

**T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TİTREŞİMSSEL OLARAK UYARILMIŞ BİR MOLEKÜL İLE ATOMUN
ETKİLEŞMESİNİN CORIOLİS BAĞLAŞIM (CORIOLİS COUPLİNG-CC)
METODUYLA ARAŞTIRILMASI: ND+H REAKSİYONU**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

İsmail ERİNCİ

(121114105)

Anabilim Dalı: Fizik

Programı: Atom ve Molekül Fiziği

Danışman: Prof. Dr. Sinan AKPINAR

AĞUSTOS-2018

**T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TİTREŞİMSSEL OLARAK UYARILMIŞ BİR MOLEKÜL İLE ATOMUN
ETKİLEŞMESİNİN CORİOLİS BAĞLAŞIM (CORİOLİS COUPLİNG-CC)
METODUYLA ARAŞTIRILMASI: ND+H REAKSİYONU**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**İsmail ERİNCİ
(121114105)**

**Tezin Enstitüye Verildiği Tarih: 09/08/2018
Tezin Savunulduğu Tarih: 07/09/2018**

**Tez Danışmanı: Prof. Dr. Sinan AKPINAR
Diğer Jüri Üyeleri: Prof. Dr. Niyazi BULUT
Dr. Öğ. Üy. Bilgin ZENGİN**

AĞUSTOS-2018

ÖNSÖZ

Bu seminer çalışmasının hazırlanması sırasında, sağladığı rahat çalışma ortamı ile birlikte elinden gelen hiçbir yardımı esirgemeyen, danışmanım Sayın Prof. Dr. Sinan AKPINAR hocama ve Arş. Gör. Seda SÜRÜCÜ hocama ve değerli arkadaşım Hanifi KEBİROĞLU'na teşekkürü bir borç bilirim. Ayrıca çalışmalarım sırasında bana göstermiş olduğu sabırdan dolayı Sevgili eşime çok teşekkür ediyorum.

İsmail ERİNCİ
ELAZIĞ – 2018

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
ÖNSÖZ	II
İÇİNDEKİLER.....	III
ÖZET	IV
SUMMARY	V
ŞEKİLLER LİSTESİ	VI
SEMBOLLER LİSTESİ	VII
1.GİRİŞ.....	1
2. TEORİK YÖNTEM	4
2.1.1. Coriolis Coupling (CC) Metodu.....	7
2.1.2. Centrifugal Sudden (CS) Yaklaşımı.....	8
2.2. Zamana Bağlı Schrödinger Denkleminin Çözüm Metotları	9
2.2.1. Chebychev Polinomları Açılımı Metodu	9
2.2.2. Reel Dalga Paketi Metodu.....	13
2.3. Dalga Paketinin Analiz Edilmesi	14
2.3.1. Reaksiyon İhtimaliyetleri	15
2.3.2. Reaksiyonun İntegral Tesir Kesiti.....	15
2.3.3. Reaksiyon hız sabiti	16
3. SONUÇ ve TARTIŞMA.....	17
4. KAYNAKLAR.....	22
ÖZGEÇMİŞ	24

ÖZET

TİTREŞİMSEL OLARAK UYARLANMIŞ BİR MOLEKÜL İLE ATOMUN ETKİLEŞMESİNİN CORIOLİS BAĞLAŞIM (CORIOLİS COUPLİNG-CC) METODUYLA ARAŞTIRILMASI: ND+H REAKSİYONU

Coriolis coupling (CC) hesaplamaları dikkate alan Zamana bağlı dalga paketi kuantum metodu doğru bir potansiyel enerji yüzeyine dayanan ND+H ($v_0=1$ ve $j_0=2,3$) reaksiyonun dinamiklerini araştırmak için kullanılmıştır. Coriolis Coupling (CC) ve Centrifugal Sudden (CS) sonuçlarının Reaksiyon tesir kesitleri ve Hız sabitleri karşılaştırıldığında, belirgin CC etkileri, başlık reaksiyonlarının hem değişim hem de depletion kanalları için belirgindir. Hesaplamalar, CC etkilerinin ND+H ($v_0=1$ ve $j_0=2,3$) reaksiyonunda önemli bir rol oynadığını göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: Coriolis coupling etkileşmesi, Zamana bağlı kuantum dalga paketi metodu, Reaksiyon ihtimaliyetleri, Reaksiyon hız sabitleri, Reaksiyon tesir kesitleri.

SUMMARY

THE INVESTIGATION WITH CORIOLIS COUPLING METHOD OF INTERACTION OF ATOM WITH VIBRATIONALLY A EXCITED MOLECULE: ND+H REACTION

The time-dependent wave packet quantum method taking into account the Coriolis coupling (CC) has been employed to investigate the dynamics of ND+H ($v_0=1$ and $j_0=2,3$) reactions based on an accurate potential energy surface. When the Reaction Cross sections and Rate constants of Coriolis Coupling (CC) and Centrifugal Sudden (CS) results was compared, the pronounced CC effects have been revealed for both exchange and depletion channels of the title reactions. The calculations demonstrate that CC effects play an important role in the ND+H ($v_0=1$ and $j_0=2,3$) reaction

Keywords: Coriolis coupling interaction, Time dependent quantum wave packet method, Reaction possibilities, Reaction rate constants, Reaction influence sections.

ŞEKİLLER LİSTESİ

Sayfa No

- Şekil 3.1.** Dalga fonksiyonunun bir potansiyel enerji yüzeyi üzerindeki yayılımı. 17
- Şekil 3.2.** $H + ND(a^1D) \rightarrow NH(a^1D) + D$ değişim (Exchange) reaksiyonu için titreşimsel olarak uyarılmış ND molekülünün $v_0 = 1$, $j_0 = 2,3$ titreşim ve dönme kuantum durumlarındaki toplam reaksiyon ihtimaliyetleri.. 18
- Şekil 3.3.** $H + ND(a^1D) \rightarrow NH(a^1D) + D$ depletion reaksiyonu için titreşimsel olarak uyarılmış ND molekülünün $v_0 = 1$, $j_0 = 2,3$ titreşim ve dönme kuantum durumlarındaki toplam reaksiyon ihtimaliyetleri 18
- Şekil 3.4.** $v_0=1, j_0=2$ kuantum sayıları için CC ve CS metotlarındaki değişim (Exchange) ve Depletion reaksiyonlarının tesir kesitleri ve hız sabitleri. 20
- Şekil 3.5.** $v_0=1, j_0=3$ kuantum sayıları için CC ve CS metotlarındaki değişim (Exchange) ve Depletion reaksiyonlarının tesir kesitleri ve hız sabitleri.. 20

SEMBOLLER LİSTESİ

$\tilde{X}^2B_1$	: Taban elektronik durum
A^2A_1	: Birinci uyarılmış elektronik durum
$\hat{\nabla}$	: Laplace operatörü
ψ	: Dalga fonksiyonu
v	: Titreşim kuantum sayısı
$g(R)$	: Gelen atomun öteleme hareketini temsil eden dalga fonksiyonu
$\hat{H}$	: Hamiltonyen operatörü
h	: Planck sabiti
J	: Toplam açısal momentum kuantum sayısı
j	: Dönme kuantum sayısı
$\hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{j}_+, \hat{j}_-$	: Alçaltma ve yükseltme operatörleri
K	: Toplam açısal momentumun z-eksenindeki izdüşümü
k_{vj}	: Reaksiyon hız sabiti
$\hat{l}$	: Yörünge açısal momentum operatörü
μ_R, μ_r	: İndirgenmiş kütleler
$P_j(\gamma)$	: İki atomlu molekülün dönme hareketini temsil eden dalga fonksiyonu
$P^J(E)$	: Reaksiyon ihtimaliyetleri
$\hat{T}$	: Kinetik enerji operatörü
$\hat{V}$	: Potansiyel enerji operatörü
E_{col}	: Çarpışma enerjisi

1. GİRİŞ

Kuantum mekaniği, fizik ve kimyanın temel dallarından olup mikroskobik yapıda bulunan moleküllerin, atomların ve bunları meydana getiren elektron, proton, nötron, kuark, gluon gibi parçacıkların özelliklerini ve bunların arasında olan etkileşimleri inceler. Klasik fizik, (Newton mekaniğinde) makroskobik yapıdaki parçacıkların dinamiği hakkında gözlem yapmak ve sonuçlara ulaşmak için deneysel yöntemler kullanır (Bransden ve Joachain, 1999). Mikroskobik yapıdaki etkileşimler femtosaniye gibi bir zaman diliminde gerçekleştiği için mikroskobik parçacıkların dinamiksel değişkenlerinin Newton mekaniği ile deneysel ve teorik olarak incelenmesi oldukça zordur. Bunun yanında parçacıkların fiziksel ve kimyasal davranışlarını inceleyen kuantum mekaniksel yöntemlere dayalı deneysel yöntemler olsa da, bu yöntemlerin maliyeti fazla olması ve kimyasal reaksiyonların birçoğunun çok kısa sürede gerçekleşiyor olması nedeniyle atom-atom, atom-molekül etkileşmelerinde istenilen fiziksel durumların gözlenebilmesi için kuantum mekaniğinin kullanıldığı teorik yöntemlere gereksinim duyulmaktadır (Padmanaban ve Mahapatra, 2006).

Kimyasal reaksiyon dinamiğinde atom ve moleküller arasında gerçekleşen fiziksel olayların incelenmesinde teorik çözümler için atom ve moleküller arasındaki fiziksel ve kimyasal etkileşimler sonucu oluşan ürünlerin durumları, kuantum mekaniksel hareket denklemleri çözülerek belirlenebilmektedir. Bu çözümler sonucunda parçacıkların saçılma durumlarına bağlı reaksiyon tesir kesiti gibi fiziksel büyüklükler ile beraber tesir kesitine bağlı olarak reaksiyon kinetiğinde kullanılan hız sabiti gibi büyüklükler dalga paketi metodu kullanılarak elde edilir. Bu fiziksel büyüklüklerin hesaplanabilmesi için reaksiyon ihtimaliyetlerinin elde edilmesi gerekir (Gray ve Balint-Kurti, 1998). Tüm bu hesaplamalar için zamana bağlı dalga fonksiyonunun Schrödinger denklemine uygulanarak çözümünün yapılması ve reaksiyona girecek olan molekülün sahip olduğu potansiyel enerji yüzeyinin iyi belirlenmesi gerekmektedir. Potansiyel enerji yüzeyi bir reaksiyonun topografyası (bir arazi yüzeyinin tabii veya suni ayrıntılarının meydana getirdiği şekil) gibidir (Balakrishnan, vd.,1997). Son zamanlarda, reaksiyon dinamiğinde Coriolis Coupling (CC) kullanılarak gerçek sonuçlara daha yakın değerler elde edilmektedir.

Coriolis Coupling etkisi (CC) Jeofizikte, Astrofizikte, çok atomlu sistemlerde ve akışkanların dinamiğinde, uzun menzilli silahlarla yapılan atışlarda önemli rol oynamaktadır (Hongsheng, vd.,2014).

Kuantum mekaniği kullanılarak çözülmeye çalışılan reaksiyonlarda Coriolis Coupling (CC) etkisi ile beraber Hamiltonyen denklemindeki birçok terim günümüze kadar ihmal edilerek çalışılmaktaydı (Neuhauser vd., 1990; Bulut vd., 1999; Gamallo vd.,2003; Sürücü, 2011). Genelde $J=0$ toplam açısal momentum kuantum durumu için hesaplamalar yapılarak reaksiyon ihtimaliyetleri elde edilirdi ve bu ihtimaliyetler kullanılarak, $J>0$ durumları için bariyerli ve bariyersiz reaksiyonlarda çeşitli formülasyonlar kullanılarak sonuçlar elde edilmekteydi. Bu durum düşük kuantum durumu ve düşük enerjili reaksiyonlar için avantaj sağlamaktadır. Ancak çarpışmaya dâhil olacak hedef molekül ve gelen atomun enerjisi ve kuantum durumlarının artması nedeniyle toplam açısal momentumunun tüm değerleri için reaksiyon ihtimaliyetlerinin hesaplanmasında Centrifugal Sudden (CS) ve Coriolis Coupling terimleri hesaplamalara dahil edilmiştir. (Meijer, vd.,1998; Padmanaban, vd., 2002; Poirier, 2005). CS metodu kullanılarak yapılan reaksiyon dinamiği hesaplamalarında Hamiltonyen denklemindeki farklı iz düşüm kuantum sayısı değerleri arasındaki etkileşimin ifade edildiği CC terimleri ihmal edilir (Şimşek, 2014). Şimşek çalışmasında hidrojen atomu ile (H) titreşimsel olarak uyarılmış ND ($\alpha^1\Delta$, $v=1,2$) molekülü arasında gerçekleşen reaktif saçılmayı incelerken CC terimlerini ihmal etmiştir. Düşük J değerleri ve düşük enerji aralıklarında CS ve CC yöntemleri ile elde edilen sonuçlar, arasındaki fark az olsa da artan J değerleri ile birlikte çarpışma enerjisinin artması ile CC yaklaşımı daha çok tercih edilmektedir. CC nin ihmal edildiği CS yaklaşımında hesaplamaların zorluğu ve hesaplama zamanı azalabilir. Ancak hesaplamalardaki kesinlik ve doğruluk CC terimlerinin ihmal edilmesi ile azalmaktadır. Bu nedenle CC etkisine kimyasal reaksiyon dinamiğindeki teoriksel araştırmalara gittikçe artan bir ilgi olmuştur (Padmanaban. Mahapatra, 2006; Defazio ve Petrongolo, 2007; Akpınar ve Sürücü, 2013).

Bariyersiz potansiyel enerji yüzeyine sahip olan $H + ND(a^1\Delta)$ reaksiyonunun $H + ND(a^1D) \rightarrow N(^2D) + HD$ depletion (ND– depletion), $H + ND(a^1D) \rightarrow NH(a^1D) + D$ (H- Exchange) değişim kanalları için titreşimsel olarak uyarılmış ND molekülünün $v_0 = 1$, $j_0 = 2, 3$ titreşim ve dönme kuantum durumlarında toplam reaksiyon ihtimaliyetleri, tesir kesitleri ve hız sabitleri CC metodu kullanılarak hesaplanmıştır.

2. TEORİK YÖNTEM

Üç atomlu A+BC reaksiyonunda reaktif saçılma problemi için çözülecek olan Schrödinger eşitliği

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \quad (2.1)$$

Şeklinde yazılır. Denklem (2.1) deki H Hamiltonyen ifadesi Jacobi koordinatlarına bağlı olarak üç atomlu bir sistem için, pertürbasyon terimlerini içerecek şekilde tekrar yazılırsa,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(R, r, \theta) \\ + \zeta(r) \vec{S} \cdot \vec{L} + a \vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i - \vec{\mu}_j \cdot \vec{B}_0 - \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_0 - \vec{D} \cdot \vec{\varepsilon}_0 + \dots \quad (2.2)$$

olur. Burada ilk iki terim kinetik enerji terimi, üçüncü terim potansiyel enerji terimi, dördüncü terim spin – yörünge etkileşme (ince yapı) terimi, beşinci terim çekirdek – elektrondipol – dipol etkileşme (aşırı ince yapı) terimi, altı ve yedinci terimler Zeeman terimleri olarak adlandırılır. Denk. (2.2) deki sekizinci terim ise Stark terimi olarak bilinir (Aygün ve Zengin, 1992). Bu denklem atom – molekül sistemi için birçok etkileşim terimini içermektedir. Kuantum mekaniksel çalışmalarda Schrödinger denkleminin çözümü için ilk iki terim dışındaki diğer terimler ihmal edilmektedir.

Reaksiyona giren üç atomlu A+BC sistemi için Hamiltonyen operatörünü Jacobi koordinatları cinsinden cisim merkezli koordinat sistemi çerçevesinde (2.2) denklemini yeniden

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(R, r, \theta) + \frac{\hat{l}^2}{2\mu_R R^2} + \frac{j^2}{2\mu_r r^2} \quad (2.3)$$

yazılabilir. Burada R , BC molekülünün kütle merkezine A atomunun uzaklığı, r ; BC atomları arasındaki mesafe (bağ uzunluğu), θ ; $\vec{R}$ ve $\vec{r}$ vektörleri arasındaki açıdır., $V(R, r)$; adyabatik potansiyel enerji yüzeyi, μ_R ; A atomu ile BC molekülünün kütle merkezinin indirgenmiş kütlesi, μ_r ; BC molekülünün kütle merkezinin indirgenmiş kütlesidir ve

$$\mu_r = \frac{m_B m_C}{m_B + m_C} \quad \mu_R = \frac{m_A (m_B + m_C)}{m_A + m_B + m_C} \quad (2.4)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (2.3) deki j^2 dönme açısal momentum operatörü ve $\hat{l}^2$ orbital açısal momentum operatörü olup

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta_R} \frac{\partial}{\partial \theta_R} \left(\sin \theta_R \frac{\partial}{\partial \theta_R} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta_R} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_R^2} \right\} \quad (2.5)$$

$$\hat{j}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta_r} \frac{\partial}{\partial \theta_r} \left(\sin \theta_r \frac{\partial}{\partial \theta_r} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta_r} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_r^2} \right\} \quad (2.6)$$

yazılır. J toplam açısal momentum operatörü olup dönme ve orbital açısal momentumu cinsinden

$$J = \hat{l} + j \quad (2.7)$$

yazılır. Buradan $\hat{l}$ yörünge açısal momentum operatörünü

$$l = J - j \quad (2.8)$$

$$\hat{l}^2 = (\hat{J} - \hat{j})^2 = J^2 + j^2 - 2\hat{J}_z\hat{j}_z - \hat{J}_+\hat{j}_- - \hat{J}_-\hat{j}_+ \quad (2.9)$$

elde edilir. Burada $\hat{J}_z$ ve $\hat{j}_z$ sırasıyla toplam açısal momentum ($\hat{J}$) ve dönme açısal momentum operatörünün ($\hat{j}$) cisim merkezli koordinat düzleminde z-ekseni üzerindeki izdüşümüdür. $\hat{J}_+$, $\hat{J}_-$ ve $\hat{j}_+$, $\hat{j}_-$ yükseltme ve alçaltma operatörleridir ve

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad (2.10)$$

$$j_{\pm} = j_x \pm j_y \quad (2.11)$$

olarak tanımlanır. Denklem (2.3) deki Hamiltonyen operatörünü yükseltme ve alçaltma operatörleri cinsinden yazıldığında

$$\begin{aligned} H = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{2I} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\hat{j}_z^2}{\sin \theta} \right] \\ & + \frac{1}{2\mu_R R^2} \left[J^2 - 2J_z j_z \right] + \frac{1}{2\mu_R R^2} \left[J_+ j_- + J_- j_+ \right] + V(R, r, \theta) \end{aligned} \quad (2.12)$$

denklemini elde edilir (Sürücü, 2011). Denklem (2.12) deki beşinci terim Coriolis Coupling terimleridir. Denklem (2.12) deki I üç atomlu sistemin eylemsizlik momentidir ve

$$I = \frac{\left(\mu_R \mu_r R^2 r^2 \right)}{\left(\mu_R R^2 + \mu_r r^2 \right)} \quad (2.13)$$

şeklinde yazılır.

2.1.1. Coriolis Coupling (CC) Metodu

Kuantum mekaniksel hesaplamalar cisim merkezli yüzeyde adyabatik potansiyel enerji yüzeyi üzerinde gerçekleştirildiğinde dalga fonksiyonu cisim merkezli yüzeyde yer değiştirme – titreşim –dönme hareketlerini kapsayan

$$|n\rangle |v\rangle |J\Omega j\Omega\rangle \quad (2.14)$$

baz fonksiyonu içerisinde yayılmaktadır. Sırasıyla $|n\rangle$ ve $|v\rangle$ öteleme ve titreşim temel fonksiyonları, $|J\Omega j\Omega\rangle$ ifadesi cisim merkezli yüzeyin temel dönme baz fonksiyonunu temsil eder. Ω Toplam açısal momentumu J ile dönme açısal momentumu j'nin cisim merkezli yüzeyde z eksenini üzerindeki izdüşümü olmakla beraber açısal hareketi tanımlamaktadır. Hamiltonyen matrisinin temel halini 2.12 denkleminde uygun olarak

$$\begin{aligned} H_{n'v'j'\Omega',nvj\Omega} = & \left\langle n' \left| -\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right| n \right\rangle \delta_{v'v} \delta_{j'j} \delta_{\Omega'\Omega} \\ & + \left\langle v' \left| -\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right| v \right\rangle \delta_{v'v} \delta_{j'j} \delta_{\Omega'\Omega} \\ & + \left\langle n' \left| \left\langle v' \left| \left\langle J\Omega' j'\Omega' \right| V(R,r) \right| J\Omega j\Omega \right\rangle \right| v \right\rangle \right| n \right\rangle \\ & + \left\langle v' \left| \left\langle J\Omega' j'\Omega' \left| \frac{j^2}{2\mu_r r^2} \right| J\Omega j\Omega \right\rangle \right| v \right\rangle \delta_{nn'} \\ & + \left\langle n' \left| \left\langle v' \left| \left\langle J\Omega' j'\Omega' \left| \frac{L^2}{2\mu_R R^2} \right| J\Omega j\Omega \right\rangle \right| v \right\rangle \right| n \right\rangle \delta_{v'v} \end{aligned} \quad (2.15)$$

yazabiliriz. Merkezci ifadedeki $\hat{L}$ yörünge açısal momentum operatörü cisim merkezli koordinat sisteminde açısal momentumun bileşenleri ile komütatif özelliğe sahip olmadığı için $\hat{L}$ yörünge açısal momentum operatörü baz seti içerisinde kullanılmamaktadır (Skouteris vd., 2004). Bu nedenle $L = J - j$ terimini Legendre polinomlarının bir dönüşümü ile kullanarak Coriolis coupling terimlerini;

$$\begin{aligned}
\left\langle J\Omega' j'\Omega' \left| L^2 \right| J\Omega j\Omega \right\rangle &= \left\langle J\Omega' j'\Omega' \left| (J-j)^2 \right| J\Omega j\Omega \right\rangle \\
&= \left[J(J+1) + j(j+1) - 2\Omega^2 \right] \delta_{jj'} \delta_{\Omega\Omega'} \\
&\quad - \left[J(J+1) - \Omega(\Omega+1) \right]^{1/2} \left[j(j+1) - \Omega(\Omega+1) \right]^{1/2} \delta_{jj'} \delta_{\Omega'\Omega+1} \\
&\quad - \left[J(J+1) - \Omega(\Omega-1) \right]^{1/2} \left[j(j+1) - \Omega(\Omega-1) \right]^{1/2} \delta_{jj'} \delta_{\Omega'\Omega-1}
\end{aligned} \tag{2.16}$$

gibi elde ederiz.

2.1.2 Centrifugal Sudden (CS) Yaklaşımı

Centrifugal Sudden(CS) yaklaşımında denklem (2.15) de verilen diyagonal olmayan Coriolis Coupling(CC) elemanlarının (Ω çiftlenimleri) ihmal edilmesiyle

$$\left\langle J\Omega' j'\Omega' \left| L^2 \right| J\Omega j\Omega \right\rangle = \left[J(J+1) + j(j+1) - 2\Omega^2 \right] \delta_{jj'} \delta_{\Omega\Omega'} \tag{2.17}$$

CS terimleri elde edilmektedir.

2.2. Zamana Bağlı Schrödinger Denkleminin Çözüm Metotları

2.2.1. Chebychev Polinomları Açılımı Metodu

Bilim ve mühendislikte karşılaşılan problemlerin birçoğunun matematiksel modelleri adi ve kısmi diferansiyel denklemlerle ifade edilmektedir. Bu nedenle diferansiyel denklemler ve çözümleri büyük bir öneme sahiptir. Diferansiyel denklemlerin tam çözümlerini bulmak zor olduğundan yaklaşık sayısal çözümlerine gerek duyulmaktadır. Chebyshev polinomları adi diferansiyel denklemleri içeren başlangıç değer problemleri için nümerik çözümler içermektedir. Zamana bağlı dalga paketi metodunda kullanılan Schrödinger denklemi de bir başlangıç değer problemi olduğu için Chebyshev polinomları bu diferansiyel denklemin çözümünde kullanılmaktadır. Chebyshev polinomları, trigonometrik fonksiyonlarla ifade edildiğinden $[-1,1]$ aralığında tanımlıdır ve bu aralıktaki problemlere çözüm üretmektedir (Çalık N., 2010).

Schrödinger dalga denkleminin çözülebilmesi için denklem (2.7) deki üstel ifadenin Chebyshev serisine açılarak tekrar çözülmesi gerekir. Bu denklemdeki üstel ifade $e^{\alpha x}$ gibi bir skaler fonksiyon cinsinden yazılarak Chebyshev serisine açılırsa

$$e^{\alpha x} = \sum_{n=0}^{\infty} (2 - \delta_{n0}) J_n(\alpha) T_n(x) \quad (2.18)$$

olur. Burada δ_{n0} Kronecker delta olup, $(2 - \delta_{n0})$ fonksiyonu Dirac delta fonksiyonudur.

Bu seride açılım katsayılarını tanımlayan bir fonksiyondur. Açılım katsayıları n değerlerine bağlı olarak

$$(2 - \delta_{n0}) = \begin{cases} 1 & , n=0 \\ 2 & , n>1 \end{cases} \quad (2.19)$$

değişmektedir. Eşitlik (2.18) daki $T_n(x)$ n değerlerine bağlı Chebyshev polinomu, $J_n(\alpha)$ serideki n ve α değerlerine bağlı olarak değişen Bessel fonksiyonu olup α 'nın değeri

$$\alpha = \frac{\Delta E \cdot \Delta t}{2\hbar} \quad (2.20)$$

tanımlanmaktadır. Chebyshev polinomları tekrarlama bağıntıları kullanılarak hesaplanmaktadır. Chebyshev tekrarlama bağıntıları

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \quad (2.21)$$

şeklinde yazılır (Çalık N., 2010).

İlk iki terim için Chebyshev polinomlarının değerleri

$$T_0(x) = 1 \quad T_1(x) = x \quad (2.22)$$

gibidir. Denklemlerdeki x değişkeninin Hamiltonyen operatörünü temsil ettiğini düşünerek Schrödinger denklemindeki üstel ifade Chebyshev serisine açılarak (2.22) deki eşitlik ile serinin diğer terimleri bulunabilmektedir x değişkenleri $[-1,1]$ aralığında olduğu için Hamiltonyen operatörünün yeniden bu aralıkta

$$-1 < H_{norm} < 1 \quad (2.23)$$

normlanması gerekmektedir. Hamiltonyen operatörü bu aralıkta sınırlı olduğu sürece, operatörün işlevi Chebyshev serisinde gösterilebilmektedir (Tal-Ezer, H ve Kosloff, R., 1984, Kosloff, R., 1988). Hamiltonyen operatörünün normlanmış hali

$$H_{norm} = \frac{(H - \overline{H})}{\frac{1}{2}\Delta E} \quad (2.24)$$

şeklinde yazılır. Bu denkleme göre maksimum ve minimum enerji hangi değeri alırsa alsın normlanmış Hamiltonyen operatörü $[-1,1]$ aralığında olacaktır. Burada $\bar{H}$ ortalama enerji değerini

$$\bar{H} = \frac{E_{\max} + E_{\min}}{2} \quad (2.25)$$

temsil etmektedir. Hamiltonyen operatörünün normlanmış hali H_{norm} ve ortalama değeri $\bar{H}$ 'ı tanımladıktan sonra eşitlik (2.7) verilen Schrödinger denkleminin üstel terimini yeniden H_{norm} ve $\bar{H}$ cinsinden

$$e^{-iH\Delta t/\hbar} = e^{-i\bar{H}\Delta t/\hbar} e^{-i\alpha H_{norm}} \quad (2.26)$$

Yazılabilir (Tal-Ezer, H ve Kosloff, R., 1984, Kosloff, R., 1988). Eşitliğin sağ tarafındaki ilk terim enerji skalasındaki değişimden kaynaklanan faz kaymasıdır. Eşitliğin sağındaki ikinci terim Chebyshev serisine açılırsa

$$e^{-i\alpha H_{norm}} = \sum_{n=0}^N (2-\delta_{n0}) J_n(\alpha) \Phi_n(-iH_{norm}) \quad (2.27)$$

olur. Burada $\Phi_n(-iH_{norm})$ karmaşık Chebyshev polinomudur. $\psi(R,t)$ dalga fonksiyonunun zamana bağlı olarak yayılımını Chebyshev polinomu cinsinden yeniden yazarsak

$$e^{-iH\Delta t/\hbar} \Phi(t + \Delta t) = e^{-i\bar{H}\Delta t/\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} (2-\delta_{n0}) J_n(\alpha) \Phi_n(-iH_{norm}) \Phi(t) \quad (2.28)$$

Olur. Bu serinin diğer terimlerinin bulunabilmesi için ilk iki terimin bilinmesi gerekmektedir. Tekrarlama bağıntısı

$$\Phi_{n+1}(x) = -2iH_{norm}\Phi_n(x) - \Phi_{n-1}(x) \quad (2.29)$$

yazılır. Bu bağıntıya göre ilk iki terim

$$\Phi_0 = 1, \Phi_1 = -iH_{norm} \quad (2.30)$$

elde ederiz.

Schrödinger denklemi Chebyshev polinomları cinsinden seriye açıldığında bu serinin gerçek çözümü temsil etmesi için yakınsaması gerekmektedir. Chebyshev serisindeki yakınsama için uygun katsayılar seçilmesi gerekmektedir. Uygun katsayılar için eşitlik (2.18) yer alan Bessel fonksiyonları kullanılır. Bessel fonksiyonları

$$(2 - \delta_{n0})J_n(\alpha) = \int_{-1}^1 \frac{e^{\alpha x} P_n(x) dx}{\sqrt{1-x^2}} \quad (2.31)$$

tanımlanmaktadır. Bu fonksiyonda Chebyshev serisinin istenilen şekilde yakınsaması için uygun katsayı değerlerinin elde edilmesi gerekir. Bunun için fonksiyondaki n değeri arttıkça Bessel fonksiyonu üstel olarak azalarak $N \cong \alpha$ olduğunda sifıra yakınsadığı için

$$N \cong \frac{\Delta E \cdot \Delta t}{2\hbar} \quad (2.32)$$

alınabilir. Bu ifade ile dalga fonksiyonunun yayılacağı enerji aralığı yayılma zamanı ve tekrarlama bağıntısının kullanılması ile $\Phi_n(-iH_{norm})$ operatörünün kaç defa dalga fonksiyonu üzerine işlem yapacağı belirlenmiş olur. Ayrıca bu çözüm dalga fonksiyonunun sonlu grid noktalarından istenmeyen yansımaları engellemek için kompleks yok edici potansiyelin kullanılmasına izin verir.

2.2.2. Reel Dalga Paketi Metodu

Chebyshev polinomları açılım metodu ile Schrödinger denklemi çözülebilir olmasına rağmen dalga fonksiyonunun imajiner kısmı da bu işlemlere dâhil edildiği için atom ve moleküllerin serbestlik dereceleri arttıkça hesaplama zamanı bir hayli artmaktadır. Bu durumun üstesinden gelebilmek reel dalga paketi metodu ile Schrödinger denklemi reel ve sanal kısımları ayrılacak şekilde yeniden düzenlenmiştir. Dalga fonksiyonunun sadece reel kısmının hesaplamalara dâhil edilmesi için imajiner kısmının ayrıştırılması gerekir. Bu amaçla eşitlik (2.7) de Schrödinger denklemindeki üssel ifadeyi trigonometrik fonksiyonlar cinsinden yazılırsa

$$\psi(t + \Delta t) = e^{\frac{-iH\Delta t}{\hbar}} \psi(t) = \cos\left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right) - i \sin\left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right) \quad (2.33)$$

$$\psi(t - \Delta t) = e^{\frac{iH\Delta t}{\hbar}} \psi(t) = \cos\left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right) \quad (2.34)$$

olur. Bu denklemler taraf tarafa toplanırsa

$$\psi(t + \Delta t) = -\psi(t - \Delta t) + 2 \cos\left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right) \quad (2.35)$$

yazılır. Denklem (2.35) dalga fonksiyonunun sadece reel kısmını içermektedir. Ancak bu hali ile denklem (2.35)'nin kullanılması oldukça zordur. Daha uygun çözümler için trigonometrik fonksiyon yerine bu fonksiyonla aynı aralıkta normlanmış denklem (2.15) deki Hamiltonyen ifadesinin normlanmış halini

$$\cos\left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right) = H_{norm} \quad (2.36)$$

yazabiliriz. Denklem (2.36) dalga fonksiyonun reel kısmını temsilen $q(t)$ ifadesi kullanılarak yeniden düzenlenirse

$$q(t + \Delta t) = -q(t - \Delta t) + 2H_{norm}q(t) \quad (2.37)$$

olur. Grid sonlarındaki istenmeyen yansımaları engellemek için denklem (2.37) e sönümleme fonksiyonu A eklenirse reel dalga fonksiyonu

$$q(t + \Delta t) = A[-Aq(t - \Delta t) + 2H_{norm}q(t)] \quad (2.38)$$

elde edilir.

Dalga fonksiyonunun yayılımın başlayabilmesi için tekrarlama bağıntısının $t = 0$ daki ve $t = 1$ daki değerlerinin bilinmesi

$$q_0 = [q(t=0)] \quad q_1 = H_{norm}q(t=0) - \sqrt{1 - H_{norm}^2} p(t=0) \quad (2.39)$$

(2.29) deki karekök $\sqrt{1 - H_{norm}^2}$ ifadesi Chebyshev polinomları cinsinden

$$\sqrt{1 - H_{norm}^2} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n T_n(H_{norm}) \quad (2.40)$$

yazılır. Burada ki $T_n(H_{norm})$ n ye bağlı Chebyshev polinomudur. B_n ise açılım katsayılarıdır.

2.3. Dalga Paketinin Analiz Edilmesi

Saçılma matrisi $S_{j \leftarrow i}$ saçılmaya uğrayan fiziksel bir sistemin başlangıç hali ile son hali arasında bağlantı kurmaktadır. Saçılma matrisi

$$S_{j \leftarrow i} = \langle \psi_{out}^+ | \psi_{in}^- \rangle \quad (2.41)$$

gibidir. Burada $|\psi_{in}^- \rangle$ fonksiyonu giriş kanalında başlangıçtaki sistemin kuantum durumudur. $\langle \psi_{out}^+ |$ İse çıkış kanalında sistemin son anındaki kuantum durumunu gösterir.

2.3.1. Reaksiyon İhtimaliyetleri

Dalga fonksiyonunun yeteri kadar uzun zamanda yayılması ile toplam reaksiyon ihtimaliyetleri, reaksiyon tesir kesiti gibi fiziksel büyüklükler hesaplanabilir. Temel hal (j_0, k_0, v_0) için reaksiyon ihtimaliyeti;

$$P_{j_0, k_0, v_0}^J = \sum_j \frac{\hbar}{\mu_r} \text{Im} \left[\langle \psi(E) | \delta(s - s_0) | \psi(E) \rangle \right] \quad (2.42)$$

eşitliği ile hesaplanır. Burada $\psi(E)$ dalga fonksiyonu $\psi(t)$ fonksiyonunun zamandan bağımsız kısmına karşılık gelmektedir. S_0 R veya r koordinatları ($S_0 = R$ veya r) boyunca yürütülen akı hesaplamalarını temsil etmektedir.

2.3.2. Reaksiyonun İntegral Tesir Kesiti

Reaktif saçılma ve diğer saçılma reaksiyonlarının anlaşılması ve reaksiyona ait bilgilerin elde edilmesi için önemli kuantum mekaniksel bilgilerden biride reaksiyon tesir kesitidir. Reaksiyon ihtimaliyetlerinin hesaplanması ile bu ihtimaliyetlere bağlı olarak reaksiyonun tesir kesiti dalga paketi hesaplamalarına dayalı olarak aşağıdaki eşitlikle hesaplanabilir.

$$\sigma_{j_0, k_0, v_0}(E) = \frac{\pi}{k^2} \sum_J (2J + 1) P_{j_0, k_0, v_0}^J(E) \quad (2.43)$$

2.3.3. Reaksiyon hız sabiti

Reaksiyon hız sabiti toplam reaksiyon tesir kesiti kullanılarak aşağıdaki ifadede

$$k(T) = \eta \sqrt{\frac{k_B T}{\pi \mu_R}} (k_B T)^{-2} \int_0^{\infty} E \sigma(E) e^{-\frac{E}{k_B T}} dE \quad (2.44)$$

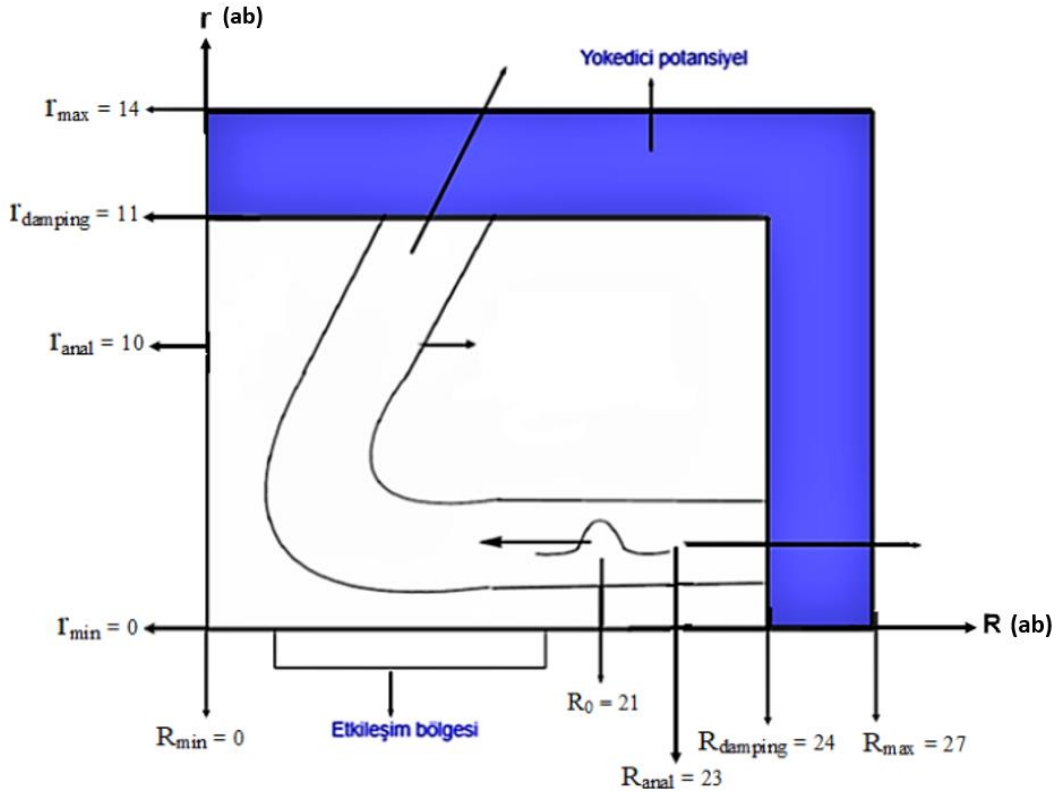
hesaplanmaktadır. Burada k_B Boltzman sabitidir.

.

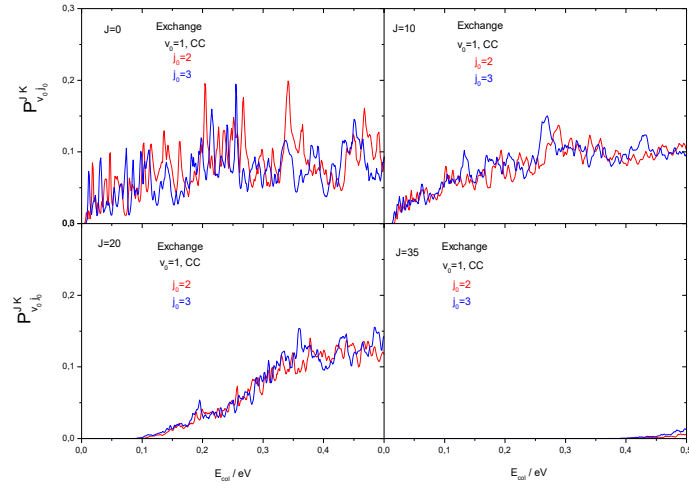


3. SONUÇ ve TARTIŞMA

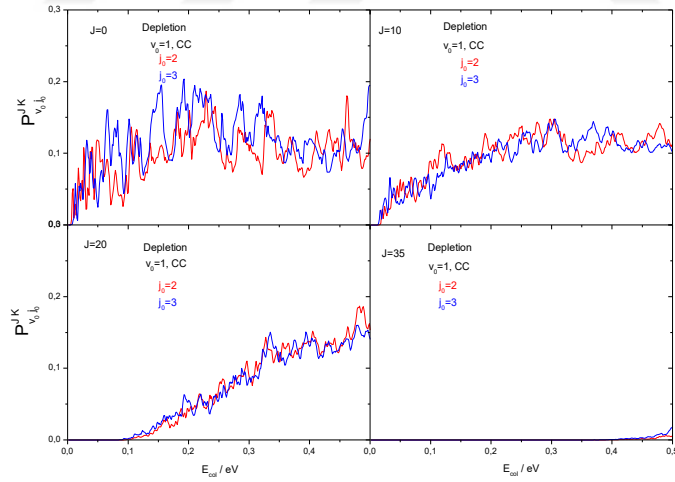
Şekil 3.1 de hesaplamalarda kullanılan parametreler atomik birim cinsinden belirtilmiş ve dalga fonksiyonunun potansiyel enerji yüzeyi üzerindeki yayılımı gösterilmiştir. R_0 noktasına yerleştirilen Gaussiyen bir dalga fonksiyonun verilen enerji ile Güçlü etkileşim bölgesine hareketi sağlanır. Güçlü etkileşim bölgesini aşıp diğer kanala(r) geçen dalga fonksiyonu r_{anal} bölgesinde analiz edildiğinde reaktif saçılma ihtimaliyetleri elde edilir. Kanalin sonuna yaklaşan (r_{max}) dalga fonksiyonun geri dönüşümünü engellemek için dalga fonksiyonunu yok eden yok edici bir parametre $r_{damping}$ bölgesinde kullanılır. Bununla birlikte, güçlü etkileşim bölgesinden geri dönen dalga fonksiyonu R_{anal} bölgesinde analiz edildiğinde inelastik saçılma ihtimaliyetleri bulunur.



Şekil 3.1 Dalga fonksiyonunun bir potansiyel enerji yüzeyi üzerindeki yayılımı

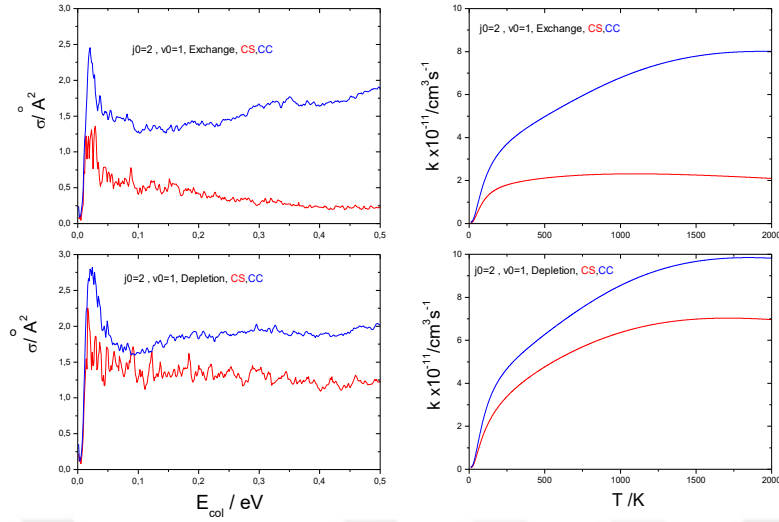


Şekil 3.2. $H + ND(a^1D) \rightarrow NH(a^1D) + D$ değişim (Exchange) reaksiyonu için titreşimsel olarak uyarılmış ND molekülünün $v_0 = 1$, $j_0 = 2, 3$ titreşim ve dönme kuantum durumlarındaki toplam reaksiyon ihtimaliyetleri.

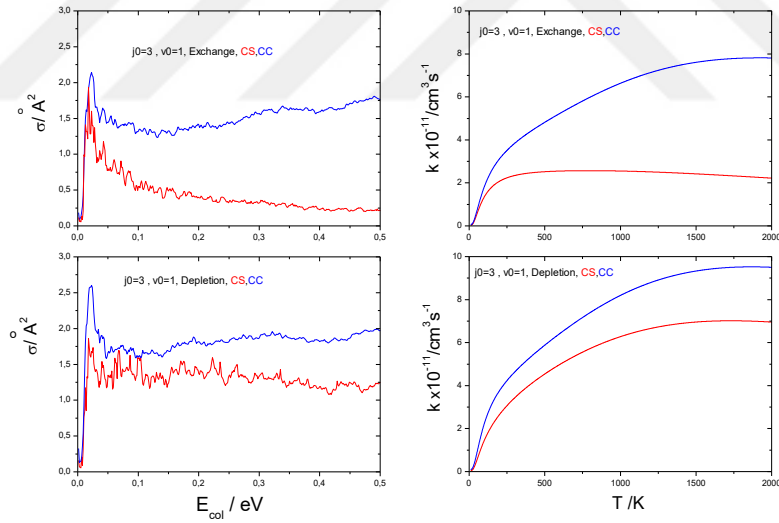


Şekil 3.3. $H + ND(a^1D) \rightarrow N(^2D) + HD$ depletion reaksiyonu için titreşimsel olarak uyarılmış ND molekülünün $v_0 = 1$, $j_0 = 2, 3$ titreşim ve dönme kuantum durumlarındaki toplam reaksiyon ihtimaliyetleri

Yapılan hesaplamalar NH_2^2A' uyarılmış potansiyel enerji yüzeyinde gerçekleştirilmiştir. Toplam açısal momentumunu $J_{\min} = 0$ ve $J_{\max} = 40$ arasındaki tüm değerleri için hesaplamalar yapılmış, çarpışma enerjisinin 0.0-0.5 eV aralığı için reaksiyon ihtimaliyetleri elde edilmiştir. Elde edilen bu ihtimaliyetler analiz edilerek Şekil 3.2 ve Şekil 3.3 grafikleri çizilmiştir. Şekil 3.2 de $H + ND(a^1D) \rightarrow NH(a^1D) + D$ değişim (Exchange) reaksiyonunun sırasıyla, $v_0=1$, $j_0=2, 3$ ve $J=0, 10, 20, 35$ titreşim, dönme ve toplam Açısal momentum kuantum durumlarındaki toplam reaksiyon ihtimaliyetleri gösterilmiştir. Şekilden de görüleceği gibi $J=0$ kuantum durumunda bariyersiz bir potansiyel enerji fonksiyonu ve ekzotermik bir reaksiyondan dolayı eşik enerjisi görülmemektedir. $J=10, 20$ ve 35 kuantum durumlarında ise 2.16 denkleminin son terimindeki merkezci bariyerin etkisiyle reaksiyon ihtimaliyetleri artan enerjiyle kaymaya başlamıştır. $J=0$ kuantum durumu için düşük enerjili değerlerde keskin rezonans yapılar görülmektedir. Bunun sebebi reaksiyonun derin bir potansiyel kuyusuna sahip olmasıdır. Toplam Açısal kuantum sayısının artmasıyla rezonans yapılar beklenildiği gibi kaybolmuş ve $J=35$ için reaksiyon ihtimaliyet değerlerinin yok denecek kadar küçüldüğü görülmüştür. Ayrıca, hem $j_0=2$ hemde $j_0=3$ dönme kuantum durumlarında tüm toplam açısal kuantum durumları için reaksiyon ihtimaliyetleri benzer eğilim göstermiştir. Şekil 3.3 de $H + ND(a^1D) \rightarrow N(^2D) + HD$ depletion reaksiyonu için Şekil 3.2 ye benzer grafikler verilmiştir. Depletion reaksiyonunda Exchange reaksiyonuna benzer şekilde, J toplam açısal momentum sayısının büyümesiyle reaksiyon ihtimaliyetlerinde daha büyük enerji değerlerine doğru kaymalar görülmektedir. Depletion reaksiyonundaki toplam reaksiyon ihtimaliyetleri Exchange reaksiyonundaki reaksiyon ihtimaliyetlerine göre daha büyük, zayıf ve keskin piklere sahiptir. Bunun sebebi, Exchange reaksiyonundaki hidrojen ve döteryum atomlarının yer değiştirmesidir.



Şekil 3.4. $v_0=1, j_0=2$ kuantum sayıları için CC ve CS metotlarındaki değişim (Exchange) ve Depletion reaksiyonlarının tesir kesitleri ve hız sabitleri.



Şekil 3.5. $v_0=1, j_0=3$ kuantum sayıları için CC ve CS metotlarındaki değişim (Exchange) ve Depletion reaksiyonlarının tesir kesitleri ve hız sabitleri.

Şekil 3.4 de $v_0=1, j_0=2$ titreşim ve dönme kuantum sayılarında hesaplanılan hem değişim hem de depletion reaksiyonları için CC ve CS tesir kesitleri ve hız sabitleri gösterilmiştir. Reaksiyon tesir kesitleri $J=40$ kadar olan tüm toplam açısız kuantum sayısında hesaplanılan CC reaksiyon ihtimaliyetlerinden elde edilmiştir.

Büyük toplam açısal kuantum sayılarındaki reaksiyon ihtimaliyetlerinin hesaplanması 2.16 denklemindeki Coriolis coupling terimlerinden dolayı zaman problemini ortaya çıkarmaktadır. Örnek olarak $J=20$ için reaksiyon ihtimaliyeti sonuçlarının bulunması 5 gün $J=40$ için 7 günü bulmaktadır. Bununla birlikte hem değişim hemde depletion reaksiyonları için CC hesaplamalarının önemli olduğu Şekil 3.4 ten görülmektedir. CC hesaplamaları CS hesaplamalarından özellikle yüksek enerji bölgelerinde daha büyük çıkmaktadır. Ayrıca, 2.44 denklemindeki reaksiyon hız sabitleri reaksiyon tesir kesitlerinden hesaplanmaktadır. Reaksiyon hız sabitleri reaksiyonun meydana gelme hızını göstermektedir. Sütün oda sıcaklığında buzdolabına göre daha çabuk bozulması reaksiyon hız sabitiyle ilgilidir. Şekil 3.5 teki reaksiyon tesir kesitleri ve hız sabitleri $v_0=1$, $j_0=3$ kuantum durumları için çizilmiştir. Şekilden görüleceği gibi Şekil 3.4 teki grafiklere benzer eğilim görülmektedir. Şekil 3.4 ve 3.5'te verilen hem değişim hem de depletion reaksiyonları için oda sıcaklığındaki ($T=300$ K) reaksiyon hız sabitleri, $v_0=1$, $j_0=2$ durumunda $3,85 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ ve $4,64 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ değerlerinde $v_0=1$, $j_0=3$ durumunda $4,03 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ ve $5,08 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ değerlerindedir. Bu değerlerden görüleceği gibi hem değişim hemde depletion reaksiyonun her iki kuantum durumunda meydana gelme hızları çok düşüktür.

KAYNAKLAR

Aygün E ve Zengin M., 1992 Atom ve Molekül Fiziği, Bilim Yayıncılık, Ankara

Akpınar S. ve Sürücü S. 2013 The effect of the Coriolis Coupling on H+ND reaction: A time dependent wave packet study, *Chemical Physics Letters* 578, 21–27.

Balakrishnan, N., Kalyanaraman, C. And Sathyamurthy, N.,1997. Time dependent Quantum mechanic alapproach to reactive scattering and related processes, *Physics Reports*, 280, 79-144.

Bransden, B.H. ve Joachain, C.J., 1999. Atom ve Molekül Fiziği, Bilim yayıncılık, Ankara.

Bulut, N., Yıldız, A., Göğtaş, F. and Akpınar, S., 1999. Quantum wave packet study of O(1D) +HCl(v)→ClO(v') + H reaction, *International Journal of Quantum Chemistry*, 73, 425-432.

Çalık N.,2010 Chebyshev Polinomları ve Bazı Uygulamaları Selçuk Üniversitesi Yüksek Lisans Tezi

Defazio, P. andPetrongolo, C., 2007. Coriolis coupling effects on the initial-state resolved dynamics of the N(2D) + H₂→NH+H reaction, *The Journal of Chemical Physics*, 127, 204311-204314.

Gamallo, P., Gonzalez, M., Sayos, R. And Petrongolo, C., 2003. Quantum wave packet dynamics of the 1 3A" N (4S) + NO (X 2Π) →N₂(X 1Σ+g) +O(3P) reaction, *Journal of Chemical Physics*, 119, 7156-716.

Gray, S.K. and Balint-Kurti, G.G., 1998. Quantum Dynamics with real wave packets, including application to three-dimensional (J=0) D+H₂→HD+H reactive scattering, *The Journal of Chemical Physics*, 108, 950-962

Hongsheng Zhai, Wenliang Li, andYufangLiu, 2014 Coriolis Coupling Influence on the H+LiH Reaction *Bull. Korean Chem. Soc.*, 35, 151.

Kosloff, R., 1988. Time –dependent quantum- mechanical methods for molecular dynamics, *The Journal of Physical Chemistry*, **92**, 2087-2100.

Meijer, A.J.H.M. and Goldfield E.M., 1998. Time-dependent quantum mechanical calculations on H+O₂ for total angular momentum $J>0$, *Journal of Chemical Physics*, 108,1.

Neuhauser, D., Baer, M., Judson, R.S. and Kouri, D.J., 1990. A time dependent wave packet approach to atom-diatom reactive collision probabilities: Theory and application to the H+H₂ ($J=0$) system, *The Journal of Chemical Physics*, 93,1.

Padmanaban, R. And Mahapatra, S., 2006. Coriolis- Coupling Wave Packet Dynamics of H+HLi Reaction, *The Journal of Physical Chemistry*, 110, 6039-6046.

Padmanaban, R. And Mahapatra, S., 2002. Time-dependent wave packet dynamics of the H+HLi reactive scattering, *Journal of Chemical Physics*, 117, 10.

Poirier, B., 2005. Analytical treatment of Coriolis coupling for the three-body systems, *Chemical Physics*, 308, 305-315.

Sürücü, S., 2011. Hidrojen atomuyla azot döteryum molekülünün etkilemesinin incelenmesi. Fırat Üniversitesi Yüksek Lisans Tezi.

Şimşek E.,2014. Atom Molekül Reaksiyonlarında Titreşim Kuantum Sayısının Reaksiyon Tesir Kesiti Ve Reaksiyon Hız Sabitine Etkisi., Fırat Üniversitesi Yüksek Lisans Tezi.

Tal-Ezer, H. And Kosloff, R., 1984. An accurate and efficient scheme for propagating the Time dependent Schrödinger equation, *The Journal of Chemical Physics*, **81**,3967-3971.

.

ÖZGEÇMİŞ

1985 yılında Kahramanmaraş'ta doğmuşum. İlk, orta Kahramanmaraş'ta okudum ve liseyi Osmaniye'de tamamladım. 2005 yılında başladığım Dokuz Eylül Üniversitesi Eğitim Fakültesi Fizik Anabilim dalında Fizik öğretmeni olarak 2010 yılında mezun oldum. 2012 yılında Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı Atom ve Molekül Fiziği Bilim Dalında yüksek lisans eğitimime başladım. Şu an Milli Eğitim Bakanlığı'na bağlı kurumunda öğretmenlik yapıyorum.

