

T.C.
RİZE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ BOYUTLU HELYUM ATOMUNUN
TABAN DURUM ENERJİSİNİN HESAPLANMASI

Erkan KIRIŞ

Tez Danışmanı:

Doç. Dr. Hasan KARABULUT

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

RİZE-2010

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

İKİ BOYUTLU HELYUM ATOMUNUN
TABAN DURUM ENERJİSİNİN HESAPLANMASI

Erkan KIRIŞ

YÜKSEK LİSANS

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 04/06/2010

Tezin Sözlü Savunma Tarihi : 22/06/2010

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Hasan KARABULUT

Jüri Üyesi : Prof. Dr. Hüseyin KARAL

Jüri Üyesi : Doç. Dr. Hasan BALTAŞ

Enstitü Müdürü : Doç. Dr. Kerim SERBEST



RİZE-2010

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Rize Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda 'Yüksek Lisans Tezi' olarak hazırlandı.

Bu tezin hazırlanmasında öncü olan ve her aşamasında engin bilgilerinden yararlandığım, karşılaştığım zorluklarda desteğini ve ilgisini gördüğüm değerli danışman hocam Doç. Dr. Hasan KARABULUT'a minnettarlığımı bir borç bilir ve teşekkürlerimi sunarım.

Lisans ve yüksek lisans eğitimimin her aşamasında her türlü maddi ve manevi yardımını esirgemeyen çok değerli hocam Rize Üniversitesi Rektörü sayın Prof. Dr. Nazmi Turan OKUMUŞOĞLU'na teşekkürlerimi ve saygılarımı sunarım

Lisans ve yüksek lisans eğitimim boyunca benden yardımlarını ve gerek maddi gerek manevi desteğini esirgemeyen çok değerli hocam Doç. Dr. Hasan BALTAŞ'a en içten dileklerle teşekkür ederim.

Ayrıca beni bugünlere getirmek için büyük emek sarf eden ve karşılaştığım güçlüklerde desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen aileme sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Erkan KIRIŞ

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No:</u>
ÖNSÖZ	I
İÇİNDEKİLER	II
ÖZET	III
SUMMARY	IV
SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ	V
ŞEKİLLER DİZİNİ	VI
TABLolar DİZİNİ	VII
1. GENEL BİLGİLER	1
1.1. Giriş	1
1.2. Helyum Atomunun Üç Boyutta Çözülmesi	2
2. YAPILAN ÇALIŞMALAR	5
2.1. Hamiltonyen'in Çıkarılışı	5
2.2. İntegrallerin Hesaplanması	8
2.3. Lineer Değişmeli (Varyasyonel) Yöntem	15
2.4. Problemin Simetrisi	16
2.5. Programın Yazılması	17
3. BULGULAR	50
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	55
5. ÖNERİLER	56
KAYNAKLAR	57
ÖZGEÇMİŞ	59

ÖZET

Bu çalışmada, iki boyutlu helyum atomunun taban durum enerjisi hesaplandı. Hesaplamalarda fortran 95 kullanıldı. Genelleştirilmiş özdeğer problemi varyasyon metodu ile elde edildi. Kinetik enerji operatörü Hylleraas koordinatları r_1, r_2 ve r_{12} ' de ifade edildi. Taban durumunun varyasyon hesabı için Hylleraas tipi taban fonksiyonları kullanıldı. Matris elemanlarındaki integraller analitik olarak hesaplandı. Hylleraas dalga fonksiyonundaki parametrelerin en iyi taban durum enerjisini veren değerleri bulundu.

Anahtar Kelimeler: Helyum atomu, taban durum enerjisi, iki boyutlu Hamiltonyen, Hylleraas tipi dalga fonksiyonları, varyasyon metodu.

SUMMARY

CALCULATION OF THE GROUND STATE ENERGY OF HELIUM ATOM IN TWO DIMENSIONS

In this study, we have calculated ground state energy of helium atom in two dimensions. We used fortran 95 in our calculations. A generalized eigenvalue problem is obtained from variation method. We expressed kinetic energy operator in Hylleraas coordinates r_1, r_2 and r_{12} . We used Hylleraas type basis functions for a variation calculation of the ground state. The integrals in the matrix elements are evaluated analytically. The parameters in Hylleraas wave functions are optimized for the best ground state energy.

Key Words: Helium atom, ground state energy, Hamiltonian in two dimensions, Hylleraas type wave functions, variation method.

SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ

H_{ij} : Hamiltonyen matris elemanı

S_{ij} : Overlap matris elemanı

∇^2 : Laplasyen

Z : Atom numarası

r_{12} : Elektronlar arası uzaklık

δ : Dirac-Delta fonksiyonu

$\langle a|b \rangle$: Bra-ket notasyonu

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No:

Şekil 1. Helyum atomunun koordinat sistemi.....	1
Şekil 2. NN=4, MM=4, KK=3 ve a=4,25 değerleri için $ \Delta E $ ' nin c' ye göre değişimi.....	51
Şekil 3. NN=4, MM=4, KK=3 ve c=0,8 değerleri için $ \Delta E $ ' nin a' ya göre değişimi.....	52
Şekil 4. NN=4, MM=4, KK=3 değerleri için $ \Delta E $ ' nin a ve c' ye göre değişimi.....	54
Şekil 5. NN=4, MM=4, KK=3 değerleri için $ \Delta E $ ' nin a ve c' ye göre değişimi.....	54

TABLULAR DİZİNİ

Sayfa No:

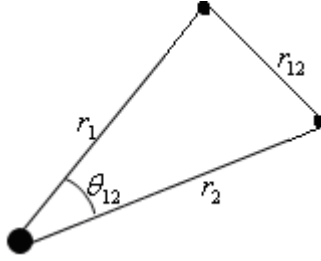
Tablo 1. NN=4, MM=4, KK=3, a=4,25 ve c değerleri için helyum atomunun taban durum enerjisi ve Hilico ve arkadaşlarının [16] çalışmasıyla karşılaştırılarak elde edilen enerji farkları.	50
Tablo 2. NN=4, MM=4, KK=3, c=0,8 ve a değerleri için helyum atomunun taban durum enerjisi ve Hilico ve arkadaşlarının [16] çalışmasıyla karşılaştırılarak elde edilen enerji farkları.	52
Tablo 3. NN=4, MM=4, KK=3, a ve c değerleri için helyum atomunun taban durum enerjisi ve Hilico ve arkadaşlarının [16] çalışmasıyla karşılaştırılarak elde edilen enerji farkları.	53

1. 1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

1929 yılında, Hylleraas [1] hidrojen atomunda olduğu gibi kesin sonuçlar (veya en azından sonuçlar spektroskopik doğrulukta olarak) üreten çok elektronlu atomların enerji durumlarının kuantum mekaniksel olarak hesaplanabileceğini öne sürdü. Bu hesaplamalarda matematiksel zorluklar ortaya çıktı, fakat esas itibariyle çözülebilirdi [2]. Bunu göstermek için, Hylleraas helyum atomu problemini çalışmaya başladı.

Hylleraas Dalga fonksiyonunu üretmek için r_1 , r_2 ve θ 'nın yerine r_1 , r_2 ve r_{12} gibi üç bağımsız değişkeni seçti. Burada θ , r_1 ile r_2 arasındaki açı olarak ifade edilir ve r_{12} ise elektronlar arası uzaklıktır.



Şekil 1. Helyum atomunun koordinat sistemi

Öncelikle Hylleraas, r_{12} 'nin doğrusal olduğu bir dalga fonksiyonu seçti. Hylleraas, kartezyen koordinatlara göre dalga fonksiyonun türevlerini uygulayarak r_1 , r_2 ve r_{12} koordinatlarında Hamiltonyen ifadesini elde etti [2].

Hylleraas tipi bir dalga fonksiyonun açılımı

$$\psi(s, u, t) = N e^{-(1/2)s} \sum_{l, m, n} C_{l, m, n} s^l u^m t^n \quad (1)$$

eşitliği ile ifade edilir. Burada n, m, l pozitif tamsayılar ve N normalizasyon sabitidir. s, u, t ise Hylleraas koordinatlarında şöyle tanımlanmaktadır [2].

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_2 - r_1, \quad u = r_{12} \quad (2)$$

Helyum atomu için sonuçlar sadece çekirdeğin hareketinden dolayı düzeltmelerde ve görelî düzeltmelerde deneyden ayrılmaktadır. Buna rağmen, bu açılım Schrödinger denkleminin kurallara uygun bir çözümü değildir, çünkü s ve u değişkenleri negatif terim içermiyordu. Kinoshita metodunda, s ve u 'nun üstel değerlerinin negatif olduğu kabul edildi. Açılım, kurallara uygun bir çözümdür ve şöyle yazılır [2].

$$\psi(s, u, t) = N e^{-(1/2)s} \sum_{l, m, n} C_{l, m, n} s^{l-m} u^{m-n} t^n \quad (3)$$

1.2. Helyum Atomunun Üç Boyutta Çözülmesi

Schwartz [4] tarafından Hylleraas tipi dalga fonksiyonlarına yarım tamsayı ilave terimleri dahil edilerek ve helyum atomu için Schrödinger denklemine Ritz varyasyonel metodu uygulanarak taban durum enerjisinin değeri -2,903719 atomik birim olarak elde edildi.

Kinoshita tarafından Hylleraas tipi dalga fonksiyonlarından daha genel deneme fonksiyonları ve Ritz varyasyonel tekniği kullanılarak helyum atomunun taban durum enerjisinin değeri -2,9037225 atomik birim olarak elde edildi. Kinoshita'nın helyum atomu için kullandığı Schrödinger denklemi atomik birimlerde aşağıdaki gibidir.

$$\left[\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + E + \frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right] \psi = 0 \quad (4)$$

Burada kullanılan Hylleraas tipi dalga fonksiyonu aşağıdaki gibidir.

$$\psi(s, u, t) = e^{-\frac{1}{2}s} \sum_{l, m, n} C_{l, m, n} s^l u^m t^n \quad (5)$$

$p = u/s$, $q = t/u$ eşitlikleri dikkate alınarak dalga fonksiyonunun en son hali şöyle yazılır [5].

$$\varphi(s, u, t) = e^{-\frac{1}{2}s} \sum_{l, m, n} C_{l, m, n} s^{l-m} u^{m-n} t^n \quad (6)$$

Pekeris tarafından helyum atomunun taban durum enerjisinin değeri -2,903724225 atomik birim olarak elde edildi. Pekeris'in hesaplamalarında kullandığı dalga fonksiyonu

$$\psi = N e^{-\frac{1}{2}ks} \sum c_{lmn} k^{l+m+n} s^l t^m u^n \quad (7)$$

şeklinde ifade edilir. Burada k parametre ve C_{lmn} ise Schrödinger denkleminin varyasyonel çözümünden elde edilen katsayılarıdır. Çekirdeğin hareketi ihmal edilirse iki elektronlu atomlar için Pekeris'in hesaplamalarında kullandığı Schrödinger denklemi

$$\nabla_1^2 \psi + \nabla_2^2 \psi + 2 \left(E + \frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right) \psi = 0 \quad (8)$$

şeklinde ifade edilir. ∇_1^2 ve ∇_2^2 üç boyuttaki ifadeleri denklem (8) de yerine yazılırsa aşağıdaki denklem elde edilir [6].

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1^2} + \frac{2}{r_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_2^2} + \frac{2}{r_2} \frac{\partial \psi}{\partial r_2} + 2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_{12}^2} + \frac{4}{r_{12}} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \frac{(r_1^2 - r_2^2 + r_{12}^2)}{r_1 r_{12}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1 \partial r_{12}} + \frac{(r_2^2 - r_1^2 + r_{12}^2)}{r_2 r_{12}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_2 \partial r_{12}} + 2 \left(E + \frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right) \psi = 0 \quad (9)$$

Kinoshita tarafından Hylleraas tipi dalga fonksiyonları kullanılarak ve terim sayısı artırılarak helyum atomunun taban durum enerjisinin değeri -2,9037237 atomik birim olarak elde edildi [7].

Schwartz tarafından parametre sayısı artırılarak Ritz-Hylleraas çözümlerinde helyum atomunun taban durum enerjisinin değeri -2,903711 atomik birim olarak hesaplandı. Helyum atomu için Schrödinger denklemi şu şekilde yazılmaktadır [8].

$$H\psi = \left[-\frac{1}{2\mu} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - 2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{1}{r_{12}} \right] \psi = E\psi \quad (10)$$

Burada $\mu = \frac{M}{1+M}$ olarak ifade edilmektedir. M çekirdeğin kütlesidir.

Schwartz tarafından uygun Hylleraas serileri içerisine logaritmik terimler ilave edilerek helyum atomunun taban durum enerjisinin değeri -2,90372437616 atomik birim olarak elde edildi [9].

Frankowski ve Pekeris tarafından dalga fonksiyonların logaritmik terimleri kullanılarak helyum atomunun taban durum enerjisinin değeri -2,9037243770326 atomik birim olarak hesaplandı [10].

Radi tarafından Hylleraas tipi dalga fonksiyonlarından daha genel bir dalga fonksiyonu ve Rayleigh-Ritz tekniđi kullanılarak helyum atomunun taban durum enerjisinin deęeri -2,903724371 atomik birim olarak elde edildi [11].

Thakkar tarafından standart Hylleraas tipi dalga fonksiyonları kullanılarak ve Radi'nin hesaplamaları dikkate alınarak helyum atomunun taban durum enerjisinin deęeri -2,90372434287 atomik birim olarak elde edildi [12].

Korobov tarafından kompleks üst içeren $\exp(-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12})$ tipindeki varyasyon taban fonksiyonlar kullanılarak ve Bailey tarafından hazırlanan çok duyarlılık paketi uygulanarak helyum atomunun taban durum enerjisinin deęeri -2,9037243770341195982955 atomik birim olarak elde edildi [13].

2. 2. YAPILAN ÇALIŞMALAR

2.1. Hamiltonyen'in Çıkarılışı

Helyum atomu için sonsuz çekirdek kütlesi yaklaşıklığında görelili olmayan Hamiltonyen ifadesi atomik birimlerde

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^2 \frac{2}{r_i} + \frac{1}{r_{12}} \quad (11)$$

olarak yazılır [2]. Helyum atomunun iki boyutlu Hamiltonyen ifadesini bulmak için önce kinetik enerji operatöründeki laplasyen ifadesi hesaplanır. Dalga fonksiyonu $\psi(r_1, r_2, r_{12})$ olarak alınır. Kutupsal koordinatlarda

$$r_1 = \sqrt{x_1^2 + y_1^2}, \quad r_2 = \sqrt{x_2^2 + y_2^2}, \quad r_{12} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad (12)$$

olarak ifade edilir. İki boyutta laplasyen ifadesi her bir elektron için

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2}, \quad \nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \quad (13)$$

şeklinde yazılır. Zincir kuralı kullanılarak aşağıdaki denklemler elde edilir.

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_1} = \frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial r_2}{\partial x_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_2} + \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial y_1} = \frac{\partial r_1}{\partial y_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial r_2}{\partial y_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_2} + \frac{\partial r_{12}}{\partial y_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \quad (14)$$

$\frac{\partial r_2}{\partial x_1} = 0$ ve $\frac{\partial r_2}{\partial y_1} = 0$ eşitlikleri göz önüne alınarak (14) nolu denklem tekrar yazılır:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_1} = \frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial y_1} = \frac{\partial r_1}{\partial y_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial r_{12}}{\partial y_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \quad (15)$$

Yukarıdaki ifadelerin ikinci kez türevleri alınırsa

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2 r_1}{\partial x_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_1} \right) + \frac{\partial^2 r_{12}}{\partial x_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \right) \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} = & \frac{\partial^2 r_1}{\partial x_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial^2 r_{12}}{\partial x_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \frac{\partial r_1}{\partial x_1} \left[\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial r_1} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_1} \right) + \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_1} \right) \right] \\ & + \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} \left[\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial r_1} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \right) + \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \right) \right] \end{aligned} \quad (17)$$

denklemleri elde edilir. Denklem (17)'de ikinci türevleri açıkça yazılırsa

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2 r_1}{\partial x_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial^2 r_{12}}{\partial x_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \left(\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1^2} + \left(\frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_{12}^2} + 2 \frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1 \partial r_{12}} \quad (18)$$

eşitliği elde edilir. Yapılan işlemlerin aynısı $\frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2}$ için de yapılırsa

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} = \frac{\partial^2 r_1}{\partial y_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial^2 r_{12}}{\partial y_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \left(\frac{\partial r_1}{\partial y_1} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1^2} + \left(\frac{\partial r_{12}}{\partial y_1} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_{12}^2} + 2 \frac{\partial r_1}{\partial y_1} \frac{\partial r_{12}}{\partial y_1} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1 \partial r_{12}} \quad (19)$$

sonucuna varılır. Yukarıda yapılan işlemlerin aynısı ikinci elektron için de yapılırsa $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2}$

ve $\frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2}$ ifadeleri aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} = & \frac{\partial^2 r_1}{\partial x_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial^2 r_{12}}{\partial x_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \left(\frac{\partial r_1}{\partial x_2} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1^2} + \left(\frac{\partial r_{12}}{\partial x_2} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_{12}^2} + 2 \frac{\partial r_1}{\partial x_2} \frac{\partial r_{12}}{\partial x_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1 \partial r_{12}} \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2} = & \frac{\partial^2 r_1}{\partial y_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{\partial^2 r_{12}}{\partial y_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \left(\frac{\partial r_1}{\partial y_2} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1^2} + \left(\frac{\partial r_{12}}{\partial y_2} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_{12}^2} + 2 \frac{\partial r_1}{\partial y_2} \frac{\partial r_{12}}{\partial y_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1 \partial r_{12}} \end{aligned} \quad (20)$$

$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2}$ ifadesinin toplamını bulmak için yukarıdaki (18) ve (19) nolu denklemler

kullanılırsa ve ortak paranteze alınırsa

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} = & \left(\frac{\partial^2 r_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 r_1}{\partial y_1^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \left(\frac{\partial^2 r_{12}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 r_{12}}{\partial y_1^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \left[\left(\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_1}{\partial y_1} \right)^2 \right] \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1^2} \\ & + \left[\left(\frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_{12}}{\partial y_1} \right)^2 \right] \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_{12}^2} + 2 \left(\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} + \frac{\partial r_1}{\partial y_1} \frac{\partial r_{12}}{\partial y_1} \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1 \partial r_{12}} \end{aligned} \quad (21)$$

eşitliği bulunur. $r_1 = \sqrt{x_1^2 + y_1^2}$ ve $r_{12} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$ ifadelerinin türevleri alınarak (21) nolu denklemde yerine yazılırsa formülde parantez içerisindeki her ifade basite indirgenebilir.

$$\left(\frac{\partial r_1}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial r_1}{\partial y_1}\right)^2 = \left(\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + y_1^2}}\right)^2 + \left(\frac{y_1}{\sqrt{x_1^2 + y_1^2}}\right)^2 = 1 \quad (22)$$

$$\left(\frac{\partial r_{12}}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial r_{12}}{\partial y_1}\right)^2 = \left(\frac{x_1 - x_2}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}}\right)^2 + \left(\frac{y_1 - y_2}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}}\right)^2 = 1 \quad (23)$$

$$\frac{\partial^2 r_1}{\partial x_1^2} = \frac{1}{\sqrt{x_1^2 + y_1^2}} - \frac{x_1^2}{(x_1^2 + y_1^2)^{3/2}} = \frac{x_1^2 + y_1^2}{(x_1^2 + y_1^2)^{3/2}} - \frac{x_1^2}{(x_1^2 + y_1^2)^{3/2}} = \frac{y_1^2}{(x_1^2 + y_1^2)^{3/2}} \quad (24)$$

$$\frac{\partial^2 r_1}{\partial y_1^2} = \frac{x_1^2}{(x_1^2 + y_1^2)^{3/2}} \quad (25)$$

(24) ve (25) nolu denklemler toplanılırsa

$$\frac{\partial^2 r_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 r_1}{\partial y_1^2} = \frac{x_1^2 + y_1^2}{(x_1^2 + y_1^2)^{3/2}} = \frac{1}{\sqrt{x_1^2 + y_1^2}} = \frac{1}{r_1} \quad (26)$$

eşitliği elde edilir.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 r_{12}}{\partial x_1^2} &= \frac{1}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}} - \frac{(x_1 - x_2)}{\left((x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2\right)^{3/2}} \\ &= \frac{(y_1 - y_2)^2}{\left((x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2\right)^{3/2}} \end{aligned} \quad (27)$$

$$\frac{\partial^2 r_{12}}{\partial y_1^2} = \frac{(x_1 - x_2)^2}{\left((x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2\right)^{3/2}} \quad (28)$$

(27) ve (28) nolu denklemler toplanılırsa

$$\frac{\partial^2 r_{12}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 r_{12}}{\partial y_1^2} = \frac{1}{r_{12}} \quad (29)$$

eşitliği elde edilir.

$$\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} + \frac{\partial r_1}{\partial y_1} \frac{\partial r_{12}}{\partial y_1} = \frac{x_1}{r_1} \frac{(x_1 - x_2)}{r_{12}} + \frac{y_1}{r_1} \frac{(y_1 - y_2)}{r_{12}} = \frac{1}{r_1 r_{12}} \left[(x_1^2 + y_1^2) - (x_1 x_2 + y_1 y_2) \right] \quad (30)$$

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = x_1 x_2 + y_1 y_2, \quad \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = \left| \vec{r}_1 \right| \left| \vec{r}_2 \right| \cos \theta_{12} \quad (31)$$

$$\cos \theta_{12} = \frac{r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2}{2r_1 r_2} \quad (32)$$

(31) ve (32) nolu denklemler kullanılarak (30) nolu denklem şu şekilde yazılır.

$$\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} + \frac{\partial r_1}{\partial y_1} \frac{\partial r_{12}}{\partial y_1} = \frac{1}{r_1 r_{12}} \left[r_1^2 - \frac{1}{2} (r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2) \right] = \frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{2r_1 r_{12}} \quad (33)$$

Yukarıda bulunan bütün eşitlikler (21) nolu denklemde yerine yazılırsa

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} = \nabla_1^2 \psi = \frac{1}{r_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} + \frac{1}{r_{12}} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_{12}^2} + \frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_1 \partial r_{12}} \quad (34)$$

eşitliği elde edilir. Yukarıda yapılan işlemlerin aynısı ikinci elektron içinde yapılırsa (34) nolu denkleme benzer şekilde aşağıdaki eşitlik bulunur.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2} = \nabla_2^2 \psi = \frac{1}{r_2} \frac{\partial \psi}{\partial r_2} + \frac{1}{r_{12}} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_{12}^2} + \frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_2 \partial r_{12}} \quad (35)$$

Birinci elektronun kinetik enerjisi ve çekirdek ile etkileşmesi, ikinci elektronun kinetik enerjisi ve çekirdek ile etkileşmesi ve elektronlar arası etkileşme göz önüne alınarak helyum atomu için atomik birimlerde iki boyutta Hamiltonyen ifadesi şu şekilde yazılır.

$$H = -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (36)$$

$$H = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} + \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} + \frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{12}} \right] - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (37)$$

2.2. İntegrallerin Hesaplanması

Bu çalışmada hesaplanan integrallere benzer integraller üç boyutlu helyum atomunun taban durum enerjisinin hesaplanmasında da ortaya çıkmıştır [14,15]. Bu çalışmadaki iki boyutlu integrallerle ilgili her hangi bir makaleye rastlanmamıştır.

$\frac{e^{-ar}}{r}$ ifadesinin Fourier dönüşümü

$$F(\vec{k}) = \int_S e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{e^{-ar}}{r} d^2\vec{r} \quad (38)$$

eşitliği ile hesaplanır. Kutupsal koordinatlarda, $x = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta$ ve $d^2\vec{r} = r d\theta dr$ ifadeleri kullanılır. $\vec{k} = k \cdot \hat{j}$ olarak alınırsa $\vec{r} \cdot \vec{k} = yk = kr\sin\theta$ olarak bulunur ve (38) nolu integral

$$F(k) = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} r dr e^{-ikr\sin\theta} \frac{e^{-ar}}{r} = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} e^{-(ik\sin\theta+a)r} dr = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{ik\sin\theta+a} \quad (39)$$

haline gelir. Rezidü teoremini kullanılarak (39) nolu integral çözülür. $z = e^{i\theta}$, $dz = ie^{i\theta} d\theta$ ve $dz = izd\theta$ eşitlikleri kullanılarak

$$d\theta = -i \frac{dz}{z}, \quad \sin\theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}, \quad 2i\sin\theta = z - \frac{1}{z} \quad (40)$$

eşitlikleri elde edilir ve bu terimler (39) nolu integralde yerine yazılır.

$$F(k) = \frac{2}{k} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2i\sin\theta + \frac{2a}{k}} = \frac{2}{k} \oint_{|z|=1} \frac{-i/z dz}{(z-1/z) + 2\alpha} = -\frac{2i}{k} \oint_{|z|=1} \frac{dz}{z^2 + 2\alpha z - 1}, \quad \alpha = \frac{a}{k} \quad (41)$$

$z^2 + 2\alpha z - 1 = (z - z_1)(z - z_2) = 0$ eşitliğindeki kökler aşağıdaki gibi bulunur.

$$z_{1,2} = -\alpha \mp \frac{1}{2} \sqrt{4\alpha^2 + 4}, \quad z_1 = -\alpha + \sqrt{1 + \alpha^2}, \quad z_2 = -\alpha - \sqrt{1 + \alpha^2} \quad (42)$$

Rezidü teoremine göre integralin son hali yazılırsa

$$F(k) = -\frac{2i}{k} 2\pi i \lim_{z \rightarrow z_1} (z - z_1) \frac{1}{(z - z_1)(z - z_2)} = \frac{2\pi}{k} \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} = \frac{2\pi}{\sqrt{k^2 + a^2}} \quad (43)$$

haline gelir. $\frac{e^{-ar}}{r}$ terimi (38) nolu denklemdeki Forier dönüşümünden yazılır.

$$\frac{e^{-ar}}{r} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_S e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} F_a(\vec{k}) d^2\vec{k}, \quad F_a(k) = \frac{2\pi}{\sqrt{k^2 + a^2}} \quad (44)$$

(44) denkleminde benzer şekilde r_1 , r_2 ve r_{12} için de benzer ifadeleri yazılırsa

$$\frac{e^{-ar_1}}{r_1} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_S e^{i\vec{k}_1\cdot\vec{r}_1} F_a(\vec{k}_1) d^2\vec{k}_1 \quad (45)$$

$$\frac{e^{-br_2}}{r_2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_S e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} F_b(\vec{k}_2) d^2 \vec{k}_2 \quad (46)$$

$$\frac{e^{-cr_{12}}}{r_{12}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_S e^{i\vec{k}_3 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} F_c(\vec{k}_3) d^2 \vec{k}_3 \quad (47)$$

eşitlikleri elde edilir. (45), (46) ve (47) denklemleri yan yana yazılıp çarpılır.

$$\frac{e^{-ar_1}}{r_1} \frac{e^{-br_2}}{r_2} \frac{e^{-cr_{12}}}{r_{12}} = \frac{1}{(2\pi)^6} \int_S e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 + i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2 + i\vec{k}_3 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} F_a(\vec{k}_1) F_b(\vec{k}_2) F_c(\vec{k}_3) d^2 \vec{k}_1 d^2 \vec{k}_2 d^2 \vec{k}_3 \quad (48)$$

(48) denkleminin her iki tarafı $d^2 \vec{r}_1 d^2 \vec{r}_2$ hacmi üzerinden integre edilirse

$$\int_S \frac{e^{-ar_1 - br_2 - cr_{12}}}{r_1 r_2 r_{12}} d^2 \vec{r}_1 d^2 \vec{r}_2 = \frac{1}{(2\pi)^6} \int_S d^2 \vec{k}_1 d^2 \vec{k}_2 d^2 \vec{k}_3 F_a(\vec{k}_1) F_b(\vec{k}_2) F_c(\vec{k}_3) \int_S d^2 r_1 d^2 r_2 e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_3) \cdot \vec{r}_1} e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_3) \cdot \vec{r}_2} \quad (49)$$

haline gelir. Dirac delta fonksiyonun özelliğine göre

$$\int_S d^2 r_1 d^2 r_2 e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_3) \cdot \vec{r}_1} e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_3) \cdot \vec{r}_2} = (2\pi)^4 \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_3) \delta(\vec{k}_2 - \vec{k}_3) \quad (50)$$

eşitliği yazılır. (50) nolu eşitlik (49) nolu denklemde kullanılırsa

$$\int_S \frac{e^{-ar_1 - br_2 - cr_{12}}}{r_1 r_2 r_{12}} d^2 \vec{r}_1 d^2 \vec{r}_2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_S d^2 \vec{k} F_a(-\vec{k}) F_b(\vec{k}) F_c(\vec{k}) = 2\pi \int_S \frac{d^2 \vec{k}}{\sqrt{(k^2 + a^2)(k^2 + b^2)(k^2 + c^2)}} \quad (51)$$

denklemini elde edilir. Burada $d^2 \vec{k} = 2\pi k dk$ eşitliği integralde yerine yazılırsa

$$\int_S \frac{e^{-ar_1 - br_2 - cr_{12}}}{r_1 r_2 r_{12}} d^2 \vec{r}_1 d^2 \vec{r}_2 = 2\pi \int_0^\infty \frac{2\pi k dk}{\sqrt{(k^2 + a^2)(k^2 + b^2)(k^2 + c^2)}} \quad (52)$$

eşitliği bulunur. (52) nolu denklemin integral kısmında değişken değiştirme özelliğinden, $k^2 = x$ ve $2kdk = dx$ eşitlikleri kullanılırsa

$$\int_S \frac{e^{-ar_1 - br_2 - cr_{12}}}{r_1 r_2 r_{12}} d^2 \vec{r}_1 d^2 \vec{r}_2 = 2\pi^2 \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{(x + a^2)(x + b^2)(x + c^2)}} \quad (53)$$

sonucuna varılır. Hesaplamalarda kullanılan dalga fonksiyonları Hylleraas tipi dalga fonksiyonlarıdır ve hesaplanan integraller (53) nolu eşitliğin sol tarafındaki integrallerin a, b ve c göre türevlerinin alınmış şeklidir. Eşitliğin sol tarafının a, b ve c göre türevi alınırsa çözümü elde etmek için eşitliğin sağ tarafının da aynı şekilde türevlerin alınması gerekir. (53) eşitliğin sağ tarafındaki integralin a' ya türevi alınmış hali aşağıdaki gibi yazılır.

$$I = \frac{\partial}{\partial a} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{(x+a^2)(x+b^2)(x+c^2)}} \quad (54)$$

Yukarıdaki denklemde işlemleri biraz daha kolaylaştırmak için zincir kuralı uygulanılarak a^2 'nin türevleri alınır.

$$I = \frac{\partial a^2}{\partial a} \frac{\partial}{\partial a^2} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{(x+a^2)(x+b^2)(x+c^2)}} = 2a \int_0^{\infty} \frac{-1/2 dx}{\sqrt{(x+a^2)^3(x+b^2)(x+c^2)}} \quad (55)$$

Eşitliğinde a 'ya ve a^2 'ye göre türev alınırsa bu iki türev arasında şu bağıntı bulunur.

$$\left(\frac{\partial}{\partial a}\right)^n = \sum_{p=\text{int}\left(\frac{n+1}{2}\right)}^n c_p^n a^{2p-n} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^p \quad (56)$$

(56) nolu bağıntıda $p > n$ için $c_p^n = 0$ olur ve p ve n değerleri için birkaç tane c_p^n değeri yazılabilir.

$$\begin{aligned} c_p^n &= 0 \quad (p > n) \\ c_0^0 &= 1, c_0^1 = 0, c_1^1 = 2 \end{aligned} \quad (57)$$

(56) nolu denklemde eşitliğin her iki tarafının da bir kez daha a 'ya göre türevi alınırsa

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial a}\right)^{n+1} &= \frac{\partial}{\partial a} \sum_{p=\text{min}}^n c_p^n a^{2p-n} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^p \\ &= \sum_{p=\text{min}}^n \left[c_p^n (2p-n) a^{2p-n-1} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^p + c_p^n a^{2p-n} \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^p \right] \end{aligned} \quad (58)$$

denkleme elde edilir. (58) nolu denklemde $\frac{\partial}{\partial a} = 2a \frac{\partial}{\partial a^2}$ eşitliği yerine yazılırsa

$$\left(\frac{\partial}{\partial a}\right)^{n+1} = \sum_p \left[c_p^n (2p-n) a^{2p-(n+1)} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^p + c_p^n 2a^{2p-n+1} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^{p+1} \right] = \sum_p c_p^{n+1} a^{2p-(n+1)} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^p \quad (59)$$

ifadesi elde edilir. (59) nolu denklemdeki eşitlikler göz önüne alınarak c_p^n katsayıları için bir eşitlik yazılır.

$$c_p^{n+1} = (2p-n)c_p^n + 2c_{p-1}^n \quad (60)$$

(53) nolu denklemdeki eşitliğin her iki tarafı a 'ya göre $n+1$ kez, b 'ye göre $m+1$ kez ve c 'ye göre $k+1$ kez türevleri alınırsa

$$\int_S r_1^n r_2^m r_{12}^k e^{-ar_1-br_2-cr_{12}} d^2r_1 d^2r_2 = \left(\frac{\partial}{\partial a}\right)^{n+1} \left(\frac{\partial}{\partial b}\right)^{m+1} \left(\frac{\partial}{\partial c}\right)^{k+1} \int_0^\infty \frac{2\pi^2 dx}{\sqrt{(x+a^2)(x+b^2)(x+c^2)}} \quad (61)$$

olur. (59) nolu eşitlik (61) nolu denklemde kullanılırsa

$$\int_S r_1^n r_2^m r_{12}^k e^{-ar_1-br_2-cr_{12}} d^2r_1 d^2r_2 = \sum_{p_1} \sum_{p_2} \sum_{p_3} c^{n+1} c^{m+1} c^{k+1} a^{2p_1-(n+1)} b^{2p_2-(m+1)} c^{2p_3-(k+1)} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^{p_1} \left(\frac{\partial}{\partial b^2}\right)^{p_2} x \left(\frac{\partial}{\partial c^2}\right)^{p_3} \int_0^\infty \frac{2\pi^2 dx}{\sqrt{(x+a^2)(x+b^2)(x+c^2)}} \quad (62)$$

denklemini elde edilir. (62) nolu denklemde katsayılar hariç kalan diğer kısmı hesaplanır.

$$K = \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^u \left(\frac{\partial}{\partial b^2}\right)^w \left(\frac{\partial}{\partial c^2}\right)^z \int_0^\infty \frac{2\pi^2 dx}{\sqrt{(x+a^2)(x+b^2)(x+c^2)}} \quad (63)$$

(63) nolu denklemde a^2 'nin u kez, b^2 'nin w kez ve c^2 'nin z kez türevleri alındıktan sonra aşağıdaki denklem elde edilir:

$$K = 2\pi^2 \int_0^\infty \frac{(-1/2)\dots(-(2u-1)/2)(-1/2)\dots(-(2w-1)/2)(-1/2)\dots(-(2z-1)/2)}{\sqrt{(x+a^2)^{2u+1}(x+b^2)^{2w+1}(x+c^2)^{2z+1}}} dx \quad (64)$$

$$K = \frac{2\pi^2}{(-2)^{u+w+z}} a_u a_w a_z \int_0^\infty \frac{dx}{(x+a^2)^{u+(1/2)}(x+b^2)^{w+(1/2)}(x+c^2)^{z+(1/2)}} \quad (65)$$

Burada a_u , a_w ve a_z aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$a_u = \begin{cases} (2u-1)!! & u < 0 \\ 1 & u = 0 \end{cases}, a_w = \begin{cases} (2w-1)!! & w < 0 \\ 1 & w = 0 \end{cases}, a_z = \begin{cases} (2z-1)!! & z < 0 \\ 1 & z = 0 \end{cases} \quad (66)$$

(65) nolu denklemdeki integral ifadesi aşağıdaki gibi ayrı bir şekilde yazılıp çözülür.

$$Q = \int_0^\infty \frac{dx}{(x+4a^2)^{u+(1/2)}(x+4b^2)^{w+(1/2)}(x+4c^2)^{z+(1/2)}} \quad (67)$$

İntegral $a = b \neq c$ durumu için;

$$Q = \int_0^\infty \frac{dx}{(x+4a^2)^{u+w+1}(x+4c^2)^{z+(1/2)}} \quad (68)$$

Değişken değiştirme yöntemi kullanılarak; $x + 4c^2 = y^2$, $dx = 2ydy$, $x = y^2 - 4c^2$ eşitlikleri (68) nolu integralde yerine yazılır.

$$Q = \int_{2c}^{\infty} \frac{2ydy}{(y^2 + 4a^2 - 4c^2)^{u+w+1} (y^2)^{z+(1/2)}} = 2 \int_{2c}^{\infty} \frac{dy}{(y^2 + 4a^2 - 4c^2)^{u+w+1} (y^2)^z} \quad (69)$$

(69) nolu integrali hesaplamak için temel matematikten bilinen bazı eşitlikler özetlenebilir.

$$\frac{(n-1)!(m-1)!}{(y^2 - \alpha)^n (y^2 - \beta)^m} = \left(\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^{m-1} \frac{1}{(y^2 - \alpha)(y^2 - \beta)} \quad (70)$$

$$\frac{1}{(y^2 - \alpha)^n (y^2 - \beta)^m} = \frac{1}{(n-1)!(m-1)!} \left(\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^{m-1} \frac{1}{(y^2 - \alpha)(y^2 - \beta)} \quad (71)$$

$$\frac{1}{(y^2 - \alpha)(y^2 - \beta)} = \frac{1}{\alpha - \beta} \left[\frac{1}{y^2 - \alpha} - \frac{1}{y^2 - \beta} \right] \quad (72)$$

(71) nolu eşitlik integral içindeki paydaya benzetmeye çalışılır ve (72) nolu eşitlik (71) nolu denklemde yerine yazılırsa

$$A = \left(\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^{m-1} \frac{1}{(y^2 - \alpha)(y^2 - \beta)} = \left(\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^{m-1} \left[\frac{1}{(\alpha - \beta)(y^2 - \alpha)} - \frac{1}{(\alpha - \beta)(y^2 - \beta)} \right] \quad (73)$$

denklemini elde edilir ve bu denklem daha açık bir şekilde yazılır.

$$A = \left(\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^{n-1} \left[\frac{(m-1)!}{(\alpha - \beta)^m} \frac{1}{(y^2 - \alpha)} \right] + \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^{m-1} \left[\frac{(n-1)!}{(\beta - \alpha)^n} \frac{1}{(y^2 - \beta)} \right] \quad (74)$$

$$A = (-1)^m (m-1)! \sum_{k=0}^{n-1} \left[\frac{1}{(\beta - \alpha)^m} \right]^{(k)} \left[\frac{1}{(y^2 - \alpha)} \right]^{(n-1-k)} \frac{(n-1)!}{(n-1-k)!k!} \\ + (-1)^n (n-1)! \sum_{k=0}^{m-1} \left[\frac{1}{(\alpha - \beta)^n} \right]^{(k)} \left[\frac{1}{(y^2 - \beta)} \right]^{(m-1-k)} \frac{(m-1)!}{(m-1-k)!k!} \quad (75)$$

$$A = (-1)^m \left[\sum_{k=0}^{m-1} \frac{(m+k-1)!}{(\beta - \alpha)^{m+k}} \frac{(n-1)!}{k!(y^2 - \alpha)^{n-k}} \right] + (-1)^n \left[\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n+k-1)!}{(\alpha - \beta)^{n+k}} \frac{(m-1)!}{k!(y^2 - \beta)^{m-k}} \right] \quad (76)$$

(76) ve (71) nolu denklemler kullanılarak (69) nolu denklemde ortaya çıkacak olan integral çeşitlerinden birisi

$$\int_{2c}^{\infty} \frac{dy}{(y^2 - \beta)^k} = \frac{1}{2k-1} (2c)^{1-2k}, \quad \beta = 0, \quad k = 2z \quad (77)$$

şeklindedir. Diğer integral çeşiti ise

$$I_p = \int_{2c}^{\infty} \frac{dy}{(y^2 + q^2)^p}, \quad q = \sqrt{|\alpha|}, \quad q^2 = 4a^2 - 4c^2 \quad (78)$$

olarak yazılır. $\alpha < 0$ ve $p=1$ için;

$$I_1 = \int_{2c}^{\infty} \frac{dy}{y^2 + q^2} = \frac{1}{q} \left(\frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{2c}{q}\right) \right) \quad (79)$$

$\alpha > 0$ ve $p=1$ için;

$$I_1 = \int_{2c}^{\infty} \frac{1}{2q} \left(\frac{1}{y-q} - \frac{1}{y+q} \right) dy = \frac{1}{2q} \ln \left(\frac{y-q}{y+q} \right) \Big|_{2c}^{\infty} = \frac{1}{2q} \ln \left(\frac{2c+q}{2c-q} \right) \quad (80)$$

eşitlikleri yazılır. (78) nolu denklemdeki integralin pay ve paydası $(y^2 + q^2)$ ile çarpılır.

$$I_p = \int_{2c}^{\infty} \frac{(y^2 + q^2)}{(y^2 + q^2)^{p+1}} dy = q^2 \int_{2c}^{\infty} \frac{1}{(y^2 + q^2)^{p+1}} dy + \frac{1}{2} \int_{2c}^{\infty} y \frac{2y}{(y^2 + q^2)^{p+1}} dy \quad (81)$$

(81) nolu eşitliğin sağ tarafındaki birinci integral I_{p+1} dir ve ikinci integrale de kısmi integrasyon çözümü uygulanır.

$$I_p = q^2 I_{p+1} - \frac{1}{2p} \frac{1}{(y^2 + q^2)^p} y \Big|_{2c}^{\infty} + \frac{1}{2p} \int_{2c}^{\infty} \frac{dy}{(y^2 + q^2)^p} \quad (82)$$

(82) nolu denklemdeki integral kısmı yine I_p olur ve bu ifade denklemin sol tarafına atılıp eşitlik yeniden yazılırsa

$$\left(1 - \frac{1}{2p} \right) I_p = q^2 I_{p+1} + \frac{1}{p} \frac{c}{(4c^2 + q^2)^p} \quad (83)$$

bağıntısı elde edilir ve (83) denkleminde I_{p+1} eşitliği yazılır:

$$I_{p+1} = \frac{1}{q^2} \left[\left(1 - \frac{1}{2p} \right) I_p - \frac{c}{p(4a^2)^p} \right] \quad (84)$$

(84) bağıntısında bir döngü vardır yani $p = 1$ için I_1 bilindiğinden denklemde yerine yazılır ve I_2 bulunur. Aynı şekilde I_2 yerine yazılır I_3 bulunur ve bu döngü bu şekilde devam eder. Hesaplamalarda karşılaşılan integraller (77) ve (84) nolu bağıntılarla çözülür.

(67) nolu denklemdeki integrali $a = b = c$ durumu için çözümlerse integral ifadesi şu şekilde yazılır.

$$Q = \int_0^{\infty} \frac{dx}{(x + 4a^2)^{(u+w+z+(3/2))}} = \frac{(x + 4a^2)^{-(u+w+z+(1/2))}}{-(u + w + z + (1/2))} \Big|_0^{\infty} = \frac{(4a^2)^{-(u+w+z+(1/2))}}{(u + w + z + (1/2))} \quad (85)$$

2.3. Lineer Değişmeli (Varyasyonel) Yöntem

Sistemin toplam dalga fonksiyonu

$$\psi(x) \cong c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \dots + c_N\phi_N(x) \quad (86)$$

şeklinde tanımlansın. Burada $\phi_1(x), \phi_2(x), \dots, \phi_N(x)$ fonksiyonları taban durum fonksiyonlarıdır. Genelleştirilmiş özdeğer denklemi

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (87)$$

eşitliği ile ifade edilir. $\psi(x)$ toplam dalga fonksiyonu yerine yazılır.

$$\hat{H} \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(x) = E \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(x) \quad (88)$$

(88) nolu eşitliğin her iki tarafı ϕ_i^* ile çarpılıp integre edilir.

$$\sum_{j=1}^N \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle c_j = E \sum_{j=1}^N \langle \phi_i | \phi_j \rangle c_j \quad (89)$$

(89) nolu denklemde H ve S matrisleri tanımlansın. S matrisine aynı zamanda overlap matrisi de denmektedir. c katsayısı ise vektör ile temsil edilir.

$$H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle \quad (90)$$

$$S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \quad (91)$$

$$\sum_{j=1}^N H_{ij} c_j = E \sum_{j=1}^N S_{ij} c_j, \quad (i = 1, \dots, N) \quad (92)$$

$$\underline{\underline{H}} \underline{\underline{c}} = E \underline{\underline{S}} \underline{\underline{c}} \quad (93)$$

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} H_{11} & \dots & H_{1N} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ H_{N1} & \dots & H_{NN} \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{S}} = \begin{bmatrix} S_{11} & \dots & S_{1N} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ S_{N1} & \dots & S_{NN} \end{bmatrix} \quad (94)$$

$$\underline{c} = \begin{bmatrix} c_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ c_N \end{bmatrix} \quad (95)$$

2.4. Problemin Simetrisi

H ve S matrislerinin simetrik oldukları gösterilir.

H matrisi için;

f ve g iki reel fonksiyon olsun.

$$\int_V \partial_i (f \partial_i g) dv = \int_S f (\partial_i g) \hat{n}_i ds \quad (96)$$

$$\int_V f \partial_i^2 g dv + \int_V (\partial_i f) (\partial_i g) dv = \int_S f (\partial_i g) \hat{n}_i ds \quad (97)$$

Yapılan işlemin aynısı f ile g fonksiyonu yer değiştirilerek yapılır.

$$\int_V g \partial_i^2 f dv + \int_V (\partial_i g) (\partial_i f) dv = \int_S g (\partial_i f) \hat{n}_i ds \quad (98)$$

Burada $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$ ve $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$ ifadelerine eşit oldukları bilinmektedir. (97) nolu

ve (98) nolu denklemleri birbirinden çıkartılır.

$$\int_V f (\partial_i^2 g) dv - \int_V g (\partial_i^2 f) dv = \int_V \left(f \vec{\nabla} g - g \vec{\nabla} f \right)_i \hat{n}_i ds \quad (99)$$

(99) nolu denklemdeki integralde hacim sonsuz alınırsa yüzeyde sonsuz olur ve sonsuzda f ve g fonksiyonu sıfır olur. Bu durumda (99) nolu denklemin sağ tarafındaki eşitlik sıfır olur ve bağıntı şu hale gelir.

$$\int_V f (\partial_i^2 g) dv = \int_V g (\partial_i^2 f) dv \quad (100)$$

ve bu eşitliğin

$$\int_V f \nabla^2 g dv = \int_V g \nabla^2 f dv \quad (101)$$

olduğu açıkça görülür. (101) nolu denklemden görüldüğü gibi laplasyen ifadeleri simetriktir. Laplasyen ifadesini simetrik olması Hamiltonyen ifadesindeki kinetik enerji operatörünün simetrik olması anlamına gelmektedir. Diğer potansiyel enerji terimlerinde ise her hangi bir türev ifadesi içermediğinden ve kullanılan dalga fonksiyonunda kompleks terim bulunmadığından bu etkileşme enerjileri sonucunda ortaya çıkan integraller de simetriktir ve $H_{ij} = H_{ji}$ eşitliği yazılır.

S matrisi için;

$$S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \quad (102)$$

(102) nolu denklemde bra-ket notasyonunda

$$S_{ij} = \int_V \phi_i^* \phi_j dV \quad (103)$$

$$S_{ji} = \int_V \phi_j^* \phi_i dV \quad (104)$$

integral ifadeleri yazılır. Hesaplamalarda kullanılan dalga fonksiyonunda kompleks ifade bulunmadığından S matrisi simetrik olur yani $S_{ij} = S_{ji}$ olur.

2.5. Programın Yazılması

c 2D Helium ground state energy = -11.899 822 342 953 a.u.

program Helium2D

implicit double precision(a-h,o-z)

parameter (np=2000)

parameter (nf=42)

parameter (ncoef=30)

common a,b,c, coef(0:100,0:100)

dimension H(np,np), S(np,np), E(np), Y(np)

dimension f(-2:nf,-2:nf,-2:nf)

c

open(6, file='hmatrisi.txt')

open(7, file='energies.txt')

c

E=0.0d0

```

write(*,*) 'NN, MM, KK =?'
read(*,*) NN, MM, KK
write(*,*) ' a = ?'
read(*,*) a
c
write(*,*) ' c = ?'
read(*,*) c
c
b=a
c
ndim = (NN+1)*(MM+1)*(KK+1)
c
CALL coeff(coef,ncoef)
c
CALL integrals(f,NN,MM,KK,nf)
c
CALL HSmatrix(H,S,np,NN,MM,KK,f,nf)
c
write(6,*) ' a = ', a
write(6,*) ' c = ', c
write(6,*) 'NN,MM,KK = ', NN,MM,KK
do 10 i=1,ndim
do 20 j=1,ndim
Write(6,*) i,j
write(6,*) H(i,j), H(j,i)
write(6,*) S(i,j), S(j,i)
write(6,*) '-----'
20 continue
10 continue
C*****
CALL EWEVGE(np,np,ndim,H,S,E,Y,1,-1,IER)
write(*,*) ' ier = ', ier
c

```

```

write(7,*) ' a = ', a
write(7,*) ' c = ', c
write(7,*) 'NN,MM,KK = ', NN,MM,KK
do 30 i=1,ndim
  write(7,*) i, E(i)
30 continue
c
  STOP
  END
c*****
  SUBROUTINE integrals(f,NN,MM,KK,nf)
  implicit double precision(a-h,o-z)
  dimension f(-2:nf,-2:nf,-2:nf)
c  open(9, file='f.txt')
c
  do 10 i=-2,2*NN+2
    do 20 j=-2,2*MM+2
      do 30 k=-2,2*KK+2
        f(i,j,k)=hint(i,j,k)
30  continue
20  continue
10  continue
c
  RETURN
  END
c*****
  subroutine HSmatrix(H,S,np,NN,MM,KK,f,nf)
  implicit double precision(a-h,o-z)
  common a,b,c,coef(0:100,0:100)
  dimension H(np,np), S(np,np)
  dimension f(-2:nf,-2:nf,-2:nf)
c
  do 10 n=0,NN

```

```

do 20 m=0,MM
do 30 k=0,KK
  i=(KK+1)*(MM+1)*n + (KK+1)*m + k + 1
do 11 n1=0,NN
do 21 m1=0,MM
do 31 k1=0,KK
  j=(KK+1)*(MM+1)*n1 + (KK+1)*m1 + k1 + 1
c-----
A1 = -2*a*n*f(n1+n-1,m1+m,k1+k) + a**2*f(n1+n,m1+m,k1+k)
A1 = A1 + n*(n-1)*f(n1+n-2,m1+m,k1+k)
c-----
A2 = -2*b*m*f(n1+n,m1+m-1,k1+k) + b**2*f(n1+n,m1+m,k1+k)
A2 = A2 + m*(m-1)*f(n1+n,m1+m-2,k1+k)
c-----
B1 = -a*f(n1+n-1,m1+m,k1+k)
B1 = B1 + n*f(n1+n-2,m1+m,k1+k)
c-----
B2 = -b*f(n1+n,m1+m-1,k1+k)
B2 = B2 + m*f(n1+n,m1+m-2,k1+k)
c-----
A12 = -2*c*k*f(n1+n,m1+m,k1+k-1) + c**2*f(n1+n,m1+m,k1+k)
A12 = A12 + k*(k-1)*f(n1+n,m1+m,k1+k-2)
c-----
B12 = -c*f(n1+n,m1+m,k1+k-1)
B12 = B12 + k*f(n1+n,m1+m,k1+k-2)
c-----
E1a = n*k*f(n1+n,m1+m,k1+k-2)+a*c*f(n1+n+1,m1+m,k1+k-1)
E1a = E1a - a*k*f(n1+n+1,m1+m,k1+k-2)-c*n*f(n1+n,m1+m,k1+k-1)
c
E1b = n*k*f(n1+n-2,m1+m,k1+k)+a*c*f(n1+n-1,m1+m,k1+k+1)
E1b = E1b - a*k*f(n1+n-1,m1+m,k1+k)-c*n*f(n1+n-2,m1+m,k1+k+1)
c
E1c = -n*k*f(n1+n-2,m1+m+2,k1+k-2)-a*c*f(n1+n-1,m1+m+2,k1+k-1)

```

$$E1c = E1c + a * k * f(n1+n-1, m1+m+2, k1+k-2) + c * n * f(n1+n-2, m1+m+2, k1+k-1)$$

$$E1 = E1a + E1b + E1c$$

c-----

$$E2a = m * k * f(n1+n, m1+m, k1+k-2) + b * c * f(n1+n, m1+m+1, k1+k-1)$$

$$E2a = E2a - b * k * f(n1+n, m1+m+1, k1+k-2) - c * m * f(n1+n, m1+m, k1+k-1)$$

c

$$E2b = m * k * f(n1+n, m1+m-2, k1+k) + b * c * f(n1+n, m1+m-1, k1+k+1)$$

$$E2b = E2b - b * k * f(n1+n, m1+m-1, k1+k) - c * m * f(n1+n, m1+m-2, k1+k+1)$$

c

$$E2c = -m * k * f(n1+n+2, m1+m-2, k1+k-2) - b * c * f(n1+n+2, m1+m-1, k1+k-1)$$

$$E2c = E2c + b * k * f(n1+n+2, m1+m-1, k1+k-2) + c * m * f(n1+n+2, m1+m-2, k1+k-1)$$

c

$$E2 = E2a + E2b + E2c$$

c-----

c

$$Hij = -(A1 + A2 + 1 * B1 + 1 * B2 + 2 * A12 + 2 * B12 + E1 + E2) / 2$$

c

$$Hij = Hij - 2 * f(n1+n-1, m1+m, k1+k) - 2 * f(n1+n, m1+m-1, k1+k)$$

$$Hij = Hij + f(n1+n, m1+m, k1+k-1)$$

c

$$H(i,j) = Hij$$

$$S(i,j) = f(n1+n, m1+m, k1+k)$$

c

31 continue

21 continue

11 continue

c

30 continue

20 continue

10 continue

c

RETURN

END

```

function hint(p1,p2,p3)
implicit double precision(a-h,o-z)
common a,b,c, coef(0:100,0:100)
integer p1,p2,p3
c
two=2
c
if(p1.lt.-1.or.p2.lt.-1.or.p3.lt.-1) then
  hint = 0
  go to 99
endif
c
nb=int((p1+2)/2)
mb=int((p2+2)/2)
kb=int((p3+2)/2)
c
  hint=0
do 10 n=nb, p1+1
do 20 m=mb,p2+1
do 30 k=kb,p3+1
  term=coef(p1+1,n)*coef(p2+1,m)*coef(p3+1,k)*uwz(n,m,k,a,c)
  term=term*a**(2*n-p1-1)*b**(2*m-p2-1)*c**(2*k-p3-1)
  hint = hint + term
30  continue
20  continue
10  continue
c
  hint = (-1)**(p1+p2+p3+3)*hint/two**(p1+p2+p3+3)
c
99 RETURN
END
c*****
function uwz(u,w,z,a,c)

```

```

implicit double precision(a-h,o-z)
integer u,w,z
c
alfa = 4*c**2 - 4*a**2
one = 1
two=2
pi = 4*atan(one)
n=u+w+1
m=z
Cuwz = 2*pi**2*dfac(u-1)*dfac(w-1)*dfac(z-1)*(-two)**(u+w+z)
c
if(a.eq.c) then
  p = u+w+z+one/2
  uwz = Cuwz/(p*(4*a**2)**p)
  go to 99
endif
c
if (z.eq.0) then
  uwz= 2*Cuwz*yint(alfa,c,n)
  go to 99
endif
c
  term1 = 0
do 10 k=0, n-1
  dummy = fac(n-1)*fac(n+m-k-2)/(fac(n-k-1)*(-alfa)**(n+m-k-1))
  dummy = dummy*yint(alfa,c,k+1)
  term1 = term1 + dummy
10 continue
  term1 = (-1)**m*term1
c
  term2 = 0
do 11 k=0, m-1
  dummy = fac(m-1)*fac(n+m-k-2)/(fac(m-k-1)*(alfa)**(n+m-k-1))

```



```

dummy = dummy/((2*k+1)*(2*c)**(2*k+1))
term2 = term2 + dummy
11 continue
term2 = (-1)**n*term2
c
uwz = 2*Cuwz*(term1+term2)/(fac(n-1)*fac(m-1))
c
99 RETURN
END
c*****
function yint(alfa,c,kk)
implicit double precision(a-h,o-z)
c
one =1
pi=4*atan(one)
aa = 4*c**2 - alfa
c
if(alfa.lt.0) then
sq=sqrt(-alfa)
sb = ( pi/2 - atan(2*c/sq) )/sq
endif
if(alfa.gt.0) then
sq=sqrt(alfa)
sb = log((2*c+sq)/(2*c-sq))/(2*sq)
endif
c
do 10 n = 1, kk-1
sa = ( -1 + one/(2*n) )*sb +c/( n*(aa)**n )
sa = sa/alfa
sb = sa
10 continue
yint = sb
c

```

```

RETURN
END
c*****
SUBROUTINE coeff(coef,ncoef)
implicit double precision(a-h,o-z)
c
dimension coef(0:100,0:100)
c
coef=0
coef(0,0)=1
coef(1,1)=2
c
do 20 n=1, ncoef-1
do 30 j=int((n+2)/2),n+1
coef(n+1,j) = (2*j-n)*coef(n,j) + 2*coef(n,j-1)
30 continue
20 continue
c
RETURN
END
c*****
c
function fac(n)
implicit double precision(a-h,o-z)
c
if(n.lt.0) then
write(*,*) 'problem in fac'
stop
endif
c
if(n.eq.0) then
fac=1
go to 99

```

```

endif
  fac=1
do 10 i=1,n
  fac=fac*i
10 continue
c
99 return
end
c*****
function dfac(n)
implicit double precision(a-h,o-z)
c
if(n.lt.-1) then
  write(*,*) 'problem in dfac'
  stop
endif
c
if(n.eq.-1) then
  dfac=1
  return
endif
c
dfac=1
do 10 i=1,2*n+1,2
  dfac=dfac*i
10 continue
c
RETURN
END
c*****
function comb(n,m)
implicit double precision(a-h,o-z)

```

```

c
  if(n.lt.0.or.m.lt.0.or.m.gt.n) then
    write(*,*) 'problem in comb'
    stop
  endif
c
  comb = fac(n)/( fac(m)*fac(n-m) )
c
  return
  end
c*****
C   SUBROUTINE EWEVGE [16]
C*****
C   This is a collection of subroutines designated to solve the real
C   general symmetric eigenvalue problem with or without eigenvectors.
C   The routines have been taken from different freeware FORTRAN
C   libraries and optimized by hand (or eye ?! ;-)). Most of the
C   optimizations have been done with respect to stride minimization
C   for the innermost loops of the subroutines. Problems with
C   bugs, roaches and other livestock please report to
C
C   Dirk Porezag  porezag@physik.tu-chemnitz.de
C
C   And please c.c. to Arkady Krashennikov akrashen@beam.helsinki.fi
C
C   or to your nearest pest control agency (I doubt they will help).
C   Have fun !!
C
C   Copyright for this file by Dirk Porezag
C   Washington, DC, January 8th, 1995
C
C *****
C   SUBROUTINE EWEVGE

```

```

C =====
C *****
C
C Eevege calculates eigenvalues and eigenvectors of the general
C symmetric eigenvalue problem.
C
C Method: *  $A*C = E*S*C$ 
C          * Choleski decomposition  $S = R'*R$ 
C          *  $A*C = E*R'*R*C \rightarrow INV(R')*A*C = E*R*C$ 
C          * Transformation  $Y = R*C \rightarrow C = INV(R)*Y$ 
C          * Solve  $INV(R')*A*INV(R)*Y = E*Y$  (Householder + IQL)
C          * Back transformation  $C = INV(R)*Y$ 
C          * Sorting of eigenvalues and eigenvectors
C
C Parameters:
C
C NA (I) : Dimension of A
C NB (I) : Dimension of B
C N (I) : Dimension of Problem
C A (I) : Matrix A (lower triangle)
C (O) : Eigenvector matrix
C B (I) : Matrix B (lower triangle)
C (O) : R where  $B = R'*R$  (upper triangle)
C EW (O) : Eigenvalues
C H (-) : Auxiliary vector
C IEV (I) : 0: No eigenvectors
C IORD (I) : 1: Descending order of eigenvalues
C          -1: Ascending order of eigenvalues
C          otherwise: no sorting
C IER (O) : Error indication
C          0: No error
C          K: ( $K \leq N$ ) B is not positive definite
C          K: ( $K > N$ ) Convergence failure for eigenvalue

```

```

C          (K-N), (K-N-1) eigenvalues are correct
C *****
C
C      SUBROUTINE EWEVGE (NA,NB,N,A,B,EW,H,IEV,IORD,IER)
C          IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C          DIMENSION A(NA,N),B(NB,N),EW(N),H(N)
C
C          IER = 0
C          EPS = 0.0
C          CALL CHOLES(N,B,NB,IER)
C          IF (IER .NE. 0) RETURN
C          CALL MATRAF(N,A,NA,B,NB,H)
C          CALL TRIDIA(NA,N,EW,H,A,IEV)
C          CALL IQLDIA(NA,N,EW,H,A,IEV,IER)
C          IF (IER .GT. 0) IER = IER+N
C          IF (IER .NE. 0) RETURN
C          IF (IEV .NE. 0) CALL BACKTR(N,N,B,NB,A,NA,A,NA,H)
C          II = 0
C          IF (IEV .NE. 0) II = 1
C          CALL SORTVC(NA,N,N,EW,A,IORD,II,H)
C          RETURN
C      END
C
C *****
C
C      SUBROUTINE CHOLES
C          =====
C
C *****
C
C      Choles calculates the Choleski decomposition  $B = R' * R$  of B
C      into an upper triangle matrix R for the symmetric positive
C      definite Matrix B. The elements of the main diagonal are

```

```

C stored inverted.
C Parameters:
C
C N (I) : Dimension of problem
C B (I) : Matrix B (lower triangle)
C (O) : Matrix R (upper triangle), inverted main diagonal
C NB (I) : Dimension of B
C ICHO (I) : ICHO - 1 is the dimension of the submatrix that
C is available as Choleski decomposition ( < 1 = 1)
C (O) : Row number where decomposition failed (0 if success)
C
C *****
C
SUBROUTINE CHOLES (N,B,NB,ICHO)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION B(NB,N)
C
IF (ICHO .GT. N) GOTO 200
IF (ICHO .LT. 1) ICHO = 1
DO 80 I = ICHO,N
I1 = I - 1
DO 70 J = I,N
S = B(J,I)
DO 20 K = 1,I1
S = S - B(K,I) * B(K,J)
20 CONTINUE
IF (I .NE. J) GOTO 40
IF (S .LE. 0.0) GOTO 100
S = 1.0 / SQRT(S)
D = S
GOTO 60
40 S = S * D
60 B(I,J) = S

```

```

70 CONTINUE
80 CONTINUE
   ICHO = 0
   GOTO 200
100 ICHO = I
200 RETURN
   END

```

```

C
C *****
C
C SUBROUTINE MATRAF
C =====
C *****
C
C Matraf calculates out of the symmetric matrix A and the
C upper triangular matrix R the product  $INV(R') * A * INV(R)$ ,
C where the main diagonal of R is given inverted.
C
C Parameters:
C
C N (I) : Dimension of problem
C A (I) : Matrix A (lower triangle)
C (O) : Transformed matrix (lower triangle)
C NA (I) : Dimension of A
C B (I) : Matrix R (upper triangle), inverted main diagonal
C NB (I) : Dimension of B
C
C *****
C
C SUBROUTINE MATRAF (N,A,NA,B,NB,H)
C IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C DIMENSION A(NA,N),B(NB,N),H(N)
C

```


C FILL MATRIX

DO 20 I = 1,N

DO 10 J = I+1,N

A(I,J) = A(J,I)

10 CONTINUE

20 CONTINUE

C

C CALCULATION OF $A = \text{INV}(R') * A$

C

DO 60 I = 1,N

I1 = I-1

D = B(I,I)

DO 50 J = 1,N

S = A(I,J)

DO 30 K = 1,I1

S = S - B(K,I) * A(K,J)

30 CONTINUE

A(I,J) = S * D

50 CONTINUE

60 CONTINUE

C

C CALCULATION OF $A = A * \text{INV}(R)$ (USE BUFFER FOR STRIDE OPTIMIZATION)

C

DO 160 I = 1,N

I1 = I-1

D = B(I,I)

DO 110 J = I,N

H(J) = A(J,I)

110 CONTINUE

DO 130 K = 1,I1

S = B(K,I)

DO 120 J = I,N

```

        H(J) = H(J) - S * A(J,K)
120    CONTINUE
130    CONTINUE
        DO 140 J = I,N
            A(J,I) = H(J) * D
140    CONTINUE
160    CONTINUE
        RETURN
    END

C
C *****
C
C  SUBROUTINE TRIDIA
C  =====
C
C *****
C
C  Tridiagonalization of a given symmetric matrix A using Householder
C
C  Parameters:
C
C  NM   (I) : Dimension of A
C  N    (I) : Dimension of problem
C  D    (O) : Diagonal of tridiagonal matrix
C  E    (O) : Subdiagonal of tridiagonal matrix (E(1) = 0.0)
C  A    (I) : Matrix A (lower triangle)
C        (O) : Transformation Matrix
C  IEV  (I) : 0: No eigenvectors
C *****
C
SUBROUTINE TRIDIA (NM,N,D,E,A,IEV)
    IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
    DIMENSION A(NM,N),D(N),E(N)

```

```

C
  DO 100 I = 1,N
    D(I) = A(N,I)
100  CONTINUE
    IF (N .EQ. 1) GOTO 510
C
C FOR I = N STEP -1 UNTIL 2 DO
C
  DO 300 II = 2,N
    I = N + 2 - II
    L = I - 1
    H = 0.0
    SCALE = 0.0
    IF (L .LT. 2) GOTO 130
C
C SCALE ROW
C
  DO 120 K = 1,L
    SCALE = SCALE + ABS(D(K))
120  CONTINUE
C
  IF (SCALE .NE. 0.0) GOTO 140
130  E(I) = D(L)
    DO 135 J = 1,L
      D(J) = A(L,J)
      A(I,J) = 0.0
      A(J,I) = 0.0
135  CONTINUE
    GOTO 290
C
140  DO 150 K = 1,L
    D(K) = D(K) / SCALE
    H = H + D(K) * D(K)

```

```

150  CONTINUE
      F = D(L)
      G = -SIGN(SQRT(H),F)
      E(I) = SCALE * G
      H = H - F * G
      D(L) = F - G
C
C FORM A * U
C
      DO 170 J = 1,L
          E(J) = 0.0
170  CONTINUE
      DO 240 J = 1,L
          F = D(J)
          A(J,I) = F
          G = E(J) + A(J,J) * F
          JP1 = J + 1
          DO 200 K = JP1,L
              G = G + A(K,J) * D(K)
              E(K) = E(K) + A(K,J) * F
200  CONTINUE
          E(J) = G
240  CONTINUE
C
C FORM P
C
      F = 0.0
      DO 245 J = 1,L
          E(J) = E(J) / H
          F = F + E(J) * D(J)
245  CONTINUE
      HH = F / (H + H)
C

```

C FORM Q

DO 250 J = 1,L

E(J) = E(J) - HH * D(J)

250 CONTINUE

C

C FORM REDUCED A

C

DO 280 J = 1,L

F = D(J)

G = E(J)

DO 260 K = J,L

A(K,J) = A(K,J) - F * E(K) - G * D(K)

260 CONTINUE

D(J) = A(L,J)

A(I,J) = 0.0

280 CONTINUE

C

C DONE WITH THIS TRANSFORMATION

C

290 D(I) = H

300 CONTINUE

C

C ACCUMULATION OF TRANSFORMATION MATRICES

C

IF (IEV .EQ. 0) GOTO 600

DO 500 I = 2,N

L = I - 1

A(N,L) = A(L,L)

A(L,L) = 1.0

H = D(I)

IF (H .EQ. 0.0) GOTO 380

DO 330 K = 1,L

D(K) = A(K,I) / H

```

330  CONTINUE
      DO 360 J = 1,L
          G = 0.0
          DO 340 K = 1,L
              G = G + A(K,I) * A(K,J)
340  CONTINUE
          DO 350 K = 1,L
              A(K,J) = A(K,J) - G * D(K)
350  CONTINUE
360  CONTINUE
C
380  DO 400 K = 1,L
          A(K,I) = 0.0
400  CONTINUE
500  CONTINUE
510  DO 520 I = 1,N
          D(I) = A(N,I)
          A(N,I) = 0.0
520  CONTINUE
      GOTO 700
C
C DEAL WITH EIGENVALUES ONLY
C
600  DO 610 I = 1,N
          D(I) = A(I,I)
610  CONTINUE
C
700  A(N,N) = 1.0
      E(1) = 0.0
      RETURN
      END
C
C *****

```

```

C
C  SUBROUTINE IQLDIA
C  =====
C
C *****
C
C  Iqldia calculates eigenvalues and eigenvectors of a tridiagonal
C  matrix using the QL algorithm with implicit shifting.
C
C  Parameters:
C
C  NM  (I) : Dimension of Z
C  N   (I) : Dimension of the problem
C  D   (I) : Diagonal of tridiagonal matrix
C      (O) : Eigenvalues
C  E   (I) : Subdiagonal of tridiagonal matrix
C  Z   (I) : Transformation matrix
C      (O) : Eigenvectors according to Z
C  IEV (I) : 0: No eigenvectors
C  IER (O) : Error indication
C          0: no error
C          K: Convergence failure for the eigenvalue
C             number k, k-1 eigenvalues are correct
C
C *****
C
C  SUBROUTINE IQLDIA (NM,N,D,E,Z,IEV,IER)
C  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C  DIMENSION D(N),E(N),Z(NM,N)
C
C  IER = 0
C  IF (N .EQ. 1) RETURN
C

```

C GET MACHINE EPSILON AND BIG

EPS = 1.0E-2

10 IF ((1.0 + EPS) .EQ. 1.0) GOTO 20

EPS = 0.5 * EPS

GOTO 10

20 EPS = 2.0 * EPS

EPSS = SQRT(EPS)

EPS4 = EPS * 1.0E-4

BIG = 1.0/EPSS

C

ANORM = 0.0

R = 0.0

DO 30 I = 2, N

S = E(I)

E(I-1) = S

S = ABS(S)

P = ABS(D(I-1)) + R + S

IF (P .GT. ANORM) ANORM = P

R = S

30 CONTINUE

P = ABS(D(N)) + R

IF (P .GT. ANORM) ANORM = P

E(N) = 0.0

DO 250 L = 1, N

J = 0

C

C LOOK FOR SMALL SUBDIAGONAL ELEMENT

C

50 DO 60 M = L, N-1

DD = ABS(D(M)) + ABS(D(M+1))

IF (ABS(E(M)) .LE. (EPS * DD)) GOTO 70

IF (ABS(E(M)) .LE. (EPS4 * ANORM)) GOTO 70

60 CONTINUE


```

M = N
70  P = D(L)
    MM1 = M - 1
    IF (M .EQ. L) GOTO 250
    IF (J .EQ. 30) GOTO 900
    J = J + 1

```

C

C FORM SHIFT. THIS IS A SLIGHTLY ADVANCED FORM OF SHIFTING
 MAKING

C THE ROUTINE ABOUT 20 PERCENT FASTER THAN THE USUAL STUFF.

C

```

    G = (D(L+1) - P) / (2.0 * E(L))
    R = SQRT (G * G + 1.0)
    S = P - E(L) / (G + SIGN (R, G))
    IF (M .EQ. L+1) GOTO 120
    T = S
    R = MAX(ABS(S),(ANORM / N))
    DO 100 I = 1, 6
        PSI = D(M) - T
        PSJ = -1.0
        DO 90 KK = L, MM1
            K = L + MM1 - KK
            IF (ABS(PSI) .GE. (EPS * ABS(E(K)))) GOTO 80
            PSI = BIG
            PSJ = BIG * BIG
        GOTO 90
80    P = E(K) / PSI
        PSI = D(K) - T - P * E(K)
        PSJ = P * P * PSJ - 1.0
90    CONTINUE
        IF (ABS(PSJ) .LE. EPS4) GOTO 120
        P = PSI / PSJ
        C = P

```

```

        IF (ABS(P) .GT. (0.5 * R)) C = SIGN(R,P)
        T = T - C
        IF (ABS(P) .LE. (EPSS * R)) GOTO 110
100   CONTINUE
        GOTO 120
110   S = T
120   G = D(M) - S
        S = 1.0
        C = 1.0
        P = 0.0
        MML = M - L
C
C FOR I = M - 1 STEP -1 UNTIL L DO
C
        DO 200 II = 1, MML
            I = M - II
            F = S * E(I)
            B = C * E(I)
C
C SAFE CALCULATION OF SQRT(G * G + F * F) AND SIMILAR STUFF
C
        IF (ABS(F) .LT. ABS(G)) GOTO 150
        C = G / F
        R = SQRT(1.0 + C * C)
        E(I+1) = F * R
        S = 1.0 / R
        C = C * S
        GOTO 160
150   S = F / G
        R = SQRT (1.0 + S * S)
        E(I+1) = G * R
        C = 1.0 / R
        S = S * C

```

```

160   G = D(I+1) - P
      R = (D(I) - G) * S + 2.0 * C * B
      P = S * R
      D(I+1) = G + P
      G = C * R - B
      IF (IEV .EQ. 0) GOTO 200

```

C

C FORM VECTOR

C

```

      DO 180 K = 1,N
        F = Z(K,I+1)
        B = Z(K,I)
        Z(K,I+1) = S * B + C * F
        Z(K,I) = C * B - S * F

```

180 CONTINUE

200 CONTINUE

```

      D(L) = D(L) - P
      E(L) = G
      E(M) = 0.0
      GOTO 50

```

250 CONTINUE

RETURN

900 IER = L

RETURN

END

C

C *****

C

C This is another version of Iqldia using a less sophisticated
C shifting algorithm. It is much simpler but 20 percent slower.

C

C *****

C

```

C  SUBROUTINE IQLDIA (NM,N,D,E,Z,IEV,IER)
C  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C  DIMENSION D(N),E(N),Z(NM,N)
C
C  IER = 0
C  IF (N .EQ. 1) RETURN
C  DO 10 I = 2, N
C    E(I-1) = E(I)
C 10  CONTINUE
C  E(N) = 0.0
C  DO 250 L = 1, N
C    ITER = 0
C
C  LOOK FOR SMALL SUBDIAGONAL ELEMENT
C
C 100  DO 110 M = L, N-1
C    DD = ABS(D(M)) + ABS(D(M+1))
C    IF ((ABS(E(M)) + DD) .EQ. DD) GOTO 120
C 110  CONTINUE
C    M = N
C 120  IF (M .EQ. L) GOTO 250
C    IF (ITER .EQ. 30) GOTO 900
C    ITER = ITER + 1
C
C  FORM SHIFT
C
C    G = (D(L+1) - D(L)) / (2.0 * E(L))
C    R = SQRT (G * G + 1.0)
C    G = D(M) - D(L) + E(L) / (G + SIGN(R,G))
C    S = 1.0
C    C = 1.0
C    P = 0.0
C

```

```

C FOR I = M - 1 STEP -1 UNTIL L DO
C   DO 200 II = 1, M-L
C   I = M - II
C   F = S * E(I)
C   B = C * E(I)
C
C SAFE CALCULATION OF SQRT(G * G + F * F) AND SIMILAR STUFF
C
C   IF (ABS(F) .LT. ABS(G)) GOTO 150
C   C = G / F
C   R = SQRT(1.0 + C * C)
C   E(I+1) = F * R
C   S = 1.0 / R
C   C = C * S
C   GOTO 160
C 150   S = F / G
C   R = SQRT (1.0 + S * S)
C   E(I+1) = G * R
C   C = 1.0 / R
C   S = S * C
C 160   G = D(I+1) - P
C   R = (D(I) - G) * S + 2.0 * C * B
C   P = S * R
C   D(I+1) = G + P
C   G = C * R - B
C   IF (IEV .EQ. 0) GOTO 200
C
C FORM VECTOR
C
C   DO 180 K = 1, N
C   F = Z(K,I+1)
C   Z(K,I+1) = S * Z(K,I) + C * F
C   Z(K,I) = C * Z(K,I) - S * F

```

```

C 180  CONTINUE
C 200  CONTINUE
C     D(L) = D(L) - P
C     E(L) = G
C     E(M) = 0.0
C     GOTO 100
C 250  CONTINUE
C     RETURN
C 900  IER = L
C     RETURN
C     END
C
C *****
C
C  SUBROUTINE BACKTR
C  =====
C
C *****
C
C Backtr solves the system  $R * X = Y$  (R upper triangular matrix),
C where the main diagonal of R is given inverted.
C
C Parameters:
C  N   (I) : Dimension of problem
C  M   (I) : Number of columns in X and Y
C  R   (I) : Matrix R (upper triangle)
C  NR  (I) : Dimension of R
C  X   (O) : Matrix X (solution of system)
C  NX  (I) : Dimension of X
C  Y   (I) : Matrix Y (right side)
C  NY  (I) : Dimension of Y
C  H   (I) : Auxiliary vector
C

```

C *****

SUBROUTINE BACKTR (N,M,R,NR,X,NX,Y,NY,H)

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

DIMENSION R(NR,N),X(NX,M),Y(NY,M),H(N)

C

C CALCULATION OF X = INV(R) * Y

C

DO 40 II = 1,N

I = N + 1 - II

II = I + 1

D = R(I,I)

DO 10 J= I,N

H(J)= R(I,J)

10 CONTINUE

DO 30 J = 1,M

S = Y(I,J)

DO 20 K = II,N

S = S - H(K) * X(K,J)

20 CONTINUE

X(I,J) = S * D

30 CONTINUE

40 CONTINUE

RETURN

END

C *****

C

C SUBROUTINE SORTVC

C =====

C

C *****

C

C Sortvc sorts D and (if required) E and the columns of Q.

C

```

C  Prameters:
C  NM   (I) : Dimension of Q
C  N    (I) : Dimension of problem (size of one vector in Q)
C  NQ   (I) : Number of elements in D (or columns in Q)
C  D    (I) : Vector to sort
C       (O) : Sorted vector
C  Q    (I) : Matrix to sort (vectors in columns)
C       (O) : Sorted matrix (vectors in columns)
C  M    (I) : 1: Descending order in D
C       -1: Ascending order in D
C       otherwise: no sorting
C  IEV  (I) : 0: No sorting of Q and E
C       1: Sorting of Q, no sorting of E
C       2: Sorting of Q and E
C  E    (I) : Additional Vector to sort
C       (O) : Sorted additional vector
C
C *****
C
SUBROUTINE SORTVC (NM,N,NQ,D,Q,M,IEV,E)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  LOGICAL  LMIN,LMAX
  DIMENSION D(NQ),E(NQ),Q(NM,NQ)
  IF (NQ .LT. 2) RETURN
  LMAX = (M .EQ. 1)
  LMIN = (M .EQ. -1)
  IF (.NOT. (LMAX .OR. LMIN)) RETURN
  DO 40 KK = 2,NQ
    K = KK - 1
    J = K
    H = D(K)
C
C FIND EXTREMUM

```



```

C
DO 10 I = KK,NQ
  S = D(I)
  IF (LMIN .AND. (S .GE. H)) GOTO 10
  IF (LMAX .AND. (S .LE. H)) GOTO 10
  J = I
  H = S
10  CONTINUE
  IF (J .EQ. K) GOTO 40
C
C SORT D
C
  D(J) = D(K)
  D(K) = H
  IF (IEV .EQ. 0) GOTO 40
C
C SORT Q
C
  DO 20 I = 1,N
    H = Q(I,K)
    Q(I,K) = Q(I,J)
    Q(I,J) = H
20  CONTINUE
  IF (IEV .LT. 2) GOTO 40
C
C SORT E
C
  H = E(K)
  E(K) = E(J)
  E(J) = H
40  CONTINUE
  RETURN
  END

```

C

C*****

SUBROUTINE SWAP(X,Y)

IMPLICIT NONE

REAL*8 X,Y,TEMP

TEMP=X

X=Y

Y=TEMP

RETURN

END

C*****

SUBROUTINE ISWAP(I,J)

IMPLICIT NONE

INTEGER I,J,TEMP

TEMP=I

I=J

J=TEMP

RETURN

END

3. BULGULAR

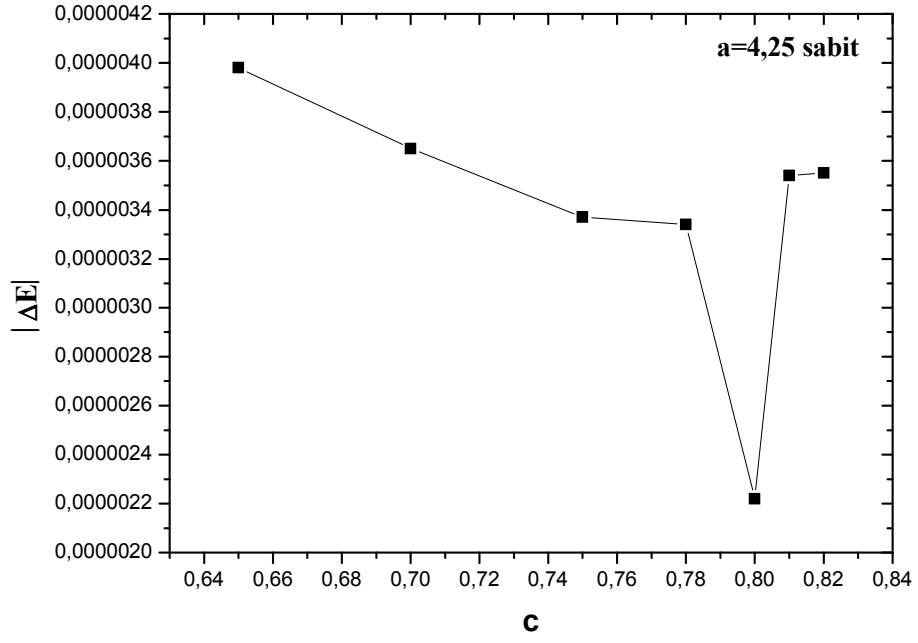
Bilgisayar yazılım programlama dillerinden olan Fortran 95 kullanılarak helyum atomunun taban durum enerjisi, a ve c parametreleri, NN, MM ve KK değerleri için hesaplanmıştır. Bu değerlere bağlı olan dalga fonksiyonu ise aşağıdaki gibidir.

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = e^{-ar_1-br_2-cr_{12}} \sum_{n=0}^{NN} \sum_{m=0}^{MM} \sum_{k=0}^{KK} C_{nmk} r_1^n r_2^m r_{12}^k \quad (105)$$

Sonuçlar atomik birimlerde elde edilmiştir ve aşağıdaki tablolarda gösterilmiştir.

Tablo 1. NN=4, MM=4, KK=3, a=4,25 ve c değerleri için helyum atomunun taban durum enerjisi ve Hilico ve arkadaşlarının [16] çalışmasıyla karşılaştırılarak elde edilen enerji farkları.

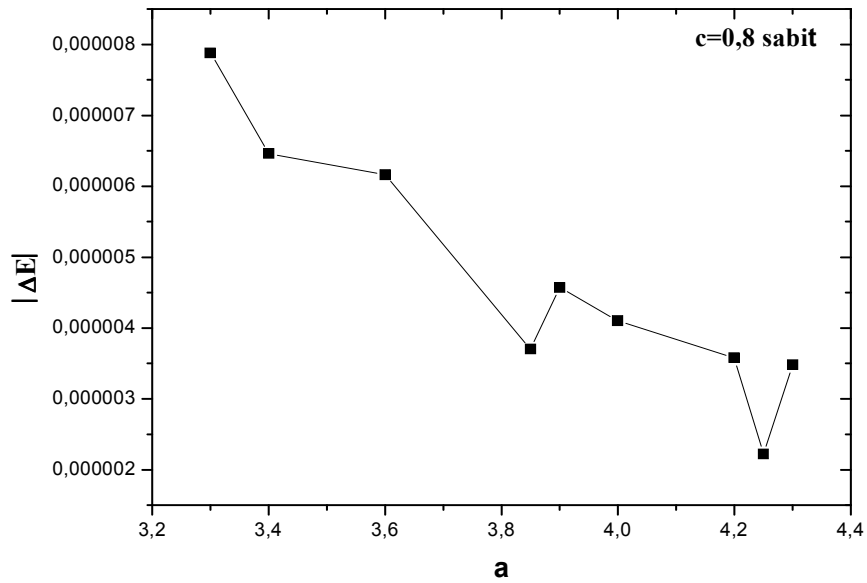
c	E	\Delta E
0,65	-11,8998182526	0,00000398
0,7	-11,8998185834	0,00000365
0,75	-11,8998188667	0,00000337
0,78	-11,8998188942	0,00000334
0,8	-11,8998200113	0,00000222
0,81	-11,8998186996	0,00000354
0,82	-11,8998186841	0,00000355



Şekil 2. NN=4, MM=4, KK=3 ve a=4,25 değerleri için $|\Delta E|$ ' nin c' ye göre değişimi.

Tablo 2. NN=4, MM=4, KK=3, c=0,8 ve a değerleri için helyum atomunun taban durum enerjisi ve Hilico ve arkadaşlarının [16] çalışmasıyla karşılaştırılarak elde edilen enerji farkları.

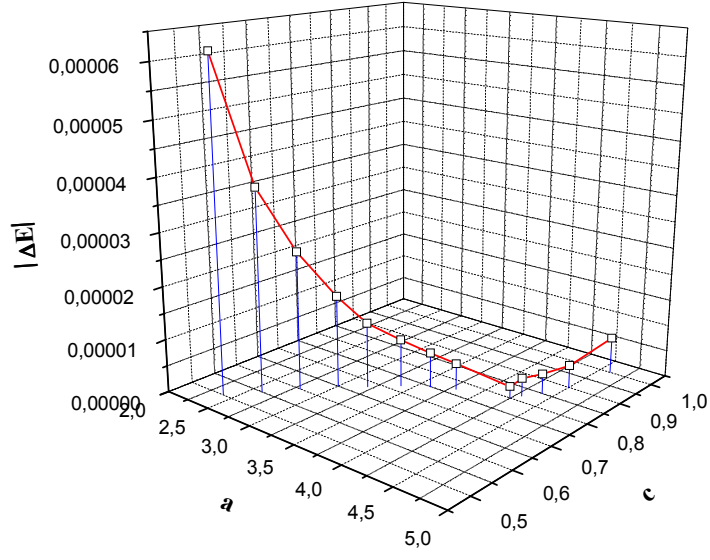
a	E	$ \Delta E $
3,3	-11,8998143523	0,00000788
3,4	-11,8998157787	0,00000646
3,6	-11,8998160759	0,00000616
3,85	-11,8998185308	0,00000370
3,9	-11,8998176665	0,00000457
4	-11,8998181430	0,00000410
4,2	-11,8998186564	0,00000358
4,25	-11,8998200113	0,00000222
4,3	-11,8998187579	0,00000348



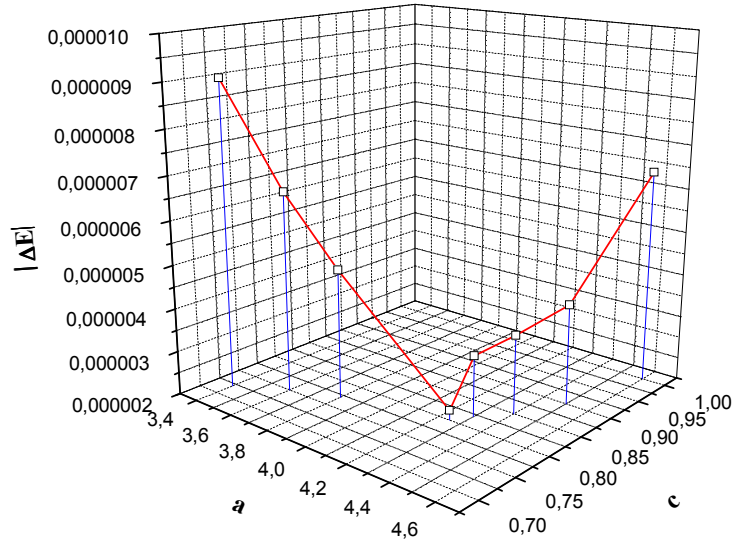
Şekil 3. NN=4, MM=4, KK=3 ve c=0,8 değerleri için $|\Delta E|$ ' nin a' ya göre değişimi.

Tablo 3. NN=4, MM=4, KK=3, a ve c deęerleri iin helyum atomunun taban durum enerjisi ve Hilico ve arkadaşlarının [16] alıřmasıyla karřılařtırılarak elde edilen enerji farkları.

a	c	E	ΔE
1	0,2	-11,8638406718	0,036
1,2	0,25	-11,8898367739	0,0099
1,4	0,3	-11,8967210098	0,0031
1,6	0,35	-11,8987410192	0,00108
1,8	0,4	-11,8993974712	0,000425
2,2	0,45	-11,8997143572	0,000108
2,4	0,5	-11,8997602405	0,000062
2,6	0,55	-11,8997839333	0,0000383
2,8	0,6	-11,8997960470	0,0000262
3	0,65	-11,8998048417	0,0000174
3,2	0,68	-11,8998098313	0,0000124
3,4	0,72	-11,8998132129	0,00000902
3,6	0,75	-11,8998156216	0,00000661
3,8	0,77	-11,8998172684	0,00000497
4,25	0,8	-11,8998200113	0,00000222
4,3	0,82	-11,8998188432	0,0000034
4,4	0,85	-11,8998184423	0,0000038
4,5	0,9	-11,8998179305	0,0000043
4,6	1	-11,8998153256	0,0000069



Şekil 4. NN=4, MM=4, KK=3 değerleri için $|\Delta E|$ ' nin a ve c' ye göre değişimi.



Şekil 5. NN=4, MM=4, KK=3 değerleri için $|\Delta E|$ ' nin a ve c' ye göre değişimi.

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

İki boyutta helyum atomunun taban durum enerji değerinin hesaplamasında elde edilen çözümler NN, MM, KK, a ve c değerlerine karşılık elde edilmiştir. Tablolarda verilen sonuçlar Hilico ve arkadaşlarının [16] yaptığı çalışmadaki helyum atomunun taban durumunun enerji değerine kıyasla 7 basamak uyumaktadır. Tablo 1’de NN=4, MM=4, KK=3 ve a=4,25 değerleri için c değerini artırarak elde edilen enerji değeri c=0,8 değerinde diğer değerlere kıyasla Hilico ve arkadaşlarının çalışmasıyla biraz daha uyum içerisinde olmaktadır. Bu çalışmada bizim bulduğumuz enerji değeri en iyi şekilde -11,8998200113 atomik birimdir ve şekil 2’deki gibi çizildi. Tablo 2’de ise NN=4, MM=4, KK=3 ve c=0,8 değerleri için a değerini artırılarak elde edilen enerji değeri a=4,25 değerinde en iyi şekilde bulundu ve şekil 3’deki gibi çizildi. Tablo 3’de ise NN=4, MM=4, KK=3 değerleri için a ve c değerleri birlikte artırılarak taban durum enerji değerleri bulundu ve bu değerler şekil 4-5’deki gibi çizildi. Hilico ve arkadaşlarının bulduğu enerji değeri ise -11,899822342953 atomik birim olarak elde edildi [16].

5. ÖNERİLER

Bu çalışmada hesaplamalar yapılırken Fortran 95 bilgisayar programlama dili kullanıldı. Hesaplamalar yapılırken başka bilgisayar yazılım programlama dilleri de kullanılabilir. Hesaplamalarda Fortran, C ++ veya başka programa dillerinde çok duyarlılık işlem yapan programlar kullanılarak iki boyutta helyum atomunun taban durum enerjisi bu çalışmada bulunan enerji değerinden 4 veya 5 kat daha hassaslıkta bulunabilir.

Bu çalışmada kullanılan yöntemin geliştirilmesi ile iki boyutta helyum atomunun uyarılmış enerji seviyeleri de hesaplanabilir.

KAYNAKLAR

- [1] Hylleraas, E. A., *Z Phys.* 54 (1929) 347.
- [2] Ruiz, M. B., Hylleraas Method for Many-Electron Atoms. I. The Hamiltonian, *International Journal of Quantum Chemistry*, 101 (2005) 246-260.
- [3] Slater, J. C., *Phys. Rev.*, 31 (1928) 333.
- [4] Schwartz, H. M., Ground-State Solution of the Nonrelativistic Equation for Helium, *Phys. Rev.*, 103 (1956) 110-111.
- [5] Kinoshita, T., Ground State of the Helium Atom, *Phys. Rev.*, 105 (1957) 1490-1502.
- [6] Pekeris, C. L., Ground State of Two-Electron Atoms, *Phys. Rev.*, 112 (1958) 1649-1658.
- [7] Kinoshita, T., Ground State of the Helium Atom. II., *Phys. Rev.*, 115 (1959) 366-374.
- [8] Schwartz, H. M., Ritz-Hylleraas Solutions of the Ground State of Two-Electron Atoms Involving Fractional Powers, *Phys. Rev.*, 120 (1960) 483-487.
- [9] Schwartz, C., Ground State of the Helium Atom, *Phys. Rev.*, 128 (1962) 1146-1148.
- [10] Frankowski, K. and Pekeris, C. L., Logarithmic Terms in the Wave Functions of the Ground State of Two-Electron Atoms, *Phys. Rev.*, 146 (1966) 46-49.
- [11] Radi, H. M. A., Improvement to wave functions and energy values of the ground state of helium, *Phys. Rev. A*, 12 (1975) 1137-1143.
- [12] Thakkar, A. J., Comments on explicitly correlated wave functions for the ground state of the helium atom, *Phys. Rev. A*, 16 (1977) 1740-1742.
- [13] Korobov, V. I., Coulomb three-body bound state problem: Variational calculations of nonrelativistic energies, *Phys. Rev. A*, 61 (2000) 064503(1-3).
- [14] Calais, J. L. and Löwdin P. O., A Simple Method of Treating Atomic Integrals Containing Functions of r_{12} , *Journal of Molecular Spectroscopy*, 8 (1962) 203-211.
- [15] Harris, F. H., Recurrence Relations for Matrix Elements of Few-Body Correlated Wave Functions, *International Journal of Quantum Chemistry*, 105 (2005) 857-865.

- [16] Hilico, L., Gremaud, B., Jonckheere, T., Billy, N. and Delande, D., Quantum three-body Coulomb problem in two dimensions, *Phys. Rev. A*, 66 (2002) 022101(1-12).

ÖZGEÇMİŞ

1986 yılında Samsun'un Ladik ilçesinde doğdu. İlkokulunu Amasya'nın Suluova ilçesi Zübeyde Hanım İlköğretim Okulu'nda, orta ve lise eğitimini Fatih Lisesi'nde tamamladıktan sonra 2003 yılında Karadeniz Teknik Üniversitesi Rize Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nü kazandı. 2007 yılında lisans eğitimini tamamladı. Aynı yıl Karadeniz Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Tezli yüksek lisans eğitimini kazandı ve 2008 yılında İngilizce hazırlık eğitimi için gittiği Yabancı Diller Yüksek Okulu'ndan başarıyla mezun oldu. Aynı yıl Rize Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Tezli Yüksek Lisans eğitimini kazandı. 2009 yılında Rize Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'ne Araştırma Görevlisi olarak atandı. Halen bu görevine devam etmektedir.