaktadır.

ALFA	THT	ENERJİ
1,22	12,1 xD(06)	-0,547
1,12	42,0 xD(06)	-0,677
1,10	32,4 xD(06)	-0,690
1,05	14,0 xD(06)	-0,708
1,00	4,6 xD(06)	-0,717
0,95	0,7 xD(06)	-0,727
0,90	1,2 xD(06)	-0,745
0,92	1,6 xD(06)	-0,737
0,975	0,95 xD(06)	-0,721
0,925	1,70 xD(06)	-0,735





Şek. 6A : ALFA' ya karşı $|THT|$ grafiği. $\alpha = 0,80$ civarında bir minimum vardır.

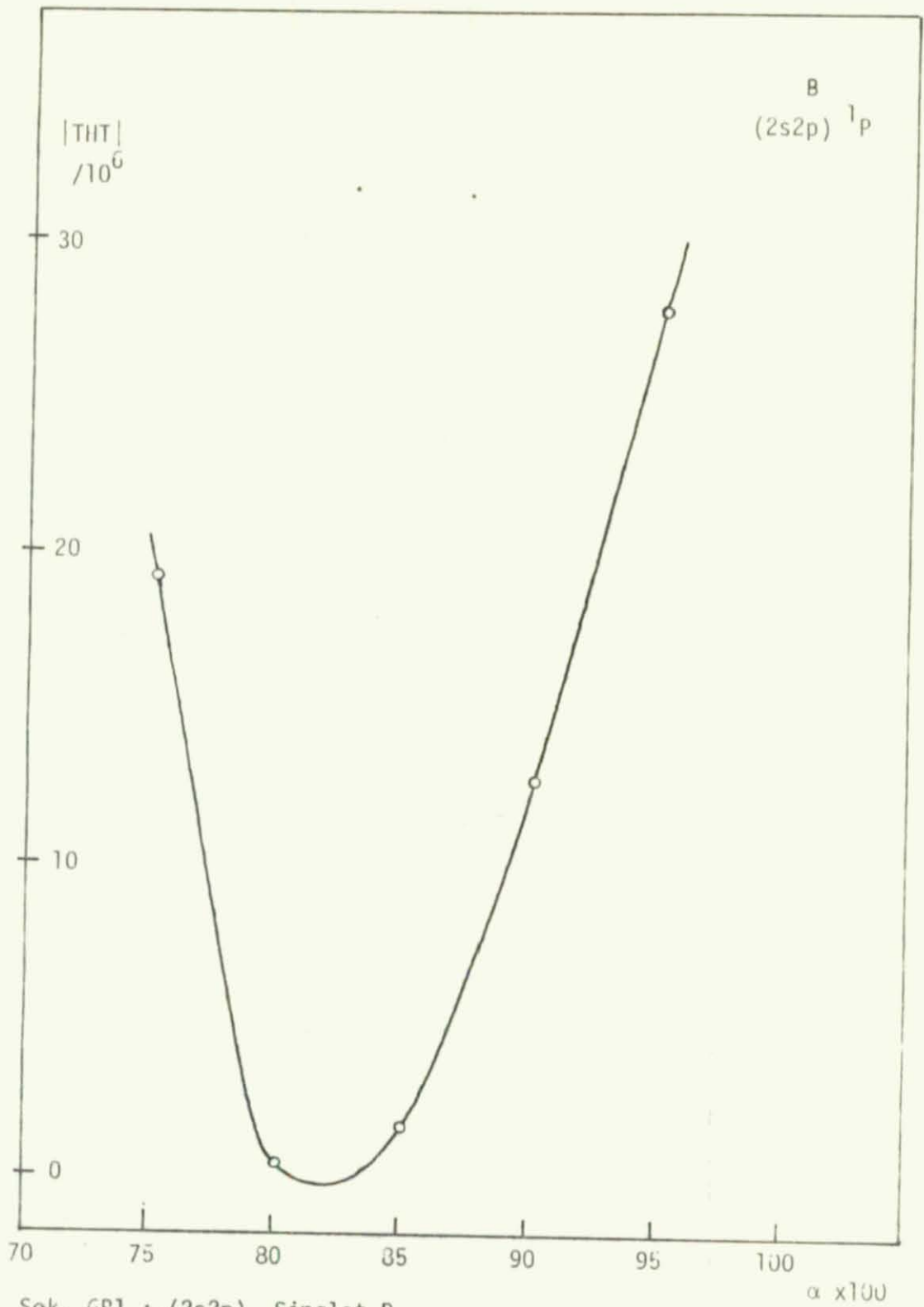


TABLO B

Sayfa 96 da verilen izahat bu tablo için de aynıdır. Enerji helyumun temel enerji seviyesi 'sıfır' kabul edildiğine göre ve atom birimlerindedir.

A L F A	THT	ENERJİ
0,75	19,2 xD(06)	-0,743
0,80	0,1 xD(06)	-0,710
0,85	0,2 xD(06)	-0,683
0,90	12,7 xD(06)	-0,673
0,95	27,8 xD(06)	-0,676
1,00	42,9 xD(06)	-0,678
0,805	1,3 xD(06)	-0,707
0,810	0,2 xD(06)	-0,704
0,813	0,3 xD(06)	-0,702
0,815	0,8 xD(06)	-0,701
0,820	1,5 xD(06)	-0,698
0,825	2,1 xD(06)	-0,695
0,830	2,5 xD(06)	-0,692

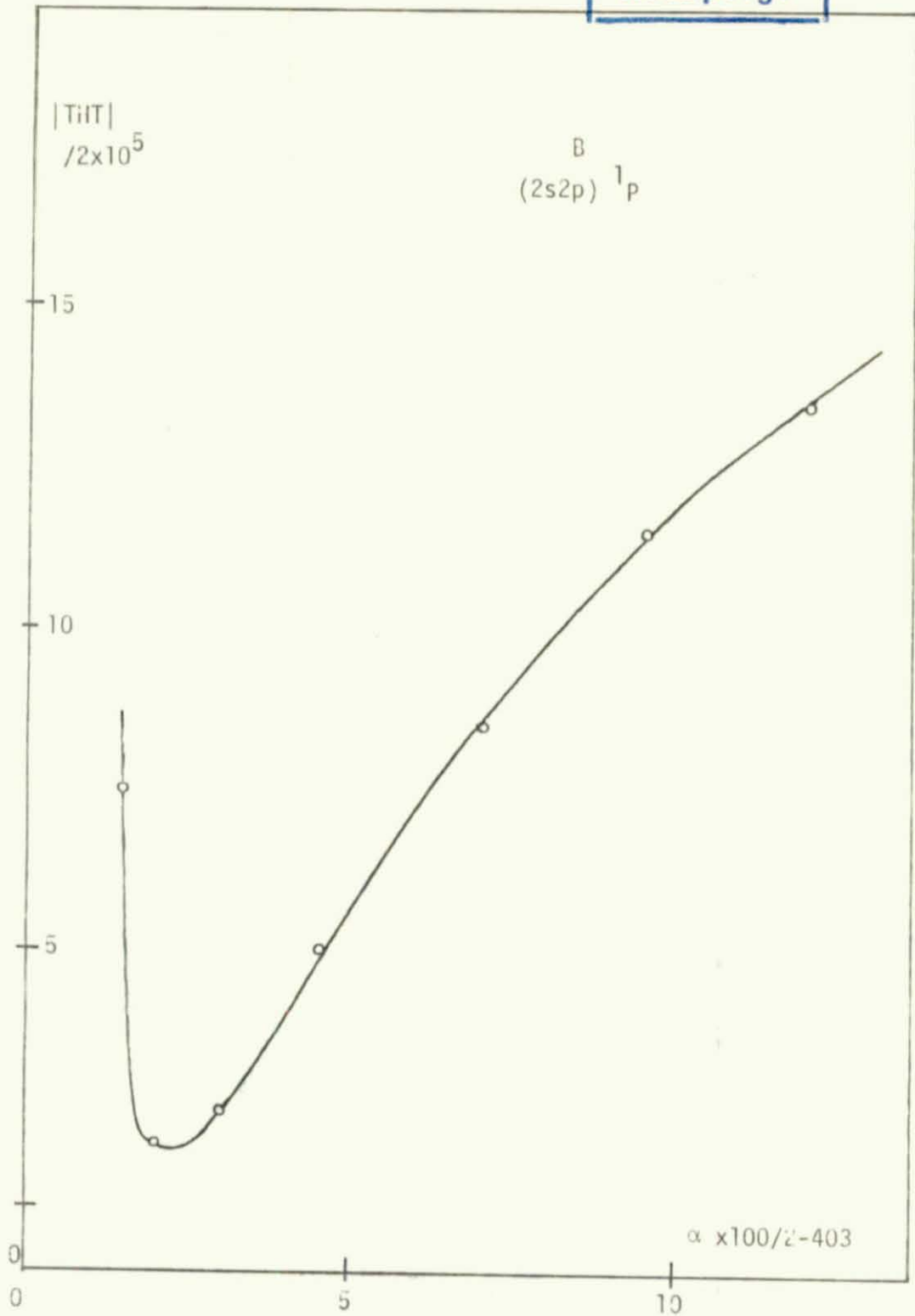




Şek. GB1 : $(2s2p)$ Singlet P

$\alpha \approx 0,82$ için 'minimum' vardır.





Şek. 6B2 : Şek.6B1 ' in duyarlılıkla çizilmiş bir bölümü. $\alpha = 0,310$ için bir minimum vardır.



T A B L O 6AA

A : (2s2p) ³P

E N E R J İ (eV)

Deney (15)	Bu Çalışma	(3)
58,34	59,24	58,32

T A B L O 6BB

B : (2s2p) ¹P

E N E R J İ (eV)

Deney (6)	Bu Çalışma	(3)
60,06	59,87	60,14

(3) : A K Bhatia, A Temkin, Phys.Rev. A11,2018(1975).

(6) : H Suzuki ve diğerleri, J.Phys. Soc. Japan 28,534(1970).

(15): M E Rudd, Phys. Rev. Lett. 15,580(1965).



elde edilen mertebede iyi görülmemektedir. Sturmian fonksiyonların, P hallerini S halleri kadar iyi hesaplamaya uygun bir baz olmadıkları düşünülebilir. Diğer bir sebep de P hallerinde açısal korelasyonun (angular correlation) daha karmaşık bir mahiyet alabilmesi ve konumların daha büyük titizlik ve mülâhazalarla seçilme ihtiyacı olabilir.

$$6.5 \quad C : (2s3s) {}^1S$$

Bu hal'de ALFA'nın sekiz değeri için hesaplar yapılmıştır. Elde edilen ENERJİ ve THT değerleri Tablo C de gösterildiği gibidir. Alfa'nın büyük değerleri için Şek. 6C de görüldüğü gibi salınan THT mutlak değerleri bulunması üzerine dikkat küçük Alfalara çevrilmiştir. Enerjinin 0,594265 ab değerini veren belirgin bir minimum bulunmuştur. Bu nokta için ayrıca vektör de alınmıştır. Sonuçlar Tablo 6CC de karşılaştırmalı olarak sunulmuştur. a vektör bileşenlerinin değerlerinden, en çok katkının (2s4s) ve (3s3s) radyal konumlardan geldiği, fakat açısal korelasyonun da küçümsenemeyecek bir ölçüde bulunduğu anlaşılmaktadır. Herbir konumun enerjiye olan katkısını ayrıca değerlendirmek, onu konum etkileşme fonksiyonuna yalnız başına eklemekle enerjide meydana gelecek değişmeyi hesaplamakla görülebilirdi, ve böylece açısal ve radyal korelasyonlar için limit değerler elde edilebilirdi. Bu çalışmada adı geçen yönlerde hesaplamalar yapılması hem gaye, hem de eldeki imkânlar bakımından uygun olmamıştır.

$$6.6 \quad D : (3s4s) {}^1S$$

Bu hal için az sayıda ALFA değeri ile belirgin bir ekstremum (burada maksimum) elde edilmesi ve karşılık gelen enerjinin deney enerjisi ile uyuşması daha fazla hesaplamalara gidilmesine ihtiyaç göstermemiştir. Toplam dalga fonksiyonuna sekiz konum alınmış, 0,353 ab çıkış enerjisi elde edilmiştir. Bu rezonans halinin hesaplamalarda diğer hallere nispetle iki misli kompüter zamanı harcadığı dikkati çekmiştir. Bununla ilgili değerler Tablo D ve Tablo 6DD ile, grafik ise Şek. 6D ile verilmektedirler.



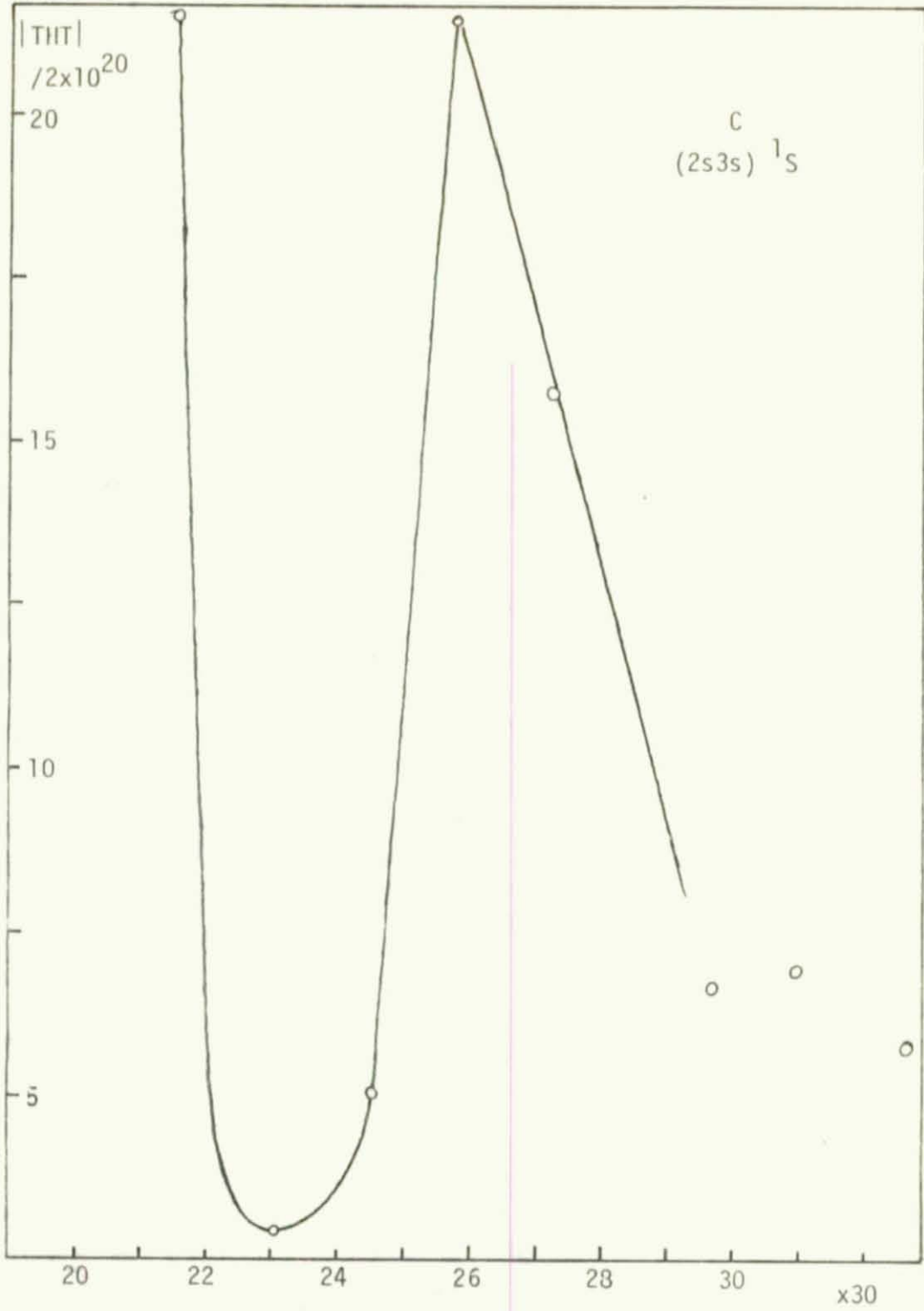
T A B L O : C

A L F A	T H T	E N E R J I (ab)
0,856	385 x D(19)	-0,576
0,906	266 "	-0,559
0,986	33 "	-0,492
1,030	91 "	-0,543
1,086	66 "	-0,507
0,816	52 "	-0,566
0,766	10 "	-0,594
0,716	3580 "	-0,276

T A B L O D

A L F A	T H T	E N E R J I (ab)
0,76	0,3 xD(20)	-0,360
0,78	2,5 xD(20)	-0,353
0,80	0,5 xD(20)	-0,335





Şek. GC : $\alpha = 0,766$ değeri için bir minimum görülmektedir.



T A B L O 6CC

C : (2s3s) ¹S

E N E R J İ (eV)

Deney (8)	Bu Çalışma	(10)	(9)
62,80	62,84	62,93	62,99

V E K T Ö R :

$$a(2,0,3,0) = 1,000$$

$$a(2,0,4,0) = -0,4941$$

$$a(3,0,3,0) = 0,3745$$

$$a(3,0,4,0) = -0,0533$$

$$a(2,1,3,1) = 0,0903$$

$$a(2,1,4,1) = -0,0553$$

$$a(3,1,3,1) = -0,0303$$

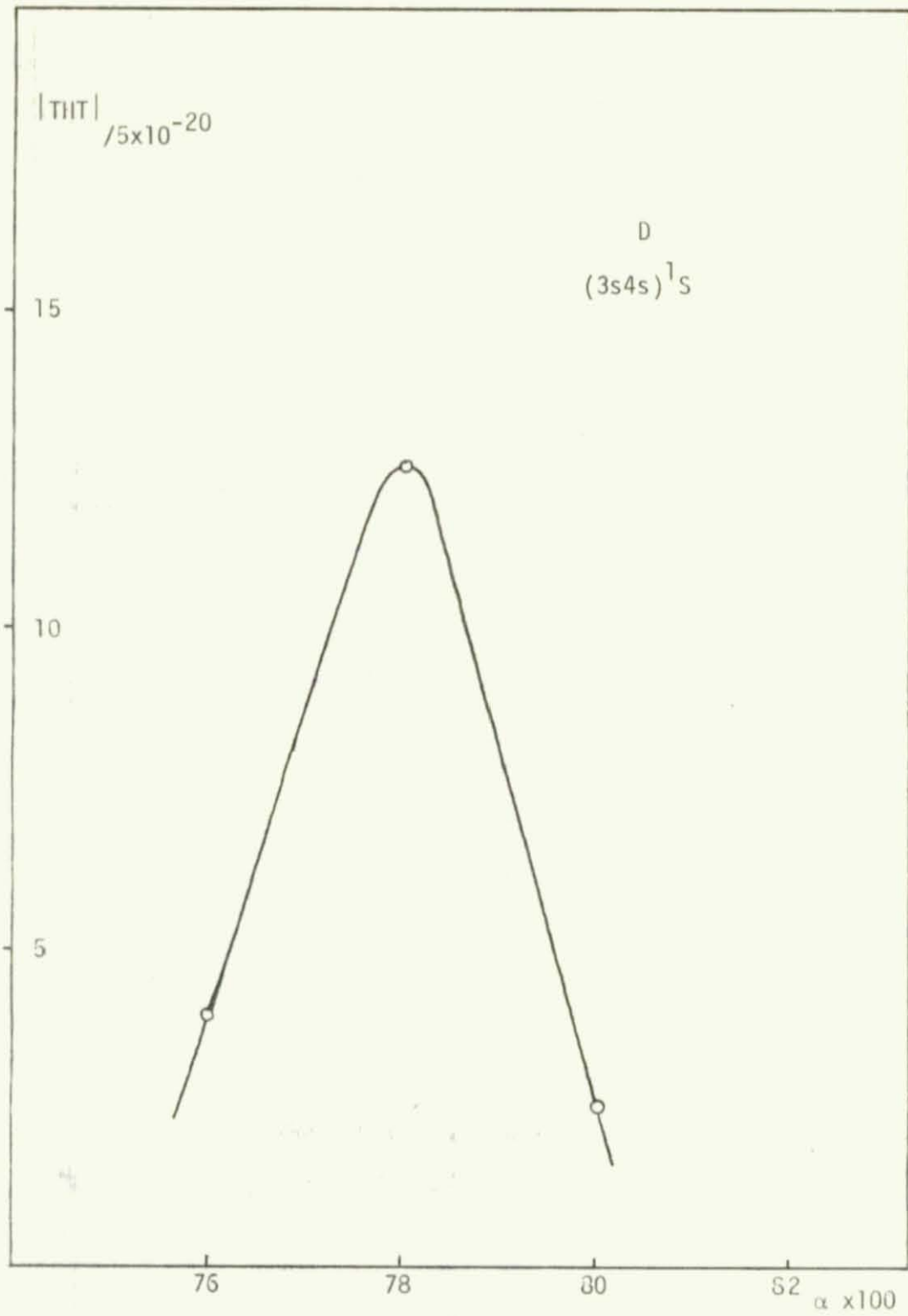
$$a(3,1,4,1) = 0,0011$$

(8) : N Oda ve diğerleri, Phys. Rev. Lett. 24,42(1970).

(9) : E Holoien, J Hildtal, J. Phys.B3,592(1970).

(10): Genel Kaynaklar (45).





Şek.6D :0ç değerle $\alpha \approx 0,78$ de bir ekstremum (maksimum) bulunmuştur.



$$6.7 \quad G : (2s^2) ^1S$$

Sekizlik bir fonksiyon gurubu ile elde edilen deęerler Tablo G de sunulmuştur. Altı nokta ile çizilen THT – ALFA grafięi ise Şek. 6G de görölmektedir. Apsis büyüklüęüne göre üçüncü noktanın parametresi kullanılarak elde edilen enerji 0,777882 ab olup deneyin ölçü duyarlıęı sahasındadır. Karşılaştırmalı deęerler Tablo 6GG de sunulmaktadır. Burada yazılan vektör minimum noktasına deęil, ona komşu , dördüncü noktaya ait olduęundan yaklaşık bir deęerdir.



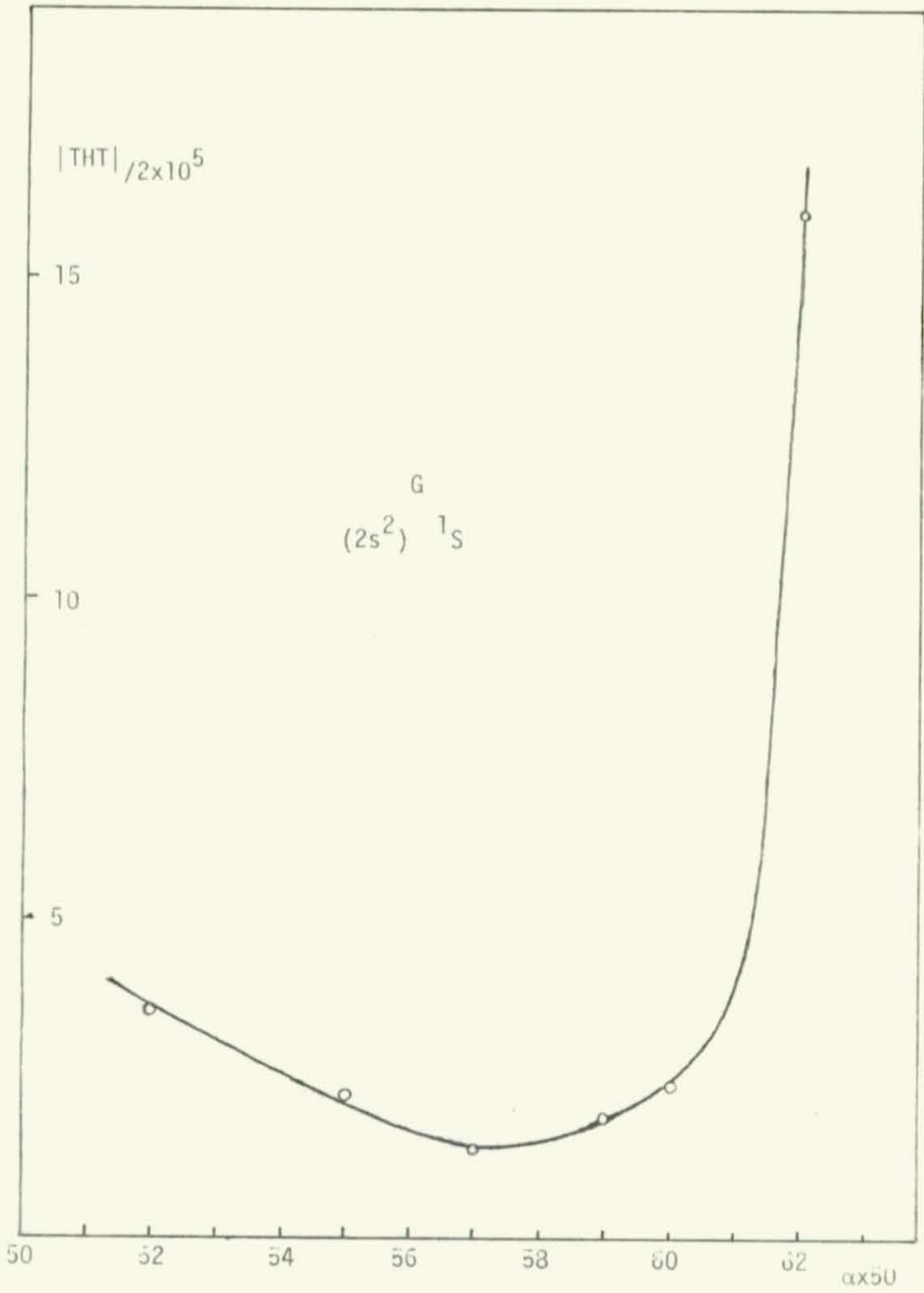
T A B L O : G

Bu tablodaki deęerler $(2s^2) 1S$ içindir.

ALFA, THT ve ENERJİ sayfa 96 daki A tablosu için ilk paragrafta açıklanan deęişkenlerdir. THT nin her deęeri ilk deęerinin katsayısı D ile çarpılacaktır.

A L F A	THT	E N E R J İ
1,24	31,9 xD(-05)	-0,619
1,14	2,8	-0,779
1,04	7,2	-0,300
1,10	4,6	-0,739
1,18	3,3	-0,750
1,20	4,9	-0,718





Şek. GG : $\alpha = 1,10$ için minimum görülmektedir.

Handwritten signature and a circular stamp.

T A B L O 6DD

D : (3s4s) ^1S

E N E R J i (eV)

Bu Çalışma	(10)	(12)	(13)
69,42	69,36	69,45	69,39

T A B L O 6GG

G : (2s²) ^1S

E N E R J i (eV)

Deney (16)	Bu Çalışma	(3)	(14)
57,82	57,85	57,84	57,94

V E K T Ö R : G

$$a(2,0,2,0) = 1,000$$

$$a(2,0,3,0) = 1,296$$

$$a(3,0,2,0) = -0,329$$

$$a(3,0,3,0) = -0,372$$

$$a(2,1,2,1) = 0,461$$

$$a(2,1,3,1) = 0,450$$

$$a(3,1,2,1) = -0,467$$

$$a(3,1,3,1) = -0,223$$

(3),(10): Sayfa 101, 105 te aynı numaralı kaynaklar.

(12) : E Holoiien, J Midtdal, J. Phys.B4,37(1971).

(13) : P G Burke, A J Taylor, J. Phys.B2,44(1969).

(14), (16) : Genel Kaynaklar (39), (30) .

6.8 Sonuç ve Düşünceler:

Bu tezde atomların 'rezonans halleri' üzerindeki deney ve teori yöntemleri özetlendikten sonra, yeni çalışılmakta olan Türev Yöntemi ele alınmış, Konum Etkileşme Teorisi ve Sturmian fonksiyonlar ile de karakterlenen bir cebir denklemi(4.56) ne varılmış ve bu denklem: FORTRAN IV lisansı ile hazırlanan bir elektronik hesaplama programı ile, helyum atomunun temel hali ve kendiliğinden iyonlaşan -rezonans- altı hali için çözülmüştür. Araştırmanın amacı çok iyi enerji ve dalga fonksiyonları üretmekten daha çok 'yöntemi ortaya koymak ve programlamak' olmuştur. Bu itibarla karmaşık olmayan bir sistem olan He üzerinde durulmuştur. Bütün hesaplamalar kompüterle yapılmıştır. Elektronik hesaplama imkânları pahalı ve gidilmesi güç olduğundan, araştırma sınırlı kuantum halleri ve çok yüksek olmayan duyarlıkta yürütülmüştür. Elde edilen sonuçlar bu bölümde sunulduğu gibidir.

Enerji için bulunan değerler, ($1s^2$) temel hal ve bir ^3S , dört tane ^1S ve bir tane ^1P halleri için, konum etkileşme fonksiyonunun büyüklüğü ölçüsünde, deney ve teori ile uyuma göstermektedirler. İncelenen bir halde, ^3P de, Şekil 6A dan da görüldüğü gibi, ALFA parametresinin işlenen sahasında belirli bir ekstremum elde edilememiştir. Hesaplanan enerji de deneyin verdiği den uzak- tır. Alfa parametresinin daha küçük değerleri için yeni hesaplamaların iyi sonuçlar vereceği ihtimali benimsenmektedir. Bu triplet üzerinde yapılabilecek başka çalışmalarda, paralel yönelmiş spin - leri daha iyi hesaba katacak açısal konumların etkileşmeye sokul - ması da denenebilir. ($3s4s$) ^1S hali üzerinde sadece üç hesaplama yapılmış olması normal olarak az sayılmaktadır. Bu sayı'nın artı - rılması, varılmış olan 'tutarlı' sonucun desteklenmesi bakımından mümkündür.

Kompüter programı da bazı geliştirmelere şüphesiz ki açıktır. Bazı rutinlerin birleştirilmesi ve bazı fonksiyonların, meselâ (5.3), hesaplamalarında simetri şartlarının konmasıyla zaman bakımından daha ekonomik hale getirilmesi mümkün görülmekte-

dir. Daha yüksek simetri halleri olan D, E, ..., vs. için 'overflow' ve 'underflow' süapları etkili bir tarzda programa konabilir. Ayrıca fonksiyon bazının 'geniş' seçilmesi hali de araştırılabilir.

Bu çalışmada kullanılan programla helyumdan başka H^- , Li^+ ve Be^{++} gibi iyonların bağlı ve rezonans halleri de araştırılabilir. Daha genel olarak, elde edilmiş olan dalga fonksiyonlarının kullanılmasıyla, iki elektronlu atom sistemlerinde, Birinci Bölümde bahsedilen 'elektron çekimi', 'geçiş ihtimalleri', 'terim oranları' vs. gibi gözlenebilirler ve "rezonans çizgi genişlikleri" hesaplanabilir. Kullanılan 'konum etkileşme yöntemi' çok genel olduğundan, üç ve daha çok elektronlu atomlara Türev yöntemi eşliğinde uygulanması ise şimdiki araştırmanın daha detaylı fakat tabii bir uzantısı olacaktır. Daha büyük sistemlere geçilmesi halinde Sturmian fonksiyon ailesi veya daha yaygın olan Slater Tipi Yörüngesiler (STY)' in denenmesi mümkündür.



YEDİNCİ BÖLÜM[†]

KAYNAKLAR

- 1- Pamuk H Ü, Kuantum Kimyası, (baskıda), K.T.Ü. Yayınları, 1978.
- 2- Messiah A, Quantum Mechanics, vol.I,II. North-Holland, 1961.
- 3- Slater J C, Quantum Theory of Atomic Structure, vol.I,II.
McGraw-Hill Book C. 1960.
- 4- Hyllraas E A, Revs. Mod. Phys. 35, 421 (1963).
- 5- Pekeris C L, Phys. Rev. 112, 1649 (1958), Phys. Rev. 115, 1216
(1959).
- 6- Kinoshita T, Phys. Rev. 105, 1490 (1957).
- 7- Shavitt I, Modern Theoretical Chemistry, 3, Ed: H.F. Schaefer,
Plenum Press, 1977.
- 8- Green L C, ve diğ. , Phys. Rev. 139A, 373 (1965).
- 9- Seaton H J, Quantum Theory II, ed. D.R. Bates, Academic Press,
(1962).
- 10- Löwdin P O , Phys. Rev. 97, 1490 (1955).

[†] Tez metninin bazı yerlerinde bu bölüme 'Genel Kaynaklar' olarak işaret edilmektedir, ve kaynak sayıları () içine alınmışlardır.



- 11- Weiss A W , Krauss H , J. Chem. Phys. 52,4363(1970).
- 12- Hagstrom A, Sims J, Phys. Rev.A4,908(1971).
- 13- Sinanoğlu O , J. Chem. Phys. 36,706(1962).
- 14- Üksüz İ , Ph.D. Thesis, Yale University,1969
- 15- Bagus P S, ve diğ., Phys. Rev. 179, 39(1969).
- 16- White H E ,Introduction to Atomic Spectra, McGraw-Hill,1934.
- 17- Condon E U , ve Shortley G H , The Theory of Atomic Spectra,
Cambridge, 1970.
- 18- Allen C W , Phys. Rev. 39,42, 55(1932).
- 19- Madden R P , ve Codling K , Astrophys. J.141,364(1965).
- 20- Temkin A , Autoionization, ed. A. Temkin, Mono Book, 1966.
- 21- Hibbert A , Rep. Prog. Phys. 38, 1217(1975).
- 22- Burke P G , Adv. Atom. Molec. Phys. 4,173(1968).
- 23- Gerjuoy E , Autoionization, ed. A. Temkin, Mono, 1966.
- 24- Schulz G J , Phys. Rev. 136A,650(1964).
- 25- Durmaz S , Ph.D. Thesis, University of Sussex, 1971.
- 26- Garton W , 20 numaralı kaynak.
- 27- Bayrakçeken F, Fink R D, Sousa I A, Molecular Photo-
physics, McGraw-Hill, 1978 (baskıda).
- 29- Schulz G J , Revs. Mod. Phys.45, 378(1973).
- 30- Hicks P J , ve Comer J , J. Phys.B3, 1866(1975).
- 31- Siegbahn E M , ESCA- Applied to Free Molecules, North
Holland, 1969.
- 32- Smith K , The Calculation of Atomic Collision Processes,
Wiley-Interscience, 1971.

- 33- Fano U , Phys. Rev. 124,1866(1961).
- 34- Wu T Y , Phys. Rev. 66 , 291(1944).
- 36- Feshbach H , Ann. Phys. 5,357(1953)
- 37- Sharma C S , SriRanganathan S , Nuovo Cimento 42B,65(1977).
- 38- O'Malley T F, ve Geltman S , Phys. Rev. 137A, 1344(1965).
- 39- Lipsky L , Russek A , Phys. Rev. 142, 59(1966).
- 40- Holoiien E , ve Hildtdal J , J.Phys. B5, 1111(1972).
- 41- Ilazarof G , J. Chem. Phys. 52, 5873(1970).
- 42- Holoiien E , özel haberleşme.
- 43- Üksüz İ. , Doçentlik Tezi, Ankara,1974.
- 44- Üksüz İ. , ve Erkoç Ş , Fifth International Conference on
Atomic Physics, Abstracts, Berkeley, 1976.
- 45- Üksüz İ., Phys. Rev. A13, 1507(1976).
- 46- Erkoç Ş , Uzer T , ve Üksüz İ , Phys. Rev.A15, 1805(
1977)
- 47- Erkoç Ş , Ph.D. Thesis, İİETU, Ankara, 1977.
- 48- Erkoç Ş , özel konuşma.
- 49- Üksüz İ , ve Erkoç Ş , yayımlanacak.
- 50- Erkoç Ş , ve Üksüz İ , TÜBİTAK VI, Bilim Kongresi,
Ankara, 1977.
- 51- Pilar F , Elementary Quantum Chemistry, McGraw-Hill,1967.
- 52- Üksüz İ , Yayımlanacak.
- 53- Rotenberg H , Ann. Phys. 19, 262(1962).
- 54- Knox H O , ve Rudge H R H , J. Phys.B2, 521(1969).
- 55- Shull H , ve Löwdin P O , J. Chem. Phys. 23, 1362(1955).



- 56- Slater J C , Phys. Rev. 42, 33(1932).
- 57- Percival I , ve Seaton H J , Proc. Cambridge Phil. Soc.
53, 658(1957).
- 58- Löwdin P O , J. Mol. Spectroscopy 8, 203(1962).
- 59- Rose H A , Elementary Theory of Angular Momentum,
John Wiley, 1957.
- 60- Knox H O , Comput. Phys. Commun. 1,167(1969).
- 61- Gradshteyn IS, ve Ryzhik IM, Tables of Integrals, Series
and Products, Academic Press, 1964.
- 62- Gourlay A R , Watson G A , Computational Methods for
Matrix Eigenproblems, John Wiley, 1973
- 63- Racah G , Phys. Rev. 62, 438(1942).
- 64- Pierce J R , Theory and Design of Electron Beams,
van Nostrand, 1954.
- 65- Farago P S , Free Electron Physics, Penguin, 1970.
- 66- Stamatović A , Schulz G J , Rev. Sci. Instrum. 41,423(
1970).
- 67- Moore C E , Atomic Energy Levels, Natl. Bur. Standards
(US) circ. 467(1949).



E K : I

KOMPÜTER PROGRAMI

(ASLI)

Beşinci Bölüm'de açıklamalarıyla tanıtılan FORTRAN IV programının kendisi, 'satır basıcı' dan alınan çıkışı şekliyle bu ekte verilmiştir. Tez metninde bu kısım için bazan 'program derleme çıkışı' adı kullanılmıştır.



JAN 73)

05/360 FORTRAN H

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF

MAIN PROGRAM

OKUNAN DEGERLER HAKKINDA BILGI:

Z : ATOM NUMARASI
E : GIRIS ENERJISI
ALFA : LINER OLMAYAN PARAMETRE
NDIM : TOPLAM DALGA FONKSIYONUNDAKI TERIM SAYISI
L : HESAPLANACAK HALIN TOPLAM YORUNGE ACISAL MOMENTUMU
IS : HESAPLANACAK HALIN TOPLAM SPIN ACISAL MOMENTUMU
IVECT : ALFADAKI ADIM SAYISI
CRE : ALFADAKI ADIM BUYUKLUGU
EPS : POWER SABRUTININDEKI DUYARLIK
IN(I) : BAS QUANTUM SAYILARINI TASIYAN BIR BOYUTLU TABLO
IL(I) : YORUNGE ACISAL MOMENTUM QUANTUM SAYILARINI TASIYAN TABLO

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

REAL*4 EPS

DIMENSION HAMAL(20,20),HT(210),STN(210),WORK(210),EV(20),VV(20)

COMMON /VECT/ IVECT

COMMON /GAMA/ GA(40)

COMMON /ARRAY/ IN1(20),IL1(20),IN2(20),IL2(20)

COMMON /EN/ E

DATA VV /20*1.000/

READ(5,15) Z,E,ALFA,L,IS,IVECT,N1,L1,N2,L2, L1MAX,N1MAX,N2MAX,C

1 EPS

15 FORMAT(3D23.16/10I2,D23.16,E10.3)

WRITE(6,20)Z,E,ALFA,L,IS,IVECT,CRE,EPS,N1,L1,N2,L2,L1MAX,N1MAX,

1 AX

20 FORMAT('1'//2X,'INPUT DATA : '//2X,'Z=',D23.16,5X,'E=',D23.16,5X

1 LFA=',D23.16//2X,'L=',I3,5X,'S=',I3,5X,'IVECT=',I3//2X,'CRE=',

3.16,5X,'EPS=',E15.7//2X,'N1=',I3,5X,'L1=',I3,5X,'N2=',I3,5X,'L2

4 I3,5X,'L1MAX=',I3,5X,'N1MAX=',I3,5X,'N2MAX=',I3)

CALL STATE(N1,L1,N2,L2,L1MAX,N1MAX,N2MAX,NDIM)

WRITE(6,25) (IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),I=1,NDIM)

25 FORMAT('//2X,'QUANTUM NUMBERS (N1,L1,N2,L2) : '//(11(3X,4I2)))

WRITE(6,65) NDIM

65 FORMAT('//2X,'BASIS BUYUKLUGU: NDIM=',I3)

WRITE(6,26)

26 FORMAT(/2X,120('*')/)

GA(1)=1.000

GA(2)=1.000

DO 30 I=3,40

30 GA(I)=GA(I-1)*DFLOAT(I-1)

CALL SEC(ALFA,Z,E,NDIM,L,IS,CRE,EPS,VV,EV,HT,STN,HAMAL,WORK)

STOP

END



```

REAL FUNCTION SIGMA*8(ALFA,Z,E,NDIM,L,IS,CRE,EPS,VV,EV,HT,STN,HAM
1L,WORK)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION WORK(1),HT(1),STN(1),EV(1),VV(1),HAMAL(NDIM,NDIM)
COMMON /ARRAY/ IN1(20),IL1(20),IN2(20),IL2(20)
INDTRA(I,J)=(J*(J-1))/2+I
DO 160 I=1,NDIM
DO 160 J=1,NDIM
A1=RH(E,Z,L,IS,ALFA,IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),IN1(J),IL1(J),IN2
1J),IL2(J))
A2=H12(ALFA,L,IS,IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),IN1(J),IL1(J),IN2(J)
1IL2(J))
A3=SN(L,IS,ALFA,IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),IN1(J),IL1(J),IN2(J)
1IL2(J))
A4=-A1-A2+2.95000*A3
STN(INDTRA(I,J))=A3
HT(INDTRA(I,J))=A4
HAMAL(I,J)=A4
HAMAL(J,I)=A4
160 CONTINUE
CALL DMINVH(HAMAL,NDIM,DETER)
IF(DETER) 200,190,200
190 WRITE(6,195)
195 FORMAT(/'2X,**** DETERMINANT = 0.0 ****')
STOP
200 CONTINUE
DO 260 I=1,NDIM
DO 260 J=1,NDIM
WORK(INDTRA(I,J))=HAMAL(I,J)
260 CONTINUE
CALL POWER(WORK,STN,EV,VV,OZ,NDIM,EPS)
OZ=1.000/OZ
OZEN=OZ-2.95000
ENER=0.000
OVR=0.000
HHT=0.000
DO 300 I=1,NDIM
EVII=EV(I)*EV(I)
INDIS=(I*(I+1))/2
B1=TH(E,Z,L,IS,ALFA,IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),IN1(I),IL1(I),
1IN2(I),IL2(I))
B2=TH12(ALFA,L,IS,IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),IN1(I),IL1(I),
1IN2(I),IL2(I))
B3=TN(L,IS,ALFA,IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),IN1(I),IL1(I),
1IN2(I),IL2(I))
ENER=ENER+EVII*HT(INDIS)
HHT=HHT+EVII*(-B1-B2+2.95000*B3)
OVR=OVR+EVII*STN(INDIS)
300 CONTINUE
NDIMM1=NDIM-1
DO 310 I=1,NDIMM1
K=I+1
DO 310 J=K,NDIM
EVIJ=2.000*EV(I)*EV(J)
INDIS=INDTRA(I,J)
B1=TH(E,Z,L,IS,ALFA,IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),IN1(J),
1IL1(J),IN2(J),IL2(J))
B2=TH12(ALFA,L,IS,IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),IN1(J),IL1(J),
1IN2(J),IL2(J))
B3=TN(L,IS,ALFA,IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),IN1(J),IL1(J),
1IN2(J),IL2(J))
ENER=ENER+EVIJ*HT(INDIS)
HHT=HHT+EVIJ*(-B1-B2+2.95000*B3)
OVR=OVR+EVIJ*STN(INDIS)
310 CONTINUE
ENERJI=ENER/OVR
ENEKSI=ENERJI-2.95000
HTUREV=HHT/OVR
SIGMA=DABS(HTUREV)
WRITE(6,400) OZ,ENERJI,HTUREV,ALFA,OVR,OZEN,ENEKSI
WRITE(6,402)
402 FORMAT(/'2X,'OZVEKTOR:',/2X,10(' '-'))
WRITE(6,401) (IN1(I),IL1(I),IN2(I),IL2(I),EV(I),I=1,NDIM)
401 FORMAT(/'2X,3('A(',I2,',',I2,',',I2,',',I2,',',D23.16,4X))
400 FORMAT(/'2X,'OZ=',D23.16,4X,'ENERJI=',D23.16,4X,'HTUREV=',D23.16,
1X,'ALFA=',D23.16,7/2X,'OVR=',D23.16,5X,'OZEN=',D23.16,4X,'ENEKSI=

```

(JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
SUBROUTINE SEC(O,Z,E,NDIM,L,IS,CRE,EPS,VV,EV,HT,STN,HAMAL,WORK)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
REAL*4 EPS
DIMENSION HT(1),STN(1),WORK(1),EV(1),VV(1),HAMAL(NDIM,NDIM)
COMMON /VECT/ IVECT
OI=CRE
ALF=DSQRT(2.000*E)
ITER=0
1  ZZ=SIGMA(O,Z,E,NDIM,L,IS,CRE,EPS,VV,EV,HT,STN,HAMAL,WORK)
IF(IVECT.LT.0) GO TO 11
999 IF(ITER) 20,10,20
10 S1=ZZ
O1=0
S2=ZZ
O2=0
11 O=O+OI
IF(O.GT.ALF) STOP
12 ITER=ITER+1
IF(ITER.GE.IABS(IVECT)) STOP
GO TO 1
20 IF(S2-ZZ) 40,30,30
30 S1=S2
O1=O2
S2=ZZ
O2=0
GO TO 11
40 IF(ITER.NE.1) GO TO 100
888 S1=ZZ
O1=0
OI=-OI
O=O+2.000*OI
IF(O.GT.ALF) STOP
GO TO 12
100 CALL UCSEC(S1,S2,ZZ,O1,O2,O,E,NDIM,Z,L,IS,CRE,EPS,VV,EV,HT,STN,HA
1AL,WORK)
RETURN
END

```

```

FFECT* NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
FFECT* SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF

```

```

SOURCE STATEMENTS = 41 ,PROGRAM SIZE = 1236

```

```

NO DIAGNOSTICS GENERATED

```

```

COMPILATION *****

```

```

356K BYTES OF CO

```

JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NODEIT,LD,NXXREF
SUBROUTINE UCSEC(Y1,Y2,Y3,X1,X2,X3,E,NDIM,Z,L,IS,CRE,EPS,VV,EV,HT
1 STN,HAMAL,WORK)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
REAL*4 EPS
DIMENSION HT(1),STN(1),WORK(1),EV(1),VV(1),HAMAL(NDIM,NDIM)
PRE=1.0D-3
E2=E
12 IF((DABS(1.0D0-Y1/Y2).LE.PRE).AND.(DABS(1.0D0-Y3/Y2).LE.PRE)) GO
10 17
ILK=0
IF(Y1-Y3) 1,1,2
2 XN=(X2+X3)/2.0D0
YN=SIGMA(XN,Z,E,NDIM,L,IS,CRE,EPS,VV,EV,HT,STN,HAMAL,WORK)
IN=-1
GO TO 3
1 XN=(X1+X2)/2.0D0
YN=SIGMA(XN,Z,E,NDIM,L,IS,CRE,EPS,VV,EV,HT,STN,HAMAL,WORK)
IN=1
3 IF(Y2-YN) 4,4,5
4 IF(ILK) 7,6,7
6 ILK=1
IF(IN-1) 8,9,8
9 Y1=YN
X1=XN
E1=E
GO TO 2
8 Y3=YN
X3=XN
E3=E
GO TO 1
7 IF(IN-1) 10,11,10
11 Y1=YN
X1=XN
E1=E
GO TO 12
10 Y3=YN
X3=XN
E3=E
GO TO 12
5 IF(IN-1) 13,14,13
14 Y3=Y2
X3=X2
E3=E2
Y2=YN
X2=XN
E2=E
GO TO 12
13 Y1=Y2
X1=X2
E1=E2
Y2=YN
X2=XN
E2=E
GO TO 12
17 XM=X2
YM=Y2
EM=E2
YM=SIGMA(XM,Z,EM,NDIM,L,IS,CRE,EPS,VV,EV,HT,STN,HAMAL,WORK)
WRITE(6,20) XM,YM,EM,(EV(I),I=1,NDIM)
20 FORMAT(//2X,'ALFA=',D23.16,5X,'|HTUREV|=',D23.16,5X,'ENERJI=',D23.16,5X,'EIGENVEKTOR :',//(4X,4(D23.16,2X)))
1.16//2X,'EIGENVEKTOR :',//(4X,4(D23.16,2X)))
RETURN
END

```



```

SUBROUTINE DMINVH(A,N,D)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION A(1),L(20),M(20)
D=1.0D0
DLOGD=0.0D0
NK=-N
DO 80 K=1,N
NK=NK+N
L(K)=K
M(K)=K
NK=NK+K
BIGA=A(KK)
DO 20 J=K,N
IZ=N*(J-1)
DO 20 I=K,N
IJ=IZ+1
10 IF(DABS(BIGA)-CABS(A(IJ))) 15,20,20
15 BIGA=A(IJ)
L(K)=I
M(K)=J
20 CONTINUE
J=L(K)
IF(J-K) 35,35,25
25 KI=K-N
DO 30 I=1,N
KI=KI+N
HOLD=-A(KI)
JI=KI-K+J
A(KI)=A(JI)
30 A(JI)=HOLD
35 I=M(K)
IF(I-K) 45,45,38
38 JP=N*(I-1)
DO 40 J=1,N
JK=NK+J
JI=JP+J
HOLD=-A(JK)
A(JK)=A(JI)
40 A(JI)=HOLD
45 IF(BIGA) 48,46,48
46 D=0.0D0
RETURN
48 CONTINUE
DO 55 I=1,N
IF(I-K) 50,55,50
50 IK=NK+I
A(IK)=A(IK)/(-BIGA)
55 CONTINUE
DO 65 I=1,N
IK=NK+I
HOLD=A(IK)
IJ=I-N
DO 65 J=1,N
IJ=IJ+N
IF(I-K) 60,65,60
60 IF(J-K) 62,65,62
62 KJ=IJ-I+K
A(IJ)=HOLD*A(KJ)+A(IJ)
65 CONTINUE
KJ=K-N
DO 75 J=1,N
KJ=KJ+N
IF(J-K) 70,75,70
70 A(KJ)=A(KJ)/BIGA
75 CONTINUE
DLOGD=DLOGD+DLOG10(CABS(BIGA))
A(KK)=1.0D0/BIGA
80 CONTINUE
D=DLOGD
K=N
100 K=K-1
IF(K) 150,150,105
105 I=L(K)
IF(I-K) 120,120,108
108 JQ=N*(K-1)
JR=N*(I-1)

```

```

      DO 110 J=1,N
      JK=JQ+J
      HOLD=A(JK)
      JI=JR+J
      A(JK)=-A(JI)
110   A(JI)=HOLD
120   J=M(K)
      IF(J-K) 100,100,125
125   KI=K-N
      DO 130 I=1,N
      KI=KI+N
      HOLD=A(KI)
      JI=KI-K+J
      A(KI)=-A(JI)
130   A(JI)=HOLD
      GO TO 100
150   RETURN
      END

```

JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
                  SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOCEDIT,ID,NOMXREF
SUBROUTINE POWER(A,S,EV,V,OZ,NDIM,PREC)
REAL*8 A(1),S(1),EV(1),V(1),OZ,OLDOZ
REAL*4 PREC
ITER=0
1   I=0
   DO 10 M=1,NDIM
   I=M+1
10  EV(M)=S(I)*V(M)
   I=0
   DO 100 K=2,NDIM
   I=I+1
   KML=K-1
   DO 100 L=1,KML
   I=I+1
   EV(K)=S(I)*V(L)+EV(K)
100  EV(L)=S(I)*V(K)+EV(L)
101  V(I)=EV(I)
   I=0
   DO 20 M=1,NDIM
   I=M+1
20  EV(M)=A(I)*V(M)
   I=0
   DO 200 K=2,NDIM
   I=I+1
   KML=K-1
   DO 200 L=1,KML
   I=I+1
   EV(K)=A(I)*V(L)+EV(K)
200  EV(L)=A(I)*V(K)+EV(L)
   OZ=EV(1)
   V(1)=1.000
   ITER=ITER+1
   DO 300 JJ=2,NDIM
300  V(JJ)=EV(JJ)/OZ
      IF(ITER-1) 11,11,12
12   IF(DABS((OZ/OLDOZ)-1.000).LE.PREC) GO TO 1000
11   OLDOZ=OZ
      GO TO 1
1000 WRITE(6,1111) ITER,PREC
1111 FORMAT(/2X,'POWER CONVERGED'   ***  ITER=',I4,10X,'PRECISION=',E15
1.7)
   DO 400 JJ=1,NDIM
400  EV(JJ)=V(JJ)
      RETURN
      END

```

```

REAL FUNCTION SN*8(L,IS,ALFA,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
SN=0.000
DELTA1=DELTA(L1,LU1)*DELTA(L2,LU2)
IF(DELTA1) 50,60,50
50 D1=RI1(0,0,ALFA,N1,L1,NU1,LU1)
D2=RI4(0,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
SN=SN+D1*D2
60 DELTA2=DELTA(L2,LU1)*DELTA(L1,LU2)
IF(DELTA2) 70,80,70
70 D3=RI2(0,0,ALFA,N1,L1,NU2,LU2)
D4=RI3(0,0,ALFA,N2,L2,NU1,LU1)
SN=SN+DFLOAT((-1)**(L1+L2-L+IS))*D3*D4
80 SN=2.000*SN
RETURN
END

```

JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NODEDIT,ID,NOXRFF
REAL FUNCTION TN*8(L,IS,ALFA,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
TN=0.000
DELTA1=DELTA(L1,LU1)*DELTA(L2,LU2)
IF(DELTA1) 40,50,40
40 C1=RTI1(0,0,ALFA,N1,L1,NU1,LU1)
C2=RI4(0,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
C3=RI1(0,0,ALFA,N1,L1,NU1,LU1)
C4=RTI4(0,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
TN=TN+C1*C2+C3*C4
50 DELTA2=DELTA(L2,LU1)*DELTA(L1,LU2)
IF(DELTA2) 60,70,60
60 C5=RTI2(0,0,ALFA,N1,L1,NU2,LU2)
C6=RI3(0,0,ALFA,N2,L2,NU1,LU1)
C7=RI2(0,0,ALFA,N1,L1,NU2,LU2)
C8=RTI3(0,0,ALFA,N2,L2,NU1,LU1)
TN=TN+DFLOAT((-1)**(L1+L2-L+IS))*(C5*C6+C7*C8)
70 TN=2.000*TN
RETURN
END

```

JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NODEDIT,ID,NOXRFF
REAL FUNCTION RH*8(E,Z,L,IS,ALFA,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
RH=0.000
DELTA1=DELTA(L1,LU1)*DELTA(L2,LU2)
IF(DELTA1) 20,30,20
20 A1=RI4(0,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
A2=RI1(0,0,ALFA,N1,L1,NU1,LU1)
A3=RI1(-1,0,ALFA,N1,L1,NU1,LU1)
A4=RI4(-1,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
RH=RH+2.000*E*A1*A2+2.000*(Z-DFLOAT(NU1)*ALFA)*A1*A3+2.000*(Z-DFL
1AT(NU2)*DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA))*A2*A4
30 DELTA2=DELTA(L1,LU2)*DELTA(L2,LU1)
IF(DELTA2) 40,50,40
40 A5=RI2(0,0,ALFA,N1,L1,NU2,LU2)
A6=RI3(0,0,ALFA,N2,L2,NU1,LU1)
A7=RI3(-1,0,ALFA,N2,L2,NU1,LU1)
A8=RI2(-1,0,ALFA,N1,L1,NU2,LU2)
RH=RH+DFLOAT((-1)**(L1+L2-L+IS))*(2.000*E*A5*A6+2.000*(Z-DFL
11)*ALFA)*A5*A7+2.000*(Z-DFLOAT(NU2)*DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA))*A6*
18)
50 RETURN
END

```

JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION TH*8(E,Z,L,IS,ALFA,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
TH=0.000
DELTA1=DELTA(L1,LU1)*DELTA(L2,LU2)
10 IF(DELTA1) 20,30,20
20 A1=RTI4(0,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
A2=RI1(0,0,ALFA,N1,L1,NU1,LU1)
A3=RI4(0,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
A4=RTI1(0,0,ALFA,N1,L1,NU1,LU1)
A5=RI1(-1,0,ALFA,N1,L1,NU1,LU1)
A6=RTI1(-1,0,ALFA,N1,L1,NU1,LU1)
A7=RI4(-1,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
A8=RTI4(-1,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
TH=TH+2.000*(A1*A2+A3*A4)-2.000*DFLOAT(NU1)*A3*A5+2.000*(Z-DFLOAT(NU1)*ALFA)*(A1*A5+A3*A6)+2.000*ALFA*DFLOAT(NU2)*A2*A7/DSQRT(2.000*(E-ALFA*ALFA))+2.000*(Z-DFLOAT(NU2)*DSQRT(2.000*(E-ALFA*ALFA)))*(A4+A7+A2*A8)
30 DELTA2=DELTA(L1,LU2)*DELTA(L2,LU1)
40 IF(DELTA2) 40,50,40
40 A9=RTI2(0,0,ALFA,N1,L1,NU2,LU2)
A10=RI3(0,0,ALFA,N2,L2,NU1,LU1)
A11=RI2(0,0,ALFA,N1,L1,NU2,LU2)
A12=RTI3(0,0,ALFA,N2,L2,NU1,LU1)
A13=RI3(-1,0,ALFA,N2,L2,NU1,LU1)
A14=RTI3(-1,0,ALFA,N2,L2,NU1,LU1)
A15=RI2(-1,0,ALFA,N1,L1,NU2,LU2)
A16=RTI2(-1,0,ALFA,N1,L1,NU2,LU2)
TH=TH+DFLOAT((-1)**(L1+L2-L+IS))*(E*(A9*A10+A11*A12)-DFLOAT(NU1)*A11*A13+(Z-DFLOAT(NU1)*ALFA)*(A9*A13+A11*A14)+ALFA*DFLOAT(NU2)*A10+2*A15/DSQRT(2.000*(E-ALFA*ALFA))+(Z-DFLOAT(NU2)*DSQRT(2.000*(E-ALFA*ALFA)))*(A12*A15+A10*A16))*2.000
50 CONTINUE
RETURN
END

```

JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION H12*8(ALFA,L,IS,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
CALL LAMDA(L1,LU1,L2,LU2,LAMMIN,LAMMAX)
10 IF(LAMMIN) 55,50,55
50 LAMMI=LAMMIN+1
LAMMA=LAMMAX+1
GO TO 60
55 LAMMI=LAMMIN
LAMMA=LAMMAX
60 H12=0.000
DO 100 LAM=LAMMI,LAMMA
IF(LAMMIN) 80,70,80
70 ILAM=LAM-1
GO TO 90
80 ILAM=LAM
90 B1=FLAM(ILAM,L,L1,L2,LU1,LU2)
B2=FLAM(ILAM,L,L2,L1,LU1,LU2)
B3=RK(ILAM,1,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2,ALFA)
B4=RK(ILAM,1,N2,L2,N1,L1,NU2,LU2,NU1,LU1,ALFA)
B5=RK(ILAM,1,N2,L2,N1,L1,NU1,LU1,NU2,LU2,ALFA)
B6=RK(ILAM,1,N1,L1,N2,L2,NU2,LU2,NU1,LU1,ALFA)
100 H12=H12+B1*(B3+B4)+DFLOAT((-1)**(L1+L2-L+IS))*B2*(B5+B6)
RETURN
END

```

(JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NXXREF
REAL FUNCTION TH12*8(ALFA,L,IS,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
CALL LAMDA(L1,LU1,L2,LU2,LAMMIN,LAMMAX)
IF(LAMMIN) 55,50,55
50 LAMMI=LAMMIN+1
   LAMMA=LAMMAX+1
   GO TO 60
55 LAMMI=LAMMIN
   LAMMA=LAMMAX
60 TH12=0.000
   DO 100 LAM=LAMMI,LAMMA
   IF(LAMMIN) 80,70,80
70 ILAM=LAM-1
   GO TO 90
80 ILAM=LAM
90 B1=FLAM(ILAM,L,L1,L2,LU1,LU2)
   B2=FLAM(ILAM,L,L2,L1,LU1,LU2)
   B3=TK(ILAM,1,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2,ALFA)
   B4=TK(ILAM,1,N2,L2,N1,L1,NU2,LU2,NU1,LU1,ALFA)
   B5=TK(ILAM,1,N2,L2,N1,L1,NU1,LU1,NU2,LU2,ALFA)
   B6=TK(ILAM,1,N1,L1,N2,L2,NU2,LU2,NU1,LU1,ALFA)
100 TH12=TH12+B1*(B3+B4)+DFLOAT((-1)**(L1+L2-L+IS))*B2*(B5+B6)
   TH12=-2.000*TH12
   RETURN
END

```

(JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NXXREF
REAL FUNCTION RK*8(K,N,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2,ALFA)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /GAMA/ GA(40)
A1=FUN(N1,L1,NU1,LU1)/(2.000*(2.000*ALFA)**K)
IKN=-K-N
A4=RI4(IKN,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
TOP1=0.000
L1A1=L1+1
DO 100 IQ=L1A1,N1
A2=DFLOAT((-1)**IQ)/G1(IQ,N1,L1)
TOP2=0.000
LU1A1=LU1+1
DO 200 JQ=LU1A1,NU1
A3=DFLOAT((-1)**JQ)*G2(IQ,JQ,K,NU1,LU1)
TOP3=0.000
KQQ=K+IQ+JQ+1
DO 300 IP1=1,KQQ
IP=IP1-1
IPK=IP-K-N
ALFA2=2.000*ALFA
A5=RI40(IPK,ALFA2,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
A6=(2.000*ALFA)**IP*A5/GA(IP+1)
300 TOP3=TOP3+A6
200 TOP2=TOP2+A3*(A4-TOP3)
100 TOP1=TOP1+A2*TOP2
RK=A1*TOP1
RETURN
END

```



JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE, EBCDIC, NOLIST, NODECK, LOAD, NOMAP, NOEDIT, ID, NOXREF
REAL FUNCTION TK*8(K,N,N1,L1,N2,L2,NU1,LU1,NU2,LU2,ALFA)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /GAMA/ GA(40)
TK=0.000
F=FUN(N1,L1,NU1,LU1)
L1A1=L1+1
DO 100 IQ=L1A1,N1
P1=DFLOAT((-1)**IQ)/G1(IQ,N1,L1)
LU1A1=LU1+1
DO 200 JQ=LU1A1,NU1
P2=DFLOAT((-1)**JQ)*G2(IQ,JQ,K,NU1,LU1)
KN=-K-N
P3=RTI4(KN,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
P4=RI4(KN,0,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
KQQ=K+IQ+JQ+1
DO 300 IP1=1,KQQ
IP=IP1-1
IPK=IP+KN
ALFA2=2.000*ALFA
P5=RI4(IPK,ALFA2,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
P6=RTI4(IPK,ALFA2,ALFA,N2,L2,NU2,LU2)
300 TK=TK+(2.000*ALFA)**IP*(DFLOAT(K-IP)*P5/ALFA-P6)/GA(IP+1)
TK=TK+P3-P4*DFLOAT(K)/ALFA
200 TK=TK*P2
100 TK=TK*P1
TK=TK*F/(2.000*(2.000*ALFA)**K)
RETURN
END

```

```

SOURCE, EBCDIC, NOLIST, NODECK, LOAD, NOMAP, NOEDIT, ID, NOXREF
REAL FUNCTION RI1*8(IP,IG,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
A10=(2.000*ALFA+DFLOAT(IG))**(IP+1)
A1=FUN(N,L,NU,LU)*ALFA/A10
TOP1=0.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A2=(-2.000*ALFA/(2.000*ALFA+DFLOAT(IG)))*IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=0.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A3=(-2.000*ALFA/(2.000*ALFA+DFLOAT(IG)))*JQ*G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)
200 TOP2=TOP2+A3
100 TOP1=TOP1+A2*TOP2
RI1=A1*TOP1
RETURN
END

```

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE, EBCDIC, NOLIST, NODECK, LOAD, NOMAP, NOEDIT, ID, NOXREF
REAL FUNCTION RI2*8(IP,IG,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /EN/ E
A1=DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA)
A2=FUN(N,L,NU,LU)*DSQRT(ALFA*A1)/(ALFA+A1+DFLOAT(IG))**(IP+1)
TOP1=0.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A3=(-2.000*ALFA/(ALFA+A1+DFLOAT(IG)))*IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=0.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A4=G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)*(-2.000*A1/(ALFA+A1+DFLOAT(IG)))*JQ
200 TOP2=TOP2+A4
100 TOP1=TOP1+A3*TOP2
RI2=A2*TOP1
RETURN
END

```

JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
                    SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NODEDIT,ID,NOMXREF
REAL FUNCTION RI3*8(IP,IG,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /EN/ E
A1=DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA)
A2=FUN(N,L,NU,LU)*DSQRT(ALFA*A1)/(ALFA+A1+DFLOAT(IG))**(IP+1)
TOP1=0.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A3=(-2.000*A1/(ALFA+A1+DFLOAT(IG)))*IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=0.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A4=(-2.000*ALFA/(ALFA+A1+DFLOAT(IG)))*JQ*G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)
200 TOP2=TOP2+A4
100 TOP1=TOP1+A3*TOP2
RI3=A2*TOP1
RETURN
END

```

JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
                    SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NODEDIT,ID,NOMXREF
REAL FUNCTION RI4*8(IP,IG,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /EN/ E
A1=DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA)
A10=(DFLOAT(IG)+2.000*A1)**(IP+1)
A2=FUN(N,L,NU,LU)*A1/A10
TOP1=0.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A3=(-2.000*A1/(DFLOAT(IG)+2.000*A1))*IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=0.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A4=(-2.000*A1/(DFLOAT(IG)+2.000*A1))*JQ*G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)
200 TOP2=TOP2+A4
100 TOP1=TOP1+A3*TOP2
RI4=A2*TOP1
RETURN
END

```

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
                    SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NODEDIT,ID,NOMXREF
REAL FUNCTION RI40*8(IP,G,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /EN/ E
A1=DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA)
A2=FUN(N,L,NU,LU)*A1/(G+2.000*A1)**(IP+1)
TOP1=0.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A3=(-2.000*A1/(G+2.000*A1))*IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=0.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A4=(-2.000*A1/(G+2.000*A1))*JQ*G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)
200 TOP2=TOP2+A4
100 TOP1=TOP1+A3*TOP2
RI40=A2*TOP1
RETURN
END

```

JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
                    SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NODEDIT,ID,NXXREF
REAL FUNCTION RTI1*8(IP,IG,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
A1=FUN(N,L,NU,LU)/(2.000*ALFA+DFLOAT(IG))**(IP+2)
TOP1=0.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A2=(-2.000*ALFA/(2.000*ALFA+DFLOAT(IG)))*IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=0.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A3=(-2.000*ALFA/(2.000*ALFA+DFLOAT(IG)))*JQ*(DFLOAT(IG*(IQ+JQ+1))
1-2.000*ALFA*DFLOAT(IP))*G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)
200 TOP2=TOP2+A3
100 TOP1=TOP1+A2*TOP2
RTI1=A1*TOP1
RETURN
END

```

JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
                    SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NODEDIT,ID,NXXREF
REAL FUNCTION RTI2*8(IP,IG,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /EN/ E
A1=DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA)
A2=ALFA+A1+DFLOAT(IG)
A3=DSQRT(A1)*FUN(N,L,NU,LU)/A2**(IP+2)
TOP1=0.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A4=(-2.000*ALFA/A2)*IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=0.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A5=(-2.000*A1/A2)*JQ*G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)
A6=A2*((DFLOAT(IQ)+0.5000)/DSQRT(ALFA)-(DFLOAT(JQ)+0.5000)*ALFA*
1QRT(ALFA)/(A1*A1))-DFLOAT(IP+IQ+JQ+1)*DSQRT(ALFA)*(1.000-ALFA/A1)
200 TOP2=TOP2+A5*A6
100 TOP1=TOP1+A4*TOP2
RTI2=A3*TOP1
RETURN
END

```

JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
                    SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NODEDIT,ID,NXXREF
REAL FUNCTION RTI3*8(IP,IG,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /EN/ E
A1=DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA)
A2=ALFA+A1+DFLOAT(IG)
A3=DSQRT(A1)*FUN(N,L,NU,LU)/A2**(IP+2)
TOP1=0.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A4=(-2.000*A1/A2)*IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=0.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A5=(-2.000*ALFA/A2)*JQ*G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)
A6=A2*((DFLOAT(JQ)+0.5000)/DSQRT(ALFA)-(DFLOAT(IQ)+0.5000)*ALFA*
1QRT(ALFA)/(A1*A1))-DFLOAT(IP+IQ+JQ+1)*DSQRT(ALFA)*(1.000-ALFA/A1)
200 TOP2=TOP2+A5*A6
100 TOP1=TOP1+A4*TOP2
RTI3=A3*TOP1
RETURN
END

```



JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION RTI4*8(IP,IG,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /EN/ E
A1=DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA)
A2=-2.000*A1/(DFLOAT(IG)+2.000*A1)
A3=ALFA*FUN(N,L,NU,LU)/(DFLOAT(IG)+2.000*A1)**(IP+2)
TOP1=C.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A4=A2**IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=C.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A5=A2**JQ*G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)
A6=DFLOAT(2*(IP+IQ+JQ+1))-DFLOAT(IQ+JQ+1)*(DFLOAT(IG)+2.000*A1)/A1
200 TOP2=TOP2+A5*A6
100 TOP1=TOP1+A4*TOP2
RTI4=A3*TOP1
RETURN
END

```

```

FFECT* NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
FFECT* SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
SOURCE STATEMENTS = 20 ,PROGRAM SIZE = 1122

```

JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

MPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION RTI40(IP,G,ALFA,N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /EN/ E
A1=DSQRT(2.000*E-ALFA*ALFA)
A2=-2.000*A1/(G+2.000*A1)
A3=ALFA*FUN(N,L,NU,LU)/(G+2.000*A1)**(IP+2)
TOP1=C.000
LA1=L+1
DO 100 IQ=LA1,N
A4=A2**IQ/G1(IQ,N,L)
TOP2=C.000
LUA1=LU+1
DO 200 JQ=LUA1,NU
A5=A2**JQ*G2(IQ,JQ,IP,NU,LU)
A6=DFLOAT(2*(IP+IQ+JQ+1))-DFLOAT(IQ+JQ+1)*(G+2.000*A1)/A1
200 TOP2=TOP2+A5*A6
100 TOP1=TOP1+A4*TOP2
RTI4=A3*TOP1
RETURN
END

```

```

FFECT* NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
FFECT* SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
SOURCE STATEMENTS = 20 ,PROGRAM SIZE = 1074

```

NO DIAGNOSTICS GENERATED

COMPILATION *****

360K BYTES OF CTS

(JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION CLEBG*8(I,J,L)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION KA(3)
COMMON /GAMA/ GA(40)
KA(1)=I+J-L
KA(2)=I
KA(3)=J
KMAX=KA(1)
DO 10 M=2,3
IF(KA(M).LE.KMAX) KMAX=KA(M)
10 CONTINUE
K1=I+J-L+1
K2=L+I-J+1
K3=L+J-I+1
IF((K1.LE.0).OR.(K2.LE.0).OR.(K3.LE.0)) GO TO 20
CB=DSQRT(DFLOAT(2*L+1)*GA(I+1)*GA(I+1)*GA(J+1)*GA(J+1)*GA(L+1)*GA
1 L+1)*GA(I+J-L+1)*GA(L+I-J+1)*GA(L+J-I+1)/GA(I+J+L+2))
CL=0.0D0
KMAXA1=KMAX+1
DO 100 IK=1,KMAXA1
K=IK-1
I1=I+J-L-K+1
I2=I-K+1
I3=J-K+1
I4=L-J+K+1
I5=L-I+K+1
IF((I1.LE.0).OR.(I2.LE.0).OR.(I3.LE.0).OR.(I4.LE.0).OR.(I5.LE.0))
CGO TO 100
CL=CL+DFLOAT((-1)**K)/(GA(K+1)*GA(I1)*GA(I2)*GA(I3)*GA(I4)*GA(I5
100 CONTINUE
CLEBG=CB*CL
RETURN
200 CLEBG=0.0D0
RETURN
END

```

EFFECT* NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,

EFFECT* SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF

SOURCE STATEMENTS = 36 ,PROGRAM SIZE = 1194

NO DIAGNOSTICS GENERATED

IF COMPILATION *****

356K BYTES OF C



(JAN 73)

75/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=000K,
                  SOURCE,FBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION RACAH*8(L1,L2,L3,L4,L5,L6)
IMPLICIT REAL*8(A-H,I-Z)
DIMENSION KA(5)
COMMON /GAMA/ GA(40)
KA(1)=L1+L2-L5
KA(2)=L3+L4-L5
KA(3)=L1+L3-L6
KA(4)=L2+L4-L6
KA(5)=L1+L2+L3+L4+1
KMAX=KA(1)
DO 1 I=2,5
  IF(KA(I).LE.KMAX) KMAX=KA(I)
1 CONTINUE
K1=L1+L2-L5+1
K2=L1-L2+L5+1
K3=L2-L1+L5+1
K4=L3+L4-L5+1
K5=L3-L4+L5+1
K6=L4-L3+L5+1
K7=L1+L3-L6+1
K8=L1-L3+L6+1
K9=L3-L1+L6+1
K10=L2+L4-L6+1
K11=L2-L4+L6+1
K12=L4-L2+L6+1
IF((K1.LE.0).OR.(K2.LE.0).OR.(K3.LE.0).OR.(K4.LE.0).OR.(K5.LE.0).
* (K6.LE.0).OR.(K7.LE.0).OR.(K8.LE.0).OR.(K9.LE.0).OR.(K10.LE.0).
* (K11.LE.0).OR.(K12.LE.0)) GO TO 200
R1=GA(L1+L2-L5+1)*GA(L1-L2+L5+1)*GA(L2-L1+L5+1)/GA(L1+L2+L5+2)
R2=GA(L3+L4-L5+1)*GA(L3-L4+L5+1)*GA(L4-L3+L5+1)/GA(L3+L4+L5+2)
R3=GA(L1+L3-L6+1)*GA(L1-L3+L6+1)*GA(L3-L1+L6+1)/GA(L1+L3+L6+2)
R4=GA(L2+L4-L6+1)*GA(L2-L4+L6+1)*GA(L4-L2+L6+1)/GA(L2+L4+L6+2)
TOPLAM=0.0D0
KMAXA1=KMAX+1
DO 100 IK=1,KMAXA1
  K=IK-1
  I1=KA(5)+1-K
  I2=KA(1)+1-K
  I3=KA(2)+1-K
  I4=KA(3)+1-K
  I5=KA(4)+1-K
  I6=L5+L6-L1-L4+K+1
  I7=L5+L6-L2-L3+K+1
  IF((I1.LE.0).OR.(I2.LE.0).OR.(I3.LE.0).OR.(I4.LE.0).OR.(I5.LE.0).
1 .OR.(I6.LE.0).OR.(I7.LE.0)) GO TO 100
  R5=GA(I1)/(GA(K+1)*GA(I2)*GA(I3)*GA(I4))
  R6=GA(I5)*GA(I6)*GA(I7)
  TOPLAM=TOPLAM+DFLOAT((-1)**K)*R5/R6
100 CONTINUE
RACAH=DSQRT(R1*R2*R3*R4)*TOPLAM
RETURN
200 RACAH=0.0D0
RETURN
END

```

```

EFFECT* NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=000K,
EFFECT* SOURCE,FBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
SOURCE STATEMENTS = 54 ,PROGRAM SIZE = 1990
NO DIAGNOSTICS GENERATED
F COMPILATION *****

```

348K BYTES OF C



(JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION FLAM*8(LA,L,L1,L2,LU1,LU2)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
FLAM=DFLOAT((-1)**(L1+LU1-L))*DSQRT(DFLOAT((2*L1+1)*(2*L2+1)*(2*
11+1)*(2*LU2+1)))/DFLOAT(2*LA+1)
FLAM=FLAM*CLEBG(L1,LU1,LA)*CLEBG(L2,LU2,LA)*RACAH(L1,L2,LU1,LU2,
1LA)
RETURN
END

```

(JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION G1*8(IQ,N,L)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /GAMA/ GA(40)
G1=GA(L+IQ+1)*GA(IQ-L)*GA(N-IQ+1)
RETURN
END

```

(JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION G2*8(IQ,JQ,IP,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /GAMA/ GA(40)
JEU=JQ-LU
NQ=NU-JQ+1
IF((JEU.LE.0).OR.(NQ.LE.0)) GO TO 74
G2=GA(IQ+JQ+IP+1)/(GA(JQ+LU+1)*GA(JQ-LU)*GA(NU-JQ+1))
RETURN
74 G2=0
RETURN
END

```

(JAN 73)

OS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NOXREF
REAL FUNCTION FUN*8(N,L,NU,LU)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /GAMA/ GA(40)
FUN=DFLOAT((-1)**(L+LU))*DSQRT(GA(N+L+1)*GA(N-L)*GA(NU+LU+1)*GA(
1-LU)/DFLOAT(N*NU))
RETURN
END

```

JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=000K,
                    SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NXREF
SUBROUTINE LAMDA(L1,LU1,L2,LU2,LAMMIN,LAMMAX)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
N1=IABS(L1-LU1)
N2=IABS(L2-LU2)
N3=L1+LU1
N4=L2+LU2
IF(N1-N2) 5,6,6
5 LAMMIN=N1
GO TO 7
6 LAMMIN=N2
7 IF(N3-N4) 8,9,9
8 LAMMAX=N4
RETURN
9 LAMMAX=N3
RETURN
END

```

JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
                    SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NXREF
REAL FUNCTION DELTA*8(I,J)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
IF(I-J) 1,2,1
1 DELTA=0.000
RETURN
2 DELTA=1.000
RETURN
END

```

JAN 73)

DS/360 FORTRAN H

```

COMPILER OPTIONS - NAME= MAIN,OPT=02,LINECNT=80,SIZE=0000K,
                    SOURCE,EBCDIC,NOLIST,NODECK,LOAD,NOMAP,NOEDIT,ID,NXREF
SUBROUTINE STATE(N1,L1,N2,L2,L1MAX,N1MAX,N2MAX,M)
COMMON /ARRAY/ NN1(20),LL1(20),NN2(20),LL2(20)
M=0
K=0
L1MAX1=L1MAX+1
DO 1 J=1,L1MAX1
IL1=L1+K
IL2=L2+K
K=K+1
IF(N2-IL2) 20,20,21
2 N2=N2+1
21 IF(N1-IL1) 22,22,23
22 N1=N1+1
23 CONTINUE
DO 10 IN1=N1,N1MAX
DO 10 IN2=N2,N2MAX
M=M+1
NN1(M)=IN1
LL1(M)=IL1
NN2(M)=IN2
LL2(M)=IL2
10 CONTINUE
RETURN
END

```

EK : II

TEZDE KULLANILAN TÜRKÇE ÜZERİNE

Türkçe'nin hızlı bir değişme halinde olmasının ortaya koyduğu sıkıntıların fizikçiler için de var olduğu, hazırlanan tezin meslektaşlarca yapılan eleştirilerinden de açıkça anlaşılmış ve bu Ek'in hazırlanmasına sebeb olmuştur.

Tezde kullanılan terimlerin büyük çoğunluğu, araştırmacının lisans ve doktora derslerini dinlediği hocalardan ve Doç. Dr. F. Bayrakçıken'in hazırlamış olduğu Uluslararası Spetroskopi Sözlüğü'nün "Türkçe" bölümünden alınmışlardır. Rezonans Olaylarına ait terimler genellikle Doç. Dr. İ. Üksüz tarafından kullanılanlardır. Az sayıda terim ise Türkçe'de ilk defa araştırmacı tarafından kullanılmış olma izlenimi vermektedirler. Bunlara örnek olarak 'Birrenk', 'Birrenkleştirici', 'Üzuyumlu' ve 'Eniyi - leştirme' vs. gösterilebilir. Bu şekilde yenilik ve değişiklik taşıdığı sanılan bazı kelimeler harf sırası ve İngilizce karşılıklarıyla aşağıda verilmişlerdir. Genel Türkçe açısından ise, kullanılan dilin 30-40 yaşlarındaki kuşağın zorlamasız olarak konuştukları kelimeleri yansıtmaya çalışılmıştır.



A	Atom Birimleri, a.b,	: Atomic Units, a.u .
	Atılan Elektron	: Ejected Electron
	Altprogram	: Subprogram
	Antisimetrikleştirme	: Antisymmetrization
B	Birrenk	: Monokromatik, Monochromatic
	Birrenkleştirici	: Monochromator
	Bindirme Matrisi	: Overlap Matrix
	Birle(n)me	: Normalization (to unity)
	Bozunma	: Decay
	Bağlı Hal	: Bound State
Ç	Çokelektron Teorisi	: Many-electron Theory
D	Değişim	: Variation
	Duraklı Hal	: Stationary State
	Doğrudanlık	: Doğrudan olma, dolaylı olmama
	Dejenerelik	: Yozlaşma, Degeneration
	Derle(n)me	: Compilation
	Düzeltilmiş Çekirdek Yükü	: Modified Nuclear Charge
E	Eşlenme	: Coupling
	Engel Kuyruğu	: Barrier Tail
	Ejected Electron	: Atılan Elektron
	Eniyileştirme	: Optimization
G	Gözlenebilir	: Observable
	Geçiş İhtimali	: Transition Probability
	Genlik	: Amplitude



H	Hal	: State, Durum
	H-F	: Hartree-Fock
	Hakim Konum	: Dominant Configuration
I, I	İzafi	: Relativistik
	İzafi Olmayan	: Nonrelativistik
	İşlemci	: Operator
	İşınımsız, İşımasız	: Radiationless
K	Kendiliğinden İyonlaşma	: Autoionization
	Kendiliğinden İyonlaşan Hal	: Autoionizing State
	Konum Etkileşmesi	: Configuration Interaction
	Kesikli Hal	: Discrete State
	Kuvvet Yöntemi	: The Power Method
	Kapalı Kabuk	: Closed Shell
	KE	: Konum Etkileşmesi
	Kısmi Dalga	: Partial Wave
	Kırınım	: Diffraction
	Kutuplanmış	: Polarized
	Kart Okuyucu	: Card-reader
M	Morüstü	: Ultraviolet, morötesi
	Multiplet	: Çokkatlı, Multiplet
O	Osilatör Kuvveti	: Oscillator Strength
	Özuyumlu	: Self-consistent
	Ölçekle(n)me	: Scaling
R	Rutin	: Routine

P	Perdeleme sabiti	: Screening Constant
S	Sürekli Bölge	: Continuum
	Spinyörüngemsi	: Spinorbital
	Stable	: Kararlı
	Salma	: Emission
	Soğurma	: Absorption
	Simetrisizlik	: Asymmetry
	Seviye	: Level
	Satır Basıcı	: Line Printer
T	Temel Hal	: Ground State
	Tedirgin	: Perturbed
	Tedirginlik	: Perturbation
	Tesir Kesiti	: Cross-section
	Transmission	: İletme
	Tam, Tamam	: Complete
	Tablo, dizi	: Array
0	0slü-e, e-üssü	: Exponential
V	Vurma	: Impact
Y	Yapı	: Structure
	Yörüngemsi	: Orbital
	Yaygın	: Diffuse
Z	ZKT	: Zaman Kararlılığı Teorisi



Arařtırmacı
H ü s e y i n K a r a l ' ın
Üzgeçmiři

1945 doğumlu ve Çaykara'nın Akdoğın Köyü'ndendir. Daha küçük yaşta ölen babası marangozdu. Sekiz kardeş, çiftçi olan anneleri Ayşe Karal tarafından büyütölmüştür. Arařtırmacı, köy ilkokul öğretmeni Mehmet Akçelik'e, okul dönemindeki emek ve Erzurum Yavuz Selim İlköğretmen Okulu'na girme hususundaki teşviklerinden dolayı müteşekkirdir. Buradaki beş yıllık çok yönlü bir eğitimden sonra 1964 te Ankara Yüksek Öğretmen Okulu'na seçilmiş ve Ankara Üniversitesi Fen Fakölte'sinde Fizik-Matematik lisans öğrenimi görmüştür. Orta ve yüksek tahsili süresince Milli Eğitim Bakanlığı'nın sağladığı yatılı öğrencilik imkânlarından dolayı Türk Devleti'ne minnettardır. 1970 te mezun olduđu bölümde asistanlığa başlamış ve 1971 de aynı görevle Karadeniz Teknik Üniversitesi Temel Bilimler Fakölte'si Fizik Bölümü'ne girmiştir. 1974 te K.T.Ö. adına İngiltere'ye gitmiş, orada lisan kurslarına katılmış ve Edinburgh Üniversitesi'nde doktora projesine başlamış, bu araştırmasını Orta Doğu Teknik Üniversitesi'nde, 1978 de tamamlamıştır.

Arařtırmacı evlidir ve iki çocuđu vardır.

