

**T.C.
RECEP TAYYIP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**VARYASYONEL YÖNTEMLE İKİ BOYUTLU HELYUM ATOMU
TABAN DURUM ENERJİSİNİN YÜKSEK DUYARLILIKLA
HESAPLANMASI**

MESUT YILMAZ ESMER

**TEZ DANIŞMANI
PROF. DR. HASAN KARABULUT
TEZ JÜRİLERİ
PROF. DR. MEHMET ŞAHİN
YRD. DOÇ. DR. BARBAROS DİNÇER**

**YÜKSEK LİSANS TEZ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**RİZE-2015
Her hakkı saklıdır**

T.C.
RECEP TAYYİP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**VARYASYONEL YÖNTEMLE İKİ BOYUTLU HELYUM ATOMU TABAN
DURUM ENERJİSİNİN YÜKSEK DUYARLILIKLA HESAPLANMASI**

Prof. Dr. Hasan KARABULUT danışmanlığında, Mesut Yılmaz ESMER tarafından hazırlanan bu çalışma, Enstitü Yönetim Kurulu kararıyla oluşturulan jüri tarafından 29/06/2015 tarihinde Fizik Anabilim Dalı'nda YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Unvanı Adı Soyadı

İmzası

Başkan

: Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN

Mehmet Şahin

Üye

: Prof. Dr. Hasan KARABULUT

H. Karabulut

Üye

: Yrd. Doç. Dr. Barbaros DİNÇER

Barbaros Dinçer



Prof. Dr. Selami ŞAŞMAZ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü' de Yüksek Lisans tezi olarak hazırlanmıştır. Çalışmanın okuyucular için üç açıdan önemli olduğunu düşünüyorum. Bunlardan ilki, yarı iletken teknolojilerin ilerlemesi ile üretilmesi mümkün olan kuantum kuyuları ve kuantum telleri gibi düşük boyutlu sistemleri çalışmak için bir başlangıç noktası olabilir. İkincisi, son derece zarif bir şekilde analitik olarak hesaplanan radyan integralin tam bir ders niteliğinde olduğunu düşünüyorum. Sonuncusu ve en önemlisi, çalışılan konunun helyum atomu için Schrödinger denkleminin çözümü ile ilgili olmasıdır. Çünkü helyum atomu tam olarak çözülemeyen çok elektronlu sistemlerin en basitidir ve bir çözüm arayışı atom fiziğinin en önemli problemlerinden biridir.

Hem bu problemin seçiminde öncülük ettiği hem de yardımlarından dolayı sayın Prof. Dr. Hasan KARABULUT'a, Yüksek Lisans Eğitimim boyunca yardımlarını ve desteğini esirgemeyen sayın Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN' e ve Lisans eğitimimden beri üzerimde büyük emekleri olan değerli hocam sayın Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU' a ve tüm diğer hocalarıma sonsuz teşekkür ederim.

Bu çalışmada, gözümden kaçan noktalar varsa, onlar için özür diliyorum. En önemlisi okuyuculara ve ülkeye yararlı olmasını arzu ediyorum.

Mesut Yılmaz ESMER

TEZ ETİK BEYANNAMESİ

Tarafımdan hazırlanan *Varyasyonel Yöntemle İki Boyutlu Helyum Atomu Taban Durum Enerjisinin Yüksek Duyarlılıkla Hesaplanması* başlıklı bu tezin, Yükseköğretim Kurulu Bilimsel Araştırma ve Yayın Etiği Yönergesindeki hususlara uygun olarak hazırladığımı ve aksinin ortaya çıkması durumunda her türlü yasal işlemi kabul ettiğimi beyan ederim.
29/06/2015

İmza

Mesut Yılmaz ESMER

Uyarı: Bu tezde kullanılan özgün ve/veya başka kaynaklardan sunulan içeriğin kaynak olarak kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.

ÖZET

VARYASYONEL YÖNTEMLE İKİ BOYUTLU HELYUM ATOMU TABAN DURUM ENERJİSİNİN YÜKSEK DUYARLILIKLA HESAPLANMASI

Mesut Yılmaz ESMER

Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Ana Bilim Dalı

Yüksek Lisans Tezi

Danışman: Prof. Dr. Hasan KARABULUT

Schrödinger denkleminin tam olarak çözülemediği en basit sistemlerden biri atomik helyumdur. Ancak, yüksek hassasiyetli hesaplamalar için varyasyonel yöntemler gibi son derece etkili yaklaşımlar helyum atomuna uygulanabilir. Bu çalışmada, iki boyutlu helyum atomu taban durumu enerjisi varyasyonel yöntem kullanılarak, virgülden sonra birçok anlamlı rakamla hesaplandı. Örtüşme ve hamiltonyen matris elemanları analitik olarak elde edildi. Bu matris elemanlarının hesaplanmasında tüm parçacıklar arası uzunlukları içeren üssel bir baz fonksiyonu kullanıldı. Keyfi hassasiyetler için bir Python kütüphanesi olan Mpmath ile Python' da yeni bir multiprecision program yazıldı. Elde edilen en iyi taban durumu enerjisi **-11.899 822 342 649 616** a.b. dir ve bu değer literatürdeki değerler ile uyushmaktadır.

2015, 37 sayfa

Anahtar Kelimeler: İki Boyutlu Helyum Atom, Varyasyonel Yöntem, Taban Durumu Enerji

ABSTRACT

CALCULATION OF TWO DIMENSIONAL HELIUM ATOM GROUND STATE ENERGY USING VARIATIONAL METHODS WITH HIGH PRECISION CALCULATION

Mesut Yilmaz ESMER

Recep Tayyip Erdogan University
Graduate School Of Natural And Applied Sciences
Department of Physics
Master Thesis
Supervisor : Prof. Dr. Hasan KARABULUT

One of the simplest system, where Schrödinger equation cannot be solved exactly, is atomic helium. However, extraordinarily powerful approximations, like variational methods are available to helium for high precision calculations. In this study, two dimensional helium atom ground state energy using the variational method has been calculated to many significant digits. Overlap and hamiltonian matrix elements have been obtained analytically. A basis containing exponentials in all the interparticle distances have been used in calculation of these matrix elements. A new multiprecision program is written on Python with Mpmath which, is a pure - Python library for multiprecision floating-point arithmetic. The best ground state energy which have been obtained is **-11.899 822 342 649 616** and this result is compatible with the results in literature.

2015, 37 pages

Keywords: Variational Method , Two Dimensional Helium Atom, Ground State Energy.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	I
TEZ ETİK BEYANNAMESİ.....	II
ÖZET.....	III
ABSTRACT.....	IV
İÇİNDEKİLER.....	V
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	VI
TABLolar DİZİNİ.....	VII
SEMBOLLER ve KISALTMALAR DİZİNİ.....	VIII
1. GENEL BİLGİLER.....	1
1.1 Giriş.....	1
1.2 Literatür Özeti.....	3
2. YAPILAN ÇALIŞMALAR.....	5
2.1 Lineer Varyasyonel Yöntem.....	5
2.1 ∇_1 ve ∇_2 Operatörlerinin Çıkarılışı.....	7
2.3 Hamiltonyen ve Matris Elemanlarının Çıkarılışı.....	10
2.4 Radyal İntegralin Hesaplanması.....	13
2.5 Matematiksel Formüller.....	19
2.6 Programlama.....	21
3. BULGULAR.....	22
4. TARTIŞMA ve SONUÇLAR.....	23
5. ÖNERİLER.....	25
KAYNAKLAR.....	26
EKLER.....	28
ÖZGEÇMİŞ.....	38

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1. Helyum atomu için koordinat sistemi.....	1
Şekil 2. Varyasyonel yöntemle hesaplanan yaklaşık özdeğerlerin N ile değişimi.....	8

TABLULAR DİZİNİ

Tablo 1. Üç boyutta helyum için hesaplanan taban durum enerjisinin tarihsel özeti...4	
Tablo 2. NN = 5, MM = 5, KK = 5 için hesaplanan taban durum enerjisi.....24	
Tablo 3. NN = 10, MM = 10, KK = 10 için hesaplanan taban durum enerjisi24	
Tablo 4. NN = 11, MM = 10, KK = 10 için hesaplanan taban durum enerjisi25	
Tablo 5. Elde edilen taban durumu enerji değerlerinin özeti.....26	
Tablo 6. Bu çalışmanın diğer çalışmalar ile karşılaştırılması.....26	

SEMBOLELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

\hat{H}	: Hamiltonyen
ψ_D	: Deneme fonksiyonu
E_D	: Deneme fonksiyonu için yaklaşık taban durumu enerjisi
χ	: Baz fonksiyonu
m_e	: Elektronun kütlesi
ϵ_0	: Boşluğun geçirgenlik katsayısı
e	: Protonun yükü
P_{12}	: Permütasyon işlemcisi
h	: Planck sabiti
a.b.	: Atomik birim

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{M} \vec{\nabla}_1 \cdot \vec{\nabla}_2 - \frac{Ze^2}{4\pi \varepsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi \varepsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 r_{12}} \right] \psi = \varepsilon \psi \quad (3)$$

elde edilir. Burada indirgenmiş kütle $\mu = Mm/(m+M)$ ile tanımlanır. Sonsuz ağır kütle yaklaşımı için $-\frac{\hbar^2}{M} \vec{\nabla}_1 \cdot \vec{\nabla}_2$ terimi ihmal edilebildiğinden helyum benzeri atomlar için Schrödinger denklemi atomik birimlerde (a.b.)

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

ile ifade edilebilir.

Bu denklem iki elektronun koordinatı değiştirildiği zaman değişmez kalır. Yani $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ dalga fonksiyonu (4) denklemini sağlarsa

$$\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = P_{12} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (5)$$

dalga fonksiyonu da aynı denklemi sağlar. Burada P_{12} , birinci ve ikinci elektronun koordinatlarını değiştirmek için tanımlanmış permütasyon işlemcisidir. Ayrıca bu dalga fonksiyonları sadece bir λ çarpanı kadar birbirlerinden farklıdır:

$$\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = P_{12} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \lambda \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (6)$$

P_{12} işlemcisi iki kez uygulandığında

$$P_{12}^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \lambda P_{12} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (7)$$

$$P_{12}^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \lambda^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (8)$$

$$P_{12}^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (9)$$

ve buradan $\lambda = \pm 1$ olmak üzere

$$\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \pm \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (10)$$

olur. Bu denklemde $-$ işaretli dalga fonksiyonu uzaya göre antisimetriktir ve $\psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ gösterilir. Aynı şekilde $+$ işaretli dalga fonksiyonu uzaya göre simetriktir ve $\psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ gösterilir.

Öte yandan, iki elektronu sistemin en genel çözümü uzay ve spin dalga fonksiyonlarının çarpımından oluşur. Ayrıca fermiyon sistemleri için en genel çözümün (uzay + spin) antisimetrik olması gerekir. Tüm bunlar göz önüne alındığında en genel çözüm ya simetrik dalga fonksiyonu ile antisimetrik spin durumu çarpılarak

$$\Phi = \psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \times \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)) \quad (11)$$

şeklinde ya da antisimetrik dalga fonksiyonu ile simetrik spin üçlüsü çarpılarak

$$\Phi = \psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \times \left\{ \begin{array}{c} \alpha(1)\alpha(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)) \\ \beta(1)\beta(2) \end{array} \right\} \quad (12)$$

biçiminde ifade edilir. Simetrik dalga fonksiyonu $\psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ile tanımlanan durumlar *para helyum*, antisimetrik dalga fonksiyonu $\psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ile tanımlanan durumlar *orto helyum* olarak bilinir. Ancak, Helyum atomu için yazılan Schrödinger denkleminin tam bir çözümü yoktur bu nedenle yaklaşık yöntemlere sıkça başvurulur.

1.2 Literatür Özeti

Çok elektronlu atomların en basiti ve Schrödinger denkleminin tam olarak çözülemediği en basit sistemlerden biri helyum atomudur. Bu nedenle, helyum atomunun taban durum enerjisini hesaplamak, kuantum mekaniğinin ortaya çıktığı günden beri araştırmacıların ilgisini çekmiştir. Bunun için birçok yaklaşık yöntem kullanılmıştır. Ancak taban durumu enerjisini hesaplamak için kullanılan bu yaklaşık yöntemler arasından varyasyonel yöntem öne çıkmaktadır.

Bu konudaki ilk çalışma, şimdilerde onun ismi ile anılan

$$\psi_D = e^{-ks} \sum_{l,m,n=0}^N c_{l,2m,n} s^l t^{2m} u^n \quad (13)$$

biçimindeki deneme fonksiyonunu kullanarak Hylleraas tarafından yapılmıştır. Buradaki $c_{l,2m,n}$ katsayıları varyasyonel yöntemle belirlenebilir ve

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_1 - r_2, \quad u = r_{12} \quad (14)$$

olarak tanımlanmıştır (Hylleraas, 1929). 1957’de, Kinoshita tarafından bu dalga fonksiyonundaki indisleri negatif kılınarak helyum atomunun taban durum yeniden **-2.903 722 5** a.b olarak elde edildi (Kinoshita, 1957). 1966’ya gelindiğinde Frankowski ve Pekeris tarafından bu enerji

$$\psi_D = \sum c_{l,m,n,i,j} s^l t^m u^n (s^2 + t^2)^{i/2} (\ln s)^j e^{-\alpha s} \quad (15)$$

şeklinde logaritmik deneme fonksiyonu kullanarak **-2.903 724 377 032 6** a.b olarak elde edildi (Frankowski ve Pekeris, 1966). Helyum atomu için değişik deneme fonksiyonları kullanılarak elde edilmiş taban durumu enerjileri Tablo 1 de özetlenmiştir.

Tablo 1. Üç boyutta helyum için hesaplanan taban durum enerjisinin tarihsel özeti

Referans	Tip	Enerji (a.b)
(Hylleraas, 1929)	Hylleraas	-2.902 43
(Kinoshita, 1957)	Kinoshita	-2.903 722 5
(Frankowski ve Pekeris, 1966)	Logaritmik	-2.903 724 377 032 6
(Thakkar ve Kago, 1994)	Yarım tamsayı	-2.903 724 377 034 114 4
(Goldman,1998)	Polinomal	-2.903 724 377 034 119 594
(Sims ve Hagstrom, 2002)	Hylleraas	-2.903 724 377 034 119 598 29 99
(Drake, 2002)	Triple exponent	-2.903 724 377 034 119 598 305
(Korobov, 2002)	Slater	-2.903 724 377 034 119 598 311 158 7
(Schwartz, 2006)	Logaritmik	-2.903 724 377 034 119 598 311 159 245 194 404 440 049 5
(Nakashima ve Nakatusuji, 2008)	Logaritmik	-2.903 724 377 034 119 598 311 159 245 194 404 446 696 905 37

Üç boyutlu helyum için yapılan bu çalışmaların dışında 2002’de Hilico ve arkadaşları tarafından iki boyutta helyum atomunun taban durumu enerjisi **-11.899 822 342 953** a.b olarak elde edildi (Hilico vd, 2002). (Patil, 2008)’ de iki boyutta helyum ve helyum bezeri iyonların taban ve uyarılmış durumları için pedagojik bir tartışma sunuldu. Daha sonra (Kırış, 2010) tez çalışmasında varyasyonel yöntem kullanarak taban durumu enerjisi **-11,899 820 011 3** a.b olarak hesaplandı. Ancak bu

alıřmada kullanılan Fortran programlama dili yksek hassasiyetli hesaplama yapamadığı iin (Fortran double Precision ile ancak 12-13 haneye kadar rakam saklayabilir) hesaplanan enerji birkaç anlamlı rakamla sınırlı kaldı.

2.YAPILAN ÇALIŞMALAR

2.1 Linner Varyasyonel Yöntem

Varyasyonel yöntem zamandan bağımsız bir hamiltonyenin bağlı durum enerjilerini ve dalga fonksiyonlarını elde etmek için kullanılan yaklaşık bir yöntemdir. Helyum atomu gibi üç cisim sistemlerinde taban durumu enerjisini hesaplamak için bu yönteme sıkça başvurulur.

Herhangi bir normlanabilir deneme fonksiyonu ψ_D için

$$E_D = \frac{\langle \psi_D | \hat{H} \psi_D \rangle}{\langle \psi_D | \psi_D \rangle} \quad (16)$$

büyüklüğü $E_D \geq \varepsilon_1$ eşitsizliğini sağlar. Buradaki ε_1 , Hamiltonyen \hat{H} için tam olarak çözülen Schrödinger denkleminin taban durumu enerjisidir. Bu eşitsizliği ispat etmek için ψ_D deneme fonksiyonu Hamiltonyen'in özfonksiyonları ψ_i cinsinden

$$\psi_D = \sum_i c_i \psi_i \quad (17)$$

şeklinde seriye açılır ve (16) de kullanılırsa

$$E_D = \frac{\sum_i |c_i|^2 \varepsilon_i}{\sum_i |c_i|^2} \quad (18)$$

elde edilir. Eşitliğin her iki tarafından ε_1 çıkarılırsa

$$E_D - \varepsilon_1 = \frac{\sum_i |c_i|^2 (\varepsilon_i - \varepsilon_1)}{\sum_i |c_i|^2} \geq 0 \quad (19)$$

eşitliğine ulaşılır. Buradaki $(\varepsilon_i - \varepsilon_1)$ çarpanı negatif olmadığı için $E_D - \varepsilon_1 \geq 0$ eşitsizliği ispatlanmış olur. Bu eşitsizlik, E_D 'nin ε_1 için bir üst limit olduğu anlamına gelir.

Aynı zamanda, deneme fonksiyonu ψ_D linner bağımsız $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_N$ gibi N tane keyfi fonksiyon seçerek

$$\psi_D = \sum_i a_i \chi_i \quad (20)$$

şeklinde oluşturulabilir. Bu eşitlik (16)' da kullanıldığında

$$E_D = \frac{\sum_{i,j} a_i^* a_j H_{ij}}{\sum_{i,j} a_i^* a_j S_{ij}} \quad (21)$$

elde edilir. Burada, Hamitonyen ve örtüşme matris elemanları sırasıyla $H_{ij} = \langle \chi_i | \hat{H} \chi_j \rangle$ ve $S_{ij} = \langle \chi_i | \chi_j \rangle$ ile temsil edilmektedir. E_D ' yi minimum kılan a_i katsayılarını bulmak için $\partial E_D / \partial a_k = 0$ koşulu aranırsa

$$\frac{\partial E_D}{\partial a_k} = \frac{(\sum_i a_i^* H_{ik})(\sum_{i,j} a_i^* a_j S_{ij}) - (\sum_{i,j} a_i^* a_j H_{ij})(\sum_i a_i^* S_{ik})}{(\sum_{i,j} a_i^* a_j S_{ij})^2} = 0 \quad (22)$$

halini alır ve bu eşitlikte (16) kullanıldığında problemin

$$\frac{\partial E_D}{\partial a_k} = \frac{(\sum_i a_i^* H_{ik}) - E_D (\sum_i a_i^* S_{ik})}{\sum_{i,j} a_i^* a_j S_{ij}} = 0 \quad (23)$$

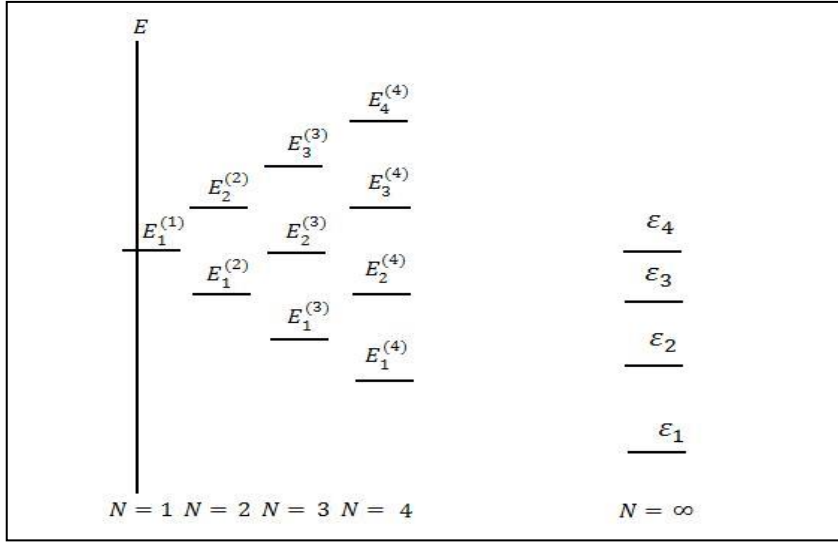
$$\sum_{i=1}^N a_i^* H_{ik} = E_D \sum_{i=1}^N a_i^* S_{ik} \quad (24)$$

$$\sum_{i=1}^N a_i H_{ki} = E_D \sum_{i=1}^N a_i S_{ki} \quad (25)$$

$$\begin{pmatrix} H_{11} & \cdots & H_{N1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & \cdots & H_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = E_D \begin{pmatrix} S_{11} & \cdots & S_{N1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{N1} & \cdots & S_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad (26)$$

şeklinde genelleştirilmiş özdeğer problemine indirgeneceği görülür. Bu problemin çözümünden $E_1^{(N)}, E_2^{(N)}, \dots, E_N^{(N)}$ şeklinde N tane enerji özdeğeri elde edilir. Bu özdeğerlerin en küçüğü $E_1^{(N)}$ taban durumu enerjisi için bir üst limittir. Ayrıca, deneme fonksiyonundaki baz sayısı olan N değerinin artırılmasıyla $E_1^{(N)}$ değeri ε_1 değerine yaklaşacağı Hylleraas – Undheim - Macdonald teoreminden bilinir (MacDonald, 1930).

Özetle (16) eşitliği herhangi bir deneme fonksiyonu için hesaplanan özdeğerin gerçek taban durumu enerjisinden büyük veya eşit olmasını garanti eder. Hylleraas – Undheim - Macdonald teoremi ise (26) eşitliğindeki matrislerin boyutları olan N' nin artırılmasıyla hesaplanan taban durumunun gerçek taban durumuna yaklaşacağını söyler. Bu anlatım Şekil 2' de özetlenmiştir.



Şekil 2. Varyasyonel yöntemle hesaplanan yaklaşık özdeğerlerin N ile değişimi

2.2 ∇_1^2 ve ∇_2^2 Operatörlerinin Çıkarılışı

Helyum atom hamiltonyeni ∇_1^2 ve ∇_2^2 operatörlerine bağlı olduğu için ilk olarak bu operatörleri r_1, r_2 ve r_{12} değişkenleri cinsinden iki boyutta elde etmek gerekir. Bu nedenle, bu kısım operatörlerin elde edilmesine ayrılmıştır.

İki boyutta Laplasyen operatörü kartezyen koordinatlarda

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \quad (27)$$

şeklinde ifade edilir. Burada x_1 ve y_1 değişkenleri ile r_1, r_2 ve r_{12} değişkenleri arasındaki

$$r_1 = \sqrt{x_1^2 + y_1^2}, \quad r_2 = \sqrt{x_2^2 + y_2^2}, \quad r_3 \equiv r_{12} = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} \quad (28)$$

ilişkiler göz önüne alınırsa

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_1} = \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \frac{\partial r_i}{\partial x_1} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (29)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_i} \frac{\partial r_i}{\partial x_1} \right) = \frac{\partial r_i}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_i} \right) + \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \quad (30)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} = \frac{\partial r_i}{\partial x_1} \frac{\partial r_j}{\partial x_1} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_i \partial r_j} + \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (31)$$

olarak bulunur. Bu işlem $\frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2}$ için tekrarlandığında

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} = \frac{\partial r_i}{\partial y_1} \frac{\partial r_j}{\partial y_1} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_i \partial r_j} + \frac{\partial^2 r_i}{\partial y_1^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \quad (i, j=1, 2, 3) \quad (32)$$

ifadesine ulaşılır. (31) ve (32), (27) de kullanılırsa

$$\nabla_1^2 = \left(\frac{\partial r_i}{\partial x_1} \frac{\partial r_j}{\partial x_1} + \frac{\partial r_i}{\partial y_1} \frac{\partial r_j}{\partial y_1} \right) \frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_j} + \left(\frac{\partial^2 r_i}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 r_i}{\partial y_1^2} \right) \frac{\partial}{\partial r_i} \quad (i, j=1, 2, 3) \quad (33)$$

$$\begin{aligned} &= \left[\left(\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_1}{\partial y_1} \right)^2 \right] \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \left[\left(\frac{\partial r_3}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_3}{\partial y_1} \right)^2 \right] \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + 2 \left[\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \frac{\partial r_3}{\partial x_1} + \frac{\partial r_1}{\partial y_1} \frac{\partial r_3}{\partial y_1} \right] \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_3} \\ &+ \left[\frac{\partial^2 r_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 r_1}{\partial y_1^2} \right] \frac{\partial}{\partial r_1} + \left[\frac{\partial^2 r_3}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 r_3}{\partial y_1^2} \right] \frac{\partial}{\partial r_3} \end{aligned} \quad (34)$$

elde edilir. (28) kullanılarak parantez içi ifadeler

$$\left(\frac{\partial r_3}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_3}{\partial y_1} \right)^2 = \left(\frac{x_2 - x_1}{r_3} \right)^2 + \left(\frac{y_2 - y_1}{r_3} \right)^2 = 1 \quad (35)$$

$$\left(\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_1}{\partial y_1} \right)^2 = \left(\frac{x_1}{r_1} \right)^2 + \left(\frac{y_1}{r_1} \right)^2 = 1 \quad (36)$$

$$\frac{\partial^2 r_3}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 r_3}{\partial y_1^2} = \frac{(x_2 - x_1)^2}{r_3^3} + \frac{(y_2 - y_1)^2}{r_3^3} = \frac{1}{r_3} \quad (37)$$

$$\frac{\partial^2 r_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 r_1}{\partial y_1^2} = \frac{x_1^2}{r_1^3} + \frac{y_1^2}{r_1^3} = \frac{1}{r_1} \quad (38)$$

olarak bulunur. (35), (36), (37) ve (38) eşitlikleri (34)'de kullanılırsa

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + 2 \left[\frac{x_1(x_1 - x_2)}{r_1 r_3} + \frac{y_1(y_1 - y_2)}{r_1 r_3} \right] \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_3} + \frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_3} \frac{\partial}{\partial r_3} \quad (39)$$

eşitliğine ulaşılır. Buradaki köşeli parantez içindeki ifade

$$\left[\frac{x_1(x_1 - x_2)}{r_1 r_3} + \frac{y_1(y_1 - y_2)}{r_1 r_3} \right] = \left[\frac{\bar{r}_1^2 - \bar{r}_1 \cdot \bar{r}_2}{r_1 r_3} \right] = \left[\frac{\bar{r}_1^2 + (r_3^2 - r_1^2 - r_2^2) / 2}{r_1 r_3} \right] \quad (40)$$

yerine yazılırsa (39) eşitliği

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + \left[\frac{r_1^2 + r_3^2 - r_2^2}{r_1 r_3} \right] \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_3} + \frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_3} \frac{\partial}{\partial r_3} \quad (41)$$

olarak elde edilir. Aynı şekilde

$$\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \quad (42)$$

operatörünün x_2 ve y_2 değişkenleri ile r_1, r_2 ve r_3 değişkenleri arasındaki ilişki olan (28) eşitlikleri göz önüne alınarak

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_2} = \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \frac{\partial r_i}{\partial x_2} \quad (i=1, 2, 3) \quad (43)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_i} \frac{\partial r_i}{\partial x_2} \right) = \frac{\partial r_i}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_i} \right) + \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \quad (44)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} = \frac{\partial r_i}{\partial x_2} \frac{\partial r_j}{\partial x_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_i \partial r_j} + \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \quad (i, j=1, 2, 3) \quad (45)$$

ifadesine ulaşılır. Bu işlem $\frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2}$ için tekrarlandığında

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2} = \frac{\partial r_i}{\partial y_2} \frac{\partial r_j}{\partial y_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_i \partial r_j} + \frac{\partial^2 r_i}{\partial y_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \quad (i, j=1, 2, 3) \quad (46)$$

eşitliğine ulaşılacaktır. (45) ve (46) eşitlikleri (42)' de kullanılır ve gerekli sadeleştirmeler yapılarak açık hali yazılırsa

$$\nabla_2^2 = \left[\left(\frac{\partial r_2}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_2}{\partial y_2} \right)^2 \right] \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \left[\left(\frac{\partial r_3}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_3}{\partial y_2} \right)^2 \right] \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + 2 \left[\frac{\partial r_2}{\partial x_2} \frac{\partial r_3}{\partial x_2} + \frac{\partial r_2}{\partial y_2} \frac{\partial r_3}{\partial y_2} \right] \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_3}$$

$$+ \left[\frac{\partial^2 r_2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 r_2}{\partial y_2^2} \right] \frac{\partial}{\partial r_2} + \left[\frac{\partial^2 r_3}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 r_3}{\partial y_2^2} \right] \frac{\partial}{\partial r_3} \quad (47)$$

elde edilir. (28) kullanılarak

$$\left(\frac{\partial r_3}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_3}{\partial y_2} \right)^2 = 1, \quad \left(\frac{\partial r_2}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_2}{\partial y_2} \right)^2 = 1 \quad (48)$$

$$\frac{\partial^2 r_3}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 r_3}{\partial y_2^2} = \frac{1}{r_3}, \quad \frac{\partial^2 r_2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 r_2}{\partial y_2^2} = \frac{1}{r_2} \quad (49)$$

$$\frac{\partial r_2}{\partial x_2} \frac{\partial r_3}{\partial x_2} + \frac{\partial r_2}{\partial y_2} \frac{\partial r_3}{\partial y_2} = \left[\frac{r_2^2 + r_3^2 - r_1^2}{2r_2 r_3} \right] \quad (50)$$

şeklinde hesaplanan köşeli parantezler içindeki ifadeler yerlerine yazılırsa

$$\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + \left[\frac{r_2^2 + r_3^2 - r_1^2}{r_2 r_3} \right] \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_3} + \frac{1}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{1}{r_3} \frac{\partial}{\partial r_3} \quad (51)$$

olarak elde edilir.

2.3 Hamiltonyen ve Matris Elemanların Çıkarılışı

İncelemeler elektronların görelili olmayan hareketi ile sınırlanacak olursa, sonsuz ağır kütle yaklaşımı için atomik birimlerde iki boyutta helyum atomunun Hamiltonyeni

$$\hat{H} = -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (52)$$

şeklinde yazılır. Burada r_1 ve r_2 sırasıyla birinci ve ikinci elektronun çekirdeğe göre koordinatları iken $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ elektronlar arası uzaklıktır.

Bir üst kısımda

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \left[\frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \right] \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} + \frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \quad (53)$$

ve

$$\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \left[\frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \right] \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{12}} + \frac{1}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{1}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \quad (54)$$

şeklinde hesaplanmış Laplasyen operatörleri yerlerine yazılırsa iki boyutta helyum için Hamiltonyen

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} + \frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{12}} \right. \\ & \left. + \frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right) - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \end{aligned} \quad (55)$$

olarak bulunur.

Öte yandan, Helyum atomunun S durumu için varyasyonel yöntemde kullanılacak deneme fonksiyonu

$$\psi_D = \sum_{p=0}^N a_p \chi_p(a, b, c) = \sum_{n=0}^{NN} \sum_{m=0}^{MM} \sum_{k=0}^{KK} a_{nmk} r_1^n r_2^m r_{12}^k e^{-(ar_1 + br_2 + cr_{12})} \quad (56)$$

biçiminde seçilebilir. Burada NN, MM, KK tam sayıları deneme fonksiyonuna katılan baz sayısını belirlemektedir.

Bu durumda, $\chi_p(a, b, c)$ baz fonksiyonu için örtüşme ve hamitomyen matris elemanları (bakınız eşitlik (26)' ya) sırasıyla,

$$S_{p'p} = \langle \chi_{p'}, \chi_p \rangle = I_{n+n', m+m', k+k'}(a, b, c) \quad (57)$$

ve

$$\begin{aligned} H_{p'p} = \langle \chi_{p'}, \hat{H} \chi_p \rangle = & -\frac{1}{2} \left(\langle \chi_{p'}, \left[\frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} \right] \chi_p \rangle + \langle \chi_{p'}, \left[\frac{1}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} \right] \chi_p \rangle + \langle \chi_{p'}, \left[\frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right] \chi_p \rangle \right. \\ & + \langle \chi_{p'}, \left[\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} \right] \chi_p \rangle + \langle \chi_{p'}, \left[\frac{\partial^2}{\partial r_2^2} \right] \chi_p \rangle + \langle \chi_{p'}, \left[2 \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} \right] \chi_p \rangle + \langle \chi_{p'}, \left[\frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} \right] \chi_p \rangle \\ & \left. + \langle \chi_{p'}, \left[\frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{12}} \right] \chi_p \rangle \right) + \langle \chi_{p'}, \left[-\frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] \chi_p \rangle \end{aligned} \quad (58)$$

şeklindedir. Buradaki ilk terim için önce

$$\left[\frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} \right] \chi_{n,m,k}(a,b,c) = \left[\frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} \right] r_1^n r_2^m r_{12}^k e^{-(a\bar{r}_1 + b\bar{r}_2 + c\bar{r}_{12})} \quad (59)$$

$$= n\chi_{n-2,m,k}(a,b,c) - a\chi_{n-1,m,k}(a,b,c) \quad (60)$$

hesaplanır ve daha sonra $\chi_p(a,b,c)$ ile çarpılıp tüm uzay üzerinden integral alınırsa

$$\langle \chi_p, \left[\frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} \right] \chi_p \rangle = nI_{n+n-2,m+m',k+k'}(a,b,c) - aI_{n+n-1,m+m',k+k'}(a,b,c) \quad (61)$$

olarak bulunur. Burada

$$I_{n,m,k}(a,b,c) = \int r_1^n r_2^m r_{12}^k e^{-2(a\bar{r}_1 + b\bar{r}_2 + c\bar{r}_{12})} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (62)$$

ile temsil edilir ve bu integralin hesaplanması bir alt kısımda verilmiştir. Ayrıca matris elemanının geriye kalan terimler hesaplanarak aşağıda sıralanmıştır:

$$\langle \chi_p, \left[\frac{1}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} \right] \chi_p \rangle = mI_{n+n',m+m'-2,k+k'}(a,b,c) - bI_{n+n',m+m'-1,k+k'}(a,b,c) \quad (63)$$

$$\langle \chi_p, \left[\frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right] \chi_p \rangle = 2kI_{n+n',m+m',k+k'-2}(a,b,c) - 2bI_{n+n',m+m',k+k'-1}(a,b,c) \quad (64)$$

$$\begin{aligned} \langle \chi_p, \left[\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} \right] \chi_p \rangle &= n(n-1)I_{n+n-2,m+m',k+k'}(a,b,c) - 2naI_{n+n-1,m+m',k+k'}(a,b,c) \\ &+ a^2I_{n+n',m+m',k+k'}(a,b,c) \end{aligned} \quad (65)$$

$$\begin{aligned} \langle \chi_p, \left[\frac{\partial^2}{\partial r_2^2} \right] \chi_p \rangle &= m(m-1)I_{n+n',m+m'-2,k+k'}(a,b,c) - 2mbI_{n+n',m+m'-1,k+k'}(a,b,c) \\ &+ b^2I_{n+n',m+m',k+k'}(a,b,c) \end{aligned} \quad (66)$$

$$\langle \chi_p, \left[2 \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} \right] \chi_p \rangle = 2k(k-1)I_{n+n',m+m',k+k'-2}(a,b,c) - 4kcI_{n+n',m+m',k+k'-1}(a,b,c)$$

$$+ 2c^2 I_{n+n, m+m, k+k} (a, b, c) \quad (67)$$

$$\begin{aligned} \langle \chi_p, \left[\frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} \right] \chi_p \rangle &= kn I_{n+n, m+m, k+k-2} (a, b, c) \\ &+ kn I_{n+n-2, m+m, k+k} (a, b, c) - nk I_{n+n-2, m+m+2, k+k-2} (a, b, c) \\ &- ka I_{n+n+1, m+m, k+k-2} (a, b, c) - ka I_{n+n-1, m+m, k+k} (a, b, c) \\ &+ ka I_{n+n-1, m+m+2, k+k-2} (a, b, c) - nc I_{n+n, m+m, k+k-1} (a, b, c) \\ &- nc I_{n+n-2, m+m, k+k+1} (a, b, c) + nc I_{n+n-2, m+m+2, k+k-1} (a, b, c) \\ &+ ac I_{n+n+1, m+m, k+k-1} (a, b, c) + ac I_{n+n-1, m+m, k+k+1} (a, b, c) \\ &- ac I_{n+n-1, m+m+2, k+k-1} (a, b, c) \end{aligned} \quad (68)$$

$$\begin{aligned} \langle \chi_p, \left[\frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{12}} \right] \chi_p \rangle &= mk I_{n+n, m+m, k+k-2} (a, b, c) \\ &+ mk I_{n+n, m+m-2, k+k} (a, b, c) - km I_{n+n+2, m+m-2, k+k-2} (a, b, c) \\ &- kb I_{n+n, m+m+1, k+k-2} (a, b, c) - kb I_{n+n, m+m-1, k+k} (a, b, c) \\ &+ kb I_{n+n+2, m+m-1, k+k-2} (a, b, c) - mc I_{n+n, m+m, k+k-1} (a, b, c) \\ &- mc I_{n+n, m+m-2, k+k+1} (a, b, c) + mc I_{n+n+2, m+m-2, k+k-1} (a, b, c) \\ &+ bc I_{n+n, m+m+1, k+k-1} (a, b, c) + bc I_{n+n, m+m-1, k+k+1} (a, b, c) \\ &- bc I_{n+n+2, m+m-1, k+k-1} (a, b, c) \end{aligned} \quad (69)$$

$$\begin{aligned} \langle \chi_p, \left[-\frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] \chi_p \rangle &= -2 I_{n+n-1, m+m, k+k} (a, b, c) \\ &- 2 I_{n+n, m+m-1, k+k} (a, b, c) + I_{n+n, m+m, k+k-1} (a, b, c) . \end{aligned} \quad (70)$$

2.3. Radyal İntegralin Hesaplanması

Bir $f(\vec{r})$ fonksiyonunun iki boyutta Fourier dönüşümü

$$F(\vec{k}) = \int f(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^2\vec{r} \quad (71)$$

ve $F(\vec{k})$ fonksiyonunun ters Fourier dönüşümü ise

$$f(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int F(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^2\vec{k} \quad (72)$$

ile ifade edilir. Fourier dönüşümü için e^{-ar}/r göz önüne alınırsa

$$F(\vec{k}) = \int \frac{e^{-a\vec{r}}}{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^2\vec{r} \quad (73)$$

ve bu eşitlikte $\vec{k} = k\hat{y}$, $\vec{k} \cdot \vec{r} = (r \sin \theta)k$ ve $d^2\vec{r} = r d\theta dr$ kullanılırsa

$$F(k) = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{e^{-(ik \sin \theta + a)r}}{r} r d\theta dr = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{ik \sin \theta + a} \quad (74)$$

elde edilir. Bu integral $z = e^{i\theta}$, $\sin \theta = \frac{1}{2i} \left(z - \frac{1}{z} \right)$, $d\theta = dz/iz$ dönüşümleri ve Residu teoremi yardımıyla

$$F(k) = \oint_{|z|=1} \frac{dz}{\left(\frac{k}{2} \left(z - \frac{1}{z} \right) + a \right) iz} = \frac{2}{ik} \oint \frac{dz}{z^2 + \frac{2a}{k} z - 1} = \frac{2\pi}{\sqrt{k^2 + a^2}} \quad (75)$$

$$F(k) \equiv \frac{2\pi}{\sqrt{k^2 + a^2}} \quad (76)$$

olarak hesaplanabilir.

Öte yandan (76) eşitliği yardımıyla

$$\frac{e^{-2a\vec{r}_1}}{r_1} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int F_{2a}(\vec{k}_1) e^{i\vec{k}_1\cdot\vec{r}_1} d^2\vec{k}_1 \quad (77)$$

$$\frac{e^{-2b\vec{r}_2}}{r_2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int F_{2b}(\vec{k}_2) e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}_2} d^2\vec{k}_2 \quad (78)$$

$$\frac{e^{-2cr_{12}}}{r_{12}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int F_{2c}(\vec{k}_{12}) e^{i\vec{k}_{12} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} d^2\vec{k}_{12} \quad (79)$$

ters Fourier dönüşümleri yazılabilir. Bu üç eşitlik taraf tarafa çarpılır ve $d^2\vec{r}_1 d^2\vec{r}_2$ hacim elamanı üzerinden integral alınırsa

$$\int \frac{e^{-2ar_1}}{r_1} \frac{e^{-2br_2}}{r_2} \frac{e^{-2cr_{12}}}{r_{12}} d^2\vec{r}_1 d^2r_2 = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d^2\vec{k}_1 d^2\vec{k}_2 d^2\vec{k}_{12} F_{2a}(\vec{k}_1) F_{2b}(\vec{k}_2) F_{2c}(\vec{k}_{12})$$

$$\times \int d^2\vec{r}_1 d^2\vec{r}_2 e^{i\vec{r}_1 \cdot (\vec{k}_1 + \vec{k}_{12})} e^{i\vec{r}_2 \cdot (\vec{k}_2 - \vec{k}_{12})} \quad (80)$$

elde edilir. Bu eşitlik için Delta fonksiyonunun

$$(2\pi)^4 \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_{12}) \delta(\vec{k}_2 - \vec{k}_{12}) = \int d^2\vec{r}_1 d^2\vec{r}_2 e^{i\vec{r}_1 \cdot (\vec{k}_1 + \vec{k}_{12})} e^{i\vec{r}_2 \cdot (\vec{k}_2 - \vec{k}_{12})} \quad (81)$$

şeklindeki ifadesi kullanıldığında

$$\int \frac{e^{-2ar_1}}{r_1} \frac{e^{-2br_2}}{r_2} \frac{e^{-2cr_{12}}}{r_{12}} d^2\vec{r}_1 d^2r_2 = 2\pi \int \frac{d^2\vec{k}}{\sqrt{(k^2 + 4a^2)(k^2 + 4b^2)(k^2 + 4c^2)}} \quad (82)$$

$$= (2\pi)^2 \int \frac{k dk}{\sqrt{(k^2 + 4a^2)(k^2 + 4b^2)(k^2 + 4c^2)}} \quad (83)$$

$$\int \frac{e^{-2ar_1}}{r_1} \frac{e^{-2br_2}}{r_2} \frac{e^{-2cr_{12}}}{r_{12}} d^2\vec{r}_1 d^2r_2 = \int_0^\infty \frac{(2\pi)^2 k dk}{\sqrt{(k^2 + 4a^2)(k^2 + 4b^2)(k^2 + 4c^2)}} \quad (84)$$

sonucuna ulaşılır. Son eşitliğin a ' ya göre $n+1$, b ' ye göre $m+1$ ve c ' ye göre $k+1$ kez türev alındığında

$$I_{n,m,k}(a,b,c) = \int r_1^n r_2^m r_{12}^k e^{-2(ar_1 + br_2 + cr_{12})} d^2\vec{r}_1 d^2r_2$$

$$= \frac{1}{(-2)^{n+m+k+3}} \left(\frac{\partial}{\partial a} \right)^{n+1} \left(\frac{\partial}{\partial b} \right)^{m+1} \left(\frac{\partial}{\partial c} \right)^{k+1} \int_0^\infty \frac{(2\pi)^2 k dk}{\sqrt{(k^2 + 4a^2)(k^2 + 4b^2)(k^2 + 4c^2)}} \quad (85)$$

elde edilir. (85) eşitliği için ayrıntıları bir alt bölümde verilecek olan

$$\left(\frac{\partial}{\partial a} \right)^n = \sum_{p=\text{int}((n+1)/2)}^n c_p^n a^{2p-n} \left(\frac{\partial}{\partial a^2} \right)^p \quad (86)$$

bağıntısı kullanılabilir. Bu durumda

$$I_{n,m,k}(a,b,c) = \frac{1}{(-2)^{n+m+k+3}} \sum_{p_1}^{n+1} \sum_{p_2}^{m+1} \sum_{p_3}^{k+1} c_{p_1}^{n+1} a^{2p_1-(n+1)} c_{p_2}^{m+1} b^{2p_2-(m+1)} \times c_{p_3}^{k+1} c^{2p_3-(k+1)} H_{p_1,p_2,p_3}(a,b,c) \quad (87)$$

eşitliğine ulaşılır. Burada

$$H_{u,w,z}(a,b,c) = \left(\frac{\partial}{\partial a^2} \right)^u \left(\frac{\partial}{\partial b^2} \right)^w \left(\frac{\partial}{\partial c^2} \right)^z \int_0^\infty \frac{(2\pi)^2 k dk}{\sqrt{(k^2 + 4a^2)(k^2 + 4b^2)(k^2 + 4c^2)}} \quad (88)$$

ile temsil edilir. Bu türevler teker teker alındığında

$$H_{u,w,z}(a,b,c) = (-2)^{u+w+z} (2u-1)!!(2w-1)!!(2z-1)!! \times \int_0^\infty \frac{4\pi^2 k dk}{(k^2 + 4a^2)^{u+1/2} (k^2 + 4b^2)^{w+1/2} (k^2 + 4c^2)^{z+1/2}} \quad (89)$$

elde edilir. Ancak bu integralin sadece $a = b = c$ ve $a = b \neq c$ için çözümüne ulaşılmıştır.

İlk olarak $a = b = c$ durumunu göz önüne alınırsa

$$H_{u,w,z}(a,a,a) = \frac{2\pi^2 (-2)^{u+w+z} (2u-1)!!(2w-1)!!(2z-1)!!}{(u+w+z+1/2)(4a^2)^{(u+w+z+1/2)}} \quad (90)$$

olarak elde edilir.

Öte yanda, $a = b \neq c$ durumu için

$$H_{u,w,z}(a,a,c) = (-2)^{u+w+z} (2u-1)!!(2w-1)!!(2z-1)!! \times \int_0^\infty \frac{4\pi^2 k dk}{(k^2 + 4a^2)^{u+w+1} (k^2 + 4c^2)^{z+1/2}} \quad (91)$$

olarak elde edilir. $y^2 = k^2 + 4c^2$ dönüşümü yapılırsa

$$H_{u,w,z}(a,a,c) = (-2)^{u+w+z} (2u-1)!!(2w-1)!!(2z-1)!!$$

$$\times \int_{2c}^{\infty} \frac{4\pi^2 dy}{(y^2 - (4c^2 - 4a^2))^{u+w+1} (y^2)^z} \quad (92)$$

ya da

$$H_{u,w,z}(a, a, c) = (-2)^{u+w+z} (2u-1)!!(2w-1)!!(2z-1)!! \times 4\pi^2 K_{u+w+1,z}(4c^2 - 4a^2, 0, c) \quad (93)$$

olarak elde edilir. Burada

$$K_{m,n}(\beta, \alpha, c) = \int_{2c}^{\infty} \frac{dy}{(y^2 - \beta)^m (y^2 - \alpha)^n} \quad (94)$$

ile temsil edilir. Bu integralde, $m > 0$, $n = 0$ ve $m > 0$, $n > 0$ şeklindeki tamsayılar için iki durum söz konusudur.

İlk olarak $m > 0$, $n > 0$ durumu için integral içindeki ifade göz önüne alınırsa

$$\frac{1}{(y^2 - \beta)^m (y^2 - \alpha)^n} = \frac{1}{(n-1)!(m-1)!} \frac{\partial^{m-1}}{\partial \beta^{m-1}} \frac{\partial^{n-1}}{\partial \alpha^{n-1}} \left(\frac{1}{y^2 - \beta} \right) \left(\frac{1}{y^2 - \alpha} \right) \quad (95)$$

$$= \frac{1}{(n-1)!(m-1)!} \frac{\partial^{m-1}}{\partial \beta^{m-1}} \frac{\partial^{n-1}}{\partial \alpha^{n-1}} \left(\frac{1}{(\alpha - \beta)(y^2 - \alpha)} - \frac{1}{(\alpha - \beta)(y^2 - \beta)} \right) \quad (96)$$

$$= \frac{1}{(n-1)!(m-1)!} \left(\frac{\partial^{n-1}}{\partial \alpha^{n-1}} \frac{(m-1)!}{(\alpha - \beta)^m (y^2 - \alpha)} + \frac{\partial^{m-1}}{\partial \beta^{m-1}} \frac{(n-1)!}{(\beta - \alpha)^n (y^2 - \beta)} \right) \quad (97)$$

ve bir alt kısımda hesaplanmış olan

$$\frac{\partial^{n-1}}{\partial \alpha^{n-1}} \frac{(m-1)!}{(\alpha - \beta)^m (y^2 - \alpha)} = (-1)^m \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(m+k-1)!(n-1)!}{k!} \left(\frac{1}{\beta - \alpha} \right)^{k+m} \left(\frac{1}{y^2 - \alpha} \right)^{n-k} \quad (98)$$

ve

$$\frac{\partial^{m-1}}{\partial \beta^{m-1}} \frac{(n-1)!}{(\beta - \alpha)^n (y^2 - \beta)} = (-1)^n \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(n+k-1)!(m-1)!}{k!} \left(\frac{1}{\alpha - \beta} \right)^{k+n} \left(\frac{1}{y^2 - \beta} \right)^{m-k} \quad (99)$$

eşitlikleri (97) de kullanılırsa

$$\begin{aligned} \frac{1}{(y^2 - \beta)^m (y^2 - \alpha)^n} &= (-1)^m \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(m+k-1)!}{k!(m-1)!} \left(\frac{1}{\beta - \alpha} \right)^{k+m} \left(\frac{1}{y^2 - \alpha} \right)^{n-k} \\ &+ (-1)^n \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(n+k-1)!}{k!(n-1)!} \left(\frac{1}{\alpha - \beta} \right)^{k+n} \left(\frac{1}{y^2 - \beta} \right)^{m-k} \end{aligned} \quad (100)$$

elde edilir. Bu ifade (94)'de kullanılırsa

$$\begin{aligned} K_{m,n}(\beta, \alpha, c) &= (-1)^m \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(m+k-1)!}{k!(m-1)!} \left(\frac{1}{\beta - \alpha} \right)^{k+m} E_{n-k}(\alpha, c) \\ &+ (-1)^n \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(n+k-1)!}{k!(n-1)!} \left(\frac{1}{\alpha - \beta} \right)^{k+n} E_{m-k}(\beta, c) \end{aligned} \quad (101)$$

elde edilir. Burada

$$E_k(\beta, c) = \int_{2c}^{\infty} \frac{dy}{(y^2 - \beta)^k} \quad (102)$$

ile ifade edilen bir fonksiyondur.

Öte yandan

$$E_k(0, c) = \frac{1}{(2k-1)} (2c)^{1-2k} \quad (103)$$

$$E_1(\beta, c) = \frac{1}{2\sqrt{\beta}} \ln \left(\frac{2c + \sqrt{\beta}}{2c - \sqrt{\beta}} \right) \quad \beta > 0 \quad (104)$$

$$E_1(\beta, c) = \frac{1}{\sqrt{-\beta}} \left(\frac{\pi}{2} - \tan^{-1} \frac{2c}{\sqrt{-\beta}} \right) \quad \beta < 0 \quad (105)$$

integralleri kolayca hesaplanabilen temel integrallerdir. Ayrıca (102) integralin hesaplamak için

$$E_k(\beta, c) = \int_{2c}^{\infty} \frac{dy}{(y^2 - \beta)^k} = \int_{2c}^{\infty} \frac{(y^2 - \beta) dy}{(y^2 - \beta)^{k+1}} = \int_{2c}^{\infty} \frac{y^2 dy}{(y^2 - \beta)^{k+1}} - \beta E_{k+1}(\beta, c) \quad (106)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{y}{-k} \frac{1}{(y^2 - \beta)^k} \Big|_{2c}^{\infty} - \int_{2c}^{\infty} \frac{dy}{(-k)(y^2 - \beta)^k} \right) - \beta E_{k+1}(\beta, c) \quad (107)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{2c}{k} \frac{1}{((2c)^2 - \beta)^k} + \frac{E_k(\beta, c)}{k} \right) - \beta E_{k+1}(\beta, c) \quad (108)$$

$$E_k(\beta, c) = \left(\frac{c}{k} \frac{1}{((2c)^2 - \beta)^k} + \frac{E_k(\beta, c)}{2k} \right) - \beta E_{k+1}(\beta, c) \quad (109)$$

$$E_{k+1}(\beta, c) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{c}{k} \frac{1}{((2c)^2 - \beta)^k} + E_k(\beta, c) \left(\frac{1}{2k} - 1 \right) \right] \quad (110)$$

tekrarlama bağıntısı kullanılabilir.

Öte yanda $m > 0$, $n = 0$ durumu için (94) integrali (102) integraline indirgenir. Ayrıca, daha önce (Kırış, 2010)' da hesaplanan bu integraller yeni bir multiprecision program yazmak için bu çalışmada kullanılmıştır.

2.4. Matematiksel Formüller

Bu kısımda genel akışa uygun olmadığı için yukarıda verilemeyen bazı matematiksel ifadelerin ((86) ve (99) eşitlikleri) çıkarılışları sıralanmıştır.

a' ya göre türev ile $a^{2'}$ ye göre türev arasında

$$\left(\frac{\partial}{\partial a} \right)^n = \sum_{p=\text{int}((n+1)/2)}^n c_p^n a^{2p-n} \left(\frac{\partial}{\partial a^2} \right)^p \quad (111)$$

bağıntısı vardır. Buradaki c_p^n katsayılarını bulabilmek için (111) eşitliğinin her iki tarafının a' ya göre türevi alınırsa

$$\left(\frac{\partial}{\partial a} \right)^{n+1} = \sum_p c_p^n (2p - n) a^{2p-(n+1)} \left(\frac{\partial}{\partial a^2} \right)^p + c_p^n a^{2p-n} \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{\partial}{\partial a^2} \right)^p \quad (112)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial a}\right)^{n+1} = \sum_p \left(c_p^n (2p-n) a^{2p-(n+1)} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^p + c_p^n a^{2p-n} 2a \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^{p+1} \right) \quad (113)$$

elde edilir. Ayrıca (111) eşitliği $n \rightarrow n+1$ için

$$\left(\frac{\partial}{\partial a}\right)^{n+1} = \sum_p c_p^{n+1} a^{2p-(n+1)} \left(\frac{\partial}{\partial a^2}\right)^p \quad (114)$$

halini alır. (113) ve (114) eşitliklerinin kıyaslanması

$$c_p^{n+1} = (2p-n)c_p^n + 2c_{p-1}^n \quad (115)$$

tekrarlama bağıntısı elde edilir. Bu tekrarlama bağıntısı ve

$$c_p^n = 0 \quad (p > n), \quad c_0^0 = 0, \quad c_1^1 = 2 \quad (116)$$

eşitlikleri kullanılarak diğer katsayılar hesaplanabilir.

Öte yandan (99) eşitliklerini elde etmek için, ilk olarak $1/(\alpha - \beta)^n$ ifadesinin β' ye göre türevi alınır

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{(\alpha - \beta)^n} \right) = \frac{n}{(\alpha - \beta)^{n+1}} \quad (117)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \left(\frac{1}{(\alpha - \beta)^n} \right) = \frac{n(n+1)}{(\alpha - \beta)^{n+2}} \quad (118)$$

$$\frac{\partial^k}{\partial \beta^k} \left(\frac{1}{(\alpha - \beta)^n} \right) = \frac{(n+k-1)!}{(n-1)!} \frac{1}{(\alpha - \beta)^{n+k}} \quad (119)$$

elde edilir. Diğer taraftan

$$\frac{\partial^{m-1}}{\partial \beta^{m-1}} \left(\frac{(n-1)!}{(\beta - \alpha)^n (y^2 - \beta)} \right) = (-1)^n (n-1)! \frac{\partial^{m-1}}{\partial \beta^{m-1}} \left(\frac{1}{(\alpha - \beta)^n} \frac{1}{(y^2 - \beta)} \right) \quad (120)$$

ifadesinde

$$\frac{\partial^m}{\partial x^m} (A(x)B(x)) = \sum_{k=0}^m \frac{m!}{(m-k)!k!} A(x)^{(k)} B(x)^{(m-k)} \quad (121)$$

kullanılırsa

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^{m-1}}{\partial \beta^{m-1}} \left(\frac{(n-1)!}{(\beta-\alpha)^n (y^2-\beta)} \right) = \\ & = (-1)^n (n-1)! \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(m-1)!}{(m-1-k)! k!} \left(\frac{1}{(\alpha-\beta)^n} \right)^{(k)} \left(\frac{1}{(y^2-\beta)} \right)^{(m-k-1)} \end{aligned} \quad (122)$$

elde edilir. (122) eşitliğindeki türevler (119) yardımı ile hesaplanırsa

$$\frac{\partial^{m-1}}{\partial \beta^{m-1}} \left(\frac{(n-1)!}{(\beta-\alpha)^n (y^2-\beta)} \right) = (-1)^n \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(m-1)! (n+k-1)!}{k!} \frac{1}{(\alpha-\beta)^{n+k}} \frac{1}{(y^2-\beta)^{m-k}} \quad (123)$$

eşitliğine ulaşılır.

2.5 Programlama

Birçok programlama dilinde yukarıdaki bilgiler kullanılarak Hamiltoyen ve örtüşme matrisleri oluşturup genelleştirilmiş özdeğer problemini çözecek bir algoritma yazılabilir. Ancak gerek yüksek duyarlılıkla hesaplama yapabilmek gerekse kesme ve yuvarlama gibi sayısal hata türlerini en az indirmek için multiprecision hesaplama yapabilmeye olanak sağlayabilecek bir programlama dili kullanmak gerekir. Bu nedenle bu tür problemlerin çözümlerinde D. H. Bailey tarafından geliştirilmiş Fortran' da keyfi hassasiyetler için hesaplama yapabilmeye olanak sağlayan multiprecision paketi yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu çalışmada ise sayısal hesaplama ya yakın başka bir programlama dili olan Python 3.4 ve onun keyfi duyarlılıkta hesaplama yapabilmesini sağlayan Mpmath kütüphanesi kullanılarak yeni bir multiprecision program yazıldı.

Python'da *Ekler* kısmındaki bu yeni multiprecision program üç aşamadan oluşmaktadır. Birinci aşamada yukarıdaki bilgiler yardımıyla hamiltoyen ve örtüşme matrisleri oluşturulur. İkinci aşamadan genelleştirilmiş özdeğer problemi, sıradan özdeğer problemine dönüştürülür. Çünkü birçok programlama dili için hazırlanmış genelleştirilmiş özdeğer problemini çözecek algoritma bulunmasına rağmen mpmath paketi için sadece özdeğer problemini çözecek algoritma bulunmaktadır. Bu nedenle genelleştirilmiş özdeğer problemi (denklem (26))

$$(\mathbf{L}^{-1} \mathbf{H} (\mathbf{L}^{-1})^T) (\mathbf{L}^T \mathbf{a}) = \mathbf{E}_D (\mathbf{L}^T \mathbf{a}) \quad (124)$$

şeklinde özdeğer problemine dönüştürülerek çözülmüştür. Burada \mathbf{L} ,

$$\mathbf{S} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T \quad (125)$$

şeklinde Cholesky ayrışımı kullanarak elde edilmiş bir matristir. Son aşamada ise sıradan özdeğer problemi çözümlenerek taban durumu enerjisi elde edilir.

3. BULGULAR

Yukarıdaki hesaplamalar kullanılarak Python 3.4' de yazılan yeni multiprecision program, hassasiyeti 100 için, son derece basit bir dizüstü bilgisayarda (AMD Athlon64 X2 L310 Dual Core İşlemci - 1.20GHz), Ubuntu sistem ile çalıştırılarak aşağıdaki sonuçlara ulaşılmıştır.

Tablo 2. NN = 5, MM = 5, KK = 5 için hesaplanan taban durum enerjisi

a	c	Enerji (a.b)
4.25	0.8	-11.899 822 009 979 787 042 726
4.5	0.8	-11.899 822 079 090 826 149 913
4.75	0.8	-11.899 822 098 578 370 941 075
5.0	0.8	-11.899 822 016 450 316 791 501
4.75	1.0	-11.899 822 126 931 163 525 027
4.75	1.25	-11.899 822 144 686 638 903 031
4.75	1.5	-11.899 822 121 277 933 126 496

NN= MM=KK=5 için yazılan program çalıştırılmış ve taban durumunu mümkün olduğunca minimum kılmak için varyasyonel parametreler olan a ve c değişkenleri değiştirilerek hesaplanan enerji değerleri Tablo 2' de sıralanmıştır. Tablo 2' ye göre en iyi yaklaşımla elde edilen taban durumu enerjisi -11.899 822 144 686 638 903 031 a.b. dir.

Tablo 3. NN = 10, MM = 10, KK = 10 için hesaplanan taban durum enerjisi

a	c	Enerji (a.b)
6.9	1.5	-11.899 822 342 461 733 772 209
6.7	1.5	-11.899 822 342 557 773 300 924
6.5	1.5	-11.899 822 342 569 979 310 617
6.0	1.5	-11.899 822 342 441 335 103 082

Elde edilen bu değerden daha iyi sonuçlara ulaşmak için NN,MM, KK değerlerini artırmak gerekir. Bu nedenle Tablo 3 ve Tablo 4' de bu değerler artırılarak aynı şekilde hesaplanan taban durumu enerji değerleri sıralanmıştır. En iyi yaklaşımla elde edilen

enerjiler Tablo 3 ve Tablo 4’de göre sırasıyla -11.899 822 342 569 979 310 617 a.b. ve -11.899 822 342 649 616 214 103 a.b. dir.

Tablo 4. NN = 11, MM = 10, KK = 10 için hesaplanan taban durum enerjisi

a	c	Enerji (a.b)
6.5	1.6	-11.899 822 342 649 312 184 217
6.7	1.6	-11.899 822 342 649 616 214 103
7.25	1.6	-11.899 822 342 208 539 549 811

4. TARTIŞMA ve SONUÇLAR

Daha önce (Kırış, 2010)' da varyasyonel yöntem kullanılarak iki boyutta helyum atomunun taban durumu enerjisi hesaplanmıştır. Ancak, bu hesaplama için kullanılan programlama dili (Fortran) yüksek hassasiyette hesaplamalar yapamadığı için taban durumu enerjisi birkaç anlamlı rakamla sınırlı kaldı.

Tablo 5. Elde edilen taban durumu enerji değerlerinin özeti

NN, MM, KK	a/ c	Enerji (a.b)	Bilgisayarın çalışma süresi
5, 5, 5	4.25 / 1.25	-11.899 822 144 686 638 903	Yaklaşık 1 saat 031
10, 10, 10	6.5 / 1.5	-11.899 822 342 569 979 310	Yaklaşık 5.5 gün 617
11, 10,10	6.7 / 1.6	-11.899 822 342 649 616 214	Yaklaşık 6.5 gün 103

Bu çalışmada ise, yine varyasyonel yöntem için (Kırış, 2010)' da kullanılmış hesaplamalar yeni bir notasyon ile tekrardan yapıldı. Ardından, bu hesaplamalar kullanılarak Python 3.4' de yeni bir multiprecision program yazıldı. Bu programın Ubuntu sistem bir dizüstü bilgisayarda çalıştırılması sonucu iki boyuta helyum atomu için elde edilen taban durumu enerjilerinin bir özeti tablo 5' de verilmiştir.

Tablo 6. Bu çalışmanın diğer çalışmalar ile karşılaştırılması

Referans	Enerji (a.b)
(Kırış, 2010)	-11,899 820 011 3
(Hilico, 2008)	-11.899 822 342 953
Bu çalışma	-11.899 822 342 649 616 214 103

Öte yandan, tablo 5' de görüldüğü gibi en iyi yaklaşımla elde edilen taban durumu enerjisi **-11.899 822 342 649 616 a.b** dir. Bu değer, hem (Kırış, 2010)' da elde edilenden taban durumu enerjisinden daha fazla anlamlı rakam içeri hem de literatürle uyumludur (Tablo 6). Hylleras - Undheim-Macdonald teoremi gereği, bu değerden daha iyi değerler elde etmek için NN, MM ve KK değerlerini arttırmak gerekir. Ancak yazılan programın çalıştırıldığı dizüstü bilgisayarı bu hesaplamaları yapabilecek kadar güçlü ve hızlı değildir. Ayrıca, hesaplamalar için kullanılan Python, kullanımı kolay ve

multiprecision hesaplama yapabilen bir programlama dili olmasına rağmen, diğer programlama dillerine kıyasla çok daha yavaş çalıştığı için uzun hesaplama süreleri ortaya çıkmıştır. Bu nedenlerden dolayı daha iyi sonuçlar elde edilememiştir.

Radyal integral hesaplanırken $a = b \neq c$ durumu için çözüme ulaşılmıştır (bakınız (56) ve (89) eşitliklere). Bundan başka, $a \neq b = c$ ya da $a = c \neq b$ durumları içinde radyal integral hesaplanarak taban durumu enerjisi elde edilebilir. Ancak, aynı NN, MM, KK değerinde r_1 ve r_2 simetrisinden dolayı tüm bu durumlar içinden $a = b \neq c$ durumu için elde edilen taban durum enerjisinin daha iyi bir yaklaşım olması beklenir.

Dikkatte alınması gereken diğer bir önemli unsur ise görelî hareket ve çekirdek hareketi gibi ilk aşamada ihmal edilmiş durumlardır. Varyasyonel yöntemin çok hassas hesaplama imkanı vermesi ihmal edilmiş bu durumların göz önüne alınmayacağı anlamına gelmez. Daha gerçekçi bir taban durumu enerji değeri için bu katkıları da dikkate almak gerekir.

Son olarak, varyasyonel yöntem çok etkili bir yöntem olmasına rağmen üç ve daha fazla elektronlu atomların enerji seviyeleri için hesaplamalar karmaşık bir hale geldiğinden dolayı genelde kullanılmaz. Bu hesaplamalar için başka yaklaşık yöntemlere başvurulur.

5. ÖNERİLER

İki boyutta helyum atomunun taban durumunu hesaplamak için seçilen deneme fonksiyonu (56) biçimindedir. Ancak bu deneme fonksiyonu için sadece $a = b = c$ ve $a = b \neq c$ için çözümüne ulaşılmıştır. Bu nedenle, $a \neq b \neq c$ şeklindeki çözüm araştırılabilir. Öte yandan, kullanılan deneme fonksiyonları hesaplama kolaylığı sağladığı için literatürde değişik türde deneme fonksiyonları vardır ve seçilen uygun bir deneme fonksiyonu ile daha düşük boyutta matrisler kullanarak daha iyi sonuçlar elde etmek mümkündür.

Varyasyonel yöntem kullanılarak iki boyutta helyum atomunun uyarılmış durumları da hesaplanabilir. Ya da bu algoritma ve gelişmiş bilgisayarlar kullanılarak iki boyutta helyum ve helyum benzeri iyonların taban durum enerjileri daha yüksek hassasiyetle hesaplanabilir.

Varyasyonel yöntem iki ve üç boyutlu helyum atomun taban durum enerjisinin belirlenmesinde kullanılabileceği gibi bir boyutlu helyum atomu içinde kullanılabilir.

KAYNAKLAR

- Drake, G. W. F., Cassar, M. M., and Nistor R. A., 2002.** Ground-state energies for helium, H^- , and Ps^- . *Physical Review A*, 65, 1-4. DOI: 10.1103/PhysRevA.65.054501
- Frankowski, K. and Pekeris, C. L., 1966.** Logarithmic Terms in the Wave Functions of the Ground State of Two-Electron Atoms. *Physical Review*, 146, 46-49. DOI: 10.1103/PhysRev.146.46
- Goldman, S. P., 1998.** Uncoupling correlated calculations in atomic physics: Very high accuracy and ease. *Physical Review A*, 57, 677-680. DOI: 10.1103/PhysRevA.57.R677
- Hilico, L., Gremaud, B., Jonckheere, T., Billy, N. and Delande, D., 2002.** Quantum threebody Coulomb problem in two dimensions, *Physical Review A*, 66, 1-12. DOI: 10.1103/PhysRevA.66.022101
- Hyllerass, E. A., 1929.** Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium. *Zeitschrift für Physik*, 54, 347-366. DOI: 10.1007/BF01375457.
- Kırıř, E. 2010.** İki Boyutlu Helyum Atomunun Taban Durum Enerjisinin Hesaplanması, Yüksek Lisans Tezi, Rize Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Rize, Türkiye, 59s, 8-15.
- Kinoshita, T., 1957.** Ground State of the Helium Atom. *Physical Review*, 105, 1490-1502. DOI: 10.1103/PhysRev.105.1490
- Korobov, V. I., 2002.** Nonrelativistic ionization energy for the helium ground state. *Physical Review A*, 66,1-2, DOI:10.1103/PhysRevA.66.024501
- MacDonald, J. K. L., 1930.** Successive Approximations by the Rayleigh-Ritz Variation Method, *Physical Review*, 43, 830 -833. DOI: 10.1103/PhysRev.43.830
- Nakashima, H., and Nakatsujia, H., 2007.** Solving the Schrödinger equation for helium atom and its isoelectronic ions with the free iterative complement interaction (ICI) method. *The Journal of Chemical Physics*, 127, 1-13. DOI: 10.1063/1.2801981
- Patil, S. H., 2008.** The Helium Atom and Isoelectronic Ions in Two Dimensions, *European Journal of Physics*, 29, 517–525. DOI:10.1088/0143-0807/29/3/012
- Schwartz, C., 2006.** *International Journal of Modern Physics E*, 15, 877–888. DOI: 10.1142/S0218301306004648

Sims, J. S. and Hagstrom, S. A., 2002. High-precision Hy–CI variational calculations for the ground state of neutral helium and helium-like ions. *International Journal of Quantum Chemistry*, 90, 1600–1609. DOI: 10.1002/qua.10344

Thakkar , A. J. and Koga, T., 1994. Ground-state energies for the helium isoelectronic series. *Physical Review A*, 50, 854-856. DOI: 10.1103/PhysRevA.50.854

EKLER

Hesaplamalar için kullanılan program:

```
from mpmath import*
mp.dps = 100

#oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

sNN = input("NN = ")
NN = int(sNN)

sMM = input("MM = ")
MM = int(sMM)

sKK = input("KK = ")
KK = int(sKK)

sa = input("a = ")
a = float(sa)

sc = input("c = ")
c = float(sc)

b = a
ndim = (NN+1)*(MM+1)*(KK+1)

dosya = open("Enerji", "w")

print('NN = ', NN, file = dosya)
print('MM = ', MM, file = dosya)
print('KK = ', KK, file = dosya)
print('a = ', a, file = dosya)
print('c = ', c, file = dosya)
print('-----', file = dosya)

#oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

def ana(a1,b2,c3,coef1,Umatris1,I1,J1,K1):

    if I1 < -1 or J1 < -1 or K1 < -1 :

        X = mpf(0)

    else :

        np1 = int( (I1+2)/2 )
        np2 = int( (J1+2)/2 )
        np3 = int( (K1+2)/2 )
```

```

tt = mpf(0)

for L in range(np1,I1+2):
    for M in range(np2,J1+2):
        for N in range(np3,K1+2):

            t1 = coef1[I1+1,L]*coef1[J1+1,M]*coef1[K1+1,N]
            t1 = t1*mpf(a1)**(2*L-I1-1)*mpf(b2)**(2*M-J1-1)*mpf(c3)**(2*N-K1-
1)

            t2 = (-mpf(2))**(L+M+N)
            t1 = t1*t2*fac2(2*L-1)*fac2(2*M-1)*fac2(2*N-
1)*Umatris1[N,M+L+1]*mpf(2)*pi**2
            tt = tt+t1

            Xa = mpf(2)**(I1+J1+K1+3)
            X = tt*(-mpf(1))**(I1+J1+K1+3)/Xa

return X

#oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

ncoef = 42
coef = matrix(101)
coef[0,0] = mpf(1)
coef[1,1] = mpf(2)

for i in range(1,ncoef):
    ii=int((i+2)/2)
    for j in range(ii,i+2):

        x = mpf(2*j-i)
        y = mpf(2)
        coef[i+1,j] = x*coef[i,j]+y*coef[i,j-1]

#oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

Boyut = 2*(NN+MM)+10
U1matris = matrix(1,Boyut)
B = mpf(4)*(mpf(c)**2-mpf(a)**2)

if B > 0:

    U1matris[0,0] = log( (mpf(2)*mpf(c)+sqrt(B))/( mpf(2)*mpf(c)- sqrt(B) )
)/(mpf(2)*sqrt(B))

if B < 0:

    U1matris[0,0] = ( pi/mpf(2)- atan(mpf(2)*mpf(c)/sqrt(-B)) ) / sqrt(-B)

```

```

for i in range(1,Boyut):

    S1 = (-mpf(1) + mpf(1)/(mpf(2)*mpf(i)))*U1matris[0,i-1] + mpf(c)/( mpf(i)*(
mpf(4)*mpf(c)**2-mpf(B) )**i)
    U1matris[0,i] = S1/mpf(B)

#oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

Boyut1 = 2*(KK)+10
Umatris = matrix(Boyut1,Boyut)

for M1 in range(1,Boyut):

    Umatris[0,M1] = mpf(2)*U1matris[0,M1-1]

for N1 in range(1,Boyut1-1):

    for M1 in range(1,Boyut-1):

        TT1 = mpf(0)
        TT2 = mpf(0)

        for i in range(0,N1):

            SS1 = fac(M1+N1-i-2)/(fac(N1-1-i)*fac(M1-1)*mpf(B)**(N1+M1-i-1))
            SS1 = SS1/((mpf(2)*mpf(i)+mpf(1))*(mpf(2)*mpf(c))**(2*i+1))
            TT1 = TT1+SS1

        TT1 = TT1*(-mpf(1))**(M1)

        for j in range(0,M1):

            SS2 = fac(M1+N1-j-2)/(fac(M1-1-j)*fac(N1-1)*(-mpf(B))**(N1+M1-j-1))
            SS2 = U1matris[0,j]*SS2
            TT2 = TT2 + SS2

        TT2 = TT2*(-mpf(1))**(N1)

        Umatris[N1,M1]= mpf(2)*(TT1+TT2)

#oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

HD = matrix(2*NN+5,2*MM+5,2*KK+5)

for i in range(-2,2*NN+3):
    for j in range(-2,2*MM+3):
        for k in range(-2,2*KK+3):

```

```

HD[i+2,j+2,k+2] = ana(a,b,c,coef,Umatris,i,j,k)

print('HD Bitti')

#oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

H=matrix(ndim)
S=matrix(ndim)

for n in range(0,NN+1):
    for m in range(0,MM+1):
        for k in range(0,KK+1):

            ii = (KK+1)*(MM+1)*n + (KK+1)*m + k

            for n1 in range(0,NN+1):
                for m1 in range(0,MM+1):
                    for k1 in range(0,KK+1):

                        jj = (KK+1)*(MM+1)*n1 + (KK+1)*m1 + k1

#*****

            A1 = -mpf(2)*mpf(a)*mpf(n)*HD[n1+n-1+2,m1+m+2,k1+k+2]
+mpf(a)**2*HD[n1+n+2,m1+m+2,k1+k+2]
            A1 = A1 + mpf(n)*mpf(n-1)*HD[n1+n-2+2,m1+m+2,k1+k+2]

#*****

            A2 = -mpf(2)*mpf(b)*mpf(m)*HD[n1+n+2,m1+m-1+2,k1+k+2]
+mpf(b)**2*HD[n1+n+2,m1+m+2,k1+k+2]
            A2 = A2 + mpf(m)*mpf(m-1)*HD[n1+n+2,m1+m-2+2,k1+k+2]

#*****

            B1 = -mpf(a)*HD[n1+n-1+2,m1+m+2,k1+k+2]
            B1 = B1 + mpf(n)*HD[n1+n-2+2,m1+m+2,k1+k+2]

#*****

            B2 = -mpf(b)*HD[n1+n+2,m1+m-1+2,k1+k+2]
            B2 = B2 + mpf(m)*HD[n1+n+2,m1+m-2+2,k1+k+2]

#*****

            A12 = -mpf(2)*mpf(c)*mpf(k)*HD[n1+n+2,m1+m+2,k1+k-1+2] +
mpf(c)**2*HD[n1+n+2,m1+m+2,k1+k+2]
            A12 = A12 + k*(k-1)*HD[n1+n+2,m1+m+2,k1+k-2+2]

```

#*****

$$\begin{aligned} B12 &= -\text{mpf}(c)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m+2,k1+k-1+2] \\ B12 &= B12 + \text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m+2,k1+k-2+2] \end{aligned}$$

#*****

$$\begin{aligned} E1a &= \text{mpf}(n)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m+2,k1+k- \\ &2+2]+\text{mpf}(a)*\text{mpf}(c)*\text{HD}[n1+n+1+2,m1+m+2,k1+k-1+2] \\ E1a &= E1a - \text{mpf}(a)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n+1+2,m1+m+2,k1+k-2+2]- \\ &\text{mpf}(c)*\text{mpf}(n)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m+2,k1+k-1+2] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E1b &= \text{mpf}(n)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n- \\ &2+2,m1+m+2,k1+k+2]+\text{mpf}(a)*\text{mpf}(c)*\text{HD}[n1+n-1+2,m1+m+2,k1+k+1+2] \\ E1b &= E1b - \text{mpf}(a)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n-1+2,m1+m+2,k1+k+2]- \\ &\text{mpf}(c)*\text{mpf}(n)*\text{HD}[n1+n-2+2,m1+m+2,k1+k+1+2] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E1c &= -\text{mpf}(n)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n-2+2,m1+m+2+2,k1+k-2+2]- \\ &\text{mpf}(a)*\text{mpf}(c)*\text{HD}[n1+n-1+2,m1+m+2+2,k1+k-1+2] \\ E1c &= E1c+\text{mpf}(a)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n-1+2,m1+m+2+2,k1+k- \\ &2+2]+\text{mpf}(c)*\text{mpf}(n)*\text{HD}[n1+n-2+2,m1+m+2+2,k1+k-1+2] \end{aligned}$$

$$E1 = E1a + E1b + E1c$$

#*****

$$\begin{aligned} E2a &= \text{mpf}(m)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m+2,k1+k- \\ &2+2]+\text{mpf}(b)*\text{mpf}(c)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m+1+2,k1+k-1+2] \\ E2a &= E2a - \text{mpf}(b)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m+1+2,k1+k-2+2]- \\ &\text{mpf}(c)*\text{mpf}(m)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m+2,k1+k-1+2] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E2b &= \text{mpf}(m)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m- \\ &2+2,k1+k+2]+\text{mpf}(b)*\text{mpf}(c)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m-1+2,k1+k+1+2] \\ E2b &= E2b - \text{mpf}(b)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m-1+2,k1+k+2]- \\ &\text{mpf}(c)*\text{mpf}(m)*\text{HD}[n1+n+2,m1+m-2+2,k1+k+1+2] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E2c &= -\text{mpf}(m)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n+2+2,m1+m-2+2,k1+k-2+2]- \\ &\text{mpf}(b)*\text{mpf}(c)*\text{HD}[n1+n+2+2,m1+m-1+2,k1+k-1+2] \\ E2c &= E2c+\text{mpf}(b)*\text{mpf}(k)*\text{HD}[n1+n+2+2,m1+m-1+2,k1+k- \\ &2+2]+\text{mpf}(c)*\text{mpf}(m)*\text{HD}[n1+n+2+2,m1+m-2+2,k1+k-1+2] \end{aligned}$$

$$E2 = E2a + E2b + E2c$$

#*****

$$Hij = -(A1 + A2 + B1 + B2 + \text{mpf}(2)*A12 + \text{mpf}(2)*B12 + E1 + E2)/\text{mpf}(2)$$

```

        Hij = Hij -mpf(2)*HD[n1+n-1+2,m1+m+2,k1+k+2]-
mpf(2)*HD[n1+n+2,m1+m-1+2,k1+k+2]
        Hij = Hij + HD[n1+n+2,m1+m+2,k1+k-1+2]

        H[ii,jj] = Hij
        S[ii,jj] = HD[n+n1+2,m+m1+2,k1+k+2]

Umatris = 0
HD = 0
U1matris = 0
coef = 0
print(H[3,ndim-5])
print(H[ndim-5,3])
print(H[0,ndim-3])
print(H[ndim-3,0])
print(S[0,ndim-3])
print(S[ndim-3,0])

#oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

Chole = cholesky(S)
S = 0
print('Chole = cholesky(S) Bitti')

iChole = Chole**-1
Chole = 0
print('iChole = Chole**-1 Bitti')

TChole = iChole.T
print('TChole = iChole.T Bitti')

CholeH = iChole*H*TChole
H = 0
iChole = 0
TChole = 0
print('CholeH = iChole*H*TChole Bitti')

print('Eig BaÅŸladÄ±')
Eig = mp.eigsy(CholeH,eigvals_only = True, overwrite_a=True)

for p in range(0,ndim):

    print(Eig[p],file = dosya)
    print("-----",file=dosya)

dosya.close()

#oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

```

ÖZGEÇMİŞ

Mesut Yılmaz ESMER, 26/11/1986 tarihinde İstanbul’ da doğdu. İlköğretimini 2001 yılında İstanbul/ Güngören ilinde/ilçesinde Mehmetçik İlköğretim Okulu’nda ve Ortaöğretimini 2005 yılında Rize/Çayeli ilinde/ilçesinde Vakıfbank Lisesi’nde tamamladı. 02/09/2008 tarihinde başladığı lisans eğitimini 06/06/2012 tarihinde Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü’nde 88.63 derecesi ile tamamladı. 2013 yılında Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Bölümü’nde başladığı yüksek lisans öğrenimini halen devam ettirmektedir.

Bilimsel Çalışmaları ve Yayınları;

1. Mamedov, B. A. and Esmer, M. Y., 2014. on the Philosophical Nature of Einstein’s Mass-Energy Equivalence Formula $E = mc^2$, Foundations of Science, 19, 4, 319-329. DOI:10.1007/s10699-013-9339-6