S.Ü. Fen-Edebiyat Fakültesi Fen Dergisi Sayı 18 (2001) 7-10, KONYA

Dönme Katsayılarının Hesabında Kesme ve Yuvarlama Hatalarının Rolü

H. Şevki DARENDELİOĞLU[1]

Özet: *Bu çalışmada 15 basamak uzunluğunda rakamlar kullanılarak Dönme katsayıları hesaplanmıştır. Sonuçlar 33 basamak kullanılarak elde edilenlerle karşılaştırılarak kesme ve yuvarlama hatalarının sonucu nasıl etkiliyebileceği ortaya konulmuştur.*

Anahtar Kelimeler: **Dönme Katsayısı, Kesme hatası, yuvarlama hatası, Clebsch-Gordan Katsayıları**

The Role of the Truncation and Rounding-off Errors in the Calculation of Rotation Coefficients

Abstract: *Rotation coefficients have been calculated by using 15-digit numbers and compared with those obtained by using 33-digit numbers.The importance of truncation and rounding-off errors on the result has been emphasized*

Key Words: **Rotation Coefficient, Truncation Error, Rounding-off Error, Clebsch-Gordan Coefficients**

Giriş

Günümüzde bilgisayarlar yardımıyla sayısal hesaplamalar yapmak bütün bilim dallarında ve mühendislik dallarında gerekli olmaktadır. Özellikle teorik kimyanın hesaplamalarında bu gereklilik kendisini had safhada hissettirmektedir. Bugün itibarıyla teorik kimyanın bir çok hesabı güçlü ve hızlı bilgisayarlar kullanılmasına rağmen hala yapılamamaktadır. Bunun nedeni teorideki herhangi bir yetersizlik veya güçlük değildir. Sadece çok miktarda işlem yapıldığından ve bilgisayarlarda kullanılan rakam sayısının sonlu oluşundan kaynaklanan hata birikimleridir. Bu çalışmada kullanılan basamak sayısının sonuçları nasıl etkileyebileceğini, dönme katsayılarının hesabı üzerinde gösterilmeye çalışılacaktır.

Bu katsayılar atom, molekül ve katıların fiziksel ve kimyasal özelliklerinin incelenmesinde son derece önemlidir. Genelde bu katsayılar küçük parametre değerlerinde hesaplarken herhangi bir güçlükle karşılaşılmamasına karşın büyük parametre değerlerinde bir çok güçlükle karşılaşılır.Maalesef bu büyük parametre değerli katsayılara da Slater-Tipi Orbitaller (STO) üzerinden çok merkezli integrallerin seriye açılımında muhakkak ihtiyaç duyulur [1].

1 Selçuk University, Faculty of Sciences and Arts, Physics Dept.(42031) Konya-Turkey

Materyel ve Metod

Literatürde dönme katsayıları ve bu katsayıların hesabı içerisinde yer alan Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayıları çok geniş bir biçimde incelenmiştir [2- 6]. Ancak bu katsayıların fazlarının tanımının belirsizliği yüzünden çok farklı tanımlar ve notasyonlar kullanılmaktadır. Bu çalışmada I.I. Guseinov'un tanımı kullanılmıştır [7-8]. Guseinov bu katsayılar için bilgisayar hesabı amacına yönelik bir çok analitik ifadeler elde etmiştir. Dönme, Clebsch-Gordan ve diğer katsayıların tanımları [3-4] kaynaklarında verilmektedir. Daha fazla bilgi bu kaynaklardan elde edilebilir.

Dönme katsayıları aşağıdaki formülde görüldüğü gibi örtme integrallerinin koordinat dönüşümlerinde ortaya çıkarlar

$$S_{n\ell m,n'\ell' m'}(\zeta,\zeta';\vec{R}_{ab})=\sum_{\lambda=0}^{\min(\ell,\ell')} T^{\lambda}_{\ell m,\ell' m'}(\Theta,\Phi)S_{n\ell\lambda,n'\ell'\lambda}(\zeta,\zeta';R_{ab})$$

Burada $T^{\lambda}_{\ell m,\ell' m'}(\Theta,\Phi)$ dönme katsayıları olarak adlandırılır ve $\gamma=|m|$, $\gamma'=|m'|$ olmak üzere

$$T^{\lambda}_{\ell m,\ell' m'}(\Theta,\Phi)=(-1)^{\gamma+\gamma'}\frac{2}{(1+\delta_{\lambda 0})[(1+\delta_{m0})(1+\delta_{m'0})]^{1/2}}$$

$$\times\sum_{i=\pm 1}\sum_{L=|\ell-\ell'|}^{\ell+\ell'\ (2)}(\varepsilon_{mm'})^{\delta_{i,\varepsilon_{mm'}}}C^{\ell\ell' L}_{i\gamma,\gamma',i\gamma+\gamma'}C^{\ell\ell' L}_{\lambda,-\lambda,0}$$

$$\times\left[\frac{2}{2L+1}\right]^{1/2}\mathrm{P}_{L|i\gamma+\gamma'|}(\cos\theta)\begin{cases}\cos(|i\gamma+\gamma'|)\Phi & \varepsilon_{mm'}=1\\ \sin(|i\gamma+\gamma'|)\Phi & \varepsilon_{mm'}=-1\end{cases}$$

şeklinde tanımlanır. Burada $\varepsilon_{mm'}$, m ile m' nün işaretlerinin çarpımı; $P_L(\cos\theta)$, normalize Legendre polinomu ve $C^{\ell\ell' L}_{mm'M}$ ler Clebsch-Gordan katsayılarıdır. Bu katsayılar, binom katsayıları, $F_m(n)=n!/m!(n-m)!$, kullanılarak

$$C^{\ell_1\ell_2 L}_{m_1 m_2 M}=(-1)^{\frac{1}{2}(m_1+|m_1|+m_2+|m_2|+M+|M|)}\frac{2L+1}{\sqrt{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}}$$

$$\times\left[\frac{F_{\ell_1+\ell_2-L}(\ell_1+\ell_2+L+1)F_{L+M}(2L)}{F_{\ell_1-\ell_2+L}(\ell_1+\ell_2+L+1)F_{\ell_1+m_1}(2\ell_1)F_{\ell_2+m_2}(2\ell_2)}\right]^{1/2}$$

$$\times\sum_t(-1)^t F_t(\ell_1+\ell_2-L)F_{\ell_2+m_2-t}(L+M)F_{\ell_1-m_1-t}(L-M)$$

ifadesi ile hesaplanabilir

Burada $|\ell_1 - \ell_2| \le L \le \ell_1 + \ell_2$, $|M| \le L$ ve

$$\max\left[0, \ell_2 + m_2 - (L+M), \ell_1 - m_1 - (L-M)\right] \le t \le \min\left[0, \ell_1 + \ell_2 - L, \ell_2 + m_2, \ell_1 - m_1\right]$$

Tablo 1. Dönme Katsayıları (reel *8 ve *16 aritmetik kullanılarak elde edilmiştir. $\phi = 45°$)

λ	ℓ	m_1	ℓ_2	m_2	θ	$T(\lambda, \ell_1, m_1, \ell_2, m_2, \theta, \phi)$	λ	ℓ	m_1	ℓ_2	m_2	θ	$T(\lambda, \ell_1, m_1, \ell_2, m_2, \theta, \phi)$
0	1	0	0	0	30	**0.047329386745757**	18	53	-43	21	13	90	**taşma**
						0,86602540378443							-0,5924800323723293E-03
0	4	-3	3	-2	30	**-0.6712757365657E-01**	11	56	15	33	-32	30	taşma
						-0.6712757365659E-01							-0.41743818014268481E-05
3	7	-1	4	1	30	**-0.1212642746064798**	31	58	-29	54	-40	60	taşma
						-0.121264274606479							0.16444090735845037E-02
3	11	8	6	0	30	**-0.1498356511757175**	9	62	14	18	13	30	**-6.845501272160768E05**
						-0.1498356511757175							-0.94247202858867 3495E-03
5	14	-1	11	-10	60	**0.20966342956374E-01**	0	67	36	31	12	60	taşma
						0.20966342956374E-01							-0.17736968407819110E-01
18	20	-5	19	-14	60	**-0.51915840408717E-01**	11	70	35	38	-15	60	taşma
						-0.51915840408717E-01							0.825363473905250E-02
2	21	-18	11	3	60	**-0.1071127283633454**	18	71	64	23	-19	60	taşma
						-0.10711272836345							0.14281262947185162 8E-01
0	24	-2	17	-1	60	**-0.47329386943999E-01**	1	75	-42	24	1	90	taşma
						-0.473293869439992E-01							0.38163061847322476 8E-01
21	28	-2	24	12	30	**-0.7132694386526952E-04**	21	79	-1	25	-22	60	taşma
						-0.7132694492548709E-04							0.28279807752154962 1E-01
9	30	-14	11	-7	60	**0.005533225218654**	23	80	16	25	20	60	taşma
						0.5533225221609922E-02							-0.35681274179340280 4E-01
2	34	31	11	-1	60	**0.045907674871881**	16	84	7	26	-17	60	taşma
						0.4590767487188097E-01							0.12423075690361994 8
0	37	-3	1	0	60	**0.5283425134779155 0E-01**	32	86	-2	71	-63	60	taşma
						0.5283425134779155 0E-01							-0.216900636995102E-02
18	41	38	30	-25	60	**-0.013096487569493**	1	88	66	2	1	60	taşma
						-0.1309648756944543 80E-01							-0.690384517036796E-01
23	49	24	28	21	90	**-0.007646948010501**	20	90	14	25	-9	60	taşma
						-0.76469480105007234 2E-02							0.12246988727736562E-01
17	52	-7	26	25	30	**-0.031846594939779**	15	98	-38	30	-6	60	taşma
						-0.31827599708286E-01							-0.18049[illegible]065981678E-01

Sonuç ve Tartışma

Bu çalışmada reel*8 aritmetik(15 basamak) kullanılarak elde edilen dönme katsayıları kaynak [3] de reel*16 aritmetik(33 basamak) kullanılarak elde edilenlerle birlikte Tablo 1' de verilmiştir. Ancak tabloda fazla yer tutmaması için 33 basamağın hepsi alınmamış sadece 15 basamak civarında rakam alınmıştır. Her gruptaki ilk satır reel*8 aritmetik ile elde edilen sonucu ikinci satır ise reel*16 aritmetik ile elde edilen sonucu göstermektedir. Dönme katsayıları λ, ℓ_1, m_1 ℓ_2, m_2, θ ve ϕ şeklinde yedi parametreye bağlı bir büyüklüktür.Hesaplamalar yapılırken ϕ değeri 45 derece olarak sabit tutulmuştur.(Kaynak[6] de yazarlar Tablo 1 de ϕ açısını her ne kadar 60 derece olarak belirtmekteselerde hesaplamalarında bu açı için 45 derece değerini kullanmışlardır. Bu nedenle bu çalışmada da aynı değer kullanılmıştır.) θ değeri ise 30, 60 ve 90 derece değerlerini almaktadır. Geri kalan parametreler ise muhtelif değerler almaktadır. Tablo 1 den açıkca görüldüğü gibi bu parametrelerin küçük değerlerinde farklı uzunlukta sayılar kullanılarak yapılan hesaplar tamamen uyuşmaktadır. Ancak bu parametrelerin büyük değerleri söz konusu olduğunda 15 basamak sayısı kullanılarak yapılan hesaplar ya yanlış sonuçlar vermekte ya da taşma hatalarına sebeb olmaktadır. Taşma hatası bilgisayarda hesaplanan sayının bilgisayarda temsil edilebilecek en büyük sayıdan daha büyük olmasından kaynaklanmaktadır. Neticede katsayılar hesaplanamamaktadır. Bu durum tamamen kesme ve yuvarlama hatalarından kaynaklanmaktadır. Zira her iki hesapda da formüllerin ifadesi ve hesap yöntemi hemen hemen aynıdır.Yukarıda belirtildiği gibi Guseinov' un binom katsayıları aracılığıyla ifade edilmiş formülleri kullanılmıştır.

Sonuçta dönme katsayılarının hesabında kesme ve yuvarlama hatalarının ne kadar önemli ve ciddiye alınması gerektiği görülmüştür.

Kaynaklar

1-Harris F.E., Michels H. H., **The Evaluation of Molecular Integrals for Slater Type Orbitals,** Advan. Chem. Phys. 13, 205-266 (1997).

2- Guseinov I. I., Atav Ü., Özmen A., Yüksel H., Aliyeva T.H., **Computation of Clebsch-Gordan and Gaunt Coefficients Using Binomial Coefficients,** J. of Compt. Physics 122 343-347 (1995).

3- Weniger E.J., Steinborn E.O., **Programs for the Coupling of Spherical Harmonics** Computer Physics Communictions 25, 149-157 (1982).

4- Edmons A.R., **Angular Momentum in Quantum Mechanics,** Princeton Univ. Press, Princeton N.J. 1957)

5- Rotenberg R., Bivins R., Metropolis M, Wooten J.K., **The 3-j and 6-j Symbols,** The Technology Press MIT, Cambridge, MA,1957)

6- Guseinov I. I., Atav Ü., Özmen A., Yüksel H., Aliyeva T.H., **Calculation of Rotation Coefficients for Overlap Integrals over Arbitrary Atomic Orbitals,** Tr.J. of Physics 21 1087-1092 (1997).

7- Guseinov I. I., **On the Evaluation of Multielectron Molecular Integrals over Slater-Type Orbitals Using Binomial Coefficients,** Journal of Molecular Structure(Theochem) 335 17-20 (1995).

8- Guseinov I. I., **Spherically Symmetrical Properties of two-center Overlap Integrals over Arbitrary Atomic Orbitals and Translation Coefficients for Slater-Type Orbitals,** Journal of Molecular Structure(Theochem) 343 173-176 (1995).