



**ATOM VE MOLEKÜL FİZİĞİNDE ETKİN VE HIZLI PROGRAMLAMA
YÖNTEMLERİ VE SLATER TİPİ ORBİTAL BAZINDA ÖRTME
İNTEGRALİNE UYGULANMASI**

Engin KARAARSLAN
Yüksek Lisans Tezi
Fizik Anabilim Dalı

Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

2015

Her Hakkı Saklıdır

T.C.
GAZİOSMANPAŞA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ATOM VE MOLEKÜL FİZİĞİNDE ETKİN VE HIZLI
PROGRAMLAMA YÖNTEMLERİ VE SLATER TİPİ ORBİTAL
BAZINDA ÖRTME İNTEGRALİNE UYGULANMASI

Engin KARAARSLAN

TOKAT

2015

Her Hakkı Saklıdır

Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU danışmalığında, Engin KARAARSLAN tarafından hazırlanan bu çalışma 06/01/2015 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Fizik Anabilim Dalı'nda Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Doç. Dr. Naim ÇAĞMAN

İmza:

Üye: Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

İmza:

Üye: Doç. Dr. İbrahim YİĞİTOĞLU

İmza:



Yukarıdaki sonucu onaylarım

Prof. Dr. Mehmet Ali SAKİN

Enstitü Müdürü

12/01/2015

TEZ BEYANI

Tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu tezin yazılmasında bilimsel ahlak kurallarına uyulduğunu, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğunu, tezin içerdiği yenilik ve sonuçların başka bir yerden alınmadığını, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, tezin herhangi bir kısmının bu üniversite veya başka bir üniversitedeki başka bir tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

Engin KARAARSLAN

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

ATOM VE MOLEKÜL FİZİĞİNDE ETKİN VE HIZLI PROGRAMLAMA YÖNTEMLERİ VE SLATER TİPİ ORBİTAL BAZINDA ÖRTME İNTEGRALİNE UYGULANMASI

Engin KARAARSLAN

Gaziosmanpaşa Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

Çok elektronlu atom ve moleküllerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin incelenmesinde Schrödinger denkleminin çözümü mümkün olmadığı için değişik yaklaşık yöntemler kullanılır. Bu yaklaşım yöntemleri içerisinde en yaygın kullanılanı Hartree-Fock-Roothaan (HFR) yaklaşımıdır. HFR denklemi çözülerek sistemin fiziksel özelliklerinin hesaplanabilmesi için, Slater tipi atom orbitalleri (STO) önemli rol oynamaktadır. STO bazındaki çok merkezli moleküler integrallerin hesaplanması Örtme integraline indirgenmektedir. Bu çalışmada Guseinov' un oluşturduğu analitik formül kullanılarak Örtme integrallerinin hızlı ve hassas hesaplanması için bilgisayar algoritması geliştirilmiştir. Örtme integralinde ortaya çıkan yardımcı fonksiyonların daha hızlı hesaplaması için yeni bir programlama yöntemi geliştirildi. Alınan sonuçlar literatürle karşılaştırılarak yeni oluşturulan programlama yöntemine göre Örtme integrallerinin daha hızlı hesaplandığı görüldü.

2015, 61 sayfa

Anahtar Kelimeler: Guseinov' un Yardımcı Fonksiyonları, Slater Tipi Orbitaler, Örtme İntegrali

ABSTRACT

Mr Thesis

THE EFFICIENT AND FAST PROGRAMMING METHODS IN THE ATOM AND MOLECULAR PHYSICS AND ITS APPLICATION TO THE OVERLAP INTEGRALS OVER SLATER TYPE ORBITALS

Engin KARAARSLAN

Gaziosmanpaşa University
Natural and Applied Science Department of Physics Science

Supervisor: Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

Because of the solutions of Schrödinger equation are not possible for examining physical and chemical properties of multielectron atoms and molecules, different approximate methods have been used. HFR approximation is the most commonly used one in these approximate methods. To determine the physical properties at the system by solving HFR equations, Slater type atomic orbitals have an important role. On the basis of STO, the calculation at multicenter molecular integrals reduces to the overlap integrals. In this study a computer algorithm has been developed to fast and accurate calculation of overlap integrals. By using Guseinov's analytical formulas. To faster calculations of the auxiliary functions arising in overlap integrals, new programming method has been advanced. By comparing the calculation results with literature. It is seen that using new constructed programming method, the overlap integral has been calculated more faster.

2015, 61 pages

Keywords: Guseinov's the Auxiliary Functions, Slater Type Orbitals, Overlap Integral

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR

Yüksek Lisans çalışmalarım süresince bana her türlü kolaylığı sağlayan, karşılaştığım zorluklarda bana yol gösteren ve bu çalışmanın oluşmasında bilgi ve deneyimlerini esirgemeyen danışman hocam Sayın Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU' na en içten teşekkürlerimi sunarım. Çalışmalarım süresince yardımlarını esirgemeyen bölümdeki değerli hocalarıma teşekkür ederim.

Bu çalışmanın her aşamasında yanımda olup desteklerini esirgemeyen eşim H. Bahar KARAARSLAN, arkadaşlarım Elif SOMUNCU, Arş. Gör. Ebru ÇOPUROĞLU, Melek GÖKBULUT ve Ayşe BAT' a teşekkür ederim.

Engin KARAARSLAN
06/01/2015

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	i
ABSTRACT	ii
ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SİMGE VE KISALTMALAR DİZİNİ	v
TABLolar DİZİNİ	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
1.GİRİŞ	1
1.1.Hartree-Fock Yaklaşımı	2
1.2.Slater Yaklaşımı	3
1.3.Moleküllerin Kuantum Teorisi	6
2.GENEL BİLGİLER	11
2.1.Atom Orbitalleri	11
2.1.1.Slater Tipi Atom Orbitali (STO)	12
2.1.2.Gauss Tipi Atom Orbitali (GTO)	13
3.MATERYAL VE METOD	15
3.1.Slater Bazında İki Merkezli Örtme İntegralinin Analitik İfade Edilmesi	15
3.2.Geri Çağırma Fonksiyonları	19
4.BULGULAR	26
5.SONUÇLAR VE TARTIŞMA	45
KAYNAKLAR	47
ÖZGEÇMİŞ	49

SİMGE ve KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler

U	Bir Elektronlu Atomik Orbital
R_{nl}	Radyal Dalga Fonksiyonu
V	Potansiyel Enerji
Y_{lm}	Küresel Dalga Fonksiyonu
Ψ_{nlm}	Dalga Fonksiyonu
\hat{F}_i	Fock Operatörü
n^*	Etkin Kuantum Sayısı
ξ	Slater Sabiti
A_n	Normalleştirme Katsayısı
χ_i	Atom Orbitali
ζ	Slater Katsayısı
S_{lm}	Reel Küresel Harmonikler
$S_{nlm,n'l'm'}$	Örtme İntegrali
χ_{nlm}	Kompleks Katsayı
F_m	Genelleştirilmiş Binomial Katsayısı
A	Yardımcı Fonksiyon
B	Yardımcı Fonksiyon
$P_{l\lambda}$	Legendre Polinomu
g	Yardımcı Fonksiyon

Kısaltmalar

HF	Hartree-Fock
STO	Slater Tipi Atom Orbitali
GTO	Gauss Tipi Atom Orbitali

Kısaltmalar

HFR

CPU

HDD

SSD

RAM

Açıklamalar

Hartree-Fock-Roothaan

İşlemci

Sabit Disk

Solid State Disk

Bellek

TABLolar DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Tablo 3.1. $g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda)$ yardımcı fonksiyonu için hafızaya yazılma şeması.....	21
Tablo 3.2. $F_q(n, n')$ yardımcı fonksiyonunun hafızaya yazma şeması	24
Tablo 4.1. $F_m(n)$ Binomial katsayısı hesaplaması	28
Tablo 4.2. 3.14. Eşitliğin çözümü ve çözüm için harcanan süre	32
Tablo 4.3. 3.11 Eşitliğin hesaplaması ve hesaplamak için harcanan zaman	37
Tablo 4.4. (Ref. Guseinov, I.I., Mamedov, B, 2000) Örtme integralinin hesaplama sonuçlarının karşılaştırılması	44

ŞEKİLLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 1.1. Bir molekülde ortaya çıkan enerji seviyeleri	8
Şekil 1.2. İki elektronlu bir molekül	9
Şekil 2.1. STO-nG Yaklaşımı için şematik gösterim	13

1. GİRİŞ

Moleküler yapı teorisi moleküllerin yapısının ve kimyasal özelliklerinin nicel tanımını doğru bir şekilde yapmayı amaçlar. Fiziksel sistemler için, Schrödinger denkleminin çözülerek dalga fonksiyonlarının belirlenmesi ve bu dalga fonksiyonlarının elektronik yapısının incelenebilmesi kuantum mekaniğinin en önemli problemlerinden biridir. Schrödinger denklemi hidrojen ve hidrojene benzer atomlar için çözülebilir. Fakat çok elektronlu sistemler için çözülememektedir. Bu problemin üstesinden gelebilmek için değişik yaklaşık yöntemler önerilmiştir. Bu yöntemlerden biri merkezci alan yaklaşımıdır.

Merkezcil alan yaklaşımında bir elektronlu atom orbitali

$$U_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.1)$$

dir. Schrödinger denkleminin açısız görünümüne $V(r)$ potansiyel enerjisi dahil olmadığından küresel simetrik yapıya sahip olan sistemler için açısız Schrödinger denkleminin çözümünün her zaman $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ fonksiyonu olur. $R_{nl}(r)$ fonksiyonunu belirlemek için

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R}{dr^2} + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R_{nl}(r) = ER_{nl}(r) \quad (1.2)$$

Radyal Schrödinger denklemini çözmemiz gerekir (Karaoğlu, 2003; Zettili, 2009). H atomu için $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ şeklinde alarak 1.2 Eşitliğinin çözümünün r konumları şeklinde arandığını biliyoruz. Bir atom orbitalindeki $R_{nl}(r)$ dalga fonksiyonunu

belirlemek için 1.2 Eşitliğinden merkezci alan yaklaşımından aldığımız $V(r)$ potansiyelini yazarak bu denklemi çözmemiz gerekir. Öyle bir denklem çözümü mümkün olmadığından bilim adamları radyal dalga fonksiyonunu belirlemek için değişik yaklaşık yöntemler ileri sürmüşlerdir.

1.1. Hartree-Fock Yaklaşımı

Atom ve moleküllerin kuantum teorisi kuantum mekaniğinin çok incelenmiş ve geliştirilmiş kısmıdır. Atom – molekül ve çekirdek sistemlerinin parçacıklarının yapısı ve özelliklerini incelemek için kuantum mekaniğinde çeşitli yaklaşım yöntemleri önerilmiştir. Bu yöntemlerden en çok kullanılanı Hartree-Fock (HF) yaklaşım yöntemidir.

Hartree yaklaşımı elektronlar arası etkileşmeleri (spin-spin, spin-yörünge) ihmal etmektedir ve antisimetrik dalga fonksiyonu özelliklerini içermemektedir. Hartree tarafından önerilen öz uyumlu alan yaklaşımının amacı çok elektronlu atom ya da moleküller için yazılan Schrödinger denklemini tek elektronlu, çözümü yapılabilen bir Schrödinger denklemine indirgemek olmuştur. Daha sonra bu metot elektron değiş tokuşunun etkisini de kapsamak üzere Fock ve Slater tarafından geliştirilmiştir (Atkins,1983).

Fock, Hartree yaklaşımında Pauli ilkesinin de dikkate alınması gerektiğini öne sürmüştür. HF yöntemi incelenecek sistemin kabuk modeli ile ilgilidir. Kabuk modeli Schrödinger tarafından hidrojen atomu için incelenmiş ve uzay koordinatlarına bağlı $\psi_{nlm}(xyz)$ dalga fonksiyonu kullanılarak hidrojen atomu için Schrödinger denklemi çözülmüştür (Levi, 2003; Szasz, 1931).

HF denklemi;

$$\hat{F}_i(i)\phi_i(r_i) = \varepsilon_i\phi_i(r_i)$$

şeklinde yazılır. Eşitlikte ε_i , i . orbitalin enerjisini temsil eder. \hat{F} , Fock operatörüdür ve

$$\hat{F} = \hat{h} + \hat{G}$$

şeklinde ifade edilir.

HF yönteminden alınan enerji gerçek enerji değerinin üzerindedir. Hartree-Fock denklemleri sadece sayısal olarak çözülebilmektedir. Yani r 'nin verilen her bir değerinde $R_{nl}(r)$ dalga fonksiyonunun sayısal değerleri elde edilir. Bu nedenle Hartree-Fock denklemleri yardımıyla sistemin fiziksel özelliklerini incelemek mümkün değildir.

1.2. Slater Yaklaşımı

Bu yaklaşımda geriye kalan elektronların çekirdeğinin alanını bir γ kadar azalttığı düşünülür. Yani incelenen elektron $Z - \gamma$ yükünün oluşturduğu alanda hareket ettiği düşünülür. Ayrıca Zerner ve başka bilim adamları H atomunun dalga fonksiyonuna yeni parametreler dahil ederek sonraki atomların dalga fonksiyonlarını yaklaşık olarak belirlemişler. Atomda elektronların sayısı arttıkça dalga fonksiyonuna sahip parametrelerin sayısı arttığında elektronun sayısı çok olan atom için dalga fonksiyonunu belirlemek çok zordur. Bu yöntem kullanılarak Sodyum atomuna kadar olan atomların dalga fonksiyonları belirlenebilmiştir. Slater o dönemde ortaya konulan tüm deneysel ve teorik sonuçları inceleyerek radyal dalga fonksiyonunun aşağıdaki şekilde olabileceğini düşündü.

$$R_{nl}(r) = A_{n^*} r^{n^*-1} l^{-\xi r} \quad (1.3)$$

Burada n^* 'a etkin kuantum sayısı denir ve $n = 1, 2, 3, 4, \dots$, $n^* = 1, 2, 3, 4, \dots$ gibi kesirli değerler de olabilir. Bundan sonraki incelemelerde $n^* = n$ alınacaktır.

ξ Slater sabiti, ekranlaştırma sabiti adını alır ve aşağıdaki şekilde gösterilir.

$$\xi = \frac{Z - \gamma}{n^*} \quad (1.4)$$

ξ 'ini belirlemek için Slater kuralları kullanılır. Bunu belirlemek için atom orbitallerini aşağıdaki gibi gruplara ayırmıştır.

1s, 2s 2p, 3s 3p.....

$${}^1H : 1s^1 \quad \xi_{1s} = 1,186$$

1.3 Eşitliğindeki A_n sayısı normalleştirme katsayısıdır. Bu sayıyı bulalım;

$$\int_0^{\infty} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (1.5)$$

1.3 Eşitliğini 1.5 Eşitliğinde yerine yazarsak

$$A_n^2 \int_0^{\infty} r^{2n-2} e^{-2\xi r} r^2 dr = 1$$

Bu denklemi sadeleştirirsek;

$$A_n^2 \int_0^{\infty} r^{2n} e^{-2\xi r} dr = 1$$

$$\int_0^{\infty} r^{2n} e^{-2\xi r} dr = \frac{(2n)!}{(2\xi)^{2n+1}}$$

Bu denklemi yerine yazarsak;

$$A_n^2 \frac{(2\xi)^{2n+1}}{(2n)!} = 1$$

ve buradan;

$$A_n = \frac{(2\xi)^{n+1/2}}{\sqrt{(2n)!}}$$

olur.

Radyal dalga fonksiyonunu (Slater atom orbitalini) aşağıdaki şekilde yazabiliriz;

$$R_{nl}(r) = \frac{(2\xi)^{n+1/2}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\xi r} \quad (1.6)$$

1.6 Eşitliğini 1.1 Eşitliğinde yerine yazarsak

$$U_{nlm}(\xi, r, \theta, \varphi) = \frac{(2\xi)^{n+1/2}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\xi r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.7)$$

1.7 Eşitliğinde Slater Tipi Atom Orbitali (STO) denir (Slater, J.C., 1930).

$$U_{nlm}(\xi, r, \theta, \varphi) = \chi_{nlm}(\xi, r, \theta, \varphi)$$

Örneğin Slater atomunu Hidrojen atomuna uyguladığımızda $\xi = 1,186$ buluruz.

Bu durumda Hidrojen atomu için χ değerini yazalım.

$$\chi_{nlm}(\xi, r, \theta, \varphi) = \frac{(2(1,186))^{n+1/2}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-1,186r}$$

Slater sabitini belirlemek için atomların elektron konfigürasyonu aşağıdaki gibi gruplara ayrılır.

$$\underbrace{1s}_1, \underbrace{2s, 2p}_2, \underbrace{3s, 3p}_3, \dots$$

Son zamanlarda bilgisayar teknolojisindeki gelişmelerden dolayı STO'ya ilgi artmıştır (Jones 1981; 1986; Banett, 2000;2002; Wenger ve Steinborn, 1983). Ancak STO'nun yetersizlikleri aşağıdakilerdir.

Bilindiği gibi Hidrojen atomu dalga fonksiyonu $(n-l-1)$ sayıda sıfır noktaları vardır. Dikkat edilirse Slater atom orbitalinin sıfır noktaları yoktur. Bu nedenle atomların incelenmesinde Hartree-Fock yaklaşımı Slater yaklaşımından daha iyi sonuç verir. Moleküllerin incelenmesinde ise tersine Slater yaklaşımı daha iyi sonuç verecektir.

1.3. Moleküllerin Kuantum Teorisi

Moleküller atomlardan oluşan dengeli bir sistemdirler. Atomlar küresel simetrik yapıya sahip olduklarından açısal momentum ve z bileşeni korunur. Bu da Schrödinger dalga denkleminin çözümünü kolaylaştırır. Moleküller küresel simetrik özelliğe sahip olmadıklarından L ve L_z korunmaz. Yani molekül için l ve m sayılarının da anlamı olmaz. Moleküller için L ve L_z 'nin korunmaması bu sistemler için Schrödinger denkleminin çözümünün çok çok zor olması demektir. Bu nedenle moleküllerin fiziksel özelliklerini incelemek için değişik yaklaşık yöntemler kullanılır. Bu yöntemlerden en geneli Adyabatik Yaklaşım Yöntemidir.

Adyabatik Yaklaşım Yöntemi molekülü oluşturan parçacıkların kütleleri arasındaki kesin farka dayanır.

$$m_{\text{molekül}} \gg m_{\text{çekirdek}} \gg m_{\text{elektron}} \quad (1.8)$$

Bilindiği gibi molekülü oluşturan parçacıklarla molekül arasında yukarıdaki gibi bir bağıntı vardır. Kütleler arasındaki bu farktan yola çıkarak Adyabatik Yaklaşım Yöntemini aşağıdaki gibi oluştururuz.

- i. Molekülleri oluşturan çekirdeklerin kütleleri çok büyük olduklarında ilk yaklaşımda çekirdekleri hareketsiz kabul ederek elektronların hareketi incelenir.
- ii. Elektronların hareketini göz önüne alarak aldığımız dalga fonksiyonunu kullanarak çekirdeklerin hareketi incelenir.
- iii. Bilindiği gibi moleküller kendi eksenleri etrafında dönme hareketi yapıyorlar ve toplam enerjisi bu hareketten etkileniyor. Bu nedenle 3. yaklaşımda moleküllerin dönme hareketi göz önüne alınır.
- iv. Ayrıca moleküller ilerleme hareketi de yapıyorlar. Molekülün toplam enerjisi bu hareketten etkilenmediği için koordinat başlangıcını kütle merkezine yerleştirerek bu hareketi aradan kaldırmak mümkündür.

Molekülü oluşturan parçacıkların hareketlerini dalga fonksiyonlarından molekülün dalga fonksiyonunu aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\Psi_{molekül} = \Psi_{elektron} \cdot \Psi_{çekirdek} \cdot \Psi_{dönme} \quad (1.9)$$

Elektronların ve çekirdeklerin yarıçaplarına bağlı olarak 1.9 Eşitliğini aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\Psi_{mol} = \Psi(\vec{r}) \cdot \Psi(\vec{R})$$

Burada \vec{r} elektronların yarıçap vektörü ve \vec{R} ise çekirdeğin yarıçap vektörüdür.

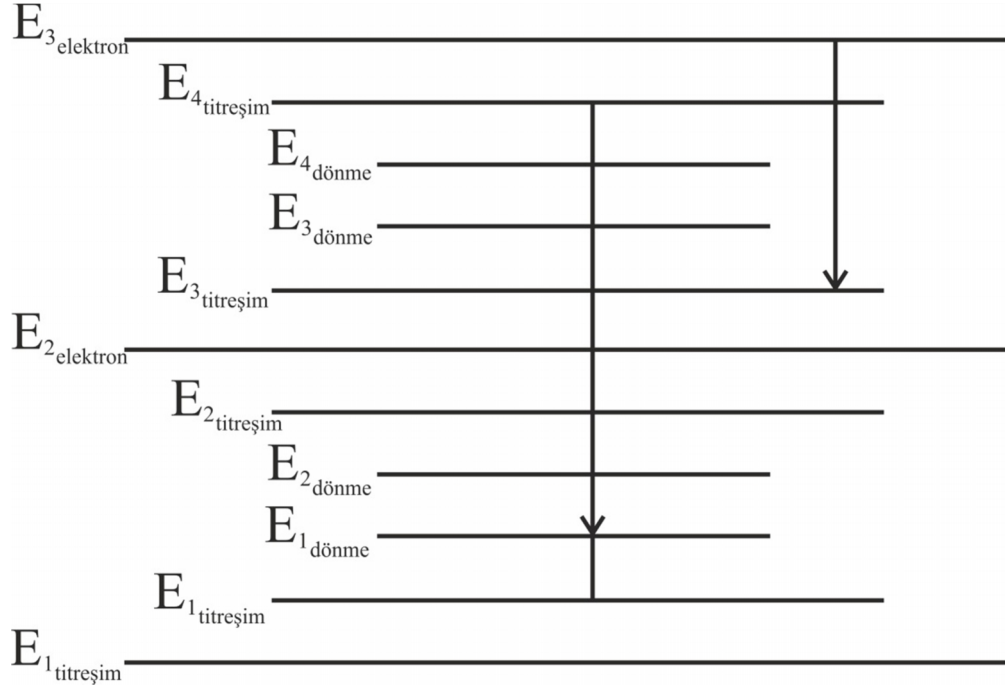
Molekülün yukarıda söylediğimiz hareketlerden kaynaklanan enerji seviyelerinin frekansları arasında aşağıdaki bağıntıyı yazabiliriz.

$$\omega_{elektron} \gg \omega_{titreşim} \gg \omega_{dönme} \quad (1.10)$$

$$\hbar\omega_{elektron} \gg \hbar\omega_{titreşim} \gg \hbar\omega_{dönme}$$

$$E_{elektron} \gg E_{titreşim} \gg E_{dönme} \quad (1.11)$$

1.11 Eşitliğinden yola çıkarak molekülde ortaya çıkan enerji seviyelerini aşağıdaki gibi gösterebiliriz.



Şekil 1.1. Bir molekülde ortaya çıkan enerji seviyeleri.

Yukarıda söylediğimiz Adyabatik Yaklaşım Yöntemine göre ilk yaklaşımda sistemin Hamilton operatöründe elektronların hareketini içeren terim göz önüne alınır ve geriye kalan terimlere ise pertürbasyon terimi olarak bakılır. İlk yaklaşımda elektronların hareketi için Schrödinger denklemi çözülür.

Schrödinger denkleminde aldığımız dalga fonksiyonunu kullanarak çekirdeklerin titreşim hareketlerinden ve molekülün dönme hareketinden dalga fonksiyonuna ve enerjiye gelen katkıları pertürbasyon yaklaşımı kullanılarak hesaplanır.

Yukarıda söylediklerimizi yaparak moleküllerin fiziksel özelliklerini incelemek çok zor olduğu için değişik yaklaşık yöntemler ileri sürülmüştür.

- i. Valans Bağ Yöntemi
- ii. Moleküler Orbital Yaklaşımı

Valans Baę Yöntemini kullanarak 30. yıllarda birçok molekülün fiziksel ve kimyasal özellikleri incelenebildi. Moleküllerde atomların sayısı arttığında bu yöntemi kullanarak molekülü incelemek çok zordur.

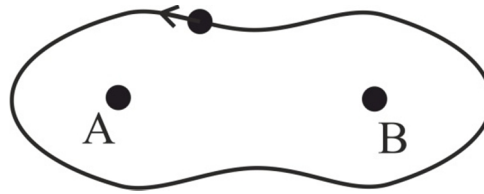
Günümüzde çok elektronlu sistemlerin fiziksel ve kimyasal özelliklerini incelemek için moleküler orbital teori kullanılır. Moleküler orbital teori merkezci alan yaklaşımına benzer. Bu yaklaşıma göre molekülde incelenen elektronun, geriye kalan elektronların ve çekirdeklerin ortalama alanında hareket ettiği düşünülür.

Merkezci alan yaklaşımında incelenen elektronun dalga fonksiyonu atom orbitali olarak tanımlanır. Moleküler orbital teoride ise incelenen elektronun dalga fonksiyonuna moleküler orbital denir.

Görüldüğü gibi moleküler orbitali oluşturmak atom orbitalinin oluşturmaktan kat kat zordur. Atom orbitalinde elektronlar bir çekirdekten olan yarıçap vektörlerine baęlı olurlar. Ama moleküler orbitalle incelenen elektronun birden çok çekirdekten olan yarıçap vektörlerine baęlı olacaktır. Ayrıca bilindiğı gibi oluşturulan moleküler orbitaller ortonormal dalga fonksiyonları olması gerekir. Bu düşünceden yola çıkarak molekülü oluşturan atom orbitalleri ortonormal fonksiyonlar kümesi olduklarından moleküler orbitalleri atom orbitallerinin lineer toplamı şeklinde alabiliriz (Roothaan, 1960).

$$U = \sum_i c_i \chi_i \quad (1.12)$$

Burada χ_i atom orbitalleri, c_i katsayıları enerjinin minimum olma ilkesinden bulunur. U ise moleküler orbitaldir. Bu düşüncelyi iki atomlu molekül için yorumlayalım.



Şekil 1.2. İki elektronlu bir molekül.

$$U = c_A \chi_A + c_B \chi_B$$

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B$$

İncelenen elektron A çekirdeğine yakın ise

$$U \approx c_A \chi_A$$

ve

$$\hat{H} \approx \hat{H}_A$$

olur.

İncelenen elektron B çekirdeğine yakın ise

$$U \approx c_B \chi_B$$

ve

$$\hat{H} \approx \hat{H}_B$$

olur.

2. GENEL BİLGİLER

2.1. Atom Orbitalleri

Orbital, bir atom veya molekülde elektronların bulunma olasılıklarının en yüksek olduğu yerlerdir. Buna göre bunlar sırasıyla atom orbitali veya moleküler orbital olarak adlandırılırlar. Temel setleri veya baz fonksiyonları şeklinde de adlandırılırlar (Anonim, 2014). Atomik orbital, incelenen atomun çekirdeği etrafındaki elektronun hareketini tanımlayan bir elektronlu fonksiyondur. Atomik orbitaller çok elektronlu atom ve moleküllerin dalga fonksiyonlarını incelemek için kullanılmaktadır.

Enerjiyi bulmak için öncelikle dalga fonksiyonunu bilmemiz gerekir. Schrödinger denklemi sadece hidrojen benzeri sistemler için tam olarak çözülebilmektedir (H , He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} , ...). İki den fazla parçacık içeren herhangi bir sistemde Schrödinger denklemini çözmek için dalga fonksiyonunu tahmin etmemiz gerekir. Daha önceden bilinen formüllere benzer fonksiyonlar kullanarak tahmine başlayabiliriz. Yani s , p , d , f , ... atomik orbitallerine benzer fonksiyonlar seçmeliyiz. Bu noktada baz seti kullanımı oldukça önemlidir. Çünkü baz setleri s , p , d , f benzeri fonksiyonlar setidir ve hidrojene benzer olsun veya olmasın elektronun tüm sistemlerdeki davranışını açıklamamıza yardımcı olur.

Baz fonksiyonlarının sayısı arttıkça, Moleküler Orbitallerin (MO) duyarlılığı da artar. Baz fonksiyonlarının sayısını sonsuz sayıda alırsak alınan sonuçlar Hartree-Fock'un nümerik yöntemle çözümünden alınan sonuçlarla aynı olur. Buna Hartree-Fock Limiti denir. Fakat alınan bu sonuç Schrödinger denkleminin tam çözümü olarak düşünülemez. Sadece tek determinantlı dalga fonksiyonu olarak kullanılarak alınan en iyi sonuçtur. Pratikte Hartree-Fock Limitine asla ulaşamaz. Fakat bu limit değerine yaklaştıkça gerçek enerji değerine de o kadar yaklaşmış olur.

Genelde fiziksel özelliklerin hesaplamalarda iki türlü baz fonksiyonu kullanılır; Slater Tipi Atom Orbitali ve Gauss Tipi Atom Orbitali.

2.1.1 Slater tipi atom orbitali (STO)

Hidrojen ve benzeri atomlar için Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen dalga fonksiyonlarından ve deneysel sonuçlardan yola çıkılarak öne sürülen Slater Tipi Orbitaller moleküler hesaplamalarda en çok kullanılan orbital türüdür ve aşağıdaki gibi yazılırlar (Slater, 1930).

$$\chi_{nlm}(\zeta; r, \theta, \varphi) = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\zeta r} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.1)$$

Burada (n, l, m) kuantum sayıları, (r, θ, φ) uzayda herhangi bir p noktasının küresel koordinatlarını temsil etmektedir. ζ , Slater katsayısıdır. $S_{lm}(\theta, \varphi)$ reel küresel harmoniklerdir. Kompleks küresel harmoniklerin lineer toplamından oluşan $S_{lm}(\theta, \varphi)$ reel küresel harmonikler aşağıdaki gibi belirlenir.

$$S_{l|m|}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_{l|m|}(\theta, \varphi) + Y_{l-|m|}(\theta, \varphi)]$$

$$S_{l-|m|}(\theta, \varphi) = \frac{1}{i\sqrt{2}} [Y_{l|m|}(\theta, \varphi) - Y_{l-|m|}(\theta, \varphi)]$$

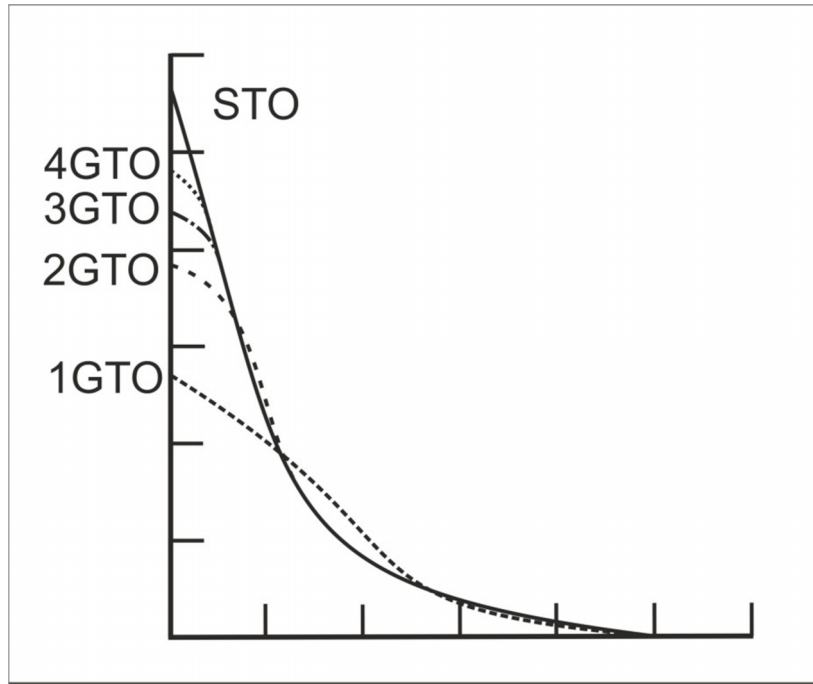
$$S_{l0}(\theta, \varphi) = Y_{l0}(\theta, \varphi)$$

Fock matrisindeki çok merkezli moleküler integralleri STO' lar bazında hesaplamak çok zordur (Sharma, 1976). Bu problemler bilgisayar teknolojisindeki gelişmeler sayesinde büyük oranda ortadan kalkmıştır.

STO bazında yapılan hesaplamalardaki zorlukları ortadan kaldırmak için Gauss fonksiyonlarının lineer toplamı alınır (Mamedov, 2004).

$$\chi_{STO} = \sum_{i=1}^N c_i \chi_{GTO}(\zeta_i) \quad (2.2)$$

Literatürde bu yaklaşım STO-nG olarak da bilinir (Leach, 2001). Burada n lineer toplamdaki Gauss tipi fonksiyonların sayısıdır. Gauss Tipi Atom Orbitalerin (GTO) sayısı ne kadar fazla olursa gerçek Slater tipi orbitaline o kadar yaklaşmış oluruz. Fakat bu durumda da lineer toplamdaki katsayılarının hesaplanmasında zorluklar ortaya çıkmaktadır.



Şekil 2.1. STO-nG Yaklaşımı için şematik gösterim.

Özuyumlu alan yaklaşımı HF yöntemindeki hesaplamalarda STO' lar en çok kullanılan atomik orbitaldir. Bu yaklaşımda STO' lar, fiziksel özelliklerin incelenmesinde önemli rol oynamaktadır.

2.1.2 Gauss tipi atom orbitali (GTO)

Gaussian tipi orbital, moleküller orbitalleri oluşturan lineer kombinasyonlarda kullanılan bir atomik orbitaldir. GTO' lar, çok atomlu moleküllerin ab-initio hesaplamalarında yaygın olarak kullanılmaktadır ve

$$g_{nlm}(\zeta r) = A_{nlm} e^{-\zeta r^2} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.3)$$

şeklinde ifade edilir. (Grandshteyn ve Ryzhik, 2001).

GTO' lar çekirdeğe yakın ve çekirdekten çok uzak mesafelerde deneysel sonuçlarla uyum sağlamamaktadır. Gaussian fonksiyonunun şekli tam exponansiyel değildir. Bu orbitaller orijinde daha düzgündür ve r' ye bağlı olarak hızlı bir şekilde azalır. Gauss fonksiyonu kullanılarak varyasyon yöntemi ile hidrojen atomunun enerjisi hesaplandığında gerçek değerinden uzak sonuçlar bulunur. GTO' larla matematiksel olarak çalışmak kolaydır (Richard ve Cooper, 1983).

3. MATERYAL VE METOD

3.1. Slater Bazında İki Merkezli Örtme İntegralinin Analitik İfade Edilmesi

Atom ve Moleküllerin fiziksel özelliklerinin hesaplanmasında Hartree-Fock Roothaan Yöntemi önemli rol oynamaktadır (Roothaan, 1960; Rico ve ark, 1989; Mekelleche ve Baba-Ahmed, 1996; Guseinov, 1970). HFR denklemini çözmeden önce ortaya çıkan çok merkezli moleküler integrallerin Slater Atom Orbitalinde (STO) hesaplanması önemlidir. Çok merkezli integraller Guseinov yaklaşımları kullanılarak iki merkezli örtme integrali ile ifade edilmiştir (Guseinov, 1995; Guseinov ve ark., 2000). Bu nedenle STO bazında iki merkezli örtme integralinin hassas ve hızlı hesaplanması çok önemlidir.

İki merkezli örtme integralini hızlı hesaplamak için oluşturulan analitik formüldeki yardımcı fonksiyonların tekraren hesaplanmaması için bilgisayar hafızasına bir kere yazılarak daha sonraki hesaplamalarda çağırma formüllerinin oluşturulması da önemlidir. STO bazında örtme integrali aşağıdaki gibi tanımlanır;

$$S_{nlm,n'l'm'}(p,t;\theta,\phi) = \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \vec{r}_a) \chi_{n'l'm'}(\zeta', \vec{r}_b) dV \quad (3.1)$$

Burada $p = \frac{R}{2}(\zeta + \zeta')$, $t = (\zeta - \zeta')/(\zeta + \zeta')$; olup R, θ ve ϕ yarıçap vektörünün küresel koordinatlardaki ifadesidir ve $\vec{R} \equiv \vec{R}_{ab} = \vec{r}_a - \vec{r}_b$ şeklinde tanımlanır. $\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}_a)$ ve $\chi_{n'l'm'}(\zeta', \vec{r}_b)$ ise a ve b çekirdekleri üzerine normalize edilmiş kompleks sayılardır.

$$\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}) = (2\zeta)^{n+\frac{1}{2}} \left[(2n)! \right]^{-\frac{1}{2}} r^{n-1} e^{-\zeta r} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.2)$$

Burada n tam sayı yada tam sayı olmayan ana kuantum sayısıdır. S_{lm} ise kompleks yada gerçek küresel harmoniktir.

$$S_{nlm,n'l'm'}(p,t;\theta,\varphi) = \sum_{\lambda=0}^{\min(l,l')} T_{lm,l'm'}^{*\lambda}(\theta,\varphi) S_{nl\lambda,n'l'\lambda}(p,t) \quad (3.3)$$

Burada $S_{nlm,n'l'm'}$ örtme integralidir. T^λ değişkeni ise iki farklı durum için belirlenir;

i. Kompleks STO' lar için

$$T_{lm,l'm'}^\lambda(\theta,\varphi) = \frac{2}{1+\delta_{\lambda 0}} \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} {}^{(2)}C_{m,-m',m-m'}^{ll'L} \cdot C_{\lambda,-\lambda,0}^{ll'L} \left(\frac{4\pi}{2L+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{L,m-m'}(\theta,\varphi) \quad (3.4)$$

ii. Gerçek STO' lar için

$$T_{lm,l'm'}^\lambda(\theta,\varphi) = \frac{2(-1)^{\gamma+\gamma'}}{(1+\delta_{\lambda 0})[(1+\delta_{m_0})(1+\delta_{m'_0})]^{\frac{1}{2}}} \sum_{i=-l}^l {}^{(2)} \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} {}^{(2)}(\varepsilon_{m_0})^{\delta_{i,\varepsilon_{mm'}}} C_{i\gamma,\gamma',i\gamma+\gamma'}^{ll'L} \cdot C_{\lambda,-\lambda,0}^{ll'L} \left[\frac{2\pi(1+\delta_{M_i,0})}{2L+1} \right]^{\frac{1}{2}} S_{LM_i}(\theta,\varphi) \quad (3.5)$$

olarak tanımlanır. Burada $\gamma = |m|$, $\gamma' = |m'|$ ve $M_i = \varepsilon_{mm'} |i\gamma + \gamma'|$. Eşitlik 3.4 ve Eşitlik 3.5' te yer alan $\sum^{(2)}$ işlemi, toplama işleminin iki kez yapılacağı anlamına gelmektedir. Eşitlik 3.5' te i ' nin negatif ($i = -1$) olduğu durumlarda $\gamma = \gamma'$ ve $\varepsilon_{mm'} = -1$ olacaktır ve eşitliğin değeri sıfır olacaktır. $\varepsilon_{mm'}$ 'un değeri ± 1 olabilir. Bu m ve m' 'nün işaretlerine göre belirlenir.

$\theta = \varphi = 0$ durumu için örtme integrali;

$$S_{nl\lambda,n'l'\lambda}(p,t) \equiv S_{nl\lambda,n'l'\lambda}(p,t,0,0) = \int \chi_{nl\lambda}^*(\zeta, \vec{r}_a) \chi_{n'l'\lambda}(\zeta', \vec{r}_b) dV \quad (3.6)$$

olarak tanımlanır. Burada $\lambda = |m| = |m'|$ ' dir. Yukarıda tanımladığımız değişkenleri 3.6 Eşitliğinde yerine yazarsak,

$$S_{nl\lambda, n'l'\lambda}(p, t) = N_{nn'}(p, t) \sum_{\alpha=-\lambda}^l \sum_{\beta=\lambda}^{l'} \sum_{q=0}^{\alpha+\beta} g_{\alpha\beta}^q(l\lambda, l'\lambda) Q_{n-\alpha, n'-\beta}^q(p, t) \quad (3.7)$$

Burada

$$N_{nn'}(p, t) = [\Gamma(2n+1)\Gamma(2n'+1)]^{-\frac{1}{2}} [p(1+t)]^{n+\frac{1}{2}} [p(1-t)]^{n'+\frac{1}{2}} \quad (3.8)$$

$$Q_{nn'}^q(p, t) = \int_{-1}^{\infty} \int_{-1}^1 (\mu\nu)^q (\mu+\nu)^n (\mu-\nu)^{n'} e^{-p\mu-p't\nu} d\mu d\nu \quad (3.9)$$

$$Q_{nn'}^q(p, t) = \sum_{m=0}^{n+n'} F_m(n, n') A_{n+n'+q-m}(p) B_{q+m}(pt) \quad (3.10)$$

$$g_{\alpha\beta}^q(l\lambda, l'\lambda) = g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda) F_q(\alpha + \lambda, \beta - \lambda) \quad (3.11)$$

$$g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda) = \left[\sum_{i=0}^{\lambda} (-1)^i F_i(\lambda) D_{\alpha+2\lambda-2i}^{l\lambda} \right] D_{\beta}^{l'\lambda} \quad (3.12)$$

3.12 Eşitliğinde

$$D_{\beta}^{l\lambda} = \frac{(-1)^{(l-\beta)/2}}{2^l} \left[\frac{2l+1}{2} \frac{F_l(l+\lambda)}{F_{\lambda}(l)} \right]^{1/2} F_{(l-\beta)/2}(l) F_{\beta-\lambda}(l+\beta) \quad (3.13)$$

olarak tanımlanır ve 3.13 Eşitliğinde

$$F_m(n, n') = \sum_k (-1)^k F_{m-k}(n) F_k(n') \quad (3.14)$$

olarak tanımlanır. Burada $k; \frac{1}{2}[(m-n) + |m-n|] \leq k \leq \min(m, n')$ aralığında olur. 3.14

Eşitliğinde $F_m(n) \equiv F_m(n, 0) = n! / (m!(n-m)!)$ ve $F_m(n, n')$ genelleştirilmiş binomial katsayısıdır. Genelleştirilmiş binomial katsayıları aşağıdaki ilişki ve simetri özelliklerine sahiptir;

$$F_m(n, n') = F_m(n-2, n') + 2F_{m-1}(n-2, n') + F_{m-2}(n-2, n') \quad (3.15)$$

$$F_m(n, n') = F_m(n-1, n'-1) - 2F_{m-2}(n-1, n'-1) \quad (3.16)$$

$$F_m(n, n') = F_m(n-1, n') - F_{m-1}(n-1, n') \quad (3.17)$$

$$F_m(n, n') = F_m(n, n'-1) - F_{m-1}(n, n'-1) \quad (3.18)$$

ve

$$F_m(n, n') = (-1)^m F_m(n', n) \quad (3.19)$$

$i = 0, 1, \dots, n + n'$ durumları için;

$$F_i(n, n') = (-1)^{n'} F_{n+n'-i}(n, n') \quad (3.20)$$

3.10 Eşitliğinde yer alan A ve B yardımcı fonksiyonları ise

$$A_\sigma(p) = \int_1^\infty \mu^\sigma e^{-p\mu} d\mu \quad (3.21)$$

$$B_k(pt) = \int_{-1}^1 v^k e^{-pv} dv \quad (3.22)$$

Burada σ pozitif ve negatif tamsayı yada tamsayı olmayan değerler alır. k ise pozitif bir tam sayıdır. A ve B yardımcı fonksiyonları aşağıdaki bağıntılarla ilişkilidir;

$$A_\sigma(p) = \frac{1}{p} [\sigma A_{\sigma-1}(p) + e^{-p}] \quad (3.23)$$

$$B_k(pt) = \frac{1}{pt} [kB_{k-1}(pt) + (-1)^k e^{pt} - e^{-pt}] \quad , pt \neq 0 \quad (3.24)$$

$$B_k(0) = \frac{1}{k+1} [1 + (-1)^k] \quad , pt = 0 \quad (3.25)$$

σ sayısının tam sayı değerleri için A yardımcı fonksiyonu daha önceden hesaplanmış ve σ ve p ' nin tüm değerleri için hassas sonuçlar alınır. σ sayısının tam sayı olmayan durumları için p parametresinin küçük değerleri için eşitlik değeri hassas çıkmıştır (Guseinov ve Mamedov, 2002). σ ' nın tam sayı olmayan durumları için A yardımcı fonksiyonu aşağıdaki şekilde tanımlanır; (Grandshteyn ve Ryzhik, 1980)

$$A_\sigma(p) = p^{-\sigma-1} \Gamma(\sigma+1, p) \quad (3.26)$$

Burada

$$\Gamma(\sigma, p) = \int_p^\infty t^{\sigma-1} e^{-t} dt \quad (3.27)$$

olarak tanımlanır.

3.2. Geri Çağırma Fonksiyonları

Yukarıda verilen örtme integralini hızlı bir şekilde hesaplanması için her bir kuantum sayılarının verilen değerlerinde formüllerde ortaya çıkan katsayılar bir kere hesaplanarak bilgisayar hafızasına kaydedilir ve aşağıda verilen geri çağırma formüllerine göre hafızadan geri çağırılır.

$$\begin{aligned}
P_{l\lambda} &= \left(\frac{1+\mu\nu}{\mu+\nu} \right) P_{l'\lambda} \left(\frac{1-\mu\nu}{\mu-\nu} \right) = \\
&= \sum_{\alpha=-\lambda+\gamma^{l\lambda}}^l \binom{(2)}{(2)} \sum_{\beta=\lambda+\gamma^{l'\lambda}}^{l'} \sum_{q=0}^{\alpha+\beta} g_{\alpha\beta}^q(l\lambda, l'\lambda) \frac{(\mu\nu)^q}{(\mu+\nu)^\alpha (\mu-\nu)^\beta}
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Burada $P_{l\lambda}$ normalize edilmiş bağıl Legendre Polinomlarıdır (Abramowitz, 1972). 3.28 Eşitliğinde $g_{\alpha\beta}^q(l\lambda, l'\lambda)$ katsayısı aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$g_{\alpha\beta}^q(l\lambda, l'\lambda) = g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda) F_q(\alpha + \lambda, \beta - \lambda) \tag{3.29}$$

$$\gamma^A = \begin{cases} 0 & l + \lambda & \text{\textit{\textit{çift}}} \\ 1 & l + \lambda & \text{\textit{\textit{tek}}} \end{cases} \tag{3.30}$$

Çok merkezli örtme integrali hesabı için $g_{\alpha\beta}^0$ ve genelleştirilmiş F_q binomial katsayıları indislerin değişmesine göre bilgisayar hafızasına yazılma tablosu aşağıdaki gibi verilmiştir (Guseinov, 1995).

Tablo 3.1. $g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda)$ yardımcı fonksiyonu için hafızaya yazılma şeması (Guseinov ve Mamedov, 2004)

λ	l	l'	α	β	$\Gamma_{l\lambda, l'\lambda}^L$	$\Gamma_{l\lambda, l'\lambda}^{L\alpha\beta}$	λ	l	l'	α	β	$\Gamma_{l\lambda, l'\lambda}^L$	$\Gamma_{l\lambda, l'\lambda}^{L\alpha\beta}$
0	0	0	0	0	1	1			3	1	1	16	1
		1	0	1	2	1				1	3		2
		2	0	0	3	1				3	1		3
			0	2		2				3	3		4
		3	0	1	4	1	1	1	1	-1	1	17	1
			0	3		2				1	1		2
	1	0	1	0	5	1			2	-1	2	18	1
		1	1	1	6	1				1	2		2
		2	1	0	7	1			3	-1	1	19	1
			1	2		2				-1	3		2
		3	1	1	8	1				1	1		3
			1	3		2				1	3		4
	2	0	0	0	9	1		2	1	0	1	20	1
			2	0		2				2	1		2
		1	0	1	10	1			2	0	2	21	1
			2	1		2				2	2		2
		2	0	0	11	1			3	0	1	22	1
			0	2		2				0	3		2
			2	0		3				2	1		3
			2	2		4				2	3		4
		3	0	1	12	1		3	1	-1	1	23	1
			0	3		2				1	1		2
			2	1		3				3	1		3
			2	3		4			2	-1	2	24	1
	3	0	1	0	13	1				1	2		2
			3	0		2				3	2		3
		1	1	1	14	1			3	-1	1	25	1
			3	1		2				-1	3		2
		2	1	0	15	1				1	1		3
			1	2		2				1	3		4
			3	0		3				3	1		5
			3	2		4				3	3		6

Örtme integrali formülünden görüldüğü gibi $g_{\alpha\beta}^0$ ve F_q katsayıları aynı indislerin aldığı değerlerde tekraren hesaplanmaktadır. Aşağıda bu durumun önüne geçmek için indislerin aldığı değerlerde bu katsayılar bir kere hesaplanarak bilgisayar hafızasına yazma ve gerektiğinde hafızadan geri çağırma formülleri aşağıdaki gibi verilmiştir (Guseinov ve Mamedov, 2004).

$$F_0(n, n') = 1 \quad (3.31)$$

$$F_{n+n'}(n, n') = (-1)^{n'} \quad (3.32)$$

$$F_q(n, n') = 0 \quad q \text{ tek için} \quad (3.33)$$

$$F_q(n, n') = (-1)^n F_q(n, n') \quad (3.34)$$

$$F_q(n, n') = (-1)^{n'} F_{n+n'-q}(n, n') \quad (3.35)$$

$g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda)$ için indisler sıfır olmamalıdır. Aşağıda indislerin alabileceği değerler aralığı verilmiştir.

$$0 \leq \lambda \leq L \quad (3.36)$$

$$\lambda \leq l \leq L \quad (3.37)$$

$$\lambda \leq l' \leq L \quad (3.38)$$

$$-\lambda + \gamma^\lambda \leq \alpha \leq l \quad (3.39)$$

$$\lambda + \gamma^\lambda \leq \beta \leq l' \quad (3.40)$$

$F_q(n, n')$ için

$$n = 2, 3, 4, \dots \quad (3.41)$$

$$2 \leq n' \leq n \quad (3.42)$$

$$2 \leq q(2) \leq n - \gamma^{n_0} \quad n = n' \text{ için} \quad (3.43)$$

$$2 \leq q(1) \leq (n + n' - \gamma^{nn'}) / 2 \quad n \neq n' \text{ için} \quad (3.44)$$

$$0 \leq q \leq 2L \quad (3.45)$$

Burada $L = l_{\max} = l'_{\max}$ ' dir.

Sırasıyla 3.36-40 ve 3.41-45 eşitlikleriyle indislerin sıfırdan farklı değerleri için $g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda)$ ve $F_q(n, n')$ katsayılarının bilgisayar hafızasına yazma tablosu verilmiştir.

Tablo 3.2. $F_q(n, n')$ yardımcı fonksiyonunun hafızaya yazma şeması (Guseinov, Mamedov, 2004).

n	n'	q	$F_{nm'}^L$	$F_{nm'}^{Lq}$	n	n'	q	$F_{nm'}^L$	$F_{nm'}^{Lq}$
2	2	2	1	1			4		2
3	2	2	2	1	6	2	2	11	1
	3	2	3	1			3		2
4	2	2	4	1			4		3
		3		2		3	2	12	1
	3	2	5	1			3		2
		3		2			4		3
	4	2	6	1		4	2	13	1
		4					3		2
5	2	2	7	1			4		3
		3		2			5		4
	3	2	8	1		5	2	14	1
		3		2			3		2
		4		2			4		3
	4	2	9	1			5		4
		3		2		6	2	15	1
		4		3			4		2
	5	2	10	1			6		3

$g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda)$ katsayılarının hesaplama sonuçlarını indislerinin aldığı değerlere göre bilgisayar hafızasından geri çağırmak için aşağıdaki formül oluşturulmuştur.

$$\Gamma_{l\lambda, l'\lambda}^L = \frac{1}{6} \lambda(\lambda-1)(2\lambda-1) + (L-\lambda+1)(\lambda L+l) + \lambda L+l'+1 \quad (3.46)$$

$$F_{nm'}^L = \frac{1}{2} n(n-3) + n' \quad (3.47)$$

$g_{\alpha\beta}^q(l\lambda, l'\lambda)$ katsayılarının hesaplama sonuçlarını indislerinin aldığı değerlere göre bilgisayar hafızasından geri çağırmak için aşağıdaki formül oluşturulmuştur.

$$\Gamma_{l\lambda, l'\lambda}^{L, \alpha\beta} = \sum_{i=-\lambda+\gamma'^{\lambda}}^{\alpha-2} {}^{(2)}b_{l'\lambda}^{ll'} + b_{l'\lambda}^{\alpha\beta-2} - \sum_{i=1}^{n-1} (\alpha_i + \beta_i) + 1 \quad (3.48)$$

$$F_{mn'}^{Lq} = \begin{cases} q/2 & n = n' \text{ için} \\ q-1 & n \neq n' \text{ için} \end{cases} \quad (3.49)$$

Burada $b_{l'\lambda}^{ik}$ katsayısı aşağıdaki formüle göre hesaplanır.

$$b_{l'\lambda}^{ik} = \sum_{j=\lambda+\gamma'^{\lambda}}^k {}^{(2)}(i+j+1) \quad (3.50)$$

Yukarıdaki çağırma formüllerini kullanarak $g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda)$ ve $F_q(n, n')$ yardımcı fonksiyonlara göre örtme integralinin hesaplama sonuçlarını hassas ve zaman açısından hızlı bir şekilde bulabiliriz. Örnek olarak Tablo 3.1. ve Tablo 3.2.' de görülen değerler bu yardımcı fonksiyonların çözümünün sadece bir kısmıdır.

4. BULGULAR

Bilindiği gibi HFR yaklaşımı kullanılarak çok elektronlu atom ve moleküllerin fiziksel ve kimyasal özelliklerini hesaplamak için Fock matrisinde ortaya çıkan çok merkezli integrallerin hızlı ve hassas hesaplanması çok önemlidir. Bu çalışmada HFR denkleminde ortaya çıkan moleküler integrallerden örtme integralinin STO bazında oluşturulan formüllere göre hızlı ve hassas hesaplama yöntemleri incelenmiştir. Bu yöntemlerden biriside bilgisayarın hafızasını kullanarak moleküler integrallerin formüllerinde ortaya çıkan katsayıları bir kere hesaplayarak hard disk de hafızaya yazmaktır. Ortaya çıkan katsayıların sonuçlarının hard disk deki değerleri hafızaya yazılan yerinden geri çağırma formülleri kullanılarak moleküllerin hesaplanmasında ortaya çıkan örtme integrali hızlı bir şekilde hesaplanır. Örtme integralinin hesaplanması için 3.14 Eşitliğinde ortaya çıkan $F_m(n) \equiv F_m(n, 0) = n! / (m!(n-m)!)$ binomial katsayılarının hafızaya yazma algoritması aşağıdaki gibi verilmiştir.

1. *Function BinomialFmn(m As Double, n As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double*
3. *sonuc = Faktoriyel(n) / (Faktoriyel(m) * Faktoriyel(n - m))*
4. *Return sonuc*
5. *End Function*

Fonksiyon 4.1. $F_m(n)$ Binomial katsayısının hesaplanma algoritması.

1. *Private Sub Button1_Click_1(sender As System.Object, e As System.EventArgs) Handles Button1.Click*
2. *DataGridView2.Rows.Clear()*
3. *Dim n As Integer*
4. *Dim m As Integer*
5. *Dim sonuc As Double = 0*
6. *Dim sayac As New Stopwatch()*
7. *For n = 2 To Int(Txtn.Text)*
8. *For m = 0 To n*
9. *sonuc = 0*
10. *sayac.Start()*
11. *sonuc = BinomialFmn(m, n)*
12. *sayac.Stop()*

13. *Dim ts As TimeSpan = sayac.Elapsed*
14. *Dim elapsedTime As String = ts.Milliseconds*
15. *Dim row As String() = New String() {m, n, sonuc, elapsedTime}*
16. *DataGridView2.Rows.Add(row)*
17. *Next*
18. *Next*
19. *End Sub*

Fonksiyon 4.2. $F_m(n)$ binomial katsayılarının hafızadan geri çağırma ara programı.

Yukarıda gösterilen Fonksiyonlar Visual Studio programı kullanılarak oluşturulmuştur. Programların çalışabilmesi için Visual Studio programında bir adet DataGridView, bir adet TextBox ve bir adet Button eklenmiştir. Button'un Click olayına Fonksiyon 2 yazılmıştır.

Fonksiyon 4.1. içerisinde çağırılan Faktoriyel() fonksiyonu ise aşağıda verilmiştir.

1. *Function Faktoriyel(sayi As Integer) As Double*
2. *Dim sonuc As Double = 1*
3. *Dim n As Integer*
4. *For n = 1 To sayi*
5. *sonuc = sonuc * n*
6. *Next*
7. *Return sonuc*
8. *End Function*

Fonksiyon 4.3. Tam sayılar için Faktöriyel hesabı yapan ara program.

Yukarıda verilen fonksiyonlar ve program kullanılarak yapılan hesaplamada aşağıdaki sonuçlara ulaşılmıştır.

Tablo 4.1. $F_m(n)$ Binomial katsayısı hesaplaması.

Normal Hesaplama				Ram Kullanarak Hesaplama			
m	N	Sonuç	Süre (ms)	m	N	Sonuç	Süre (ms)
0	2	1	0	0	2	1	0
1	2	2	0	1	2	2	0
2	2	1	0	2	2	1	0
0	3	1	0	0	3	1	0
1	3	3	0	1	3	3	0
2	3	3	0	2	3	3	0
3	3	1	0	3	3	1	0
0	4	1	0	0	4	1	0
1	4	4	0	1	4	4	0
2	4	6	0	2	4	6	0
3	4	4	0	3	4	4	0
4	4	1	0	4	4	1	0
0	5	1	0	0	5	1	0
1	5	5	0	1	5	5	0
2	5	10	0	2	5	10	0
3	5	10	0	3	5	10	0
4	5	5	0	4	5	5	0
5	5	1	0	5	5	1	0
0	6	1	0	0	6	1	0
1	6	6	0	1	6	6	0
2	6	15	0	2	6	15	0
3	6	20	0	3	6	20	0
4	6	15	0	4	6	15	0
5	6	6	0	5	6	6	0
6	6	1	0	6	6	1	0
0	7	1	0	0	7	1	0
1	7	7	0	1	7	7	0
2	7	21	0	2	7	21	0
3	7	35	0	3	7	35	0
4	7	35	0	4	7	35	0
5	7	21	0	5	7	21	0
6	7	7	0	6	7	7	0
7	7	1	0	7	7	1	0
0	8	1	0	0	8	1	0

Tablo 4.1.' in devamı

1	8	8	0	1	8	8	0
2	8	28	0	2	8	28	0
3	8	56	0	3	8	56	0
4	8	70	0	4	8	70	0
5	8	56	0	5	8	56	0
6	8	28	0	6	8	28	0
7	8	8	0	7	8	8	0
8	8	1	0	8	8	1	0
0	9	1	0	0	9	1	0
1	9	9	0	1	9	9	0
2	9	36	0	2	9	36	0
3	9	84	0	3	9	84	0
4	9	126	0	4	9	126	0
5	9	126	0	5	9	126	0
6	9	84	0	6	9	84	0
7	9	36	0	7	9	36	0
8	9	9	0	8	9	9	0
9	9	1	0	9	9	1	0
0	10	1	0	0	10	1	0
1	10	10	0	1	10	10	0
2	10	45	0	2	10	45	0
3	10	120	0	3	10	120	0
4	10	210	0	4	10	210	0
5	10	252	0	5	10	252	0
6	10	210	0	6	10	210	0
7	10	120	0	7	10	120	0
8	10	45	0	8	10	45	0
9	10	10	0	9	10	10	0
10	10	1	0	10	10	1	0

Tablo 4.1' den görüldüğü üzere hesaplama süresinde değişiklik olmamaktadır. Ancak m değerinin artırılmasıyla bu değişiklik görülebilir. Ayrıca 3.14 Eşitliğinin çözümünde çok kez tekrarlanan $F_m(n)$ Binomial katsayılarının her defada yeniden hesaplanması 3.14 Eşitliğinin çözüm süresinde önemli zaman almaktadır. Bu sebeple 3.14 Eşitliğinin çözümü için bilgisayar hafızasında [100x100x100] boyutunda bir matris

oluşturularak farklı değerler için yapılan her hesaplama matris içerisine yazılıp daha sonra aynı değerler için tekrar hesaplama yapmadan daha önceden yapılmış hesaplama kullanılarak Örtme integrali hesabında kullanılmıştır.

3.14 Eşitliğinin hesaplamasında kullanılan Fonksiyon ve bu fonksiyonu kullanan, daha önceden yapılan hesapları yeniden hesaplama yapmadan işleme alan program aşağıdaki şekilde oluşturulmuştur.

1. *Function BinomialFmnnu(m As Double, n As Double, nu As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double*
3. *Dim k As Integer*
4. *Dim kbaslangic, kbitis As Double*
5. *kbaslangic = (1 / 2) * ((m - n) + Math.Abs(m - n))*
6. *kbitis = Math.Min(m, nu)*
7. *For k = kbaslangic To kbitis*
8. *sonuc = sonuc + (Math.Pow(-1, k)) * BinomialFmn(m - k, n) * BinomialFmn(k, nu)*
9. *Next*
10. *Return sonuc*
11. *End Function*

Fonksiyon 4.4. $F_m(n, n')$ Binomial katsayısını hesaplama ara programı.

1. *Private Sub Button6_Click(sender As System.Object, e As System.EventArgs) Handles Button6.Click*
2. *DataGridView1.Rows.Clear()*
3. *Dim n As Integer*
4. *Dim nu As Integer*
5. *Dim m As Integer*
6. *Dim sonuc As Double = 0*
7. *Dim sayac As New Stopwatch()*
8. *Dim FmnnuSonuc(100, 100, 100) As Double*
9. *For n = 2 To Int(Txt1.Text)*
10. *For nu = 2 To n*
11. *For m = 0 To n + nu*
12. *sonuc = 0*
13. *sayac.Start()*
14. *If FmnnuSonuc(m, n, nu) = 0 Then*
15. *sonuc = BinomialFmnnu(m, n, nu)*
16. *FmnnuSonuc(m, n, nu) = sonuc*
17. *End If*
18. *sayac.Stop()*

```
19. Dim ts As TimeSpan = sayac.Elapsed
20. Dim elapsedTime As String = ts.Milliseconds
21. Dim row As String() = New String() {m, n, nu, FmnuSonuc(m, n, nu),
    elapsedTime}
22. DataGridView1.Rows.Add(row)
23. Next
24. Next
25. Next
26. End Sub
```

Fonksiyon 4.5. $F_m(n, n')$ genelleşmiş binomial katsayılarının hesaplanmasında kullanılan Fonksiyonu çağırıp, daha önce hesaplanmamışsa yeniden hesaplayan ve hesaplanan sonucu tabloya yazan ara program.

Fonksiyon 4.4 ve Fonksiyon 4.5 kullanılarak hesaplanan 3.14 Eşitliğinin değerleri, sonucu ve hesaplamak için geçen süreler aşağıda verilmiştir.

Tablo 4.2. 3.14. Eşitliğin çözümü ve çözüm için harcanan süre.

Normal Hesaplama					Ram Kullanarak Hesaplama				
m	n	n'	Sonuç	Süre (ms)	m	n	n'	Sonuç	Süre (ms)
0	2	2	1	1	0	2	2	1	0
1	2	2	0	9	1	2	2	0	0
2	2	2	-2	21	2	2	2	-2	0
3	2	2	0	36	3	2	2	0	0
4	2	2	1	51	4	2	2	1	0
0	3	2	1	69	0	3	2	1	0
1	3	2	1	79	1	3	2	1	0
2	3	2	-2	92	2	3	2	-2	0
3	3	2	-2	106	3	3	2	-2	0
4	3	2	1	122	4	3	2	1	0
5	3	2	1	137	5	3	2	1	0
0	3	3	1	151	0	3	3	1	0
1	3	3	0	165	1	3	3	0	0
2	3	3	-3	180	2	3	3	-3	0
3	3	3	0	194	3	3	3	0	0
4	3	3	3	209	4	3	3	3	0
5	3	3	0	223	5	3	3	0	0
6	3	3	-1	237	6	3	3	-1	0
0	4	2	1	252	0	4	2	1	0
1	4	2	2	266	1	4	2	2	0
2	4	2	-1	281	2	4	2	-1	0
3	4	2	-4	295	3	4	2	-4	0
4	4	2	-1	310	4	4	2	-1	0
5	4	2	2	324	5	4	2	2	0
6	4	2	1	338	6	4	2	1	0
0	4	3	1	353	0	4	3	1	0
1	4	3	1	367	1	4	3	1	0
2	4	3	-3	381	2	4	3	-3	0
3	4	3	-3	396	3	4	3	-3	0
4	4	3	3	410	4	4	3	3	0
5	4	3	3	424	5	4	3	3	0
6	4	3	-1	439	6	4	3	-1	0
7	4	3	-1	453	7	4	3	-1	0
0	4	4	1	468	0	4	4	1	0
1	4	4	0	483	1	4	4	0	0
2	4	4	-4	497	2	4	4	-4	0
3	4	4	0	511	3	4	4	0	0
4	4	4	6	526	4	4	4	6	0

Tablo 4.2.' nin devamı

5	4	4	0	540	5	4	4	0	0
6	4	4	-4	555	6	4	4	-4	0
7	4	4	0	569	7	4	4	0	0
8	4	4	1	583	8	4	4	1	0
0	5	2	1	598	0	5	2	1	0
1	5	2	3	612	1	5	2	3	0
2	5	2	1	627	2	5	2	1	0
3	5	2	-5	641	3	5	2	-5	0
4	5	2	-5	658	4	5	2	-5	0
5	5	2	1	670	5	5	2	1	0
6	5	2	3	684	6	5	2	3	0
7	5	2	1	699	7	5	2	1	0
0	5	3	1	713	0	5	3	1	0
1	5	3	2	728	1	5	3	2	0
2	5	3	-2	742	2	5	3	-2	0
3	5	3	-6	756	3	5	3	-6	0
4	5	3	0	771	4	5	3	0	0
5	5	3	6	786	5	5	3	6	0
6	5	3	2	803	6	5	3	2	0
7	5	3	-2	814	7	5	3	-2	0
8	5	3	-1	829	8	5	3	-1	0
0	5	4	1	843	0	5	4	1	0
1	5	4	1	858	1	5	4	1	0
2	5	4	-4	872	2	5	4	-4	0
3	5	4	-4	886	3	5	4	-4	0
4	5	4	6	901	4	5	4	6	0
5	5	4	6	916	5	5	4	6	0
6	5	4	-4	930	6	5	4	-4	0
7	5	4	-4	944	7	5	4	-4	0
8	5	4	1	961	8	5	4	1	0
9	5	4	1	976	9	5	4	1	0
0	5	5	1	990	0	5	5	1	0
1	5	5	0	3	1	5	5	0	0
2	5	5	-5	18	2	5	5	-5	0
3	5	5	0	32	3	5	5	0	0
4	5	5	10	47	4	5	5	10	0
5	5	5	0	61	5	5	5	0	0
6	5	5	-10	76	6	5	5	-10	0
7	5	5	0	90	7	5	5	0	0

Tablo 4.2.' nin devamı

8	5	5	5	104	8	5	5	5	0
9	5	5	0	119	9	5	5	0	0
10	5	5	-1	133	10	5	5	-1	0

Tablo 4.2.' den görüldüğü gibi $m = 10$ değeri için yapılan hesaplamada toplam 34994 ms süre harcanırken oluşturulan fonksiyonlarla bu süre sıfıra indirilmiştir.

Örtme integrali hesabında kullanılan 3.11-13 Eşitliklerin de ortaya çıkan katsayılar için oluşturulan Fonksiyonlar ve bu fonksiyonları çağırmak için kullanılan programlar aşağıda verilmiştir.

1. *Function galphabetaq(alpha As Double, beta As Double, l As Double, lu As Double, lambda As Double, q As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double*
3. *sonuc = galphabeta0(alpha, beta, l, lu, lambda) * BinomialFmnnu(q, alpha + lambda, beta - lambda)*
4. *Return sonuc*
5. *End Function*

Fonksiyon 4.6. 3.11 Eşitliğinin çözümü için oluşturulan ara program.

1. *Function galphabeta0(alpha As Double, beta As Double, l As Double, lu As Double, lambda As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double = 0*
3. *Dim i As Integer*
4. *For i = 0 To lambda*
5. *sonuc = sonuc + (Math.Pow(-1, i) * BinomialFmn(i, lambda) * D(alpha + (2 * lambda) - (2 * i), l, lambda))*
6. *Next*
7. *sonuc = sonuc * D(beta, lu, lambda)*
8. *Return sonuc*
9. *End Function*

Fonksiyon 4.7. 3.12 Eşitliğinin çözümü için oluşturulan ara program.

1. *Function D(beta As Double, l As Double, lambda As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double*
3. *sonuc = (Math.Pow(-1, (l - beta) / 2) / Math.Pow(2, l)) * Math.Pow((((2 * l) + 1) / 2) * BinomialFmn(l, l + lambda) / BinomialFmn(lambda, l), (1 / 2)) * BinomialFmn((l - beta) / 2, l) * BinomialFmn((beta - lambda), (l + beta))*
4. *Return sonuc*
5. *End Function*

Fonksiyon 4.8. 3.13 Eşitliğinin çözümü için oluşturulan ara program.

1. *Private Sub Button2_Click_1(sender As System.Object, e As System.EventArgs) Handles Button2.Click*
2. *DataGridView3.Rows.Clear()*
3. *Dim lambda, l, lu, alpha, beta As Integer*
4. *Dim sonuc As Double = 0*
5. *Dim sayac As New Stopwatch()*
6. *For lambda = 0 To Int(Txtl.Text)*
7. *For l = lambda To Int(Txtl.Text)*
8. *For lu = lambda To Int(Txtl.Text)*
9. *For alpha = -lambda + GammalLambda(l, lambda) To l*
10. *For beta = lambda + GammalLambda(l, lambda) To lu*
11. *sonuc = 0*
12. *sayac.Start()*
13. *sonuc = galphabetaq(alpha, beta, l, lu, lambda, Txtq.Text)*
14. *sayac.Stop()*
15. *Dim ts As TimeSpan = sayac.Elapsed*
16. *Dim elapsedTime As String = ts.Milliseconds*
17. *Dim row As String() = New String() {lambda, l, lu, alpha, beta, Txtq.Text, sonuc, elapsedTime}*
18. *DataGridView3.Rows.Add(row)*
19. *Next*
20. *Next*
21. *Next*
22. *Next*
23. *Next*
24. *End Sub*

Fonksiyon 4.9. 3.11 Eşitliğinin hesabını yapan Fonksiyonu çağırıp, gerekli hesaplamaları yapan ve sonucu tabloya yazan ara program.

Fonksiyon 4.9' da kullanılan *GammalLambda()* Fonksiyonu ařağıdaki řekilde oluřturulmuřtur.

1. *Function GammalLambda(l As Double, Lambda As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double*
3. *sonuc = l + Lambda*
4. *If sonuc Mod (2) = 0 Then*
5. *Return 0*
6. *ElseIf sonuc Mod (2) <> 0 Then*
7. *Return 1*
8. *End If*
9. *End Function*

Fonksiyon 4.10. Fonksiyon 4.9 iin oluřturulan ve 3.30 Eřitlięi *GammalLambda()* ara programı.

Yukarıda verilen fonksiyonlar kullanılarak hesaplanan 3.11 Eřitlięinin sonucu, kullanılan deęiřkenler ve hesaplama iin harcanan sreler ařağıdaki tabloda verilmiřtir.

Tablo 4.3. 3.11 Eşitliğin hesaplaması ve hesaplamak için harcanan zaman.

Normal Hesaplama								Ram Kullanarak Hesaplama							
λ	l	l'	α	β	q	Sonuç	Süre (ms)	λ	l	l'	α	β	q	Sonuç	Süre (ms)
0	0	0	0	0	0	0,5	2	0	0	0	0	0	0	0,5	0
0	0	1	0	1	0	0,866025404	2	0	0	1	0	1	0	0,866025404	0
0	0	2	0	0	0	-0,55901699	2	0	0	2	0	0	0	-0,55901699	0
0	0	2	0	2	0	1,677050983	2	0	0	2	0	2	0	1,677050983	0
0	0	3	0	1	0	-1,98431348	2	0	0	3	0	1	0	-1,98431348	0
0	0	3	0	3	0	3,307189139	2	0	0	3	0	3	0	3,307189139	0
0	1	1	1	1	0	1,5	2	0	1	1	1	1	0	1,5	0
0	1	2	1	2	0	2,90473751	2	0	1	2	1	2	0	2,90473751	0
0	1	3	1	1	0	-3,43693177	2	0	1	3	1	1	0	-3,43693177	0
0	1	3	1	3	0	5,728219619	2	0	1	3	1	3	0	5,728219619	0
0	2	0	0	0	0	-0,55901699	2	0	2	0	0	0	0	-0,55901699	0
0	2	0	2	0	0	1,677050983	2	0	2	0	2	0	0	1,677050983	0
0	2	1	0	1	0	-0,96824584	2	0	2	1	0	1	0	-0,96824584	0
0	2	1	2	1	0	2,90473751	2	0	2	1	2	1	0	2,90473751	0
0	2	2	0	0	0	0,625	2	0	2	2	0	0	0	0,625	0
0	2	2	0	2	0	-1,875	2	0	2	2	0	2	0	-1,875	0
0	2	2	2	0	0	-1,875	2	0	2	2	2	0	0	-1,875	0
0	2	2	2	2	0	5,625	2	0	2	2	2	2	0	5,625	0
0	2	3	0	1	0	2,218529919	2	0	2	3	0	1	0	2,218529919	0
0	2	3	0	3	0	-3,69754986	3	0	2	3	0	3	0	-3,69754986	0
0	2	3	2	1	0	-6,65558976	3	0	2	3	2	1	0	-6,65558976	1
0	2	3	2	3	0	11,09264959	3	0	2	3	2	3	0	11,09264959	1
0	3	1	1	1	0	-3,43693177	3	0	3	1	1	1	0	-3,43693177	1
0	3	1	3	1	0	5,728219619	3	0	3	1	3	1	0	5,728219619	1
0	3	2	1	2	0	-6,65558976	3	0	3	2	1	2	0	-6,65558976	1
0	3	2	3	2	0	11,09264959	3	0	3	2	3	2	0	11,09264959	1
0	3	3	1	1	0	7,875	3	0	3	3	1	1	0	7,875	1
0	3	3	1	3	0	-13,125	3	0	3	3	1	3	0	-13,125	1
0	3	3	3	1	0	-13,125	3	0	3	3	3	1	0	-13,125	1
0	3	3	3	3	0	21,875	3	0	3	3	3	3	0	21,875	1
1	1	1	-1	1	0	1,125	3	1	1	1	-1	1	0	1,125	1
1	1	1	1	1	0	-3	3	1	1	1	1	1	0	-3	1
1	1	2	-1	2	0	2,515576475	3	1	1	2	-1	2	0	2,515576475	1
1	1	2	1	2	0	-6,70820393	3	1	1	2	1	2	0	-6,70820393	1
1	1	3	-1	1	0	-1,05234114	4	1	1	3	-1	1	0	-1,05234114	1
1	1	3	-1	3	0	5,2617057	4	1	1	3	-1	3	0	5,2617057	1
1	1	3	1	1	0	2,80624304	4	1	1	3	1	1	0	2,80624304	1
1	1	3	1	3	0	-14,0312152	4	1	1	3	1	3	0	-14,0312152	1

Tablo 4.3.'ün devamı

1	2	2	0	2	0	4,375	4	1	2	2	0	2	0	4,375	1
1	2	2	2	2	0	-10	4	1	2	2	2	2	0	-10	1
1	2	3	0	3	0	9,15096904	4	1	2	3	0	3	0	9,15096904	1
1	2	3	2	3	0	-20,9165007	4	1	2	3	2	3	0	-20,9165007	1
1	3	1	-1	1	0	-0,76002416	4	1	3	1	-1	1	0	-0,76002416	2
1	3	1	1	1	0	4,20936456	4	1	3	1	1	1	0	4,20936456	2
1	3	1	3	1	0	-7,60024157	4	1	3	1	3	1	0	-7,60024157	2
1	3	2	-1	2	0	-1,69946568	4	1	3	2	-1	2	0	-1,69946568	2
1	3	2	1	2	0	9,412425299	4	1	3	2	1	2	0	9,412425299	2
1	3	2	3	2	0	-16,9946568	4	1	3	2	3	2	0	-16,9946568	2
1	3	3	-1	1	0	0,7109375	4	1	3	3	-1	1	0	0,7109375	2
1	3	3	-1	3	0	-3,5546875	5	1	3	3	-1	3	0	-3,5546875	2
1	3	3	1	1	0	-3,9375	5	1	3	3	1	1	0	-3,9375	2
1	3	3	1	3	0	19,6875	5	1	3	3	1	3	0	19,6875	2
1	3	3	3	1	0	7,109375	5	1	3	3	3	1	0	7,109375	2
1	3	3	3	3	0	-35,546875	5	1	3	3	3	3	0	-35,546875	2
2	2	2	-2	2	0	1,2890625	5	2	2	2	-2	2	0	1,2890625	2
2	2	2	0	2	0	-6,71875	5	2	2	2	0	2	0	-6,71875	2
2	2	2	2	2	0	15,78125	5	2	2	2	2	2	0	15,78125	2
2	2	3	-2	3	0	3,410538799	5	2	2	3	-2	3	0	3,410538799	2
2	2	3	0	3	0	-17,7761416	5	2	2	3	0	3	0	-17,7761416	2
2	2	3	2	3	0	41,75326288	5	2	2	3	2	3	0	41,75326288	2
2	3	3	-1	3	0	7,9296875	5	2	3	3	-1	3	0	7,9296875	2
2	3	3	1	3	0	-29,09375	5	2	3	3	1	3	0	-29,09375	2
2	3	3	3	3	0	50,96875	6	2	3	3	3	3	0	50,96875	2
3	3	3	-3	3	0	1,450737847	6	3	3	3	-3	3	0	1,450737847	3
3	3	3	-1	3	0	-11,2747396	6	3	3	3	-1	3	0	-11,2747396	3
3	3	3	1	3	0	37,84375	6	3	3	3	1	3	0	37,84375	3
3	3	3	3	3	0	-66,9375	6	3	3	3	3	3	0	-66,9375	3

Tablo 4.3' te 3.11 Eşitliğinin hesaplanması $q = 0$ ve $l = 3$ değerleri kullanılarak yapılmıştır. Normal yöntemler kullanılarak yapılan hesaplamada Tablo 4.3' ten de görüldüğü üzere toplam 238 ms gibi bir süre kullanılmıştır. Ancak bu çalışmada oluşturulan Fonksiyonlar yardımıyla yapılan hesaplamada ise 76 ms süre kullanılmıştır. Görüldüğü gibi 3.11 Eşitliği için 0,319328 oranında bir süre kazanımı olmuştur. Yöntemimizdeki hesaplamalarda harcanan zaman sadece daha önceden yapılan

hesaplama sonuçlarını çağırmak ve daha önceden yapılmamış yeni hesaplamaları yapmak için harcadığı zamandır (CPU zamanı). Daha yüksek kapasiteli bir CPU ile çok daha kısa zamanda bu hesaplamalar yapılabilir.

Örtme integralinin hesaplanmasında kullanılan 3.10 Eşitliği için oluşturulan Fonksiyon ve bu fonksiyonu kullanarak sonuçları veren program aşağıda verilmiştir.

1. *Function Qnnu(n As Double, nu As Double, q As Double, p As Double, t As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double*
3. *Dim m As Integer = 0*
4. *For m = 0 To n + nu*
5. *sonuc = sonuc + (BinomialFmnnu(m, n, nu) * A(n + nu + q - m, p) * B(q + m, p * t))*
6. *Next*
7. *Return sonuc*
8. *End Function*

Fonksiyon 4.11. 3.10 Eşitliğinin hesaplanması için oluşturulan ara program.

1. Private Sub Button4_Click_1(sender As System.Object, e As System.EventArgs) Handles Button4.Click
2. DataGridView5.Rows.Clear()
3. Dim sonuc As Double = 0
4. Dim sayac As New Stopwatch()
5. sayac.Start()
6. sonuc = Qnnu(Txtn.Text, Txtnu.Text, Txtq.Text, Txtp.Text, Txtt.Text)
7. sayac.Stop()
8. Dim ts As TimeSpan = sayac.Elapsed
9. Dim elapsedTime As String = ts.Milliseconds
10. Dim row As String() = New String() {Txtn.Text, Txtnu.Text, Txtp.Text, Txtt.Text, Txtq.Text, sonuc, elapsedTime}
11. DataGridView5.Rows.Add(row)
12. End Sub

Fonksiyon 4.12. 3.10 Eşitliğinin hesaplanması için gerekli Fonksiyonu çağıran ve sonucu tabloya yazan ara program.

3.10 Eşitliğinin hesaplanmasında kullanılan 3.23-25 Eşitliklerinin hesaplanması için oluşturulan fonksiyonlar aşağıda tanımlanmıştır.

1. *Function A(n As Double, alpha As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double*
3. *Dim k As Integer = 0*
4. *If Fix(n) = n Then*
5. *sonuc = (Faktoriyel(n) * Math.Exp(-alpha)) / Math.Pow(alpha, (n + 1))*
6. *For k = 0 To n*
7. *sonuc = sonuc + (Math.Pow(alpha, k) / Faktoriyel(k))*
8. *Next*
9. *End If*
10. *Return sonuc*
11. *End Function*

Fonksiyon 4.13. 3.23 Eşitliğinin hesaplanması için oluşturulan ara program.

1. *Function B(n As Double, beta As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double*
3. *If n > 0 Then*
4. *sonuc = (Math.Pow(-1, (n + 1)) * A(n, -beta)) - A(n, beta)*
5. *Else*
6. *sonuc = (1 / (n + 1)) * (1 + Math.Pow(-1, n))*
7. *End If*
8. *Return sonuc*
9. *End Function*

Fonksiyon 4.14. 3.24 ve 3.25 Eşitliklerinin hesaplanması için oluşturulan ara program.

Örtme integrali hesabında kullanılan 3.8 Eşitliği için oluşturulan Fonksiyon ve bu fonksiyonu hesaplamak, sonucunu tabloya yazmak için gerekli program aşağıda verilmiştir.

1. *Function Nnnu(n As Double, nu As Double, p As Double, t As Double) As Double*
2. *Dim sonuc As Double*

3. $sonuc = Math.Pow(InGamma((2 * n) + 1, 0) * InGamma((2 * nu) + 1, 0), (-1 / 2)) * Math.Pow((p * (1 + t)), (n + (1 / 2))) * Math.Pow((p * (1 - t)), (nu + (1 / 2)))$
4. *Return sonuc*
5. *End Function*

Fonksiyon 4.15. 3.8 Eşitliğinin hesaplanması için oluşturulan ara program.

1. *Private Sub Button5_Click(sender As System.Object, e As System.EventArgs) Handles Button5.Click*
2. *DataGridView6.Rows.Clear()*
3. *Dim sonuc As Double = 0*
4. *Dim sayac As New Stopwatch()*
5. *sayac.Start()*
6. *sonuc = Nnnu(Txtn.Text, Txtnu.Text, Tntp.Text, Txtt.Text)*
7. *sayac.Stop()*
8. *Dim ts As TimeSpan = sayac.Elapsed*
9. *Dim elapsedTime As String = ts.Milliseconds*
10. *Dim row As String() = New String() {Txtn.Text, Txtnu.Text, Tntp.Text, Txtt.Text, sonuc, elapsedTime}*
11. *DataGridView6.Rows.Add(row)*
12. *End Sub*

Fonksiyon 4.16. 3.8 Eşitliğinin hesabını yaptırmak ve sonucunu tabloya yazmak için gerekli ara program.

3.8 Eşitliğinin hesaplamasında gerekli olan ve Fonksiyon 4.15' te *InGamma()* ile çağırılan 3.27 Eşitliğinin hesaplanması aşağıdaki program ile oluşturulmuştur.

1. *Function InGamma(alpha As Double, x As Double) As Double*
2. *Dim n As Integer = 0*
3. *Dim sonuc As Double*
4. *If alpha = 1 Then*
5. *sonuc = Math.Exp(-x)*
6. *Return sonuc*
7. *Exit Function*
8. *End If*
9. *If Fix(alpha) = alpha Then 'alpha tam sayı*
10. *If x = 0 Then 'Gamma Fonksiyonu Hesabı*
11. *sonuc = Faktoriyel(alpha - 1)*
12. *Return sonuc*
13. *Exit Function*
14. *Else*

```

15. sonuc = Math.Pow(x, alpha - 1) * Math.Exp(-x)
16. Dim sonuc2 As Double = 0
17. For n = 0 To 100
18. sonuc2 = sonuc2 + (Math.Pow(-1, n) * (1 / Math.Pow(x, n)) * (Faktoriyel(n -
    alpha) / Faktoriyel(-alpha)))
19. Next
20. sonuc = sonuc * sonuc2
21. End If
22. Else
23. If x = 0 Then 'Gamma Fonksiyonu Hesabı
24. Dim gamma As Double = 0.577266
25. Dim sonuc2 As Double = 1
26. Dim k As Integer
27. sonuc = (Math.Exp(-gamma * alpha) / alpha)
28. For k = 1 To 100000
29. sonuc2 = sonuc2 * (Math.Exp(alpha / k) * (Math.Pow(1 + (alpha / k), -1)))
30. Next
31. sonuc = sonuc * sonuc2
32. Return sonuc
33. Exit Function
34. End If
35. End If
36. Return sonuc
37. End Function

```

Fonksiyon 4.17. 3.27 Eşitliğinin hesaplanması için oluşturulan ara program.

3.7 Eşitliğiyle gösterilen Örtme integralinin hesaplanması için ve bu Fonksiyonun sonucunu tabloya yazmak için oluşturulan program aşağıda gösterilmiştir.

```

1. Function Overlap(n As Double, l As Double, lambda As Double, nu As Double,
    lu As Double, p As Double, t As Double) As Double
2. Dim sonuc As Double
3. Dim sonuc2 As Double = 0
4. sonuc = Nnu(n, nu, p, t)
5. Dim alpha, beta, q As Double
6. For alpha = -lambda To l Step 2
7. For beta = lambda To lu Step 2
8. For q = 0 To alpha + beta
9. sonuc2 = sonuc2 + (galphabetaq(alpha, beta, l, lu, lambda, q) * Qnu(n -
    alpha, nu - beta, q, p, t))
10. Next
11. Next
12. Next

```

13. *sonuc = sonuc * sonuc2*
14. *Return sonuc*
15. *End Function*

Fonksiyon 4.18. 3.7 Örtme integrali Eşitliğinin hesabını yapan ara program.

1. *Private Sub Button8_Click(sender As System.Object, e As System.EventArgs) Handles Button8.Click*
2. *DataGridView7.Rows.Clear()*
3. *Dim sonuc As Double = 0*
4. *Dim sayac As New Stopwatch()*
5. *sayac.Start()*
6. *sonuc = Overlap(Txtn.Text, Txtl.Text, Txtlambda.Text, Txtnu.Text, Txtlu.Text, Txtp.Text, Txtt.Text)*
7. *sayac.Stop()*
8. *Dim ts As TimeSpan = sayac.Elapsed*
9. *Dim elapsedTime As String = ts.Milliseconds*
10. *Dim row As String() = New String() {Txtn.Text, Txtnu.Text, Txtl.Text, Txtlu.Text, Txtlambda.Text, Txtp.Text, Txtt.Text, sonuc, elapsedTime}*
11. *DataGridView7.Rows.Add(row)*
12. *End Sub*

Fonksiyon 4.19. 3.7 Örtme integrali Eşitliğinin hesabını yapan Fonksiyonu çağırıp sonucu tabloya yazan ara program.

Çok merkezli moleküler integrallerin hesaplanmasında kullanılan yardımcı fonksiyonlar bilgisayar hafızası kullanarak hesaplanmıştır. Örtme integrali için alınan hesaplama sonuçları ve hesaplamak için geçen zaman aşağıdaki tabloda gösterilmiştir. Tablodan görüldüğü gibi Literatürde kullanılan hesaplama yöntemi ile bilgisayar hafızasından çağırılarak yapılan hesaplamada süre kazanımı olmuştur.

Tablo 4.4. (Ref. Guseinov, I.I., Mamedov, B, 2000) Örtme integralinin hesaplama sonuçlarının karşılaştırılması.

n	l	m	n'	l'	m'	p	t	θ	ϕ	Literatürdeki Hesaplama		Ram Kullanarak Hesaplama	
										Sonuç	Süre (ms)	Sonuç	Süre (ms)
4	3	2	3	2	1	1,5	0,5	120	90	$687153968850948 \times 10^{-11}$	0,01	$687153968850948 \times 10^{-11}$	0,006
5	4	3	5	3	-2	30	0,3	150	35	$-3,76528714570421 \times 10^{-6}$	2,0	$-3,76528714570421 \times 10^{-6}$	1,13
6	5	1	6	5	1	50	0,8	150	270	$-4,52554470357060 \times 10^{-6}$	6,0	$-4,52554470357060 \times 10^{-6}$	2,98
10	9	8	12	10	8	20	0,4	30	360	$1,50981944685389 \times 10^{-3}$	7,85	$1,50981944685389 \times 10^{-3}$	3,25
12	10	9	12	10	8	20	0,7	45	0	$-4,97337842055340 \times 10^{-6}$	10,98	$-4,97337842055340 \times 10^{-6}$	6,21
13	6	4	12	5	4	60	0,7	15	0	$2,58664616427115 \times 10^{-6}$	0,65	$2,58664616427115 \times 10^{-6}$	0,40
14	3	2	14	6	2	200	0,9	7,5	0	$1,31943525439935 \times 10^{-5}$	0,16	$1,31943525439935 \times 10^{-5}$	0,98
14	13	12	14	13	12	70	0,5	135	0	$-2,18765647986679 \times 10^{-5}$	10,86	$-2,18765647986679 \times 10^{-5}$	4,82
16	12	6	17	12	6	10	0,6	120	0	$-2,20845885527976 \times 10^{-5}$	9,72	$-2,20845885527976 \times 10^{-5}$	6,11
20	10	8	20	10	8	35	0,2	0	45	$2,41391679719113 \times 10^{-2}$	21,35	$2,41391679719113 \times 10^{-2}$	12,64
22	12	6	18	10	6	50	0,4	0	180	$-1,28993134351658 \times 10^{-3}$	18,5	$-1,28993134351658 \times 10^{-3}$	10,7
24	8	5	20	7	5	60	0,4	0	240	$-7,03048781165857 \times 10^{-4}$	5,74	$-7,03048781165857 \times 10^{-4}$	2,83
15	10	10	15	10	10	40	0,6	45	210	$5,47546324620556 \times 10^{-7}$	19,5	$5,47546324620556 \times 10^{-7}$	11,32
26	9	8	15	10	8	10	0,8	0	150	$-5,39739018697043 \times 10^{-5}$	38	$-5,39739018697043 \times 10^{-5}$	20,05
26	12	-6	20	10	-6	22	0,9	0	270	$1,34710397904560 \times 10^{-13}$	40	$1,34710397904560 \times 10^{-13}$	22,94
32	6	4	20	5	4	34	0,7	0	300	$4,44505406036585 \times 10^{-4}$	16	$4,44505406036585 \times 10^{-4}$	7,72
34	8	5	27	7	5	30	0,6	0	180	$4,47327103267062 \times 10^{-4}$	43	$4,47327103267062 \times 10^{-4}$	25,44
34	12	10	27	10	10	12	0,5	0	180	$7,98319684824242 \times 10^{-2}$	55,5	$7,98319684824242 \times 10^{-2}$	30,81
38	10	8	30	10	8	20	0,7	0	0	$1,36385965917645 \times 10^{-6}$	58,6	$1,36385965917645 \times 10^{-6}$	30,99
40	8	7	30	7	7	30	0,9	0	0	$-4,70039545616601 \times 10^{-17}$	40	$-4,70039545616601 \times 10^{-17}$	21,54
42	6	6	30	7	7	30	0,9	0	0	$1,54941633286238 \times 10^{-2}$	32	$1,54941633286238 \times 10^{-2}$	15,88
48	7	2	28	6	2	29	0,6	45	30	$3,43880694721407 \times 10^{-3}$	43	$3,43880694721407 \times 10^{-3}$	24,68
50	5	2	50	5	2	20	0,6	180	90	$-5,64314946989160 \times 10^{-6}$	32	$-5,64314946989160 \times 10^{-6}$	17,23

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Çok elektronlu atom ve moleküllerin yapıları incelenirken karşımıza çok sayıda moleküler integral çıkmaktadır. Bu integralleri çözebilmek için yaklaşık yöntemler geliştirilmiştir. Bu yöntemlerden en yaygın olanı HFR yöntemidir. Bu yöntemin uygulanması sırasında çok merkezli moleküler integraller ortaya çıkmaktadır. Çok merkezli moleküler integralleri hızlı ve hassas çözebilirsek moleküler sistemlerin fiziksel ve kimyasal özelliklerini inceleyebiliriz.

Atom ve moleküllerin elektronik yapılarının belirlenmesinde kullanılan HFR teorisi, Schrödinger denkleminin yaklaşık çözümü için, en yaygın kullanılan yaklaşık yöntemden biridir. HFR denklemi çözülerek sistemin fiziksel özelliklerinin hesaplanabilmesi için, Slater tipi atom orbitalleri önemli rol oynamaktadır. Bu yaklaşımda, ortaya çıkan çok merkezli moleküler integraller için oluşturulan formüller iki merkezli örtme integrali ile ifade edilmektedir. Bu nedenle STO bazında örtme integrallerinin hızlı ve hassas hesaplanması çok önemlidir.

Bu çalışmada Örtme integralinin hesaplanması için oluşturulan 3.14 Eşitliğinin içerdiği yardımcı fonksiyonların hızlı hesaplanması için yeni bir algoritma önerilmiştir. Yapılan çalışmada örtme integrali formülündeki $g_{\alpha\beta}^0(l\lambda, l'\lambda)$, $g_{\alpha\beta}^q(l\lambda, l'\lambda)$, $F_m(n, n')$ ve $F_m(n, n')$ katsayılarının indislerinin aldığı değerlerde bir kere hesaplanarak bilgisayar hafızasına yazılır. Bu da çok merkezli moleküler integrallerin hesaplanmasında önemli rol oynayan Örtme integralinin hızlı ve hassas hesaplanmasına olanak sağlar.

Tablo 4.1' den görüldüğü üzere hesaplama süresinde değişiklik olmamaktadır. Ancak m 'nin büyük değerlerinde katsayıların hesaplama süresinde değişiklik görülür. 3.14 Eşitliğinde ortaya çıkan $F_m(n)$ Binomial katsayıları indislerin aynı değerlerinde tekraren hesaplanması 3.14 Eşitliğine göre örtme integralinin hesaplanma süresini önemli ölçüde arttırmaktadır. Hesaplama zamanı en aza indirmek için bilgisayar hafızasında [100x100x100] boyutunda bir matris oluşturduk. İndislerin farklı değerler için yapılan her hesaplama matris içerisine yazılarak ve daha sonra aynı değerler için

tekrar hesaplama yapmadan daha önceden geri çağırma formülü kullanılarak Örtme integrali hızlı bir şekilde hesaplanır.

Tablo 4.3' te 3.11 Eşitliğindeki katsayıların indislerinin $q=0$ ve $l=3$ değerlerinde bu katsayılar için toplam 238 ms gibi bir süre kullanılmıştır. Ancak bu çalışmada oluşturulan algoritmalar yardımıyla yapılan hesaplamalarda ise hesaplama zamanı 76 ms süreye indirgenmiştir. Görüldüğü gibi 3.11 Eşitliğinin hesaplanmasında 0,319328 oranında bir zaman kazanımı olmuştur.

Bu çalışmada Visual Studio programı kullanılarak programlar oluşturulmuştur. Kullanılan bilgisayar Pentium(R) B950 2,10 GHz CPU, 4 Gb RAM, SSD 120 Gb HDD ve 64 bit işletim sistemine sahiptir. Burada oluşturulan yöntemle, Örtme integralinin hesaplanmasında ortaya çıkan katsayılar hafızaya yazılarak 3.11 Eşitliğine göre örtme integralinin hesaplanması için 0,319328 oranında bir süre kazanımı olduğu görülmüştür.

KAYNAKLAR

- Abramowitz, M., Stegun I.A., 1972, Handbook Of Mathematical Functions, 3rd Edn. Dover Publications, New York.
- Anonim, 2014. Atomic Orbital, http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbital (20.10.2014).
- Atkins, P. W., 1983. Molecular Quantum Mechanics. Oxford University Pres, New York.
- Barnett, M.P., 2002, Digital Erosion On The Evaluation Of Molecular Integrals., Theor. Chem. Acc. 107, 241
- Barnett, M.P., 2000, Two-Center Nonexchange Integrals Over Slater Orbitals, J.Chem. Phys., 113, 9419-9428.
- Gradshteyn, I.S., Ryzhik, I.M., 1980, Tables of integrals, sums, series and products, 4th edn. (Academic Pres, New York, 1980).
- Guseinov, I.I., Mamedov, B., Calculation of overlap integrals over Slater-type orbitals using translational and rotational transformations for spherical harmonics., 2000.
- Guseinov, I.I., Mamedov, B., Evaluation of overlap integrals with integer and noninteger n Slater-type orbitals using auxiliary functions., 2002.
- Guseinov, I.I., Mamedov, B.A., Journal of Molecular Structure (Theochem) 677:7-10, 2004
- Guseinov, I.I., Analytical Evaluation of Two-Center Coulomb, Hybrid and One-Electron Integrals for Slater-Type Orbitals J.Phys. B: Atom. Molec. Phys. 3:1399, 1970.
- Guseinov, I.I., J. Mol. Struct. (Theochem) 336: 17, 1995
- Guseinov, I.I., On the Evaluation of Multielectron Molecular Integrals Over Slater-Type Orbitals Using Binomial Coefficients J.Mol. Struc. (Theochem) 335:17, 1995.
- Guseinov, I.I., Öztekin, E. And Hüseyin, S., Computation of Molecular Integrals Over Slater-Type Orbitals, Part VI, Calculation of Overlap Integrals with the same screening parameters Using Gegenbauer Coefficients, J. Mol. Struc. (Theochem) 536: 59, 2000.
- Karaoğlu, B., 2003. Kuantum Mekaniğine Giriş, Seyir Yayıncılık, İstanbul, 120-152.
- Leach, A.R., 2001, Molecular Modelling Principles and Applications, Prentice Hall, New York.
- Levi A., 2003. *Applied Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge. 523p.
- Jones, H.W., 1986, Exact Formulas For Multipole Moments Using Slater-Type Molecular Orbitals. Phys. Rev.A, 33, 2081; 1987, Exact Formulas And Their Evaluation For Slater-Type Orbital Overlap Integrals With Large Quantum Numbers
- Jones, H.W., 1981, Computer-Generated Formulas For Two Center Coulomb Integrals Over Slater-Type Orbitals. Int.J.Quantum Chem.20, 1217.
- Mamedov, B.A., 2004. On the evaluation of boys functions using downward recursion relation, Journal of Mathematical Chemistry, 36, 3.
- Mekelleche, S.M. and Baba-Ahmed, A. Calculation of the One-Electron Two-Center Integrals Over Slater-Type Orbitals by Means of the Ellipsoidal Coordinates Method, Int. J. Quant. Chem. 63:843, 1996.
- Nouredine Zettili, Quantum Mechanics John Wiley and Sons, 2009, pp. 353

- Richard, W.G, Cooper, D.L., 1983. *Ab Initio Molecular Orbital Calculation For Chemists*, Clarendon Pres, Oxford.
- Rico, J.F., Lopez, R. And Ramirez, G.Improved Algorithm for the Calculation of One-Electron Two-Center Integrals with STOs, *J.Chem. Phys*, 91:4213, 1989.
- Roothaan, C.C., Self-Consistent Field Theory for Open Shells of Electronic Systems, *Rev. Mod. Phys*, 32:179, 1960.
- Sharma, R.R., 1976. Expansion of a function about a displaced center for multicenter integrals: A general and closed expression for the coefficients in the expansion of a Slater orbital and for overlap integrals. *Physical Review A*, 13, 517.
- Slater, J.C., 1930. Atomic Shielding Constants, *Phys.Rev.*, 36,57-64.
- Szasz L., 1931. *The electronic Structure of Atoms*. John Wiley & Sons, Inc, Canada. 571p.
- Weniger, E.J., Steinborn, E.O., 1983, Numerical Properties For The Convolution Theorems Of B Function, *Phys. Rev. A.*, 28, 2026-2040.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı : Engin KARAARSLAN
Doğum Yeri ve Yılı : Karapınar / 1982
Yabancı Dili : İngilizce
Telefon No : +90 546 893 11 33
E-Mail : enginkaraarslan@hotmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Yılı
Lise	Karaman Lisesi	1999
Önlisans	Çukurova Üniversitesi Karaisalı MYO. Bilgisayar Programcılığı	2001
Lisans	Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik	2007