

22195

KARADENİZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ * FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

FİZİK PROGRAMI

ATOMLARDA KONFIGÜRASYON ETKİLEŞMESİ YÖNTEMİ

Fizikçi İbrahim OKUR

Karadeniz Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsünce
"Yüksek Lisans (Fizik)"
Ünvanının Verilmesi İçin Kabul Edilen Tezdir

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 29.05.1992
Tezin Sözlü Savunma Tarihi : 30.06.1992

Tez Danışmanı : Yrd.Doç.Dr.Hüseyin KARAL

Jüri Üyesi : Doç.Dr.A. İhsan KOPYA

Jüri Üyesi : Doç.Dr.Hüseyin DIRİM

Enstitü Müdürü : Doç. Dr. Temel SAVAŞKAN

TEMMUZ - 1992

TRABZON

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

ÖNSÖZ

Bu yüksek lisans tezi çalışmasında, Atomlarda Konfigürasyon Etkileşmesi Metoduna göre hazırlanmış bir kompüter programının incelenmesi ve yürütülmesi konu alınmıştır. Program kuantum mekaniği, atom fiziği ve bilgisayar hesaplama yönleriyle incelendikten sonra, KTÜ Bilgi İşlem Merkezindeki IBM 4341 sisteminde çalıştırılmıştır. Tezde programın kısa bir dökümü yapılmış, daha sonra bütün altprogramlar ve birkaç hesap sonuçları tanıtılmıştır. Daha başka uygulamaları da kolaylıkla yapılabilir.

Çalışma konusunu teklif eden ve genel idareciliğini yapan Yrd.Doç.Dr.Hüseyin KARAL'a, KTÜ Bilgi İşlem Merkezinin değerli personeline, maddi destek sağlayan KTÜ Araştırma Fonu Yönetimine teşekkürlerimi sunarım.

Temmuz 1992

Ibrahim OKUR

İÇİNDEKİLER

	Sayfa no:
ÖNSÖZ	II
ÖZET	V
ABSTRACT	VI
BÖLÜM 1	
GİRİŞ	1
BÖLÜM 2	
KONFIGÜRASYON ETKİLEŞMESİ VE OSİLATÖR KUVVETİ	3
2.1. Hylleraas Yöntemi	3
2.2. Konfigürasyon Etkileşmesi Yöntemi	4
2.3. Osilatör Kuvveti	6
2.3.1. Tanımlar ve Formüller	6
2.3.2. Dipol Yaklaşıklığı	8
2.4. Atomik Kompüter Programları	9
2.4.1. Paket Programlar	10
BÖLÜM 3	
KOMPÜTER PROGRAMININ TANITILMASI	13
3.1. Hamiltonyen Matris Elemanları	14
3.1.1. İki Elektron İntegralleri	14
3.1.2. Tek Elektron İntegralleri	15
3.1.3. Radyal Fonksiyonlar	15
3.2. Optimumlama İşlemi	16
3.3. Programın Genel Akışı	16
3.4. Faz Anlaşmaları	20
3.5. Yöntemin Diğer Atomik Özellikleri	20
3.5.1. Osilatör Kuvveti	21
3.5.2. Alt Köşegenleştirme	21
3.5.3. Konfigürasyon Takımının Büyütülmesi ...	21
3.5.4. Optimumlaştırılacak Fonksiyonelin Tanımı	22
3.5.5. Eş Elektronik Dizi	22

3.5.6. Hamiltonyen Matrisinin Girdirilişı ve Çıkarılışı	22
3.5.7. Dışa Yazma Seviyeleri	22
3.6. Ortak Bloklar	22
3.7. Altprogramların Tanıtılması	24
3.8. Giriş Bilgilerinin Tanımlanması	33
3.8.1. Kısım A- Giriş Deyimleri	34
3.8.2. Kısım B- Giriş Verilerinin Tanıtılması	38
3.8.2.1. Temel Bilgiler	38
3.8.2.2. Radyal Fonksiyonlar İçin Temel Veriler	40
3.8.2.3. Radyal Fonksiyonlar	41
3.8.2.4. Konfigürasyon Verileri	41
3.8.2.5. Fonksiyon Tipi	43
3.8.2.6. Optimumlaştırma Verileri	44
3.8.2.7. Hamiltonyen Matrisinin Girdirilişı	47
3.8.2.8. Hamiltonyen Matrisinin Çıkarılması	47
3.8.2.9. Konfigürasyon Takımının Genişletilmesi	47
3.8.2.10. Çok İnce Yapı Verileri	48
3.8.2.11. Osilatör Kuvvetleri Verileri	48
3.8.2.12. Alt Köşegenleştirme	49
3.8.2.13. Yürütmenin Devam veya Sonlandırılması	49
BÖLÜM 4	
PROGRAMIN ÇALIŞTIRILMASI VE SONUÇLAR	51
4.1. Test Durumları	51
4.2. Sonuçlar	53
KAYNAKLAR	56
EKLER	58
ÖZGEÇMİŞ	71

ÖZET

Bu çalışmada, korelasyon enerjisi hesaplamaya yönelik "Konfigürasyon Etkileşmesi Metodu" kullanılarak 12'den az elektrona sahip atom sistemleri için, dalga fonksiyonları, bunlara karşılık gelen enerjiler ve osilatör kuvveti hesaplamaları gerçekleştirilmiştir.

Hesaplamalar için, yurt dışından sağlanan ve KTÜ'deki kompüter sistemine adapte edilmiş bir paket program, verileri hazırlanarak çalıştırılmıştır. Sekiz farklı durum için enerji ve osilatör kuvveti hesaplamaları gerçekleştirilmiştir.

12'den fazla elektrona sahip sistemler için gerçek enerjilerle hesaplanan enerjiler arasındaki fark artmaktadır. Bu sistemler için çok ince yapı, fotoiyonlaşma, çarpışmayla uyarma, Van-der Waals kuvvetleri ve elektron atom saçılma hesapları enerjiye eklendiği takdirde gerçek enerjilere yakın enerjiler hesaplamak mümkün olacaktır.

ABSTRACT

In this work, correlation energies and oscillator strengths for atoms containing less than twelve electrons have been computed. The method of configuration interaction has been used.

The computer program used has been obtained from CPC Program Library and adapted to the computer system of KTU. Suitable input data have been supplied and the program has been run. Energy and oscillator strength has been calculated for different eighth cases.

The difference between experimental and computed energies increases for systems containing more than twelve electrons. For these systems adding the hyperfine structure, photoionization, collisional excitation, Van-der Waals forces and electron-atom scattering calculations to energy, it is possible to obtain results that agree with experimental values.

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Çok elektronlu atomların yapısının ayrıntılarını incelemek için Schrödinger eşitliğinin çözümüne birtakım katkılar araştırılmalıdır. Bu katkıları veren yaklaşımlar, sonlu bir baz cümlesi cinsinden dalga fonksiyonlarının gösteriminden doğan, genelde matematiksel nitelik taşımaktadırlar.

Bu yaklaşımlardan en köklü olanları Hartree ve Hartree-Fock(HF) metodlarıdır. Hartree metodu herbir elektronun diğerinden bağımsız hareketine izin verir. Hartree-Fock metodu, Pauli ilkesini sağlamayan Hartree metodundan farklı olarak dalga fonksiyonunun bir determinant şeklinde yazılmasını içerir. Böylece dışarlama ilkesi sağlanır[1].

Slater,değişim ilkesini kullanarak Hartree-Fock metodunu basitleştirmiştir. Slater'ın bu düşüncesi daha sonraları Hartree-Fock Slater metodu olarak isimlendirilmiştir[2].

Hartree-Fock denklemleri iteratif yolla veya tedirginlik yöntemi ile çözülebilirler. İteratif yaklaşımda uzay yörüngesileri için uygun fonksiyonlar tahmin edilir, direkt ve değiştirmeli potansiyeller hesaplanır. Bu sonuçlar HF denklemlerine alınarak yeni fonksiyonlar bulunur. Uyum sağlanana kadar böylece devam edilir. Sonuçlar sayı tabloları halinde verilir. Tedirginlik yöntemi uygulandığı hallerde ise merkezi alan Hamiltonyeni sıfırncı mertebe enerji işlemcisi olarak alınır, geri kalan işlemciler tedirginlik muamelesi görür.

Hartree-Fock yöntemleri çok geniş uygulama görmüş ve elektronik hesap makinelerine uygun tarzda değişik programlamaları yapılmaktadır. Üzerindeki birçok kısıtlamaların kaldırılması ile elde edilen "Sınırlandırılmamış Hartree-Fock Yöntemi" ile daha iyi sonuçlar alınıyor ise de birçok

maksatlar için bunlar yeterli değildir. Daha sağlıklı yöntemler de bulunmaktadır. Bunlardan en önemli olanları Hylleraas yöntemi[3], konfigürasyon etkileşmesi yöntemi(KE) ve çok elektron teorileridir.



BÖLÜM 2

KONFIGÜRASYON ETKİLEŞMESİ ve OSİLATÖR KUVVETİ

Hartree-Fock Yöntemi antisimetrik dalga fonksiyonları kullanarak paralel spinli iki elektron arasındaki korelasyonu hesaba katar, fakat zıt yönelmiş spinler halindeki korelasyonu ihmal etmektedir. Bu yüzden enerji farkları, geçiş olasılıkları ve relativistik katkıların hesabı gibi hallerde gerekli duyarlılıkta dalga fonksiyonlarının ve enerjilerin HF metoduyla elde edilmesi beklenemez. Bir atom veya molekülün relativistik olmayan gerçek enerjisi ile HF enerjisi arasındaki farka "Korelasyon Enerjisi" denir. Bu enerji, toplam enerjinin %1-5 i gibi küçük bir miktardır[3]. Bu farkı hesaba katmak için geliştirilen yöntemlere "Korelasyon Yöntemleri" denir. Bunların en önemli iki tanesi Hylleraas Yöntemi ve Konfigürasyon Etkileşmesi Yöntemidir.

2.1. Hylleraas Yöntemi

Elektronlararası etkileşmeyi hesaba katmak için Hylleraas, elektronlararası uzaklığı, $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, doğrudan dalga fonksiyonuna sokmayı düşündü[3]. "Hylleraas Fonksiyonu" diye adlandırılan

$$\Psi(r_1, r_2, r_{12}) = \exp[-\frac{1}{2}k(r_1+r_2)] \cdot \sum_n \sum_l \sum_m c_{nlm} \cdot (k(r_1+r_2))^n (k(r_2-r_1))^l (kr_{12})^m \quad (2.1)$$

ifadesini ve değişim yöntemini kullanarak He için birkaç terimle çok iyi enerjiler elde etti. Hylleraas yöntemi daha sonraları geliştirilmiştir. Bu yöntemle üç elektronlu atomlara gidildiğinde hesaplanması pek zor olan;

$$\int \exp[-(ar_1+br_2+cr_3)] r_1^d r_2^e r_3^f r_1^g r_2^h r_3^j dr$$

tipinde integrallerle karşılaşılır. Bu tür integraller gelişmiş kompüter programlarıyla hesaplanabilmektedir. Daha fazla elektrona sahip atomlara gelindiğinde Hylleraas yöntemi imkansız denecek kadar zorlaşmaktadır.

2.2. Konfigürasyon Etkileşmesi Yöntemi

Kesin paritenin durumu, S^2 , S_z , L^2 , L_z orbital açısal momentum operatörleri ve spinin bir özfonksiyonu vektör çiftlenim tekniklerine göre[4] verilir. Bu vektör çiftlenim tekniklerine göre; spin ve açısal fonksiyonları düzenleyen, N-orbital fonksiyonlarının bir cümlesi, bir atomik sistemin N-elektronunu temsil etmek üzere "konfigürasyon" terimiyle isimlendirilir. Örneğin karbonun 3P temel hali için HF konfigürasyonu $1s^2(1s)2s^2(1s)2p^2(3P)$ ile temsil edilmelidir. Konfigürasyon terimi bazen basitçe, elektronların (nl) değerlerinin bir cümlesine atanmasını göstermede kullanılır. Karışıklık doğduğu durumlarda, "elektron konfigürasyonu" terimi kullanılır.

Bir elektrona bir özel (nl) yörüngemsisinin verilmesi HF metodunun koyduğu bir kısıtlamadır. Örnek olarak berilyumun temel durum HF konfigürasyonunun $1s^2 2s^2 1s$ olması durumunda temel durum dalga fonksiyonu

$$\Psi = a_1 \phi_1(1s^2 2s^2 1s) + a_2 \phi_2(1s^2 2p^2 1s) \quad (2.2)$$

şeklindedir. Burada ϕ_1 ve ϕ_2 iki konfigürasyonu anlatan fonksiyonlar, a_1 ve a_2 değişimden tayin edilebilen parametrelerdir. (2.2) eşitliği konfigürasyon etkileşmesi(KE) dalga fonksiyonuna bir örnektir.

Genelde bir KE dalga fonksiyonu

$$\Psi = \sum_{i=1}^M a_i \phi_i(\alpha_i LS) \quad (2.3)$$

şeklini alır[5]. Burada M, prensip olarak sonsuz fakat bütün pratik hesaplamalarda sonludur. $\{\Phi_i\}$ her biri bir konfigürasyonu anlatan "konfigürasyon dalga fonksiyonları"nın bir cümlesidir. Konfigürasyonların çiftlenmesi ve pariteler $\{\alpha_i\}$ ile gösterilir. Denklem (2.3)'teki konfigürasyonlar bir ortak pariteye sahip olmalıdır. $\{a_i\}$ sabitleri, H

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i} + \sum_{i<j} \sum \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi = H\Psi = E\Psi$$

N-elektron Hamiltonyeni olmak üzere, $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ şartıyla $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ açılımının minimumlaştırılması sonucu tayin edilmelidir. E Lagrange çarpanının getirilmesiyle;

$$\sum_{j=1}^M (H_{ij} - ES_{ij}) a_j = 0, \quad i=1, 2, \dots, M \quad (2.4)$$

elde edilir. Burada $H_{ij} = \langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle$ ve $S_{ij} = \langle \Phi_i | \Phi_j \rangle$ 'dir. Böylece mümkün E enerji değerleri, S üstüste getirme matrisi ile ilgili olarak H matrisinin özdeğerleridir. $\{a_i\}$ katsayıları karşılık gelen özvektörlerin bileşenleridir. S, Φ_i orthonormal cümle alındığında birim matrise indirgenir.

Değişim ilkesi [6] kullanıldığında en düşük özdeğer, en düşük enerji değerine bir üst sınır teşkil eder. Uyarılmış hal için değişim ilkesinin alışılmış şekli, bunun dalga fonksiyonu daha düşük hallerin doğru dalga fonksiyonlarına dik ise uygulanır. Fakat (2.3) KE dalga fonksiyonunun şekli, Hylleraas-Undheim teoremi gereği[7]

$$E^{(j)} \geq E_{\text{doğru}}^{(j)} \quad (2.5)$$

ifadesini verir. Burada $E^{(j)}$ j'yinci en düşük özdeğer ve $E_{\text{doğru}}^{(j)}$ özel simetrinin j'yinci en düşük enerji seviyesidir.

$\{\Phi_i\}$ konfigürasyon fonksiyonları ve böylece $\{E^{(j)}\}$ özdeğerleri $\{P_{n1}\}$ radyal fonksiyonlarının seçimine bağlıdır. (2.5) eşitsizlikleri radyal fonksiyonların değişmesine göre minimumlaştırılacak fonksiyonel olarak herhangi bir

özdeğerin kullanılmasına izin verir. Bu değişimi gerçekleştirmek için iki farklı yol vardır:

(a) Konfigürasyon cümlesi HF konfigürasyonunu içermelidir. Konfigürasyonların süperpozisyonu metodu(SOC), HF radyal fonksiyonlarını geri kalan konfigürasyonları tanımlamak için ihtiyaç duyulan radyal fonksiyonlarla tamamlar[8]. Bu ilave fonksiyonlar yukarıda söylendiği gibi optimizedirler. HF konfigürasyonundaki fonksiyonlar yeniden optimumlaştırılmış değildirler.

(b) HF fonksiyonlarının yeniden optimumlaştırılması daha büyük esnekliğe izin verir ve bu çok konfigürasyonlu HF (MCHF) yönteminin bir özelliğidir. SOC ve MCHF arasındaki bu farklılık helyumun temel hali için iyice belirgindir. Fakat SOC ve MCHF yöntemleri arasında bir başka önemli ayrılık vardır. SOC metodundan farklı olarak MCHF metodu, değişim ilkesini radyal fonksiyonların diferansiyel denklemlerini elde etmek için kullanır. Çözüm herbiri iki kısımdan oluşan tekrarlama işlemini içerir:

(i) $\{a_j\}$ 'nin verilen bir tahmini için denklemler radyal fonksiyonları elde etmek için öz uyumlu şekilde çözülür,

(ii) Bu radyal fonksiyonlar için $\{a_j\}$ 'nin bir yeni cümlesi elde edilir.

SOC için radyal fonksiyonlar HF metodunda olduğu gibi [5], analitik şekilde temsil edilirler.

2.3. Osilatör Kuvveti

Bir atomda bir durumdan diğerine geçiş ele alındığında, ya enerji soğurulması ya da kendiliğinden veya etkiyle oluşan enerji salması gerçekleşir. Bu kesimde korelasyonu içine alan dalga fonksiyonlarını kullanan geçiş ihtimalinden söz edeceğiz.

2.3.1. Tanımlar ve Formüller

Geçiş ihtimallerini veren formüllerin elde edilmesi için zamana bağlı Schrödinger denklemi ele alınmalıdır:

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (2.6)$$

Burada H Hamiltonyeni sadece elektrostatik etkileşmeyi değil, radyasyon alanı içindeki bir elektronlu sistemler için $(e/mc)\vec{A}\cdot\vec{p}$ şeklindeki elektromagnetik düzeltmeleri de içerir. \vec{A} , elektromagnetik alanla uyuşan vektör potansiyeli ve \vec{p} elektronun momentumudur.

Dalga fonksiyonu böylece $\{E_n\}$ enerjilerine sahip $\{\Psi_n\}$ kararlı hal dalga fonksiyonlarına açılmış olarak ifade edilir:

$$\Psi = \sum_n C_n(t) \exp(-iE_n t/\hbar) \Psi_n \quad (2.7)$$

Burada toplam kontinyum üzerinden bir integrali de içine alır. Eğer atom $t=0$ anında $|i\rangle$ halindeyse $n \neq i$ için $C_j(0)=0$, $C_i(0)=1$ olacaktır. Eğer vektör potansiyeli $A_0 \cos(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})$ şeklinde düzlem dalgaların bir Fourier serisi olarak verilirse, tek elektronlu atomlarda soğurma için birinci mertebe perturbasyon teorisi;

$$\frac{1}{t} |C_j(t)|^2 = \frac{2\pi}{3} \frac{c^2}{\hbar^2 \nu_{ji}} \left| \langle j | \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) | i \rangle \right|^2 \rho(\nu_{ji}) \quad (2.8)$$

$$= B_{ij} \rho(\nu_{ji}) \quad (2.9)$$

ifadesini verir. Burada

$$h\nu_{ji} = E_j - E_i \quad (2.10)$$

ile verilir. B_{ij} , soğurma için Einstein katsayısı ve $\rho(\nu_{ji})$ birim frekans aralığı başına enerji yoğunluğudur.

Soğurma osilatör kuvveti f_{ij} , Einstein katsayısına

$$f_{ij} = \frac{m}{\pi e^2} h\nu_{ji} B_{ij} \quad (2.11)$$

ifadesiyle bağlıdır. Soğurma osilatör kuvveti pozitiftir.

2.3.2. Dipol Yaklaşıklığı

\vec{k} dalga vektörünün büyüklüğü $k=2\pi/\lambda$ 'dır. Böylece atomların boyutuyla karşılaştırıldığında büyük dalga boyları için $\vec{k}\cdot\vec{r}\ll 1$ elde edilir. Böylece;

$$\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})=1+i\vec{k}\cdot\vec{r}+\dots \quad (2.12)$$

açılımı hızlı bir şekilde etkin terim halini alır. Denklem (2.12)'nin denklem (2.8)'de kullanılmasıyla multipol açılımının dipol yaklaşıklığı elde edilir[9]:

$$\frac{i\hbar}{m} \vec{p} = i\hbar \dot{\vec{r}} = [\vec{r}, H_0] \quad (2.13)$$

(2.8) matris elemanı dipol yaklaşıklığıyla

$$\langle j | \frac{e}{mc} \vec{p} | i \rangle = \frac{ie}{\hbar c} \langle j | H_0 \vec{r} - \vec{r} H_0 | i \rangle = \frac{i}{\hbar c} (E_j - E_i) \langle j | e\vec{r} | i \rangle \quad (2.14)$$

olarak açıklanır. Böylece soğurma osilatör kuvveti için iki eşdeğer denkleme sahip oluruz:

$$f_{ij}^l = \frac{2}{3} \frac{m}{h^2} (E_j - E_i) |\langle j | \vec{r} | i \rangle|^2 \quad (2.15)$$

$$f_{ij}^v = \frac{2}{3} \frac{1}{m} \frac{1}{E_j - E_i} |\langle j | \vec{p} | i \rangle|^2 \quad (2.16)$$

Bunlar hız ve boy şekliyle ifade edilmiş osilatör kuvvetleridir. (2.13) niceliği \vec{p} yerine $\dot{\vec{r}}$ ile uygulanabilir ve bu yolla ivme şekliyle ifade edilen osilatör kuvveti elde edilir:

$$f_{ij}^a = \frac{2}{3} \frac{h^2}{m} \frac{1}{(E_j - E_i)^3} |\langle j | \ddot{r} | i \rangle|^2 = \frac{2}{3} \frac{z^2 e^4 h^2}{m(E_j - E_i)^3} |\langle j | \frac{1}{r^3} \vec{r} | i \rangle|^2 \quad (2.17)$$

Burada V elektrostatik potansiyel enerjidir.

2.4. Atomik Kompüter Programları

Atom ve moleküllere ait hesap programlarının ortak kullanımları için "Kuantum Kimyası Program Servisi" sistemi kurulmuştur. 1970'li yıllarda bu alanda bir standartlaştırmaya gidilmiş ve programların birbirleri ile uyumlu hale gelmesi için "Kompüter Fiziği İletişimi" (CPC) isimli dergi yayınlanmaya başlanmıştır.

CPC hesaplama fiziği ve fiziko-kimya dallarındaki programları içeren bir uluslararası dergidir. 1969 yılında kurulmuştur. Merkezi Amsterdam'dadır. CPC dergisindeki programların Belfast'taki program kütüphanesinden alınması mümkündür. Program kütüphanesi Belfast Queen's üniversitesinde (Kuzey İrlanda) bulunmaktadır. Kütüphane toplu ve ferdi satışlar yapmaktadır.

Konfigürasyon Etkileşmesi Yöntemi için iki program paketi bulunmaktadır. Bu program paketlerinden biri MCHF, diğeri SOC yöntemini kullanır.

Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemine dayanan programlar çiftlenmiş integro-diferensiyel denklemler takımının sayısal çözümüyle, $\{a_i\}$ konfigürasyon ağırlıkları ve $\{P_n\}$ radyal fonksiyonlarını hesaplar. Radyal fonksiyonlar başlangıçta perdelenmiş hidrojenik tipte alınır, perdeleme sabitleri ve $\{a_i\}$ parametreleri başlangıçta seçilir.

Hesaplama bir tek konfigürasyon kullanımıyla, bu yöntemin bir alt cümlesi olarak HF yaklaşımı elde edilir. Bu limit şekli 1965 yılından sonra kullanılmaya başlanmıştır. Bundan başka yöntem bir donmuş öz HF (veya MCHF) yöntemine indirgenebilir. Bunun için iç kabuk fonksiyonları daha önceki hesaplamalarda elde edilmiş olmalıdır.

İkinci genel program SOC metodunu içerir. $\{a_i\}$ katsayıları konfigürasyon dalga fonksiyonlarının bir baz cümlesine göre Hamiltonyen matrisinin uygun özvektörü olarak elde edilirler. Hylleraas-Undheim teoremine göre özdeğerlerin herhangi biri (özellikle en düşük olanı), $\{P_n\}$ radyal

fonksiyonlarını deęişimsel biçimde kullanabilir. Bu $\{P_n\}$ fonksiyonları STO'ların toplamı olarak analitik biçimde ifade edilir.

2.4.1. Paket Programlar

Yukarıda bahsedilen her iki program, Hamiltonyen matris elemanlarında ortaya çıkan spin ve açı integrallerini hesaplamaya ihtiyaç duyar. Hamiltonyenin $\Sigma(1/r_{ij})$ iki elektron parçası için bu integraller doğrudan (direkt) ve takas integrallerinin $\{a_k\}$ ve $\{b_k\}$ sabitlerini içerir. Bunları hesaplamak için bir yöntem Fano tarafından verilmiş ve Hibbert tarafından programlanmıştır. Katsayılar nispi soy ve yeniden çiftlenim katsayılarının çarpımlarının toplamı olarak açıklanır. Nispi soy katsayılarını hesaplayan programlar, p ve d elektronları için Allison ve Chivers, f elektronları için Allison ve McNulty tarafından hesaplanmıştır. Burke'ün yeniden çiftlenim katsayıları paketi Hibbert tarafından kullanılmıştır. $(3n)_j$ sembolleri Nussbaumer, Shapiro ve Tamura tarafından programlanmıştır. Hamilton operatörünün tek elektron kısmı benzer yolla Hibbert tarafından ele alınmıştır.

Açısal momentum integrali içeren programlar Hibbert tarafından SOC kodu içine yerleştirilmiştir[8]. Bu programlar MCHF metodu için giriş verilerini sağlamada ayrıca kullanılmalıdır. Bu durum, geniş bir programın dikkatli bir şekilde yapılışının avantajını gösterir. Bir çok program paketinin bu metod yoluyla birbirine bağlanması SOC kodunun bir özelliğidir.

Bu SOC kodu aynı zamanda elektrik-dipol osilatör kuvvetini de hesaplar. Geçiş matris elemanlarının açısal ve spin integralleri Robb tarafından verilen tek tensörler için "indirgenmiş matris elemanı" programı kullanımıyla hesaplanır. Aynı genel indirgenmiş matris elemanı programı elektrik kuadrupol ve magnetik dipol radyasyonu için kullanılabilir. Magnetik kuadrupol radyasyonu operatörü bir spin tensörü ve bir yörünge tensörünün çarpımıdır. Bunlar için de programlar

Glass ve Klotz tarafından verilmiştir. Bu programlar magnetik dipol ve elektrik kuadrupol çok ince yapısıyla ilgili açısal ve spin integrallerinin hesaplanması için de yeterlidir. Bunlara karşılık gelen radyal integrallerin programlanması nispeten basittir.

Programlar dik yörüngesileri ve LS çiftlenmesini kabul eder. Dik olmayan yörüngesi takımı için inceleme Froese Fischer ve Hibbert tarafından daha sonra yapılmıştır.

Spin-kendi yörünge ve spin-diğer yörünge için LS kısmını KE fonksiyonlarıyla hesaplayan bir program Klotz tarafından yazılmıştır ve bu SOC kodunun içine sokulabilir. Özellikle "jj çiftlenmesi" için bir nispi soy kodu Grant tarafından yazılmış, Robb'unkine karşılık gelen tek tensör matris elemanı kodu Chang tarafından, Hamiltonyen matris elemanları Grant tarafından verilmiştir. MCHF ve SOC kodlarının her ikisi de "ab initio" hesapları yapar. Bunlar LS çiftlenmesi dahilinde atom ve iyonların çok çeşitli halleri için hesaplamalara imkan verdiklerinden geneldirler. Fakat bunların bütün durumlarda en uygun olmaları gerekmez. Knox 1969'da helyum dizisi için bir SOC kodu geliştirmiştir. Burada P_{nl} radyal fonksiyonları Sturmian fonksiyonları olarak verilmiştir. Etkin bir iki-elektron sistemi, kapalı kabuk dışında iki elektronu olan bir sistemdir. Bu, Beck ve Zare tarafından büyük atomların da düşünülebildiği relativistik bir formüllendirme halinde işlenmiştir. Relativistik olmayan hesapları özel hal olarak incelenebilecek tarzdadır. Bunda yine bir SOC tipi, L^2 , S^2 , J^2 , J_z ve paritenin bir öz hali olan bir dalga fonksiyonu kullanılmış ve radyal fonksiyonlar Hartree-Fock denkleminin çözümü halinde önceden tayin edilmişlerdir. Bu kod Herman-Skillman'ın, Desloux tarafından yeniden yazılan kodu üzerine oturmaktadır. Bir tekli konfigürasyon programı Wood ve Boring tarafından verilmiştir. Klapisch, parametrik potansiyel kullanımıyla bir çok konfigürasyon dalga fonksiyonunu incelemiştir. Bu yöntemdeki açısal ve spin integralleri hesaplamaları Hibbert'in programından alınmalıdır.

Bir başka çok konfigürasyon yöntemi Eissner ve

Nussbaumer ile Eissner ve arkadaşları tarafından anlatılmıştır. Bu yöntem karakterde Hibbert'in SOC koduna benzerdir. Fakat bir çok farklılıkları vardır. Açısal ve spin integraller; Racah cebiri değil, Condon-Shortley geleneği kullanılarak hesaplanır. Radyal fonksiyonlar kullanıcı tarafından sağlanır veya Thomas-Fermi istatistik potansiyelinden hesaplanabilir. Program aynı zamanda Breit-Pauli Hamiltonyeninin relativistik işlemcilerinin matris elemanlarını hesaplar.

Relativistik düzeltmeler ile KE programı Fraga[10] tarafından programlanmıştır. ABBB RIAS kod adlı "Research in Atomic Structure: A Configuration Interaction Program with Relativistic Corrections" programında, uygun $SM_{S}LM_{L}$ fonksiyonlarından elde edilen etkileşme enerji matrisinin köşegenleştirilmesi ile SL, J veya F seviyeleri hesaplanmaktadır. Kullanılan Hamiltonyen Breit Hamiltonyenidir. Bu programda, elektronik terimler (kinetik enerji, çekirdek çekimi ve elektrostatik itme), öz kütle etkisi, kütle değişimi, Darwin düzeltmesi, elektron spin-spin bağı etkileşmesi ve yörünge-yörünge etkileşmesi, ince yapı ve çok ince yapı terimleri içerilmektedir. Program z_s54 olan atomlara uygulanabilmektedir. Program MCHF yöntemini kullanmaktadır.

BÖLÜM 3

KOMPÜTER PROGRAMININ TANITILMASI

Konfigürasyon etkileşmesi yöntemiyle ilgili AAKMCIV3 kodlu programla dalga fonksiyonları elde edilmesi ve osilatör kuvveti hesabı yapıldı. Konfigürasyon Etkileşmesi Yöntemi 2. bölümde tartışıldığından burada daha çok programın ayrıntılarını vereceğiz.

Çok elektronlu sistemler için SOC yöntemini kullanan "Konfigürasyon Etkileşmesi Dalga Fonksiyonları ve Elektrik Dipol Osilatör Kuvvetleri Hesabının bir Genel Programı" CPC program kütüphanesinden ısmarlanmıştır.

Programda FortranIV dili kullanılmaktadır. Program açıklama kartlarıyla beraber 11499 satırdır. Program için kart okuyucu, çizgi yazıcı, kart delici ve ikinci kart okuyucu kanalı gerekmektedir. BCD kart delgi kodu kullanılmıştır. Bu programın çalıştırılabilmesi için ACQB, ACRN, AAGD, AAON, ACQV, ACQV0001, ACQV0002 kod adlı programlar gerekli olmaktadır.

Program problemin çözümü için konfigürasyon etkileşmesi dalga fonksiyonlarını kurar ve atomik sistemlerde geçişlerin osilatör kuvveti hesaplamasını yapar. Çözüm metodu için; önce Hamiltanyen matrisi kurulur. Açısal integraller ACQV paket programı ile gerçekleştirilir. Radyal fonksiyonlar Slater tip yörüngelerin toplamları olarak açıklanır. Daha sonra Hamiltanyen matrisi köşegenleştirilir. Radyal fonksiyonların parametreleri fonksiyonel minimum olarak değişebilir. KE dalga fonksiyonları iki veya daha çok durum için elde edilir ve böylece osilatör kuvveti hesaplanır. Benzer hesaplama bir eş elektronik dizilişe sahip atom için tekrarlanır.

3.1. Hamiltonyen Matris Elemanları

Konfigürasyon Etkileşmesi dalga fonksiyonları Hamiltonyen matrisinin kurulmasında ilk aşamadır. Genelde;

$$H_{ij} = \langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i | H_0 + V | \Phi_j \rangle \quad (3.1)$$

yazılabilir. Burada atomik birimlerde

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{z}{r_i} \right), \quad V = \sum_{i>j} 1/r_{ij} \quad (3.2)$$

şeklindedir. Böylece,

$$\langle \Phi_i | H_0 | \Phi_j \rangle = \sum_{\substack{\sigma, \sigma' \\ \rho, \rho'}} y(\sigma, \sigma') \langle P_{n_0 l_0} | \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{z}{r} + \frac{l_0(l_0+1)}{2r^2} \right] | P_{n_0 l_0} \rangle \delta_{l_0 l_0'} \quad (3.3)$$

ve

$$\langle \Phi_i | V | \Phi_j \rangle = \sum_{\substack{\rho, \sigma, \rho', \sigma', k}} y(\rho, \sigma, \rho', \sigma', k) R^k(n_\rho, l_\rho, n_{\sigma'}, l_{\sigma'}, n_\rho, l_\rho, n_{\sigma'}, l_{\sigma'}) \quad (3.4)$$

yazılır.

3.1.1. İki Elektron İntegralleri

Denklem (3.4) teki y katsayılarının hesaplanması Fano tarafından Râcah cebiri kullanılarak anlatılmıştır. Bu uyum programla da birleştirilmiştir. Φ_i ve Φ_j 'lerin en az (N-2) tane ortak yörüngemsi olmalıdır ve $(\rho, \sigma, \rho', \sigma')$ 'nin mümkün seçimleri aşağıdaki gibi belirlenmelidir:

(i) Eğer Φ_i ve Φ_j tam olarak (N-2) tane ortak yörüngemsiye sahipse, ve σ geri kalan iki elektronu içine alan Φ_i 'deki alt tabakalardır. Halbuki ρ' ve σ' farklı iki elektronu içine alan Φ_j 'deki alt tabakalardır.

(ii) Eğer Φ_i ve Φ_j 'nin (N-1) yörüngemsi ortaksa, ρ , Φ_i 'nin geri kalan elektronu içine alan alt kabuğudur. ρ' de Φ_j 'ye göre benzer şekilde tanımlanır.

(iii) Eğer ϕ_i ve ϕ_j aynı N elektrondan kurulursa, $(\rho, \sigma) = (\rho', \sigma')$ alt tabakanın herhangi bir çifti olabilecektir. $\rho = \sigma$ olması karşılık gelen alt tabakada iki veya daha fazla elektron bulunması halinde izinlidir.

3.1.2. Tek Elektron İntegralleri

(3.3)'teki $\{x\}$ katsayılarının hesaplanması iki elektron kısmıyla uyumlu olarak Hibbert[11] tarafından anlatılmış ve programlanmıştır. Sıfır olmayan $\{x\}$ için, ϕ_i ve ϕ_j 'nin en az $(N-1)$ yörüngesisi ortak olmalı ve (σ, σ') 'nin mümkün seçimleri aşağıdaki gibi belirlenmelidir:

(i) Eğer ϕ_i ve ϕ_j nin tam $(N-1)$ yörüngesisi ortaksa, σ geri kalan elektronu içine alan ϕ_i 'de alt tabakadır; σ' , ϕ_j 'ye göre benzer şekilde tanımlanır.

(ii) Eğer ϕ_i ve ϕ_j aynı N yörüngesiden kuruluysa, bu iki fonksiyon matris elemanının sıfır olmaması için özdeş olmalıdır. Bu durumda $\sigma = \sigma'$ olur ve (3.3) denklemindeki toplam σ alt tabakasındaki elektronların sayısına eşit $x(\sigma, \sigma)$ ile bütün işgalli alt tabakalar üzerinden işlem görür.

3.1.3. Radyal Fonksiyonlar

Radyal fonksiyonları Slater tipi orbitallerinin[12] lineer kombinasyonu olarak seçilmiştir:

$$P_{nl}(r) = \sum_{j=1}^k C_{jnl} r^{I_{jnl}} \exp(-\xi_j r) \quad (n > 1) \quad (3.5)$$

Bir elektronlu yörüngesiler için ortonormalliği korumak üzere;

$$\int_0^{\infty} P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) dr = \delta_{nn'} \quad l+1 \leq n' \leq n \quad (3.6)$$

seçimi gereklidir. Eğer $k=n-1$ ise $\{C_{jnl}\}$ katsayıları (3.6) şartları ile bir tek şekilde, $\{I_{jnl}, \xi_{jnl}\}$ 'nin verilen

seçimi için belirlidir. Eğer $k > n-1$ ise katsayıların bazıları, HF hesaplamaları veya bu kodla yapılacak SOC hesaplamalarında değişim parametreleri olarak kullanılabilir.

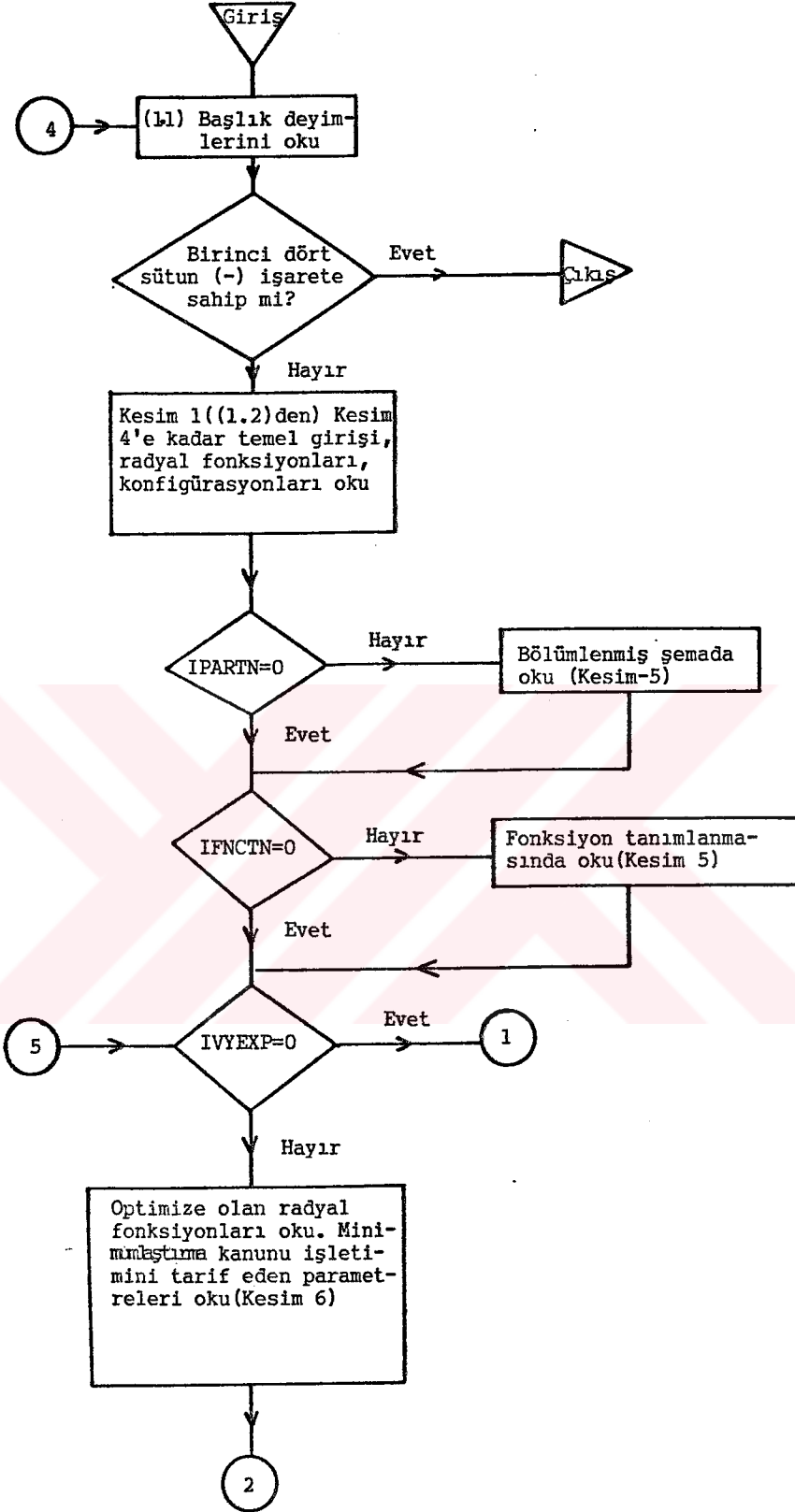
3.2. Optimumlama İşlemi

j 'yinci özdeğer $E^{(j)}$, j 'yinci enerji seviyesinin doğru değerinin bir sınırı olduğundan; $E^{(j)}$ 'lerin lineer kombinasyonu aynı doğru seviyelerin lineer kombinasyonunun bir üst sınırı olur. Böylece $E^{(j)}$, $\{ \epsilon_{jn} \}$ üslerine ve denklem (3.6)'yı sağlamada kullanılmayan denklem (3.5)'teki $\{ C_{jn} \}$ katsayılarına bağlı, değişim fonksiyoneli olarak kullanılabilir.

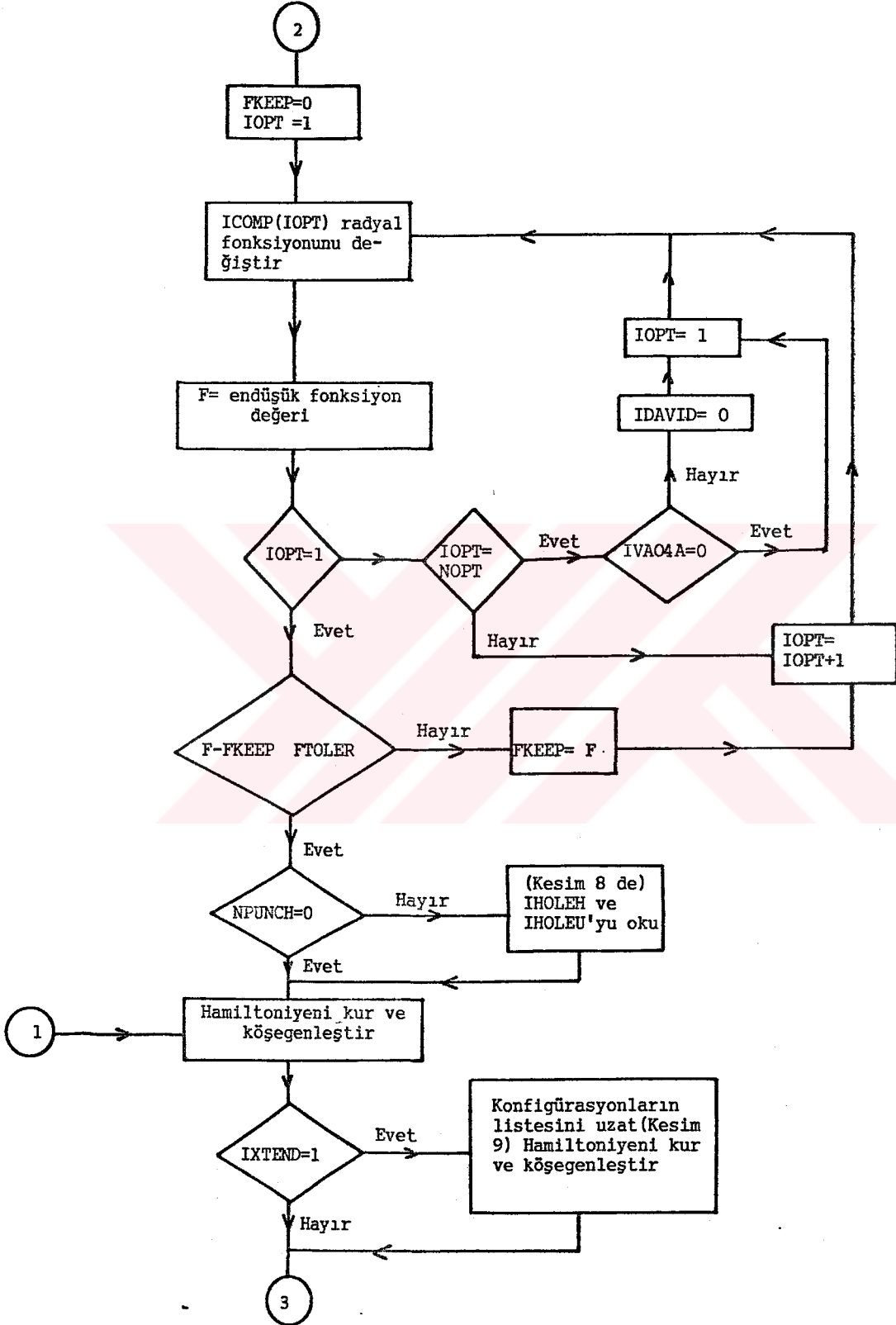
Açıkça, optimizasyon işlemi sadece fonksiyonel değerlerinin belirlenmesinde gereklidir ve kısmi türevlerin hesabında gerekli olmamaktadır. Bununla beraber, kısmi türevleri açık diferansiyel almadan çok bilinen fonksiyon değerlerinden hesaplayan bir minimumlaştırma programını kullanmak mümkün olmalıdır. Şimdiki program içerisine iki minimumlaştırma programı konulmuştur. Bunların biri veya herikisi kullanılabilir. Bunlardan birincisi VAO4A, Powell'ın [13] doğrudan arama metoduna dayanır. Bu işlemde başlangıçta koordinat eksenini olarak seçilen n tane yönün (değişkenlerin sayısı) herbiri boyunca aramalar yapılır. İkincisi, MODDAV, Lill [14] tarafından ALGOL da verilmiş olan yöntemin bir "Fortran" çevirimidir.

3.3. Programın Genel Akışı

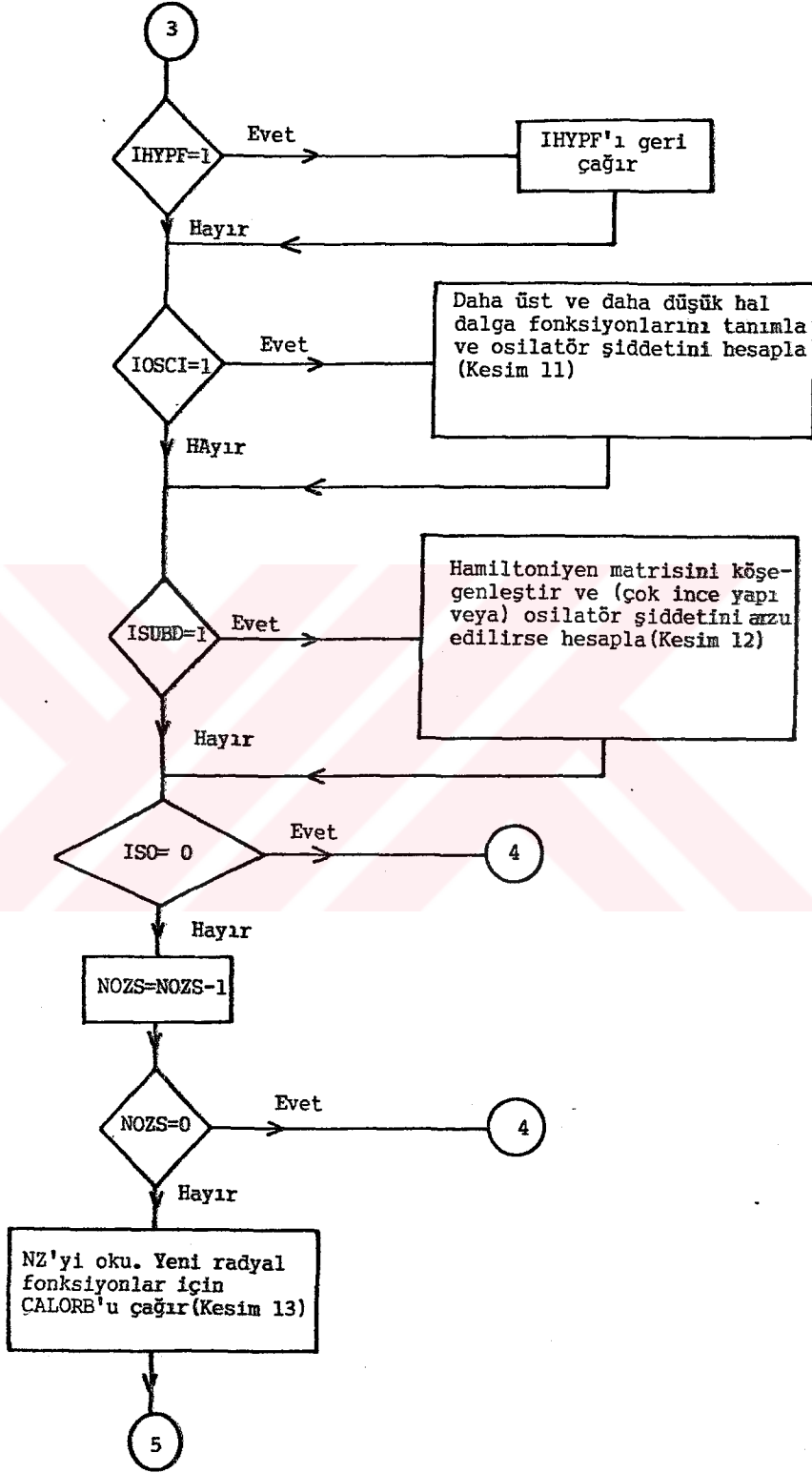
Programın genel yapısı Şekil.1'deki akış diyagramıyla tanımlanmıştır. Buradaki kesim numaraları (4.8) kesimindeki giriş verilerine karşılık gelir. Veriler konfigürasyon ve radyal fonksiyonları tanımlayan iki ana başlıktan oluşur. Böylece, örneğin herhangi bir radyal fonksiyonun değişip değişmeyeceği, hesaplamanın farklı bir başlangıç fonksiyonları takımıyla veya eş elektronik dizinin farklı bir üyesi için tekrar edilip edilmeyeceği belirtilmelidir.



Şekil 1.a. Programın genel akış diyagramı.



Şekil 1.b. Programın genel akış diyagramı.



Şekil 1.c. Programın genel akış diyagramı .

Hamiltonyen matrisinin ilk defa kurulması için denklem (3.3) ve denklem (3.4)'teki $\{x\}$ ve $\{y\}$ katsayıları ile radyal integraller herbir matris elemanı için hesaplanmalıdır. Bir yörüngemsinin radyal fonksiyonu değiştirilecekse sadece bu sonuçların çoğu değişmemiş kalacaktır. Gerçekte değişen yegane çokluklar değişen fonksiyonla ilgili radyal integraler olacaktır. Böylece herbir matris elemanı aşağıdaki gibi ayrılacaktır:

$$H_{ij} = H_{ij}^f + \sum_p x_p' I_p + \sum_q y_q' R_q^k \quad (3.7)$$

Burada H_{ij} değişen fonksiyondan bağımsızdır. Buradaki iki toplam o fonksiyonla ilgisi olmayan bir ve iki elektron integralleri üzerindedir. Sadece $\{I_p\}$ ve $\{R_q^k\}$ 'nin yeniden hesaplanmasına ihtiyaç vardır. Böylece Hamilton matrisi ilk defa kurulduğunda $\{H_{ij}^f\}$, $\{x_p'\}$ ve $\{y_q'\}$ depolanırlar.

3.4. Faz Anlaşmaları

Açısal momentum integrali programı, küresel harmoniklerin fazı için Fano-Racah[15] geleneğini kullanır. Değişik bir düzen olarak Condon-Shortley[16] geleneği kullanılabilir. Bu iki düzen arasındaki fark;

$$Y_l^m [F.R] = i^l Y_l^m [C.S] \quad (3.8)$$

şeklinde açıklanabilir. Burada $i^2 = -1$ 'dir. Giriş verilerinde ICSTAS değişkeni 0 alınırsa Fano-Racah, 1 alınırsa Condon-Shortley düzeni işlerlik kazanır[17].

3.5. Yöntemin Diğer Atomik Özellikleri

İlk olarak bir SOC dalga fonksiyonu[8] kurulmuştur. Daha sonra diğer atomik özellikler, hesaplama aşamasında kullanılmıştır. Özellikle atomik yapıda ilgi çeken iki özellik osilatör kuvveti (geçiş ihtimali) ve çok ince yapı ile ilgilidir. Yöntemden sonuç olarak incelenebilecek olan bu

iki nicelikten sadece osilatör kuvveti hesaplamaları program çalıştırmada dikkate alınmıştır.

3.5.1. Osilatör Kuvveti

Osilatör kuvveti 2. bölümde tartışılmıştı. Burada, osilatör kuvveti hesaplamalarının daima soğurmaya ait olduğu not edilmelidir. Osilatör kuvveti hesaplaması sebebiyle giriş bilgilerinde IOSCI ve IPARTN değerleri "1"e eşit alınmalıdır.

3.5.2. Alt Köşegenleştirme

Bazen daha fazla konfigürasyonların dahil edilmesinin enerji ve osilatör kuvvetlerinin yakınsamasına olan etkisini incelemek ilgi çekicidir.

Başlangıçta Hamiltonyen matrisi kurulduktan sonra bütün matrisin satır ve sütunlarının alt cümlelerinin eklenmesiyle teşkil edilen altmatrislerin köşegenleştirilmesi gerçekleştirilebilir. Karşılık gelen osilatör kuvvetleri daha sonra hesaplanabilir. Bu alt köşegenleştirme seçiminin kullanılması ISUBD değişkeninin giriş verisinde alacağı değerle belirlenir.

3.5.3. Konfigürasyon Takımının Büyütülmesi

Önce küçük sayıdaki konfigürasyonları, radyal fonksiyonların optimumlaştırılmasından sonra daha geniş bir takım kullanmak genelde uygundur. Bu işlemi giriş bilgilerinde IXTEND değişkenini "1"e eşitleyerek ve optimumlaştırma işleminin ardından ileri konfigürasyonları ekleyerek gerçekleştirmek mümkündür.

3.5.4. Optimumlaştırılacak Fonksiyonelin Tanımı

Fonksiyonelin normal şekli Hamiltonyen matrisinin en düşük özdeğeridir. Eğer bu uygun değilse IFNCTN değişkeni giriş bilgilerinde "1"e eşit konulmalı ve fonksiyonelin şekli yeniden tanımlanmalıdır.

3.5.5. Eş Elektronik Dizi

Belirli bir Z-değeri için daha önce yapılmış bir hesaplama, başlangıçtaki konfigürasyon verilerini tekrar girdirmeden diğer değerler için tekrarlanabilir. Bu seçim firiş verilerinde ISO değişkenini "1"e eşit yapmakla mümkün olur. Aynı tercih farklı radyal fonksiyonlar fakat aynı Z değeri için hesaplamanın yapılmasına izin verir.

3.5.6. Hamiltonyen Matrisinin Girdirilişi ve Çıkarılışı

Hamiltonyen matrisinin bir dış dosyaya çıkarılması arzu edilebilir. Eğer Hamiltonyen matrisi büyükse onu geri okumak, yeniden hesaplamaktan daha verimlidir. NPUNCH'ı uygun bir çıkış kanal numarasına eşitleyerek Hamiltonyen matrisini, özdeğerleri ve özvektörleri çıkarmak mümkündür.

3.5.7. Dışa Yazma Seviyeleri

Basılı çıkış bilgileri alma seviyeleri IBUG1, NBUG2 gibi giriş parametreleriyle tayin edilir.

3.6. Ortak Bloklar

Bu pakette kullanılan ortak bloklar çok fazladır. Tamam bir anlatım programın başındaki yorum kartlarında yapılır.

Kullanılan dizi boyutları şimdiki paketle birleştirilmiştir. Bu durumda konfigürasyonların sayısındaki sınır (NCFG) 30'dur ve bu konfigürasyonların hiçbiri 5 kapalı alt tabakadan daha fazla olmamalıdır. Optimimumlaştırma işlemi

sırasında konfigürasyonların sayısında sınır 20'dir. İzinli farklı yörüngemsi sayısı 21'dir. Diğer durumlarda tek bir radyal fonksiyonda (NPARAM) değişken parametrelerin sayısı 20'yi aşmamalıdır. $M1 \cdot NCOEFF$ çarpımı 240 olduğunda $M1 = NLIMIT \cdot LRANG2$ çarpımının en büyük değeri 30'dur. Bu limitlerin hepsi kullanıcının arzusuna göre artar veya azalır. Bu değişim birçok ortak blokları etkiler.

Kodun işletiminde ne kadar eleman kullanılacağıının belirlenmesinin kolaylıkla mümkün olmaması sebebiyle bazı değişken ortak bloklarda birtakım diziler vardır. Bu dizilerde boyut sınırının aşılması için kontrol garanti edilir. Eğer bu sebeple program duruyorsa çizgi yazıcısında bir uyarı gözükecektir. Yeniden çiftlenim kodundan farklı dizi sınırları bu kodun diğer kısımlarını etkilemeksizin böyle hata uyarılarıyla birleştirilmiştir. Ortak bloklardaki dizi boyutlarını değiştirirken dizi sınırlarına karşılık gelen değişken değerlerini de CICODE altprogramında yeniden tanımlamak gerekmektedir. Pratikte dizilerin sunulan boyutları herbiri 5 kapalı alt tabakadan fazlasını içermeyen yaklaşık 30 konfigürasyon için izinlidir. Bu sınır boyut yaklaşık 12 elektrona sahip atomik sisteme karşılık gelir. Kodun başında yorum kartlarında verilen bilgilerle boyut sınırlarını yükseltmek mümkündür. Kesin alfasayısal sonuç yazdırımı aşağıdaki düzende atomun durumuyla birleştirilecek şekilde kurulur:

ATNAME: atom adı,

ASTATE: toplam yörünge açısal momentumu için spektroskopik gösterim

ASPIN : singlet, dublet, triplet vs.

ROMANN: iyonizasyon derecesi (II, III, IV vs).

Bunlar **LATENT** ve **OSCI** programlarında kullanılır.

3.7. Altprogramların Tanıtılması

Altprogramların birbirlerine bağıllığı Şekil.2'de gösterilmiştir. Bu altprogramların bazıları daha önce CPC program kütüphanesinde tanıtıldığından aşağıda şimdiki paket için yeni olanları tanıtacağız.

CIV3

CICODE'u çağıran etkisiz bir parçadır.

CICODE

Bu programın ana sürücü rutinidir. Şekil.1'de gösterilen bir akış diyagramına sahiptir. Diğer kodların içerisine çağırılabilmesi için altprogram olarak adlandırılmıştır.

ACNFIG

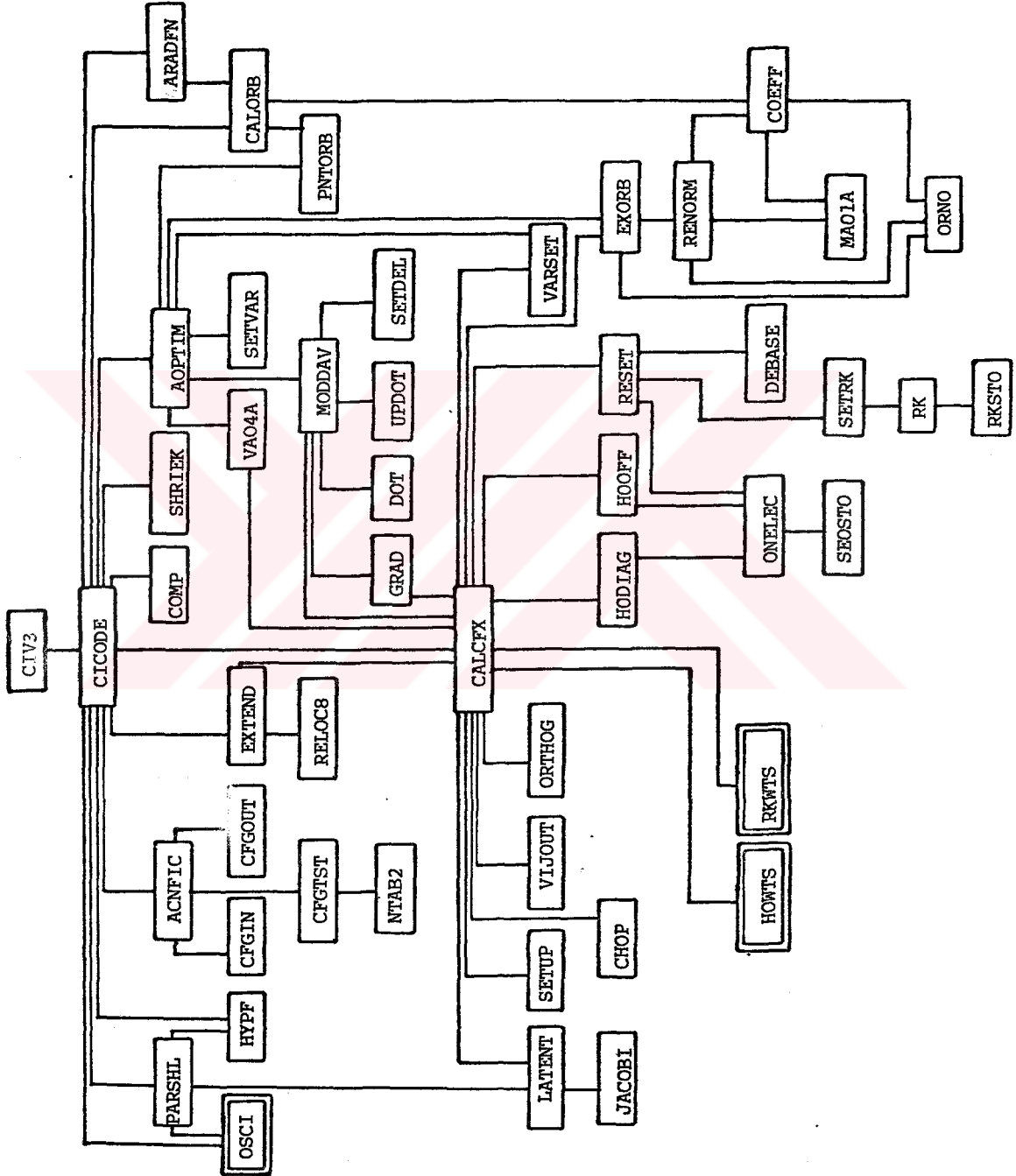
Bu altprogram konfigürasyon giriş bilgilerini okur ve test eder. Gerekli olduğu yerde optimumlaştırılacak fonksiyoneli tanımlar.

AOPTIM

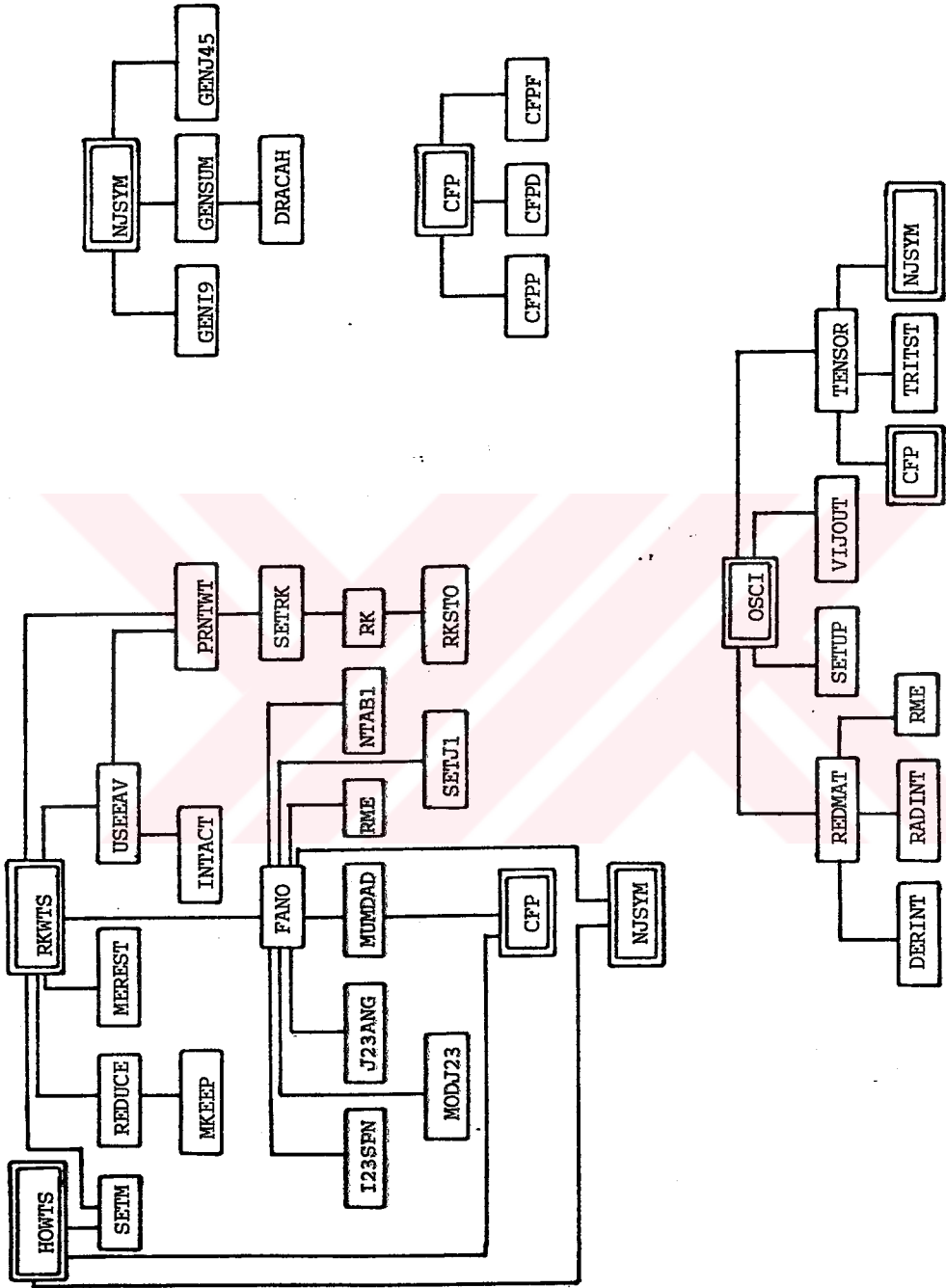
Bu altprogram gerekli radyal fonksiyonların optimumlaştırılmasını sağlar. Optimumlaşmış NOPT fonksiyonlarının listesinde her bir radyal fonksiyon ayrı ayrı değiştirilir. Listedeki son radyal fonksiyon optimumlaştırıldığında işlem listedeki birinci ile yeniden başlar.

ARADFN

Bu altprogram radyal fonksiyon parametrelerini okur. Karşılık gelen dışa yazma her iki C_{jn1} , C_{jn1} katsayılarının şeklini verir.



Şekil 2.a. Altprogramların birbirine bağımlılığı.



Şekil 2.b. Altprogramların birbirine bağımlılığı.

CALCFX

Bu program optimumlaştırılacak fonksiyoneli tanımlar. Hamiltonyen matrisini kurar ve köşegenleştirir, sonuçları basar. Böylece SOC dalga fonksiyonları ve karşılık gelen enerjileri üretir.

CALORB

Bu altprogram radyal fonksiyonları normalleştirilmiş Slater tipi orbitallerin (STO) toplamı olarak okur. Normalleştirme çarpanları $\{C_{jn}\}$ katsayılarını elde etmek için $\{C'_{jn}\}$ katsayılarıyla birleştirir ve bütün parametreler PNTORB'un kullanılmasıyla yazdırılır.

COEFF

Bu altprogram STO'ların son $(n-1)$ katsayılarını (4.6) ortonormallık şartlarından belirler. Katsayıların oranları ilk olarak diklik şartlarından belirlenir. Gerçek değerler daha sonra normalleştirme gerekliliğinden tayin edilir. Dikliğin sadece daha küçük n -değerleri ve aynı l -değerine sahip radyal fonksiyonlar için gerekli olduğu farzedilmiştir.

COMP

Bu altprogram iki tamsayının eşit olup olmadığını karşılaştırır. Böylece yürütmenin sona erdirilip erdirilmeyeceğine karar verir.

DEBASE

Bu altprogram $R^k(\rho, \sigma, \rho', \sigma')$ 'deki $\rho, \sigma, \rho', \sigma'$, k parametrelerini NMORB'dan yeniden belirler ve R^k 'da açığa çıkan dört yörüngesinin (n, l) değerlerini hesaplar.

DERINT

Bu altprogram osilatör kuvvetinde ortaya çıkan radyal integ-ralleri hız biçiminde hesaplar.

DOT

Bu altprogram iki vektörün skaler çarpımını hesaplar.

EXORB

Bu altprogram (n,l) yörüngemsisinin parametrelerinin opti-mumlaştırma işlemi sırasında değişmesi durumunda yeniden ku-rulmasını düzenler.

EXTEND

Bu altprogram konfigürasyon takımı büyütüldüğünde ilave kon-figürasyonları içeri okur. Bunlar CFGIN'de başlangıç takı-mında olduğu gibi girdirilir. Yalnız NCFG ilave konfigüras-yonların sayısı olan NEXTRA ile yer değişir. Eğer gerekiyorsa matrisin yeni bölünmesi tanımlanır. Yeni Hamiltonyen mat-risi CALCFX'in çağırılmasıyla hesaplanır.

GRAD

Bu altprogram değişim parametreleri cinsinden fonksiyonelin gradiyentini hesaplar.

HODIAG

Bu altprogram köşegenel matris elemanının bir elektron kıs-mının hesabını yapar.

H0OFF

Bu program H0DIAG programının yaptığıının aynısını köşegen olmayan matris elemanları için gerçekler.

HYPF

Bu şimdilik etkisiz bir programdır.

JACOBI

Bu altprogram Jacobi metoduyla Hamiltonyen matrisinin köşegenleştirilmesini sağlar. Program her bloğun özdeğerlerini normal olarak azalan sırada düzenler.

LATENT

Bu program Hamiltonyen matrisinin alt matrislerini ayrı ayrı köşegenleştirir ve sonuçları yazdırır.

MA01A

Bu program eşzamanlı eşitlikleri çözer ve radyal fonksiyonlarda STO'ların $\{C_{jn}\}$ katsayılarının belirlenmesinde kullanılır.

MODDAV

Bu altprogram Lill tarafından ALGOL'da verilen minimumlaştırma kodunun fortran'a çevrilmişidir.

ONELEC

Bu altprogram (4.3) eşitliğindeki tek elektron Hamiltonyen matris elemanındaki radyal integrallerin hesaplanmasını sağlar. Herbir radyal fonksiyon STO'ların bir toplamıdır.

ORNO

Bu altprogram k-1 yörüngemsiyle (n-1) yörüngemsisinin j'yinci STO'su arasındaki üst üste gelmeyi (overlap) hesaplar:

$$\int_0^{\infty} P_{kl}(r) r^{I_{jnl}} \exp(-\xi_{jnl} r) dr$$

OSCI

Bu altprogram osilatör kuvvetlerini hesaplar. Bir geçişle ilgili iki halin özvektör ve özdeğerleri LATENT'te giriş verilerinden üretilen listeden seçilir. Enerji farkı ΔE böylece hesaplanır.

PARSHL

Bu altprogram Hamiltonyen matrisinin alt köşegenleştirilmesini gerçekleştirir.

PNTORB

Bu altprogram radyal fonksiyonları tanımlayan parametreleri yazdırır.

PRNTWT

Bu altprogram, mevcut programın amacı sebebiyle açışal momentum paketinde içerilen aynı isimli altprogramın yerine geçer. Program Slater integrallerinin katsayılarını çıkarır.

RADINT

Bu altprogram osilatör kuvveti kesiminde kullanılan

$$\langle P_{n_1 l_1} | r^k | P_{n_2 l_2} \rangle$$

ifadesini hesaplar.

REDMAT

Bu altprogram osilatör kuvveti kesiminde kullanılan radyal integralleri çağırır ve onların değerlerini $(1 || c^{[k]} || 1)$ ($k=1$) indirgenmiş matris elemanı ile çarpar.

RELOC8

Konfigürasyon takımı büyütüldüğünde ve artan yeni yörüngem- silere sahip konfigürasyonlar getirildiğinde, MAXORB'un de- ğeri artırılır. Tek elektron karakteristik sayıları ve Slater integralleri MAXORB'un terimleriyle tanımlanır ve bu sayılar yeniden hesaplanır.

RENORM

Bu altprogram n MAXNEX(1+1) olması halinde (n,1) yörüngemsi- si için EXORB'un yaptığı aynı işlemi yapar.

RESET

Bu altprogram (3.7) eşitliğine göre Hamiltonyen matrisinin yeniden hesaplanması optimumlaştırma işleminde kullanılır.

RK, RKSTO

Bu programlar (3.4) eşitliğindeki Slater integrallerinin he- saplanması sırasında işe yarar. Her bir P_{n_1} radyal fonksiyonu

STO'ların bir toplamıdır ve tek bir STO'yu kullanan karşılıklı gelen integral RKSTO ile hesaplanır.

SETRK

Bu program Slater integrallerinin hesaplanmasını gerçekleştirir. Her bir integralin R^k 'nin çağırılmasıyla hesaplanacağına veya değerinin RKLIST dizisinde depolanacağına karar verir.

SETVAR

Minimumlaştırma kodları MODDAV ve VA04A'nın gerektirdiği değişkenleri ve diğer bilgileri kurar.

UPDOT

Bu program bir vektörü bir simetrik matrisin belirli bir satırıyla çarpar.

USEEAV

Bu altprogram açısal momentum integral kodunda bulunan aynı isimli altprogramla yer değiştirir.

VA04A

Bu altprogram A.E.R.E. Harwell altprogramının değiştirilmiş bir baskısıdır ve Powell'ın eşlenik yönleri kullanan minimumlaştırma işlemine dayanır.

VARSET

Bu altprogram minimumlaştırma programının optimumlaştırılmış değişkenlerinden, değişen radyal fonksiyonun parametrelerine yeniden değerler verir. STO'ların katsayılarını yeniden belirlemek açısından EXORB'un çağırılışı bu programın

çağırılığını izlemelidir.

3.8. Giriş Bilgilerinin Tanımlanması

Giriş bilgilerinin A kısmı, girdirilecek bütün değişkenlerin listesini verir. Verilen bir yürütme için bu değişkenlerin bütünü gerekli olmayabilir. B kısmı parametrelerin bazılarının üzerinde tavsiyeyle birlikte bu değişkenlerin bir tanıtımını vermektedir.

Dört giriş deyimi alfasayısal formatları kullanır. (1.1) ve (13.2) deyimleri 18A4, (4.7) ve (9.7) deyimleri 24A3 formatında okunurlar. Diğer bütün değişkenlerin kullandığı iki format şekli vardır:

Tamsayı Değişkenler : 12I5

Reel Değişkenler : 5F14.7

Bazen konfigürasyon verilerinde tamsayı sabitler için 24I3 formatını kullanmak uygun olabilir.

3.8.1. Kısım A- Giriş Deyimleri

<u>Ref.No: Değişkenlerin Girişi :</u>	<u>Notlar :</u>
(1.1) IALPHA(I), I=1,18	-Kesim 1 CICODE'dan oku Format (18A4)
(1.2) IVYEXP, IHYPF, IOSCI, IXTEND, IPARTN, ISUBD, ISO, IFNCTN, NPUNCH, IDTAIL, NREAD, ICSTAS,	
(1.3) NOZS	ISO#0 ise gir.
(1.4) NFNGO, NFNEND	IDTAIL#0 ise gir.
(1.5) IBUG1, IBUG2, IBUG3, IBUG4, IBUG5, IBUG6, IBUG7, IBUG8, IBUG9	
(1.6) NBUG2, NBUG6	IOSCI#0 ise gir.

	-Kesim 2 ARADFN'den oku
(2.1) LRRANG2, NCOEFF, NZ	
(2.2) MAXNEX(I), I=1, LRRANG2	

	-Kesim 3 ARADFN'den oku
(3.1) K	Herbir radyal fonksiyon için L=1, LRRANG2 N=L, MAXNEX(L) deęerle- rini alır.
(3.2) ISTO(I), I=1, K	
(3.3) ZESTO(I), I=1, K	
(3.4) CSTO(I), I=1, K	

	-Kesim 4 CFGIN'den oku
(4.1) NCFG	
(4.2) NOCCSH(I), I=1, NCFG	
(4.3) NOCORB(J, I), J=1, N	Herbir konfigürasyon için tekrarlıdır: I=1, NCFG M=2N+1 N=NOCCSH(I)
(4.4) NELCSH(J, I), J=1, N	
(4.5) (J1QNRD(J, K, I), K=1, 3, J=1, M	
(4.6) NJCOMP(I), LJCOMP(I), I=1, MAXORB	
(4.7) IAJCMP(I), I=1, MAXORB	Format (24A3)

-Kesim 5 ACNFIG'den oku

- (5.1) NPARTS, (NDPART(I), I=1, NPARTS) IPARTN#0 ise gir.
 (5.2) NEIGEN, (LEIGEN(I), I=1, NEIGEN) }
 (5.3) WTIGEN(I), I=1, NEIGEN } IFNCTN#0 ise gir.
-

-Kesim 6 AOPTIM'den oku

- (6.1) NOPT, (JCOMP(I), I=1, NOPT)
 (6.2) IDAVID, IVA04A
 (6.3) IZETA, MAXIT1 }
 (6.4) ECOMM1, ECOMM2, FTOLER, FACTOR, } IDAVID#0 ise gir.
 DIFF
 (6.5) IZETA, MAXIT2 }
 (6.6) ECOMM1, ECOMM2, FTOLER, ESCALE } IVA04A#0 ise gir.
 (6.7) IZETAP IZETA=9 ise gir.
 (6.8) IZEOPT(I), I=1, NOPT IZETA=8,9 ise gir.
 (6.9) K, (NOVSTO(J+KTOT), J=1, K) IZETA veya IZETAP=3,7
 ise gir. Bu deyim her
 bir optimumlaşmış yö-
 rünge için tekrarlanır.
 Örneğin NOPT kez.
-

-Kesim 7 CALCFX'ten oku

- (7.1) PSHPSP(I, J), J=1, IEND } matrisin
 için tekrarlı } herbir
 sütunu
 için
 tekrarlı
 ISTART=1 birinci sütun
 için
 =NDPART(N-1)+1
 N. sütun için
 IEND=NDPART(N)
-

-Kesim 8 CICODE'dan oku

- (8.1) IHOLEH, IHOLEU NPUNCH#0 ise gir.
-

-Kesim 9 EXTEND'den oku

(9.1) NEXTRA

(9.2) NOCCSH(I+NCFG), I=1, NEXTRA

(9.3) NOCORB(J, I1), J=1, N

(9.4) NELCSH(J, I1), J=1, N

(9.5) J1QNRD(J, K, I), K=1, 3), J=1, M

M=2N+1

{ Herbir fazlalık
konfigürasyon
için tekrarlı
N=NOCCSH(I1)
I1=I+NCFG

Burada NCFG konfigürasyonların orijinal sayı-
sıdır.

(9.6) NJCOMP(I), LJCOMP(I),
I=MX1, MAXORB

MAXORB yeni değerdir.

MX1=eski MAXORB + 1

(9.7) IAJCMP(I), I=MX1, MAXORB

Format (24A3)

(9.8) NPARTS, (NDPART(I), I=1,
NPARTS)

IPARTN≠0 ise gir.

Bu durumda giriş verisi yok.

-Kesim 10 HYPF'den oku

-Kesim 11 OSCI'den oku

(11.1) NOSCIS

IOSCI=1 ise gir.

(11.2) NGDGO, NCFGG, IGEND, NEXGO,
NCFGE, IGENEX

NOSCIS kez tekrarlı.

-Kesim 12 PARSHL'dan oku

(12.1) NDIAGS

(12.2) NCFG, (ICFG(I), I=1, NCFG)

(12.3) NPARTS, (NDPART(I), I=1,
NPARTS)

IPARTN=0 } NDIAGS kez
ise gir } tekrarlı

(12.4)

Çok ince yapı verisi
kesim 10'daki gibi,

(12.5)

Osilatör kuvveti verisi
kesim 11'deki gibi.

(13.1) NZ

-Kesim 13 CICODE'dan oku
ISO=0 ve NOZS=0 ise gir.
Daha sonra kesim 3'ü ye-
ni radyal fonksiyonlarla
tekrarla, ardından
kesim 6'dan ilerle.

(13.2) IALPHA(I),I=1,18

ISO#0 ve/veya NOZS=0 ise
Eğer IALPHA(I) dört eksi
işaretiyle oluşmuşsa
program sonlanacaktır.
Aksi halde yeni bir he-
sap düşünülür, deyim
(1.2)'den ilerlenir.



3.8.2. Kısım B- Giriş Verilerinin Tanıtılması

Bu kısımda giriş verilerinin alabileceği değerler, birbirlerine bağımlılıkları dikkate alınarak verilmiştir.

3.8.2.1 Temel Bilgiler

(1.1)

Bu bir başlık olup, ilk 64 karakter uygun bir başlığı içerebilir. Son sekiz karakter 15-11-1991 gibi işletim tarihi için kullanılabilir. Bu kart programı, eğer ilk dört karakterin işareti (-) ise durdurur.

(1.2)

Bu kart gerekli hesaplama tipini tayin eder.

IVYEXP=1, bir veya daha çok radyal fonksiyon parametrelerinin değişimi; =0, değişim yok.

IHYPF =1, çok ince yapı altprogramı çağırılır; =0 ise çağırılmaz.

IOSCI =1, osilatör kuvveti programı çağırılır; =0 ise çağırılmaz.

IXTEND=1, konfigürasyon listesi minimumlaştırmadan veya IVYEXP=0 ise CALCFX'in birinci çağrımından sonra genişletilir; =0 ise liste genişletilmez.

IPARTN=1, eğer Hamiltonyen matrisi bu hesaplamanın herhangi bir basamağında bölünüyorsa; =0, eğer bölünme mümkün değilse.

ISUBD =1, eğer Hamiltonyen matrisinin alt matrisleri köşegenleştirilecekse; =0 diğer durumlarda.

ISO =1, eğer eş elektronlu dizilişin diğer üyeleri için veya Z'si aynı fakat farklı radyal fonksiyonlar için hesaplama tekrarlanıyorsa; =0 diğer durumlarda.

IFNCTN=1, IVYEXP=1 kabullenilmesiyle minimumlaştırılmış fonksiyonel, Hamiltonyen matrisinin en düşük özdeğerine sahip değilse; =0 diğer durumlarda.

NPUNCH= delgi kanal sayısı, eğer sonuç Hamiltonyen matrisi ve veya onun özdeğer ve özvektörleri kartlar üzerine deliniyorsa; =0 kart delimi olmaması için.

IDTAIL=1, kesin fonksiyon hesaplaması için bir tam çıktı gerekiyorsa; =0 değilse.

NREAD ikinci giriş kanal numarası; =0 giriş yok, =4 ICL Hamiltonyen matrisinin girişi.

(1.3)

NOZS hesaplamanın yapılacağı fazlalık Z değerlerinin sayısı.

(1.4)

NFNGO NFVALS değişkeni Hamiltonyen matrisinin kurulması ve köşegenleştirilmesi tekrar sayısına işaret eden bir sayıcıdır. Eğer IDTAIL#0 ise NFVALS,

NFNGO<NFVALS<NFNEND

şartını sağladığında tam çıktı elde edilecektir.

(1.5)

IBUG1 =0, sadece final sonuç çıktısı; =1 artı Slater integrallerinin değerleri; =2 iki elektron parçası için tam çıktı.

IBUG2 yöntemde konulmuştur. Fakat uygunluk için "0"a eşit girilir.

IBUG3 =0, yeniden çiftlenim kodundan çıktı alınmaz; =1 tam çıktı alınır.

IBUG4 IBUG1'e benzerdir. Fakat tek elektron kısmı için geçerlidir.

IBUG5 birinci yörüngenin optimumlaştırılmasından sonra IBUG1'e yeniden değer verilir. Böylece, örneğin IBUG1'in kodun sonucunu veren işlem olup olmadığı

kontrol edilir, daha sonra IBUG1=0'a dönülür.

IBUG6 birinci optimumlaştırmadan sonra IBUG4 buna eşitlenir.

IBUG7 =0, Hamiltonyen matrisinin çıkarılması yok,

=1, sadece özdeğer ve özvektörlerin çıktısı,

≥2, Hamiltonyen matrisi, özdeğer ve özvektörlerin çıkarılması. Optimumlama işlemleri için bu, sifıra eşit yapılmalıdır.

IBUG8 =1, minimumlaştırma işleminden çıktı üretir; =0, böyle bir çıktı üretmez. Son durumda, sadece herbir yörüngesinin optimumlaştırılmasının nihai çıktısı alınır.

IBUG9 =1, radyal fonksiyon parametreleri her bir optimumlaştırma sonunda yazdırılacaksa; =0, bu parametreler hesaplamanın sonu ve başlangıcında listelendiyse.

Normalde IBUG1-IBUG7 değerleri sıfır olarak girilmelidir. Aksi takdirde optimumlaştırma işleminde çıktı geniş olacaktır.

(1.6)

Bu parametreler bir hatadan şüphelenilmedikçe ya "1", veya "0" (sadece nihai sonuç için), tercihen "0" olmalıdır. Bu parametreler kodun aşağıdaki kesimine işaret ederler:

NBUG2 osilatör kuvveti kodu için,

NBUG6 tek tensör kodu için.

Genelde bu ikisi "0" olarak girilir.

3.8.2.2. Radyal Fonksiyonlar İçin Temel Veriler

(2.1)

LRANG2 radyal fonksiyonlarda (l+1)'in en büyük değeri,

NCOEFF herhangi bir yörüngesindeki STO'ların en büyük sayısı,

NZ atom numarasıdır.

(2.2)

MAXNEX(I) l'nin (I-1) değeri ile ilgili radyal fonksiyonlar için en geniş n-değeri.

3.8.2.3. Radyal Fonksiyonlar

Bütün radyal fonksiyonların denklem (3.5) şeklinde alındığı ve (3.6) şartlarını sağladığı kabul edilir. Bu programın birçok yürütümünde bazı radyal fonksiyonlar yayınlanmış HF verilerinden alınacaktır. Böyle tablolarla, fonksiyonlar normalize STO'ların $\{X_{jnl}\}$ 'leri cinsinden verilir:

$$P_{nl} = \sum_{j=1}^k C_{jnl} X_{jnl}$$

Böylece

$$C_{jnl} = \frac{(2^{I_{jnl}})^{I_{jnl} + \frac{1}{2}}}{[(2I_{jnl})!]^{\frac{1}{2}}} C'_{jnl}$$

olur. P_{nl} için giriş bilgisi k , $\{I_{jnl}\}$, $\{I'_{jnl}\}$, $\{C'_{jnl}\}$ sırasıyla (3.1), (3.2), (3.3) ve (3.4) deyimlerinde kullanılır. P_{nl} 'nin giriş sırası $[(N=L, \text{MAXNEX}(L)), L=1, \text{LRANG2}]$ sınırlarıyla olur. Burada $L=1+1$ 'dir.

3.8.2.4. Konfigürasyon Verileri

Konfigürasyon verileri CFGIN'den okunur. Herbir konfigürasyon kendi alt tabakaları ile tanımlanır:

$$\Phi_i(\alpha LS) = \{(1s)^{\lambda_1} (\alpha_1 L_1 S_1) (2s)^{\lambda_2} (\alpha_2 L_2 S_2) \dots (nl)^{\lambda_k} (\alpha_k L_k S_k) : \alpha LS\}$$

Burada tabakanın doldurulması λ_j kıdemi, yörünge ve spin

açısal momentumlarını gösteren $(\alpha_j L_j S_j)$ kuantum sayılarıyla ilgilidir. Giriş verilerinin tayininden önce konfigürasyonda işgal edilmiş yörüngelerin bir listesi yapılmalıdır. İlave olarak ara çiftlenme kuantum sayıları belirlenmelidir. Çiftlenme şeklinin izleyen şekilde olduğu kabul edilir:

$$\{ \dots [(\alpha_1 L_1 S_1), (\alpha_2 L_2 S_2)] (\alpha_{k+1} L_{k+1} S_{k+1}), (\alpha_3 L_3 S_3) \} \cdot \\ (\alpha_{k+2} L_{k+2} S_{k+2}) \dots \} (\alpha_{2k-1} L_{2k-1} S_{2k-1})$$

Burada $L_{2k-1}=L$, $S_{2k-1}=S$ ve $\{\alpha_i, i=k+1, \dots, 2k-1\}$ ifadeleri tanımlanmadığı (veya kullanılmadığı) için "0" alınmalıdır. Bir başka deyişle alt tabakalar sırasıyla çiftlenmişlerdir.

(4.1)

Konfigürasyonların sayısını okur.

(4.2)

Konfigürasyonların (λ_k) 'nin k değerlerini okur. Daha sonra her bir konfigürasyon için;

(4.3)

Bu konfigürasyondaki işgal edilmiş yörüngesiler listesindeki yerlerini okur. Verilen I için,

$$\text{NOCORB}(J, I) > \text{NOCORB}(J-1, I)$$

ifadesi sağlanmalıdır.

(4.4)

Karşılık gelen $\{\lambda_i, i=1, 2, \dots, k\}$ λ_i takımını okur ve

(4.5)

Kuantum sayıları üçlüsünü $(\alpha_i, 2L_i+1, 2S_i+1)$ $i=1,2,\dots,(2k-1)$ şeklinde okur.

(4.6)

Yörüngemsi listesindeki (n,l) değerlerini okur. MAXORB, NOCORB(J,I)'nın en büyük değeridir.

(4.7)

şeklen $1s,2s,2p,4f$ vs. şeklinde, (4.6) ile aynı sırada yörüngemsilerin alfasayısal biçimini okur.

3.8.2.5. Fonksiyon Tipi

(5.1)

Bloklar halinde bölünebilen bir Hamiltonyen matrisinin olabirliğine izin verir.

A	0	0
0	B	0
0	0	C

NPARTS böyle blokların sayısı; NPART(I), I bloğundaki son konfigürasyondur. Bu deyimle eğer IPARTN=1 ise karşılaşılır. Eğer IPARTN=0 ise böylece NPARTS otomatik olarak "1" ve NDPART(I)=NCFG olur.

(5.2) ve (5.3)

Bu iki deyimle son bloğun özdeğeri, fonksiyonun minimumlaştırılmasında, en düşük değeri değilse karşılaşılır. Uygun bir fonksiyon olarak özdeğerlerin lineer konveks bir kombinasyonuna izin verir:

$$F = \sum_{i=1}^n W_i \lambda_i$$

NEIGEN özdeğerlerin sayısı (n),
 {LEIGEN(I)} ilgili λ_i 'lerin bütün özdeğerler listesindeki konumları,
 {WTIGEN(I)} yukarıdaki W_i katsayılarıdır.

Köşegenleştirme için JACOBI programı kullanılır. Bu program normal olarak azalan sırada $\lambda_i < \lambda_{i-1}$ gibi, her bir blok içindeki özdeğerleri sıralar.

3.8.2.6. Optimumlaştırma Verileri

(6.1)

NOPT mevcut yürütmede optimumlaştırılacak radyal fonksiyonların sayısı,
 JCOMP(I) optimumlaştırılacak radyal fonksiyonların (4.6) veya (4.7) ile tanımlı sırada yörüngelerin tam listesindeki konumudur.

(6.2)

IDAVID=1, MODDAV'ın kullanımı; =0 MODDAV kullanılmazsa,
 IVA04A=1, VA04A kullanılırsa; =0 VA04A kullanılmazsa. Bu ikili KE hesaplamalarında minimumlaştırma için tavsiye edilen metodlardır. Başlama noktası minimum konuma yakın olduğunda, VA04A'nın çok iyi çalıştığı, fakat parametrelerin baştaki değeri çok doğru olmadığı zaman MODDAV'ın sıkça daha iyi olduğu bulunmuştur. Değişkenlerin başlangıçtaki tahminleri tam iyi olarak bekleniyorsa VA04A tek başına (IDAVID=0, IVA04A=1) kullanılmalıdır. Eğer başlangıçtaki tahminler zayıf oluyorsa MODDAV tek başına (IDAVID=1, IVA04A=0) veya iki program bir arada (IDAVID=IVA04A=1) kullanılır. Bu son durumda

herbir radyal fonksiyonun optimum olabilmesi için, MODDAV ilk olarak kullanılır, hemen ardından VA04A ile izlenilir. MODDAV'ı kullanmak için parametreler şunlardır:

(6.3)

- IZETA neyin optimumlaştırılacağını belirler; =1, sadece $\{\varphi_{jn1}\}$ değiştirilir ve bütünü eşit tutulur; =2, sadece $\{\varphi_{jn1}\}$ değiştirilir fakat birbirinden bağımsızdır; =3, sadece $\{\varphi_{jn1}\}$ değerlerinin bazıları değiştirilir; =4, sadece $\{C_{jn1}\}$ katsayıları değiştirilir; =5, bütün katsayılar ve $\{\varphi_{jn1}\}$ için ortak bir φ değiştirilir; =6, bütün $\{C_{jn1}\}$ katsayıları ve $\{\varphi_{jn1}\}$ üslerinin birbirinden bağımsız değişmesine izin verilir; =7, bütün $\{C_{jn1}\}$ katsayıları ve $\{\varphi_{jn1}\}$ üslerinden bazıları değiştirilir; =8, her bir radyal fonksiyon için farklı mümkün bir IZETA değeri optimumlaştırılır; =9, bütün katsayılar değiştirilir, diğer 8 ihtimalin herhangi biri ayarlanır.
- MAXIT1 MODDAV içindeki tekrarların en büyük sayısı. N herhangi bir anda optimumlaştırılan değişkenlerin en büyük sayısını göstermek üzere genelde $MAXIT1 > N+1$ seçimi arzu edilir. MODDAV kullanımını VA04A'nın kullanımıyla izlenecekse MAXIT1'i bir küçük tamsayı (örneğin 5) olarak seçmek yeterli olabilir.

(6.4)

- ECOMM1 ($\epsilon_j = EE(I)$) katsayılarının beklenen doğruluğunun ortak değeri.
- ECOMM1 Enerjide küçük etkiler oluşturan bir çok durumdaki değişiklikler gibi üslerin beklenen doğruluğunun ortak değeri. ECOMM1 ve ECOMM2'den sadece birisi kullanılacak olsa bile her ikisi de

proğrama giriş verisi olarak okunur.

FTOLER ilk yörüngesilerin her optimumlaştırma işlemi sonunda, karşılık gelen enerjiler karşılaştırılır. Eğer farkları FTOLER'den daha az ise işlem sonlandırılır. Genelde $Z^2 \cdot 10^{-6}$ denenir.

FACTOR GRAD'da, gradiyent vektörünün bileşenlerini hesaplar larken

$$\delta x_i = \begin{cases} \text{FACTOR} \cdot x_i & \text{eğer } x_i \neq 0 \\ \text{FACTOR} & \text{eğer } x_i = 0 \end{cases}$$

seçilir.

DIFF MODDAV, fonksiyonelin en küçük değeri için bir tahmin gerektirir. Bu DIFF değişkeni, MODDAV'ın herhangi bir çağrımında baştaki ve sondaki fonksiyon değerleri arasındaki farkın bir tahminidir. Genelde bu fark optimumlaştırılacak farklı radyal fonksiyonlar için değişir. DIFF'i bu farkların en büyüğü olarak seçmek uygundur.

(6.5) ve (6.6)

Bu parametreler, VA04A'nın kullanımı için gereklidir. IZETA, ECOMM1, ECOMM2, FTOLER, (6.3) ve (6.4)'teki gibi tam olarak tarif edilirler. MAXIT2, MODDAV'daki MAXIT1 gibi, VA04A içindeki etkileşmelerin en büyük sayısıdır.

ESCALE doğrudan araştırmada başlangıçtaki adım boyunu tayin eder. Bu adım, $0.1 \cdot \text{ESCALE} \cdot \text{ECOMM}$ 'dir. Burada, $\text{ECOMM} = \text{ECOMM1}$ katsayılar için $\text{ECOMM} = \text{ECOMM2}$ üsler için kullanılır. $\text{ECOMM1} = 0.01$ için $\text{ESCALE} = 100$ seçimi yapılabilir.

(6.7)

IZETA=9 ise bu terimle karşılaşılır. IZETA, 5'ten 8'e kadar değer alabilir.

(6.8)

Bu terimle IZETA veya IZETAP 8 deęerini alırsa karřılařılır.

(6.9)

Bu terimlerle üslerin sadece bazıları optimumlařtırılacaksa (IZETA veya IZETAP=3 veya 7 olduęunda) karřılařılır. Bylece herbir radyal fonksiyon iin; K, optimize edilecek üslerin sayısı, NOVSTO deęiřtirilmek istenen üslerin konumlarıdır. Bylece rneęin, eęer radyal fonksiyonlar 4 baz fonksiyonu iine alıyorsa ve eęer 1., 2., 3., 4.nn deęiřtirilmesi arzu ediliyorsa K=3, NOVSTO=1, 3, 4 olur.

3.8.2.7. Hamiltonyen Matrisinin Girdiriliři

PSHPSP simetrik Hamiltonyen matrisi, herbir bloęun st ęgenini ayrıca okuyarak girdirilir.

3.3.2.8. Hamiltonyen Matrisinin ıkarılması

Gereksiz sıfırları ıkarmamak iin delme, blok-blok yapılır. Delgi ıkarma deyimleri CALCFX'te bulunur. Bu kesimle NPUNCH#0 olursa karřılařılır.

(8.1)

IHOLEH=1, Hamiltonyen matrisi kart ıkıřı,

≠0, matrisin ıkarılması yok.

IHOLEU=1, zdeęer ve zvektrlerin kart ıkıřı; =0 en dřk

zdeęer ve karřılık gelen zvektrn kart ıkıřı,

<0 zdeęer ve zvektrlerin kart ıkıřı yok.

3.8.2.9. Konfigrasyon Takımının Geniřletilmesi

Giriř řekli ařaęıdaki farklılıklarla (3.8.2.4)'teki gibidir:

(i) NCFG yerine NEXTRA, fazlalık konfigürasyon sayısı okunur.

(ii) Yörüngelerin listesi (4.6) ile tanımlanan ve (4.3) te kullanılanlara eklenerek yapılabilir. Önceki yörüngemsi-lerin sırası ve konumu devam ettirilmelidir.

(iii) (9.6) ve (9.7) deyimleri, sadece bu adımda geti-rilen yeni yörüngemsi-leri içermelidir.

(9.8)

Yeni konfigürasyonlar bir öncekinden farklı bir simetride olabilir. Eğer bu durum varsa (IPARTN=0 ise), NPARTS değiř-kenleri okunmalıdır.

3.8.2.10. Çok İnce Yapı Verileri

Bu konuyla ilgili hesaplama yapılmadığından IHYPF=0 olarak girilmelidir.

3.8.2.11. Osilatör Kuvvetleri Verileri

Hamiltoniyen matrisi uygun farklı simetrilerin iki veya daha çok bloğunu içeriyorsa, uygun bir bloktan çekilen özde-ğer veya özvektörle karakterleştirilmiş iki durum arasındaki dipol osilatör kuvveti hesaplamak mümkün olabilir.

(11.1)

NOSCIS böyle osilatör kuvveti hesaplarının sayısıdır. Bu hesaplamaların herbiri için izleyen giriş bulunma-lıdır:

(11.2)

NGDGO konfigürasyonların tam listesinde daha küçük hale ait ilk konfigürasyon,
NCFGG daha düşük haldeki konfigürasyon sayısı,

IGENGD daha düşük hal dalga fonksiyonunu tanımlayan özdeğer veya özvektörün konumudur.

Programda NGDGO=NEXTGO, NCFGG=NCFGE ve IGENGD=IGENEX seçilmiştir. Bu değerler de bu düşünce ile NGDGO, NCFGG ve IGENGD değerlerini alacaklardır.

3.8.2.12. Alt Köşegenleştirme

Hamiltonyen matrisi kurulunca sınırlı sayıda konfigürasyon dahil etmenin etkisini görmek için alt matrisler köşegenleştirilmek istenebilir.

(12.1)

NDIAGS böyle gerekli alt köşegenleştirmelerin sayısı. Her bir alt köşegenleştirme için;

(12.2)

NCFG alt matrislerin boyutu (örneğin satır-sütun sayısı)

ICFG(I) alt matrisleri kuran orjinal matrisin satırları (veya sütunları), veya bir başka deyişle bu alt setlerde içerilen tam listedeki konfigürasyonlar.

(12.3)

Alt köşegenleştirmenin bölünmesini tanımlar. Burada OSCI'yi çağırarak mümkündür.

3.8.2.13. Yürütmenin Devam veya Sonlandırılması

Bu aşamada bir takım seçenekler vardır:

(i) Bir eş elektronik dizinin başka üyeleri için hesaplama tekrarlanabilir.

(13.1)

NZ Z'nin yeni deęeridir. CALORB programına gelinir. Yeni radyal fonksiyonlar okunur. Program (3.8.2.6) ya döner ve oradan işe devam edr.

(ii) Yeni tam bir hesaplama, (13.2) okunuşuyla (1.2) başlangıcına geri dönüş ve girişin yeni bir veri takımının sokulmasıyla gerçekleştirilir.

(iii) Program (13.2) deyiminin kullanımıyla sona erdirilebilir.

(13.2)

Bu kart, ilk dört sütundaki dört (-) işaretinden oluşuyorsa, programı sona erdirir veya yeni bir giriş verisi eklenecekse yeni bir başlıktan ibaret olmalıdır.

BÖLÜM 4

PROGRAMIN ÇALIŞTIRILMASI VE SONUÇLAR

Çok elektronlu sistemler için SOC yöntemini kullanan AAKM CIV3 kod adlı "Konfigürasyon Etkileşmesi Dalga Fonksiyonları ve Elektrik Dipol Osilatör Kuvvetleri Hesaplamak İçin Genel Bir Program" Computer Physics Communication Program Library'den ısmarlanmıştır. Ana program ve birkaç altprogramın orijinali Ekler'de sunulmuştur.

Bu programın işletimi için geçen süre, atomun boyutuna, optimumlama gerekliliğine, konfigürasyonların sayısına ve herbir radyal fonksiyondaki temel fonksiyonların sayısına bağlıdır.

CPC'den ısmarlanan programı çalıştırabilmek için; önce ihtiyaç duyulan altprogramlar bu paket programa eklenmiştir. Bazı yazım ve eklemeden doğan fazlalıkların getirdiği hatalar derleme aşamasında düzeltilmiştir. Bu derleme aşaması KTÜ'deki IBM 4341 sistemde 3,5 dakikalık bir süre almıştır.

4.1. Test Durumları:

Bu programda geniş sayıda mümkün hesaplamaların olması sebebiyle bir tek hesaplama bütün sonuçların elde edilmesi imkânsızdır. Bu nedenle sekiz farklı hesap tipi tasarlanmıştır. Bu sekiz durum şunlardır:

Durum 1:

Seçilen atom oksijendir. Durum 2'deki NIV'ün verileriyle OV'in temel hal enerjisi hesaplanır.

Durum 2:

Bu durum tekrar optimumlaştırma işlemini içermez. Fakat kurulan dalga fonksiyonlarından osilatör kuvveti hesaplanır. Seçilen atom NIV'tür. NIV'ün geçişi $1s^2 2s^2 1s - 1s^2 2s 2p 1p$ şeklindedir. Burada herbir hal iki konfigürasyon içerir: $1s-1s^2 2s^2, 1s^2 2p^2: 1p-1s^2 2s 2p, 1s^2 2p 3d$. Kullanılan radyal fonksiyonlar ve elde edilen osilatör kuvvetleri [18]'in "2x2" sonuçlarına karşılık gelir. Fano-Racah düzeni kullanılır. IBUG1 ve IBUG4=1 olacak şekilde hesaplama yapılır.

Durum 3:

İkinci durumdaki hesaplamaya benzerdir. Condon-Shortley düzeni kullanılır. Bu durumda hesaplanan osilatör kuvveti ve enerji özdeğerleri bir önceki durumla özdeştir.

Durum 4:

Seçilen atomlar Be ve BII'dir. 3p ve 3d fonksiyonları $[1s^2] 2p^2, 2p 3p, 3p^2, 3d^2$ (dört) konfigürasyonundan elde edilen Be'un en düşük $3p^e$ hali üzerinde optimumlaştırılmışlardır. (3p) ve (3d)'nin parametrelerinin sadece üslerinin bir tahminleri [18] referansında verilmişlerdir. Bu değerler $1s \longrightarrow 1p$ geçişinin osilatör kuvveti hesabında kullanılmıştır. Başlangıç değerlerinin mantıklı olduğu kabullenilmesiyle sadece VA04A kullanılır. Test çıkışında, IBUG8=IBUG9=0 olduğundan verilen optimumlaştırma devrinin nihai sonuçları gözükür. Konfigürasyon takımı izleyen $3p^o$ konfigürasyonunu içerecek şekilde genişletilir ve $3p^o \longrightarrow 3p^e$ osilatör kuvveti hesaplanır: $[1s^2] 2s 2p, 3s 2p, 2s 3p, 3s 3p, 2p 3d, 3p 3d$. Bu işlem BII için tekrarlanır. Dört $3p^e$ konfigürasyonlarını yeniden girdirmeye ihtiyaç yoktur, fakat minimumlaştırma ve osilatör kuvveti verileri, fazlalık konfigürasyonlar ve alt köşegenleştirme verileri yeniden girilmelidir.

Durum 5:

Bu durumda berilyumun $[1s^2]2s2p, 2p3d$ konfigürasyonlarına sahip düşük 1P özdeğeri üzerine 3d fonksiyonu iki STO ile optimize edilir. STO'ların katsayıları ilk üslerin seçimi ve onları takip eden bütün parametrelerin değiştirilmesiyle belirlenir. MODDAV programı $DIFF=0.0001$ ve $DELTA=0.00001$ seçimiyle kullanılır. Bu ara sonuçlar $IBUG8=IBUG9=1$ seçimiyle minimumlaştırma sırasında verilir.

Durum 6:

Optimumlaştırmanın bir farklı örneği bu durumda verilir. Seçilen atom lityum'dur. Lityumun en düşük 2P özenerjisi fonksiyonel olarak seçilir ve 2s fonksiyonu $1s^22p$ ve $2s^22p$ konfigürasyonu ile optimumlaştırılmaktadır.

Durum 7:

Bir önceki durumun değme noktası şartlarının sağlandığı bir örnektir.

Durum 8:

En düşük özdeğerden başka bir fonksiyonelin optimumlaştırılmasına izin verir. 2s fonksiyonu helyumun $1s2s^3S$ ve $1s2s^1S$ özdeğerlerinin aritmetik ortalaması üzerine optimumlaştırılmıştır. 1s fonksiyonu ve aynı zamanda 2s fonksiyonu $Z=2$ ile hidrojenik formda alınır. 3S hali için bir tek konfigürasyon kullanılır. 1S hali için konfigürasyonlar $1s^2$; $1s2s$; $2s^2$ şeklinde üç tanedir. $1s^2$ 'nin dahil edilmesi esastır. $DIFF=0.1$ ve MODDAV seçilir.

4.2. Sonuçlar

Derleme işleminden sonra programın verileri uygun formatta hazırlanarak ayrı bir kütükte bilgisayara

yüklenmiştir. Programın yürütülmesi aşamasında ilk olarak 4. test durumunda tartışılan Be ve BII örneği ele alınmıştır. IBM 4341 sistemde işletim zamanı 55sn olarak tespit edilmiştir. Sekiz değişik duruma ait hesaplanan enerji değerleriyle deneysel enerji değerleri[19] Tablo 1'de sunulmuştur. Hesaplanan enerji değerleriyle deneysel enerji değerlerinin uyduğu so-nucuna varılmıştır. Ayrıca dört değişik atom için 6^3P-4^3P geçişiyle ilgili ΔE enerji farkları ile boy, hız ve ivme şekliyle osilatör kuvveti hesaplamaları verilmiştir. Bu değerlerin deneysel değerlerle [7] uyuşmadığı sonucuna varılmıştır. NIV için sadece 2^1S-2^1P geçişindeki ΔE enerji farkı hesaplanmıştır. Enerji ve osilatör kuvvetiyle ilgili hesaplamaların atomik birim(ab) cinsinden verildiği not edilmelidir ($1ab=27.211652eV$).

Tablo 1 Bazı Atomların Temel Hal Enerjileri
(ab cinsinden)

Atom	Deney	Bu Çalışma
He	-2.90	-2.75
Li	-7.47	-7.36
Be	-14.669	-14.665
NIV	-51.24	-51.14
BII	-24.35	-22.89
CIII	-36.54	-35.70
OV	-68.45	-66.91

Tablo 2 Atomların Bazı Osilatör Kuvvetleri

Atom	Geçiş	$\Delta E(ab)$	f_l	f_v	f_a
Be	6^3P-4^3P	0.65	1.37	0.69	1.80
BII	6^3P-4^3P	1.30	1.21	0.70	1.09
CIII	6^3P-4^3P	1.50	1.39	0.68	1.73
OV	6^3P-4^3P	1.56	1.12	0.64	5.32
NIV	2^1S-2^1P	2.36	—	—	—

Bu çalışmada sınırlı sayıda atomun birer hali üzerinde kaba hesaplar denenmiştir. Aynı atomların başka terim ve çokluları için ve konfigürasyon takımları değiştirilerek hesaplamalar çeşitlendirilebilir ve daha duyarlı hale getirilebilir. Atom numarası 12'den küçük başka atomlar da incelenebilir. Bu tür hesaplamaları basamaklarda çok ince yapı, fotoiyonlaşma, çarpışma uyarma ve elektron-atom saçılma hesapları araştırılabilir. Bu gibi çalışmalarda mevcut gerekli altprogramlar devreye sokulmalı veya yeniden hazırlanmalıdır. CPC Program Library'ye bilgisayar ağına girilebilirse daha verimli çalışmalar gerçekleştirilebilecektir.

KAYNAKLAR

- [1] Murrel, J. N., Kettle, S. F. A., Tedler, J. M., Valence Theory, Second Edition, Wiley & Sons, London, 1966.
- [2] Slater, J. C., A Simplification of the Hartree-Fock Method, Phys.Rev. 81(1951) 385-387.
- [3] Karal, H., Helyumun Enerji Seviyeleri ve Dalga Fonksiyonlarının Hesaplanması, Doktora Tezi, K.T.Ü., Trabzon, 1969.
- [4] Rose, M. E., Elementary Theory of Angular Momentum, New York, Wiley, 1957.
- [5] Hibbert, A., Developments in Atomic Structure Calculations, Rep.Prog.Phys. 38(1975) 1217-1338.
- [6] Bransden, B. H., Joachain, C. J., Atom ve Molekül Fiziği, Çeviri: Fevzi Köksal, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Yayınları, Samsun, 1989.
- [7] Hibbert, A., CIV3 A General Program to Calculate the Configuration Interaction Wave Functions and Electric Dipole Oscillator Strengths, Comp.Phys.Com. 9(1975) 141-172.
- [8] Nesbet, R. K., Bruckner's Theory and the Method of Superpositions of Configuration, Phys.Rev. 109(1957) 1632-1634.
- [9] Woodgate, G. K., Elementary Atomic Structure, McGraw Hill, London, 1970.
- [10] Fraga, S., Research in Atomic Structure A Configuration Interaction Program with Relativistic Correction, Comp.Phys.Com. 47(1987) 159-181.
- [11] Hibbert, A., Adaptation of A General Program to Calculate Angular Momentum Integrals on Atomic Structure, Comp.Phys.Com. 7(1974) 318-326.
- [12] Slater, J. C., Quantum Theory of Atomic Structure, Vol. 1 and Vol.2, New York, McGraw Hill, 1970.
- [13] Powell, M. J. D., An Efficient Method for Finding the Minimum of a Function of Several Variables without Calculating Derivatives, App.Math.Group.Theo.Phys.Div., AERE Harwell, Berks, 8(1973) 76-84.

- [14] Lill, S. A., A Modified Davidon Method for Finding the Minimum of a Function Using Difference Approximation for Derivatives, Comp.J., 13(1970) 111-118.
- [15] Fano, U., Racah, G., Irreducible Tensorial Sets, New York, Academic, 1971.
- [16] Condon, E. U., Shortley, G. H., Theory of Atomic Structure, Cambridge, Cambridge University Press, 1968.
- [17] Coulson, C.A., Sharma, C.S., A Reconsideration of the Split p-Orbital (s-p-o) Method in Molecular Orbital Theory, Proc.Roy.Soc., A 272(1963) 1-5.
- [18] Burke, P.G., Hibbert, A., Robb, W.D., Wave Functions and Oscillator Strengths for the Beryllium Iso-Electronic Sequence, J.Phys.B, 5(1972) 37-43.
- [19] Baiwen, L., Goldflam, R., Henley, E., Willets, L., Two Electron Correlations in Atoms: Application to Be-like ions, J.Phys.B, 17(1984) 1445-1452.

EKLER

C *****

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

 *
 * EXTERNAL AND INTRINSIC *
 * FUNCTIONS REQUIRED *
 *

ABS
 ALOG
 AMAX1
 AMIN1
 EXIT
 EXP
 FLOAT
 IABS
 MAX0
 MIN0
 MOD
 SIGN
 SQRT

C *****

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

MASTER CIV3
 CALL CICODE
 STOP
 END
 SUBROUTINE CICODE

DIMENSION IALPHA(18),NDSTO(80)

COMMON/ALTER1/IVYEXP,LVYEXP,KTOT,NJVARY,LJVARY,NVARY,NH0VAR,
 1 NFKVAR,NGKVAR,NRKVAR,ISETUP,JZETA,NZEVY(30),NOVSTO(50)
 COMMON/CHEERS/IALT2,INFS,INGS,INRS,IH0S,IRKS,MYIHS
 COMMON/CPUNCH/NPUNCH,IHOLEH,IHOLE0,NREAD
 COMMON/DEBUG/IBUG1,IBUG2,IBUG3,IBUG4,IBUG5,IBUG6,IBUG7,IBUG8,IBUG9
 COMMON/DIMEN/KFL1,KFL2,KFL3,KFL4,KFL5,KFL6
 COMMON/GAUSS/A(225),B(15),NSIMEQ
 COMMON/H0VALD/ALB(50),NILINT,IILPOS(50),IILINT,NILCAL(50),
 1 IILCAL(50)
 COMMON/INFORM/ IREAD,IWRITE,IPUNCH
 COMMON/KRON/IDEL(10,10)
 COMMON/NBUG/NBUG1,NBUG2,NBUG3,NBUG4,NBUG5,NBUG6,NBUG7,NBUG8,NBUG9
 COMMON/OPTIMA/X(20),ECOMM1,ECOMM2,EE(20),ESCALE,RMAC,DIFF,FACTOR,


```

2  NPARAM,NFVALS,MAXIT,IVAO4A,IPRINT,ICON,IDAVID,IFAIL
COMMON/PARTN/WTIGEN(30),NPARTS,NDPART(30),NEIGEN,LEIGEN(30),IFNCTN
COMMON/PHASE/ICSTAS,SIGNFA(30),SINSTO(30)
COMMON/RADIAL/C(240),ZE(240),IRAD(240),NCO(30),LRANG1,LRANG2,
1  MAXNHF(9),MAXNEX(9),NCOEFF,NLIMIT,NZ
COMMON/RKVALD/RKLIST(500),NRKCAL(500),NRKINT,IRKPOS(500),
1  IRKINT,IRKCAL(500),INISHL
COMMON/STATES/NCFG,NCCSH(30),NOCORB(5,30),NELCSH(5,30),
1  JIQNRD(9,3,30),MAXORB,NJCOMP(21),LJCOMP(21),IAJCOMP(21)
COMMON/SUBCFG/PSHPS(30),ISUBL,IXTEND,ICFG(30),NCSTO
COMMON/TEMPRY/NFNGO,NFNEND,I1STO,I4STO,I5STO,I6STO,I7STO
DATA ACCY/0.5E-10/

```

C

```
DATA LAST/4H----/
```

C

```

1  FORMAT(12I5)
6  FORMAT(1H1///50X,19H-----/50X,19HINITIAL HAMILTONIA
1N/50X,19H-----/)
9  FORMAT(///50X,20H-----/50X,20HTHE RADIAL FUNCTIONS
1/51X,18HINITIAL PARAMETERS/50X,20H-----/)
11 FORMAT(78H IN THIS RUN, THE TYPE OF CALCULATION IS DEFINED BY THE
1FOLLOWING PARAMETERS -/5X,24H VARIATION OF PARAMETERS,11X,8HIVYEXP
2 =,I2,25X,20H HYPERFINE STRUCTURE,15X,8HIIYYPF =,I2/5X,21H OSCILLA
3TOR STRENGTHS,14X,8HIIOSCI =,I2,25X,22H EXTEND CONFIGURATIONS,13X,
48HIIXTEND =,I2/5X,19H MATRIX PARTITIONED,16X,8HIIPARTN =,I2,25X,26H
5MATRIX SUBDIAGONALIZATION,9X,8HIIISUBD =,I2/5X,26H OTHER MEMBERS OF
6 SEQUENCE,9X,8H ISO =,I2,25X,27H DIFFERENT FORM OF FUNCTION,8X,8
7HIIFNCTN =,I2/5X,21H HAMILTONIAN PUNCHING,14X,8HIIHPUNCH =,I2,25X,31H
8 PRINT-OUT FOR CERTAIN MATRICES,4X,8HIIHTAIL =,I2/5X,27H READ IN HA
9MILTONIAN MATRIX,9X,7HIIENREAD =,I2,25X,27H PHASE CONVENTION PARAMETE
1R,8X,8HIIICSTAS =,I2/5X)
12 FORMAT(/5X,66H THERE WILL BE FULL OUTPUT, EXCEPT FOR NJSYM, AFTER
1FUNCTION VALUE,15,2X,25H AND UP TO FUNCTION VALUE,15//)
24 FORMAT(35H0INITIAL DEBUG IN 2-ELECTRON PART =,I2,2H ,,5X,30H DEBUG
1 IN RECOUPLING PACKAGE =,I2,2H ,,5X,35H INITIAL DEBUG IN 1-ELECTRO
2N PART =,I2/63H INITIAL DEBUG IN 2-ELECTRON PART FOR SUBSEQUENT MI
3NIMIZATION =,I2/63H INITIAL DEBUG IN 1-ELECTRON PART FOR SUBSEQUEN
4T MINIMIZATION =,I2/44H DEBUG FOR PRINT-OUT OF HAMILTONIAN MATRIX
5=,I2/47H DEBUG FOR PRINT-OUT WITHIN MINIMIZATION CODE =,I2/55H DEB
6UG FOR PRINT-OUT OF INTERMEDIATE RADIAL FUNCTIONS =,I2)
37 FORMAT(18A4)
41 FORMAT(/////52X,17H-----/52X,17HFINAL HAMILTONIAN/52X
1,17H-----/)
42 FORMAT(/10X,91H THE ABOVE MATRIX ELEMENTS ARE CONSTRUCTED USING T
1HE SPHERICAL HARMONIC PHASE CONVENTION OF/)
43 FORMAT(32X,47HCONDON AND SHORTLEY, THEORY OF ATOMIC STRUCTURE/32X,
147H-----/)
44 FORMAT(35X,42HFANO AND RACAH, IRREDUCIBLE TENSORIAL SETS/35X,42H--
1-----/)
50 FORMAT(1H1///36X,10HCCCCCCCC,4X,10HIIIIIIII,3X,2HVV,8X,2HVV,4
1X,10H3333333333/35X,12HCCCCCCCC,3X,10HIIIIIIII,3X,2HVV,8X,2H
2VV,3X,12H3333333333/35X,2HCC,8X,2HCC,
2 7X,2HII,7X,2HVV,8X,2HVV,3X,2H33,8X,
32H33/35X,2HCC,17X,2HII,7X,2HVV,8X,2HVV,13X,2H33/35X,2HCC,17X,2HII,
47X,2HVV,8X,2HVV,13X,2H33/35X,2HCC,17X,2HII,7X,2HVV,8X,2HVV,10X,4H3

```

```

5333/35X,2HCC,17X,2HII,7X,2HVU,8X,2HVV,10X,4H3333/35X,2HCC,17X,2HII
6,8X,2HVU,6X,2HVV,14X,2H33/35X,2HCC,17X,2HII,9X,2HVU,4X,2HVV,15X,2H
733/35X,2HCC,8X,2HCC,7X,2HII,10X,2HVU,2X,2HVV,6X,2H33,8X,2H33/35X,1
82HCCCCCCCCCCC,3X,10HIIIIIIIII,7X,4HVUUU,7X,12H3333333333333/36X,1
90HCCCCCCCCC,4X,10HIIIIIIIII,8X,2HVU,9X,10H3333333333333333/25X,
116A4,10X,9H DATE - ,2A4/25X,64H-----
2-----//)
52 FORMAT(1H1//5X,28H SIMILAR CALCULATION FOR Z =,I3//)
62 FORMAT(27H THERE WILL SUBSEQUENTLY BE,I5,19H FURTHER Z-VALUES//)
63 FORMAT(/////50X,12H -----/50X,12H END OF DATA/50X,12H ---
1-----)
78 FORMAT(47H DEBUG PARAMETER IN OSCILLATOR STRENGTH CODE IS,I3/41H D
1EBUG PARAMETER IN SINGLE TENSOR CODE IS,I3)

```

```

C
C  SET INPUT AND OUTPUT CHANNELS
C

```

```

I READ=1
I WRITE=2
N FACT=20
N HDEL=10
R MAC=ACCY
I PRINT=1
I CON=1

```

```

C
C --- SET DIMENSION LIMITS FOR SEVERAL COMMON BLOCKS
C

```

```

I ALT2=100
I NFS=100
I NGS=100
I NRS=200
I HOS=50
I RKS=500
K FL2=12
K FL3=20
K FL4=40
K FL5=80
K FL6=12
K FL1=5
N SIMEQ=15
M XIHSR=10

```

```

C
C  READ IN HEADING CARD
C
C

```

```

39 READ(I READ,37) (I ALPHA(I),I=1,18)
   CALL COMP(I ALPHA(1),LAST,ICOMP)
   IF(ICOMP.EQ.0) GO TO 10
   WRITE(I WRITE,63)
   RETURN
10 WRITE(I WRITE,50) (I ALPHA(I),I=1,18)

```

```

C
C  READ IN BASIC PARAMETERS DEFINING USE OF PROGRAM
C

```

```

READ(I READ,1) I VYXP,I HYPF,I GSCI,I XTEND,I PARTN,I SUBD,I SO,I FNCTN,
1  NPUNCH,I DTAIL,N READ,I CSTAS

```

```

WRITE(IWRITE,11) IVYEXP,IHYPF,IOSCI,IXTEND,IPARTN,ISUBD,ISO,
1  IFNCTN,NPUNCH,IDTAIL,NREAD,ICSTAS
IF(ISC.EQ.0) GO TO 61
READ(IREAD,1) NOZS
WRITE(IWRITE,62) NOZS
61 IF(IDTAIL.EQ.0) GO TO 85
READ(IREAD,1) NFNGO,NFNEND
WRITE(IWRITE,12) NFNGO,NFNEND
GO TO 82
85 NFNGO=-1
   NFNEND=-1
82 ISUBST=ISUBD
   ISUBD=0

C
C  READ IN DEBUG PARAMETERS
C
READ(IREAD,1) IBUG1,IBUG2,IBUG3,IBUG4,IBUG5,IBUG6,IBUG7,IBUG8,
1  IBUG9
WRITE(IWRITE,24) IBUG1,IBUG3,IBUG4,IBUG5,IBUG6,IBUG7,IBUG8,IBUG9
IF(IHYPF.EQ.0.AND.IOSCI.EQ.0) GO TO 79
READ(IREAD,1) NBUG2,NBUG6
WRITE(IWRITE,78) NBUG2,NBUG6

C
C  SET FACTORIALS
C
79 CALL SHRIEK(NFACT)

C
C  SET KRONECKER DELTA
C
DO 2 I=1,NHDEL
DO 3 J=1,I
IF(I.EQ.J) GO TO 5
IDEL(I,J)=0
IDEL(J,I)=0
GO TO 3
5 IDEL(I,I)=1
3 CONTINUE
2 CONTINUE

C
C
C --- DEFINE THE RADIAL FUNCTIONS
C
C
CALL ARADFN

C
C
C --- READ IN THE SET OF CONFIGURATIONS AND, WHEN NECESSARY, DEFINE
C   THE FUNCTION TO BE MINIMIZED
C
C
CALL ACNFIG(IPARTN)

C
C
C  INITIALIZE THE ARRAY ICPG
C

```

```

53 DO 87 I=1,NCFG
    ICFG(I)=I
87 CONTINUE
C
C --- ZEROIZE STORE OF RADIAL INTEGRALS
C
    NRRINT=0
    DO 20 I=1,IRNS
        NRRCAL(I)=1
20 CONTINUE
    NILINT=0
    DO 8 I=1,IHCS
        NILCAL(I)=1
8 CONTINUE
    IF(IVYEXP.NE.0) GO TO 71
C
    WRITE(IWRITE,6)
    ISETUP=0
    NFVALS=0
    GO TO 30
C
C
C --- OPTIMIZATION OF THE RADIAL FUNCTIONS
C
C
71 CALL AOPTIM
C
C
C --- LAST (OR ONLY) EVALUATION AND DIAGONALIZATION OF HAMILTONIAN
C MATRIX
C
    WRITE(IWRITE,41)
30 LVYEXP=0
    IVYSTO=IVYEXP
    IVYEXP=0
    NVARY=0
    ISUBD=ISUBST
    IBUGD=IBUG7
    IBUG7=3
    IF(NPUNCH.EQ.0) GO TO 7
C
C INPUT CARD-OUTPUT PARAMETERS
C
    READ(IREAD,1) IHOLEH,IHOLEU
C
    GO TO 33
7 IHOLEH=-1
    IHOLEU=-1
C
33 CALL CALCFX(X,F)
C
    IF(IVYEXP.EQ.0) GO TO 46
    WRITE(IWRITE,42)
    IF(ICSTAS.EQ.0) GO TO 45
    WRITE(IWRITE,43)

```

```

      GO TO 46
45 WRITE(IWRITE,44)
46 MXSTO=MAXORB
      NCSTO=NCFG
      NPSTO=NPARTS
      DO 80 I=1,NPARTS
      NDSTO(I)=NDPART(I)
80 CONTINUE
C
C --- EXTENSION OF CONFIGURATION SET
C
      IF(IXTEND.EQ.1) CALL EXTEND(IPARTN)
      DO 86 I=1,NCFG
      IF(ICSTAS.NE.0) SINSTO(I)=SIGNFA(I)
      ICFG(I)=I
86 CONTINUE
C
C --- HYPERFINE STRUCTURE
C
      IF(IHYPF.EQ.1) CALL HYPF
C
C --- OSCILLATOR STRENGTHS
C
      IF(IOSCI.EQ.1) CALL OSCI
C
C --- SUB-DIAGONALIZATIONS
C
      IF(ISUBD.EQ.1) CALL PARSHL(IHYPF,IOSCI,IPARTN)
      NCFG=NCSTO
      MAXORB=MXSTO
      NPARTS=NPSTO
      DO 81 I=1,NPARTS
      NDPART(I)=NDSTO(I)
81 CONTINUE
      IF(ICSTAS.EQ.0) GO TO 88
      DO 84 I=1,NCFG
      SIGNFA(I)=SINSTO(I)
84 CONTINUE
88 IF(ISO.EQ.0) GO TO 39
      IF(NOZS.EQ.0) GO TO 39
C
C --- SIMILAR CALCULATIONS WITH DIFFERENT Z AND/OR RADIAL FUNCTIONS
C
      IVYEXP=IVYSTO
      IBUG7=IBUGHD
      NOZS=NOZS-1
      READ(IREAD,1) NZ
      WRITE(IWRITE,52) NZ
      WRITE(IWRITE,9)
      CALL CALORB
      GO TO 53
C
      END
      SUBROUTINE ACNFIG(IPARTN)
      COMMON/ALTER1/IVYEXP,LVYEXP,KTOT,NJVARY,LJVARY,NVARY,NEQVAR,

```

```

1   NFKVAR,NGKVAR,NRKVAR, ISETUP, JZETA, NZEVY(30), NOVSTO(50)
COMMON/CONSTS/ZERO, TENTH, HALF, ONE, TWO, THREE, FOUR, SEVEN, ELEVEN, EFS
COMMON/CPUNCH/KPUNCH, IHOLES, IHOLESU, NREAD
COMMON/INFOEM/ IREAD, IWRITE, IPUNCH
COMMON/PHASE/ICSTAS, SIGNFA(30), SINSTO(30)
COMMON/PARTN/WTIGEN(30), NPARTS, NDPART(30), NEIGEN, LEIGEN(30), IFNCTN
COMMON/STATES/NCFG, NCCSH(30), NCCORE(5, 30), NELCSH(5, 30),
1   JIQNED(9, 3, 30), MAXORB, NJCOMP(21), LJCOMP(21), IAJCMP(21)
1   FORMAT(12I5)
2   FORMAT(1H1///49X, 21H-----/49X, 21HTHE CONFIGURATIO
IN SET/49X, 21H-----/49X)
3   FORMAT(///47X, 26H-----/47X, 26HMINIMIZATION S
IPECIFICATION/47X, 26H-----/)
19  FORMAT(/////)
36  FORMAT(5F14.7)
38  FORMAT(/5X, 111H THE FUNCTION TO BE EVALUATED IS A LINEAR COMBINATI
ION OF EIGENVALUES, ACCORDING TO THE FOLLOWING PRESCRIPTION -//10X,
229H THE EIGENVALUES INVOLVED ARE, 13X, 10I6)
42  FORMAT(/10X, 39H THE WEIGHTING OF THESE EIGENVALUES ARE, 5X, 10F6.2)
49  FORMAT(/5X, 88H THE FUNCTION TO BE EVALUATED IS THE LOWEST EIGENVAL
1UE OF THE LAST (POSSIBLY ONLY) BLOCK)
72  FORMAT(///5X, 10H THERE ARE, 13, 51H PARTITIONS, ENDING RESPECTIVEL
1Y AT CONFIGURATIONS, 12I4/18I4)

C
C   READ IN (AND PRINT OUT) CONFIGURATIONS
C
C   WRITE(IWRITE, 2)
C   CALL CFGIN
70  CALL CFGOUT
C   CALL CFGTST

C
C   IF NECESSARY, DEFINE THE PARTITIONING
C
C   IF(IPARTN.EQ.0) GO TO 83
C   READ(IREAD, 1) NPARTS, (NDPART(I), I=1, NPARTS)
C   WRITE(IWRITE, 72) NPARTS, (NDPART(I), I=1, NPARTS)
C   GO TO 84
83  NPARTS=1
C   NDPART(1)=NCFG

C
C   --- DEFINITION OF FUNCTION TO BE MINIMIZED
C
C   84 IF(IFNCTN.EQ.0) GO TO 35
C   WRITE(IWRITE, 3)
C   READ(IREAD, 1) NEIGEN, (LEIGEN(I), I=1, NEIGEN)
C   READ(IREAD, 36) (WTIGEN(I), I=1, NEIGEN)
C   WRITE(IWRITE, 38) (LEIGEN(I), I=1, NEIGEN)
C   WRITE(IWRITE, 42) (WTIGEN(I), I=1, NEIGEN)
C   GO TO 48
35  IF(IVYEXP.EQ.0) GO TO 14
C   WRITE(IWRITE, 49)
48  WRITE(IWRITE, 19)
14  IF(ICSTAS.EQ.0) RETURN

C
C   DETERMINE THE SIGN ASSOCIATED WITH ANGULAR MOMENTUM PHASE

```

C CONVENTIONS

C

```

DO 21 NN=1,NPARTS
  IF(NN.EQ.1) GO TO 22
  ISTART=NDPART(NN-1)+1
  GO TO 23
22 ISTART=1
23 IEND=NDPART(NN)
  SIGNFA(ISTART)=ONE
  LBASE=0
  N1=NOCCSH(ISTART)
  DO 2 I=1,N1
    N2=NOCORB(I,ISTART)
    LBASE=LBASE+NELCSH(I,ISTART)*LJCOMP(N2)
  2 CONTINUE
  ISP1=ISTART+1
  DO 13 N=ISP1,IEND
    LPHASE=0
    N1=NOCCSH(I)
    DO 4 I=1,N1
      N2=NOCORB(I,N)
      LPHASE=LPHASE+NELCSH(I,N)*LJCOMP(N2)
    4 CONTINUE
    LPHASE=(LPHASE-LBASE)/2
    IF((LPHASE-LPHASE/2*2).EQ.0) GO TO 5
    SIGNFA(N)=-ONE
    GO TO 13
  5 SIGNFA(N)=ONE
13 CONTINUE
21 CONTINUE
  RETURN
  END
  SUBROUTINE JORBITM
  DIMENSION J(10),JZEPT(10),LTZEVY(10),NVSTO(10)
  COMMON/ALTBAS/ALB(50),LVP,LVYEXP,KTOT,NJVARY,LJVARY,NVARY,NHOVAR,
  1 NPKVA,NPKVB,NPKVC,NPKVD,NPKVE,NPKVF,NPKVG,NPKVH,NPKVI,NPKVJ,
  COMMON/CONST/CONSTANT,TENTH,HALF,ONE,TWO,THREE,FOUR,SEVEN,ELEVEN,EPS
  COMMON/CPUNCH/NPUNCH,IHOLEH,IHOLEU,NREAD
  COMMON/DEBUG/IBUG1,IBUG2,IBUG3,IBUG4,IBUG5,IBUG6,IBUG7,IBUG8,IBUG9
  COMMON/HQVALU/ALB(50),NILINT,IILPOS(50),IILINT,NILCAL(50),
  1 IILCAL(50)
  COMMON/INFORM/ IREAD,IWRITE,IPUNCH
  COMMON/OPTIMA/X(20),ECOMM1,ECOMM2,EE(20),ESCALE,RMAC,DIFF,FACTOR,
  1 DFIRST(20),G(20),OLDG(20),BIGH(20),SMALLH(210),
  2 NPARAM,NFVALS,MAXIT,IWA04A,IPRINT,ICON,IDAVID,IFAIL
  COMMON/RADIAL/C(240),ZE(240),IRAD(240),NCO(30),LRANG1,LRANG2,
  1 MAXNHF(9),MAXNEX(9),NCOEFF,NLIMIT,NZ
  COMMON/RKVALU/RKLIST(500),NRKCAL(500),NRKINT,IRKPOS(500),
  1 IRKINT,IRKCAL(500),INISHL
  COMMON/STATES/NCFG,NOCCSH(30),NOCORB(5,30),NELCSH(5,30),
  1 JIQFRD(9,3,30),MAXORB,NJCOMP(21),LJCOMP(21),IAJCOMP(21)
  DATA CONV/0.25E 00/

```

C

```

1 FORMAT(12I5)
4 FORMAT(/6H THE ,A4,102H ORBITAL HAS INSUFFICIENT BASIS FUNCTIONS

```

```

170 SATISFY THE ORTHONORMALITY CONDITIONS DURING OPTIMIZATION)
6  FORMAT(1H1////50X,19H-----/50X,19HINITIAL HAMILTONIA
    1N/50X,19H-----//)
15  FORMAT(///42H FOR THE MINIMIZATION ROUTINE - MODDAP ---/10X,33H MI
    NIMIZATION PARAMETER - IZETA = ,I3/10X,36H THE MAXIMUM NUMBER OF IT
    ERATIONS IS,I5/10X,60H THE REQUIRED ACCURACY FOR THE VALUES OF THE
    3 COEFFICIENTS IS,F14.7/10X,57H THE REQUIRED ACCURACY FOR THE VALUE
    4S OF THE EXPONENTS IS,F14.7/10X,43H THE TOLERANCE ON THE FUNCTION
    5 VARIATION IS,F14.7/10X,43H THE SMALL INCREMENT FOR GRAD - DELTA
    6 IS,F14.7/10X,51H THE ESTIMATED IMPROVEMENT IN THE FUNCTION VALUE
    7 IS,F14.7)
16  FORMAT(/6H AFTER,I5,23H  FUNCTION VALUES, F =,F15.8/30H THE OPTIM
    1UM VARIABLES FOR THE,A4,16H  ORBITAL ARE -/12F10.5)
17  FORMAT(5F14.7)
18  FORMAT(/4H THE,I4,2X,59H ORBITALS TO BE OPTIMIZED ARE NUMBERED IN
    1THE ABOVE LIST AS/30X,15I5)
19  FORMAT(////)
40  FORMAT(1H1////50X,20H-----/50X,20HTHE RADIAL FUNCTI
    1ONS/50X,20HOPTIMIZED PARAMETERS/50X,20H-----//)
49  FORMAT(///50H THE VARIABLE NCOEFF IS TOO SMALL - FAIL IN AOPTIM)
51  FORMAT(1H1////48X,23H-----/50X,20HTHE RADIAL FUN
    1CTIONS/48X,23HINTERMEDIATE PARAMETERS/48X,23H-----
    2--//)
55  FORMAT(10X,85H MINIMIZATION PARAMETER AFTER COEFFICIENTS OF ORBITA
    1LS HAVE BEEN OPTIMIZED - IZETAP =,I3)
57  FORMAT(10X,51H DIFFERENT MINIMIZATION PARAMETERS FOR EACH ORBITAL.
    15X,10I5)
58  FORMAT(10X,15H FOR ORBITAL  ,A4,25HTHE VARYING EXPONENTS ARE,5Y,1
    12I5)
69  FORMAT(///41H FOR THE MINIMIZATION ROUTINE - VA04A ---/10X,33H MIN
    1MIZATION PARAMETER - IZETA =,I3/10X,36H THE MAXIMUM NUMBER OF IT
    2RATIONS IS,I5/10X,60H THE REQUIRED ACCURACY FOR THE VALUES OF THE
    3COEFFICIENTS IS,F14.7/10X,57H THE REQUIRED ACCURACY FOR THE VALUES
    4 OF THE EXPONENTS IS,F14.7/10X,43H THE TOLERANCE ON THE FUNCTION V
    5 VARIATION IS,F14.7/10X,29H THE STEP LENGTH PARAMETER IS,F14.7)
75  FORMAT(1H1////10X,48H PARAMETER ALLOWING THE USE OF MODDAP - IDAVID
    1 =,I2/10X,47H PARAMETER ALLOWING THE USE OF VA04A - IVA04A =,I2)
67  FORMAT(4H THE,A4,25H ORBITAL WAS INVOLVED IN,I3,14H FK INTEGRALS,
    1,I3,14H GK INTEGRALS,,I3,17H RK INTEGRALS AND,I3,23H ONE-ELECTRON
    2INTEGRALS/19H AT THE NEXT STAGE,,I4,21H SLATER INTEGRALS AND,I3,52
    3H ONE-ELECTRON INTEGRALS WILL NEED TO BE RECALCULATED)

```

C

C --- OPTIMIZATION OF RADIAL FUNCTIONS. DEFINE NECESSARY PARAMETERS

C

```

71  READ(IREAD,1) NOPT,(JCOMP(I),I=1,NOPT)
    WRITE(IWRITE,18) NOPT,(JCOMP(I),I=1,NOPT)
    DO 62 I=1,NOPT
    LTZEVY(I)=0
62  CONTINUE
    READ(IREAD,1) IDAVID,IVA04A
    WRITE(IWRITE,75) IDAVID,IVA04A
    IF(IDAVID.EQ.0) GO TO 67
    READ(IREAD,1) IZETA,MAXIT1
    READ(IREAD,17) ECOMM1,ECOMM2,FTOLER,FACTOR,DIFF
    WRITE(IWRITE,15) IZETA,MAXIT1,ECOMM1,ECOMM2,FTOLER,FACTOR,DIFF

```



```

67 IF(IVA04A.EQ.0) GO TO 68
   READ(IREAD,1) IZETA,MAXIT2
   READ(IREAD,17) ECOMM1,ECOMM2,FTOLER,ESCALE
   WRITE(IWRITE,69) IZETA,MAXIT2,ECOMM1,ECOMM2,FTOLER,ESCALE
68 IZETAP=0
   IF(IZETA.LT.8) JZETA=IZETA
   IF(IZETA.NE.9) GO TO 54
   READ(IREAD,1) IZETAP
   WRITE(IWRITE,55) IZETAP
54 IF(IZETA.NE.8.AND.IZETAP.NE.8) GO TO 56
   READ(IREAD,1) (IZEOPT(I),I=1,NOPT)
   WRITE(IWRITE,57) (IZEOPT(I),I=1,NOPT)
56 IF(IZETA.EQ.3.OR.IZETA.EQ.7.OR.IZETAP.EQ.3.OR.IZETAP.EQ.7)GO TO 64
   GO TO 65
64 KTOT=0
   DO 66 I=1,NOPT
     LTZEVY(I)=KTOT
     J=JCOMP(I)
     M1=NLIMIT*LJCOMP(J)+NJCOMP(J)
     READ(IREAD,1) K,(NVSTO(J1),J1=1,K)
     DO 63 J1=1,K
       NOVSTO(J1+KTOT)=NVSTO(J1)
63 CONTINUE
     J2=KTOT+1
     J3=KTOT+K
     WRITE(IWRITE,58) IAJCMP(J),(NOVSTO(J1),J1=J2,J3)
     NZEVY(M1)=K
     KTOT=KTOT+K
66 CONTINUE
C
65 ISEC=0
   WRITE(IWRITE,19)
C
C NO CARD OUTPUT AT THIS STAGE
C
   IHOLEH=-1
   IHOLEU=-1
C
   NFVALS=0
   INISHL=1
   FKEEP=ZERO
   WRITE(IWRITE,6)
C
C --- LOOP OVER ALL ORBITALS TO BE OPTIMIZED
C
27 DO 23 IOPT=1,NOPT
   ISETUP=0
   LVYEXP=0
   IRKINT=0
   IILINT=0
   NH0VAR=0
   NFKVAR=0
   NGKVAR=0
   NRKVAR=0
   KTOT=LTZEVY(IOPT)

```

```

IF(IZETA.EQ.8) JZETA=IZEOPT(IOPT)
IF(IZETA.EQ.9) GO TO 60
GO TO 59
60 JZETA=4
   ISEC=1
C
C   CHECK ON THE SUFFICIENCY OF THE BASIS FUNCTIONS
C
59 J=JCOMP(IOPT)
   NJVARY=NJCOMP(J)
   LJVARY=LJCOMP(J)
   M1=NLIMIT*LJVARY+NJVARY
   NUPPER=MAXNEX(LJVARY+1)
   M2=NCO(M1)
   M4=NUPPER-LJVARY
   M6=NCOEFF*(M1-1)
   IF(M2.GE.M4) GO TO 44
   M3=M2+1
C
C   IF IZETA=1, THE BASIS FUNCTIONS MAY EASILY BE EXTENDED
C   IF NECESSARY
C
IF(IZETA.NE.1) GO TO 45
ZESTO=ZE(M6+M2)
IR=IRAD(M6+M2)
DO 46 K=M3,M4
ZE(M6+K)=ZESTO
IR=IR+1
IRAD(M6+K)=IR
45 CONTINUE
GO TO 47
C
C   HALT IF THE RADIAL FUNCTION HAS INSUFFICIENT BASIS FUNCTIONS
C
45 WRITE(IWRITE,4) IAJCMP(J)
   CALL EXIT
C
47 NCO(M1)=M4
44 M=NCO(M1)
   IF(M.LE.NCOEFF) GO TO 48
   WRITE(IWRITE,49)
   CALL EXIT
48 MP=M-M4+1
C
C --- DEFINE THE VARIABLES TO BE OPTIMIZED
C
   CALL SETVAR(M6,MP,M,M1)
C
C --- CALL THE OPTIMIZATION CODE(S)
C
IF(IDAVID.EQ.0) GO TO 76
MAXIT=MAXIT1
CALL MODD&V(F)
76 IF(IVA04A.EQ.0) GO TO 77
   IDAVE=IDAVID

```

```

    IDAVID=0
    MAXIT=MAXIT2
    CALL VA04A(F)
    IDAVID=IDAVE
C
  77 IBUG1=IBUG5
    IBUG4=IBUG6
    WRITE(IWRITE,16) NFVALS,F,IAJCMP(J),(X(I),I=1,NPARAM)
    WRITE(IWRITE,87) IAJCMP(J),NFKVAR,NGKVAR,NRKVAR,NH0VAR,IRINT,
  1    ILLINT
C
C --- RESET THE RADIAL ORBITAL DATA FROM OPTIMIZED VARIABLES
C
    CALL VARSET(M6,MP,M,M1,X)
    CALL EXORB(NJVARY,LJVARY+1)
C
    IF(ISEC.EQ.0) GO TO 26
    IF(IBUG9.EQ.0) GO TO 21
    WRITE(IWRITE,51)
    CALL PNTORB
  21 ISEC=0
    IF(IZETAP.LT.8) JZETA=IZETAP
    IF(IZETAP.EQ.8) JZETA=IZEOPT(IOPT)
    GO TO 44
  26 IF(IOPT.EQ.1.AND.ABS(FKEEP-F).LT.FTOLER) GO TO 34
C
C --- DEFINE WHICH RADIAL INTEGRALS WILL NEED TO BE RECALCULATED AT THE
C NEXT STAGE
C
    DO 22 I=1,IRKINT
      I1=IRKCAL(I)
      NRKCAL(I1)=1
  22 CONTINUE
    DO 25 I=1,ILLINT
      I1=ILLCAL(I)
      NILCAL(I1)=1
  25 CONTINUE
    IRKINT=0
    ILLINT=0
    IF(IOPT.GT.1) GO TO 23
    FKEEP=F
    IF(IBUG9.EQ.0) GO TO 23
    WRITE(IWRITE,51)
    CALL PNTORB
  23 CONTINUE
C
    IF(IVA04A.NE.0) IDAVID=0
    IF(IDAVID.NE.0) DIFF=DIFF*CONV
    IF(IZETA.EQ.9) IZETA=IZETAP
    GO TO 27
C
  34 WRITE(IWRITE,40)
    CALL PNTORB
    RETURN
    END

```

```

SUBROUTINE ARADFN
COMMON/INFORM/ IREAD,IWRITE,IPUNCH
COMMON/RADIAL/C(240),ZE(240),IRAD(240),NCO(30),LRANG1,LRANG2,
1  MAXNHF(9),MAXNEX(9),NCOEFF,NLIMIT,NZ
1  FORMAT(12I5)
9  FORMAT(1H1////50X,20H-----/50X,20HTHE RADIAL FUNCTI
10NS/51X,18HINITIAL PARAMETERS/50X,20H-----//)
13  FORMAT(////16H HIGHEST L-VALUE =,I2,4X,57H GREATEST NUMBER OF COEF
14FICIENTS IN AN ORBITAL FUNCTION =,I2,5X,3HZ =,I3)
14  FORMAT(49H N-VALUES UP TO WHICH ORBITALS MUST BE CALCULATED,5I5)

C
C  THIS SUBROUTINE SETS THE RADIAL FUNCTION PARAMETERS
C
  READ(IREAD,1) LRANG2,NCOEFF,NZ
  WRITE(IWRITE,13) LRANG2,NCOEFF,NZ
31  READ(IREAD,1) (MAXNEX(I),I=1,LRANG2)
  WRITE(IWRITE,14) (MAXNEX(I),I=1,LRANG2)
  NLIMIT=0
  DO 32 L=1,LRANG2
  MAXN=MAXNEX(L)
  IF(NLIMIT.GE.MAXN) GO TO 32
  NLIMIT=MAXN
32  CONTINUE

C
C --- READ IN RADIAL FUNCTIONS
C
  WRITE(IWRITE,9)
  CALL CALORB

C
  RETURN
  END

```

ÖZGEÇMİŞ

5.11.1966 tarihinde Trabzon'da doğdu. İlk ve orta öğrenimini Trabzon'da sırasıyla Boztepe İlkokulu ve Atatürk Ortaokulu'nda tamamladıktan sonra; Trabzon Ticaret Lisesinden 1982-83 döneminde mezun oldu. Aynı yıl Karadeniz Teknik Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nü kazandı. Lisans öğrenimini 1988-89 döneminde tamamladı. Aynı yıl yüksek lisans sınavını kazanarak bu programda öğrenim görmeye başladı. Bu arada öğretmenlik sınavını kazanarak Amasya'da 2 yıl süreyle öğretmenlik yaptı. 26 Ağustos 1990'da Karadeniz Teknik Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Bölümü'ne Araştırma Görevlisi olarak atandı. Halen bu görevini sürdürmektedir.