

173005

LİTYUM ve ÜÇ ELEKTRONLU ATOM  
İYONLARININ  $g_J$ -FAKTÖRLERİNE  
RELATİVİSTİK KÜTLE KATKISININ  
HESAPLANMASI

DOKTORA TEZİ

Abdullah GÜKEN

Temmuz 1985

GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Bu tezin Doktora tezi olarak uygun olduğunu onayla-  
rım.

  
Doç.Dr. Atilla ÖZMEN

Tez Yöneticisi

Görevli Sınav Komisyonu (Jüri)



Doç. Dr. Nevzat AKTEKİN  
.....



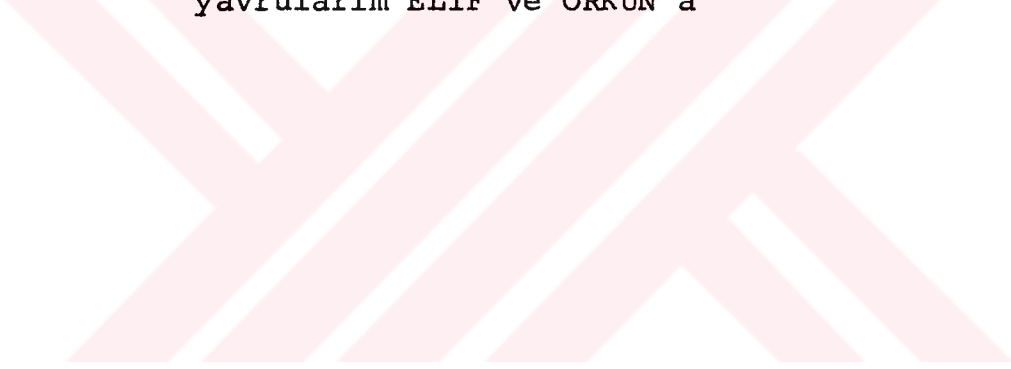
.....



  
Prof.Dr. Erol AYĞUN

Komisyon Başkanı

Kıymetli eşim SÜMER ile sevgili  
yavrularım ELİF ve ORKUN'a



## ABSTRACT

In this thesis a computer program has been developed for computing the relativistic-mass-correction to the  $g_J$  -factors of Li and Li-isoelectronic systems in their ground states, using the wave functions which are linear combinations of Hylleraas-type functions. By this program computations for Li,  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$ , and  $\text{C}^{+3}$  have been done, and the numerical values obtained for these systems have been extrapolated to get values for  $\text{N}^{+4}$  and  $\text{O}^{+5}$ .

The results found are in good agreement with the results of theoretical works which agree well with the experimental results within the error limits.

## ÖZET

Bu çalışmada Hylleraas tipi fonksiyonlardan kurulan dalga fonksiyonları kullanılarak, temel haldeki Lityum ve üç elektronlu atom iyonlarının  $g_J$ - faktörlerine relativistik kütle katkısını hesaplamak için bir bilgisayar programı geliştirilmiştir. Bu program kullanılarak  $\text{Li}$ ,  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$  için hesaplamalar yapılmış ve bu sistemler için bulunan nümerik değerler kullanılarak  $\text{N}^{+4}$  ve  $\text{O}^{+5}$  için değerler elde edilmiştir.

Bulunan sonuçlar, deney sonuçlarına hata sınırları içinde uygun  $g_J$ - faktörü veren teorik çalışma sonuçlarıyla çok iyi uyushmaktadır.

## TEŞEKKÜR

Tez konusunu saęlayan, devamlı yol gösteren ve moral destek veren kıymetli hocam Doę. Dr. Atilla ÖZMEN'e, tez çalışmalarının her aşamasındaki katkı ve yardımlarından, gösterdiği yakın dostluktan dolayı Doę. Dr. Nevzat AKTEKİN'e sonsuz şükranlarımı sunarım.

Gerekli bilgisayar programını temin ettiklerinden dolayı ODTÜ Fizik Bölümü'nden Doę. Dr. Şakir ERKOÇ ve Gazi Üniversitesi Fizik Bölümü'nden Y. Doę. Dr. Mehmet ŞİMŞEK'e, çalışma imkanı sağladıklarından dolayı ODTÜ Kimya Bölümü ve Bilgi İşlem Merkezi'ne teşekkür ederim.

## İÇİNDEKİLER

|                                                                                | <u>Sayfa</u> |
|--------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| ABSTRACT.....                                                                  | iii          |
| ÖZET.....                                                                      | iv           |
| TEŞEKKÜR.....                                                                  | v            |
| GİRİŞ.....                                                                     | 1            |
| I. TEORİ.....                                                                  | 5            |
| I.1. Bir Atomun Sabit Bir Dış Magnetik Alan-<br>la Etkileşme İşlemcisi.....    | 5            |
| I.2. Bir Atomun $g_j$ -Faktörüne Relativistik<br>Kütle Katkısı.....            | 9            |
| I.3. Lityum Atomu İçin Relativistik Kütle<br>Katkısı İşlemcisi.....            | 10           |
| I.4. Üç Elektronlu Atom İyonları İçin<br>Relativistik Kütle Katkısı İşlemcisi. | 14           |
| II. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ.....                                                  | 18           |
| II.1. Dalga Fonksiyonlarının Seçimi.....                                       | 18           |
| II.2. Relativistik Kütle Katkısı İşlemci-<br>sinin Beklenen Değeri.....        | 21           |

|                                                                      | <u>Sayfa</u> |
|----------------------------------------------------------------------|--------------|
| III. SONUÇLAR ve TARTIŞMA.....                                       | 32           |
| III.1. Dalga Fonksiyonları ve Enerjilerin<br>Yakınsaması.....        | 32           |
| III.2. $\hat{F}$ İşlemcisinin Beklenen Değerinin<br>Yakınsaması..... | 40           |
| III.3. $(1-g_{rm}/g_e)$ 'nin İncelenmesi.....                        | 48           |
| EKLER.....                                                           | 55           |
| KAYNAKLAR.....                                                       | 72           |



## GİRİŞ

Atomik landé  $g_j$ -faktörü üzerine deneysel ölçümler çekirdek hareketi ve kısmen de radyatif etkileri kapsayacak kadar hassaslaşmıştır [1-3]. Bundan dolayı teoriye dayanılarak elde edilecek hesaplama sonuçlarını deney sonuçlarıyla karşılaştırma imkânı ortaya çıkmaktadır. Hidrojene benzer sistemlerin temel halleri ile Helyum'un ilk uyarılmış  $^3S$  hali için hesaplanan değerler deneysel değerlerle çok iyi uyushmaktadır [4-8]. Elektron sayısı bakımından bunlardan sonra Li ve üç elektronlu atom iyonları gelmektedir. Li hem alkalilerin en basiti hem normal şartlar altında katı bir metal, hem de elektron sayısı bakımından bir çok özelliği değişik hesaplama yöntemleriyle bulunabilecek bir sistemdir.

Kapalı kabukları dışında tek elektrona sahip olmaları sebebiyle alkali atomların incelenmesi, çekirdeğin ve kapalı kabuk elektronlarının atomik  $g_j$ -faktörüne katkılarını görme bakımından özellikle önemlidir. Yukarıdaki katkılar ihmal edilirse, alkalilerin atomik spektrumlarının tek elektron spektrumu ile açıklanabileceği beklenir. Elektronun  $g$ -faktörü,  $g_e$ , Dirac teorisine göre, 2 olduğundan, alkali atomların  $g_j$ - faktörleri de 2 dir.

Lamb ve Retherford [9] Hidrojen, Kusch ve Foley [10] Na, In, Ga ile yaptıkları deneylerde  $g_e$  için 2 değerinden farklı sonuçlar bulmuşlardır ( $\sim 2.0023$ ). Bu farklılık elektrona bir ayırık (anomalous) magnetik moment atfederek açıklanmıştır [11].

Lityum atomunun, iç yörüngesinde (2s) iki elektron, dış yörüngesinde (1s) ise tek elektron bulunur. Bundan dolayı alkali atomların en basitidir. İlk bakışta içteki çiftlenmiş elektronlarla çekirdeğin  $g_j$ -faktörüne etkilerinin önemsiz olduğu varsayılabilir. Ancak, yapılan hesaplar [12], sadece 2s elektronlarının spinlerinden dolayı  $g_j$ -faktörü düzeltmelerine, bağlı hallerde,  $\sim 13$ 'lük bir katkının geldiğini göstermektedir. Bu, deneyle tesbit edilebilecek bir katkıdır. Li atomunun,  $g_j$ -faktörü için değişik dalga fonksiyonları ile yapılan hesaplamalar, birbirinden  $\sim 1.5$  ppm kadar farklı sonuçlar vermektedir. Deney sonuçlarıyla hesaplama sonuçları arasında  $\sim 0.35$  ppm kadar farklılık vardır [12].

Li'un  $g_j$ -faktörünün, yalnız  $\alpha^2$ ,  $\alpha^2 \frac{m}{M}$  ve  $\alpha^3$  ( $\alpha$  ince yapı sabiti) mertebesindeki terimlerin katkısını gözönüne alarak, bulunmasında kullanılmış olan değişik hesaplama yöntemleri temelde yörüngemsi yaklaşımına dayanmaktadır. Ancak incelemeler bu konuda Hylleraas tipi fonksiyonlar kullanılarak henüz hesaplamaların yapılmadığını göstermektedir.

Hylleraas [13], kendi adıyla anılan fonksiyonlarda elektronlararası uzaklığı hesaba katarak elektronların kaçınım enerjilerinin doğrudan gözönüne alınmasını sağlamıştır. Bu tip fonksiyonlar kullanılarak enerji hesaplamalarının yapılabildiği az elektronlu (He, Li, Li<sup>+</sup>, v.s.) sistemlerin pek çok özelliği için elde edilen sonuçlar Hartree-Fock (HF) ve Konumlararası Etkileşme (CI) sonuçlarından daha iyidir [14,15]. Ancak Hylleraas tipi fonksiyonlar, sistemin elektron sayısı arttıkça (Be, B, v.s.) nümerik hesaplamalarda güçlükler çıkardığından bu konuda çalışan araştırmacılar tarafından fazla çekici bulunmamaktadır. Lityumun temel hali için 45 terimli CI sonucu (-7.4771 a.b.) hassaslığında sonuç, sadece 10 Hylleraas tipi fonksiyon ihtiva eden dalga fonksiyonları ile elde edilebilmektedir [16-19]. Bundan dolayı Li ve üç elektronlu atom iyonları için Hylleraas tipi fonksiyonlar kullanarak hesaplama yapmak ortaya çıkan nümerik güçlüklerle rağmen ekonomiktir.

Bu çalışmada temel haldeki (<sup>2</sup>S) Li ile üç elektronlu atom iyonlarının dış magnetik alanla etkileşme terimlerinden biri olan relativistik kütle katkısı işlemcisi Hegstrom [20-21] tarafından verilen genel ifadeden elde edilmiş, ve bu sistemlerin g<sub>j</sub>-faktörlerine relativistik kütle katkısının Hylleraas tipi fonksiyonlar kullanılarak hesaplanması için FORTRAN IV dilinde bir bilgisayar

programı geliştirilerek hesaplamalar ODTÜ Bilgisayar Merkezindeki BORROUGHS 6900 Bilgisayarında yapılmıştır. Hesaplamalarda  $\text{Li}$ ,  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$  sistemlerinin temel hal enerjileri ile  $g_J$ -faktörlerine relativistik kütle katkılarının yakınsaması incelenmiştir.  $\text{Li}$  için kararlı enerjiyi veren dalga fonksiyonu ile elde edilen relativistik kütle katkısı değerinin deney sonuçlarına uygun  $g_J$ - faktörü veren çalışma sonuçlarıyla hata sınırları içinde uyumlu olduğu görülmüştür. Atom numarasının fonksiyonu olarak yukarıdaki sistemlerin  $g_J$ -faktörlerine relativistik kütle katkılarının değişimi incelenerek  $\text{N}^{+4}$  ve  $\text{O}^{+5}$  için bu katkıların tahmini değerleri elde edilmiştir.

## I. TEORİ

## I.1. Bir Atomun Sabit Bir Dış Magnetik Alanla Etkileşme İşlemcisi

Sabit bir dış magnetik alanla etkileşen bir atomun relativistik Hamilton işlemcisi Breit denklemi ile aşağıdaki gibi ifade edilir (tabii birimlerde,  $\hbar=c=1$ ) [20].

$$\hat{\mathcal{H}}_{lab} = \sum_i \hat{\mathcal{H}}_{(i)} + \sum_{i < j} \hat{U}_{(i,j)} \quad (1)$$

Bu denklemde toplamalar, atomu oluşturan bütün tanecikler üzerindendir.  $\hat{\mathcal{H}}_{(i)}$  ve  $\hat{U}_{(i,j)}$  şöyle tanımlanmaktadır.

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{(i)} &= \vec{\alpha}_i \cdot \vec{\pi}_i + \beta_i m_i - \kappa_i (\beta_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{H}_i - i \beta_i \vec{\alpha}_i \cdot \vec{E}_i) \\ \hat{U}_{(i,j)} &= e_i e_j r_{ij}^{-1} (1 - \frac{\vec{\alpha}_i \cdot \vec{\alpha}_j}{2} - \frac{\vec{\alpha}_i \cdot \vec{r}_{ij} \vec{\alpha}_j \cdot \vec{r}_{ij}}{2 r_{ij}^2}) \\ &+ \beta_i \beta_j \kappa_i \kappa_j [\frac{\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3 \vec{\sigma}_i \cdot \vec{r}_{ij} \vec{\sigma}_j \cdot \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^5} - \frac{8}{3} \pi \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \delta^3(\vec{r}_{ij})] \end{aligned} \quad (2)$$

$$\vec{\pi}_i = \vec{p}_i - e_i \vec{A}_i$$

$$\vec{A}_i = \vec{H} \times \frac{1}{2} \vec{r}_i$$

$$\vec{H}_i = \vec{H} + \sum_{j \neq i} \frac{e_j \vec{\alpha}_j \cdot \vec{x} \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3}$$

$$\vec{E}_i = \sum_{j \neq i} \frac{e_j \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3}$$

Yukarıdaki ifadelerde  $\vec{\pi}_i$  i-nci taneciğin mekanik momentumu,  $\vec{A}_i$  i-nci taneciğin bulunduğu noktadaki vektör potansiyeli,  $\vec{H}$  sabit dış magnetik alan,  $\vec{H}_i$  ve  $\vec{E}_i$  i-nci taneciğe etkiyen magnetik ve elektrik alanlarıdır; i-nci tanecik için  $m_i$  durgunluk kütlesi,  $e_i$  yük,  $\kappa_i$ , ayırık (anomalous) magnetik moment,  $\vec{\alpha}_i$ ,  $\beta_i$  Dirac matrisleri,  $\vec{\sigma}_i$  Pauli matrisi,  $\vec{r}_i$  ve  $\vec{p}_i$  laboratuvar referans sistemine göre pozisyon ve momentum vektörüdür;  $\vec{r}_{ij}$  i-nci ve j-inci tanecikler arasındaki uzaklıktır. Elektron, proton ve nötron için ayırık magnetik momentler sırasıyla şu değerlere sahiptir

$$\kappa_e = -(e/2m_e) (\alpha/2\pi - 0.328\alpha^2/\pi^2 + \dots)$$

$$\kappa_p = 1.793 (e/2m_p)$$

$$\kappa_n = -1.913 (e/2m_p)$$

Relativistik Hamilton işlemcisi  $\hat{\mathcal{H}}$  için laboratuvar referans sistemine göre (1) eşitliğinde verilen ifade, atomun

kütle merkezinin bu referans sistemine göre hareketini temsil eden işlemci ile taneciklerin kütle merkezine göre hareketlerini temsil eden işlemcinin toplamı şeklinde ifade edilebilir. İç koordinatlara bağlı sonuncu işlemci  $\hat{\mathcal{H}}_{i\check{c}}$  'in yaklaşık ifadesi aşağıdaki gibidir [20].

$$\hat{\mathcal{H}}_{i\check{c}} = \sum_i m_i + \sum_{j=0}^7 \hat{\mathcal{H}}_j \quad (3)$$

Bu eşitlikte  $\hat{\mathcal{H}}_0$  relativistik olmayan Hamilton işlemcisi,  $\hat{\mathcal{H}}_1$  relativistik düzeltme terimi,  $\hat{\mathcal{H}}_2$  Darwin terimi,  $\hat{\mathcal{H}}_3$  spin-yörünge çiftlenim terimi,  $\hat{\mathcal{H}}_4$  spin-diğer yörünge çiftlenim terimi,  $\hat{\mathcal{H}}_5$  relativistik kütle katkısı ve spin-dış magnetik alan çiftlenim terimi (  $\hat{\mathcal{H}}_{rm}$  ),  $\hat{\mathcal{H}}_6$  yörünge-yörünge çiftlenim terimi ve  $\hat{\mathcal{H}}_7$  spin-spin çiftlenim terimidir. (3) eşitliğinin sağ tarafındaki birinci terim sistemin değişmeyen bir özelliği olduğundan ve dış magnetik alanla etkileşmeye en önemli katkılar  $\hat{\mathcal{H}}_3$ ,  $\hat{\mathcal{H}}_4$  ve  $\hat{\mathcal{H}}_{rm}$  'den geldiğinden aşağıdaki işlemci sistemin dış magnetik alandaki iç enerjisine karşılık olan yaklaşık Hamilton işlemcisi olarak alınabilir.

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{mag} \quad (4)$$

Burada  $\hat{\mathcal{H}}_{mag}$  sistemin dış magnetik alanla etkileşmesini temsil eden işlemcidir. Yaklaşık olarak

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}} = \hat{\mathcal{H}}_3 + \hat{\mathcal{H}}_4 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{rm}} \quad (5)$$

alınmakta ve  $\hat{\mathcal{H}}_0$ 'a göre tedirginlik terimi olarak kabul edilmektedir.

$\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}}$  şu çiftlenmeleri içermektedir: (a) elektron spini-elektron yörüngesi, (b) elektron spini-başka elektron yörüngesi, (c) elektron spini-çekirdek yörüngesi, (d) elektron spini-dış magnetik alan, (e) elektron spini-elektron spini, (f) çekirdek spini-çekirdek yörüngesi, (g) çekirdek spini-elektron yörüngesi, (h) çekirdek spini-elektron spini, (i) çekirdek spini-dış magnetik alan. Bu etkileşmelerden ilk beşi atomun dış magnetik alandaki elektronik magnetik momenti ile geri kalanlar ise atom çekirdeğinin dış magnetik alandaki magnetik momenti ile ilgilidir.  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}}$ 'ın içerdiği çiftlenimlerden yukarıda bahsedilen son dört tanesi gözönüne alınmazsa,  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}}$  atomun dış magnetik alandaki elektronik magnetik momenti ile dış magnetik alanın etkileşmesini temsil eder. Atomik  $g_j$ -faktörlerinin hesaplanmasında bu şekilde tanımlanan  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}}$  işlemcisi kullanılır.



## I.2. Bir Atomun $g_j$ -Faktörüne Relativistik Kütle Katkısı

Serbest bir atomun atomik ( elektronik ) magnetik momentini

$$\vec{\mu} = g_j \mu_B \vec{J}, \quad \mu_B = \frac{e}{2m_e} \quad (6)$$

olarak tanımlanır. Bu ifadede  $g_j$  atomun atomik ( elektronik ) Landé  $g$ -faktörü,  $\vec{J}$  toplam açısal momentumu,  $\mu_B$  de Bohr magnetonudur. Bir atomun bir dış magnetik alan-daki elektronik magnetik momentinin büyüklüğü

$$\mu = - \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}} \rangle}{\partial H}, \quad H = |\vec{H}| \quad (7)$$

ifadesi ile verilir. Eğer  $H$  yeteri kadar zayıfsa ve böylece  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}}$   $H$ 'nin birinci dereceden fonksiyonu olarak alınabiliyorsa, (7) ifadesi ile verilen  $\mu$  serbest atomun magnetik momentinin büyüklüğüne,  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}}$  da dış magnetik alanla atomun, serbest iken sahip olduğu magnetik momentinden dolayı, etkileşmesine eşit olur.

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{H} \quad (8)$$

Eğer magnetik alan  $z$ -yönünde seçilirse  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}}$  için

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}} = -g_j \mu_B H J_z \quad (9)$$

ifadesi elde edilir.  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mag}}$ , (5) eşitliğinde verildiği gibi,  $\hat{\mathcal{H}}_3$ ,  $\hat{\mathcal{H}}_4$  ve  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{rm}}$  işlemcilerinin toplamı olduğundan  $g_j$  de bu işlemcilere karşılık olan katkıların toplamına eşit olur. Buna göre relativistik kütle katkısı işlemcisi  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{rm}}$  ile bu işlemciden dolayı  $g_j$ 'e gelen relativistik kütle katkısı  $g_{\text{rm}}$  arasındaki ilişki, (9) eşitliğine benzer şekilde,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{rm}} = -g_{\text{rm}} \mu_B H J_z \quad (10)$$

olur. Böylece bir atomun herhangi bir kuantum halinde iken sahip olduğu  $g_j$ -faktörüne relativistik kütle katkısı

$$g_{\text{rm}} = - \frac{\langle \hat{\mathcal{H}}_{\text{rm}} \rangle}{\mu_B H \langle J_z \rangle} \quad (11)$$

ifadesinden hesaplanabilir.

### I.3. Lityum Atomu İçin Relativistik Kütle Katkısı İşlemcisi

Sabit bir  $\vec{H}$  dış manyetik alandaki bir atom için relativistik kütle katkısı işlemcisi  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{rm}}$ 'nin açık ifadesi [20] aşağıda verilmiştir.

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{rm} = & -\sum_i g_i \mu_{oi} \vec{S}_i \cdot \vec{H} \left(1 - \frac{\pi_i^2}{2m_i^2}\right) \\ & - \sum_i \left(g_i \mu_{oi} - \frac{e_i}{m_i}\right) \frac{1}{2m_i^2} \vec{S}_i \cdot (\pi_i^2 \vec{l} - \vec{\pi}_i \vec{\pi}_i) \cdot \vec{H}\end{aligned}\quad (12)$$

Bu eşitlikte

$$g_i \mu_{oi} = 2 \left( \frac{e_i}{2m_i} + \kappa_i \right)$$

i-nci taneciğin g-faktörü,  $\mu_{oi}$  tanecik elektron ise Bohr magnetonu, çekirdek ise çekirdek magnetonu,  $\vec{S}_i$ 'de i-nci taneciğin spin işlemcisi olup diğer semboller daha önce belirtilen anlamlara sahiptir. Lityum atomu dört tanecikli bir sistem olduğundan  $\hat{\mathcal{H}}_{rm}$  için (12) eşitliğiyle verilen genel ifadedeki toplamaların üst sınırı dördüttür. Lityumun elektronik  $g_j$ -faktörüne relativistik kütle katkısını veren genel ifade (12) eşitliğindeki toplamaları elektronlar üzerinden almakla

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{rm} = & -g_e \mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{H} \left(1 - \frac{\pi_i^2}{2m^2}\right) \\ & - \frac{1}{2m^2} \left(g_e \mu_B + \frac{e}{m}\right) \sum_i \vec{S}_i \cdot (\pi_i^2 \vec{l} - \vec{\pi}_i \vec{\pi}_i) \cdot \vec{H}\end{aligned}\quad (13)$$

olarak elde edilir. Burada  $m$  elektronun kütlesi,  $e$  elektronik yüküdür. i-nci elektronun mekanik momentumu,  $\vec{\pi}_i$ , bu

elektronun çekirdeğe göre momentumu,  $\vec{p}_{i\zeta}$ , cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$\vec{\pi}_i = \frac{m}{M} \vec{K} + \vec{p}_{i\zeta} + e\vec{A}_{i\zeta} \quad (14)$$

(14) eşitliğinde M atomun kütlesi,  $\vec{K}$  da kütle merkezinin ilerleme vektörüdür. (13) eşitliğindeki  $\vec{H}$  manyetik alanı z-yönünde ve zayıf bir manyetik alan olarak alınır,  $\vec{\pi}_i$  yerine (14) eşitliğindeki ifade kullanılır, atomun hareketsiz olduğu (  $\vec{K} = \vec{0}$  ) kabul edilir ve (a) dış manyetik alan zayıf alındığından  $|\vec{A}_{i\zeta}|^2$  terimleri, (b) Li temel halde iken ( elektron konumu  $1s^2 2s$  ) elektronları s-yörüngemsilerinde olduğundan  $\vec{p}_{i\zeta} \cdot \vec{A}_{i\zeta}$  terimleri (c) elektronun kütlesi atomun kütlesine göre çok küçük olduğundan  $\frac{1}{M^2}$  li terimler ihmal edilirse, (13) eşitliği şu ifadeye dönüşür.

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{rm} = & -g_e \mu_B H \sum_i \left(1 - \frac{p_{i\zeta}^2}{2m^2}\right) S_{zi} \\ & - \frac{1}{2m^2} (g_e + 2) \mu_B \sum_i H p_{i\zeta}^2 S_{zi} - (\vec{S}_i \cdot \vec{\pi}_i) (H \pi_{zi}) \end{aligned} \quad (15)$$

Bu ifadedeki (  $\vec{S}_i \cdot \vec{\pi}_i$  ) (  $H \pi_{zi}$  ) terimi hâlâ basitleştirilebilir durumdadır.

$$(\vec{S}_i \cdot \vec{\pi}_i) (H\pi_{zi}) = H(S_{xi}\pi_{xi}\pi_{zi} + S_{yi}\pi_{yi}\pi_{zi} + S_{zi}\pi_{zi}^2)$$

yukarıdaki eşitliğin her iki tarafının beklenen değerleri alınır,

$$\begin{aligned} \langle (\vec{S}_i \cdot \vec{\pi}_i) (H\pi_{zi}) \rangle &= H (\langle S_{xi} \rangle \langle \pi_{xi}\pi_{zi} \rangle + \langle S_{yi} \rangle \langle \pi_{yi}\pi_{zi} \rangle \\ &\quad + \langle S_{zi} \rangle \langle \pi_{zi}^2 \rangle) \end{aligned}$$

elde edilir. z-yönündeki bir magnetik alan vektörü etrafında dönen spin vektörünün x-ve y-bileşenlerinin zaman ortalaması sıfırdır. Bundan dolayı

$$\langle (\vec{S}_i \cdot \vec{\pi}_i) (H\pi_{zi}) \rangle = H \langle S_{zi} \rangle \langle \pi_{zi}^2 \rangle$$

olur. Diğer yandan

$$\langle \pi_{xi}^2 \rangle = \langle \pi_{yi}^2 \rangle = \langle \pi_{zi}^2 \rangle$$

ve  $\pi_i^2 = p_{i\zeta}^2$  olduğundan

$$\langle (\vec{S}_i \cdot \vec{\pi}_i) (H\pi_{zi}) \rangle = \frac{1}{3} H \langle S_{zi} \rangle \langle p_{i\zeta}^2 \rangle$$

veya

$$(\vec{S}_i \cdot \vec{\pi}_i) (H\pi_{zi}) = \frac{1}{3} H p_{i\zeta}^2 S_{zi} \quad (16)$$

olur. (16) ifadesi (15) eşitliğinde yerine konursa, temel hâl elektron konumundaki Lityum atomunun relativistik kütle işlemcisi için

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{rm} = & -g_e \mu_B H \sum_i \left( 1 - \frac{p_{i\zeta}^2}{2m^2} \right) S_{zi} \\ & - \frac{1}{3m^2} (g_e + 2) \mu_B H \sum_i p_{i\zeta}^2 S_{zi}\end{aligned}\quad (17)$$

ifadesi elde edilir.

#### I.4. Üç Elektronlu Atom İyonları İçin Relativistik Kütle Katkısı İşlemcisi

Bir atom iyonunun i-nci taneciğinin laboratuvar referans sistemine göre mekanik momentumu aşağıdaki eşitlikte verilmektedir [20].

$$\vec{\pi}_i = \vec{p}_i - e_i [\vec{A}_i - \vec{A}(\vec{R})] - \frac{m_i}{M} \sum_j e_j \vec{A}_j \quad (18)$$

$$\vec{A}_i = \frac{1}{2} \vec{H} \times \vec{r}_i, \quad \vec{A}(\vec{R}) = \frac{1}{2} \vec{H} \times \vec{R}$$

Bu ifadede  $\vec{R}$ , kütle merkezinin laboratuvar referans sistemine göre pozisyon vektörü,  $\vec{A}(\vec{R})$  bu noktadaki vektör potansiyeli olup diğer semboller daha önce belirtilen anlamlara sahiptir. Laboratuvar referans sistemine göre i-nci taneciğin pozisyon vektörü  $\vec{r}_i$ 'nin, bu taneciğin çekirdeğe göre

pozisyon vektörü  $\vec{r}_{i\zeta}$  cinsinden ifadesi [20]

$$\vec{r}_i = \vec{R} + \vec{r}_{i\zeta} - \sum_{j \neq i} \left( \frac{m_j}{M} \right) \vec{r}_{j\zeta} \quad (19)$$

şeklindedir. (18) eşitliğindeki son toplama teriminin çekirdeğe göre ifadesi  $\vec{r}_i$  için (19) eşitliğinde verilen ifade kullanılarak bulunabilir.

$$\begin{aligned} \sum_j e_j \vec{A}_j &= \sum_j e_j \frac{1}{2} \vec{H} \times \left[ \vec{R} + \vec{r}_{i\zeta} - \sum_{i \neq j} \left( \frac{m_i}{M} \right) \vec{r}_{i\zeta} \right] \\ &= \left( \sum_j e_j \right) \vec{A}(\vec{R}) + \sum_j e_j \vec{A}_{j\zeta} - \left( \sum_j e_j \right) \sum_{i \neq j} \left( \frac{m_i}{M} \right) \vec{A}_{i\zeta} \end{aligned} \quad (20)$$

(13) eşitliğindeki relativistik kütle katkısı işlemcisi  $\hat{\mathcal{H}}_{rm}$ 'de kullanılacak olan ve (18) eşitliğinde verilen  $\vec{\pi}_i$  mekanik momentumlarının çekirdeğe göre ifadesi,  $\vec{p}_i$  yerine [20]

$$\vec{p}_i = \left( \frac{m_i}{M} \right) \vec{p} + \vec{p}_{i\zeta} ,$$

$\vec{r}_i$  yerine (19) eşitliğinde verilen ifade, son toplama terimi yerine de (20) eşitliğindeki ifade kullanılmak suretiyle

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_i = & \frac{m_i}{M} \vec{P} + \vec{p}_{i\zeta} - e_i \vec{A}_{i\zeta} + e_i \sum_{j \neq i} \frac{m_j}{M} \vec{A}_{j\zeta} \\ & - \frac{m_i}{M} \left[ \left( \sum_i e_i \right) \vec{A}(\vec{R}) + \sum_i e_i \vec{A}_{i\zeta} - \left( \sum_i e_i \right) \sum_{j \neq i} \frac{m_j}{M} \vec{A}_{j\zeta} \right] \end{aligned} \quad (21)$$

olarak elde edilir. Burada  $\vec{P}$  kütle merkezinin laboratuvar referans sistemine göre momentumudur. Referans noktası kütle merkezinde alınır (  $\vec{R} = \vec{0}$ ,  $\vec{P} = \vec{0}$  ) ve  $\vec{A}_{\zeta\zeta} = \vec{0}$  olduğu gözönünde tutulursa (21) eşitliği

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_i = & \vec{p}_{i\zeta} - e_i \vec{A}_{i\zeta} - \frac{m_i}{M} \sum_{j \neq \zeta} e_j \vec{A}_{j\zeta} \\ & + \frac{e_i}{M} \sum_{j \neq i, \zeta} m_j \vec{A}_{j\zeta} + \frac{m_i}{M^2} \left( \sum_i e_i \right) \sum_{j \neq i, \zeta} m_j \vec{A}_{j\zeta} \end{aligned} \quad (22)$$

şekline dönüşür. Bu ifadede elektron yükü (  $-e$  ) ve kütlesi (  $m$  ) kullanılıp  $\frac{m}{M^2}$ 'li terim ihmal edilirse,

$$\vec{\pi}_i = \vec{p}_{i\zeta} + e \left( 1 + \frac{m}{M} \right) \vec{A}_{i\zeta} \quad (23)$$

bulunur. Üç elektronlu atom iyonlarındaki elektronlar için elde edilen bu mekanik momentum ifadesi Lityum atomunun elektronları için (14) eşitliğinde verilen mekanik momentum ifadesi ile karşılaştırıldığında vektör potansiyelini içeren terimleri arasında (  $1 + m/M$  ) çarpanı kadar bir fark olduğu görülür. Üç elektronlu atom iyon-



larının relativistik kütle katkısı işlemcisi  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{rm}}$  için,  
 (13) eşitliğindeki  $\vec{\pi}_i$  yerine (23)'te verilen ifadesi  
 konup I.3.'te bahsedilen ihmaller yapılırsa, (17) eşit-  
 liğinin aynısı elde edilir.



## II. HESAPLAMA YÖNTEMİ

### II.1. Dalga Fonksiyonlarının Seçimi

Temel haldeki Lityum ve üç elektronlu atom iyonlarının  $g_j$ -faktörlerine relativistik kütle katkısının hesaplanabilmesi için temel hal dalga fonksiyonlarının elde edilmesi gerekir. Bu sistemlerin temel hallerini ( $^2S_{1/2}$ )  $1s^2 2s$  elektron konumu verir. Yörüngemsi yaklaşımda [22,23] bu halin dalga fonksiyonunu kurmak için tek elektron dalga fonksiyonları (orbital, yörüngemsi) kullanılır. Bu çalışmada ise dalga fonksiyonlarını kurmak için üç-elektron Hylleraas fonksiyonları kullanılmaktadır. Bir üç-elektron Hylleraas fonksiyonunun ifadesi [13]

$$\phi(i,j,k,l,m,n;\alpha,\beta,\gamma;\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3) = r_1^i r_2^j r_3^k r_{23}^l r_{13}^m r_{12}^n e^{-(\alpha r_1 + \beta r_2 + \gamma r_3)} \quad (24)$$

şeklindedir. Burada  $i,j,k$  sıfır veya pozitif tamsayılar,  $l,m,n$  en fazla bir tanesi sıfırdan farklı olmak üzere sıfır veya pozitif tamsayılar,  $\alpha,\beta,\gamma$  atomun kuantum halini veren elektron konumundaki yörüngemsilerin perdeleme parametreleri ve  $\vec{r}_i$  de  $i$ -nci elektronun çekirdeğe göre pozisyon vektörüdür.

Değişim yöntemine göre elde edilecek olan dalga fonksiyonu, üç-elektron Hylleraas fonksiyonlarının doğrusal bileşimi olan bir uzay kısmı ile bir spin kısmının çarpımı şeklinde kurulmaktadır (a.b.).

$$\Psi = \mathcal{A} [ (\sum_{\nu} C_{\nu} \phi_{\nu}) \chi ] \quad (25)$$

Bu ifadede  $\mathcal{A}$  üç-elektron antisimetrikleştirme işlemcisi,

$$\mathcal{A} = \frac{1}{\sqrt{6}} [ 1 - (12) - (13) - (23) + (123) + (321) ]$$

$C_{\nu}$ 'lar hesaplama sonucunda bulunacak olan doğrusal değişim parametreleri,  $\phi_{\nu}$ 'lar, doğrusal olmayan değişim parametrelili (a), Hylleraas fonksiyonları,

$$\phi(i,j,k,l,m,n;a;\alpha,\beta,\gamma;\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3) = r_1^i r_2^j r_3^k r_{23}^l r_{13}^m r_{12}^n e^{-a(\alpha r_1 + \beta r_2 + \gamma r_3)} \quad (26)$$

$\chi$  ise

$$\chi = \alpha(1)\beta(2)\alpha(3) - \beta(1)\alpha(2)\alpha(3) \quad (27)$$

dalga fonksiyonunun spin kısmıdır. (25) ifadesi ile verilen dalga fonksiyonu toplam spin işlemcisinin ve bu

işlemcinin z-bileşeninin, karşılıklı olarak, özdeğerleri  $\frac{\sqrt{3}}{2}$  ve  $\frac{1}{2}$  olan öz-fonksiyonudur. İncelenecek sistemlerin toplam yörünge açısal momentumları temel halde sıfır olduğundan, (25) ifadesindeki dalga fonksiyonu, aynı zamanda, toplam açısal momentum işlemcisi ile bu işlemcinin z-bileşeninin de özdeğerleri  $\frac{\sqrt{3}}{2}$  ve  $\frac{1}{2}$  olan öz-fonksiyonudur.

Antisimetrikleştirme işlemcisi uygulandığında dalga fonksiyonunun (25) de verilen ifadesi daha açık olarak

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{\nu} c_{\nu} [\chi_1(\phi_{\nu 1} + \phi_{\nu 2}) - \chi_2(\phi_{\nu 3} + \phi_{\nu 4}) - \chi_3(\phi_{\nu 5} + \phi_{\nu 6})] \quad (28)$$

şekline dönüşür. Bu eşitlikteki  $\chi_i$  ve  $\phi_{\nu i}$  ler aşağıdaki ifadeye sahiptirler

$$\chi_1 = \alpha(1)\beta(2)\alpha(3) - \beta(1)\alpha(2)\alpha(3)$$

$$\chi_2 = \alpha(1)\beta(2)\alpha(3) - \alpha(1)\alpha(2)\beta(3)$$

$$\chi_3 = \alpha(1)\alpha(2)\beta(3) - \beta(1)\alpha(2)\alpha(3)$$

$$\phi_{\nu 1} = \phi(i, j, k, l, m, n; a; \alpha, \beta, \gamma; \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$$

$$\phi_{\nu 2} = \phi(j, i, k, m, l, n; a; \beta, \alpha, \gamma; \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$$

$$\phi_{\nu 3} = \phi(k, j, i, n, m, l; a; \gamma, \beta, \alpha; \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$$

$$\phi_{\nu 4} = \phi(k, i, j, n, l, m; a; \gamma, \alpha, \beta; \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$$

(29)

$$\phi_{v5} = \phi (i,k,j,l,n,m;a;\alpha,\gamma,\beta;\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3)$$

$$\phi_{v6} = \phi (j,k,i,m,n,l;a;\beta,\gamma,\alpha;\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3)$$

Özellikleri bu kısımda belirtilen dalga fonksiyonlarının hesaplanması için, üzerinde gerekli değişiklikler yapılan, UCELAT paket programı [24] kullanılmıştır ( EK I ).

## II.2. Relativistik Kütle Katkısı İşlemcisinin Beklenen Değeri

Lityum ve üç elektronlu atom iyonlarının temel hal( $^2S_{1/2}$ )  $g_j$ -faktörlerine relativistik kütle katkısını,  $g_{rm}$ , hesaplamak için seçilen dalga fonksiyonunun toplam açısal momentum kuantum sayıları  $J = \frac{1}{2}$ ,  $m_j = \frac{1}{2}$  ve toplam spin kuantum sayıları  $S = \frac{1}{2}$ ,  $m_s = \frac{1}{2}$  dir. Böylece

$$g_{rm} = -2 \frac{\langle \hat{\mathcal{H}}_{rm} \rangle}{\mu_B H} \quad (\text{a.b.}) \quad (30)$$

olur. Dalga fonksiyonu birlenmediğinden,  $\langle \hat{\mathcal{H}}_{rm} \rangle$

$$\langle \hat{\mathcal{H}}_{rm} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{\mathcal{H}}_{rm} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (31)$$

ifadesinden bulunur.  $\hat{\mathcal{H}}_{rm}$  işlemcisinin (17) eşitliğinde

verilen ifadesi (30) eşitliğinde kullanılır ve  $g_e$  ile bölünürse,

$$\frac{g_{rm}}{g_e} = 1 - (\alpha^2 F + \frac{\alpha^3}{3\pi} F + 2 \frac{\alpha^2 m}{M} F) \quad (32)$$

eşitliği elde edilir. Bu eşitlikte

$$F = \frac{\langle \Psi | \sum_i p_i^2 S_{zi} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (33)$$

dir.

I.1'de bahsedilen  $\hat{\mathcal{H}}_{mag}$ 'ın içerdiği çiftlenimlerden elektron spini-dış magnetik alan çiftlenimi dışında kalanlar, ihmal edilirse, elektronik  $g_j$ -faktörünü veren  $\hat{\mathcal{H}}_{mag}$

$$\hat{\mathcal{H}}_{mag} \cong \hat{\mathcal{H}}_{rm} \cong -g_e \mu_B H \sum_i S_{zi}$$

alınabilir. Buna göre

$$g_j \cong g_{rm} \cong g_e$$

olur, yani bu durumda Lityum ve üç elektronlu atom iyonlarının temel hal  $g_j$ -faktörleri yaklaşık olarak  $g_{rm}$ 'ye, o da serbest elektronun  $g$ -faktörüne eşit alınabilir.

(32) eşitliğinden de görüleceği gibi  $g_{rm}$ ,  $g_e$ 'ye ilâve olarak,  $\alpha^2$  ( relativistik düzeltme ),  $\alpha^3$  ( radyatif düzeltme ) ve  $\alpha^2 \frac{m}{M}$  ( çekirdek kütle düzeltmesi ) mertebesinde terimleri içermektedir. Hesaplanması gereken bu düzeltmeler olduğundan, aşağıdaki eşitlikteki

$$1 - \frac{g_{rm}}{g_e} = \alpha^2 F + \frac{\alpha^3}{3\pi} F + 2 \frac{\alpha^2 m}{M} F \quad (34)$$

$(1 - \frac{g_{rm}}{g_e})$ 'nin değeri ile ilgilenmek daha uygundur. Bu değerin bulunması  $F$ 'nin (33) eşitliğinden hesaplanması gerektirir. (33) deki  $\Psi$  yerine (28) eşitliğinde verilen ifadesi,

$$\phi_v^A = \chi_1(\phi_{v1} + \phi_{v2}) - \chi_2(\phi_{v3} + \phi_{v4}) - \chi_3(\phi_{v5} + \phi_{v6})$$

alınarak, kullanılırsa

$$F = \frac{\langle \sum_v C_v \phi_v^A | \sum_i \nabla_i^2 S_{zi} | \sum_\mu C_\mu \phi_\mu^A \rangle}{\langle \sum_v C_v \phi_v^A | \sum_\mu C_\mu \phi_\mu^A \rangle} \quad (35)$$

bulunur. Bu ifadenin paydası, dalga fonksiyonu hesaplanırken elde edilmektedir. Böylece  $F$ 'nin hesaplanması için (35) deki ifadenin payının hesaplanması yeterlidir.

Yukarıdaki ifadenin payı aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$\langle \sum_{\nu} c_{\nu} \phi_{\nu}^{\mathcal{A}} | \sum_i \nabla_i^2 S_{zi} | \sum_{\mu} c_{\mu} \phi_{\mu}^{\mathcal{A}} \rangle = \sum_{\nu} \sum_{\mu} c_{\nu} c_{\mu} (\sum_i \langle \phi_{\nu}^{\mathcal{A}} | \nabla_i^2 S_{zi} | \phi_{\mu}^{\mathcal{A}} \rangle) \quad (36)$$

Bu eşitliğin sağındaki parantez içindeki toplam, spin işlemcilerini etki ettirdikten sonra, aşağıdaki ifadeye dönüşür.

$$\begin{aligned} \sum_i \langle \phi_{\nu}^{\mathcal{A}} | \nabla_i^2 S_{zi} | \phi_{\mu}^{\mathcal{A}} \rangle &= \langle \phi_{\nu 1} + \phi_{\nu 2} | \nabla_3^2 | \phi_{\mu 1} + \phi_{\mu 2} \rangle \\ &+ \langle \phi_{\nu 1} + \phi_{\nu 2} | -\frac{1}{2}\nabla_1^2 + \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 | \phi_{\mu 3} + \phi_{\mu 4} \rangle \\ &+ \langle \phi_{\nu 1} + \phi_{\nu 2} | \frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 | \phi_{\mu 5} + \phi_{\mu 6} \rangle \\ &+ \langle \phi_{\nu 3} + \phi_{\nu 4} | -\frac{1}{2}\nabla_1^2 + \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 | \phi_{\mu 1} + \phi_{\mu 2} \rangle \\ &+ \langle \phi_{\nu 3} + \phi_{\nu 4} | \nabla_1^2 | \phi_{\mu 3} + \phi_{\mu 4} \rangle \\ &+ \langle \phi_{\nu 3} + \phi_{\nu 4} | -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}\nabla_3^2 | \phi_{\mu 5} + \phi_{\mu 6} \rangle \\ &+ \langle \phi_{\nu 5} + \phi_{\nu 6} | \frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 | \phi_{\mu 1} + \phi_{\mu 2} \rangle \\ &+ \langle \phi_{\nu 5} + \phi_{\nu 6} | -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}\nabla_3^2 | \phi_{\mu 3} + \phi_{\mu 4} \rangle \\ &+ \langle \phi_{\nu 5} + \phi_{\nu 6} | \nabla_2^2 | \phi_{\mu 5} + \phi_{\mu 6} \rangle \end{aligned} \quad (37)$$

Eğer  $\hat{\Theta}, \hat{\Theta}_1, \hat{\Theta}_2$  ve  $\hat{\Theta}_3$  işlemcileri

$$\hat{\Theta} = \nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2$$

$$\hat{\Theta}_1 = \nabla_1^2$$



$$\hat{\Theta}_2 = \nabla_2^2$$

$$\hat{\Theta}_3 = \nabla_2^3$$

şeklinde tanımlanırsa, (37) eşitliği için şu ifade elde edilir

$$\sum_i \langle \phi_v^{\mathcal{A}} | \nabla_i^2 | \phi_\mu^{\mathcal{A}} \rangle S_{zi} =$$

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{1}{2} \right) \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Theta^{11} & \Theta^{12} & \Theta^{13} & \Theta^{14} & \Theta^{15} & \Theta^{16} \\ \Theta^{21} & \Theta^{22} & \Theta^{23} & \Theta^{24} & \Theta^{25} & \Theta^{26} \\ \Theta^{31} & \Theta^{32} & \Theta^{33} & \Theta^{34} & \Theta^{35} & \Theta^{36} \\ \Theta^{41} & \Theta^{42} & \Theta^{43} & \Theta^{44} & \Theta^{45} & \Theta^{46} \\ \Theta^{51} & \Theta^{52} & \Theta^{53} & \Theta^{54} & \Theta^{55} & \Theta^{56} \\ \Theta^{61} & \Theta^{62} & \Theta^{63} & \Theta^{64} & \Theta^{65} & \Theta^{66} \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Theta_1^{11} & \Theta_1^{12} & \Theta_1^{13} & \Theta_1^{14} & \Theta_1^{15} & \Theta_1^{16} \\ \Theta_1^{21} & \Theta_1^{22} & \Theta_1^{23} & \Theta_1^{24} & \Theta_1^{25} & \Theta_1^{26} \\ \Theta_1^{31} & \Theta_1^{32} & \Theta_1^{33} & \Theta_1^{34} & \Theta_1^{35} & \Theta_1^{36} \\ \Theta_1^{41} & \Theta_1^{42} & \Theta_1^{43} & \Theta_1^{44} & \Theta_1^{45} & \Theta_1^{46} \\ \Theta_1^{51} & \Theta_1^{52} & \Theta_1^{53} & \Theta_1^{54} & \Theta_1^{55} & \Theta_1^{56} \\ \Theta_1^{61} & \Theta_1^{62} & \Theta_1^{63} & \Theta_1^{64} & \Theta_1^{65} & \Theta_1^{66} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Theta_2^{11} & \Theta_2^{12} & \Theta_2^{13} & \Theta_2^{14} & \Theta_2^{15} & \Theta_2^{16} \\ \Theta_2^{21} & \Theta_2^{22} & \Theta_2^{23} & \Theta_2^{24} & \Theta_2^{25} & \Theta_2^{26} \\ \Theta_2^{31} & \Theta_2^{32} & \Theta_2^{33} & \Theta_2^{34} & \Theta_2^{35} & \Theta_2^{36} \\ \Theta_2^{41} & \Theta_2^{42} & \Theta_2^{43} & \Theta_2^{44} & \Theta_2^{45} & \Theta_2^{46} \\ \Theta_2^{51} & \Theta_2^{52} & \Theta_2^{53} & \Theta_2^{54} & \Theta_2^{55} & \Theta_2^{56} \\ \Theta_2^{61} & \Theta_2^{62} & \Theta_2^{63} & \Theta_2^{64} & \Theta_2^{65} & \Theta_2^{66} \end{bmatrix} \\
& + \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Theta_3^{11} & \Theta_3^{12} & \Theta_3^{13} & \Theta_3^{14} & \Theta_3^{15} & \Theta_3^{16} \\ \Theta_3^{21} & \Theta_3^{22} & \Theta_3^{23} & \Theta_3^{24} & \Theta_3^{25} & \Theta_3^{26} \\ \Theta_3^{31} & \Theta_3^{32} & \Theta_3^{33} & \Theta_3^{34} & \Theta_3^{35} & \Theta_3^{36} \\ \Theta_3^{41} & \Theta_3^{42} & \Theta_3^{43} & \Theta_3^{44} & \Theta_3^{45} & \Theta_3^{46} \\ \Theta_3^{51} & \Theta_3^{52} & \Theta_3^{53} & \Theta_3^{54} & \Theta_3^{55} & \Theta_3^{56} \\ \Theta_3^{61} & \Theta_3^{62} & \Theta_3^{63} & \Theta_3^{64} & \Theta_3^{65} & \Theta_3^{66} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

(38)

Bu eşitlikteki matris elemanları

$$\Theta^{ij} = \langle \phi_{vi} | \hat{\Theta} | \phi_{\mu j} \rangle$$

$$\Theta_1^{ij} = \langle \phi_{vi} | \hat{\Theta}_1 | \phi_{\mu j} \rangle$$

$$\begin{aligned} \Theta_2^{ij} &= \langle \phi_{vi} | \hat{\Theta}_2 | \phi_{uj} \rangle \\ \Theta_3^{ij} &= \langle \phi_{vi} | \hat{\Theta}_3 | \phi_{uj} \rangle \quad i, j = 1, 2, \dots, 6 \end{aligned} \quad (39)$$

şeklinde tarif edilmiştir. Dalga fonksiyonları Hylleraas tipi fonksiyonlardan kurulduğundan, yukarıdaki işlemcilerin bu fonksiyonun değişkenleri cinsinden ifade edilmesi gerekir. Frost [25] tarafından, bir sistemin herhangi bir kuantum hali için Hylleraas değişkenleri cinsinden verilen

$$\begin{aligned} \nabla_i^2 &= \sum_{j \neq i} \left( \frac{2}{r_{ij}} \frac{\partial}{\partial r_{ij}} \right) + \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i} (\vec{\nabla}_i r_{ij}) \cdot (\vec{\nabla}_i r_{ik}) \frac{\partial^2}{\partial r_{ij} \partial r_{ik}} \\ & \quad (40) \\ (\vec{\nabla}_i r_{ij}) \cdot (\vec{\nabla}_i r_{ik}) &= \frac{r_{ij}^2 + r_{ik}^2 - r_{jk}^2}{2r_{ij}r_{ik}} = \cos(\theta_{ij, ik}) \end{aligned}$$

ifadesi Lityum ve üç elektronlu atom iyonlarının S halleri için kullanılırsa,  $\hat{\Theta}$ ,  $\hat{\Theta}_1$ ,  $\hat{\Theta}_2$  ve  $\hat{\Theta}_3$  işlemcileri için (41), (42), (43) ve (44) eşitlikleri elde edilir.

$$\begin{aligned}
\hat{\Theta} = & \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + \frac{2}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{2}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{2}{r_3} \frac{\partial}{\partial r_3} \\
& + 2 \frac{\partial^2}{\partial r_{23}^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial r_{13}^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{4}{r_{23}} \frac{\partial}{\partial r_{23}} + \frac{4}{r_{13}} \frac{\partial}{\partial r_{13}} + \frac{4}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \\
& + \frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} + \frac{r_1^2 + r_{13}^2 - r_3^2}{r_1 r_{13}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{13}} \\
& + \frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{12}} + \frac{r_3^2 + r_{23}^2 - r_2^2}{r_3 r_{23}} \frac{\partial^2}{\partial r_3 \partial r_{23}} \\
& + \frac{r_3^2 + r_{13}^2 - r_1^2}{r_3 r_{13}} \frac{\partial^2}{\partial r_3 \partial r_{13}} + \frac{r_2^2 + r_{23}^2 - r_3^2}{r_2 r_{23}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{23}} \\
& + \frac{1}{2} \frac{r_{23}^2 + r_{12}^2 - r_{13}^2}{r_{23} r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_{23} \partial r_{12}} + \frac{1}{2} \frac{r_{23}^2 + r_{13}^2 - r_{12}^2}{r_{23} r_{13}} \frac{\partial^2}{\partial r_{23} \partial r_{13}} \\
& + \frac{1}{2} \frac{r_{13}^2 + r_{12}^2 - r_{23}^2}{r_{13} r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_{13} \partial r_{12}} + \frac{1}{2} \frac{r_{12}^2 + r_{23}^2 - r_{13}^2}{r_{12} r_{23}} \frac{\partial^2}{\partial r_{12} \partial r_{23}} \\
& + \frac{1}{2} \frac{r_{12}^2 + r_{13}^2 - r_{23}^2}{r_{12} r_{13}} \frac{\partial^2}{\partial r_{12} \partial r_{13}} + \frac{1}{2} \frac{r_{13}^2 + r_{23}^2 - r_{12}^2}{r_{13} r_{23}} \frac{\partial^2}{\partial r_{13} \partial r_{23}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\Theta}_1 = & \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{2}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{\partial^2}{\partial r_{13}^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{13}} \frac{\partial}{\partial r_{13}} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \\
& + \frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} + \frac{r_1^2 + r_{13}^2 - r_3^2}{r_1 r_{13}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{13}} \\
& + \frac{1}{2} \frac{r_{13}^2 + r_{12}^2 - r_{23}^2}{r_{13} r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_{13} \partial r_{12}} + \frac{1}{2} \frac{r_{12}^2 + r_{13}^2 - r_{23}^2}{r_{12} r_{13}} \frac{\partial^2}{\partial r_{12} \partial r_{13}}
\end{aligned}
\tag{42}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\Theta}_2 = & \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{2}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{\partial^2}{\partial r_{23}^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{23}} \frac{\partial}{\partial r_{23}} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \\
& + \frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{12}} + \frac{r_2^2 + r_{23}^2 - r_3^2}{r_2 r_{23}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{23}} \\
& + \frac{1}{2} \frac{r_{23}^2 + r_{12}^2 - r_{13}^2}{r_{23} r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_{23} \partial r_{12}} + \frac{1}{2} \frac{r_{12}^2 + r_{23}^2 - r_{13}^2}{r_{12} r_{23}} \frac{\partial^2}{\partial r_{12} \partial r_{23}}
\end{aligned}
\tag{43}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\Theta}_3 = & \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + \frac{2}{r_3} \frac{\partial}{\partial r_3} + \frac{\partial^2}{\partial r_{23}^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_{13}^2} + \frac{2}{r_{23}} \frac{\partial}{\partial r_{23}} + \frac{2}{r_{13}} \frac{\partial}{\partial r_{13}} \\
& + \frac{r_3^2 + r_{23}^2 - r_2^2}{r_3 r_{23}} \frac{\partial^2}{\partial r_3 \partial r_{23}} + \frac{r_3^2 + r_{13}^2 - r_1^2}{r_3 r_{13}} \frac{\partial^2}{\partial r_3 \partial r_{13}} \\
& + \frac{1}{2} \frac{r_{23}^2 + r_{13}^2 - r_{12}^2}{r_{23} r_{13}} \frac{\partial^2}{\partial r_{23} \partial r_{13}} + \frac{1}{2} \frac{r_{13}^2 + r_{23}^2 - r_{12}^2}{r_{13} r_{23}} \frac{\partial^2}{\partial r_{13} \partial r_{23}}
\end{aligned}
\tag{44}$$

(39) da tanımlanan matris elemanları

$$f_{r_1^i r_2^j r_3^k r_{23}^l r_{13}^m r_{12}^n} e^{-(ar_1 + br_2 + cr_3)} d\tau$$

tipindeki integrallerin doğrusal bileşimleridir. Bu integrallerde  $l$ ,  $m$  ve  $n$  en az  $-1$  değerini alabilirler. Bundan dolayı matris elemanlarının hesaplanması için gerekli bütün integraller UCELAT programının integral paketi (EK I) ile hesaplanabilmektedir.

(33) eşitliğinde ifade edilen  $F$ , bu integral değerlerini ve dalga fonksiyonunun hesaplanan parametrelerini

giriş deęerleri olarak alacak şekilde geliřtirilen,  
HILBEK programıyla (EK II ) hesaplanmaktadır.

Bu program FORTRAN IV dilinde yazılmıř ve hesapla-  
malar ODTU Bilgisayar Merkezi'ndeki BORROUGHS 6900 Bi-  
gisayarında yapılmıřtır.



### III. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

#### III.1. Dalga Fonksiyonları ve Enerjilerin Yakınsaması

Değişim yöntemiyle bir sistemin dalga fonksiyonunun elde edilmesi, enerjinin beklenen değer ifadesinin, seçilen fonksiyonun parametrelerine göre minimum yapılması esasına dayanır. Parametre sayısı artırılarak dalga fonksiyonuna ne kadar esneklik sağlanırsa, enerji de o kadar gerçek değere yaklaşır. Ancak bu da daha fazla bilgisayar zamanı ve hafızası kullanımını gerektirir. Bundan dolayı hesaplamanın amacına göre uygun sayıda parametre seçilmelidir.

Bu çalışmada incelenen Li ve üç elektronlu atom iyonları,  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$ , ün temel hallerini temsil etmek üzere seçilen dalga fonksiyonu ((25) ve (26) eşitlikleri), Hylleraas baz fonksiyonlarının katsayıları olan doğrusal değişim parametrelerinin,  $C_v$ , doğrusal olmayan değişim parametresinin,  $a$ , ve perdeleme parametrelerinin,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , fonksiyonudur; Hylleraas baz fonksiyonlarını ((24) eşitliği) belirleyen parametrelerden  $i, j, k, l, m, n$  tam sayılarının, incelenen sistemin kuantum haline bağlı olarak, hesaplamaya geçilmeden önce bilinmesi gerekir.



Yukarıda bahsedilen sistemlerin temel hal dalga fonksiyonları, değişik Hylleraas baz fonksiyonları kullanılarak ve perdeleme parametreleri değişim parametresi alınarak, başka çalışmalarda hesaplandığından [15,16,26], adı geçen parametreler bu çalışmada değişim parametreleri olarak alınmamaktadır.

İncelenen sistemler,  $\text{Li}$ ,  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$ , eş elektronlu olduklarından temel hal dalga fonksiyonlarını kurmak için, aynı baz fonksiyonları kullanılabilir. Aşağıda bu sistemlerin, kullanılan baz fonksiyonlarına göre, enerji yakınsamaları incelenmektedir.

#### A. Lityum

Tablo I.'de perdeleme parametrelerinin iki farklı takımı için,  $\text{Li}$ 'un temel hal dalga fonksiyonunu kurmakta kullanılan baz fonksiyonları, bunlardan oluşturulan dalga fonksiyonları ile hesaplanan enerjiler ve dalga fonksiyonlarının Virial Teoremi'ni ne kadar sağladığının bir ölçüsü olan, doğrusal olmayan parametreler verilmektedir.

TABLO I. Li'un temel hal dalga fonksiyonunu\* kurmakta kullanılan baz fonksiyonları hesap-  
lanan enerjiler, E (a.b.) ve doğrusal olmayan parametreler, a.

| Baz<br>No | Baz<br>fonksiyonları<br>(ijklmn) | $(\alpha = \beta = 2.69, \gamma = 0.69)[27]$ |          | $(\alpha = \beta = 2.80, \gamma = 0.65)[15]$ |          |
|-----------|----------------------------------|----------------------------------------------|----------|----------------------------------------------|----------|
|           |                                  | -E                                           | a        | -E                                           | a        |
| 1         | 001000                           | 7.416394                                     | 0.995169 | 7.417812                                     | 0.960226 |
| 2         | 101000                           | 7.417406                                     | 0.965582 | 7.417840                                     | 0.996360 |
| 3         | 111000                           | 7.428923                                     | 0.980529 | 7.430240                                     | 0.974311 |
| 4         | 201000                           | 7.442846                                     | 0.996468 | 7.444788                                     | 1.032960 |
| 5         | 000000                           | 7.445999                                     | 1.058520 | 7.446700                                     | 1.074522 |
| 6         | 002000                           | 7.446112                                     | 1.067464 | 7.446713                                     | 1.074188 |
| 7         | 100000                           | 7.446623                                     | 1.105888 | 7.446819                                     | 1.103535 |
| 8         | 102000                           | 7.446268                                     | 1.127037 | 7.446785                                     | 1.112435 |
| 9         | 110000                           | 7.446437                                     | 1.127128 | 7.446821                                     | 1.112190 |
| 10        | 112000                           | 7.446572                                     | 1.136710 | 7.446820                                     | 1.112303 |
| 11        | 200000                           | 7.446707                                     | 1.146293 | 7.446883                                     | 1.127131 |
| 12        | 202000                           | 7.446906                                     | 1.161312 | 7.446900                                     | 1.134992 |
| 13        | 211000                           | 7.447073                                     | 1.168160 | 7.447054                                     | 1.146759 |

\* Herhangi bir satırdaki -E ve a değeri, o satır ve o satıra kadar olan baz fonksiyonla-  
rından kurulan dalga fonksiyonuna aittir.

Tablo I.'den görüldüğü gibi baz fonksiyonlarının sayısı arttıkça sistemin enerjisi azalmaktadır; bu beklenen bir durumdur. Fakat aynı zamanda doğrusal olmayan parametre de artmaktadır. Sistemi iyi temsil edecek dalga fonksiyonu, hem mümkün olduğu kadar düşük enerjiye sahip olmalı, hem de Virial Teoremi'ni mümkün olduğu kadar iyi sağlamalıdır. Buna göre sistemi en iyi temsil eden dalga fonksiyonu, perdeleme parametrelerinin farklı olduğu her iki durum için de, (1-6) baz fonksiyonlarından kurulan dalga fonksiyonudur. Bu baz fonksiyonlarından (001000), sistemin temel hal elektron konumuna karşılıktır, ve dolayısı ile sistemin enerjisine en fazla katkı bundan gelmektedir. Geri kalan baz fonksiyonları içinden, enerjiye katkıları bakımından en önemlileri (2-5) baz fonksiyonlarıdır. Enerjilerin karşılaştırılmasından perdeleme parametreleri  $\alpha = \beta = 2.80$ ,  $\gamma = 0.65$  olan dalga fonksiyonunun ( $\Psi(Li)$ ), sistemi, diğerine göre daha iyi temsil edeceği görülmektedir.  $\Psi(Li)$ 'un bütün parametreleri, enerjisi, ve enerji için karşılaştırma değerleri Tablo II.'de verilmektedir.

Hesaplamalarda l,m,n - parametrelerinin üçünün de sıfır olduğu baz fonksiyonları kullanılabilmektedir. Bu üç parametreden en az bir tanesinin sıfırdan farklı olduğu baz fonksiyonları kullanıldığında, hesaplanan

TABLO II.  $\Psi(\text{Li})$ , enerjisi ve karşılaştırma değerleri

| Dalga fonksiyonu parametreleri |                            |
|--------------------------------|----------------------------|
| $C_1$                          | 1.000000                   |
| $C_2$                          | 0.410088                   |
| $C_3$                          | -0.315185                  |
| $C_4$                          | 0.595620                   |
| $C_5$                          | -0.516307                  |
| $C_6$                          | -0.006047                  |
| $a$                            | 1.074189                   |
| Enerji (-E)                    | 7.446714                   |
|                                | 7.432727[ 28]              |
|                                | 7.432751[ 29]              |
| Enerji                         | 7.432813[ 30]              |
| karşılaştırma                  | 7.447560[ 31]              |
| değerleri                      | 7.447565[ 32]              |
|                                | 7.47710 [ 33]              |
|                                | 7.477384[ 24]              |
|                                | 7.478025[ 16]              |
|                                | 7.478073[ 34] <sup>*</sup> |

<sup>\*</sup> Tam değer

enerji, relativistik olmayan tam enerji deęerinin altına düşmektedir. Bu durumun, UCELAT proęramında yapılan deęişiklięin sonucu olarak ortaya çıkan integrallerin, yeteri kadar hassaslıkla hesaplanamamasından kaynaklandığı tahmin edilmektedir.  $\Psi(\text{Li})$  dalga fonksiyonu ile bulunan enerji, toplam kaçınım enerjisinin % 31'ini içermektedir. Relativistik kütle katkısı işlemcisinin beklenen deęerini hesaplamak için kullanılmış olan dalga fonksiyonlarının [12] enerji bakımından en iyisi ise, kaçınım enerjisinin % 33'ünü içermektedir. Bundan dolayı,  $\Psi(\text{Li})$  ile hesaplanan beklenen deęer bu dalga fonksiyonunun, Li'un temel halini dięer dalga fonksiyonlarına göre daha iyi temsil edip edemediğinin bir ölçüsü de olacaktır.

B.  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$

Tablo III.'te bu üç sistemin temel hal dalga fonksiyonunu kurmakta kullanılan baz fonksiyonları, bunlardan oluşturulan dalga fonksiyonları ile hesaplanan enerjiler ve doğrusal olmayan parametreler verilmektedir.

Bu sistemler için de  $\Psi(\text{Li})$ 'u seçmekte kullanılan ölçüler kullanılırsa, hesaplanan dalga fonksiyonlarından  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$ 'ü en iyi temsil eden dalga fonksiyonlarının,

TABLO III.  $Be^+$ ,  $B^{+2}$  ve  $C^{+3}$ 'ün dalga fonksiyonlarını\* kurmakta kullanılan baz fonksiyonları, hesaplanan enerjiler,  $E$  (a.b.) ve doğrusal olmayan parametreler, a.

| Baz | Baz          | $Be^+$                                       |          | $B^{+2}$                                     |          | $C^{+3}$                                     |          |
|-----|--------------|----------------------------------------------|----------|----------------------------------------------|----------|----------------------------------------------|----------|
| No  | fonsiyonları | $(\alpha = \beta = 3.80, \gamma = 1.15)[15]$ |          | $(\alpha = \beta = 4.80, \gamma = 1.65)[15]$ |          | $(\alpha = \beta = 5.80, \gamma = 2.15)[15]$ |          |
|     | (ijklmn)     | -E                                           | a        | -E                                           | a        | -E                                           | a        |
| 1   | 001000       | 14.257918                                    | 0.967121 | 23.345565                                    | 0.969100 | 34.677104                                    | 0.969575 |
| 2   | 101000       | 14.258193                                    | 0.959305 | 23.349595                                    | 0.933023 | 34.689209                                    | 0.918224 |
| 3   | 111000       | 14.270102                                    | 0.961062 | 23.359788                                    | 0.943302 | 34.697273                                    | 0.929074 |
| 4   | 201000       | 14.282470                                    | 0.975004 | 23.371566                                    | 0.941282 | 34.709570                                    | 0.921026 |
| 5   | 000000       | 14.290116                                    | 1.054195 | 23.387849                                    | 1.040483 | 34.737294                                    | 1.031934 |
| 6   | 002000       | 14.290099                                    | 1.055862 | 23.387712                                    | 1.045158 | 34.736965                                    | 1.039182 |
| 7   | 100000       | 14.290433                                    | 1.103103 | 23.388220                                    | 1.099902 | 34.737576                                    | 1.097253 |
| 8   | 102000       | 14.290301                                    | 1.121246 | 23.387955                                    | 1.124782 | 34.737150                                    | 1.126765 |
| 9   | 110000       | 14.290396                                    | 1.121005 | 23.388114                                    | 1.124820 | 34.737369                                    | 1.127075 |
| 10  | 112000       | 14.290380                                    | 1.122374 | 23.388064                                    | 1.127725 | 34.737273                                    | 1.131241 |
| 11  | 200000       | 14.290586                                    | 1.141406 | 23.388477                                    | 1.148198 | 34.737930                                    | 1.152200 |
| 12  | 202000       | 14.290643                                    | 1.151318 | 23.388586                                    | 1.158782 | 34.738093                                    | 1.162922 |
| 13  | 211000       | 14.290947                                    | 1.164950 | 23.389058                                    | 1.172666 | 34.738874                                    | 1.176601 |

\* Herhangi bir satırdaki -E ve a değeri, o satır ve o satıra kadar olan baz fonksiyonların-  
dan kurulan dalga fonksiyonuna aittir.

$\Psi(\text{Be}^+)$ ,  $\Psi(\text{B}^{+2})$  ve  $\Psi(\text{C}^{+3})$ , (1-5) baz fonksiyonlarından oluştuğu görülür. Bu dalga fonksiyonları, enerjileri ve karşılaştırma değerleri Tablo IV.'de verilmektedir.

TABLO IV.  $\Psi(\text{Be}^+)$ ,  $\Psi(\text{B}^{+2})$ ,  $\Psi(\text{C}^{+3})$ , enerjileri ve karşılaştırma değerleri

|                                | $\text{Be}^+$   | $\text{B}^{+2}$ | $\text{C}^{+3}$  |
|--------------------------------|-----------------|-----------------|------------------|
| $C_1$                          | 1.000000        | 1.000000        | 1.000000         |
| $C_2$                          | 0.419869        | 0.429879        | 0.445993         |
| $C_3$                          | -0.394191       | -0.477460       | -0.556758        |
| $C_4$                          | 0.667961        | 0.763849        | 0.871313         |
| $C_5$                          | -0.425483       | -0.352505       | -0.300400        |
| $C_6$                          | -0.006643       | -0.000654       | 0.008678         |
| a                              | 1.055863        | 1.045158        | 1.039182         |
| -E                             | 14.290099       | 23.387712       | 34.736965        |
| Enerji karşılaştırma değerleri | 14.27739[ 35]   | 23.37599[ 35]   | 34.72606 [ 35]   |
|                                | 14.29162[ 31]   | 23.38990[ 31]   |                  |
|                                | 14.3183 [ 19]   | 23.38919[ 19]   | 34.7654 [ 19]    |
|                                | 14.32350[ 33]   | 23.42312[ 33]   | 34.77384 [ 33]   |
|                                | 14.32479[ 15] * | 23.42471[ 15] * | 34.77553 [ 15] * |

\* Tam değer

$\Psi(\text{Be}^+)$ ,  $\Psi(\text{B}^{+2})$  ve  $\Psi(\text{C}^{+3})$  Dalga fonksiyonları ile bulunan enerjiler, bu sistemlerin toplam kaçınım enerjilerinin, karşılıklı olarak, % 27, % 24 ve % 22'sini içermektedirler; bundan dolayı enerji bakımından, yaklaşık olarak,  $\Psi(\text{Li})$  ile karşılaştırılabilecek dalga fonksiyonlarıdır. Bu üç sistemin relativistik kütle katkısı işlemcilerinin beklenen değerleri üzerine yapılmış bir çalışmaya rastlanmamıştır. Ancak, bu beklenen değerlerin atom numarasına göre değişiminin incelenmesi, diğer üç elektronlu atom iyonlarının relativistik kütle katkısı işlemcilerinin beklenen değerlerini, hesap yapmadan elde etme bakımından, ilginçtir.

### III.2. $\hat{F}$ İşlemcisinin Beklenen Değerinin Yakınsaması

(35) ve (38) eşitliklerinden görüleceği gibi  $\hat{F}$  işlemcisinin ( $\hat{F} = \sum_i \nabla_i^2 S_{zi}$ ) beklenen değeri  $F, \hat{\Theta}, \hat{\Theta}_1, \hat{\Theta}_2$  ve  $\hat{\Theta}_3$  işlemcilerinin matris elemanlarını içeren  $F(\hat{\Theta}), F(\hat{\Theta}_1), F(\hat{\Theta}_2)$  ve  $F(\hat{\Theta}_3)$  terimlerinin toplamına eşittir. Bu kısımda  $\text{Li}, \text{Be}^+, \text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$  için bu dört terimin ve  $F$ 'nin yakınsaması incelenmektedir.



### A. Lityum

Lityum için yukarıda bahsedilen terimlerin  $\Psi(\text{Li})$ 'a kadar olan dalga fonksiyonları ile hesaplanan değerleri Tablo V.'te verilmektedir.

Tablo V.'te görüldüğü gibi hem F hem de diğer terimler, tek yönlü değil salınımlı olarak yakınsamaktadır. Bu durum, Larsson'un Hylleraas baz fonksiyonları kullanarak Lityum için hesapladığı Fermi değme (contact) teriminin yakınsamasında da ortaya çıkmaktadır [16].  $F(\hat{\Theta}_1)$ ,  $F(\hat{\Theta}_2)$  ve  $F(\hat{\Theta}_3)$  terimleri dalga fonksiyonlarının hepsi ile de birbirine eşit çıkmaktadır. Bu durumu, hesaplama yapmadan önce, programlanan ifadelerden görmek kolay değildir. Hesaplamalar sonunda görülen bu durum HILBEK programında  $F(\hat{\Theta}_1)$ ,  $F(\hat{\Theta}_2)$  ve  $F(\hat{\Theta}_3)$  için yazılan altprogramların sadece bir altprograma indirgenebileceğini göstermektedir.

Hesaplanan dalga fonksiyonlarından Li'un temel halini en iyi temsil eden  $\Psi(\text{Li})$  ile elde edilen sonuç diğer araştırma sonuçlarıyla birlikte Tablo VI.'da verilmektedir. Tablo VI.'daki yöntemlerin, verdikleri enerji sonuçlarına göre iki belirgin guruba ayrıldıkları görülmektedir. Guruplardan birincisi RHF (Restricted Hartree-Fock) [36], UHF (Unrestricted Hartree-Fock) [29] ve

TABLO V. Lityum için  $F(\hat{\Theta})$ ,  $F(\hat{\Theta}_1)$ ,  $F(\hat{\Theta}_2)$ ,  $F(\hat{\Theta}_3)$  ve  $F'$ 'nin (a.b.) yakınsaması.

| Baz | Baz           |                   |                     |                     |                     |
|-----|---------------|-------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| No  | Fonksiyonları | $F(\hat{\Theta})$ | $F(\hat{\Theta}_1)$ | $F(\hat{\Theta}_2)$ | $F(\hat{\Theta}_3)$ |
|     | (ijklmn)      |                   |                     |                     |                     |
| 1   | 001000        | -0.06614          | 0.08911             | 0.08911             | 0.08911             |
| 2   | 101000        | -0.06820          | 0.09322             | 0.09322             | 0.09322             |
| 3   | 111000        | -0.08533          | 0.10282             | 0.10282             | 0.10282             |
| 4   | 201000        | -0.11538          | 0.13008             | 0.13008             | 0.13008             |
| 5   | 000000        | -0.05665          | 0.09534             | 0.09534             | 0.09534             |
| 6   | 002000        | -0.05523          | 0.09520             | 0.09520             | 0.09520             |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |
|     |               |                   |                     |                     |                     |

TABLO VI. F için hesaplanan ve karşılaştırma<sup>\*</sup> değerleri

| <u>Yöntem</u> | <u>F(a.b.)</u> | <u>-E(a.b.)</u> |
|---------------|----------------|-----------------|
| RHF           | 0.20882        | 7.43273         |
| MPHF(GI)      | 0.22697        | 7.44756         |
| SOSCF(SOGI)   | 0.23408        | 7.44757         |
| UHF           | 0.23740        | 7.43275         |
| SEHF(GF)      | 0.24530        | 7.43281         |
| Bu çalışma    | 0.23036        | 7.44671         |

<sup>\*</sup> Kaynak 12.

SEHF (Spin-extended Hartree-Fock) [30] yöntemlerini kapsamakta ve F için birbirinden oldukça farklı değerler içermektedir. Buna karşı ikinci grup MPHF (Maximally paired Hartree-Fock) [31] ve SOSCF (Spin-optimized SCF) [32] yöntemleri ile bu çalışmayı kapsamaktadır. Enerji bakımından daha iyi olan bu grupta, F'nin değerleri birbirinden çok daha az farklılık göstermektedirler. F için bu çalışmada bulunan değer, hem dahil edildiği gurubun hem de diğer gurubun ortalama değerlerine çok yaklaşık olarak eşittir. Bundan dolayı, istatistik açısından, bu çalışmada bulunan F değeri diğer yöntemlerle bulunan değerlerden daha iyidir. Sadece (001000) baz

fonksiyonunu içeren dalga fonksiyonu ile bulunan  $F$  değeri, RHF dalga fonksiyonu ile bulunan değere, beklendiği gibi, yaklaşık olarak eşittir. Bu  $\Psi(\text{Li})$ 'un hem enerjiyi hem de  $F$  değerini büyük oranda geliştirdiğini göstermektedir.

B.  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$

$F(\hat{\Theta})$ ,  $F(\hat{\Theta}_1)$ ,  $F(\hat{\Theta}_2)$ ,  $F(\hat{\Theta}_3)$  ve  $F$ 'nin bu üç elektronlu sistemler için yakınsamalarını gösteren değerler, Tablo VII., Tablo VIII. ve Tablo IX.'da verilmektedir.

$F$  ve diğer dört terimin Li'da görülen yakınsama tarzı  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$ 'te de kendini göstermektedir. Bu üç sistem için bu konuda başka bir çalışmaya rastlanmamıştır. Ancak  $\Psi(\text{Be}^+)$ ,  $\Psi(\text{B}^{+2})$  ve  $\Psi(\text{C}^{+3})$ ,  $\Psi(\text{Li})$  ile karşılaştırılabilir nitelikte fonksiyonlar olduklarından, bunlarla hesaplanan  $F$  değerlerinin de Li için  $\Psi(\text{Li})$  ile elde edilen değer ile benzer nitelikte olması gerekir.

$F$ 'nin atom numarası ile değişimini inceleyerek, hesaplama yapılmayan üç elektronlu atom iyonlarının  $F$ 'leri için yaklaşık değerler elde edilebilir. III.3.C.'de bu konu daha yakından incelenmektedir.





TABLO IX.  $C^{+3}$  için  $F(\hat{\Theta})$ ,  $F(\hat{\Theta}_1)$ ,  $F(\hat{\Theta}_2)$ ,  $F(\hat{\Theta}_3)$  ve  $F$ 'nin (a.b.) yakınsaması

| Baz | Baz                       |                   |                     |                     |                     |         |
|-----|---------------------------|-------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------|
| No  | Fonksiyonları<br>(ijklmn) | $F(\hat{\Theta})$ | $F(\hat{\Theta}_1)$ | $F(\hat{\Theta}_2)$ | $F(\hat{\Theta}_3)$ | F       |
| 1   | 001000                    | -1.72111          | 1.64142             | 1.64142             | 1.64142             | 3.20317 |
| 2   | 101000                    | -1.57429          | 1.52103             | 1.52103             | 1.52103             | 2.98880 |
| 3   | 111000                    | -1.73755          | 1.63431             | 1.63431             | 1.63431             | 3.16537 |
| 4   | 201000                    | -1.92681          | 1.76320             | 1.76320             | 1.76320             | 3.36279 |
| 5   | 000000                    | -0.14638          | 0.91333             | 0.91333             | 0.91333             | 2.59361 |

### III.3. $(1 - g_{rm}/g_e)$ 'nin İncelenmesi

$(1 - g_{rm}/g_e)$ 'nin (34) eşitliğinde verilen ifadesi, relativistik kütle katkısı işlemcisinden dolayı,  $g_j$ -faktörüne katkıda bulunan relativistik, radyatif ve çekirdek kütle düzeltmelerinin ayrı ayrı hesaplanmasını mümkün kılmaktadır. Bu hesaplamalarda, ince yapı sabiti  $\alpha$  ve elektronun kütlesi  $m$  için  $\alpha = 7.297351 \times 10^{-3}$ ,  $m = 5.485930 \times 10^{-4}$  a.k.b. [37] ve çekirdek kütleleri için Kaynak.38'de verilen değerler kullanılmaktadır.

#### A. Lityum

Tablo X. ve Tablo XI.'de Lityumun tabiatta en bol bulunan iki izotopu,  ${}^7\text{Li}$  (Bolluğu 92.50) ve  ${}^6\text{Li}$  (Bolluğu 7.50) için yukarıda bahsedilen düzeltmeler verilmektedir.

Li'un  $g_j$ -faktörü için bilinen en iyi deney sonuçları  $[1,3] \cdot 10^{-7}$  mertebesinde hassaslığa sahiptir. Tablo X. ve Tablo XI.'deki değerler bu deney sonuçlarının ancak radyatif düzeltmeleri kısmen içine alabileceğini, çekirdek kütle düzeltmelerini ise içermeyeceğini göstermektedir. Buna göre  ${}^7\text{Li}$  ve  ${}^6\text{Li}$ 'nin  $g_j$ -faktörleri arasında bir fark gözlenmemesi gerekir. Gerçekten Böklen ve arkadaşları [1] her iki izotop için de aynı sonuçları elde etmişler ve



TABLO X.  $^7\text{Li}$  için relativistik kütle katkısı işlemcisi-  
den dolayı  $g_j$ 'e katkıda bulunan düzeltmeler, toplam dü-  
zeltme  $(1-g_{\text{rm}}/g_e)$  ve karşılaştırma değerleri ( $\times 10^{-6}$ )

| Yöntem        | Relativistik<br>düzeltme | Radyatif<br>düzeltme | Çekirdek<br>kütle<br>düzeltmesi | Toplam<br>düzeltme |
|---------------|--------------------------|----------------------|---------------------------------|--------------------|
| RHF           | 11.1199                  | 0.0086               | 0.0017                          | 11.1303            |
| MPHF          | 12.0865                  | 0.0094               | 0.0019                          | 12.0977            |
| SOSCF         | 12.4651                  | 0.0097               | 0.0019                          | 12.4767            |
| UHF           | 12.6419                  | 0.0098               | 0.0020                          | 12.6536            |
| SEHF          | 13.0626                  | 0.0101               | 0.0020                          | 13.0747            |
| Bu<br>Çalışma | 12.2670                  | 0.0095               | 0.0019                          | 12.2784            |

TABLO XI.  $^6\text{Li}$  için relativistik kütle katkısı işlemcisi-  
den dolayı  $g_j$ 'e katkıda bulunan düzeltmeler, toplam dü-  
zeltme  $(1-g_{\text{rm}}/g_e)$  ve karşılaştırma değerleri ( $\times 10^{-6}$ )

| Yöntem        | Relativistik<br>düzeltme | Radyatif<br>düzeltme | Çekirdek<br>kütle<br>düzeltmesi | Toplam<br>düzeltme |
|---------------|--------------------------|----------------------|---------------------------------|--------------------|
| RHF           | 11.1199                  | 0.0086               | 0.0020                          | 11.1306            |
| MPHF          | 12.0865                  | 0.0094               | 0.0022                          | 12.0980            |
| SOSCF         | 12.4651                  | 0.0097               | 0.0023                          | 12.4770            |
| UHF           | 12.6419                  | 0.0098               | 0.0023                          | 12.6540            |
| SEHF          | 13.0626                  | 0.0101               | 0.0024                          | 13.0750            |
| Bu<br>Çalışma | 12.2670                  | 0.0095               | 0.0022                          | 12.2788            |

çekirdek kütle düzeltmelerinin, hesaplamalara uygun olarak  $10^{-7}$  mertebesinden daha küçük katkı yaptığı sonucuna varmışlardır.

B.  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$

Tablo XII. de bu üç sistemin tabiatta en bol bulunan izotopları için relativistik, radyatif ve çekirdek kütle düzeltmeleri verilmektedir.

TABLO XII.  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^{+2}$  ve  $\text{C}^{+3}$ 'ün izotopları için relativistik, radyatif ve çekirdek kütle düzeltmeleri (  $\times 10^{-6}$  )

| İzotop <sup>*</sup>          | Relativistik<br>düzeltme | Radyatif<br>düzeltme | Çekirdek<br>kütle<br>düzeltmesi | Toplam<br>düzeltme |
|------------------------------|--------------------------|----------------------|---------------------------------|--------------------|
| $^9\text{Be}^+$ (100)        | 40.3776                  | 0.0312               | 0.0049                          | 40.3737            |
| $^{11}\text{B}^{+2}$ (80)    | 82.4749                  | 0.0639               | 0.0082                          | 82.5470            |
| $^{10}\text{B}^{+2}$ (20)    | 82.4749                  | 0.0639               | 0.0090                          | 82.5439            |
| $^{12}\text{C}^{+3}$ (98.89) | 138.1134                 | 0.1069               | 0.0126                          | 138.2330           |
| $^{13}\text{C}^{+3}$ (1.11)  | 138.1134                 | 0.1069               | 0.0117                          | 138.2320           |

\* Parantez içindeki değerler o izotopun tabii bolluğunu göstermektedir.

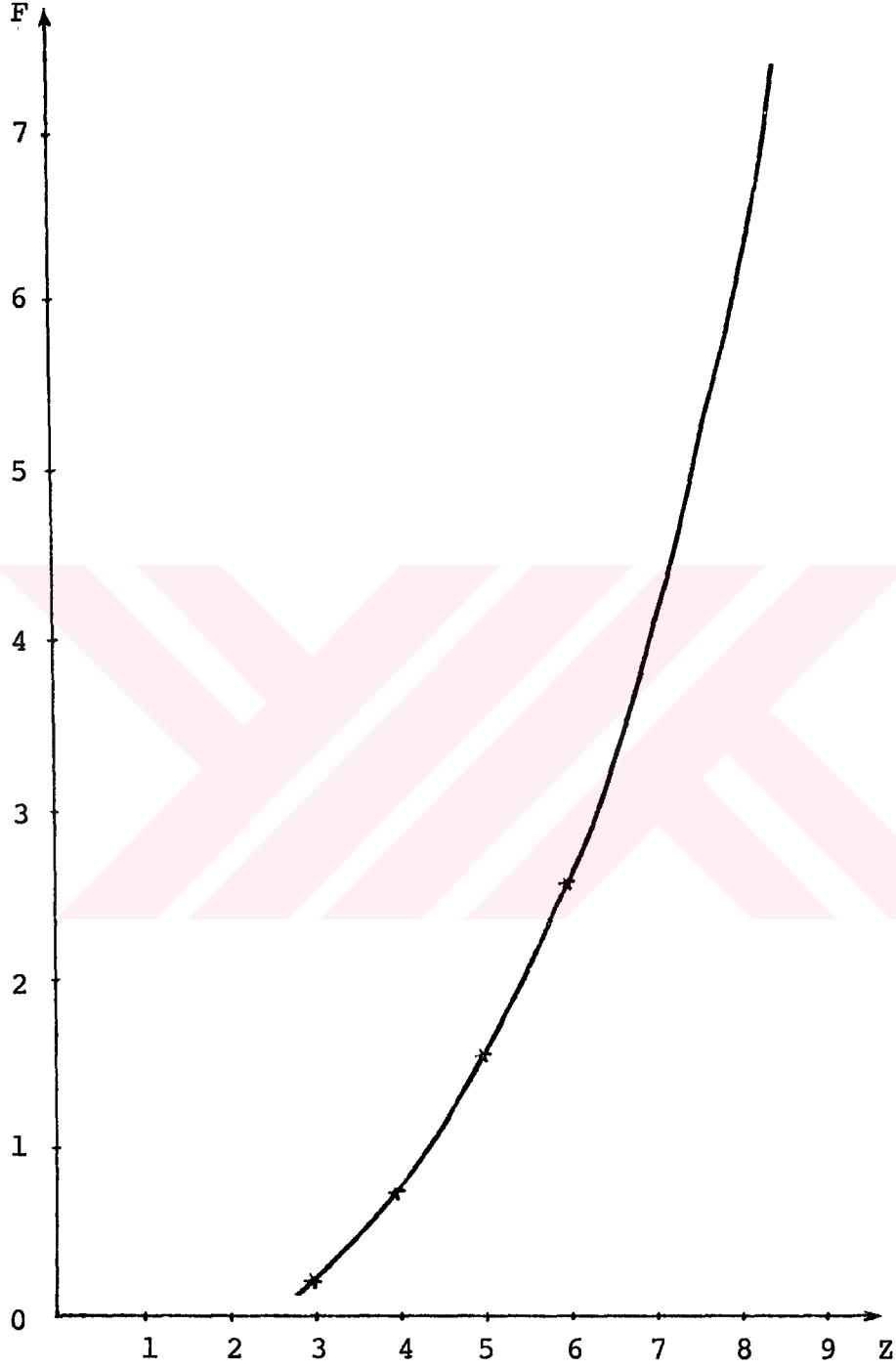
Tabloda verilen deęerler,  $10^{-7}$  mertebesinde hassaslıkla yapılan ölçümlerin, iyonlaşma derecesi arttıkça, radyatif düzeltmelerin yanında çekirdek kütle düzeltmelerini de içine alacağını fakat izotoplar arasında bir fark elde edilemeyeceğini göstermektedir. Bundan dolayı bu sistemlerin  $g_j$ -faktörlerinin ölçülebilmesi, hesaplanan deęerlerle karşılaştırma imkânı sağlayabilmesi ve hesaplamalar için esas alınan teorinin ne kadar geçerli olduğunu gösterebilmesi bakımından ilginç olacaktır.

C.  $N^{+4}$  ve  $O^{+5}$

$N^{+4}$  ve  $O^{+5}$  üç elektronlu atom iyonlarının F deęerlerini elde etmek için  $Li$ ,  $Be^{+}$ ,  $B^{+2}$  ve  $C^{+3}$  üç elektronlu sistemlerinin F deęerlerinin atom numarasına göre deęişimi kullanılmaktadır. Bu nümerik fonksiyona en küçük kareler yöntemiyle uydurmak için denenen analitik fonksiyonlardan en iyi sonucu korelasyon faktörü için 0.99979 deęeri ile

$$F(Z) = 0.00262Z^4 - 0.03555Z^3 + 0.27601Z^2 - 0.50904Z$$
 polinomu vermektedir ( Şekil 1.)

Bu fonksiyondan  $Z = 3, 4, 5, 6, 7, 8$  atom numaralı üç elektronlu sistemler için elde edilen F deęerleri Tablo XIII. te verilmektedir.



Şekil 1. Üç elektronlu sistemler için  $F$ 'nin atom numarası ( $Z$ ) ile değişimi.  $\times$  ile gösterilen noktalar hesaplanan değerlere karşılıktır.

TABLO XIII. Li - O<sup>+5</sup> üç elektronlu sistemleri için F değerleri

| Z | Sistem          | F<br>(Fonksiyondan) | F<br>(Hesaplanan) |
|---|-----------------|---------------------|-------------------|
| 3 | Li              | 0.20932             | 0.23036           |
| 4 | Be <sup>+</sup> | 0.77552             | 0.75749           |
| 5 | B <sup>+2</sup> | 1.54880             | 1.54879           |
| 6 | C <sup>+3</sup> | 2.59884             | 2.59361           |
| 7 | N <sup>+4</sup> | 4.05818             |                   |
| 8 | O <sup>+5</sup> | 6.12224             |                   |

N<sup>+4</sup> ve O<sup>+5</sup> için Tablo XIII.'te verilen F değerleri kullanılarak, bu sistemlerin tabiatta en bol bulunan izotopları için elde edilen relativistik, radyatif ve çekirdek kütle düzeltmeleri Tablo XIV.'te verilmektedir.

Tablo XIV.'teki değerler 10<sup>-7</sup> mertebesinde hassaslıkla yapılacak ölçümlerin radyatif düzeltmelerin yanında çekirdek kütle düzeltmelerinide kısmen içine alabileceğini göstermektedir.

TABLO XIV.  $N^{+4}$  ve  $O^{+5}$ 'in izotopları için relativistik,  
radyatif ve çekirdek kütle düzeltmeleri  
(  $\times 10^{-6}$  )

| İzotop                               | Relativistik<br>düzeltme | Radyatif<br>düzeltme | Çekirdek<br>kütle<br>düzeltmesi | Toplam<br>düzeltme |
|--------------------------------------|--------------------------|----------------------|---------------------------------|--------------------|
| $^{14}N^{+4}$ (99.64)                | 216.10349                | 0.16732              | 0.01693                         | 216.28774          |
| $^{15}N^{+4}$ (0.36)                 | 216.10349                | 0.16732              | 0.01581                         | 216.28662          |
| $^{16}O^{+5}$ (99.76) <del>xxx</del> | 326.01743                | 0.25243              | 0.02236                         | 326.29222          |
| $^{18}O^{+5}$ (0.20) <del>xxx</del>  | 326.01743                | 0.25243              | 0.01987                         | 326.28973          |

\* Parentez içindeki değerler o izotopun tabii bolluğunu göstermektedir.

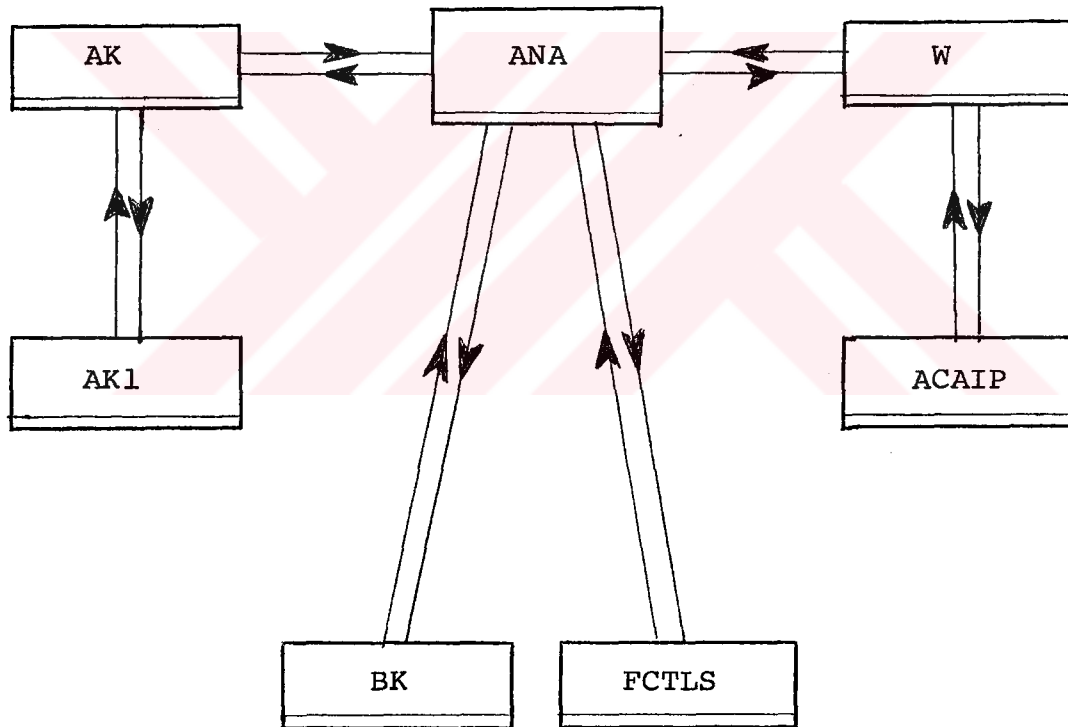
xxx Kaynak [ 39 ] .

## EK I

## UCELAT PROĞRAMI

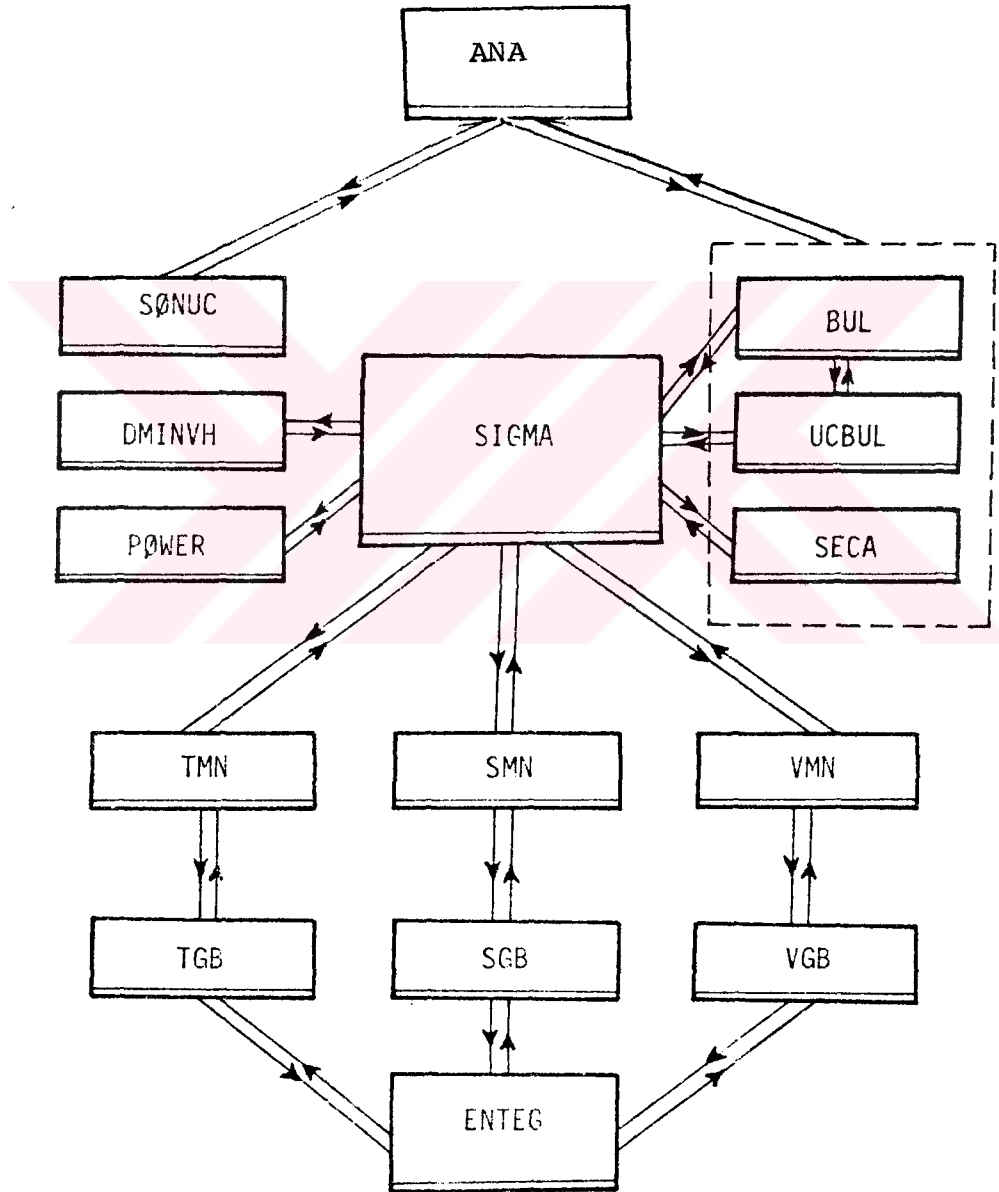
Üç elektronlu atom sistemlerinin temel ve rezonans S hallerinin enerji ve dalga fonksiyonlarını Hylleraas fonksiyonları kullanarak hesaplamak için geliştirilen UCELAT proğramı [24], gerekli integralleri ve katsayıları hesaplayıp bilgisayar disk kütüğüne yazan UCELAT/INTG proğramı ile bu disk kütüğünden integral ve katsayıları giriş değerleri olarak alıp dalga fonksiyonunu hesaplayan UCELAT/DALG proğramı olmak üzere ikiye bölünmüştür. Böylece beklenen değer hesabında da kullanılması gereken integral ve katsayılar yalnız bir defa hesaplanarak bilgisayar zamanından tasarruf edilmektedir. UCELAT/INTG programının altproğramları UCELAT proğramındakielerin aynısıdır. UCELAT/DALG proğramındaki altproğramlardan TMN, SMN ve VMN'de (25) eşitliğinde verilen dalga fonksiyonu antisimetrikleştirilirken Hylleraas fonksiyonlarındaki perdeleme parametrelerinin (29) eşitliğinde verildiği gibi permütasyona uğraması gözönüne alındığından, UCELAT proğramındaki TMN, SMN ve VMN'den farklıdır; buna bağlı olarak TGB, SGB, VGB ve ENTEG altproğramlarında da küçük farklılıklar vardır. UCELAT/INTG ve UCELAT/DALG proğramlarının akış diyagramları aşağıda verilmektedir.

## UCELAT/INTG programının akış diyagramı





UCELAT/DALG programının akış diyagramı



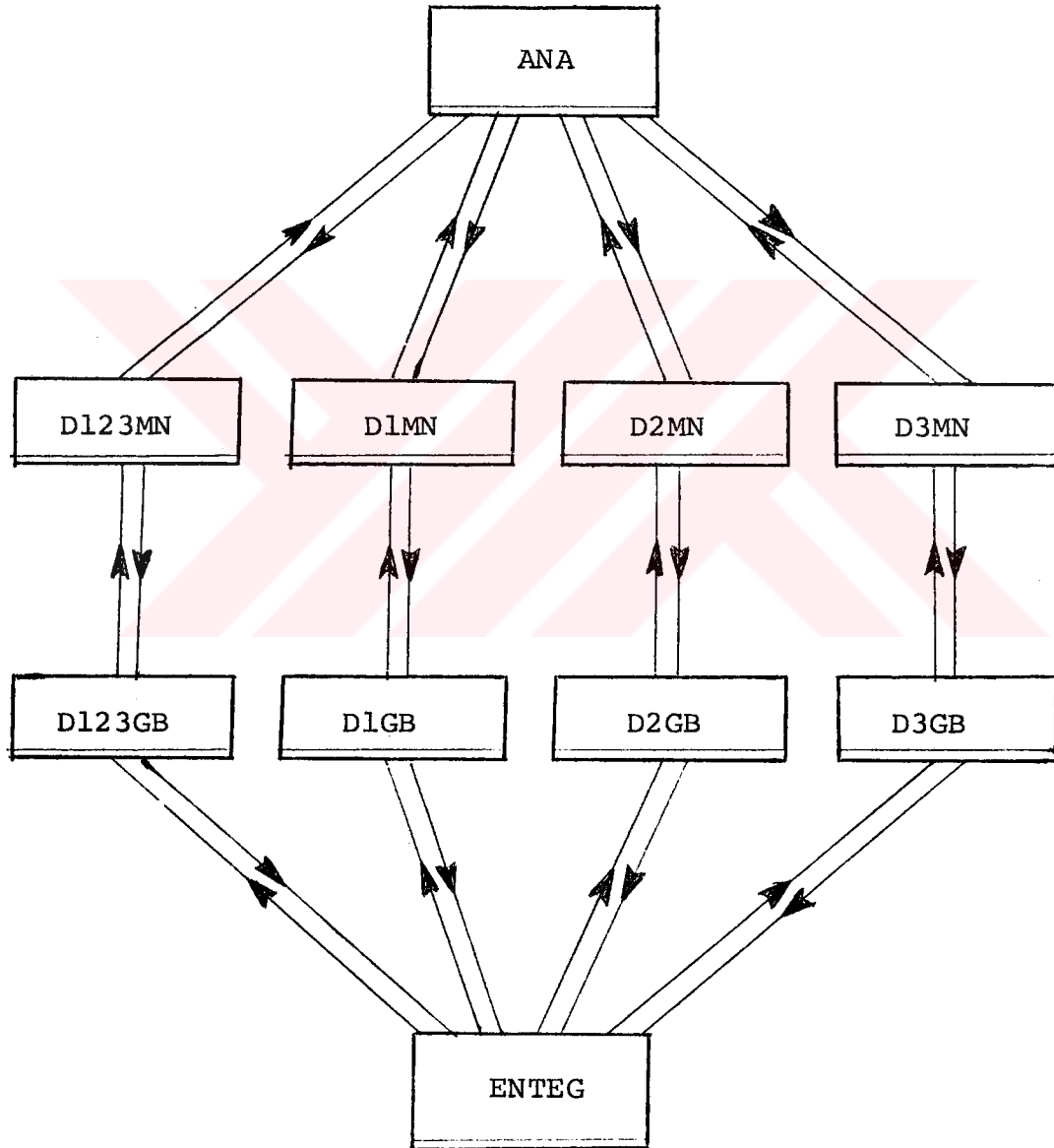
## EK II

## HILBEK PROGRAMI

Üç elektronlu atom sistemlerinin temel hal  $g_J$ -faktörlerine relativistik kütle katkısını Hylleraas fonksiyonlarını kullanarak hesaplamak için geliştirilen HILBEK programının akış diyagramı ve listesi aşağıda verilmektedir. Program UCELAT/INTG programının hesaplayıp disk kütüğüne yazdığı integral ve katsayıları giriş değeri olarak almaktadır. Altprogramlar aşağıdaki görevleri yaparlar :

- D123MN : (38) eşitliğindeki birinci terimi hesaplar
- D1MN : (38) eşitliğindeki ikinci terimi hesaplar
- D2MN : (38) eşitliğindeki üçüncü terimi hesaplar
- D3MN : (38) eşitliğindeki dördüncü terimi hesaplar
- D123GB : (39) eşitliğindeki  $\Theta_{ij}^{ij}$  integralini hesaplar
- D1GB : (39) eşitliğindeki  $\Theta_1^{ij}$  integralini hesaplar
- D2GB : (39) eşitliğindeki  $\Theta_2^{ij}$  integralini hesaplar
- D3GB : (39) eşitliğindeki  $\Theta_3^{ij}$  integralini hesaplar
- ENTEG : (39) eşitliğindeki integrallerin hesaplanması için gerekli integralleri temin eder.

HILBEK programının akış diyagramı



```

HI BEK PROGRAMI...
N. AKTEKIN VE A. GUNEN TARAFINDAN YAZILDI...
1984 YAZINDA...
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
LOGICAL NESIT
DIMENSION ELR3LU(15,15),ELRBIR(15,15),ELRIKI(15,15),ELRUC(15,15),
* C(15),IN(15),JN(15),KN(15),LN(15),MN(15),NN(15)
COMMON/UST/ MUST1(6),MUST2(6),MUST3(6),MUST4(6),MUST5(6),MUST6(6)
COMMON/FILE/ NFILE
COMMON/ENT/KAP,IE1,IE2,IE3
COMMON/DORT/DORTPI
COMMON/ENT2/KAP1
COMMON/ABK/AAK(10,10,10,10),ABK(10,10,2)
COMMON/AMM/AM(14,16,20,6)
COMMON/SPIN/ MULT
DO 379 I=1,NDIM
DO 379 J=1,NDIM
ELR3LU(I,J)=0.000
ELRBIR(I,J)=0.000
ELRIKI(I,J)=0.000
ELRUC(I,J)=0.000
379 CONTINUE
READ(5,50) NESIT
WRITE(6,60) NESIT
50
60 FORMAT(L2)
FORMAT(1X,"NESIT=",L2)
READ(5,10) NDIM,KAP1,KAP,IE1,IE2,IE3
10 FORMAT(6I5)
READ(5,13) A,OVRLP
13 FORMAT(3D25.16)
READ(5,11) A1,A2,A3,MULT
11 FORMAT(3D15.13)
READ(5,12) (IN(I),JN(I),KN(I),LN(I),MN(I),NN(I),I=1,NDIM)
READ(5,13) (C(I),I=1,NDIM)
12 FORMAT(6(1X,6I1))
WRITE(6,15) MULT,NDIM
15 FORMAT(/,2X,"MULT=",I2,3X,"NDIM=",I3)
WRITE(6,25) KAP,KAP1,IE1,IE2,IE3
25 FORMAT(/,2X,"KAP=",I3,"KAP1=",I3,"IE1=",I3,"IE2=",I3,"IE3=",I3)
WRITE(6,21) A,OVRLP
21 FORMAT(/,2X,"A=",D15.8,5X,"OVERLAP=",D15.8)
WRITE(6,23) A1,A2,A3
23 FORMAT(/,2X,"A1=",D15.8,2X,"A2=",D15.8,2X,"A3=",D15.8)
WRITE(6,22) (IN(I),JN(I),KN(I),LN(I),MN(I),NN(I),I=1,NDIM)
22 FORMAT(/,(8(2X,6I1)))
DORTPI=3.1415926535897900
READ(10,2000) AAK
READ(10,2000) ABK
IF(NESIT) GO TO 500
DO 600 NFILE=1,4
TEYPTEN AM YU OKU!
READ(5,12) MUST1,MUST2,MUST3,MUST4,MUST5,MUST6
DO 700 I=1,NDIM
DO 700 J=1,NDIM
MATRIS ELEMENLARI HESAPLANIYOR.
700 CONTINUE
600 CONTINUE
GO TO 800
500 READ(12,2000) (((((AW(I,J,K,L),L=1,3),K=1,20),J=1,16),I=1,1)
READ(13,2000) (((((AJ(I,J,K,L),L=1,3),K=1,20),J=1,16),I=2,2)
READ(14,2000) (((((AW(I,J,K,L),L=1,3),K=1,20),J=1,16),I=3,3)
READ(15,2000) (((((AJ(I,J,K,L),L=1,3),K=1,20),J=1,16),I=4,4)
READ(16,2000) (((((AW(I,J,K,L),L=1,3),K=1,20),J=1,16),I=5,5)

```

```

READ(117,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=1,3),KK=1,20),J=1,16),I=1,8)
READ(118,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=1,3),KK=1,20),J=1,16),I=1,8)
READ(119,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=1,3),KK=1,20),J=1,16),I=1,8)
READ(120,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=1,3),KK=1,20),J=1,16),I=1,8)
READ(121,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=1,3),KK=1,20),J=1,16),I=1,10)
READ(122,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=1,3),KK=1,20),J=1,16),I=1,11)
READ(123,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=1,3),KK=1,20),J=1,16),I=1,12)
READ(124,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=1,3),KK=1,20),J=1,16),I=1,13)
READ(125,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=1,3),KK=1,20),J=1,16),I=1,14)
READ(126,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,1)
READ(127,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,2)
READ(128,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,3)
READ(129,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,4)
READ(130,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,5)
READ(131,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,6)
READ(132,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,7)
READ(133,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,8)
READ(134,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,9)
READ(135,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,10)
READ(136,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,11)
READ(137,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,12)
READ(138,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,13)
READ(139,20000) (((CAJ(I,J,K,L),L=4,6),KK=1,20),J=1,16),I=1,14)
2000 FORMAT(3023,116)
DO 900 NFILE=1,4
READ(5,12) MUST1,MUST2,MUST3,MUST4,MUST5,MUST6
DO 1000 I=1,NDIM
DO 1000 J=1,NDIM
ELR3LU(I,J)=ELR3LU(I,J)+D123MN(IN(I),IN(J),JN(I),JN(J),
+KN(I),KN(J),LN(I),LN(J),MN(I),MN(J),NN(I),NN(J),A,A1,A2,A3)
ELRBIR(I,J)=ELRBIR(I,J)+D1MN(IN(I),IN(J),JN(I),JN(J),KN(I),KN(J),
+LN(I),LN(J),MN(I),MN(J),NN(I),NN(J),A,A1,A2,A3)
ELRIKI(I,J)=ELRIKI(I,J)+D2MN(IN(I),IN(J),JN(I),JN(J),KN(I),KN(J),
+LN(I),LN(J),MN(I),MN(J),NN(I),NN(J),A,A1,A2,A3)
ELRUC(I,J)=ELRUC(I,J)+D3MN(IN(I),IN(J),JN(I),JN(J),KN(I),KN(J),
+LN(I),LN(J),MN(I),MN(J),NN(I),NN(J),A,A1,A2,A3)
1000 CONTINUE
900 CONTINUE
800 CONTINUE
REL3LU=0.000
REL3IR=0.000
REL3IKI=0.000
REL3UC=0.000
DO 5317 I=1,NDIM
DO 5317 J=1,NDIM
CIJ=C(I)*C(J)
REL3LU=REL3LU+CIJ*ELR3LU(I,J)
REL3IR=REL3IR+CIJ*ELR3IR(I,J)
REL3IKI=REL3IKI+CIJ*ELR3IKI(I,J)
REL3UC=REL3UC+CIJ*ELR3UC(I,J)
5317 CONTINUE
REL3LU=REL3LU/OVRLP
REL3IR=REL3IR/OVRLP
REL3IKI=REL3IKI/OVRLP
REL3UC=REL3UC/OVRLP
REL3LU=REL3LU+REL3IR+REL3IKI+REL3UC
793 WRITE(6,793) REL3LU,REL3IR,REL3IKI,REL3UC,REL
FORMAT(2X,203J,116)
STOP
END
REAL FUNCTION ENTE3*3(I,J,K,L,M,N,MUST)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION MUST(6)
COMMON/ENT2/KAP1
COMMON/ENT/KAP,IE1,IE2,IE3

```

```

COMMON/ABK/AAK(10,10,10,10),ABK(10,10,2)
COMMON/AJW/AJ(14,16,20,6)
COMMON/DORT/DORTP1
TOP1=0.000
IF((L/2)*2-L) 20,21,20
20 IF((M/2)*2-M) 30,21,30
30 IF((N/2)*2-N) 40,21,40
40 KAR=KAP1
GO TO 23
21 CONTINUE
KAR=KAP
23 CONTINUE
DO 500 KAPA=1,KAR
KA=KAPA-1
TK1=AAK(L+4,M+4,N+4,KA+1)/(2*KA+1)**2
IF(TK1.EQ.0.000) GO TO 500
TOP2=0.000
DO 400 IS1=1,IE1
IS1=IS1-1
TK2=ABK(L+4,KA+1,IS1+1)
IF(TK2.EQ.0.000) GO TO 400
TOP3=0.000
DO 300 IS2=1,IE2
IS2=IS2-1
TK3=ABK(M+4,KA+1,IS2+1)
IF(TK3.EQ.0.000) GO TO 300
TOP4=0.000
DO 200 IS3=1,IE3
IS3=IS3-1
TK4=ABK(N+4,KA+1,IS3+1)
IF(TK4.EQ.0.000) GO TO 200
I2=I+2
J2=J+2
K2=K+2
KA2=KA*2
IS12=2*(IS1+IS2)
IS13=2*(IS1+IS3)
IS23=2*(IS2+IS3)
II242=(KAP+IE1+IE3)-0
II112=2*IE3-2
IND11=I2+KA2+IS23
IND12=J2+KA2+IS13
IND13=K2+KA2+IS11
IND21=J2+N+2*(IS1-IS3)+II11
IND22=K2+M+2*(IS1-IS2)+II11
IND23=I2+N+2*(IS2-IS3)+II11
IND24=K2+L+2*(IS2-IS1)+II11
IND25=I2+M+2*(IS3-IS2)+II11
IND26=J2+L+2*(IS3-IS1)+II11
IND31=K2+L+M-KA2-IS12+II2
IND32=J2+L+N-KA2-IS13+II2
IND33=I2+M+N-KA2-IS23+II2
W1=AW(IND11,IND21,IND31,MJST(1))
W2=AW(IND11,IND22,IND32,MJST(2))
W3=AW(IND12,IND23,IND31,MJST(3))
W4=AW(IND12,IND24,IND33,MJST(4))
W5=AW(IND13,IND25,IND32,MJST(5))
W6=AW(IND13,IND26,IND33,MJST(6))
TOP5=W1+W2+W3+W4+W5+W6
TOP4=TOP4+TK4*TOP5
200 CONTINUE
TOP3=TOP3+TK3*TOP4
300 CONTINUE
TOP2=TOP2+TK2*TOP3
400 CONTINUE

```

```

TOP1=TOP1+TK1*TOP2
500 CONTINUE
ENTEG=TOP1*DORTPI**3
RETURN
END
REAL FUNCTION D123MN*8(IG,IB,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION D123(12)
COMMON/FILE/ NFILE
COMMON/SPIN/ MULT
COMMON/UST/ MUST1(6),MUST2(6),MUST3(6),MUST4(6),MUST5(6),MUST6(6)
IF(NFILE.EQ.4) GO TO 10
IF(NFILE.EQ.3) GO TO 20
IF(NFILE.EQ.2) GO TO 30
D123(1)=0.0
D123(2)=0.0
D123(3)=0.0
D123(4)=0.0
D123(5)=0.0
D123(6)=0.0
IF(MULT.EQ.2) GO TO 40
D123(1)=0.5*D123GB(IG,IB,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST1)
D123(2)=0.5*D123GB(JG,JB,IG,IB,KG,KB,MG,MB,LG,LB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST2)
D123(3)=0.5*D123GB(KG,KB,JG,JB,IG,IB,NG,NB,MG,MB,LG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MUST3)
D123(4)=0.5*D123GB(KG,KB,IG,IB,JG,JB,NG,NB,LG,LB,MG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST4)
D123(5)=0.5*D123GB(IG,IB,KG,KB,JG,JB,LG,LB,NG,NB,MG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST5)
D123(6)=0.5*D123GB(JG,JB,KG,KB,IG,IB,MG,MB,NG,NB,LG,LB,
*A,A1,A2,A3,6,MUST6)
40 D123MN=0.0D0
DO 50 I=1,6
50 D123MN=D123MN+D123(I)
GO TO 60
30 D123(1)=0.5*D123GB(IG,KB,JG,IB,KG,JB,LG,NB,MG,LB,NG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST1)
D123(2)=0.5*D123GB(IG,JB,JG,KB,KG,IB,LG,MB,MG,NB,NG,LB,
*A,A1,A2,A3,6,MUST2)
D123(3)=0.5*D123GB(JG,KB,IG,JB,KG,IB,MG,NB,LG,MB,NG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MUST3)
D123(4)=0.5*D123GB(JG,IB,IG,KB,KG,JB,MG,LB,LG,NB,NG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST4)
D123(5)=0.5*D123GB(KG,JB,JG,IB,IG,KB,NG,MB,MG,LB,LG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST3)
D123(6)=0.5*D123GB(KG,IB,JG,KB,IG,JB,NG,LB,MG,NB,LG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST5)
D123(7)=0.5*D123GB(KG,IB,IG,JB,JG,KB,NG,LB,LG,MB,MG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST1)
D123(8)=0.5*D123GB(KG,JB,IG,KB,JG,IB,NG,MB,LG,NB,MG,LB,
*A,A1,A2,A3,6,MUST6)
D123(9)=0.5*D123GB(IG,JB,KG,IB,JG,KB,LG,MB,NG,LB,MG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST4)
D123(10)=0.5*D123GB(IG,KB,KG,JB,JG,IB,LG,NB,NG,MB,MG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MUST5)
D123(11)=0.5*D123GB(JG,IB,KG,JB,IG,KB,MG,LB,NG,MB,LG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST2)
D123(12)=0.5*D123GB(JG,KB,KG,IB,IG,JB,MG,NB,NG,LB,LG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST6)
IF(MULT.EQ.2) GO TO 70
DO 2 I=1,12
2 D123(I)=D123(I)

```



```

70 D123MN=0.000
   DO 80 I=1,12
80 D123MN=D123MN+D123(I)
   GO TO 60
20 D123(1)=-0.5*D123GB(IG,IB,JG,KB,KG,JB,LG,LB,MG,NB,NG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST1)
   D123(2)=-0.5*D123GB(JG,KB,IG,IB,KG,JB,MG,NB,LG,LB,NG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST2)
   D123(3)=-0.5*D123GB(KG,JB,JG,KB,IG,IB,NG,MB,MG,NB,LG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MUST3)
   D123(4)=-0.5*D123GB(KG,JB,IG,IB,JG,KB,NG,MB,LG,LB,MG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST2)
   D123(5)=-0.5*D123GB(IG,IB,KG,JB,JG,KB,LG,LB,NG,MB,MG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST1)
   D123(6)=-0.5*D123GB(JG,KB,KG,JB,IG,IB,MG,NB,NG,MB,LG,LB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST3)
   D123(7)=-0.5*D123GB(IG,KB,JG,JB,KG,IB,LG,NB,MG,MB,NG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MUST4)
   D123(8)=-0.5*D123GB(JG,JB,IG,KB,KG,IB,MG,MB,LG,NB,NG,LB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST5)
   D123(9)=-0.5*D123GB(KG,IB,JG,JB,IG,KB,NG,LB,MG,MB,LG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST4)
   D123(10)=-0.5*D123GB(KG,IB,IG,KB,JG,JB,NG,LB,LG,NB,MG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST6)
   D123(11)=-0.5*D123GB(IG,KB,KG,IB,JG,JB,LG,NB,NG,LB,MG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST6)
   D123(12)=-0.5*D123GB(JG,JB,KG,IB,IG,KB,MG,MB,NG,LB,LG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST5)
C NFILE=3 DURUMUNDA IKILI VE DORTLULERIN ELEMENLARI AYNI OLUYOR.
D123MN=0.000
   DO 100 I=1,12
100 D123MN=D123MN+D123(I)
   GO TO 60
10 D123(1)=0.0
   D123(2)=0.0
   D123(3)=0.0
   D123(4)=0.0
   D123(5)=0.0
   D123(6)=0.0
   IF(MULT.EQ.2) GO TO 110
   D123(1)=-0.5*D123GB(IG,JB,JG,IB,KG,KB,LG,MB,MG,LB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST1)
   D123(2)=-0.5*D123GB(JG,IB,IG,JB,KG,KB,MG,LB,LG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST1)
   D123(3)=-0.5*D123GB(KG,KB,JG,IB,IG,JB,NG,NB,MG,LB,LG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST2)
   D123(4)=-0.5*D123GB(KG,KB,IG,JB,JG,IB,NG,NB,LG,MB,MG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MUST2)
   D123(5)=-0.5*D123GB(IG,JB,KG,KB,JG,IB,LG,MB,NG,NB,MG,LB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST3)
   D123(6)=-0.5*D123GB(JG,IB,KG,KB,IG,JB,MG,LB,NG,NB,LG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST3)
110 D123MN=0.000
   DO 120 I=1,3
120 D123MN=D123MN+D123(I)
60 RETURN
END
REAL FUNCTION D1MN*3(IG,IB,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION D1(12)
COMMON/FILE/ NFILE
COMMON/SPIN/ MJLT
COMMON/UST/ MUST1(6),MUST2(6),MUST3(6),MUST4(6),MUST5(6),MUST6(6)
IF(NFILE.EQ.4) GO TO 10

```



```

IF(NFILE.EQ.3) GO TO 20
IF(NFILE.EQ.2) GO TO 30
D1(1)=0.0
D1(2)=0.0
D1(3)=D1GB(KG,KB,JG,JB,IG,IB,NG,NB,MG,MB,LG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MUST3)
D1(4)=D1GB(KG,KB,IG,IJ,JG,JB,NG,NB,LG,LB,MG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST4)
D1(5)=0.0
D1(6)=0.0
D1IN=0.0000
DO 50 I=1,6
50 D1IN=D1IN+D1(I)
GO TO 60
30 D1(1)=0.0
D1(2)=D1GB(IG,IJ,JG,KB,KG,IB,LG,MB,MG,NB,NG,LB,
*A,A1,A2,A3,6,MUST2)
D1(3)=0.0
D1(4)=D1GB(JG,IB,IG,KB,KG,JB,MG,LB,LG,NB,NG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST4)
D1(5)=0.0
D1(6)=0.0
D1(7)=0.0
D1(8)=0.0
D1(9)=D1GB(IG,JB,KG,IB,JG,KB,LG,MB,NG,LB,MG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST4)
D1(10)=0.0
D1(11)=D1GB(JG,IB,KG,JB,IG,KB,MG,LB,NG,MB,LG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST2)
D1(12)=0.0
D1IN=0.0000
DO 80 I=1,12
80 D1IN=D1IN+D1(I)
GO TO 60
20 D1(1)=D1GB(IG,IB,JG,KB,KG,JB,LG,LB,MG,NB,NG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST1)
D1(2)=0.0
D1(3)=0.0
D1(4)=0.0
D1(5)=D1GB(IG,IB,KG,JB,JG,KB,LG,LB,NG,MB,MG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST1)
D1(6)=0.0
D1(7)=0.0
D1(8)=D1GB(JG,JB,IG,KB,KG,IB,MG,MB,LG,NB,NG,LB,
*A,A1,A2,A3,6,MUST5)
D1(9)=0.0
D1(10)=0.0
D1(11)=0.0
D1(12)=D1GB(JG,JB,KG,IB,IG,KB,MG,MB,NG,LB,LG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST5)
D1IN=0.0000
DO 100 I=1,12
100 D1IN=D1IN+D1(I)
GO TO 60
10 D1(1)=0.0
D1(2)=0.0
D1(3)=D1GB(KG,KB,JG,IB,IG,JB,NG,NB,MG,LB,LG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST2)
D1(4)=D1GB(KG,KB,IG,JB,JG,IB,NG,NB,LG,MB,MG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MUST2)
D1(5)=0.0
D1(6)=0.0
D1IN=0.0000
DO 120 I=1,6
120 D1IN=D1IN+D1(I)

```

```

60  RETURN
    END
    REAL FUNCTION D2MN*8(IG,IB,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
    *A,A1,A2,A3)
    IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
    DIMENSION D2(12)
    COMMON/FILE/ NFILE
    COMMON/SPIN/ MULT
    COMMON/UST/ MUST1(6),MUST2(6),MUST3(6),MUST4(6),MUST5(6),MUST6(6)
    IF(NFILE.EQ.4) GO TO 10
    IF(NFILE.EQ.5) GO TO 20
    IF(NFILE.EQ.12) GO TO 30
    D2(1)=0.0
    D2(2)=0.0
    D2(3)=0.0
    D2(4)=0.0
    D2(5)=D2GB(IG,IB,KG,KB,JG,JB,LG,LB,NG,NB,MG,MB,
    *A,A1,A2,A3,5,MUST5)
    D2(6)=D2GB(JG,JB,KG,KB,IG,IB,MG,MB,NG,NB,LG,LB,
    *A,A1,A2,A3,6,MUST6)
    D2MN=0.000
    DO 50 I=1,6
50  D2MN=D2MN+D2(I)
    GO TO 60
30  D2(1)=D2GB(IG,KB,JG,IB,KG,JB,LG,NB,MG,LB,NG,MB,
    *A,A1,A2,A3,4,MUST1)
    D2(2)=0.0
    D2(3)=D2GB(JG,KB,IG,JB,KG,IB,MG,NB,LG,MB,NG,LB,
    *A,A1,A2,A3,3,MUST3)
    D2(4)=0.0
    D2(5)=D2GB(KG,JB,JG,IB,IG,KB,NG,MB,MG,LB,LG,NB,
    *A,A1,A2,A3,2,MUST3)
    D2(6)=0.0
    D2(7)=D2GB(KG,IB,IG,JB,JG,KB,NG,LB,LG,MB,MG,NB,
    *A,A1,A2,A3,1,MUST1)
    D2(8)=0.0
    D2(9)=0.0
    D2(10)=0.0
    D2(11)=0.0
    D2(12)=0.0
    D2MN=0.000
    DO 80 I=1,12
80  D2MN=D2MN+D2(I)
    GO TO 60
20  D2(1)=0.0
    D2(2)=D2GB(JG,KB,IG,IB,KG,JB,MG,NB,LG,LB,NG,MB,
    *A,A1,A2,A3,4,MUST2)
    D2(3)=0.0
    D2(4)=D2GB(KG,JB,IG,IB,JG,KB,NG,MB,LG,LB,MG,NB,
    *A,A1,A2,A3,2,MUST2)
    D2(5)=0.0
    D2(6)=0.0
    D2(7)=D2GB(IG,KB,JG,JB,KG,IB,LG,NB,MG,MB,NG,LB,
    *A,A1,A2,A3,3,MUST4)
    D2(8)=0.0
    D2(9)=D2GB(KG,IB,JG,JB,IG,KB,NG,LB,NG,MB,LG,NB,
    *A,A1,A2,A3,1,MUST4)
    D2(10)=0.0
    D2(11)=0.0
    D2(12)=0.0
    D2MN=0.000
    DO 100 I=1,12
100 D2MN=D2MN+D2(I)
    GO TO 60
10  D2(1)=0.0

```

```

D2(2)=0.0
D2(3)=0.0
D2(4)=0.0
D2(5)=D2GB(IG,JG,KG,KJ,JG,IB,LG,MB,NG,NB,MG,LB,
*A,A1,A2,A3,5,MJST3)
D2(6)=D2GB(JG,IB,KG,KJ,IG,JG,MB,LG,NG,NB,LG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MJST3)
D2MN=0.000
DO 120 I=1,6
120 D2MN=D2MN+D2(I)
60 RETURN
END
REAL FUNCTION D3MN*3(IG,IB,JG,JG,KG,KJ,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3)
IMPLICIT REAL*3(A-H,O-Z)
DIMENSION D3(112)
COMMON/FILE/ NFILE
COMMON/SPIN/ MULT
COMMON/UST/ MUST1(6),MUST2(6),MUST3(6),MUST4(6),MUST5(6),MUST6(6)
IF(NFILE.EQ.4) GO TO 10
IF(NFILE.EQ.3) GO TO 20
IF(NFILE.EQ.2) GO TO 30
D3(1)=D3GB(IG,IB,JG,JG,KG,KJ,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST1)
D3(2)=D3GB(JG,JG,IG,IB,KG,KJ,MG,MB,LG,LB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST2)
D3(3)=0.0
D3(4)=0.0
D3(5)=0.0
D3(6)=0.0
D3MN=0.000
DO 50 I=1,6
50 D3MN=D3MN+D3(I)
30 D3(1)=0.0
D3(2)=0.0
D3(3)=0.0
D3(4)=0.0
D3(5)=0.0
D3(6)=D3GB(KG,IB,JG,KJ,IG,JG,NG,LB,MG,NB,LG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MJST5)
D3(7)=0.0
D3(8)=D3GB(KG,JG,IG,KJ,JG,IB,NG,MB,LG,NB,MG,LB,
*A,A1,A2,A3,6,MUST6)
D3(9)=0.0
D3(10)=D3GB(IG,KJ,KG,JG,JG,IB,LG,NB,NG,MB,MG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MJST5)
D3(11)=0.0
D3(12)=D3GB(JG,KJ,KG,IB,IG,JG,MB,NG,NG,LB,LG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST6)
D3MN=0.000
DO 80 I=1,12
80 D3MN=D3MN+D3(I)
20 GO TO 60
D3(1)=0.0
D3(2)=0.0
D3(3)=D3GB(KG,JG,JG,KJ,IG,IB,NG,MB,MG,NB,LG,LB,
*A,A1,A2,A3,6,MJST3)
D3(4)=0.0
D3(5)=0.0
D3(6)=D3GB(JG,KJ,KG,JG,IG,IB,MG,NB,NG,MB,LG,LB,
*A,A1,A2,A3,3,MJST3)
D3(7)=0.0
D3(8)=0.0
D3(9)=0.0

```

```

D3(1)=D3GB(KG,IB,IG,KB,JG,JB,NG,LB,LG,NB,MG,MB,
*A,A1,A2,A3,5,MUST6)
D3(1)=D3GB(IG,KB,KG,IB,JG,JB,LG,NB,NG,LB,MG,MB,
*A,A1,A2,A3,4,MUST6)
D3(1)=0.0
D3IN=D.0DDU
DO 100 I=1,12
100 D3IN=D3MN+D3(I)
GO TO 60
10 D3(1)=D3GB(IG,JB,JG,IB,KG,KB,LG,MB,MG,LB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,2,MUST1)
D3(2)=D3GB(JG,IB,IG,JB,KG,KB,MG,LB,LG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,1,MUST1)
D3(3)=0.0
D3(4)=0.0
D3(5)=0.0
D3(6)=0.0
D3IN=D.0DDU
DO 120 I=1,6
120 D3IN=D3MN+D3(I)
60 RETURN
END
REAL FUNCTION D123GB*8(IG,IB,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,MTJR,MUST)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION ETGB(31),MUST(6)
IGB=IG+IB
JGB=JG+JB
KGB=KG+KB
LGB=LG+LB
MGB=MG+MB
NGB=NG+NB
IF(MTJR.EQ.1) GO TO 111
IF(MTJR.EQ.2) GO TO 222
IF(MTJR.EQ.3) GO TO 333
IF(MTJR.EQ.4) GO TO 444
IF(MTJR.EQ.5) GO TO 555
ONC1=A*A2
ONC2=A*A3
ONC3=A*A1
GO TO 666
111 ONC1=A*A1
ONC2=A*A2
ONC3=A*A3
GO TO 666
222 ONC1=A*A2
ONC2=A*A1
ONC3=A*A3
GO TO 666
333 ONC1=A*A3
ONC2=A*A2
ONC3=A*A1
GO TO 666
444 ONC1=A*A3
ONC2=A*A1
ONC3=A*A2
GO TO 666
555 ONC1=A*A1
ONC2=A*A3
ONC3=A*A2
666 ETGB(1)=A*A*(A1*A1+A2*A2+A3*A3)*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB,NGB,
*MUST)
ETGB(2)=-ONC1*(2.0*IB+NB+NB+2.0)*ENTEG(IGB-1,JGB,KGB,LGB,MGB,
*NGB,MUST)
ETGB(3)=-ONC2*(2.0*JB+NB+LB+2.0)*ENTEG(IGB,JGB-1,KGB,LGB,MGB,

```

```

*NG3,MUST)
ETGB(4)=-ONC3*(2.0*K3+L3+M3+2.0)*ENTEG(IG3,JG3,KG3-1,LGB,MGB,
*NG3,MUST)
DO 20 I=5,31
20 ETGB(I)=0.0
IF(IG3.EQ.0) GO TO 21
ETGB(5)=I3*(IJ+J3+M3+1)*ENTEG(IG3-2,JG3,KG3,LG3,MGB,NG3,MUST)
21 IF(JB.EQ.0) GO TO 22
ETGB(6)=J3*(JJ+N3+L3+1)*ENTEG(IG3,JG3-2,KG3,LG3,MGB,NG3,MUST)
22 IF(KB.EQ.0) GO TO 23
ETGB(7)=KB*(KJ+L3+M3+1)*ENTEG(IG3,JG3,KG3-2,LG3,MGB,NG3,MUST)
23 IF(NB.EQ.0) GO TO 24
ETGB(8)=NB*(2*N3+I3+JB+L3+M3+2)*ENTEG(IG3,JG3,KG3,LGB,MGB,
*NG3-2,MUST)
ETGB(11)=-ONC1*I3*ENTEG(IG3+1,JG3,KG3,LGB,MGB,NG3-2,MUST)
ETGB(13)=-ONC1*N3*ENTEG(IG3,JG3+1,KG3,LGB,MGB,NG3-2,MUST)
ETGB(17)=-ONC2*J3*ENTEG(IG3+2,JG3-1,KG3,LGB,MGB,NG3-2,MUST)
ETGB(21)=-ONC1*I3*ENTEG(IG3-1,JG3+2,KG3,LGB,MGB,NG3-2,MUST)
24 IF(MB.EQ.0) GO TO 25
ETGB(9)=MB*(2*I3+I3+KB+L3+N3+2)*ENTEG(IG3,JG3,KG3,LGB,MGB-2,
*NG3,MUST)
ETGB(12)=-ONC1*MB*ENTEG(IG3+1,JG3,KG3,LGB,MGB-2,NG3,MUST)
ETGB(15)=-ONC3*I3*ENTEG(IG3,JG3,KG3+1,LGB,MGB-2,NG3,MUST)
ETGB(19)=-ONC3*MB*ENTEG(IG3+2,JG3,KG3-1,LGB,MGB-2,NG3,MUST)
ETGB(25)=-ONC1*I3*ENTEG(IG3-1,JG3,KG3+2,LGB,MGB-2,NG3,MUST)
25 IF(LB.EQ.0) GO TO 26
ETGB(10)=L3*(2*L3+JJ+KB+M3+N3+2)*ENTEG(IG3,JG3,KG3,LGB-2,
*MG3,N33,MUST)
ETGB(14)=-ONC2*L3*ENTEG(IG3,JG3+1,KG3,LGB-2,MG3,NG3,MUST)
ETGB(16)=-ONC3*L3*ENTEG(IG3,JG3,KG3+1,LGB-2,MG3,NG3,MUST)
ETGB(23)=-ONC3*L3*ENTEG(IG3,JG3+2,KG3-1,LGB-2,MG3,NG3,MUST)
ETGB(27)=-ONC2*L3*ENTEG(IG3,JG3-1,KG3+2,LGB-2,MG3,NG3,MUST)
26 IF(JB.EQ.0) OR (IJ.EQ.0) GO TO 27
ETGB(18)=-N3*J3*ENTEG(IG3+2,JG3-2,KG3,LGB,MGB,NG3-2,MUST)
27 IF(KB.EQ.0) OR (MB.EQ.0) GO TO 28
ETGB(20)=-M3*KB*ENTEG(IG3+2,JG3,KG3-2,LGB,MGB-2,NG3,MUST)
28 IF(IB.EQ.0) OR (NJ.EQ.0) GO TO 29
ETGB(22)=-N3*I3*ENTEG(IG3-2,JG3+2,KJ,LGB,MGB,NG3-2,MUST)
29 IF(KJ.EQ.0) OR (LJ.EQ.0) GO TO 30
ETGB(24)=-L3*KB*ENTEG(IG3,JG3+2,KG3-2,LGB-2,MG3,NG3,MUST)
30 IF(I3.EQ.0) OR (I3.EQ.0) GO TO 31
ETGB(26)=-M3*I3*ENTEG(IG3-2,JG3,KG3+2,LGB,MGB-2,NG3,MUST)
31 IF(JB.EQ.0) OR (LJ.EQ.0) GO TO 32
ETGB(28)=-L3*J3*ENTEG(IG3,JG3-2,KG3+2,LGB-2,MG3,NG3,MUST)
32 IF(LB.EQ.0) OR (MJ.EQ.0) GO TO 33
ETGB(29)=-M3*L3*ENTEG(IG3,JG3,KG3,LGB-2,MGB-2,NG3+2,MUST)
33 IF(LJ.EQ.0) OR (NJ.EQ.0) GO TO 34
ETGB(30)=-N3*L3*ENTEG(IG3,JG3,KG3,LGB-2,MGB+2,NG3-2,MUST)
34 IF(MB.EQ.0) OR (NJ.EQ.0) GO TO 35
ETGB(31)=-I3*MB*ENTEG(IG3,JG3,KG3,LGB+2,MGB-2,NG3-2,MUST)
35 D123GG=0.0
DO 10 I=1,31
10 D123GG=D123GG+ETGB(I)
RETURN
END
REAL FUNCTION D1GB*3(IG,IS,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,NTJR,MUST)
IMPLICIT REAL*3(A-H,O-Z)
DIMENSION ETGB(12),MUST(6)
IG3=IG+IS
JG3=JG+JB
KG3=KG+KB
LG3=LG+LB
MG3=MG+MB
NG3=NG+NB

```

```

IF(MTUR.EQ.1).OR.(MTUR.EQ.5) GO TO 111
IF(MTUR.EQ.1).OR.(MTUR.EQ.5) GO TO 222
ONC=JA*A3
GO TO 666
111 ONC=JA*A1
GO TO 666
222 ONC=JA*A2
666 ETGB(1)=ONC*ONC*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB,NGB,MUST)
ETGB(2)=ONC*(2.0*IB+NB+NB+2.0)*ENTEG(IGB-1,JGB,KGB,LGB,
*MGB,NGB,MUST)
DO 20 I=3,12
20 ETGB(I)=0.0
IF(IGB.EQ.0) GO TO 21
ETGB(3)=IB*(IB+NB+NB+1)*ENTEG(IGB-2,JGB,KGB,LGB,MGB,NGB,MUST)
21 IF(NB.EQ.0) GO TO 22
ETGB(4)=NB*(NB+IB+NB+1)*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB,NGB-2,MUST)
ETGB(5)=ONC*NB*ENTEG(IGB+1,JGB,KGB,LGB,MGB,NGB-2,MUST)
ETGB(6)=ONC*NB*ENTEG(IGB-1,JGB+2,KGB,LGB,MGB,NGB-2,MUST)
22 IF(MB.EQ.0) GO TO 23
ETGB(7)=MB*(MB+IB+NB+1)*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB-2,NGB,MUST)
ETGB(8)=ONC*MB*ENTEG(IGB+1,JGB,KGB,LGB,MGB-2,NGB,MUST)
ETGB(9)=ONC*MB*ENTEG(IGB-1,JGB,KGB+2,LGB,MGB-2,NGB,MUST)
23 IF(IGB.EQ.0).OR.(NB.EQ.0) GO TO 24
ETGB(10)=IB*NB*ENTEG(IGB-2,JGB+2,KGB,LGB,MGB,NGB-2,MUST)
24 IF(IGB.EQ.0).OR.(NB.EQ.0) GO TO 25
ETGB(11)=IB*NB*ENTEG(IGB-2,JGB,KGB+2,LGB,MGB-2,NGB,MUST)
25 IF(MB.EQ.0).OR.(NB.EQ.0) GO TO 26
ETGB(12)=NB*NB*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB+2,MGB-2,NGB-2,MUST)
26 D1GB=0.0
DO 10 I=1,12
10 D1GB=D1GB+ETGB(I)
RETURN
END
REAL FUNCTION D2GB*3(IG,IB,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
*A,A1,A2,A3,MTUR,MUST)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION ETGB(12),MUST(6)
IGB=IG+IB
JGB=JG+JB
KGB=KG+KB
LGB=LG+LB
MGB=MG+MB
NGB=NG+NB
IF(MTUR.EQ.1).OR.(MTUR.EQ.4) GO TO 111
IF(MTUR.EQ.1).OR.(MTUR.EQ.5) GO TO 222
ONC=JA*A3
GO TO 666
111 ONC=JA*A1
GO TO 666
222 ONC=JA*A2
666 ETGB(1)=ONC*ONC*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB,NGB,MUST)
ETGB(2)=ONC*(2.0*JB+NB+LB+2.0)*ENTEG(IGB,JGB-1,KGB,LGB,
*MGB,NGB,MUST)
DO 20 I=3,12
20 ETGB(I)=0.0
IF(JGB.EQ.0) GO TO 21
ETGB(3)=JB*(JB+NB+LB+1)*ENTEG(IGB,JGB-2,KGB,LGB,MGB,NGB,MUST)
21 IF(NB.EQ.0) GO TO 22
ETGB(4)=NB*(NB+JB+LB+1)*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB,NGB-2,MUST)
ETGB(5)=ONC*NB*ENTEG(IGB,JGB+1,KGB,LGB,MGB,NGB-2,MUST)
ETGB(6)=ONC*NB*ENTEG(IGB+2,JGB-1,KGB,LGB,MGB,NGB-2,MUST)
22 IF(LB.EQ.0) GO TO 23
ETGB(7)=LB*(LB+JB+NB+1)*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB-2,MGB,NGB,MUST)
ETGB(8)=ONC*LB*ENTEG(IGB,JGB+1,KGB,LGB-2,MGB,NGB,MUST)
ETGB(9)=ONC*LB*ENTEG(IGB,JGB-1,KGB+2,LGB-2,MGB,NGB,MUST)

```



```

23 IF(JB.EQ.0.OR.MB.EQ.0) GO TO 24
   ETGB(10)=-JB*MB*ENTEG(IGB+2,JGB-2,KGB,LGB,MGB,NGB-2,MUST)
24 IF(JB.EQ.0.OR.LB.EQ.0) GO TO 25
   ETGB(11)=-JB*LB*ENTEG(IGB,JGB-2,KGB+2,LGB-2,MGB,NGB,MUST)
25 IF(LB.EQ.0.OR.MB.EQ.0) GO TO 26
   ETGB(12)=-LB*MB*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB-2,MGB+2,NGB-2,MUST)
26 D2GB=0
   DO 10 I=1,12
10 D2GB=D2GB+ETGB(I)
   RETURN
   END
   REAL FUNCTION D3GB*3(IG,IJ,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,
   *A,A1,A2,A3,MTUR,MUST)
   IMPLICIT REAL*8(A-H,J-Z)
   DIMENSION ETGB(12),MUST(3)
   IGB=IG+IB
   JGB=JG+JB
   KGB=KG+KB
   LGB=LG+LB
   MGB=MG+MB
   NGB=NG+NB
   IF(MTUR.EQ.3.OR.MTUR.EQ.6) GO TO 111
   IF(MTUR.EQ.4.OR.MTUR.EQ.5) GO TO 222
   ONCE=A3
   GO TO 666
111 ONCE=A1
   GO TO 666
222 ONCE=A2
666 ETGB(1)=ONCE*ONCE*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB,NGB,MUST)
   ETGB(2)=-ONCE*(2.0*KJ+LB+MB+2.0)*ENTEG(IGB,JGB,KGB-1,LGB,
   *MGB,NGB,MUST)
   DO 20 I=3,12
20 ETGB(I)=0.0
   IF(KB.EQ.0) GO TO 21
   ETGB(3)=KB*(KJ+LB+MB+1)*ENTEG(IGB,JGB,KGB-2,LGB,MGB,NGB,MUST)
21 IF(MB.EQ.0) GO TO 22
   ETGB(4)=MB*(MJ+KJ+LJ+1)*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB-2,NGB,MUST)
   ETGB(5)=-ONCE*MJ*ENTEG(IGB,JGB,KGB+1,LGB,MGB-2,NGB,MUST)
   ETGB(6)=ONCE*MB*ENTEG(IGB+2,JGB,KGB-1,LGB,MGB-2,NGB,MUST)
22 IF(LB.EQ.0) GO TO 23
   ETGB(7)=LB*(LJ+KJ+MJ+1)*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB-2,MGB,NGB,MUST)
   ETGB(8)=-ONCE*LJ*ENTEG(IGB,JGB,KGB+1,LGB-2,MGB,NGB,MUST)
   ETGB(9)=ONCE*LB*ENTEG(IGB,JGB+2,KGB-1,LGB-2,MGB,NGB,MUST)
23 IF(KB.EQ.0.OR.IJ.EQ.0) GO TO 24
   ETGB(10)=-KJ*JB*ENTEG(IGB+2,JGB,KGB-2,LGB,MGB-2,NGB,MUST)
24 IF(KB.EQ.0.OR.LJ.EQ.0) GO TO 25
   ETGB(11)=-KJ*LB*ENTEG(IGB,JGB+2,KGB-2,LGB-2,MGB,NGB,MUST)
25 IF(LB.EQ.0.OR.MJ.EQ.0) GO TO 26
   ETGB(12)=-LJ*JB*ENTEG(IGB,JGB,KGB,LGB-2,MGB-2,NGB+2,MUST)
26 D3GB=0
   DO 10 I=1,12
10 D3GB=D3GB+ETGB(I)
   RETURN
   END

```

## KAYNAKLAR

1. K.D.Böcklen, W.Dankwort, E.Pitz and S.Penselin; Z.Phys., 200, 464 (1967).
2. P.A.Vandenbout, E.Aygün, V.J.Ehlers, T.Incesu, A.Sap-lakoğlu and H.A.Shugart; Phys.Rev., 165, 88 (1968).
3. A.Özmen; Doktora Tezi, ODTÜ (1976).
4. H.Grotch and R.A.Hegstrom; Phys.Rev., A 8, 116 (1973).
5. C.L. Pekeris; Phys.Rev., 112, 1949 (1958).
6. C.L. Pekeris; Phys.Rev., 115, 1216 (1959).
7. F.G. Walther, W.D.Philips, and D.Kleppner; Phys.Rev.lett., 28, 1159 (1972).
8. H.Grotch and R.A.Hegstrom; Phys.Rev., A 4, 59 (1971).
9. W.E.Lamb Jr. and R.C.Retherford; Phys.Rev., 72, 241 (1947).
10. P.Kusch and H.M.Foley; Phys.Rev., 74, 250 (1948).
11. J.Schwinger; Phys.Rev., 82, 852 (1953).
12. R.A.Hegstrom; A 11, 421 (1975).
13. E.A.Hylleraas; Z.Phys., 54, 347 (1929).
14. T.Ahlenius and S.Larsson; Phys.Rev.A 18, 1329 (1978).
15. J.F.Perkins; Phys.Rev., A 13, 915 (1976).



16. S.Larsson; Phys.Rev., 169, 49 (1968).
17. H.M.James and A.S.Coolidge; Phys.Rev., 49, 688 (1936).
18. E.A.Burke; Phys.Rev., 130, 1871 (1963).
19. Y.Öhrn and J.Nordling; Arkiv Fysik., 31, 471 (1966).
20. R.A.Hestrom; Phys.Rev., A 7, 451 (1973).
21. H.Grotch and R.A.Hegstrom; Phys.Rev., A 8, 2771 (1973).
22. F.L.Pilar; Elementary Quantum Chemistry, McCraw-Hill, New.York.pp 341, (1968).
23. H.Ö.Pamuk; Kuantum Kimyasına Giriş, Karadeniz Teknik Üniversitesi, Trabzon. s.304, (1979).
24. M.Şimşek; Doktora Tezi, İnönü Üniversitesi (1983);  
M.Şimşek, S.Şimşek ve Ş.Erkoç; Chem. Phys.Letters 91, 456, (1982).
25. A.A.Frost; Theoret Chim Acta (Berl), 1, 36 (1962).
26. J.F.Perkins; Phys.Rev.A, 5, 514 (1972).
27. Kaynak.24'te  $\alpha = \beta = 2.69$ ,  $\gamma = 0.672$  dir. Hesaplamalarda  $\alpha = \beta = 2.69$ ,  $\gamma = 0.69$  alınması sonuçları, verilen hassasiyet sınırları içinde etkilemez [16].
28. C.C.J.Roothaan, L.Sachs, and A.W.Weiss; Rev.Mod.Phys. 32, 186 (1960).
29. L.M.Sachs; Phys.Rev. 117, 1504 (1960).

30. W.A.Goddard, III; Phys.Rev. 157, 93 (1967).
31. W.A.Goddard, III; Phys.Rev. 169, 120 (1968).
32. U.Kaldor and F.E.Harris; Phys.Rev. 183, 1 (1969).
33. A.W.Weiss; Phys.Rev. 122, 1826 (1961).
34. C.F.Bunge; Phys.Rev.A, 16, 2496 (1977).
35. A.W.Weiss; Astrophys J. 138, 1262 (1963).
36. E.Clementi, C.C.J.Roothaan, and M.Yoshimine, Phys.  
Rev. 127, 1618 (1962).
37. B.N.Taylor, W.H.Porker, and D.N.Longenberg; Rev.Mod.  
Pys. 41, 375 (1969).
38. R.C.Weast (Editor), CRC Handbook of Chemistry and  
Physics, CRC Press, Inc.Buca Raton, Florida pp  
B232 (1983-1984).
39. D.L.Pavia, G.M.Lampman, G.S.Kriz, and Jr.W.B.  
Saunders Co., Introduction to spectroscopy,  
Philadelphia, London, pp 237 (1979).