

T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**ELEKTRONİKSEL UYARILMIŞ BİR POTANSİYEL ENERJİ
YÜZEYİ ÜZERİNDE DÖTERYUM ATOMU İLE AZOT
DÖTERYUM MOLEKÜLÜNÜN REAKTİF SAÇILMASI**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Gülşen TASMANOĞLU

**Anabilim Dalı: Fizik
Programı: Atom ve Molekül Fiziği**

Danışmanı: Doç. Dr. Sinan Akpınar

MART - 2012

**T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ELEKTRONİKSEL UYARILMIŞ BİR POTANSİYEL ENERJİ YÜZEYİ
ÜZERİNDE DÖTERYUM ATOMU İLE AZOT DÖTERYUM MOLEKÜLÜNÜN
REAKTİF SAÇILMASI**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**GÜLŞEN TASMANOĞLU
(101114109)**

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih :

Tezin Savunulduğu Tarih :

**Tez Danışmanı: Doç.Dr. Sinan AKPINAR
Diğer Jüri Üyeleri: Prof. Dr.Niyazi AKBULUT
Doç.Dr. Sefa KAZANÇ**

MART - 2012

ÖNSÖZ

“Elektroniksel uyarılmış bir potansiyel enerji yüzeyi üzerinde döteryum atomu ile azot döteryum molekülünün reaktif saçılması” adlı yüksek lisans tez çalışmamda bana çok yardımcı olan danışman hocam Sayın Doç. Dr. Sinan Akpınar ve Arş. Gör. Seda Hekim’e sonsuz saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Yaşamım boyunca maddi ve manevi desteğini benden esirgemeyen değerli aileme teşekkür ederim.

Gülşen TASMANOĞLU

ELAZIĞ-2012

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
ÖNSÖZ	II
İÇİNDEKİLER.....	III
ÖZET	IV
SUMMARY	V
SEMBOLLER LİSTESİ	VI
ŞEKİLLER LİSTESİ	VIII
TABLolar LİSTESİ	IX
KISALTMALAR	X
2. Zamana Bağlı Schrödinger Dalga Denklemi	5
2.1. İkinci Dereceden Diferansiyel Alma Metodu	7
2.2. Operatör Ayırma Metodu	8
2.3. Chebychev Polinomları Açılım Metodu.....	9
2.4. Reel Dalga Paketi Metodu.....	10
2.5.Hamiltonyen Operatörünün Etkisi	13
2.6. Potansiyel Enerji Operatörünün Etkisi	13
2.7.Radyal Kinetik Enerji Operatörünün Etkisi	14
2.8. Açısal Kinetik Enerji Operatörünün Etkisi	14
3.A+BC REAKSİYONU İÇİN HAMILTONYEN	15
3.1.Centrifugal Sudden (CS) Yaklaşımı.....	18
3.2. Başlangıç Dalga Fonksiyonu	18
3.3. Dalga Fonksiyonunun Analizi.....	19
3.3.1.Akı (Flux) Analizi	20
3.4.Reaksiyon tesir kesiti	21
3.5. Reaksiyon Hız Sabiti.....	22
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	24
KAYNAKLAR.....	34
ÖZGEÇMİŞ	38

ÖZET

Bu çalışmada Elektroniksel uyarılmış bir $\text{NH}_2 \tilde{A}^2A_1$ potansiyel enerji yüzeyi ile $\text{D} + \text{ND}(a^1\Delta) \rightarrow \text{D}_2 + \text{N}$ depletion ve $\text{D} + \text{ND}(a^1\Delta) \rightarrow \text{D} + \text{ND } a^1\Delta$ exchange reaksiyonları için Real Dalga Paketi metodu ve akı analizi kullanılarak reaksiyon dinamikleri hesaplandı. Kuantum saçılma hesaplaması, sıfırdan farklı J değerleri için CS yaklaşımı kullanılarak her iki kanal için reaksiyon ihtimaliyetleri, toplam tesir kesitleri, reaksiyon hız sabiti ve termal hız sabitini hesaplamak için yapıldı. Her iki reaksiyon için integral tesir kesitleri başlangıç dönme kuantum durumuna kuvvetli bir şekilde bağlıdır. Özellikle depletion kanalı için reaksiyon termal hız sabitinin deney ve yarı klasik sonuçlarla uyumluluğu gösterildi.

Anahtar Kelimeler: Depletion reaksiyon, Exchange reaksiyon, Reaksiyon ihtimaliyeti, Termal hız sabiti

SUMMARY

Reactive Scattering of Nitrogen Döteryum Molecules With Deterium Atom on Electronically Excited Potential Energy Surface

In this study, the quantum scattering dynamics of the depletion reaction $D + ND(a^1\Delta) \rightarrow D_2 + N$ and of the exchange reaction $D + ND(a^1\Delta) \rightarrow D + ND(a^1\Delta)$ have been calculated using the real wave packet and flux methods and modified $NH_2 \tilde{A}^2A_1$ potential energy surface (PES). A quantum scattering dynamics calculation is used to study the initial-state-resolved reaction probabilities, integral cross section, rate constants and thermal rate constant for both channels using the Centrifugal Sudden (CS) approximation for non-zero total angular momentum (J) values. Integral cross sections for both reactions depend strongly on the initial rotational states. In particular, the thermal reaction rate constant for the depletion channel is in good agreement with experimental and semiclassical results.

Key words: Depletion reaction, Exchange reaction; initial state resolved probabilities; thermal rate constant

SEMBOLLER LİSTESİ

ΔH	: Entalpi
ΔU	: İç Enerji
Σ, Π, Δ	: Moleküler terim sembolleri
$\tilde{X}^2 B_1$: Taban elektronik durum
$A^2 A_1$: Birinci uyarılmış elektronik durum
A	: Frekans faktörü
E_a	: Aktivasyon enerjisi
$\hat{\nabla}$: Laplace operatörü
ψ	: Dalga fonksiyonu
ν	: Titreşim kuantum sayısı
F	: Akı operatörü
$g(\mathbf{R})$: Gelen atomun öteleme hareketini temsil eden dalga fonksiyonu
\hat{H}	: Hamiltonyen operatörü
\hbar	: Planck sabiti
J	: Toplam açısal momentum kuantum sayısı
j	: Dönme kuantum sayısı
$\hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{j}_+, \hat{j}_-$: Alçaltma ve yükseltme operatörleri
K	: Toplam açısal momentumun z-eksenindeki izdüşümü
k_{vj}	: Reaksiyon hız sabiti
\hat{l}	: Yörünge açısal momentum operatörü
μ_R, μ_r	: İndirgenmiş kütleler
P	: Lineer momentum
$P_j(\gamma)$: İki atomlu molekülün dönme hareketini temsil eden dalga fonksiyonu
$P^J(\mathbf{E})$: Reaksiyon ihtimaliyetleri
$P_{vj}(\mathbf{T})$: Boltzmann ihtimaliyet
$k_{v'j',vj}$: T sıcaklığında bireysel kuantum seviyeleri arasındaki hız sabiti
$\sigma_{v'j',vj}$: Reaksiyon tesir kesiti
S	: Saçılma matrisi

\hat{T}	: Kinetik enerji operatörü
$\hat{U}(t)$: Zaman yayılım operatörü
$\mathbf{U}(\mathbf{r})$: İndirgenmiş potansiyel
\hat{V}	: Potansiyel enerji operatörü
α	: Dalga fonksiyonu genişlik parametreleri
E_{col}	: Çarpışma enerjisi

ŞEKİLLER LİSTESİ

Sayfa No

Şekil.3.1. uzay (X,Y,Z) ve cisim (x,y,z) merkezli koordinat sistemi.....	15
Şekil 3. 2. Cisim merkezli koordinat sisteminde giriş kanalı jacobı koordinatları	15
Şekil 4.1. $\text{NH}_2 \tilde{A}^2A_1$ uyarılmış potansiyel enerji yüzeyinin $R=9,0a_0$ ve 1.7^0 değeri için düzeltilen ve düzeltilmeyen şekli (Akpınar vd., 2008).....	25
Şekil 4.2. $j=2$ için, her iki reaksiyon kanalında farklı J değerleri için CS ihtimaliyetleri ...	26
Şekil 4.4. $j=4$ için, her iki reaksiyon kanalında farklı J değerleri için CS ihtimaliyetleri ...	28
Şekil 4.5. $j=5$ için, her iki reaksiyon kanalında farklı J değerleri için CS ihtimaliyetleri ...	29
Şekil 4.6. $j=6$ için, her iki reaksiyon kanalında farklı J değerleri için CS ihtimaliyetleri ...	30
Şekil 4.7. Exchange ve depletion için farklı j durumlarının CS tesir kesitleri	31
Şekil 4.8. Exchange ve depletion için farklı j durumlarının CS reaksiyon hız sabitleri	32
Şekil 4.9. Kuantum mekaniksel olarak her iki reaksiyon kanalının termal hız sabitlerinin deney ve yarı deneysel termal hız sabitleri ile karşılaştırılması.....	33

TABLÖLAR LİSTESİ

Sayfa No

Tablo 4.1. Hesaplamalarda kullanılan parametreler (Bütün birimler atomik birim cinsinden verilmiştir.)	25
---	----

KISALTMALAR

CC	: Coriolis Coupling
CS	: Centrifugal Sudden
DVR	: Kesikli deęişken gösterimi
FFT	: Fast Fourier Dönüşümü
RT	: Renner-Teller

1.GİRİŞ

İki veya daha fazla maddenin (atom, molekül veya iyonların) birbiri ile etkileşmesi sonucu kendi özelliklerini kaybederek yeni özellikte maddeler oluşturması olayına kimyasal reaksiyon denir (Zhang vd., 1998; Levine, 2005). Hangi maddelerin reaksiyona girdiği, ürünlerin ne olduğu, giren ya da ürün madde miktarının ne olduğunu, reaksiyon denkleminde yer alan maddelerin birbirlerine göre bağıl oranlarının ne olduğunu basit kimyasal denklemlerle görebiliriz. Kimyasal reaksiyonlarla özellikle kimyasal reaksiyonların hızıyla ilgilenen bilim dalına kimyasal kinetik denir. Bir reaksiyonun belli koşullarda hangi hızla ilerlediği, reaksiyon hızını değiştiren faktörler veya reaksiyon hızının nasıl değiştirileceği, reaksiyonun hangi basamakları izlediği gibi konuları kimyasal kinetik araştırır. Reaksiyona girecek olan iki molekül birbirine yaklaştığı andaki durumları, birbirleriyle nasıl etkileştikleri ve nasıl reaksiyon ürünlerine dönüştükleri kimyasal kinetikle bulunabilir. Molekül-molekül, atom-molekül etkileşmeleri 10^{-15} sn gibi kısa bir sürede gerçekleştiğinden dolayı bu tür etkileşmelerin kimyasal kinetiklerini deneysel olarak incelemek çok zordur. Bu tür etkileşmeleri incelemek için ilk başta klasik, yarı klasik ve teorik metotlar kullanılmıştır. Günümüzde ise zamana bağlı ve zamandan bağımsız kuantum mekaniksel metotlar kullanılmaktadır.

Reaksiyon dinamiğinde kimyasal olayların daha iyi anlaşılması mikroskobik moleküler seviye de araştırmayı gerektirir. Deneysel olarak crossed molecules beams teknikleri kullanılarak atom ve moleküllerin reaktif saçılma deneyleri yapılabilmektedir (Lee, 1987; Casavecchia, 1996). Bu yüzden, kuantum teorisi deneysel çalışmalarını anlamak için önemlidir ve bu deneyler daha ayrıntılı ve daha doğru teorilerin ortaya çıkmasına sebep olmaktadır (Heller, 1981; Chen ve Poirier, 2010; Zang ve Chen, 2009; WeiQ ve Zhou, 2009)

Bir kimyasal reaksiyonda gelen A atomu ile titreşim ve dönme hareketi yapan BC(v,j) molekülünün etkileşmesi gelen atomun enerjisine bağlı olarak aşağıdaki şekilde

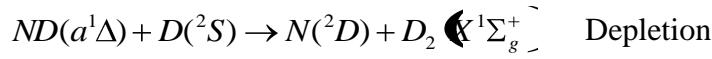
sonuçlanır. Gelen atomun enerjisi hedef atomun enerjisinin bağı kırarak kadar büyük değilse esnek saçılma fakat hedef atomun dönme ve titreşim kuantum durumların da bir değişiklik olması durumun inelastik saçılma meydana gelir. Gelen atomun enerjisi hedef moleküldeki atomlar arası bağı kırarak kadar büyükse reaktif saçılma meydana gelir.

Yukarıdaki saçılma olayları zamana bağı veya zamandan bağımsız Schrödinger denklemlerinin çözümlerinin uygulamalarıdır. Zamana bağı Schrödinger denklemi bir başlangıç değer problemi olurken zamandan bağımsız Schrödinger denklemi bir sınır değer problemidir. Zamana bağı Schrödinger denkleminin çözümünde enerji özdeğerleri ve öz fonksiyonları bir birinden bağımsız olarak hesaplanmaktadır. Zamana bağı dalga fonksiyonu belli bir enerji aralığına karşılık gelir zamandan bağımsız dalga fonksiyonu ise bir tek enerji değerine karşılık gelir Zamana bağı Schrödinger denklemin bir tek çözümünden geniş bir enerji aralığı büyüklüğünü bulunabildiğinden zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümünden daha avantajlıdır.

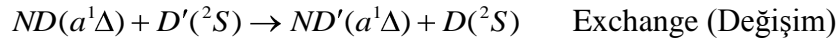
Günümüze kadar zamana bağı Schrödinger denklemi kimyasal reaksiyonlar için çözülebilmiştir. 1990'lı yıllarda atom ve moleküller arasındaki saçılma olayları tek bir potansiyel enerji yüzeyi kullanarak toplam açısal momentumun ($J=0$) sıfır değeri için yalnızca reaksiyon ihtimaliyetleri hesaplanabilmekteydi. Bu yöntemle $\text{Li}+\text{HF}$ (Gögtas,1995), $\text{O}(1\text{D})+\text{HCl}(v)$ (Bulut, vd. 1999) $\text{H}+\text{H}_2$ (Pack, vd. 1995) $\text{N}+\text{H}_2$ (Honvault and Launay, 1999) reaksiyon ihtimaliyetleri hesaplanmıştır. Daha sonraki yıllarda toplam açısal momentumun ($J>0$) sıfırdan büyük değerleri için reaksiyon ihtimaliyetleri J-shifting ve Capture metotları ile $J=0$ reaksiyon ihtimaliyet değerleri kullanılarak hesaplanmıştır. J-shifting metodu ile bariyerli potansiyel yüzeye sahip $\text{H}+\text{Li}_2$, $\text{N}+\text{H}_2$, $\text{O}+\text{O}_2$ reaksiyonlarının birçok kuantum dinamikleri hesaplanmıştır (Patmanaman ve Mahapatra, 2006; Lin ve Gue, 2006; Yeh vd. 2003; Miquel vd., 2003). Potansiyel enerji yüzeyi bariyersiz olan $\text{N}+\text{NH}$, $\text{N}+\text{NO}$, $\text{S}+\text{H}_2$ reaksiyonları Capture metodu ile incelenmiştir (Gamallo vd., 2003; Bulut vd., 2004) Günümüzde ise $J>0$ reaksiyon ihtimaliyetleri Centrifugal Sudden (CS)ve Coriolis Coupling (CC) metotları ile doğrudan hesaplanabilmektedir (Poirier, 2005; padmanaban, 2005). Ayrıca 2010'lu yıllardan itibaren reaksiyon dinamiği daha da gelişerek taban ve uyarılmış potansiyel enerji yüzeylerinin kullanıldığı Renner-Teller (RT) ve spin orbit çalışmaları yapılmaktadır. Defazio ve Petrongolo bir bariyere sahip $\text{N}(^2\text{D})+\text{H}_2\rightarrow\text{NH}(X^3 \text{ ve } a^1\Delta)+\text{H}(^2\text{S})$ reaksiyonunu hem

taban hemde uyarılmış elektronik durum arasındaki Renner-Teller etkileşimini Coriolis Coupling etkisini de kullanarak incelemiştir (Defazio ve Petrongolo, 2007)

Azot atomlarının diğer atom ve moleküllerle olan reaksiyonları, yanma kimyasında ve plazma kimyasında önemli bir yere sahiptir (Casavecchia vd., 1999). Astrokimya bağlamında, NH molekülü, (N and N₂ den sonra) atmosferde en fazla bulunan moleküldür. Bu şu anlama gelir, NH molekülü ve onun izotopu ND radikallerini içeren reaksiyonlar hem yanma kimyasında hem de astro kimya modelleri üzerinde güçlü bir etkiye sahiptirler (Frank ve Nyman, 2007). Bu tezde, iki farklı ürün (sonuç) oluşmasını sağlayan ND+D izotop reaksiyonu incelenmiştir. Bu durumda, iki reaktif (ürün) kanal aşağıdaki gibi tarif edilebilir:



ve



Günümüzde, $NH + H$ reaksiyonu ve izotopları üzerinde teorik ve deneysel çalışmalar yapılmaktadır. Qu ile arkadaşları [Qu vd., 2005] ve Adam ile arkadaşları (Adam vd., 2007) tarafından $NH \left(\leftarrow ^3\Sigma^- \right) + D \left(\leftarrow ^1S \right)$ ve $NH \left(\leftarrow ^1\Delta \right) + H \left(\leftarrow ^1S \right)$ reaksiyonları ayrı ayrı incelenmiştir. Bu çalışmalarda, quasistatic laser-flash photolysis ve laser-induced fluorescence deneysel metotları kullanılarak oda sıcaklığında hız sabitleri ölçülmüştür. Ayrıca, molekülün titreşim ve dönme hareketini Newton ve Lagrange hareket denklemlerinden faydalanarak tanımlayan yarı klasik metotlarda tesir kesitleri ve hız sabitleri elde edilmiştir. Bu çalışmalarda kullanılan \tilde{X}^2B_1 taban durumu ve \tilde{A}^2A_1 uyarılmış durum potansiyel enerji fonksiyonları aug-cc-pvqz metoduyla bulunmuştur (Qu vd., 2005). Akpınar ile arkadaşları, NH+H reaksiyonu için düşük enerjilerde hatalı sonuçlar veren yukarıdaki potansiyeli eksponansiyel bir ifadeyle tekrar tanımlamışlardır. (Akpınar vd., 2008). Yeni tanımlanan potansiyel enerji fonksiyonunu kullanarak elektronik olarak uyarılan $NH \left(\leftarrow ^1\Delta, \nu = 0 \right)$ ve hem elektronik olarak hem de molekülün bir üst titreşim enerji seviyesinde bulunduğu $NH \left(\leftarrow ^1\Delta, \nu = 1 \right)$ reaksiyonları için deneysel yarı klasik metot ve kuantum mekaniksel dalga paketi metodu ile reaksiyon ihtimaliyetleri, tesir kesitleri ve termal hız sabitleri hesaplanmıştır (Defazio vd., 2009; Akpınar vd., 2008). Bu çalışmalarda, deneysel ve teoriksel termal hız sabitinde iyi bir uyum sağlamıştır (Defazio

vd., 2009; Akpınar vd., 2008). Son zamanlarda, NH+H reaksiyonunun bireysel kuantum durumları derin bir potansiyel enerji kuyusuna ve bariyersiz reaksiyon yoluna sahip NH₂ (X^2A'') taban elektronik durumu kullanılarak kuantum mekaniksel ve yarı klasik (Li vd., 2011) metotla exchange ve abstraction kanalları için çalışılmıştır (Zhou vd., 2008).

Bu tez çalışmasında, geliştirilmiş \tilde{A}^2A_1 yüzeyi kullanılarak Döteryum atomu ile elektronik olarak uyarılmış durumdaki azot döteryum (ND) molekülü arasında gerçekleşen reaksiyonu incelemek için zamana bağlı kuantum mekaniksel yöntem kullanılacaktır. Özellikle, reaksiyon ihtimaliyetleri değişen J değerleri için CS yaklaşımı kullanarak hesaplanacaktır. 0-0.5 eV aralığında değişen çarpışma enerji değerleri için integral reaksiyon tesir kesitleri elde edilecektir. Bu tesir kesitleri kullanılarak başlangıç kuantum durumları için reaksiyon hız sabitleri hesaplanacaktır. Son olarak, deneysel ve yarı klasik termal hız sabiti sonuçları ile hesapladığımız termal hız sabiti sonuçları karşılaştırılacaktır.

2. ZAMANA BAĞLI SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİ

Bir parçacığa eşlik eden dalga fonksiyonu t anında x noktasında

(2.1)

eşitliği ile ifade edilir. Burada k dalga sayısı, w açısal frekans, t ise zamanı ifade etmektedir. x 'e göre türev alındığında eşitlik

$$\text{---} \quad (2.2)$$

şeklini alır. Denklem (2.2) de --- yerine yazılır ve gerekli sadeleştirmeler yapıldığında momentum operatörü ;

$$\text{---} \quad (2.3)$$

$$\text{---} \quad (2.4)$$

elde edilir. Aynı şekilde denklem (2.1) in t 'ye göre türevi alındığında ve --- eşitliğinden yararlanılarak E nin operatör ifadesi () ;

$$\text{---} \quad (2.5)$$

şeklinde bulunur. Bu operatör kavramları klasik mekanikte kinetik ve potansiyel enerji toplamı olan mekanik enerji de kullanıldığında Schrödinger dalga denklemi elde edilir. Mekanik enerji eşitliği Denklem (2.6) ya benzer şekilde

$$\text{---} \quad (2.6)$$

yazılabilir. Rölativistik olmayan kinetik enerji terimi --- Denklem (2.6) da yerine yazıldığında

$$\text{---} \quad (2.7)$$

elde edilir. Klasik fizikteki gözlenebilir nicelik olan p momentum ifadesinin kuantum mekaniğindeki karşılığı olan operatörü

$$\text{---} \quad (2.8)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (2.8) in karesi alındığında p^2 elde edilir.

$$(2.9)$$

Denklem (2.9) ve (2.5) Denklem (2.7) de yerine yazıldığında

$$\text{---} \quad (2.10)$$

elde edilir. Böylece toplam enerji denklemi operatör olarak ifade edilmiş olur. Bu operatör ifade bir $\Psi(r,t)$ dalga fonksiyonuna uygulandığında;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}^2 + \hat{U}(r) \right] \Psi(r,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r,t) \quad (2.11)$$

zamana bağlı Schrödinger dalga denklemi elde edilir. Schrödinger denklemi ikinci dereceden bir diferansiyel denklemdir Denklem (2.5) den yararlanılarak gerekli sadeleştirmeler yapıldığında Hamiltonyen operatörünün () sistemin toplam enerjisine eşit olduğu görülür.

$$\hat{H} = \text{---} \quad (2.12)$$

Zamana bağlı Schrödinger denkleminin en genel ifadesi denklem (2.13) de ki gibidir.

$$\text{---} \quad (2.13)$$

(2.19)

ifadeleri elde edilir. Denklem (2.19) da anındaki dalga fonksiyonları bilinirse anındaki dalga fonksiyonu bulunabilir (Hu, and Schatz, 2006).

Bu çözümün iyi sonuçlar vermesi için 'nin yeterince küçük seçilmesi gerekir. — değerleri için daha iyi sonuçlar verdiği görülmüştür. Ancak çok boyutlu problemlerde zaman değerinin çok küçük seçilmesi bu metotla çözümü zorlaştırmaktadır.

2.2. Operatör Ayırma Metodu

Zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümünde, kinetik enerji operatörünün dalga fonksiyonu üzerindeki etkisini hesaplamak için Fourier dönüşüm tekniğinin kullanıldığı bir metottur (Mahapatra and Sathyamurth,1997). Hamiltonyen operatörü yerine alınır, $t+$ anındaki dalga fonksiyonu

(2.20)

şeklinde ifade edilir. Potansiyel enerji ve kinetik enerji operatörleri komutatif (yer değiştirebilen) operatör olmadığından dolayı terimi şeklinde yazılamaz bu yüzden Baker-Campbell-Hausdorf teoremi kullanılarak üstel ifade

(2.21)

şeklini alır. Buna göre $t+$ anında dalga fonksiyonu

$$(x,t+) = (x,t) \quad (2.22)$$

olarak bulunur. Burada ki hata payı kadardır. Yapılan çalışmalarda — kadar küçük seçildiğinde daha iyi sonuçlar elde edilmiştir. Burada potansiyel aralığını tanımlar (Mahapatra ve Sathyamurth, 1997). Bu metot bize negatif bir potansiyel

kullanma imkânı verdiğiinden dolayı ikinci dereceden yayılım metoduna göre daha kullanışlıdır.

2.3. Chebychev Polinomları Açılım Metodu

Bu metot da üstel ifadesi Kosloff ve Tal-Ezer tarafından Chebychev polinomları cinsinden seriye açılmıştır (Tal-Ezer ve Kosloff, 1984). şeklinde bir üstel fonksiyon Chebychev polinomları cinsinden

(2.23)

şeklinde ifade edilir(Mahapatra ve Sathyamurth, 1997). Denklem (2.23) te Kronecker delta, δ_{lm} (terim sayısını belirleyen parametre), Bessel fonksiyonları ve Kompleks Chebychev polinomları olarak tanımlanır. Yapılan çalışmalarda bu metodun kısa zaman adımları için daha iyi sonuç verildiği anlaşıldı. Kompleks Chebychev polinomları argümanlarının tanımlı olması için hamiltonyen operatörünün normu alınır.

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-x^2}} - x \frac{d}{dx} \right) P_l(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-x^2}} + x \frac{d}{dx} \right) P_{l+1}(x) \quad (2.24)$$

Denklem (2.24) te birim vektör, \hat{e}_z olup Hamiltonyen operatörünün özdeğer aralığını göstermektedir. Hamiltonyen operatörünün bu şekilde tanımlanması enerji spektrumunun -1 ile +1 arasında değerler almasını sağlar (Balakrishnan vd., 1997). Maksimum ve minimum enerji değerleri

$$E_{\max} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-x^2}} + x \frac{d}{dx} \right) P_l(x) \quad (2.25)$$

(2.26)

şeklinde ifade edilir. Burada potansiyel girdinin maksimumunu, potansiyelin minimumunu P_{\max} ise maksimum momentumu göstermektedir. Bu tanımlama ile zaman yayılım operatörü cinsinden

(2.27)

şeklinde ifade edilir. Burada $\psi(x, t)$ anındaki dalga fonksiyonu t_0 anındaki dalga fonksiyonu cinsinden

(2.28)

yazılabilir. Burada $\psi(x, t)$ yayılım ifadesinin her bir zaman adımı için $\psi(x, t_0)$ teriminin $\psi(x, t_0)$ başlangıç dalga fonksiyonu üzerine etkisinin hesaplanması gerekir. Bu nedenle,

(2.29)

tekrarlama bağıntısı kullanılır. Bu tekrarlama bağıntısının kullanılabilmesi için en az iki terimin bilinmesi gerekir. Bu terimler

(2.30)

(2.31)

olarak ifade edilir.

Bu metotta kompleks yok edici potansiyel kullanılarak dalga fonksiyonunun sonlu grid noktalarındaki yansımaları engeller ve hem genlik hem de fazdaki hataları Hamiltonyenin bütün enerji öz değerlerine eşit olarak dağılmaktadır. Fakat ağır atomlu sistemlerde enerji öz değer aralığı aratacağından Chepychev polinomları cinsinden açmamız çok zor olacaktır.

2.4. Reel Dalga Paketi Metodu

Reel dalga paketi metodun da üstel terim ifadesi trigonometrik fonksiyonlar cinsinden yazılır.

$$\text{---} \quad \text{---} \quad (2.32)$$

ve anındaki dalga fonksiyonlarına uygulandığında

$$\text{---} \quad \text{---} \quad (2.33)$$

$$\text{---} \quad \text{---} \quad (2.34)$$

Denklem (2.33) ve (2.34)'un taraf tarafa toplanmasıyla

$$\text{---} \quad (2.35)$$

ifadesi elde edilir. Yukarıdaki denklemlerde imajiner birim ψ dalga fonksiyonun kompleks olduğunu gösterir. Kompleks dalga paketinin reel ve imajiner kısmını

$$Q(x, t) = \text{Re} \left[\psi(x, t) \right] \quad (2.36)$$

$$P(x, t) = \text{Im} \left[\psi(x, t) \right] \quad (2.37)$$

şeklinde gösterebiliriz. Gray ve Balint-Kurti dalga paketi ve yayılma operatörünü reel ve imajiner kısımlarına ayırarak dalga paketinin reel ve imajiner kısımlarının birbirinden bağımsız olarak yayıldığını elde etmişlerdir (Gray ve Balint-Kurti, 1998). Yalnızca dalga paketinin $Q(x, t)$ reel kısmını zaman içerisinde yayılımını sağlayarak hesaplamaları basite indirgeyerek yapmışlardır. (2.35) denklemini dalga paketinin sadece reel kısmı alınarak yazılırsa

$$Q(x, t + \Delta t) = 2 \cos\left(\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}\right) Q(x, t) - Q(x, t - \Delta t) \quad (2.38)$$

elde edilir. Reaksiyon tesir kesiti ve hız sabiti gibi zamandan bağımsız niceliklerin hesaplanmasında kullanılan zamana bağlı metotlar başlangıç değer problemi olur ve tek

bir hesaplamayla geniş bir enerji aralığında tüm bilgiler elde edilir. Zamanın herhangi bir temel şekilde hesaplanması gereken niceliklere dahil olmaması zamana bağlı Schrödinger denkleminde geliştirilmiş zaman yayılımı fonksiyonunun kullanılmasına olanak sağlar (Gray ve Balint-Kurti, 1998). Denklem (2.13) de \hat{H} 'in $f(\hat{H})$ ile yeniden tanımlanmasıyla Schrödinger denklemi

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = f(\hat{H}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.39)$$

haline gelir. Burada $f(\hat{H})$

$$f(\hat{H}) = -\frac{\hbar}{\Delta t} \cos^{-1}(\hat{H}_s) \quad (2.40)$$

Schrödinger denkleminin iterasyonunu basitleştirecek şekilde seçilir.

$$H_s = a_s \hat{H} + b_s \quad (2.41)$$

H_s , Hamiltonyen operatörünün minimum ve maksimum öz değerlerinin -1 ile +1 aralığında olmasını sağlayan bir skalandırmadır. Burada $a_s = 2/\Delta E$ ve $b_s = -1 - a_s E_{\min}$ şeklindedir. E_{\min} ve E_{\max} , \hat{H} Hamiltonyen operatörünün öz değer aralığıdır ve $\Delta E = E_{\max} - E_{\min}$ dir. Denklem (2.39) 'in genel çözümü

$$\psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = 2 \cos \left[\frac{f(\hat{H}) \Delta t}{\hbar} \right] \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t - \Delta t) \quad (2.42)$$

şeklindedir. $f(\hat{H})$ 'in değeri yerine yazılıp gerekli düzenlemelerin yapılmasıyla,

$$\psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = 2\hat{H}_s \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t - \Delta t) \quad (2.43)$$

ifadesi elde edilir. Dalga fonksiyonunun yayılımı için

$$Q(\mathbf{r}, t + \Delta t) \approx 2\hat{H}_s Q(\mathbf{r}, t) - Q(\mathbf{r}, t - \Delta t) \quad (2.44)$$

şeklindedir. Sayısal hesaplamalarda sonlu koordinat aralığının kullanılması dalga fonksiyonunun koordinat sonlarında yansımaya neden olacaktır. Bu yansımaların engellenmesi için koordinat aralığı sonlarına yok edici potansiyeller yerleştirilir. Yok edici potansiyeller dikkate alındığında dalga fonksiyonunun yayılımı

$$Q(\mathbf{r}, t + \Delta t) \approx \hat{A}(\hat{A}Q(\mathbf{r}, t - \Delta t) - 2\hat{H}_s Q(\mathbf{r}, t)) \quad (2.45)$$

olarak yazılabilir. \hat{A} dalga fonksiyonunun koordinat sonlarından yansımaları engelleyen yok edici potansiyeldir. Eğer t ve $t + \Delta t$ anındaki dalga fonksiyonu bilinirse diğer bütün zamanlarda dalga fonksiyonu belirlenebilir (Sürücü, 2011)

2.5. Hamiltonyen Operatörünün Etkisi

Schrödinger denkleminin çözüm metotlarında görüldüğü gibi üstel fonksiyondaki Hamiltonyen operatörünün defalarca operasyonu gerekmektedir. Hamiltonyen operatörü kinetik enerji ve potansiyel enerji toplamıdır.

$$(2.46)$$

Burada \hat{K} ve \hat{V} radyal kinetik enerji operatörlerini, \hat{K}_θ açısal kinetik enerji operatörünü ve \hat{H}_s ise potansiyel enerji operatörünü ifade etmektedir. Hamiltonyen operatörünün içerdiği açısal kinetik enerji ve potansiyel enerji komutatif olmadığından dolayı aynı uzayda diyagonalize edilemez.

2.6. Potansiyel Enerji Operatörünün Etkisi

Potansiyel enerji operatörü koordinat uzayında skaler bir büyüklük olduğundan dolayı dalga fonksiyonu üzerindeki etkisi koordinat uzayında bir noktadaki değerinin o noktada dalga fonksiyonun aldığı değer ile çarpılmasını gerektirir.

2.7. Radyal Kinetik Enerji Operatörünün Etkisi

Öteleme hareketine karşılık gelen radyal kinetik enerji, koordinat uzayında ikinci dereceden bir diferansiyel operatör iken,

$$\hat{p}(\mathbf{R}) = -\frac{1}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} \psi(\mathbf{R}) \quad (2.47)$$

momentum uzayında bir skaler çarpım operatörüdür. Bu nedenle Fourier dönüşümü kullanılarak dalga fonksiyonu koordinat uzayından momentum uzayına dönüştürülür. Momentum uzayındaki dalga fonksiyonu

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikR} \psi(\mathbf{R}) \quad (2.48)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (2.48) $k^2/2\mu_r$ ifadesiyle çarpılıp ters Fourier dönüşümü kullanılarak tekrar koordinat uzayına Denklem (2.49) şeklinde dönüştürülür.

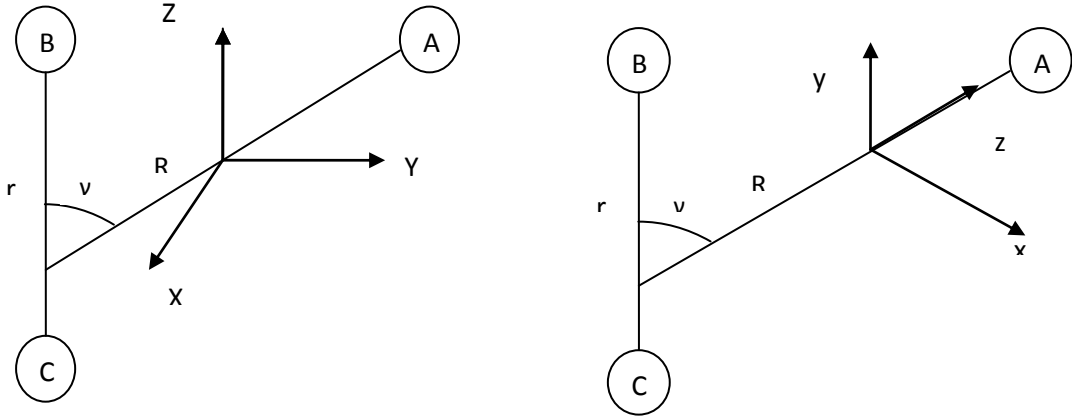
$$T(\psi(\mathbf{R}, r, \gamma, t)) = \frac{\hbar^2}{2\mu_r} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k=-\infty}^{\infty} k^2 e^{ikr} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{r=-\infty}^{\infty} e^{-ikr} \psi(\mathbf{R}, r, \gamma, t) dr \right] dk \quad (2.49)$$

2.8. Açısal Kinetik Enerji Operatörünün Etkisi

Gauss Legendre Quadrature şemasına dayanan kesikli değişken metodu (DVR) kullanılarak açısal kinetik enerji operatörünün dalga fonksiyonu üzerindeki etkisi hesaplanır. Açısal kinetik enerji operatörünün öz fonksiyonu $P_j(\cos\gamma)$ Legendre polinomlarıdır. Koordinat uzayında γ cinsinden ikinci dereceden bir türev operatörü olan açısal kinetik enerji operatörü j uzayında lokal çarpım operatörüdür. DVR metodunda dalga fonksiyonu bir dönüşüm matrisi ile açısal uzaydan (FBR uzayı), j uzayına (DVR uzayı) dönüştürülür. Bu uzayda da açısal kinetik enerji operatörüyle çarpılıp tekrar DVR uzayından FBR uzayına dönüştürülür.

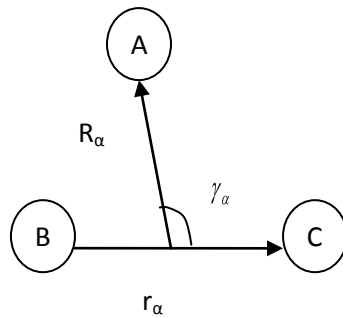
3.A+BC REAKSİYONU İÇİN HAMILTONYEN

Reaktif saçılmada A+BC giriş kanalı ile AB+C ürün kanalını temsil etmektedir. Atom-iki atom reaktif saçılma problemi Şekil 3.1 de ki gibi ya uzay ya da cisim merkezli bir referans sistemi ele alınarak incelenir.



Şekil.3.1. uzay (X,Y,Z) ve cisim (x,y,z) merkezli koordinat sistemi

Reaktif saçılma problemlerinin dalga paketi metotlarıyla reaksiyon dinamiklerini hesaplamada R , r , γ büyüklükleri ile tanımlanan Jacobi koordinatları kullanılır. Bu koordinat sisteminde giriş (R_α , r_α) kanalları Şekil3.2 de gösterildiği gibidir.



Şekil 3. 2. Cisim merkezli koordinat sisteminde giriş kanalı jacobi koordinatları

Şekil 3.2 de gösterilen giriş kanalı Jacobi koordinatları R_α , A atomu ile BC molekülünün kütle merkezi arasındaki mesafeyi, r_α , B ve C atomları arasındaki mesafeyi γ_α , R_α ve r_α vektörleri arasındaki açıyı göstermektedir.

Ürün Jacobi koordinatları J=0 toplam açısal momentum değeri için bireysel kuantum seviyeleri arasındaki reaksiyon ihtimaliyetlerini hesaplamak için kullanılır. Ancak sıfırdan farklı J değerleri için durum daha farklıdır. Cisim merkezli koordinat sisteminde Jacobi koordinatlarda dalga paketini tam anlamıyla tanımlamak için z-ekseni üzerinde toplam açısal momentumun izdüşümü olan K kuantum sayısına ihtiyaç duyulmaktadır (Gómez-Carrasco ve Roncero, 2006).

Uzay merkezli koordinat sisteminde Jacobi koordinatları cinsinden Hamiltonyen operatörü

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hat{l}^2}{2\mu_R R^2} + \frac{\hat{j}^2}{2\mu_r r^2} + V(\mathbf{R}, r, \gamma) \quad (3.1)$$

şeklinde ifade edilir. Burada \hat{l} atom-molekül kütle merkezi etrafında dönmesinden kaynaklanan yörünge açısal momentum operatörünü, \hat{j} cisim merkezli koordinat sisteminde BC molekülünün dönme açısal momentum operatörünü temsil etmektedir. μ_R A atomu ve BC molekülünden oluşan sistemin ve μ_r BC iki atomlu molekülün indirgenmiş kütesidir.

$$\mu_r = \frac{m_B m_C}{m_B + m_C} \quad (3.2)$$

$$\mu_R = \frac{m_A (m_B + m_C)}{m_A + m_B + m_C} \quad (3.3)$$

şeklinde tanımlanır.

Reaksiyon kanalından bağımsız olan toplam açısal momentum operatörü \hat{l} ve \hat{j} 'nin vektörel toplamı olarak

$$\hat{J} = \hat{l} + \hat{j} \quad (3.4)$$

şeklinde ifade edilir. Cisim merkezli referans sisteminde \hat{l}^2

$$\hat{l}^2 = \left(\hat{l} - \hat{j} \right)^2 = J^2 + j^2 - 2\hat{J}_z \hat{j}_z - \hat{J}_+ \hat{j}_- - \hat{J}_- \hat{j}_+ \quad (3.5)$$

şeklinde bulunur. Burada \hat{J}_z ve \hat{j}_z sırasıyla toplam açısal momentum (J) ve BC molekülünün dönme açısal momentum operatörünün (j) cisim merkezli koordinat düzleminde z-ekseni üzerindeki izdüşümüdür. \hat{J}_+ , \hat{J}_- ve \hat{j}_+ , \hat{j}_- yükseltme ve alçaltma operatörleridir ve

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad (3.6)$$

$$j_{\pm} = j_x \pm j_y \quad (3.7)$$

olarak tanımlanır. Böylece cisim merkezli sistemde Hamiltonyen operatörü

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\mu_R R^2} + \frac{1}{\mu_r r^2} \right] j^2 + \frac{J^2 - 2J_z j_z}{2\mu_R R^2} \\ & - \frac{J_+ j_- + J_- j_+}{2\mu_R R^2} + V(\mathbf{R}, r, \gamma) \end{aligned} \quad (3.8)$$

şeklinde yazılır (Morari ve Jaquet, 2005). Cisim merkezli koordinat sisteminde z-ekseni R koordinatına bağlı seçildiğinden ve J toplam açısal momentum operatörünün z-ekseni üzerindeki izdüşümü K kuantum sayısı ile gösterildiğinden Hamiltonyen operatörü

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\mu_R R^2} + \frac{1}{\mu_r r^2} \right] j^2 + \frac{J^2 - 2K^2}{2\mu_R R^2} \\ & - \frac{J_+ j_- + J_- j_+}{2\mu_R R^2} + V(\mathbf{R}, r, \gamma) \end{aligned} \quad (3.9)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (3.9) ile ifade edilen Hamiltonyen denkleminde ilk iki terim radyal kinetik enerji operatörlerini $\hat{T}(R)$ ve $\hat{T}(r)$, üçüncü terim açısal kinetik enerji

operatörünü $\hat{T}(\gamma)$, dördüncü terim Centrifugal Sudden (CS) ifadesini, beşinci terim Coriolis Coupling (CC) ifadesini ve son terim de potansiyel enerji fonksiyonunu gösterir (Nakamura ve Kato, 2000; Sürücü, 2011).

3.1. Centrifugal Sudden (CS) Yaklaşımı

Centrifugal Sudden (CS) yaklaşımında, potansiyel matrisi tekrar düzenlenmesiyle $J > 0$ ihtimaliyet değerleri bulunur. Denklem (3.8) de Coriolis Coupling ifadesi sıfır alınır, Hamiltonyen operatörü

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{j^2}{2\mu_r r^2} + \frac{J^2 + j^2 - 2K^2}{2\mu_R R^2} + V(\mathbf{r}, \gamma) \quad (3.10)$$

şeklinde elde edilir (Nakamura ve Kato, 2000; Lin ve Guo, 2004). Cisim merkezli koordinat sisteminde kullanılan bu yaklaşımda J toplam açısal momentumun z-ekseni üzerindeki izdüşümü olan K kuantum sayısı iyi kuantum sayısıdır ve dalga paketinin yayılımı süresince korunumlu bir parametredir (Nakamura ve Kato, 2000). Centrifugal Sudden hesaplamalarında K kuantum sayısının aldığı değerler $K = \min(J, j)$ ifadesiyle sınırlıdır (Liu vd., 2009; Sürücü, 2011).

3.2. Başlangıç Dalga Fonksiyonu

Eğer t_0 başlangıç anında kuantum mekaniksel sistemi temsil eden dalga fonksiyonu bilinirse, sistemin herhangi bir t anındaki dalga fonksiyonu zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözülmesiyle belirlenebilir. Reaktif saçılma problemi giriş kanalının asimptotik bölgesinde başladığından dolayı başlangıç dalga fonksiyonun bu bölgedeki hareketi temsil etmesi gerekir $A+BC$ sistemi için en uygun başlangıç dalga fonksiyonu giriş kanalı Jacobi koordinatlar cinsinden

$$\psi(\mathbf{r}, \gamma, t) \underset{\sim}{=} g(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{P}_j) \quad (3.11)$$

şeklinde ifade edilebilir. Tanımlanan dalga fonksiyonu A atomunun öteleme hareketini temsil eden $g(\mathbf{R})$, BC molekülünün titreşim hareketini temsil eden $\phi_{vj}(\mathbf{r})$, ve BC molekülünün dönme hareketini temsil eden $P_j(\mathbf{r})$ terimlerini içerir. Dalga paketi, zaman yayılımı boyunca genişler ve bundan dolayı çok geniş grid uzaylarının kullanımını gerektirir. Dalga paketinin genliğinin ilgili enerji aralığına düzenli bir şekilde yayılması ve bu enerji aralığı dışında genliğinin sıfır olması gerekir. Bu yüzden başlangıç dalga fonksiyonu uygun biçimde seçilir.(Hankel vd, 2003). Saçılma hesaplamalarında gelen atomun öteleme hareketini temsil eden dalga fonksiyonu $g(\mathbf{R})$, Sinüs ya da Gaussian dalga fonksiyonları şeklinde belirlenmektedir. Sinüs dalga paketi

$$g(\mathbf{R}) = N_s e^{-ik_0(\mathbf{R}-R_0)} e^{-\beta(\mathbf{R}-R_0)} \frac{\sin(\alpha(\mathbf{R}-R_0))}{R-R_0} \quad (3.12)$$

şeklindedir. Burada $N_s = \frac{1}{(\alpha\pi)^{1/2}}$ sinüs dalga paketinin normalizasyon sabitidir (Hankel vd, 2003). Başlangıç dalga fonksiyonunu enerji aralığı k_0 , α ve β değerlerine bağlı olarak belirlenir. Bu parametreleri değiştirerek farklı enerji aralıklarında saçılma olayları incelenir. Gaussian dalga fonksiyonu ise

$$g(\mathbf{R}) = N_g e^{-ik_0(\mathbf{R}-R_0)} e^{-\beta_g(\mathbf{R}-R_0)^2} \quad (3.13)$$

şeklinde verilir. $N_g = (\beta_g/\pi)^{1/4}$ olup Gaussian dalga için normalizasyon sabitidir. β_g dalga fonksiyonunun ilgili enerji aralığında yayılımını sağlar. Ancak Gaussian dalga paketinin genliğinin düşük ve yüksek enerjilerde çok küçük olması sayısal hesaplamalarda hatalara yol açabilmektedir (Hankel vd, 2003; Sürücü, 2011).

3.3. Dalga Fonksiyonunun Analizi

Atom-molekül, molekül molekül kimyasal reaksiyonlarda reaksiyon ihtimaliyetleri dalga fonksiyonu kullanılarak hesaplanır. Bu yüzden dalga fonksiyonun analizi önemlidir. Akı analizi ve asimptotik analiz yöntemleri kullanılarak reaksiyon ihtimaliyetleri

hesaplanır. Bu tez çalışmamda akı analizi yöntemi kullanılarak reaksiyon ihtimaliyetleri hesaplanmıştır.

3.3.1. Akı (Flux) Analizi

Asimptotik analizle ürün dağılım durumları ya da bireysel kuantum durumları arasındaki reaksiyon ihtimaliyetleri ürün koordinatları kullanılarak hesaplanmaktadır. Ancak, birçok saçılma olaylarında, başlangıçta giriş kanalı koordinatlarında tanımlanan dalga paketini ürün koordinatlarına dönüştürmeden toplam reaksiyon ihtimaliyetleri hesaplanabilmektedir (Miquel vd., 2003). Dalga paketinin bütün yayılımının giriş kanalında yapılmasıyla toplam saçılma ihtimaliyetleri akı analiz metodu olarak adlandırılan yöntemle elde edilebilir. akı analizi

$$\hat{F} = -\frac{i\hbar}{2\mu} \left[\frac{\partial}{\partial r} \delta(r - r_d) + \delta(r - r_d) \frac{\partial}{\partial r} \right] \quad (3.14)$$

şeklinde tanımlanan (Meijer vd., 1998) akı operatörü ile ilgili matris elemanlarını hesaplar. Burada r_d potansiyel enerji yüzeyini çıkış kanalında bölen noktadır (Padmanaban ve Mahapatra, 2006; Meijer vd., 1998). Akı analizinde $v_{j,j}$ başlangıç kuantum durumları için reaksiyon ihtimaliyetleri saçılma dalga fonksiyonu cinsinden

$$P_{vj}(E) = \langle \psi_{vj}^+(E) | \hat{F} | \psi_{vj}^+(E) \rangle \quad (3.15)$$

olarak elde edilir. $\psi_{vj}^+(E)$ saçılma fonksiyonu kompleks $\psi_{vj}(E)$ dalga fonksiyonunun Fourier dönüşümüyle

$$\psi_{vj}^+(E) = \frac{1}{a_{vj}(E)} \int_0^{\infty} dt e^{iEt/\hbar} \psi_{vj}(t) \quad (3.16)$$

şeklinde hesaplanır. $a_{vj}(E)$ normalizasyon sabitidir ve asimptotik saçılma fonksiyonlarından elde edilir.

$$k_{vj}(E) = -\left(\frac{\mu_R}{\hbar k_{vj}}\right)^{1/2} e^{-ik_{vj}R} \quad (3.17)$$

$$a_{vj}(E) = k_{vj}(E)g(R) = -2\pi\left(\frac{\mu_R}{\hbar k_{vj}}\right)^{1/2} g(k_{vj}) \quad (3.18)$$

olarak bulunur. Burada $g(R)$ başlangıçta A atomunun öteleme enerjisini gösteren dalga fonksiyonu ve $g(k_{vj})$ fourier dönüşümüdür. $\psi_{vj}^+(E)$ saçılma fonksiyonu denklem (3.15) da yerine yazılırsa reaksiyon olasılıkları

$$P_{vj}(E) = \frac{\hbar}{\mu|a_{vj}(E)|^2} \text{Im} \left\langle \int_0^\infty dt e^{iEt/\hbar} \psi_{vj}(t) \left| \int_0^\infty dt e^{iEt/\hbar} \delta\left(-r_d \frac{\partial}{\partial r} \psi_{vj}(t)\right) \right. \right\rangle \quad (3.19)$$

şeklinde elde edilir. Dalga paketinin sadece reel kısmı alındığında $r=r_\infty$ ile tanımlanan yüzeydeki akı değerlendirilir. Bu durumda reel dalga fonksiyonu için reaksiyon ihtimaliyeti

$$P_{vj}(E_{col}) = \frac{1}{2j+1} \left[P_{vj}^{JK=0}(E_{col}) + 2 \sum_{K=1}^\infty P_{vj}^{JK}(E_{col}) \right] \quad (3.20)$$

olarak hesaplanır.(Sürücü, 2011)

3.4.Reaksiyon tesir kesiti

Reaktif saçılma olaylarında integral tesir kesitleri

$$\sigma_{vj',vj}(E) = \frac{\pi}{(2j+1) \sum \mu_R E_{col} / \hbar^2} \sum_J (2J+1) \sum_{K'K} |S_{vj'K',vjK}^J(E)|^2 \quad (3.21)$$

şeklinde saçılma matrisine bağlı olarak verilir. Bu nedenle tesir kesitlerini elde etmek için birçok J değeri için reaktif saçılma matrisini hesaplamak gerekir. Saçılma olaylarında saçılma matrisi reaksiyon ihtimaliyetlerini verdiği için tesir kesiti

$$\sigma_{v_j', v_j}(E) = \frac{\pi}{(2j+1)2\mu_R E_{col} / \hbar^2} \sum_J (2J+1) \sum_K P_{v_j', v_j}^{JK}(E) \quad (3.22)$$

olur. Bu ifade bireysel kuantum durumları arasındaki tesir kesitini verir ve başlangıçtaki kuantum durumları için tesir kesitleri

$$\sigma_{v_j}(E) = \sum_{v_j'} \sigma_{v_j', v_j}(E) \quad (3.23)$$

şeklinde elde edilir (Padmanaban, 2005; Sürücü, 2011).

3.5. Reaksiyon Hız Sabiti

Kuantum mekaniksel olarak reaksiyon hızı verilen bir sıcaklık değerinde reaksiyonun oluşum hızıdır ve Maxwell Boltzmann dağılımına göre tüm enerji değerleri üzerinden reaksiyon tesir kesitlerinin integre edilmesiyle elde edilir.

$$k_{v_j', v_j}(T) = \left(\frac{8}{\pi \mu_R k_B^3 T^3} \right)^{1/2} \int_0^\infty E \sigma_{v_j', v_j}(E) e^{-E/k_B T} dE \quad (3.24)$$

(Chu vd., 2006). Burada k_B Boltzmann sabitidir ve $k_{v_j', v_j}(T)$, T sıcaklığında bireysel kuantum seviyeleri arasındaki hız sabitini gösterir. Başlangıç kuantum durumları için hız sabitleri ürün kuantum durumları üzerinden hız sabitlerinin toplanmasıyla

$$k_{v_j}(T) = \sum_{v_j'} k_{v_j', v_j}(T) \quad (3.25)$$

şeklinde elde edilir. Son olarak, termal hız sabiti, her bir kuantum durumuna karşılık gelen Boltzmann ihtimaliyetleri ile hız sabitlerinin çarpılıp toplanmasıyla

$$k_{v_j}(T) = \sum_{v_j} k_{v_j}(T) P_{v_j} \quad (3.26)$$

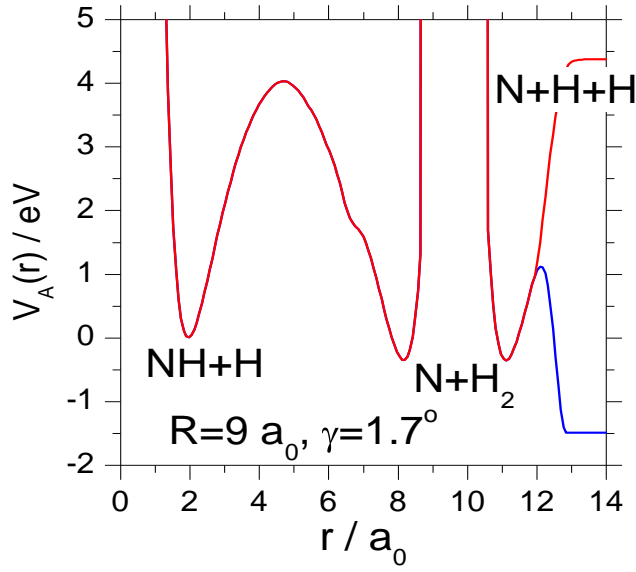
elde edilir. Buradaki p_{vj} Boltzmann ihtimaliyet ifadesi olup, $p_{vj}(T)$

$$p_{vj} = \frac{(2J+1)e^{\left(-\varepsilon_{vj}/k_B T\right)}}{\sum_{vj} (2j+1)e^{\left(-\varepsilon_{vj}/k_B T\right)}} \quad (3.27)$$

olarak ifade edilir. Denklem (3.27)' te paydadaki ifade başlangıç durumları için dağılım fonksiyonudur.

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, giriş (reaktant) Jacobi koordinatları kullanılmıştır. Sinus başlangıç dalga fonksiyonunun seçimiyle zamana bağlı real dalga paketi ve akı analiz metodlarıyla (Gray and Balint-Kurti, 1998; Meijer vd., 1998) CS ihtimaliyetleri $P_{jK}^{Jp} \tilde{E}_{col}$ hesaplanmıştır (Hankel vd.,2003). Hesaplamalarda kullanılan $\text{NH}_2 \tilde{A}^2A_1$ uyarılmış potansiyel enerji fonksiyonu şekil 4.1 de gösterildiği gibi fiziksel olmayan bir durumdan dolayı yeni bir üstel fonksiyon eklenerek tekrar ele alınmıştır Şekil 4.1' de mavi ile gösterilen kısım fiziksel olmayan durumu, kırmızı ile gösterilen kısım ise uygun potansiyel enerjiyi göstermektedir (Akpınar vd.,2008). Burada J toplam açısal momentum, $p = \pm$ parite, j ND'nin dönme kuantum durumu, K hem J 'nin hem de j 'nin R boyunca iz düşümüdür, biz $a^1\Delta$ ilk uyarılmış elektronik durum, $v=0$ taban durumunda ve j dönme durumundaki giriş iki atomlu molekül olan ND $\tilde{A}^1\Delta, v=0, j$ ile D atomu arasındaki reaktif saçılma olayını inceleriz. E_{col} ise çarpışma enerjisidir. ND $\tilde{A}^1\Delta$ molekülünün dönme Hamiltonyeni $(\hat{J}^2 - \hat{l}_z^2) / 2\mu r^2$ olarak verilir (Akpınar vd.,2008). Burada da \hat{l}_z , NH eksenine boyunda dönme elektronik açısal momentumdur. Böylece dönme enerjisi $[j(j+1) - \lambda^2] / 2\mu r^2$ şeklinde ifade edilir. Burada Δ elektronik durumu moleküler orbital teoriye uygun olarak $j \geq \lambda = 2$ dir (Akpınar vd.,2008). Tablo I 'de hesaplamalarda kullanılan sayısal parametreler verilmiştir. Bu tablodaki parametreleri belirlemek için kapsamlı yakınsaklık testleri yapılmıştır.



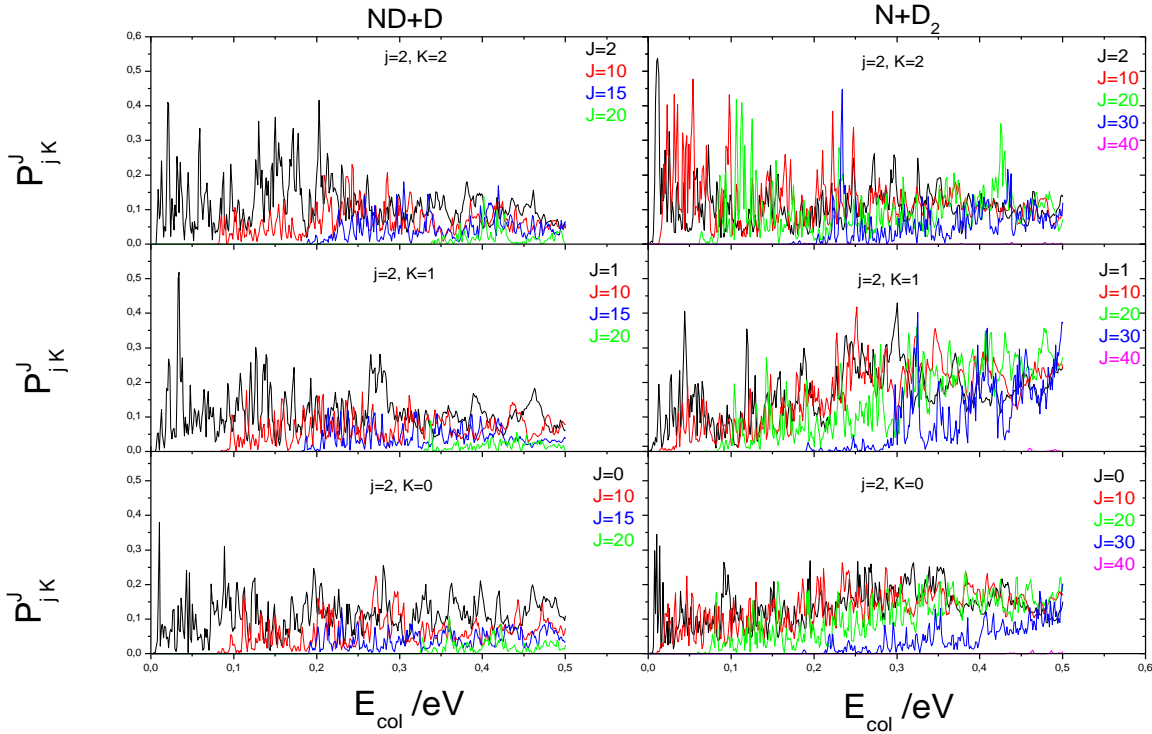
Şekil 4.1. $\text{NH}_2 \tilde{A}^2A_1$ uyarılmış potansiyel enerji yüzeyinin $R=9,0a_0$ ve 1.7° değeri için düzeltilen ve düzeltilmeyen şekli (Akpınar vd., 2008)

Tablo 4.1. Hesaplamalarda kullanılan parametreler (Bütün birimler atomik birim cinsinden verilmiştir.)

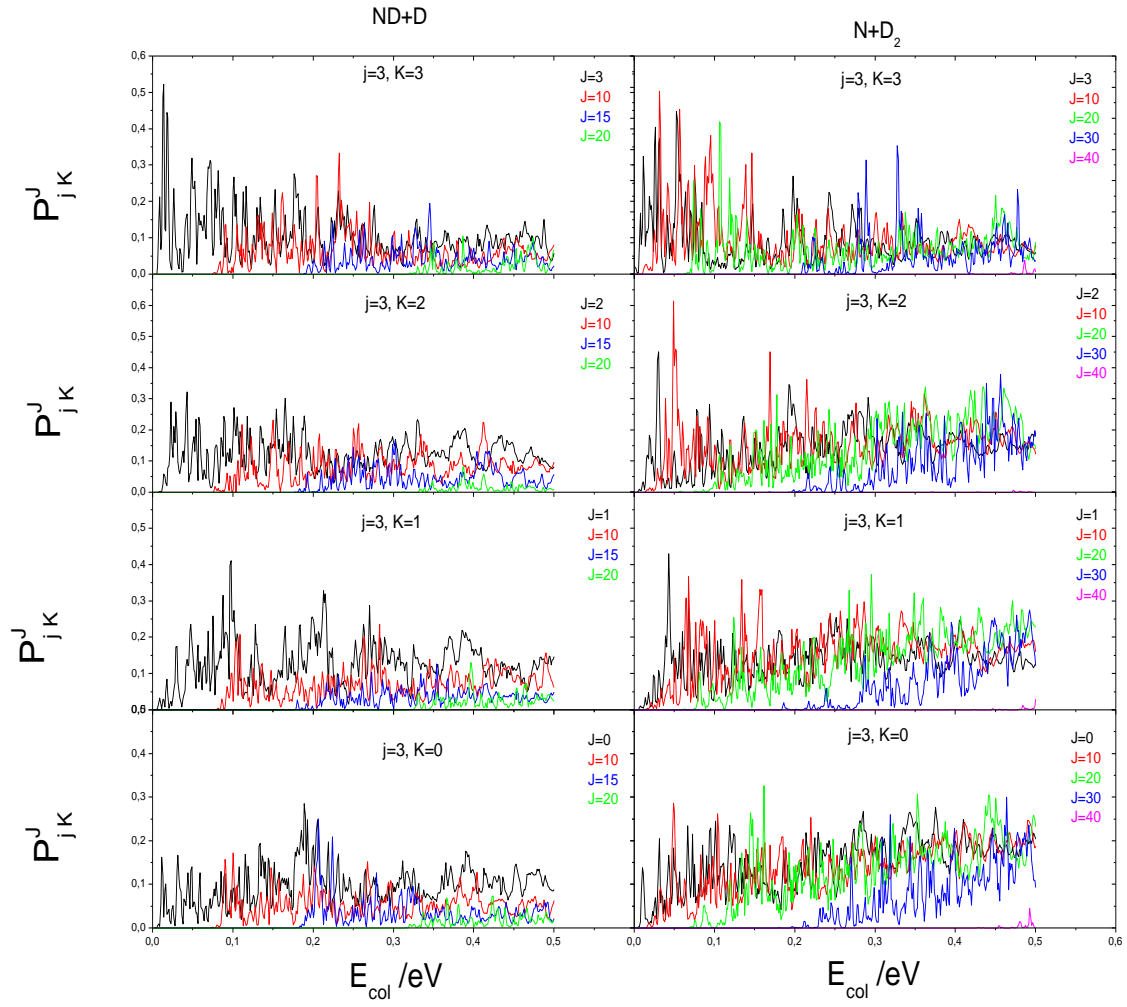
E_0 . Sinüs başlangıç dalga paketinin kinetik enerjisi	0.15 eV
$R_0, t=0$ aralığında dalga paketinin yerleştirildiği nokta	12
α , başlangıç dalga paketinin genişliği	6
R grid'inin maximum ve minimum değerleri ve grid sayısı	1–15 139
r grid'inin maximum ve minimum değerleri ve grid sayısı	1.5–13 139
Maximum dönme açısız momentum kuantum sayısı	80
Potansiyelin kesim enerjisi	0.22
R ve r grid lerinde yok edici potansiyelin yerleştirildiği yer	12 ve 10
R gridinde ki analiz çizgisinin yerleştirildiği yer	9

Şekil 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, ve 4.6 da Exchange (değişim) ve depletion kanalları için 0-0.5 eV çarpışma enerji aralığında $K=\min(J,j)$, $\nu = 0$ ve $j = 2, 3, 4, 5$ ve 6 kuantum durumları için seçilen J değerleri ile CS ihtimaliyetleri gösterilmiştir. Bütün toplam açısız momentum değerleri için reaksiyon ihtimaliyetleri $J=40$ 'a kadar hesaplanmıştır. Hem exchange hem de depletion reaksiyonları bariyersiz bir potansiyel enerji yüzeyi ile yapılan çalışmaların özelliklerini göstermektedir ve grafiklerden de görüldüğü gibi eşik enerjisi veya bir

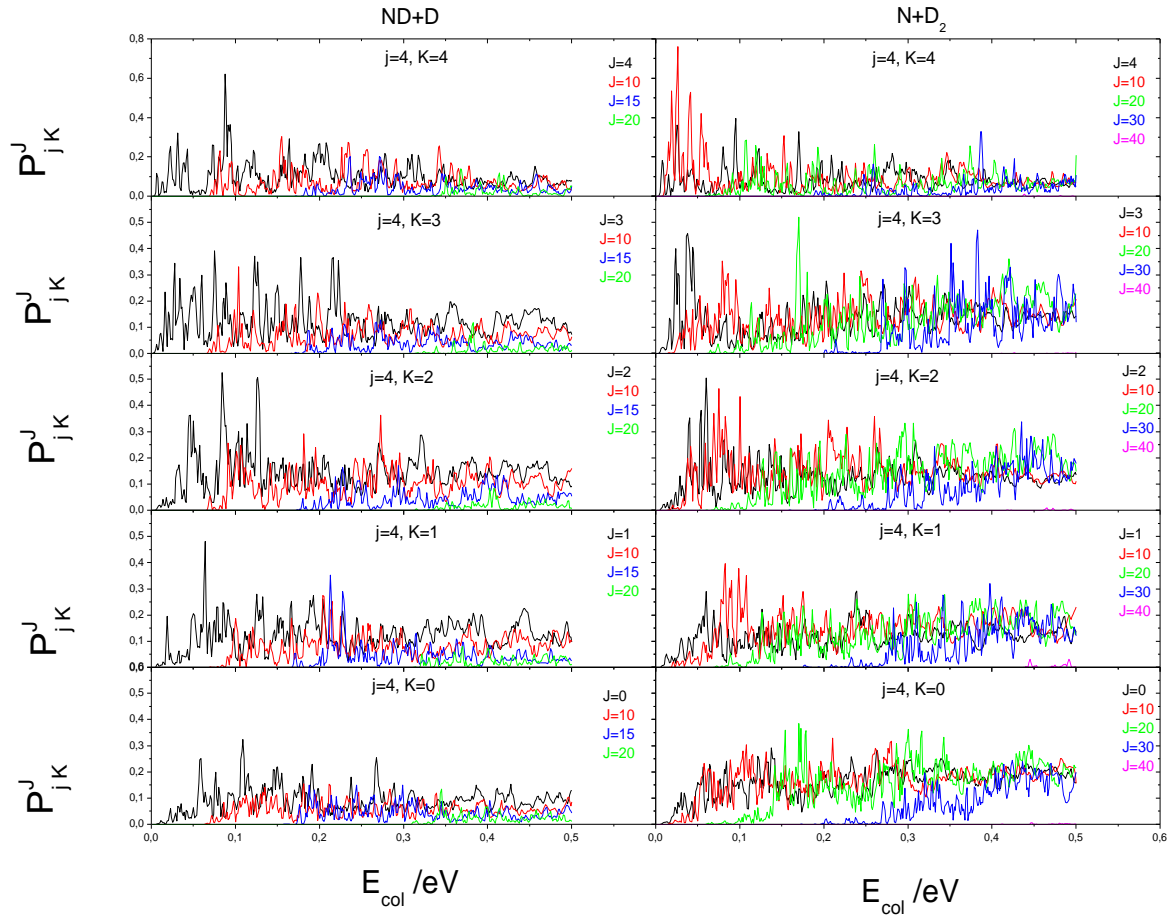
başlangıç enerjisi yoktur. Bu durum $J=0$, $j=2$, $K=0$ ve bunun gibi tüm benzer grafiklerde açık olarak görülmektedir. Fakat, $J>0$, $j=2$, $K=0$ ve bütün benzer grafiklerde bir eşik enerjisi görülmektedir. Bunun sebebi de centrifugal (merkezkaç) engelinin olmasıdır ve J arttıkça eşik enerjisi daha yüksek çarpışma enerji değerlerine ulaşır. Tüm K değerleri için ihtimaliyetler, çarpışma enerjisine bağlı olarak çok fazla güçlü ve keskin rezonanslar gösterir. Bu rezonans yapının düşük çarpışma enerjilerinde oldukça fazla olduğu grafiklerden görülmektedir. Rezonans yapıların keskin ve güçlü olmasının sebebi derin bir potansiyel kuyusunun sonucudur. Ayrıca Şekil 4.2, 4.3, 4.4, 4.5 ve 4.6 da görüldüğü gibi her iki kanalda da çarpışma enerjisinin bir artışı ile reaksiyon ihtimaliyet değerlerinde bir azalma vardır. Bütün reaksiyon ihtimaliyetleri birbirlerine benzerlik göstermektedir. $N+D_2$ depletion reaksiyon ihtimaliyetleri, aynı J değerleri için $ND+D$ exchange ihtimaliyetlerinden daha büyüktür.



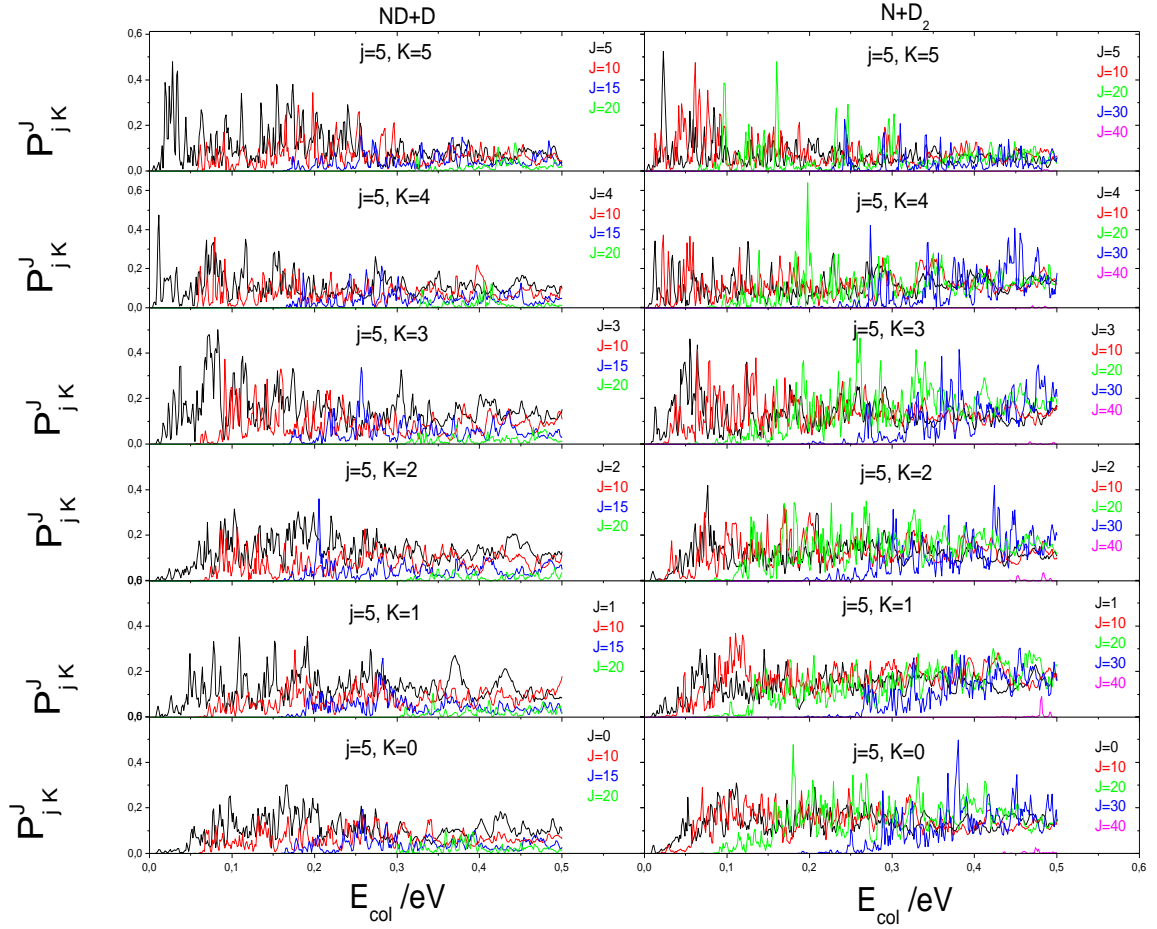
Şekil 4.2. $j=2$ için, her iki reaksiyon kanalında farklı J değerleri için CS ihtimaliyetleri



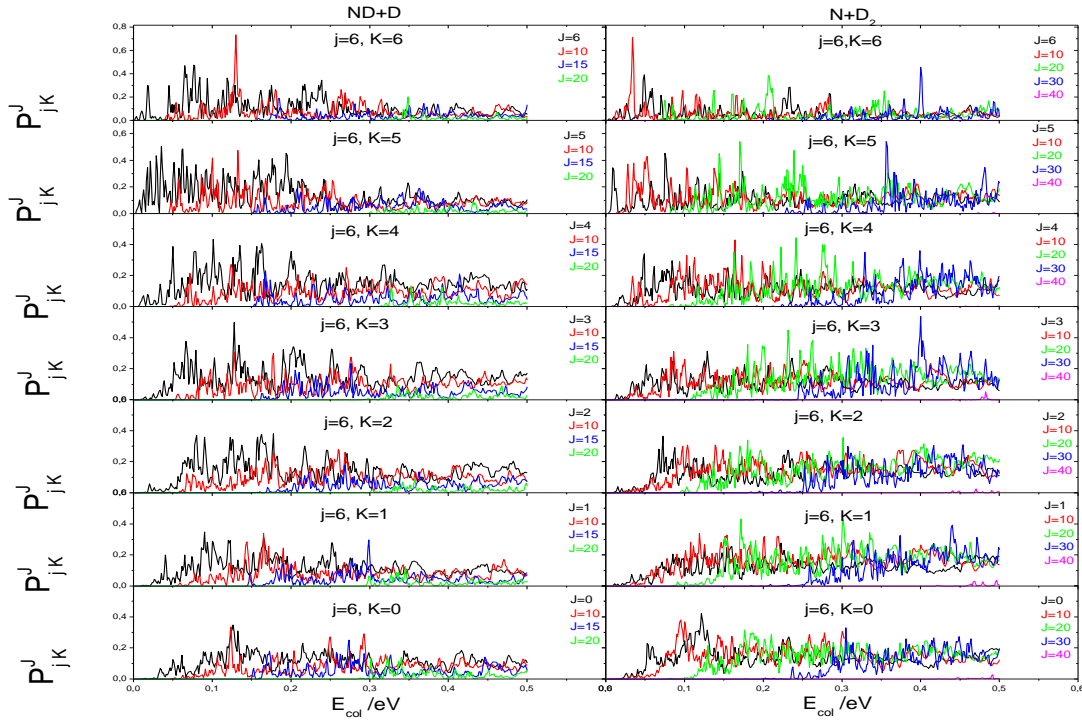
Şekil 4.3. $j=3$ için, her iki reaksiyon kanalında farklı J değerlerinin CS ihtimaliyetleri



Şekil 4.4. $j=4$ için, her iki reaksiyon kanalında farklı J değerleri için CS ihtimaliyetleri

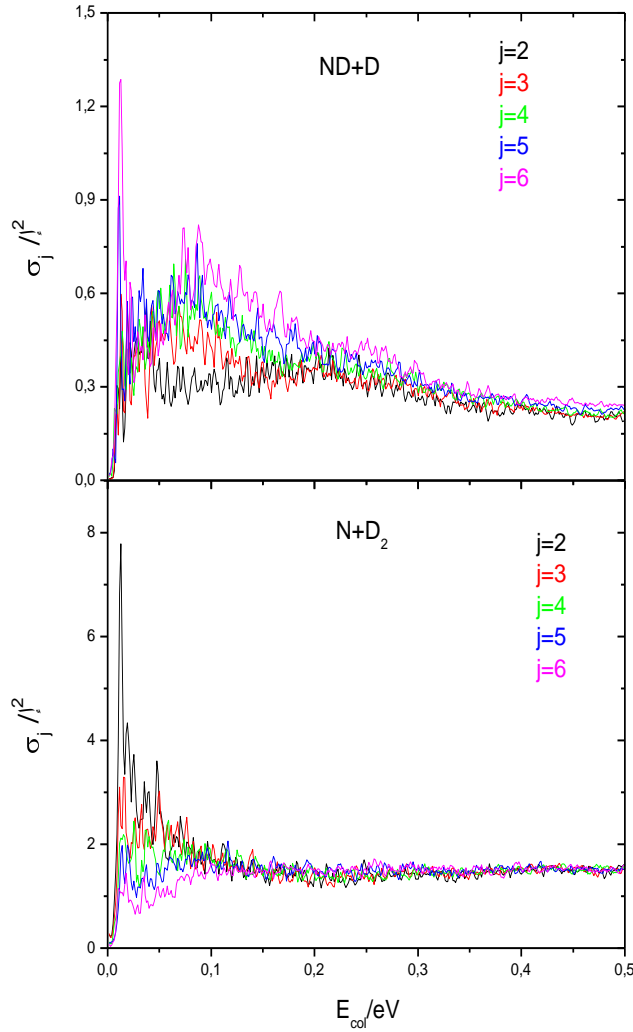


Şekil 4.5. $j=5$ için, her iki reaksiyon kanalında farklı J değerleri için CS ihtimaliyetleri



Şekil 4.6. $j=6$ için, her iki reaksiyon kanalında farklı J değerleri için CS ihtimaliyetleri

Şekil 4.7. de exchange (ND+D) ve depletion (N+D₂) reaksiyonları için tesir kesiti $\sigma_{j_0}(E_{col})$, $j=2, 3, 4, 5$ ve 6 değerleri için hesaplandı. Tüm dönme kuantum durumlarında, tesir kesitleri, ~ 0.01 eV de küçük bir eşik enerjisi gösterir daha sonra tesir kesitleri bariyersiz bir potansiyel enerji yüzeyinin özelliklerini gösteren çarpışma enerjisi ile azalır. Bundan başka tesir kesitleri küçük çarpışma enerjilerinde başlangıç dönme durumlarına bağımlı olurken yüksek çarpışma enerjilerinde dönme kuantum durumlarına bağımlılık göstermemektedir. Şekil 4.7'den görüldüğü gibi tesir kesitlerinin büyüklüğü exchange reaksiyonu için dönme kuantum sayısı ile artar fakat depletion reaksiyonu için başlangıç dönme kuantum sayısının artması ile bir azalma göstermektedir. Tüm başlangıç dönme kuantum durumları için depletion (N+D₂) reaksiyon ihtimaliyetlerine benzer şekilde exchange (ND+D) reaksiyonunun tesir kesitleri depletion (N+D₂) reaksiyonunun tesir kesitlerinden daha küçüktür.

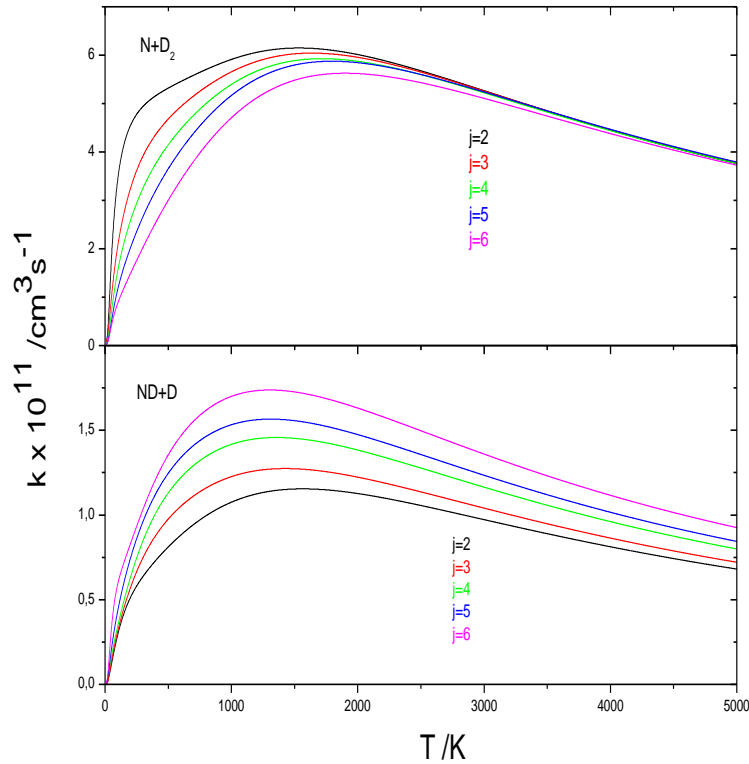


Şekil 4.7. Exchange ve depletion için farklı j durumlarının CS tesir kesitleri

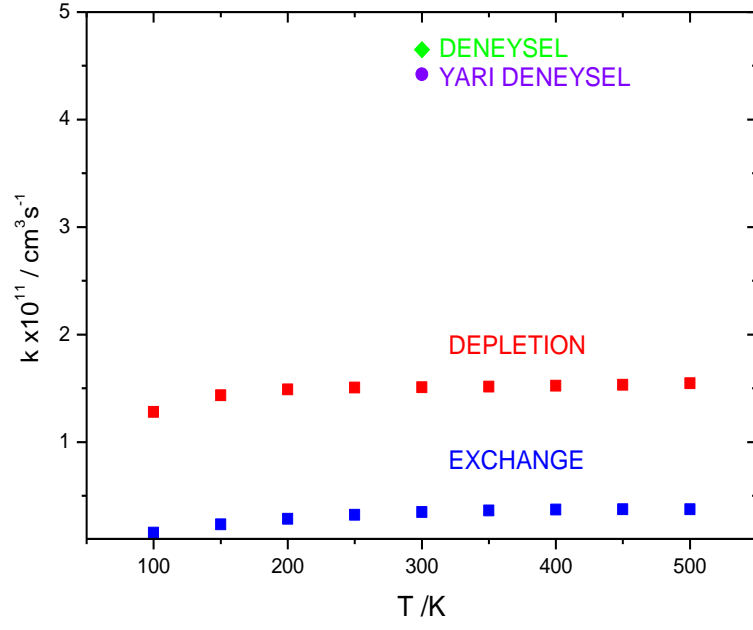
Denklem (3.24) ü kullanarak 0 ile 5000 K arasında değişen sıcaklıklarda depletion ve exchange reaksiyonlarının dönme kuantum durmları için hız sabitlerini hesapladık. Düşük sıcaklıklarda her iki reaksiyon kanalında hız sabitlerinde hızlı bir artış yüksek sıcaklıklarda ise yavaş bir düşüş şekil 4.8 de görülmektedir. Ayrıca hız sabitleri, exchange reaksiyonunda j'nin artan değerlerinde artarken, depletion reaksiyonunda j'nin artan değerlerinde azalmaktadır. Sıcaklığın, hız sabitini her iki reaksiyonda da önemli ölçüde değiştirdiği görülmektedir.

Her iki reaksiyonun termal hız sabitlerini, denklem (3.26) yı kullanarak 300 K oda sıcaklığında hesapladık. $\frac{1}{2}$ elektronik degeneracy (eşenerjilik) faktörünü de içeren termal hız sabiti, depletion kanalı için 300 K da $1.5 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ olarak bulduk. Bu da, hem $4,65 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ olan deneysel değer hem de $4,42 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ olan yarı deneysel TSH (yarı deneysel) değer (trajectory-surface hopping) ile uyumluluğu Şekil 4.9 de gösterildi (Wei vd., 2009). Teori ve deney arasındaki farklılık çoğunlukla kuantum mekaniğindeki

tünelleme ve sıfır nokta enerjisi gibi önemli kuantum etkilerinden kaynaklanmaktadır. Exchange kanalı için termal hız sabiti $3.48 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ olarak bulunmuştur. Şekilde 4.9 da gösterildiği gibi depletion termal hız sabiti 300 K sıcaklıkta exchange termal hız sabitinden daha yüksektir. Ayrıca her iki reaksiyonun kuantum mekaniğindeki termal hız sabitleri ve TSH hesaplamaları da sıcaklığında ölçülen hızlar ile birlikte Şekil 4.9 da gösterilmiştir. Bu oranlar, T ile birlikte bariyersiz potansiyel enerji yüzeyine göre kısmen artmıştır. Her iki hız da, standart Arrhenius $k(T) = A \exp(-E_a/k_B T)$ denkleminde uygun olarak depletion için $A = 1.61 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ ve $E_a = 0.0018 \text{ eV}$ sonucunu, exchange için $A = 0.48 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ ve $E_a = 0.0092 \text{ eV}$ sonucunu bulduk. Küçük aktivasyon enerjileri, yüzeyin bariyersiz yapısını ve düşük merkezkaç (centrifugal) bariyerini yansıtmaktadır (Akpınar vd.,2008).



Şekil 4.8. Exchange ve depletion için farklı j durumlarının CS reaksiyon hız sabitleri



Şekil 4.9. Kuantum mekaniksel olarak her iki reaksiyon kanalının termal hız sabitlerinin deney ve yarı deneysel termal hız sabitleri ile karşılaştırılması

KAYNAKLAR

- Adam, L., Hack, W., McBane, G.C., Zhu, H., Qu Z.W. and Schinke, R., 2007. *The Journal of Chemical Physics*, **126**, 034304
- Akpınar, S., Defazio, P., Gamallo, P. and Petrongolo, C., 2008. *The Journal of Chemical Physics*, **129**, 174307
- Balakrishnan, N., Kalyanaraman, and Sathyamurthy, N., 1997. Time dependent quantum mechanical approach to reaktive scattering and related processes, *Physics Reports*, **280**, 79-144
- Bulut, N., Yıldız, A., Gogtas, F. and Akpınar, S., 1999. Quantum Wave Packet Study of $O(1D)+HCl(v) \rightarrow ClO(v)+H$ Reaction, *International Journal of Quantum Chemistry*, **J3**, 425-432
- Bulut, N., Göğtaş, F., Akpınar, S., 2004. Quantum wave packet study of the insertion reaction $S+H_2$, *Journal of Molecular Structure*, **710**, 127-132
- Casavecchia, P., 1996. An intimate view of chemical reactions, *Science Spectra*, **6**, 56-63.
- Casavecchia, P., Balucani, N., Alagia, M., Cartechini, L. and Volpi, G.G., 1999. "Reactive scattering of oxygen and nitrogen atoms", *Accounts of Chemical Research*, **32**, 503
- Chen, W.W. and Poirier B., 2010. *J Theor Comput Chem*, **9**, 435
- Chu, T.S., Han, K.L., and Varandas, A.J.C., 2006. A Quantum Wave Packets Dynamics Study of the $N(^2D)+H_2$ Reaction, *J.Phys.Chem.*, **110**, 1666-1671
- Defazio, P. and Petrongolo, C., 2007. Coriolis coupling effects on the initial-state-resolved dynamics of the $N(^2D)+H_2 \rightarrow NH+H$ reaktion, *The Journal of Chemical Physics*, **127**, 204311-204314
- Defazio, P., Petrongolo, C., McBane, G.C., Adam, L., Hack, W. Akpınar, S. and Schinke, R., 2009. *The Journal of Chemical Physics*, **A, 113**, 14458
- Frankcombe, T.J. and Nyman, G., 2007. *The Journal of Chemical Physics*, **A 111**, 13163-13167
- Gamallo, P., Gonzalez, M., and Sayos, R., Petrongolo, C., 2003. Quantum wave packet dynamics of the $1^3A'' N(^4S)+NO(X^2\Pi) \rightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+)+O(^3P)$ reaction, *Journal of Chemical Physics*, **119**, 7156-7166

- Göktaş, F.**,1995. Time Dependet Quantum Dynamics of Reaktive Scattering: Li+HFLiF+H, *Deperment of Physical and Theoretical Chemistery University of Bristol*
- Gray, S.K., Balint-Kurti, G.G.**, 1998. Quantum dynamics with real wave packets, including application to three-dimensional (J=0) D+H₂→HD+H reactive scattering, *J.Chem. Phys.*, **108**, 950-962
- Gómez-Carrasco, S., and Roncero, O.**, 2006. Coordinate transformation methots to calculate state-to-state reaction probabilities with wave packet treatments, *The Journal of Chemical Physics*, **125**, 054102
- Hankel, M.,Balint-Kurti, G.G., and Gray, S.K.**, 2003. Sinc Wave Packets: New Form of Wave Packet for Time-Dependent Quantum Mechanical Reactive Scattering Calculations, *International Journal of Quantum Chemistry*, **92**,205-211
- Heller, E.J.**, 1981. *Accounts of Chemical Research*, **14**, 368
- Honvault, P. and Launay, J.M.**, 1999. A quantum- mechanical study of the dynamics of the N+H₂ NH+H reaction *Journal of chemical physics* **111**, 6665-6667
- Hu, W., Schatz, G.C.**, 2006. Theories of reactive scattering, *The Journal of Chemical Physics*, **125**, 132301
- Lee, Y.T.**, 1987. Molecular beam studies of elementary chemical processes. *Science*, **236**, 793-798
- Levine, R.D.**, 2005. *Molecular reaction Dynamics*, United States of America by Cambridge University Press,New York
- Li, Z., Xie, C., Jiang, B., Xie, D., Liu, L., Sun, Z., Zhang, D.H. and Guo, H.**, 2011. *The Journal of Chemical Physics*, **134**, 134303
- Lín, S.Y. and Guo, H.**, 2004. Quantum integral cross section and rate constant of the O(¹D)+H₂→OH+H reaction on a new potential energy surface, *Chemical Physics Letters*, **385**, 193-197
- Lín, S.Y. and Guo, H.**, 2006. Exact quantum dynamics of N(²D)+H₂→NH+H reaction: Cross-sections, rate constants, and dependence on reactant rotation, *The Journal of Chemical Physics*, **124**, 031101
- Liu, J., Fu, B. and Zhang, D.**, 2009. Quantum wawe packet study of the C+H₂ reaction, *chemicel Physics Letters*, **480**, 46-48

- Mapatra, A.J.H.M. and Sathyamurthy, N.,**1997. Negative imaginary potential in time-dependent quantum molecular scattering, *The Journal of Chemical Society*, **93**, 773-779
- Meijer, A.J.H.M. and Goldfield, E.M.,** 1998. Time-dependent quantum mechanical calculations on H+O₂ for total angular momentum J>0, *Journal of Chemical Physics*, **108**, 5404–5413
- Meijer, A.J.H.M., Goldfield, E.M. Gray, S.K. and Balint-Kurti, G.G.,** 1998. Flux analysis for calculating reaction probabilities with real wave packets, *Chemical Physics Letters*, **293**, 270-276
- Miquel, I., Gonzales, M., Sayos, R. Balint-Kurti, G.G, Grau, S.K., and Goldfield, E.M.,** 2003. Quantum reactive scattering calculations of cross sections and rate constant for the N(²D)+O₂(X ³Σ_g⁻)→O(³P)+NO(X ²Π) reaction, *Journal of Chemical Physics*, **118**, 3111-3123
- Morari, C. and Jaquet, R.,** 2005. Time dependent reactive scattering for the system +D₂ ↔ HD+ and comparison with +H₂ ↔ H₂+ , *The Journal of Physical Chemistry A*, **109**, 3396-3404
- Nakamura, H. and Kato, S.,**2000. State resolved reaction rates of the spin-forbidden predissociation of NO₂: A quantum dynamics study of the rotational effect, *Journal of Chemical Physics*, **112**, 1785-1796
- Pack, T.R., Butcher, E.A. and Parker, G.A.,** 1995. Accurate three-dimensional quantum probabilities and collision lifetimes of the H+O₂ combustion reaction, *J Chem Phys*, **102**, 5998-6012
- Padmanaban, R.,** 2005. Time dependent wave packet dynamics of the H+HLi reaction, *PhD Thesis*, University of Hyderabad, India
- Padmanaban, R. and Mahapatra, S.,** 2006. Coriolis- Coupling Wave Packet Dynamics of H+HLi Reaction, *J. Phys. Chem.*, **110**, 6039-6046
- Padmanaban, R.,** 2005. Time dependent wave packet dynamics of the H+HLi reaction, *Doktora Tezi*, University of Hyderabad, India
- Poirier, B.,** 2005. Analytical treatment of Coriolis coupling for the three-body systems, *Chemical Physics*, **308**, 305-31
- Sürücü, S.,** 2011. Hidrojen atomuyla azot döteryum molekülünün etkileşmesinin incelenmesi, *Yüksek Lisans Tezi*, Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ

- Tal-Ezer, H. and Kosloff, R.**, 1984. An accurate and efficient scheme for propagating the time dependent Schrödinger equation, *The Journal of Chemical Physics* **81**, 3967-3971
- Wei, Q, Wu, V.W.K. and Zhou, B.**, 2009. *J Theor Comput Chem*, **8**, 1177
- Yeh, K., Xie, D. Zhang, D., Lee, S., and Schinke, R.**, 2003. Time-Dependent WavePacket study of the $O+O_2(\nu=0, j=0)$ Exchange Reaction, *J.Phys. Chem. A.*, **107**, 7215-721
- Zhang, D.H., Light, J.C. and Lee, S.Y.** 1998. Quantum rate constants for the H_2+OH reaction with the centrifugal sudden approximation, *Journal of Chemical Physics*, **109**, 79-86
- Zhang, W.Q. and Chen, M.D.**, 2009. *J. Theor Comput Chem*, **8**, 1131
- Zhou, S., Xie, D., Lin, S.Y. and Guo, H.**, 2008. *The Journal of Chemical Physics*, **128**, 224316

ÖZGEÇMİŞ

- Doğum Tarihi/Yeri** : 17.12.1986/ MİDYAT
- Tezli Yüksek Lisans** : **2010-2012** Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Atom ve Molekül Fiziği Ana Bilim Dalı
- Lisans** : **2006-2010** Kahraman Maraş Sütçü İmam Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü
- Lise** : **2001-2004** Midyat Aziz Önen Lisesi/ Midyat
- Orta Öğretim** : **1998-2001** Fatih İ.Ö.O./Midyat
- İlk Öğretim** : **1993-1994** Gazi İ.Ö.O./Malatya, **1994-1995** Adnan Menderes İ.Ö.O./Polatlı, **1995-1998** Fatih İ.Ö.O./Midyat
- İletişim** : fiiiiiz_47@hotmail.com