

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

85098

YAPISAL DEĞİŞTİRİM İLKESİNDE
EN ÜST VE EN ALT ÖZDEĞERLERİN BULUNMASI,
ÖRÜT KURAMI VE NİCEM KİMYASINDA
UYGULAMALAR

Elif TEKİN TARIM

F.B.E. Matematik Anabilim Dalında
Hazırlanan

DOKTORA TEZİ

Tez Savunma Tarihi : 7 Mayıs 1999
Tez Danışmanı : Prof. Dr. Behiç ÇAĞAL
İkinci Tez Danışmanı : Prof. Dr. Oktay SİNANOĞLU
Jüri Üyeleri : Prof. Dr. Erol YARIZ (MÜ)
: Prof. Dr. Metin DEMİRALP (İTÜ)

Behiç ÇAĞAL
M. Demiralp

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

85098

İSTANBUL, 1999

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
TEŞEKKÜR.....	iv
ÖZET.....	v
ABSTRACT.....	vi
1. GİRİŞ	1
1.1 Yapısal Değişiririr İlkesi ve Kuralları.....	1
1.2 Yapısal Değişiririr İlkesi Kurallarına Ait Örnekler.....	3
1.3 Yapısal Değişiririr İlkesinin Bazı Teorem ve Tanımları.....	5
1.4 Nicem Kimyası ile Olan Bağlantısı.....	6
1.4.1 Kullanılan Teoriler.....	6
1.4.2 Matematiksel Teoriye Giriş.....	11
1.5 Örüt Kuramına Giriş.....	13
1.5.1 Bir Örütü Çizmek.....	14
1.5.2 Örüt Kuramında Bazı Tanımlar.....	15
1.5.3 İskeletlerin Sınıflandırılması.....	18
1.5.4 Mümkün Türlerin Sayısı.....	18
2. BİR ÇİZİTİN EN ALT VE EN ÜST ÖZDEĞERLERİNİ VEREN FORMÜLLERİN BULUNMASI.....	20
2.1 Bir Çizitin En Alt ve En Üst Özdeğerleri.....	20
2.2 Atlamalı Çizitler için Özel Durumlar.....	26
2.3 Kulaklı Çizitler için $S(A)$ Aralığının Belirlenmesi.....	28
2.4 Hückel ve Möbius Çizitleri için Özel Durumlar.....	29
2.5 Çizit Sınıf Sayısının Üst Sınırının Bulunması.....	30
3. BİLGİSAYAR YAZILIMININ ANLATILMASI.....	34
3.1 Amaç.....	34
3.2 Yazılımın Çalışmasının Anlatılması.....	35
3.3 Yazılımın Çalışmasının Bir Örnek Üzerinde Anlatılması.....	42
3.4 Bilgisayar Yazılımının Sonuç Bilgilerinin Değerlendirilmesi.....	55
5. ÖRÜT KURAMI, ATOM ve MOLEKÜL FİZİĞİNE UYGULANMASI.....	69
5.1 İki Adımlı Tepkimeler.....	69
5.2 İki Adımlı İşlengenin Hız Denklemleri ve Bunların PHASER ve MATHEMATICA Bilgisayar Yazılımları ile Çözümleri.....	71

SONUÇLAR.....	80
KAYNAKLAR.....	83
EKLER.....	85
Ek 1 Denklem 4.2'nin Mathematica 2.1 ile Çözümü.....	85
Ek 2 Denklem 4.2'nin Farklı Değişirgenler için Mathematica 2.1 ile Çözümü.....	87
Ek 3 Denklem 4.4'nin Mathematica 2.1 ile Çözümü.....	89
Ek 4 Denklem 4.6'nin Mathematica 2.1 ile Çözümü.....	92
ÖZGEÇMİŞ.....	94



TEŐEKKÜR

Tez alıřmamın her ařamasında beni ynlendiren, bilgi, tecrbe ve nerilerinden yararlandığım hocam Sayın Prof. Dr. Oktay SİNANOĐLU' na; alıřmalarım boyunca beni her konuda destekleyen hocam Sayın Prof. Dr. Behi AĐAL'a; yardımları iin Arř. Gr. Selmahan SELİM'e, Arř. Gr. Iřım DEMİRİZ'e, Do. Dr. Hasan TATLIPINAR'a, Osman Azmi BARUT'a ve Matematik Blmn'deki đretim elemanlarına, teőekkr ederim.

Ayrıca, bu gne kadar tez alıřmamda beni canı gnlden destekleyen eřim Vural TARIM'a ve sevgili aileme de teőekkr ederim.



ÖZET

Oktay Sinanoğlu tarafından ortaya atılan “Değer Etkileşim Formülü” (DEF) yöntemiyle bir özdecik veya tepkimenin çizitsel kurallarla enerji düzeyi ve kararlılığı hakkında fikir yürütme olanağı vardır. Bununla bağ-yapan (n_+), bağa-karşı (n_-) ve bağ-yapmayan (n_0) özdeciksel yörünge sayıları bulunmaktadır. Bu sayılar özdecığı veya tepkimeyi temsil eden Hermit işlerinin artı olan özdeğerlerinin sayısı, eksi olan özdeğerlerinin sayısı ve sıfır olan özdeğerlerinin sayısına karşılık gelir. En alt ve en üst özdeğer arasındaki uzaklığın ($S(A)$) üst sınırını veren formülü kullanarak, çizitsel kurallara uygulandı. Ayrıca en alt özdeğerin üst sınırını veren formülün uygulanmasıyla bir özdecığın kararlılığı hakkında daha kesin sonuçlara varmak amaçlandı. Ek olarak, çizitlerin kaç tane sınıfları olduğunu gösteren üst sınır formülü bulundu.

Bununla birlikte DEF yönteminin nicel kısmının gösterilmesi için HAO isimli bir bilgisayar yazılımı geliştirilerek, bu programın akışı CH_4 özdecığı üzerinde anlatıldı. Tek halkalı yapısal formüle sahip C_3H_6 özdecığı yapılan bu bilgisayar yazılımı kullanılarak incelendi.

Son olarak, Oktay Sinanoğlu'nun “Örüt Kuramı” iki adımlı kimyasal tepkime işlergelerine uygulanıp, bunun sonucunda elde edilen doğrusal olmayan türevsel hız denklem takımını Phaser ve Mathematica 2.1 ile çözüldü.

ABSTRACT

It is possible to have idea about the energy levels and stability of the molecules and reactions with graphical rules which is suggested by Oktay Sinanoğlu and called “Valancy Interaction Formula” (VIF). With this formula the number of the bonding (n_+), anti-bonding (n_-) and non-bonding (n_0), molecular orbitals can be calculated. This numbers are equal to positive, negative and zero eigenvalues of the Hermitian operators of the molecules or reactions. By using the equation $S(A)$, which is give the upper bound of the distance between highest and lowest eigenvalues, the results which are obtained, are compared with graphical rules results. A formula is found giving the upper bound of the number of graph classes.

The quantitative part of the VIF studied by writing computer program HAO. The steps of the program showed on CH_4 . Molecule C_3H_6 with one ring structural formula is studied by this program.

By using Oktay Sinanoğlu’s “Network Theory” the non-linear differential equations of the two step chemical reactions solved with Phaser and Mathematica 2.1.



1. GİRİŞ

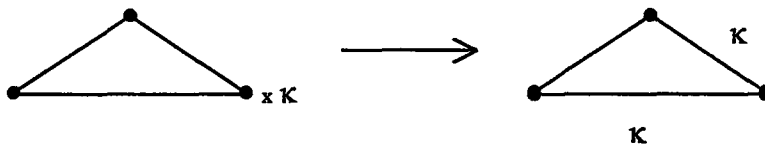
1.1 Yapısal Değişiririr İlkesi ve Kuralları

“Yapısal deęiřtiririr ilkesi” (Sinanoęlu, 1984a) ile bir çizitin (graph) artı özdeęerlerinin sayısını (n_+), eksi özdeęerlerinin sayısını (n_-) ve sıfır olan özdeęerlerinin sayısını (n_0) buluruz (örneęin, bu sayılar nicem kimyasında bir özdecik veya tepkimenin enerji düzeylerine karşılık gelir). Bu $\{n_+, n_0, n_-\}$ dizinine “*Düzey Biçit Dizini*” (Level Pattern Indices) denir (Sinanoęlu, 1984b).

Ařaęıda yapısal deęiřtiririr ilkesinin kuralları verilmiřtir. Bu kurallarla çizit daha basit bir çizite indirgenerek, $DBD = \{n_+, n_0, n_-\}$ ’si bulunur.

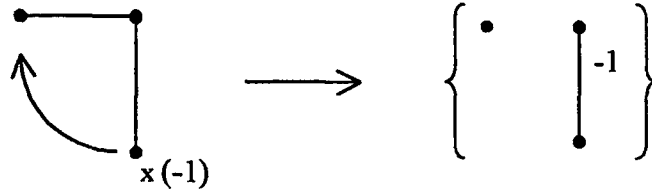
Burada sözü edilen çizitler n tepeli, aksi söylenmedięi takdirde, kenarları $+1$ kuvvetinde ve yönsüz çizitlerdir. Ayrıca $n = n_+ + n_0 + n_-$ dir (Sinanoęlu, 1984a).

1.Kural (Kappa Kuralı) : Verilen bir çizitteki herhangi bir tepeyi, sıfırdan farklı $+$ veya $-$ işaretli bir κ sayısı ile çarpmak, o tepeden çıkan tüm çizgilerin kuvvetini κ ile çarpmaktır (Şekil 1.1) (Sinanoęlu, 1984a).



Şekil 1.1 Kappa kuralı.

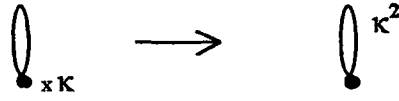
2.Kural (Yıldız Kuralı) : Şekil 1.2 de görüldüęü gibi, çizite ait herhangi bir tepe ucundan tutup kaldırılarak dięer bir tepe üstüne konursa, çakışan çizgilerin kuvvetleri toplanıp, tek çizgi halinde çizilir, tepeye ait çizgiler olduęu gibi kalır (Sinanoęlu, 1984a).



Şekil 1.2 Yıldız kuralı

3. Kappa ve Yıldız Kurallarından Türetilen Kulak Kuralları (Sinanoğlu, 1985) :

a) Her tepeden kulak (loop) için iki çizgi çıkışından, o tepeyi κ ile çarpmak o kulağın kuvvetin κ^2 ile çarpmaya eşdeğerdir.

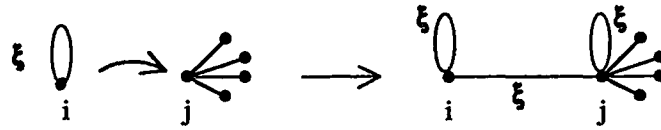


b) Tepe noktaları i ve j bir çizgi ile birleştirilmiş olsun. i 'nin j 'ye taşınması j de 2 kuvvetinde bir kulak oluşturur (Şekil 1.3).



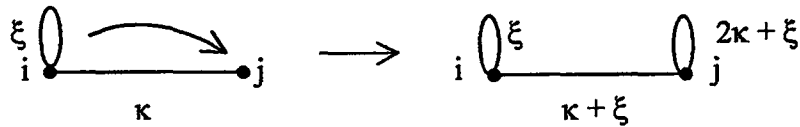
Şekil 1.3

c) Eğer i ve j bir çizgi ile birleştirilmemiş ve i üzerinde ξ kuvvetinde bir kulak varsa, i tepesi j de ξ kuvvetinde bir kulak oluşturur (Şekil 1.4).



Şekil 1.4

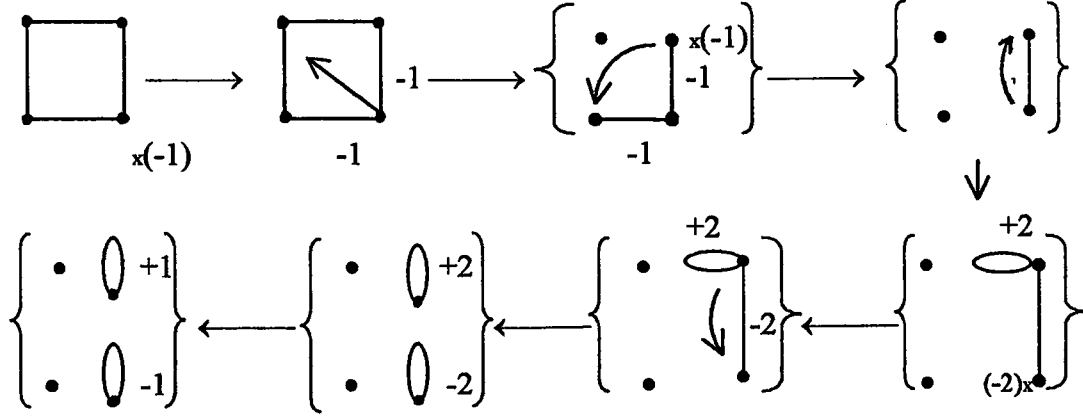
d) Eğer i ve j bir çizgi ile birleştirilmiş ve i de bir kulak varsa, i nin j ye taşınmasıyla Şekil 1.5 elde edilir. (Kulaklarla ilgili genel bir kuraldır.)



Şekil 1.5

1.2 Yapısal Değişiririr İlkesi Kurallarına Ait Örnekler

Örnek 1.1



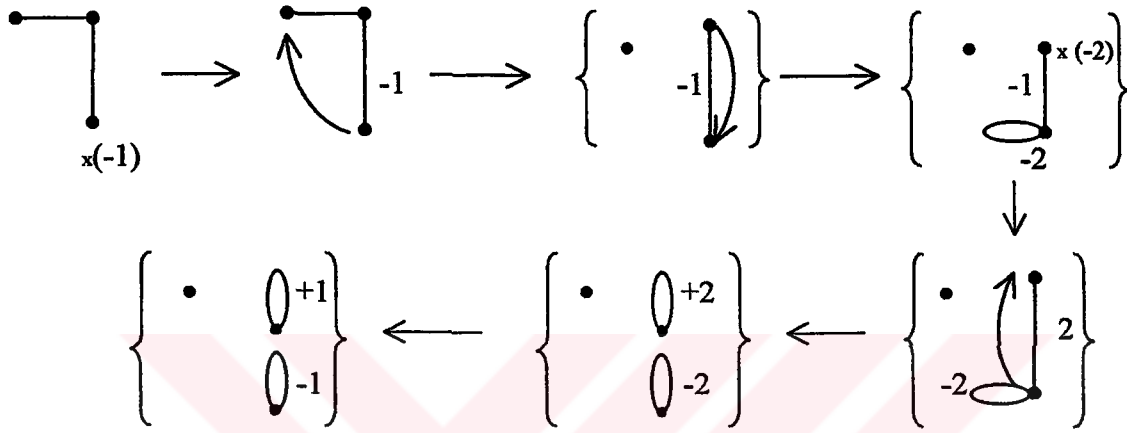
Şekil 1.6

Şekil 1.6'da Yapısal Değişiririr İlkesinin kurallarının kolaylıkla anlaşılacağı bir örnek verilmektedir. Şimdi kuralları adım adım uygulayalım:

Sağ alt köşe -1 ile çarpılarak (1.Kural), tam karşı köşenin üzerine taşınır (2.Kural). Bunun sonucunda -1 ile çarpılan çizgiler aynen kalırken, tam karşı köşeden çıkan çizgilerin kuvvetleri, üstüne gelen çizgilerin kuvvetiyle toplanarak, silinir. Sonuçta geriye bir nokta ve bir köşeye bağlı, -1 kuvvetinde iki çizgi kalır. Bu çizgilerin boşta kalan uçlarından biri -1 ile çarpılarak, diğer uca taşınırsa, geriye bir çizgi (+1 kuvvetinde) ve iki nokta kalır. Kalan çizginin bir ucu diğer ucunun üzerine taşınırsa, uçlardan birinde +2 değerli bir kulak oluşur, çizgi ve iki nokta olduğu gibi kalır (Kural.3.b). Daha sonra kulak olmayan tepe -2 ile çarpılıp, kulak olan tepe kulak olmayan tepeye taşınırsa, her iki noktada da biri +2, biri -2 kuvvetinde iki kulak oluşur, çizgi silinir ve iki nokta olduğu gibi kalır (Kural.3.d). En sonunda da bu iki kulak $1/\sqrt{2}$ ile çarpılarak, kulak kuvvetleri +1 ve -1 yapılıır (Kural.3.a). Sonuçta geriye iki tane nokta ($n_0=2$), bir tane +1 değerli kulak ($n_+=1$) ve bir tane de -1 değerli kulak ($n.=1$) kalır. Böylece son resim $DBD=\{n_+=1, n_0=2, n.=1\}$ yi verir.

Örnek 1.2

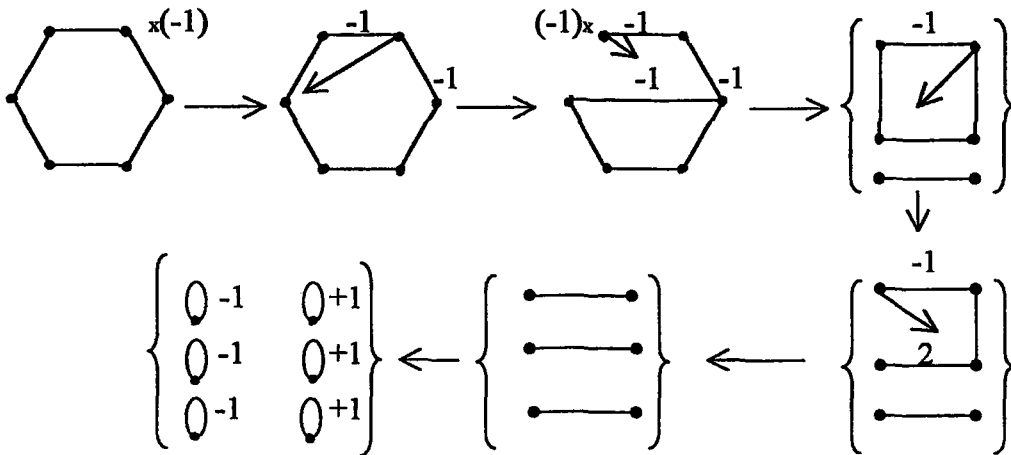
Bu örnekte de yapısal değiştirim ilkesinin kuralları adım adım uygulanırsa, Şekil 1.7'de görüldüğü gibi çizit bir tane +1, bir tane de -1 değerlikli iki kulağa ve bir noktaya indirgenerek, $DBD=\{n_+=1, n_0=1, n_-=1\}$ elde edilir.



Şekil 1.7

Örnek 1.3

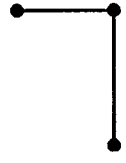
Şekil 1.8'deki gibi, iki kural kullanılarak, indirgeme işlemleri yapılır ve sonuçta üç tane +1 ve üç tane de -1 değerlikli kulak elde edilir. Bu da $DBD=\{n_+=3, n_0=0, n_-=3\}$ 'ye karşılık gelir.



Şekil 1.8

1.3 Yapısal Değişiririr İlkesinin Bazı Teorem ve Tanımları

Çizitler yönsüz olduđu için Hermit işlerleri (operatör) çiziti temsil eden dizeylerdir (matris). Örneğin, $n=3$ tepeli çiziti ele alalım. Bunu temsil eden Hermit dizeyi,



$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

dir .

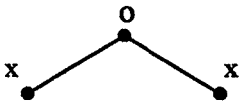
Yapısal değıştiririr ilkesinden çıkan diđer teoremler ve tanımlar da şöyledir:

Teorem 1.1 : Yukarıdaki kurallarla birbirlerinden elde edilen bütün çizitler aynı eşdeğerlik sınıflarına sahiptirler. Yani aynı DBD ye sahiptirler (Sinanođlu, 1984b).

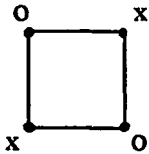
Tanım 1.1 : Eđer bir çizitin tepelerini $x-o-x-o-...$ şeklinde işaretlerken, $x-x$ veya $o-o$ şeklinde yan yana gelmiyorsa çizite *atlamalı (alternant) çizit*, aksi halde *atlamasız çizit* denir (Sinanođlu, 1988a,b).

Teorem 1.2 : Atlamalı çizitlerde $n_+ = n_-$ dir (Sinanođlu, 1988a,b).

Örnek 1.4

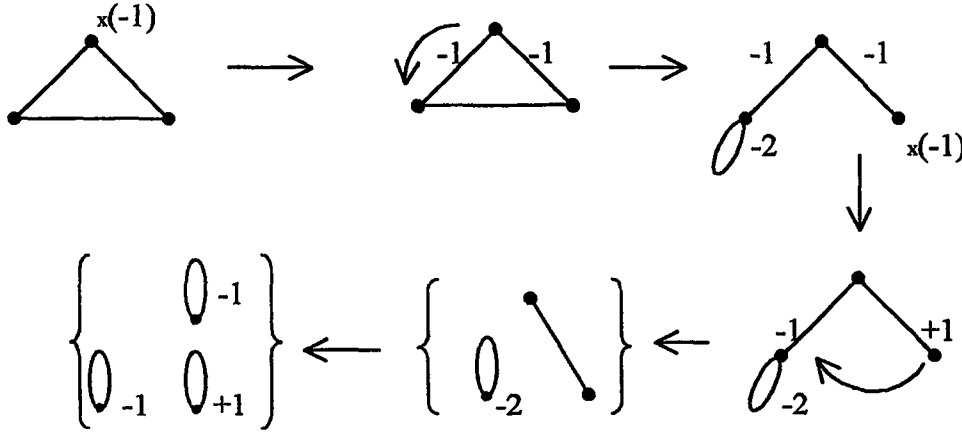


çizit atlamalı, $DBD = \{n_+ = 1, n_0 = 1, n_- = 1\}$ ve $n_+ = n_- = 1$ dir.



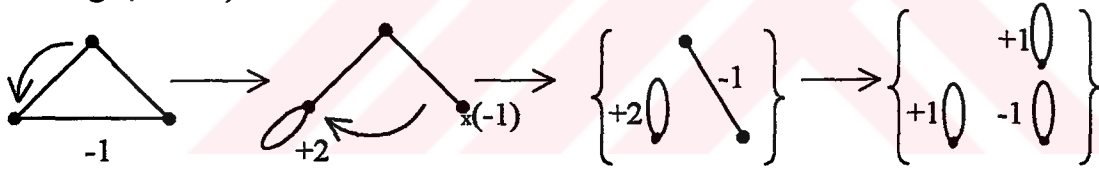
bu atlamalı çizitin ise $DBD = \{n_+ = 1, n_0 = 2, n_- = 1\}$ ve $n_+ = n_- = 1$ dir.

Tanım 1.2 : (*Hückel Durumu*): Hückel üçgeni, tüm kenar kuvvetleri 1 olan $n=3$ tepeli bir çizittir. Şekil 1.9'da olduğu gibi, yukarıdaki yapısal değişim ilkesi kurallarıyla indirgenerek, $DBD=\{n_+=1, n_0=0, n_-=2\}$ elde edilir (Sinanoğlu, 1988a).



Şekil 1.9 Hückel üçgeni ve indirgenmesi.

Tanım 1.3 : (*Möbius Durumu*): Möbius üçgeni, bir kenar kuvveti -1 olan bir çizittir. Yapısal Değişim İlkesi kuralları kullanılarak, $DBD=\{n_+=2, n_0=0, n_-=1\}$ bulunur (Sinanoğlu, 1988b).



Şekil 1.10 Möbius üçgeni ve indirgenmesi.

1.4 Nicem Kimyası ile Olan Bağlantısı

1.4.1 Kullanılan Teoriler

Modern nicem kimyasında özdecik(molekül) yapı ve özelliklerinin hesabı Değer-Bağ (Valance Bond) ve Özdeciksel Yörüngel (Molecular Orbital) yöntemleri ile yapılmaktadır. Değer-Bağ yöntemi, kimyada eskiden beri kullanılan kavramlara dayanır. Ayrıca melez ögecik yörüngemsi (Hybrid Atomic Orbital) ve Değerlik Kabuğu Eksicik Çift İtmesi (Valance Shell Electron Pair Repulsion: VSEPR) yaklaşımları kullanılarak özdecik geometrileri oldukça iyi şekilde tahmin edilebilmektedir. Buna rağmen, özdecığın kararlı

olup olmayacağı hakkında önceden fikir yürütülememektedir. MO yöntemi bakışım (simetri) ve öbek (grup) kavramlarıyla birleşince özdecığın kararlılığı veya tepkimenin olabilirliği hakkında fikir yürütülebilmekte ama bakışımlı (simetrik) olmayan hallere uygulanamamaktadır (Pamuk, 1989).

Yapısal Değişiririr İlkesi yaklaşımı Deđer-Bađ (VB) ve MO yöntemlerine dayanır. Yöntemin çıkarılışı ve ayrıntıları nicem mekanıđı ve öbek teorisi bilgilerini içerir (Sinanođlu, 1985).

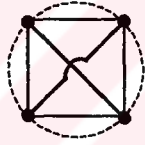
Nicem kimyasında öđecik(atom), özdecik ya da bunların bir topluluđu bir işlevle (fonksiyon) ifade edilmektedir. Öđecikler göz önüne alındıđında öđecikdeki her eksidik (elektron) de bir işlevle ifade edilir. İşte buna *öđecik yörüngemsi* (atomic orbital:AO) denir. Her yörüngemsiye karşılık gelen enerji deđeri ölçülebilmektedir, buna da *enerji düzeyi* denir. Her öđecikte en fazla 2 eksidik aynı yörüngemside bulunmaktadır (Sinanođlu, 1985).

MO yönteminde özdecikdeki eksidikler *özdeciksel yörüngemsi* (MO) denilen birer işlevle temsil edilirler. Bunlar öđecik yörüngemsilerinin dođrusal bileşimidir (Sinanođlu, 1985).

Düşük enerji düzeyi kararlılığı gösterdiđi için, kararlılık gösteren MO'ya *bađ-yapan* (bonding), diđerine de *bađa-karşı* (anti-bonding) adı verilir. Bazı özdeciklerde ise özdeciksel yörüngemsilerin enerjisi kendini oluşturan öđecik yörüngemsilerin enerji düzeylerinin ortalamasına eşit olmaktadır. Bu durumda enerji bakımından özdecığın oluşmasına bir katkı olmadığından böyle özdeciksel yörüngemsilere *bađ-yapmayan* (non-bonding) denir (Sinanođlu, 1984e).

Yapısal Değişiririr İlkesi yönteminde özdecikdeki bađ-yapan, bađ-yapmayan ve bađa-karşı yörüngemsilerin toplam sayılarına sırası ile, n_+ , n_0 , n_- denir. Bunlardan oluşan DBD= $\{n_+, n_0, n_-\}$ bir dizindir. Bu dizin'in özdecik yapı deđiştirdiđi, parçalandıđı veya birleşerek yeni ürünler verdiđi zaman deđişmediđi ispatlanmıştır (Sinanođlu, 1984d).

Ayrıca özdeciği oluşturan her öğeciğin n_a ile gösterilen bir *değerlik kabuk büyüklüğü* (valance shell size) vardır. Bu büyüklük öğeciklerin değerlik kabuğundaki öğecik yörüngemsilerinin toplam sayısına eşittir ($n_a = n_+ + n_0 + n_-$). Örneğin, H öğeciği için $n_a=1$, baş grup elementleri (Li, Be, B, C, O, F, Ne, vb.) için $n_a=4$, geçiş metalleri için $n_a=9$ dur. Bir özdecikdeki her öğecik değerlik kabuk büyüklüğüne (n_a) eşit sayıda *değerlik noktasına* (VP:valance point) sahiptir. Bunlar saf ve melez öğecik yörüngemsilere karşılık gelir. İki öğecik arasındaki etkileşimler VP ve VP' noktaları arasına çizilen bir *değerlik çizgisi* (interaction line) ile gösterilir. Bu çizgiler başa karşılık gelmez. Bunlar gerçekte bir çift değerlik noktasının arasındaki tek-eksicik etkileşiminin gösterilimidir (Sinanoğlu, 1984e). Her değerlik çizgisinin bir *kuvveti* κ ile gösterilir. Özdecikdeki bütün öğecikler aynı olduğu zaman tüm çizgi kuvvetleri $\kappa=1$ alınır. Bir de değerlik noktalarının kendi kuvveti vardır, bunlar *kulak* (loop)'a karşılık gelir ve kuvveti ise ξ dir. Baş grup elementlerinden oluşan bir özdecikte öğecikler arası etkileşmeye girmeyen değerlik noktaları öğecik içinde birbirleriyle birleştirilebilmektedir. Bunun için aşağıdaki dörtyüzlü yapı kullanılmaktadır.



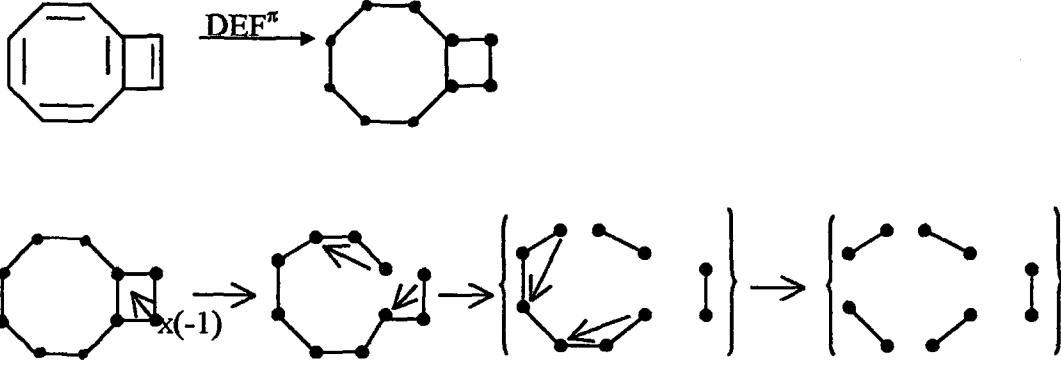
Şekil 1.11 Baş grup elementler için kullanılan dörtyüzlü

Değerlik noktalarının öğecik-içi veya öğecikler-arası birleştirilmesi ile elde edilen yapısal formüle (yani, Yapısal Değiştirim İlkesine) Oktay Sinanoğlu (1985) *Değer Etkileşim Formülü*, yani *DEF* (VIF:Valency Interaction Formula) der.

Önce yapısal formülleri basit resimli süreç ile Değer Etkileşim Formüllerine (DEF' lere) dönüştürürüz. Eğer iki değerlik noktası aynı öğecik üzerinde veya öğecikler arası etkileşime izin veriyorsa, bu noktalar arasına değer-etkileşim çizgisi çizilir.

Yapısal formüllerin DEF'leri, tamamıyla veya organik kimyada olduğu gibi sadece π değerlikleri, σ ve π değerliklerinin bazıları vs. içeren kısmi DEF'lere dönüştürülebilir.

Örnek 1.5



Şekil 1.12

Şekil 1.12 de görüldüğü gibi bu hidrokarbonun DEF^{π} 'nin $DBD=\{n_+=5, n_0=0, n_-=5\}$ elde edilir.

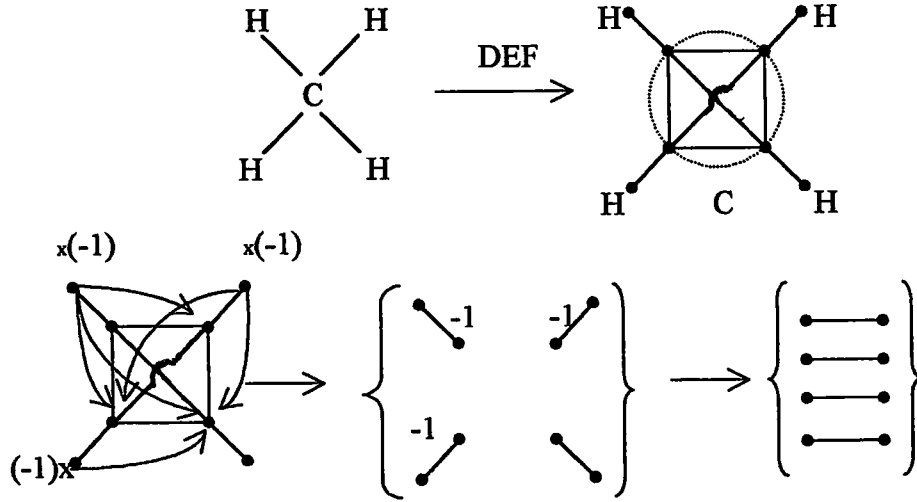
Bir özdeciğe ait DBD değeri ona ait değerlik noktası etkileşim formülü DEF^{π} 'in indirgenmesi ile bulunur (Sinanoğlu, 1984e). Bu indirgeme için Kısım 1.1'de sözü edilen yapısal değiştirim kuralları aynen geçerlidir.

Ayrıca modern inorganik kimyanın daha karmaşık türlerinde, genişletilmiş hesaplamalara başvurmadan başka görelî kararlılıkları, tepkimeleri ve olası tepkime yolları gibi nicel sonuçları çizmek güçtür (Sinanoğlu, 1989).

Özel durumlarda nicel sonuçlar için hesaplamalar gereklidir. DEF yöntemi, bununla birlikte, nitel olsa bile yapısal formüllerden doğrudan nicem kimyası tündengelimleri için günlük kimyasal kolaylıklar elde etmeye yarayan geniş resimsel uygulanabilirliğe sahip, eşdeğişim ilkesine dayanan ve matematiksel düşüncelerle ilişkilendirilmiş bir yöntemdir (Sinanoğlu, 1989).

Örnek 1.6

Metan (CH_4) özdeciğini DEF kurallarıyla indirgeyerek, enerji düzeylerini bulalım (Şekil 1.13).



Şekil 1.13 CH₄ özdeğine DEF kurallarının uygulanması

Son kalan dört tane çizgi parçası dört tane – kuvvetinde, dört tane de + kuvvetinde kulağa karşılık gelir. Böylece DBD={n₊=4,n₀=0, n₋=4} bulunur.

DEF'ler ayrıntılı yapısal formül çeşitleridir. Doğada özdecik yapıları daha çok geometrikseldir. DEF'ler ise ilingeseldir (topolojikel). Bir özdeğin tek-eksicikli Hamilton işleri göz önüne alındığında tek-eksicikli Hamilton, geçici özdeciksel yapı ve ondan çizilen DEF ile birebir uygundur. Bu tek-eksicikli Hamilton şöyle yazılır:

$$h_{ij} = \beta_{ij} A^{ij} \quad (1.2)$$

burada

$$\beta_{ij} = \langle e_i | h | e_j \rangle \quad (1.3)$$

$$2A^{ij} = |e^i\rangle\langle e^j| + |e^j\rangle\langle e^i| \quad (1.4)$$

dir. Bir $|e_i\rangle$, ögecik yörüngemsi değerliliğinin ketidir. Yöntemin matematiksel formülasyonunda (Sinanoğlu, 1984b) DEF'deki bir çizgi A^{ij} ile gösterilir. Çizgilerin büyüklüğü herhangi durumda “standart kuvvet” $\beta_{ij}/\beta_0 = 1$ olarak alınabilir. A^{ij} çizgisinin

kuvveti ve işareti, yani β_{ij} veya daha elverişli olarak, β_{ij}/β_0 DEF de çizgi üzerine yazılır (Sinanoğlu, 1984e).

Genellikle bir DEF VP'lerin öz-enerjilerine $\alpha_i = \beta_{ii}$ ye karşılık gelen kulak çizgilerini (\bigcirc) de içerir. Eğer bunların tümü aynıysa veya çok yakınsa, o zaman bu "standart" $\{\alpha_i = \alpha_0\}$ kulakları DEF'in çiziminden atarız. Ayrıca DEF üzerinde bilinen çizit kuralları kullanılarak, nitel sonuçlardaki ihmal edilmiş herhangi bir ξ_i 'nin etkisi kolaylıkla ortaya çıkarılır (Sinanoğlu, 1984e).

1.4.2 Matematiksel Teoriye Giriş

DEF teorisinin türetilmesi doğrusal eşdeğişim (linear covariance (Sinanoğlu, 1984b)) ilkesine dayanır. Bu ilke nicem mekaniği ve nokta-öbek kuramı bilgisini gerektirir. Eşdeğişimsel olarak formüle edilmiş aynı nicem mekanik denklemler dik ve dik olmayan benzeş temel yapılara uygulanır ve bunlar genel doğrusal dönüşümler altında değişmezlerdir. Yukarıda söz edildiği gibi DEF, tek-eksicikli Hamilton işlerine karşılık gelir (Sinanoğlu, 1984e).

Doğrusal eşdeğişim ilkesinin soyut denklemi,

$$(h - \lambda I) | \Psi \rangle = 0 \quad (1.5)$$

dir. Buradaki birim işler eşdeğişimsel olarak şöyle yazılabilir (Sinanoğlu, 1992):

$$I = | e_{\mu} \rangle \langle e^{\mu} | \quad (1.6)$$

Burada V_n yöney uzayında (vektör uzayı) $\{ | e_{\mu} \rangle \}$ ler eşdeğişir (covariant) temel yöneyleridir ve $\{ | e^{\mu} \rangle \}$ ters değişir (contravariant) temel yöneyleri ölçüm gereyi (metric tensor) kullanılarak bulunur (Sinanoğlu, 1992).

$$|e^\mu\rangle = \Delta^{\mu\nu} |e_\nu\rangle \quad (1.7)$$

Burada ölçüm gereyi ise eşdeğişir yöneylerin çarpımı şeklinde tanımlanır:

$$\Delta_{\mu\nu} = \langle e_\mu | e_\nu \rangle . \quad (1.8)$$

Bu ölçüm gereyi birim dikey (ortonormal) değildir ve

$$\Delta^{\mu\nu} \Delta_{\nu\rho} = I^\mu{}_\rho \quad (1.9)$$

dir. Ölçüm gereyi hesaplanmış kaplaşım (overlap) düzeyi $S_{\mu\nu}$ dür. Yöneylerin doğrusal bağımsız olması için S in tersi var olmalı (S^{-1}) ve $|S| \neq 0$ olmalıdır. Burada

$$S^{-1} = \Delta^{\mu\nu} \quad (1.10)$$

dir. Eşdeğişim birim işleri kullanılarak (yani denklem 1.6' yı kullanarak), MO özdeğer ve özışlerlerin elde edilmesinden soyut denklem 1.5, denklem 1.11 olarak yazılır (Sinanoğlu, 1992).

$$(h_{\mu\nu} - \lambda \Delta_{\mu\nu})c^\nu = 0 \quad (1.11)$$

Bu denklem doğrusal dönüşümler altında değişmezdir. Ayrıca birim dikey (O.N) ve O.N. olmayan temel yapılar için doğrudur. Özdeğerler ise, sadece O.N.'den O.N.'e bir dönüşüm söz konusu ise değişmezdirler. Ama eğer dönüşüm O.N. değilse özdeğerler değişir fakat DBD değişmez ve denklem 1.11 düzeyler cinsinden şöyle yazılır (Sinanoğlu vd., 1994):

$$(h_{\mu\nu} - E_i S_{\mu\nu})c^\nu = 0 \quad (1.12)$$

1.5 Örüt Kuramına Giriş

Bir kimyasal tepkime örütü (network), bağlaşıklık tepkime adımlarının bir kümesidir. Adımlar işlergedeki (mechanism) öge tepkimelerdir. Adımlar, iki veya daha çok adımı ortak olan kimyasal türlerin, tepken ve ürünün birleştirilmesiyle bağlaşıklık hale getirilir. Tüm bu çeşit örütlerde adımları görünen tepkime (G.T.) olarak özetleyebiliriz (Sinanoğlu, 1975a).

Bir GT ve bunun gözlenen hız yasası verilsin. Bulunan işlergeler, çeşitli yolları tahmin etmeyi ve denemeyi içerir. Ayrıca biyokimyadaki özgenli (enzim) işlergelerde aynı zorluk vardır. Örütler veya işlergelerin her biri doğru hız yasasına gidecek şekilde yazılır. Bu hız yasaları genelde doğrusal olmayandır ve integre etmek zordur. Bununla birlikte bunların bazı genel özellikleri ve bunların tahmini çözümleri örüt kuramı ile araştırılabilir (Sinanoğlu, 1975a).

Örütler verildiğinde, bunların sürekli durumlarını (var olup olmadığı, kaç tane olduğu, vs.) ve böyle durumların kararlı özellikleri araştırılmalıdır. Çünkü kararlı özellikler, endüstride kimyasal tepkir denetiminde ve biyokimyada, özleştirül (metabolik) denetim ve ayar, biyolojik saatler vs. de çok önemlidir. Bazı mümkün örütler, yapay yollar veya işlergeler verildiğinde, problemler nicem mekaniğidir. Her bir yol ve her bir öge adım tepkime aratürler, ürün vs. kümesindeki tüm ögeciklerin göreceli koordinatları $\{R\}$ ile bir nicem düzeneğinde potansiyel enerji yüzeyi $U(\{R\})$ ye karşılık gelir. Şimdiye kadar olan yöntemlerde çoğunlukla bakışimli durumlarda önemli ilerleme olmuştur (Sinanoğlu, 1975a).

Ayrıca örüt kuramı ile DEF yöntemi arasında şöyle bir bağlantı vardır. DEF yöntemindeki Sündürmeli Eşdeğişim (deformational covariance) İlkesi (Sinanoğlu, 1984c) kullanılarak, eşiz(izomer) iki özdecik DEF'lerini (yani çizitlerini) sündürerek, DBD'si aynı kalmak koşuluyla, bir başka DEF'e geçilebiliyorsa, o zaman tepkime gerçekleşir. Bu şu demektir: Enerjinin en yüksek olduğu an (etkinleşme enerjisi) özdecik ilingesel olarak şekil değiştirir. Bu değişim sabit değildir. Sonra özdecik mümkün hale döner (Sinanoğlu, 1984e).

Temel kimyasal tepkime adımları, özdecikler arasındaki gerçek çarpışmalara karşılık geldiklerinden, ancak şu türlerden olabilirler:

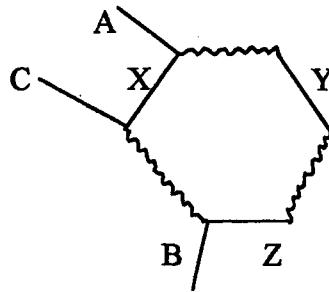
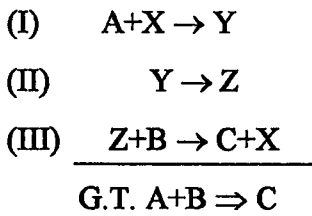
- 1) $A+X \rightarrow C$
- 2) $B \rightarrow C$
- 3) $A+B \rightarrow X+Z$

Çünkü ikiden fazla özdecığın aynı anda çarpışması olasılıklı değildir. Bu ana kural mümkün bütün işlgelerdeki adım sayısı ρ ve tür sayısı σ arasında bağlantılara yol açar (Sinanoğlu, 1975b).

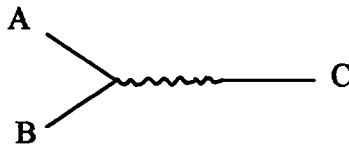
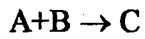
1.5.1 Bir Örutü Çizmek

Her işlgeyi bir örütü gösterebiliriz. Bunun için her kimyasal türün her bir molünü bir çizgi (—) ile, her bir tepkime adım oku ise bir dalgalı çizgi (~) ile gösterilir (Sinanoğlu, 1975a).

Örnek 1.7



Örnek 1.8



Tanım 1.7 : Örütte bazı tür-mol çizgileri birine değerler ve böylece bir çizgitop oluştururlar. Bu çizgitop iskelette *toknokta* denilen bir nokta olarak gösterilir (Sinanoğlu, 1975a).

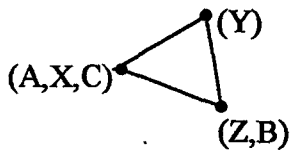
Tanım 1.8 : Tepkimeyi gösteren dalgalı çizgiler ise çizgitoptan çizgitopa gider. Bu da iskelette toknoktalar arasına çizilen bir çizgi veya eğridir (Sinanoğlu, 1975a).

Tanım 1.9 : Bir toknoktadan çıkan k tane çizgi bir k-yıldız oluşturur (Sinanoğlu, 1975a).
Örneğin,

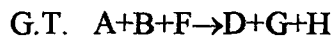
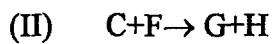
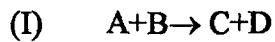


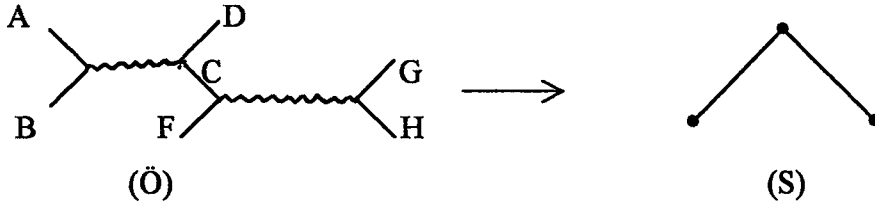
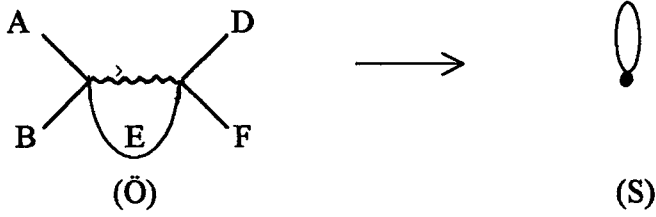
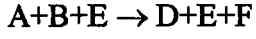
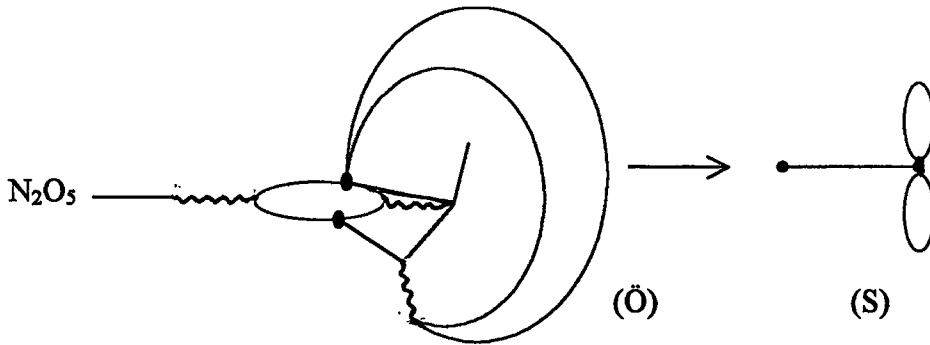
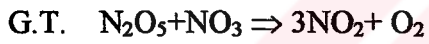
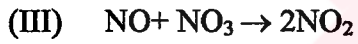
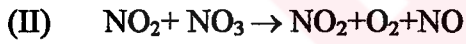
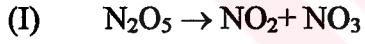
Örnek 1.11

Örnek 1.7'deki örüt iskelete aktarılsa, (A, X, C) birbirine değdikleri için, (Z, B) de birbirine değdikleri için ve (Y) birer çizgitop oluştururlar. Bunların her biri bir toknokta ile gösterilip, tepkime çizgileriyle birleştirilirse, aşağıdaki iskelet oluşur.



Örnek 1.12



**Örnek 1.13****Örnek 1.14**

Teorem 1. : ρ tane çizgiden oluşan S iskeletinde toknokta sayısı, r S'deki halka sayısı olmak üzere,

$$\gamma = \rho - r + 1$$

(1.14)




dır (Sinanoğlu, 1975a).

1.5.3 İskeletlerin Sınıflandırılması

Yukarıdaki (1.14) denklemini iskeletlerin sınıflandırılması imkanını verir. Saptanmış ρ ile her bir r , $S_{(\rho,r)}$ iskeletlerinin r -halka sınıfını tanımlar. Aynı r -halka sınıfındaki tüm iskeletler aynı γ ya sahiptir. Ancak tersi doğru değildir. Ayrıca verilen ρ için $\rho+1$ tane sınıf vardır. Örneğin, $\rho=2$ için 3 tane sınıf vardır.

Bir iskelettteki halka, o işlergede tezgenler özgenler veya zincirleme tepkimeler olduğunu gösterir (Sinanoğlu, 1993).

Çizelge 1.1 İskeletlerin sınıflandırılması

ρ	İskeletler
1	
2	
3	

1.5.4 Mümkün Türlerin Sayısı

Herhangi bir örüt için ρ 'su verilmiş çizgitoplarının mümkün sayısı denklem 1.16 ile verilmiştir. Aşağıda ρ 'su verilmiş tür-mol çizgilerinin ve türlerin sayısını veren σ için bazı denklemler verilmektedir.

$$\sum_{i \geq 1}^{\gamma} k_i = 2\rho \quad (1.15)$$

$$\sum_{i \geq 1}^{\gamma} \bar{w}_i = \sigma \quad (1.16)$$

Burada k_i bir toknoktadan çıkan çizgi sayısıdır. \bar{w}_i k-yıldızın ağırlığı olmak üzere, $k \geq 2$ için $\bar{w}_k = k-1, k, k+1$ ve sadece $k=1$ için $\bar{w}_1 = 1, 2$ dir (k-yıldız toknoktasının ağırlıkları) (Sinanoğlu, 1993).

Tahmini olarak, ρ adım sayısı verildiğinde ortalama mümkün tür sayısını bulabiliriz (Sinanoğlu, 1975a):

$$\bar{\sigma} = 2\rho \quad (1.17)$$



2. BİR ÇİZİTİN EN ALT VE EN ÜST ÖZDEĞERLERİNİ VEREN FORMÜLLERİN BULUNMASI

2.1 Bir Çizitin En Alt ve En Üst Özdeğerleri

Şu ana kadar olan bilgiler, bir özdecğin bağ-yapan(n_+), bağa-karşı(n_-) ve bağ-yapmayan (n_0) MO sayılarını verir. Biz biliyoruz ki; nicem kimyasında bu sayılar enerji düzeylerine karşılık gelir ve n_+ ne kadar büyükse, özdecik o kadar kararlıdır. Bunun için en üst ve en alt özdeğerleri basit kurallarla bulabilirsek, bazı özdeciklerin kararlılığı veya tepkimenin olabilirliği hakkında daha kesin bilgilere sahip olabiliriz.

Bunun için önce L.Mirsky' nin (Deutsch, 1978) bulduđu bir A dizeyinin en alt ve en üst özdeğeri arasındaki uzaklığı veren ve H. Yuan' a (Rojo, 1994) ait en alt özdeğeri veren üst sınır formülleri ile sözü edilen fikre ulaşılmaya çalışılacaktır.

Tanım 2.1 : A bir karmaşık dizey ve $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ bu dizeyin özdeğerleri olmak üzere, en üst ve en alt özdeğeri arasındaki S(A) aralığı şöyle tanımlanır (Deutsch, 1978):

$$S(A) = \max |\lambda_i - \lambda_j| \quad (2.1)$$

Ayrıca $\text{tr}(A)$ bu dizeyin izi ve $\|A\|_F$ de Frobenius normu (denk. 2.2) dur.

$$\|A\|_F = \left(\sum_{i,j} |a_{i,j}|^2 \right)^{1/2} \quad (2.2)$$

Bu verilenler ışığında, Mirsky'nin S(A) aralığının üst sınırını veren teoremi şöyledir (Deutsch, 1978):

Teorem 2.1 : A $n \times n$ boyutlu bir karmaşık dizey ve $n \geq 3$ olmak üzere,

$$S(A) \leq \left(2 \|A\|_F^2 - \frac{2}{n} |\text{tr}(A)|^2 \right)^{1/2} \quad (2.3)$$

dır. Denklem 2.3'ün eşitlik hali, ancak ve ancak A normal bir dizey ve A' nın (n-2) tane özdeğeri birbirine ve kalan iki tanesinin aritmetik ortalamasına eşitse, sağlanır.



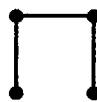
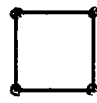
Çizitlerde kulaklar olmadığından asal köşegen elemanları sıfırdır. Yani $\text{tr}(A)=0$ dır. Ayrıca çizgi kuvvetleri de +1 ve çiziti temsil eden dizey bakışımı olduğundan, d kenar sayısı olmak üzere, (2.3) denklemi şu hali alır:

$$S(A) \leq (2 \|A\|_F^2)^{1/2} \Rightarrow S(A) \leq \sqrt{2} \|A\|_F, \quad \|A\|_F = \sqrt{2} d$$

$$S(A) \leq 2\sqrt{d} \quad (2.4)$$

Çizelge 2.1'de denklem 2.4 ile özdeğer aralığının gerçek değerinin ($S_g(A)$) karşılaştırılması; bazı çizitler üzerinde, o çizitleri temsil eden Hermit dizeylerinin özdeğerleri Mathematica 2.1 ile bulunarak, yapılmıştır.

Çizelge 2.1 $S_g(A)$ ile denklem 2.4 den elde edilmiş değerinin karşılaştırılması.

Çizit	Hermit Dizeyi	λ_i	$S_g(A)$	Denklem (2.4)
	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\lambda_1 = -1.41421$ $\lambda_2 = 0$ $\lambda_3 = 1.4142$	2.82843	$S(A) \leq 2.82843$
	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\lambda_1 = -1$ $\lambda_2 = -1$ $\lambda_3 = 2$	3	$S(A) \leq 3.4641$
	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\lambda_1 = -1.61803$ $\lambda_2 = -0.61803$ $\lambda_3 = 0.61803$ $\lambda_4 = 1.61803$	3.23607	$S(A) \leq 3.4641$
	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\lambda_1 = -2$ $\lambda_2 = 0$ $\lambda_3 = 0$ $\lambda_4 = 2$	4	$S(A) \leq 4$

Şu ana kadar denklem 2.4 ile üst sınır formülleri verilmiş ve bunlar çizitlere uygulanmıştır. Bu formüllerin hata çözümlemesi yapılarak, Hückel çizitleri için mutlak hatayı gösteren, Çizelge 2.2 elde edilir.

Çizelge 2.2 (2.4) denklemini için hata çözümlemesi

n	d	(2.4) denklemini	$S_g(A)$	$ S(A)-S_g(A) $
3	1	2.00000	2.00000	0.00000
3	2	2.82843	2.82843	0.00000
3	3	3.46410	3.00000	0.46410
4	1	2.00000	2.00000	0.00000
4	2	2.82843	2.82843	0.00000
4	3	3.46410	3.23607	0.22803
4	4	4.00000	4.00000	0.00000
5	1	2.00000	2.00000	0.00000
5	2	2.82843	2.82843	0.00000
5	3	3.46410	3.23607	0.22803
5	4	4.00000	3.46410	0.53589
5	5	4.47214	3.61803	0.85410
6	1	2.00000	2.00000	0.00000
6	2	2.82843	2.82843	0.00000
6	3	3.46410	3.23607	0.22803
6	4	4.00000	3.46410	0.53589
6	5	3.60388	4.47214	0.86826
6	6	4.89898	4.00000	0.89898
7	1	2.00000	2.00000	0.00000
7	2	2.82843	2.82843	0.00000
7	3	3.46410	3.23607	0.22803
7	4	4.00000	3.46410	0.53589
7	5	4.47214	3.60388	0.86826
7	6	4.89898	3.69552	1.20346
7	7	5.29150	3.80194	1.48956

Çizelge 2.2'nin Devamı

n	d	(2.4) denklemi	$S_g(A)$	$S(A)-S_g(A)$
8	1	2.00000	2.00000	0.00000
8	2	2.82843	2.82843	0.00000
8	3	3.46410	3.23607	0.22803
8	4	4.00000	3.46410	0.53589
8	5	4.47214	3.60388	0.86826
8	6	4.89898	3.69552	1.20346
8	7	5.29150	3.75877	1.53273
8	8	5.65685	4.00000	1.65685
9	1	2.00000	2.00000	0.00000
9	2	2.82843	2.82843	0.00000
9	3	3.46410	3.23607	0.22803
9	4	4.00000	3.46410	0.53589
9	5	4.47214	3.60388	0.86826
9	6	4.89898	3.69552	1.20346
9	7	5.29150	3.75877	1.53273
9	8	5.65685	3.80423	1.85262
9	9	6.00000	3.87939	2.12061



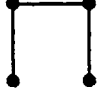

Burada, ayrıca en üst veya en alt özdeğeri veren bir formül daha gereklidir. Bu da H.Yuan'a ait (Rojo, 1994), $a_{ij}=1$, tüm $a_{ii}=0$ ve simetrik olan çizitin en büyük özdeğerini $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_n$ veren, herhangi birleştirilmiş (connected) bir çizit için verilmiş, üst sınırdır:

$$\lambda_1 \leq (2d-n+1)^{1/2} \quad (2.5)$$

Bu üst sınır da en alt özdeğer hakkında bilgi verir. Aşağıdaki Çizelge 2.3'de görüldüğü gibi, yine Mathematica 2.1 ile o çiziti temsil eden Hermit dizeyinin özdeğerleri bulunmuş ve denklem 2.5 ile karşılaştırılmıştır. Sonuç olarak iyi bir yaklaşıklıkla en alt özdeğer

hakkında bilgi sahibi olunur.

Çizelge 2.3 λ_i lerle denklem 2.5'in karşılaştırılması

Çizit	Hermit Dizeyi	λ_i	Denklem (2.5)
	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\lambda_1=1.41421$ $\lambda_2=0$ $\lambda_3=-1.4142$	$\lambda_1 \leq 1.41421$
	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\lambda_1=2$ $\lambda_2=-1$ $\lambda_3=-1$	$\lambda_1 \leq 2$
	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\lambda_1=1.61803$ $\lambda_2=0.61803$ $\lambda_3=-0.61803$ $\lambda_4=-1.61803$	$\lambda_1 \leq 1.73205$
	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\lambda_1=2$ $\lambda_2=0$ $\lambda_3=0$ $\lambda_4=-2$	$\lambda_1 \leq 2.23607$

Denklem 2.5 ile üst sınır formülleri verilmiş ve bunlar çizitlere uygulanmıştır. Hückel çizitleri için en alt özdeğerin (λ_1) hata çözümlemesi yapılırken, Çizelge 2.4 elde edilir.

(2.4) ve (2.5) denklemleri çizitlere uygulandıktan sonra, sıra bu uygulamalar sonunda ortaya çıkan sonuçları ve sonuç teoremleri ifade etmeye geldi.

Teorem 2.2 : Aynı tepe sayısına sahip çizitlerde çizgi sayısı arttıkça en alt özdeğer de büyür.

İspat:

Bunun ispatı çok basittir. (2.5) eşitsizliğinde, kenar sayısı x olmak üzere, x 'i birer birer artırarak d yerine koyarsak, en alt özdeğerin arttığını çok açık bir şekilde görürüz.

$$d=x \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 \leq (2x-n+1)^{1/2}$$

$$d=x+1 \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 \leq (2(x+1)-n+1)^{1/2} = (2x-n+3)^{1/2}$$

$$d=x+2 \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 \leq (2(x+2)-n+1)^{1/2} = (2x-n+5)^{1/2} \dots\dots\dots$$

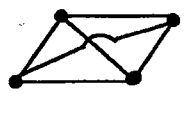
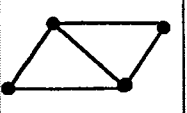
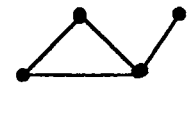

Çizelge 2.4 (2.5) denklemi için hata çözümlemesi

n	d	(2.5) denklemi (λ_1)	Gerçek en alt özdeğer (λ_g)	$ \lambda_1 - \lambda_g $
3	2	1.41420	1.41421	0.00001
3	3	2.00000	2.00000	0.00000
4	3	1.73205	1.61803	0.11402
4	4	2.23607	2.00000	0.23607
5	4	2.00000	1.73205	0.26795
5	5	2.44940	2.00000	0.44940
6	5	2.23607	1.80194	0.43413
6	6	2.00000	2.00000	0.64575
7	6	2.44949	1.84776	0.60163
7	7	2.82843	2.00000	0.82843
8	7	2.64575	1.87939	0.76636
8	8	3.00000	2.00000	1.00000
9	8	2.82843	1.90211	0.92632
9	9	3.16228	2.00000	1.16228

Örnek 2.1

Aşağıdaki çizelgede görüldüğü gibi, $n=4$ tepeli çizitlerde kenar sayıları arttıkça en alt özdeğer artar (Bkz. Çizelge 2.5).

Çizelge 2.5 Aynı ye sahip $n=4$ tepeli çizitler







			
d=6	d=5	d=4	d=3
$\lambda_1=3.000$ $\lambda_2=-1.000$ $\lambda_3=-1.000$ $\lambda_4=-1.000$	$\lambda_1=2.562$ $\lambda_2=0.000$ $\lambda_3=-1.000$ $\lambda_4=-1.562$	$\lambda_1=2.170$ $\lambda_2=0.311$ $\lambda_3=-1.000$ $\lambda_4=-1.480$	$\lambda_1=1.618$ $\lambda_2=0.618$ $\lambda_3=-0.618$ $\lambda_4=-1.618$

Sonuç 2.1 : Teorem 2.2'nin sonucu olarak, $n=n_++n_0+n_-$ olduğuna göre, aynı DBD ye sahip çizitlerin de, kendi aralarında, kenar sayıları arttıkça en alt özdeğerleri atar (Çizelge 2.6).

Örnek 2.2

Burada sonuç 2.1 için bir örnek verilmektedir.

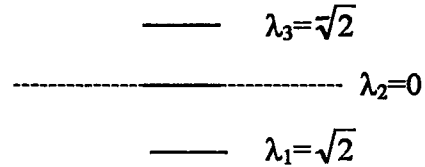
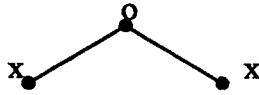
Çizelge 2.6 Aynı DBD ye sahip $n=4$ tepeli çizitler

$n=4, \text{DBD}=\{n_+=1, n_0=2, n_-=1\}$			$n=4, \text{DBD}=\{n_+=2, n_0=0, n_-=2\}$		
					
$d=4$	$d=2$	$d=1$	$d=4$	$d=3$	$d=2$
$\lambda_1=2.000$	$\lambda_1=1.414$	$\lambda_1=1.000$	$\lambda_1=2.170$	$\lambda_1=1.618$	$\lambda_1=1.000$
$\lambda_2=0.000$	$\lambda_2=0.000$	$\lambda_2=0.000$	$\lambda_2=0.311$	$\lambda_2=0.618$	$\lambda_2=1.000$
$\lambda_3=0.000$	$\lambda_3=0.000$	$\lambda_3=0.000$	$\lambda_3=-1.000$	$\lambda_3=-0.618$	$\lambda_3=-1.000$
$\lambda_4=-2.000$	$\lambda_4=-1.414$	$\lambda_4=-1.000$	$\lambda_4=-1.480$	$\lambda_4=-1.618$	$\lambda_4=-1.000$

2.2 Atlamalı Çizitler için Özel Durumlar

Çiziti temsil eden $n \times n$ boyutlu A Hermit dizeyinin özdeğerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_n$ olsun. Çizit atlamalı ise $n_+=n_-$ ve en üst özdeğerin sıfır noktasıyla arasındaki uzaklık ile en alt özdeğerin sıfır noktasıyla arasındaki uzaklık bir birine eşittir. Yani $|\lambda_1| = |\lambda_n| = \lambda$ dir

Örneğin,



$\lambda_1 = \sqrt{2}, \lambda_2 = 0, \lambda_3 = -\sqrt{2}$, $\text{DBD} = \{n_+=1, n_-=1, n_0=1\}$ ve $|\lambda_1| = |\lambda_3|$ dir.

İspat :

$|\lambda_1| = |\lambda_n| = \lambda$ alınsın ve (2.1) denkleminde, gerçek $S(A) = |\lambda_1 - \lambda_n| = 2\lambda$ olur. (2.5)

denkleminin her iki tarafı 2 ile çarpılırsa,

$$2\lambda_1 \leq 2(2d-n+1)^{1/2} \Rightarrow 2\lambda \leq 2(2d-n+1)^{1/2}$$

$$\Rightarrow S(A) \leq 2(2d-n+1)^{1/2} \Rightarrow S(A)^2 \leq 4(2d-n+1)$$

$$S(A)^2 \leq 2.4d-4n+4 \quad (2.6)$$

bulunur ve (2.4) denkleminin her iki tarafının da karesini alırsak,

$$S(A)^2 \leq 4d \quad (2.7)$$

eşitsizliğini elde ederiz. Şimdi (2.6) ve (2.7) denklemlerini taraf tarafa çıkaralım:

$$0 \leq 4d-4n+4 \Rightarrow 0 \leq d-n+1$$

$$d \geq n-1 \quad (2.8)$$

elde edilir. (2.8) denklemini kullanarak,

$$2(2d-n+1)^{1/2} = 2(2d-(n-1))^{1/2} \geq 2(2d-d)^{1/2} = 2\sqrt{d}$$

sonucuna varılır. O halde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_n$, $\lambda_1 \leq (2d-n+1)^{1/2}$ ve $n-1 \leq d$ olmak üzere,

$$2(2d-n+1)^{1/2} \geq 2\sqrt{d} \quad (2.9)$$

dir. Yani, atlamalı çizitlerde (2.4) ve (2.5) denklemleri arasında

$$2\lambda_1 \geq S(A) \quad (2.10)$$

eşitsizliği geçerlidir.

2.3 Kulaklı Çizitler için $S(A)$ Aralığının Belirlenmesi

Kulaklı çizitlerde, çiziti temsil eden Hermit dizeyinin köşegen elemanları sıfırdan farklı olacaktır. Bu yüzden (2.3) denklemi yeniden düzenlenmelidir.

Eğer kulak kuvvetleri ($|\xi_i| \neq 1$) ise:

$$S(A) \leq \left(4.d + 2. \sum_{i=1}^n |\xi_i|^2 - \frac{2}{n} \left| \sum_{i=1}^n \xi_i \right|^2 \right)^{1/2} \quad (2.11)$$

Eğer kulak kuvvetleri ($|\xi_i| = 1$) ise:

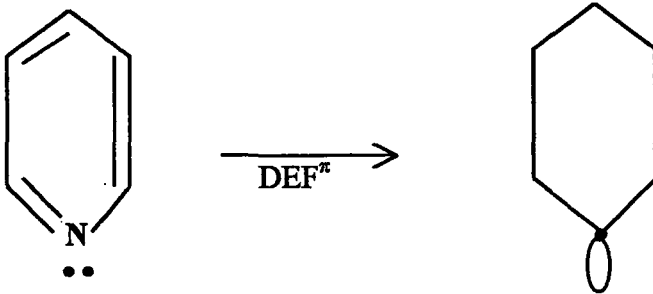
d : kenar sayısı, k : kulak sayısı olmak üzere,

$$S(A) \leq \left(4.d + 2.k - \frac{2}{n} k^2 \right)^{1/2} \quad (2.12)$$

(2.12) denkleminin özel bir hali olur.

Örnek 2.3

Yapısal formülü aşağıdaki gibi olan aşağıdaki özdecik alınsın.



Bu DEF^π 'nin $DBD = \{n_+ = 3, n_0 = 0, n_- = 3\}$ dür. Bu çiziti temsil eden Hermit dizeyinin özdeğerleri ise $\{2.27841, 1.31743, 1, -0.70462, -1, -1.89122\}$ dir. Denklem 2.12' den

$S(A) \leq 5.06623$ bulunur. Aralığın gerçek değeri ise, $S_g(A) = 4.16963$ olur. Burada mutlak hata 0.89659 olarak bulunur. Hatanın mertebesi $O(10^{-1})$ dir.

Örnek 2.4

n -gen'ler ele alınsın. Bu n -gen'lerin her bir köşesinde 1 kuvvetinde kulaklar yer alsın. Bu durumda kenar ve nokta sayısına ($n=k=d$) göre 3-gen den 9-gen'e kadar olan n -genlerin denklem 2.12'ye göre $S(A)$ 'ları şöyledir:

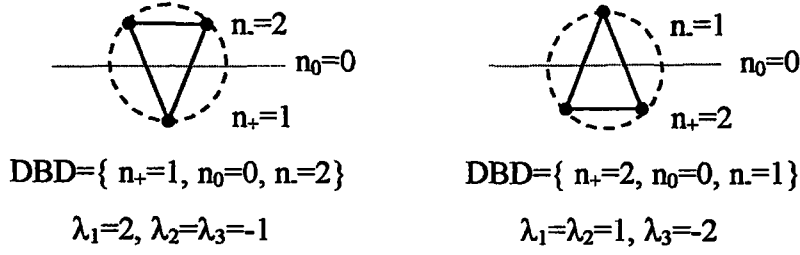
n	$S(A)$	$S_g(A)$	$ S(A) - S_g(A) $
3	3.46410	3.00000	0.46410
4	4.00000	4.00000	0.00000
5	4.47214	3.61803	0.85411
6	4.89898	4.00000	0.89898
7	5.29150	3.80194	1.48956
8	5.65685	4.00000	1.65685
9	6.00000	3.87939	2.12061

2.4 Hückel ve Möbius Çizitleri için Özel Durumlar

Teorem 2.3 : n -gen şeklindeki çizitlerde kenar sayısı tek olduğunda, Hückel durumundaki DBD Möbius durumunda ters döner.

İspat:

Frost-Musulın Algoritmasına (Sinanoğlu, 1988b) göre; Hückel de çizitin köşesi aşağı gelecek şekilde, Möbius da ise çizitin kenarı aşağıya gelecek şekilde yarıçapı 2 olan bir çemberin içine çizitler yerleştirilirse,



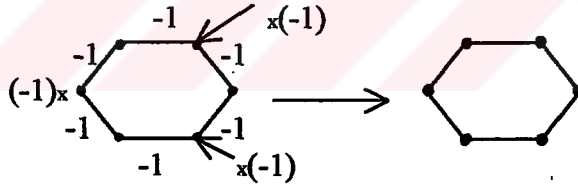
bulunur.

Bu teoreme göre n -gen şeklindeki çizitlerde kenar sayısı tek olduğunda, Hückel durumundaki çizitlerin DBD'si Möbius durumunda ters döndüğüne göre; denklem 2.4, Teorem 2.3'ü sağlayan Möbius çizitleri için de kullanılır.

Sonuç 2.2 : Tüm kenarları -1 olan n -gen çizitlerde, çift kenar sayılı olanlar Hückel durumuna indirgenir.

Örnek 2.5

Sonuç 2.2 de sözü edilen durum için örnek, Şekil 2.1 ile verilebilir.



Şekil.2.1

2.5 Çizit Sınıf Sayısının Üst Sınırının Bulunması

Bilindiği gibi, aynı DBD'ye sahip çizitler aynı eşdeşlik sınıfına aittirler. O halde n tepeli bir çizitin en fazla kaç tane eşdeşlik sınıfı olabilir?. $DBD = \{n_+, n_0, n_-\}$ ve $n = n_+ + n_0 + n_-$ şeklinde idi.

Bu n_+, n_0, n_- sayıları 0 ile n arasında tamsayılardır. Bu sayıların toplamı bize n 'i vereceğine göre, bu sayıların toplamlarının kaç değişik şekilde yazılabileceği bulunmalıdır.

Buna göre; bu sayıların toplamlarının kaç türlü olacağı denklem 2.3 ile bulunur.

$$\begin{array}{l}
 n_+ = 0, \quad n_0 = 0, 1, \dots, n, \quad n_- = n, n-1, \dots, 0 \quad \Rightarrow n+1 \text{ tane} \\
 n_+ = 1, \quad n_0 = 0, 1, \dots, n-1, \quad n_- = n-1, n-2, \dots, 0 \quad \Rightarrow n \text{ tane} \\
 n_+ = 2, \quad n_0 = 0, 1, \dots, n-2, \quad n_- = n-2, n-3, \dots, 0 \quad \Rightarrow n-1 \text{ tane} \\
 \vdots \\
 n_+ = n-1, \quad n_0 = 0, 1, \quad n_- = 1, 0 \quad \Rightarrow 2 \text{ tane} \\
 n_+ = n, \quad n_0 = 0, \quad n_- = 0 \quad \Rightarrow 1 \text{ tane}
 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} n_+ = 0 \\ n_+ = 1 \\ n_+ = 2 \\ \vdots \\ n_+ = n-1 \\ n_+ = n \end{array}} \right\} \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad (2.13)$$

Bu formül kulaklı çizitleri ve Möbius durumundaki çizitleri de içeren sınıflar için bir üst sınır oluşturur.

Kulakları içermeyen çizitlerde $\text{tr}(A)=0$ olduğundan $n_+=0$ veya $n_-=0$ ları içeren DBD oluşmaz. Ancak aşikar çözüm olan $\text{DBD}=\{0, n, 0\}$ vardır.

Bu yüzden yukarıda bulduğumuz üst sınırdan kulaklı çizitlerin sayısını kolaylıkla çıkartırız. O halde bunların sayısı,

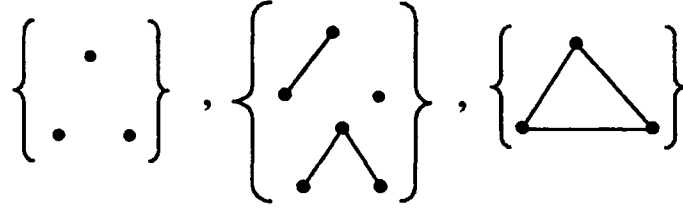
$$\begin{array}{l}
 n_+ = 0, \quad n_0 = 0, \dots, n-1, \quad n_- = n, \dots, 1 \quad \Rightarrow n \text{ tane} \\
 n_+ = n, \dots, 1, \quad n_0 = 0, \dots, n-1, \quad n_- = 0 \quad \Rightarrow n \text{ tane}
 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} n_+ = 0 \\ n_+ = n, \dots, 1 \end{array}} \right\} 2n \quad (2.14)$$

dır. Bundan dolayı yukarıda bulunan tüm sınıfların üst sınırını içeren formülden $2n$ tane kulaklı çizit atılacaktır. O zaman kulaksız çizitler için sınıfların sayısını veren üst sınır

$$s(\text{DBD}) \leq \frac{(n+1)(n+2)}{2} - 2n \quad (2.15)$$

olacaktır.

Örnek 2.6



Şekil 2.2

Bu örnekte Şekil 2.2' de görüldüğü gibi gerçekte $n=3$ tepeli kulaksız Hückel çizitleri için 3 tane çizit sınıfı vardır ($\{0,3,0\}$, $\{1,1,1\}$, $\{1,0,2\}$).

$n=3$ tepeli çizit sınıflarının DBD'si aşağıdaki gibi en fazla 10 şekilde yazılabilmektedir. Bunların içinden kulaklı olanları atarsak (yanlarında x işareti olanlar), yani $n_+=0$ veya $n_-=0$ olanları atarsak,

$\{n_+, n_0, n_-\}$	$\{n_+, n_0, n_-\}$	$\{n_+, n_0, n_-\}$	$\{n_+, n_0, n_-\}$
$\{0,3,0\}$ aşikar	$\{1,1,1\}$	$\{1,0,2\}$	$\{1,2,0\}$ x
$\{3,0,0\}$ x		$\{2,0,1\}$	$\{0,2,1\}$ x
$\{0,0,3\}$ x			$\{2,1,0\}$ x
			$\{0,1,2\}$ x

geriye $\{0,3,0\}$, $\{1,1,1\}$, $\{1,0,2\}$, $\{2,0,1\}$ kalır.

$$s(\text{DBD}) \leq \frac{(n+1)(n+2)}{2} - 2n = \frac{(3+1)(3+2)}{2} - 2 \cdot 3 = 4$$

bulunur. Yani $n=3$ tepeli bir çizitin en fazla 4 tane çizit sınıfı olur. Bu bulunan sayının içinde Möbius durumunda olanlar da vardır. Bu yüzden (2.15) denklemi sadece üst sınırı veren bir denklemdir.

3. BİLGİSAYAR YAZILIMININ ANLATILMASI

3.1 Amaç

Çok daha basit bir şekilde özdeciğin kararlılığı ya da tepkimenin olabilirliği konusunda önceden fikir yürütmeyi sağlayan DEF, bir özdecik veya tepkime ürünlerinin toplam bağ-yapan (n_+), bağa-karşı (n_-) ve bağ-yapmayan (n_0) yörünge sayılarını çizitlerle bularak özdeciğin kararlılığını, tepkimenin olabilirliğini önceden kestirmektedir.

İşte { n_+ , n_0 , n_- } sayılarını, yani enerji düzeylerini, bulmak için, Değer-Bağ ve MO yöntemlerini kullanarak hesaplamak çok uzun işlemler gerektirir. Hesaplamaların yapılması, DEF kuramının nicel kısmını göstermek amacını taşır. Doğal olarak işlemlerin uzunluğu bir bilgisayar yazılımı yapılması gereğini doğurmuştur.

Bu bilgisayar yazılımının yapısı ilk olarak Oktay Sinanoğlu, Matt Hastings ve Joe Alia tarafından hazırlandı (Sinanoğlu vd, 1994). HAO bilgisayar yazılımı EHT (Hoffmann, vd) çıktılarını alır ve zayıf olan AO EHT temelini melez AO temeline dönüştürür ve kaplaşım (overlap) düzeyini ($S_{\mu\nu}$), Hamilton düzeyini ($h_{\mu\nu}$) melez AO temelinde hesaplar.

Bu bilgisayar yazılımının WIN95 ortamında MSFORTRAN 4.0'a uyarlaması yapılırken, MSFORTRAN 4.0'ın "Standard Graphics" özelliği kullanıldı. EHT'ye verilecek giriş dosyaları daha önceleri silikon grafik bilgisayarlarda saatler süren hesaplamalarla elde ediyorlardı. Şimdi ise, bu giriş dosyaları HyperChem 1.0 ile çok kısa sürede elde edilerek, zamandan oldukça tasarruf edilmiştir. HyperChem Windows ortamında çalışan bir paket bilgisayar yazılımıdır. HyperChem'den elde edilen çıkış dosyasını istenilen şekle getirip, bu dosyaya eklenecek diğer bilgileri de sorarak EHT ye ilk giriş dosyasını oluşturan CEVIR.FOR isimli bilgisayar yazılımı yazıldı. Ayrıca DEF'in resminin çizildiği grafik kısmı tamamlanıp, bilgisayar yazılımının akışını hızlandıracak ve iyileştirecek düzenlemeler yapıldı ve gerekli olan alt programlar yazılarak, eklendi.

3.2 Yazılımın Çalışmasının Anlatılması

HAO bilgisayar yazılımını çalıştırmak için bunun bir giriş dosyasına ihtiyacı vardır. Bu giriş dosyası, EHT bilgisayar yazılımı tarafından oluşturulur. Ayrıca EHT yazılımı da bir giriş dosyasına ihtiyaç duyar.

EHT ye gereken giriş dosyasını hazırlamak için HyperChem 1.0 kullanılır. Bu

1. **Adım:** Özdeciğin yapısal formülü (SF) çizilir.
2. **Adım:** *File* seçeneğinden *Start Log* ile X.LOG dosyası açılır.
3. **Adım:** *Setup* dan *Molecular Mechanics* ve buradan da *MM+* yöntemi seçilir.
4. **Adım:** *Compute* den *Geometry Optimization* seçilerek, özdeciğin en iyi geometrisi hesaplanır.
5. **Adım:** İstenen hassaslıkta hesaplanmışsa 6. adımdan devam edilir. Aksi halde hassaslığı değiştirip tekrar hesap yapmak için 4.adıma dönülür.
6. **Adım:** Yine *Setup* dan *Semi-empirical* ve buradan da *Extended Hückel* yöntemi seçilir.
7. **Adım:** *Compute* den *Single Point* i seçerek, yörünge enerjisi hesaplanır.
8. **Adım:** *File* dan *Stop Log* seçilerek, X.LOG dosyası kapatılır.
9. **Adım:** HyperChem'den çıkılır.

şeklinde çalıştırılır (bkz. Akış Şeması I). Sonuçta elde edilen X.LOG dosyasında çizilen ve hesaplamaları yapılan özdecik ile ilgili; toplam enerjisi, enerji düzeyleri, AO'lara eksicik dağılımı, öğecik sıra numarası, öğecik numarası, yükü ve x,y,z koordinatları (bunlar a.u. cinsindedir) vb... kaydedilmiştir.

Şimdi CEVIR.FOR u aşağıdaki şekilde çalıştırıp, X.LOG dosyasını EHT ye giriş dosyası düzenine getiririz (bkz. Akış Şeması II).

1. **Adım:** Özdeciğin adını, H'lerin sayısını, ağır öğeciklerin sayısını ve özdeciksel yük bilgilerini ekrandan alır.
2. **Adım:** EHT için hesaplama yöntemi seçilir.

3. **Adım:** EHT'nin çıkış dosyasında istenilenlere uygun IPRINT bilgisi girilir (bu HAO bilgisayar yazılımı için en az 0 (sıfır) olmalıdır).
4. **Adım:** Hückel sabiti ekrandan girilir.
5. **Adım:** X.LOG dosyasını okumak, X.INP dosyasını da bilgileri yazmak için açar.
6. **Adım:** x,y,z koordinatlarını X.LOG dosyasından okur, Å e çevirir
7. **Adım:** İlk girilen bilgileri, Å e çevrilmiş x,y ve z' leri X.INP dosyasına yazar .
8. **Adım:** İki dosya da kapatılarak, CEVIR.FOR bitirilir.

Oluşturulan X.INP dosyası aşağıdaki gibi EHT'ye verilir:

```
C:\> EHT < X.INP
```

EHT'nin çalıştırılması sonucunda OUTPUT isimli bir çıkış dosyası elde edilir. Dosyaların neyi ifade ettiğinin anlaşılması için ve bir sonraki hesaplamadan da OUTPUT isimli bir dosya oluşacağından, bu dosyanın adı X.OUT şeklinde değiştirilir (bkz. Akış Şeması III).

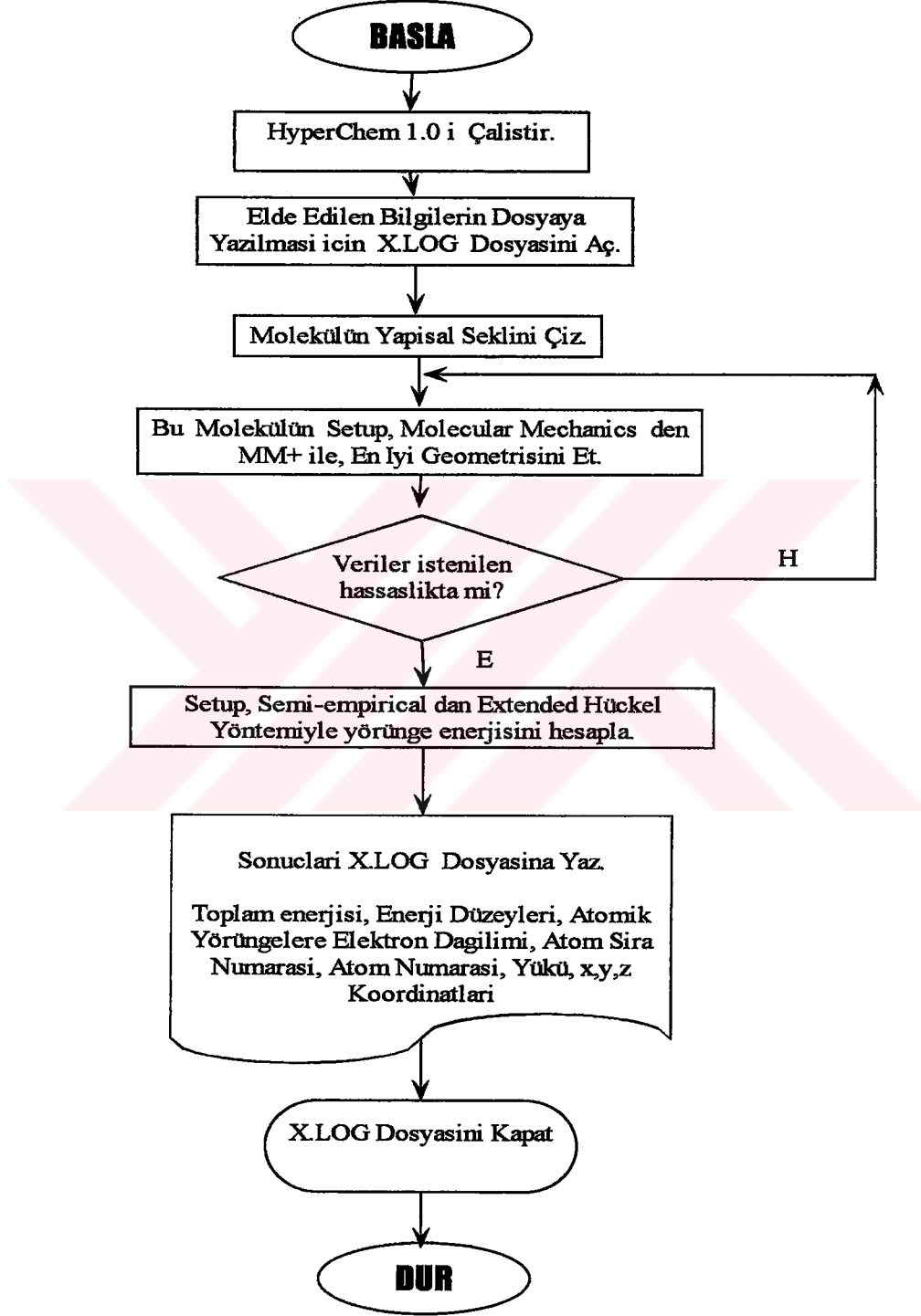
HAO bilgisayar yazılımı, önce EHT'den çıkan dosyanın adını sorar (X.OUT). Ayrıca eğer çalışmanın sonunda elde edilen bilgilerin bir dosyaya yazılması istenirse, X.HAO dosyası yazılmak üzere açılır. X.OUT dosyası, HAO için bir giriş dosyasıdır. Bu dosyadan özdeciğin geometrisi, kaplaşım düzeyi ($S_{\mu\nu}$), enerji düzeyleri (E_i), MO'lar ve AO'lar (ϕ_i) okunup, Hamilton düzeyi ($h_{\mu\nu}$) $S_{\mu\nu}$ ye orantılı şekilde oluşturulur.

$$h_{\mu\nu} \approx \frac{\alpha_\mu + \alpha_\nu}{2} S_{\mu\nu} \quad (3.1)$$

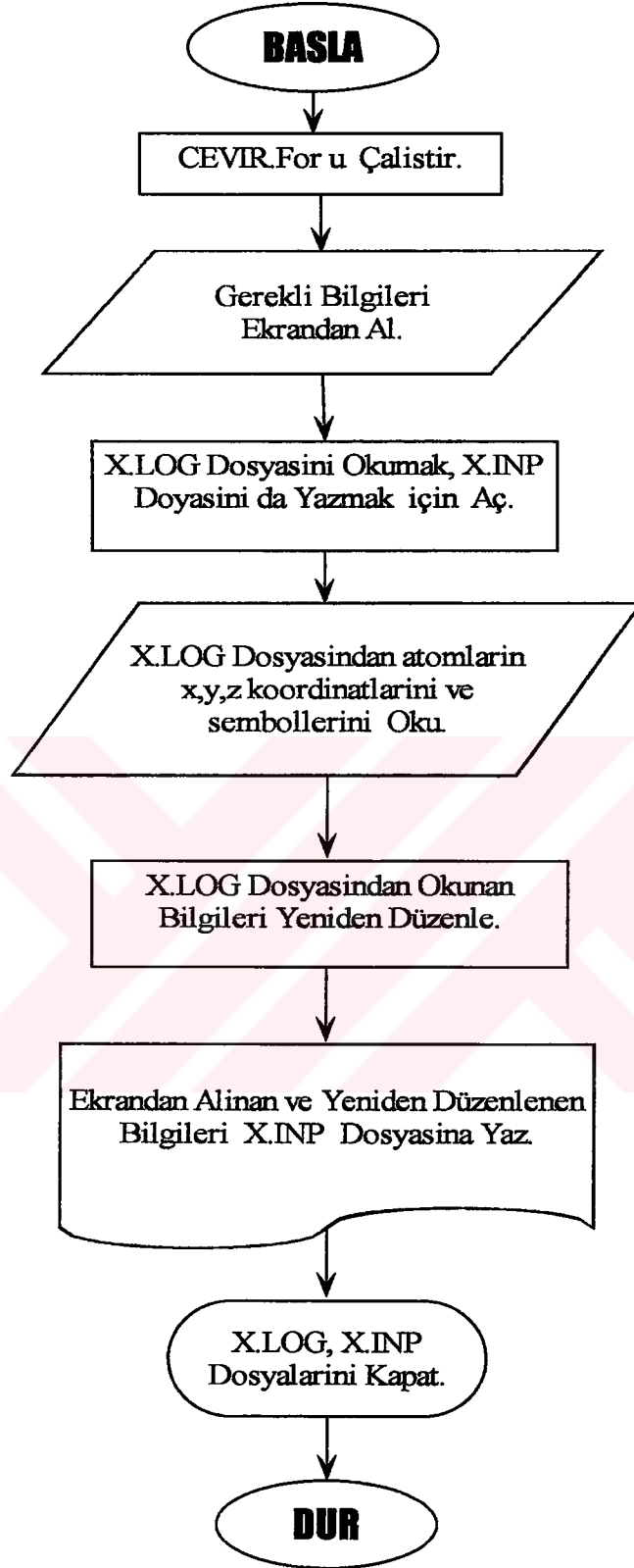
ve bu düzeyin özdeğerleri bulunur (HAO için $\{E_i\}$).

Daha sonra melezlenecek öğeciklerin sıra numaralarını, ya o öğeciğe ait melezleme düzeyini girmeyi ya da standart melezleme düzeyini belirlemeniz için melezleme türünü girmeyi bekler. Melezleme türü; $n_a=4$ için $sp/ sp^2 /sp^3$ ve $n_a=9$ için $sp/ sp^2 /sp^3/dsp^2 /d^2sp^3$ dür. Bunlardan biri seçildikten sonra melezleme düzeyi (\tilde{T}) oluşur. Daha sonra seçilen melezlenecek öğeciklerin hangi öğeciklere yönlendirileceğini ekrandan okuyarak,

melezleme düzeyi (\tilde{T}) bu öğeciklere göre döndürülür. Bu düzey ile melezlenmiş kaplaşım düzeyi ($S_{\mu\nu}^{(HAO)}$), melezlenmiş Hamilton düzeyi ($h_{\mu\nu}^{(HAO)}$), melezlenmiş MO ları (η_i) bulur.



Şekil 3.1 Akış Şeması I



Şekil 3.2 Akış Şeması II

Artık sıra DEF'e karşılık gelen Hamilton dizeyi sadeleştirilmeye gelir.

$$\bar{h}_{\mu\nu} = h_{\mu\nu} - \alpha S_{\mu\nu} \quad (\alpha:\text{ortalama, sabit}) \quad (3.2)$$

$$\bar{E}_i = E_i - \alpha \quad (3.3)$$

α =ortalama ise.

$$\bar{h}_{\mu\nu} = h_{\mu\nu} - (\text{ortalama})S_{\mu\nu}, \quad (3.4)$$

$$\bar{E}_i = E_i - \text{ortalama} \quad (3.5)$$

α =sabit ise.

$$\bar{h}_{\mu\nu} = h_{\mu\nu} - (\text{sabit})S_{\mu\nu} \quad (3.6)$$

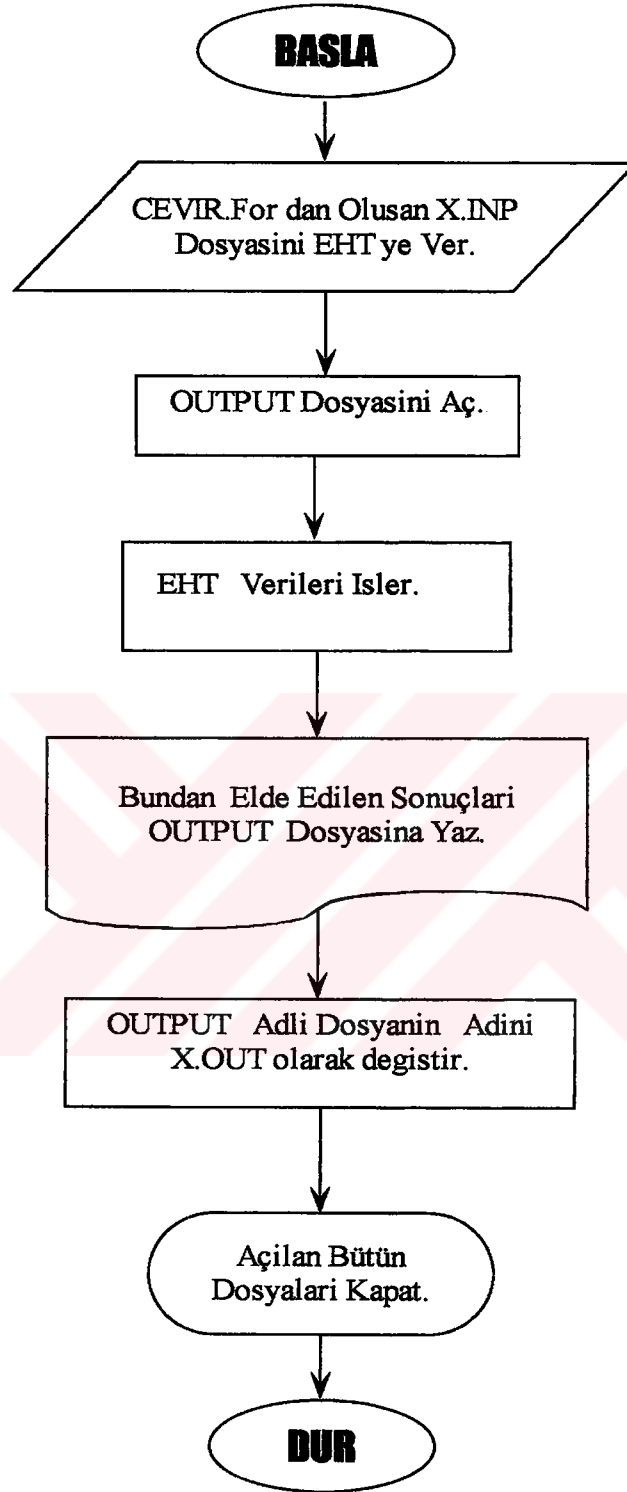
$$\bar{E}_i = E_i - \text{sabit} \quad (3.7)$$

veya hiçbir deęişiklik yapmaz (yani, $\bar{h}_{\mu\nu} = h_{\mu\nu}$). Üçünden her hangi biri yeni $\bar{h}_{\mu\nu}$ oluşturur. Bu oluşan $\bar{h}_{\mu\nu}$ bize VP'ler arasındaki çizgi kuvvetlerini verir.

Şimdi en yakın olmayan komşuların ihmal edilip edilmeyeceęi sorularak, kuvveti zayıf olan çizgiler $\bar{h}_{\mu\nu}$ 'den silinir. Yani DEF resminden atılır. Yine girilen bir b için ögecik-içi çizgilerin deęişmeden kalması istenirse, o zaman

$$|\bar{h}_{\mu\nu}| < |b| \quad (3.8)$$

olacak şekilde $\bar{h}_{\mu\nu} = 0$ alınırsa, (3.2) denklemini



Şekil 3.3 Akış Şeması III

$$h_{\mu\nu} = (\alpha) S_{\mu\nu} \quad (\alpha: \text{ortalama veya sabit}) \quad (3.9)$$

olur ve bu çizgiler de DEF resminden atılır.

Son olarak bilgisayar yazılımı bize öğecik-içi VP-VP' çizgi kuvvetlerini yeniden girme imkanı verir. Artık son şekli ile elde edilen $\bar{h}_{\mu\nu}$ ye karşılık gelen DEF resmi çizilir.

DEF resmi, xy-düzlemine izdüşürülerek çizilecektir. Ayrıca z ve y eksenleri etrafında döndürme açıları sorulur. Bilgisayar yazılımı bize istenirse, çizilen DEF resmini iyileştirme imkanı sunar. Bunun için ya öğeciklerin yeni yerleri pixel olarak (ekran 800x600 dür) tekrar ekrandan alınır ya da özdeciğin resmi, z ve y eksenini etrafında döndürme açıları tekrar girilerek döndürülür. Bu işlemler aşağıdaki seçeneklerden biri seçilerek yapılır.

- 1- Öğeciklerin yeni yerlerini girer
- 2- Resmi tekrar döndürür
- 3- Resmi hiç değiştirmeden işleme devam eder

Böylece DEF resmini güzelleştirebiliriz ve işleyişe kalınan yerden devam etmek için 3 seçeneği seçilir.

Elde edilen sadeleşmiş $\bar{h}_{\mu\nu}$ dizeyinin kulaklı ve kulaksız (asal köşegen elemanlarının sıfır olması durumu) hallerinin özdeğerlerini ($\{E_i^{EHTD}\}$) buluruz. Kulaklı ve kulaksız özdeğerlerinin ikisinin de bulunma sebebi, herhangi bir değerlik noktasının öz-enerjisinin etkisini görmektir. Bu özdeğerler ise bize $DBD = \{n_+, n_0, n_-\}$ yi verir.

Bilgisayar yazılımı bütün bu bilgileri oluşturduktan sonra, istenilen çıkış bilgilerini de belirleme imkanını aşağıdaki seçeneklerle sunar.

- 1) Uzaklık Dizeyi
- 2) AO' da Kaplaşım Dizeyi
- 3) Melezlenmiş AO'da Kaplaşım Dizeyi

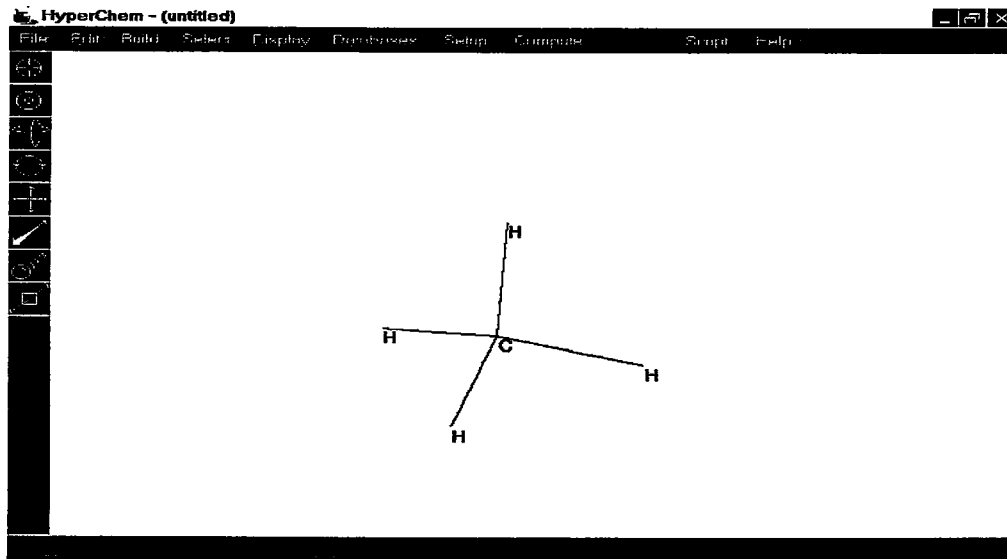
- 4) AO'da Hamilton Dizeyi
- 5) Melezlenmiş AO'da Hamilton Dizeyi
- 6) Kulaklı VIF Sadeleştirmelerini içeren Hamilton Dizeyi
- 7) Kulaksız VIF Sadeleştirmelerini içeren Hamilton Dizeyi
- 8) $\bar{h}_{\mu\nu} = h_{\mu\nu} - \alpha S$
- 9) Satırlarda AO'lar, Sütünlarda MO'lar
- 10) Satırlarda Melezlenmiş AO'lar, Sütünlarda Melezlenmiş MO'lar
- 11) Ei (EHT), Ei (HAO), Ei (EHT)-alfa, EHTD (kulaklı) ve EHTD (kulaksız)

Yukarıdaki bilgilerden hangisinin çıkış dosyasında olması ya da ekranda görülmesi isteniyorsa, onların sıra numaraları peş peşe girilir (0 girilene kadar). Bu bilgiler, yazılımın çalışması sırasında başta adı verilen, çıkış bilgilerinin kaydedileceği dosyaya (X.HAO) veya ekrana yazılır.

Aynı özdecik üzerinde yeni bir melezleme yapılmak isteniyorsa, yazılımın akışı melezlenecek öğeciklerin seçildiği kısma dönerek, yukarıda anlatıldığı gibi çalışmasını sürdürür. Eğer devam etmek istenmiyorsa, yazılımın çalışması sona erer.

3.3 Yazılımın Çalışmasının Bir Örnek Üzerinde Anlatılması

Öncelikle çalışmanın birebir örnek üzerinde anlatılması amacını bozmamak için, yazılımın çalışması, basit bir özdecik olan metan (CH_4) üzerinde anlatılacaktır.



Şekil 3.4

Önce HyperChem çalıştırılır ve yukarıdaki gibi HyperChem'de metan özdeciğinin yapısal formülü çizilir (Şekil 3.4). *File* seçeneğinden *Start Log* ile CH4.LOG dosyası açılır. *Setup* dan *Molecular Mechanics* ve buradan da *MM+* yöntemi seçildikten sonra *Compute* den *Geometry Optimization* seçilerek, özdeciğin en iyi geometrisi hesaplanır. Yine *Setup* dan *Semi-empirical* ve buradan da *Extended Hückel* seçeneği seçilir. *Compute* den *Single Point* seçilerek, yörünge enerjisi hesaplanır. *File* dan *Stop Log* ile CH4.LOG dosyası kapatılır. HyperChem den çıkılır (bkz. Akış Şeması I).

Artık elimizde içinde yapısal formülü çizilen ve hesaplamaları yapılan özdecik ile ilgili CH4.LOG dosyası vardır:

```
HyperChem log start -- Wed Jan 20 14:06:09 1999.
Geometry optimization, MolecularMechanics, molecule = CH4.HIN
mmplus
PolakRibiere optimizer
Energy=0.000000 Gradient=0.000000 Converged=YES (3 cycles 12 points).
Bond=4.15014e-020 Angle=6.23669e-008 Dihedral=0 Vdw=0 Stretch-bend=0
Electrostatic=0.
Single Point, SemiEmpirical, molecule = CH4.HIN
ExtendedHuckel
Extended-Huckel Calculation:
Singlet State Calculation
Number of Electrons = 8
Starting Extended-Huckel calculation with 8 orbitals
Charge on the System = 0
Total Orbitals = 8
Number of Double Occupied Levels = 4
Unweighted Huckel Constant = 1.7500000
d Orbitals on Si...Cl If Any Not Included
Energy=-3276.056703

----- RESULTS -----

Sum of One-Electron Energies = -3276.0567028 (kcal/mol)
Sum of One-Electron Energies = -5.220892277 (a.u.)

EIGENVALUES (eV)
-24.492725 -15.512505 -15.512505 -15.512504 3.741031
3.741033 3.741035 29.382591

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS
1.253170 0.955319 0.955319 0.955319 0.970218
0.970218 0.970218 0.970218

NET CHARGES ANE COORDINATES
Atom Z Charge Coordinates (a.u.)
x y z
1 6 -0.119127 -0.14448 0.31179 0.00000
2 1 0.029782 -0.14449 2.41505 0.00000
3 1 0.029782 1.83849 -0.38930 0.00000
4 1 0.029782 -1.13596 -0.38930 1.71732
5 1 0.029782 -1.13598 -0.38931 -1.71730
Alpha: Orbital Index = 1 Orbital Energy = -24.492725 (eV)
HyperChem log stop -- Wed Jan 20 14:18:13 1999.
```

CEVIR.FOR çalıştırılınca, aşağıdaki şekilde akışı takip edilebilir. CH4.LOG dosyası okunarak EHT'ye giriş dosyası oluşturulur (bkz. Akış Şeması II). Önce özdeciğin adını ve EHT için gereken diğer bilgileri okur.

```
Molekülün Adı (ab)?
METAN (CH4)
Hidrojen Atomlarının Sayısı (Nh) ?
4
Ağır Atomların Sayısı (Na) ?
1
Moleküler Yük (ka) ?
0
```

Daha sonra EHT bilgisayar yazılımı için belirtilen hesaplama yöntemlerinden biri seçilir.

```
0. Extended Huckel Calculation
1. Extended Huckel Calculation with charge iteration
   according to H(i,i)=H0(i,i)+(sense)*(charge)
2. Extended Huckel Calculation with charge iteration
   according to H(i,i)=-VSIE(Q)
3. Extended Huckel Calculation as in method 3 with
   inclusion of a Madelung potential correction term
Hesaplama Yöntemini girin (0/1/2/3)=>
0
```

Şimdi ise, çıkış dosyasında nelerin bulunması isteniyorsa, ona uygun olan IPRINT değişkeni girilir. Ayrıca Hückel sabiti de girilmelidir.

CIKIS DOSYASINDA ISTENILENLER	IPRINT parametresi						
	2	1	0	-1	-2	-3	-4
1) Coordinates, Parameters	X	X	X	X	X	X	X
2) Overlap integrals deleted	X	X	X	X	X	X	X
3) Distance matrix	X	X	X	X	X	X	X
4) Overlap matrix	X	X	X	X	X	X	X
5) Madelung parameters	X	X	X	X	X		
6) Input hamiltonian matrix	X						
7) Hamiltonian matrix for next cycle	X						
8) Energy Levels	X	X	X	X	X		
9) Total Energy	X	X	X	X	X		
10) Wave functions	X	X	X	X			
11) Density matrix	X						
12) Overlap population matrix	X	X					
13) Reduced overlap population matrix	X	X	X				
14) Complete charge matrix	X	X					
15) Reduced charge matrix	X	X	X				
16) Net charges and populations	X	X	X				
17) Energy matrix	X						
18) Reduced energy matrix	X	X	X				
19) Energy partitioning	X						
20) Reduced energy partitioning	X	X					

```
Print Level i girin (-4/-3/-2/-1/0/1/2)=>
0
Huckel sabitini giriniz==>
1.75
```

Son olarak da HyperChem'den çıkan dosya adını (CH4.LOG) ve EHT'ye vereceğimiz giriş dosyası adını (CH4.INP) sorar.

```
HyperChem den Cikan dosya adi:
CH4.LOG
EHT ye Verecegimiz Giris Dosyasi Adi:
CH4.INP
```

Bunların isimleri girildikten sonra, CH4.LOG dosyasını okumak ve CH4.INP dosyasını da düzenlenen bilgileri yazmak için açar. Özdeğin adını, EHT için gerekli değişirgenleri, öğecik sembollerini, x,y,z koordinatlarını CH4.LOG dosyasından okur, x,y,z'leri Å'e çevirerek, CH4.INP dosyasına yazar. En sonunda iki dosya da kapatılarak, CEVIR.FOR bitirilir. Ve sonuçta aşağıdaki CH4.INP dosyası oluşur:

```
METAN (CH4)
 4 1 0 0 0 00000 1.75
   -.355736 1.373060 .000000
   .695249 -.113245 .000000
  -.881215 -.113245 .910180
  -.881226 -.113250 -.910169
  -.355731 .258327 .000000
C
```

Oluşturulan CH4.INP dosyası aşağıdaki gibi EHT.EXE 'ye verilir (bkz Akış Şeması III) :

```
C:\> EHT < CH4.INP
```

EHT' nin çalışması bittiğinde, EHT OUTPUT isimli bir çıkış dosyası yaratır. Bu dosyanın adı, Kısım 3.2 de belirtilen nedenlerden dolayı, CH4.OUT şeklinde değiştirilir ve aşağıdaki gibidir (EHT nin değişirgenleri vs. hakkında daha fazla bilgi (Hoffmann, vd) kaynağında bulunabilir).

```
METAN (CH4)
Extended Hueckel calculation
input geometry
Atom      x      y      z      |      S      |      P
          n      exp      coul      n      exp      coul
H 1      -.356  1.373  .000  1      1.300  -13.600
H 2      .695  -.113  .000  1      1.300  -13.600
H 3     -.881  -.113  .910  1      1.300  -13.600
H 4     -.881  -.113  -.910  1      1.300  -13.600
C 5     -.356  .258  .000  2      1.625  -21.400  2      1.625  -11.400
Charge = 0      iprint = 0      Hueckel constant = 1.750
```

Distance matrix

	1	2	3	4	5
1	.0000	1.8203	1.8203	1.8203	1.1147
2	1.8203	.0000	1.8203	1.8204	1.1147
3	1.8203	1.8203	.0000	1.8203	1.1147
4	1.8203	1.8204	1.8203	.0000	1.1147
5	1.1147	1.1147	1.1147	1.1147	.0000

Overlap matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1387	.1387	.1387	.4786	.0000	.4828	.0000
2	.1387	1.0000	.1387	.1387	.4786	.4552	-.1609	.0000
3	.1387	.1387	1.0000	.1387	.4786	-.2276	-.1609	.3942
4	.1387	.1387	.1387	1.0000	.4786	-.2276	-.1609	-.3942
5	.4786	.4786	.4786	.4786	1.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.4552	-.2276	-.2276	.0000	1.0000	.0000	.0000
7	.4828	-.1609	-.1609	-.1609	.0000	.0000	1.0000	.0000
8	.0000	.0000	.3942	-.3942	.0000	.0000	.0000	1.0000

starting main calculations

Results of calculation METAN (CH4)

Energy levels (eV)			
E(1) =	29.09368	.0000	E(5) = -15.51159 2.0000
E(2) =	3.66881	.0000	E(6) = -15.51160 2.0000
E(3) =	3.66869	.0000	E(7) = -15.51161 2.0000
E(4) =	3.66858	.0000	E(8) = -24.48785 2.0000

Sum of one-electron energies = -142.04528635 eV.

Wave Functions

MO's in columns, AO's in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6864	.0296	-.3728	.9647	-.4816	.2424	.0362	.1697
2	.6864	.6980	.7572	-.0987	-.0094	-.3600	-.4030	.1697
3	.6864	.2169	-.7583	-.6695	.3812	.3704	-.0981	.1697
4	.6864	-.9445	.3739	-.1965	.1099	-.2528	.4648	.1697
5	-1.5540	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.6458
6	.0000	-.8194	-.7327	-.2580	-.1796	-.2950	-.4131	.0000
7	.0000	-.0323	.4068	-1.0527	-.4799	.2415	.0361	.0000
8	.0000	-.7761	.7566	.3162	.1655	.3802	-.3435	.0000

Reduced overlap population matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5
1	.6418	-.0380	-.0380	-.0380	.7718
2	-.0380	.6418	-.0380	-.0380	.7718
3	-.0380	-.0380	.6418	-.0380	.7718
4	-.0380	-.0380	-.0380	.6418	.7718
5	.7718	.7718	.7718	.7718	2.5737

Reduced charge matrix, MO's in columns, atoms in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.3135	.0006	.0929	.6224	.6228	.1578	.0035	.1865
2	.3135	.3259	.3835	.0065	.0002	.3479	.4360	.1865
3	.3135	.0315	.3846	.2998	.3900	.3682	.0258	.1865
4	.3135	.5966	.0935	.0258	.0324	.1716	.5801	.1865
5	.7461	1.0455	1.0455	1.0455	.9545	.9545	.9545	1.2539

Atom Net chg.

Atomic orbital occupation for given MO occupation

	S	Px	Py	Pz	Dx ² -y ²	Dz ²	Dxy	Dxz	Dyz
H 1	.029	.971							
H 2	.029	.971							
H 3	.029	.971							
H 4	.029	.971							
C 5	-.117	1.254	.955	.955	.955				

Reduced energy matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5
1	-8.7279	.9050	.9050	.9050	-18.7203
2	.9050	-8.7279	.9050	.9050	-18.7204
3	.9050	.9050	-8.7279	.9050	-18.7204
4	.9050	.9050	.9050	-8.7278	-18.7204
5	-18.7203	-18.7204	-18.7204	-18.7204	-37.6823

Bu dosya da HAO bilgisayar yazılımı için bir giriş dosyasıdır. Şimdi sıra metan için HAO'yu çalıştırmaya geldi :

```
Ayrıntili sorular ister misiniz? <E/H>
H
```

Eğer bu soruya yanıt "E" olsaydı, o zaman bazı sorulardan önce o soruları açıklayan açıklamaları görmek mümkün olacaktı.

```
EHT nin cikis dosyasinin adini giriniz.
CH4.OUT
Sonuclarin kaydedilecegi dosya adini giriniz.
Kaydetmek istemiyorsanız, <enter> a basınız. ==>
CH4.HAO
METAN

Daha hassas hesaplama yapmak istiyorsanız x,y, ve z
degerlerinin bulunduđu dosyanin adini girin.
Istemiyorsanız, <enter> a basın. ==>

Atom sembolleri,sira numaralari, x,y ve z koordinatlari
H 1 -.3560 1.3730 .0000
H 2 .6950 -.1130 .0000
H 3 -.8810 -.1130 .9100
H 4 -.8810 -.1130 -.9110
C 5 -.3560 .2580 .0000

Melezlenecek her bir atomun sıra numarasini giriniz.
Cikis icin <0> girin==>
5
0
5 atomu icin
Mezleme dizeyini siz mi gireceksiniz? <E/H>.
Siz girmeyecekseniz, bunun icin soracagi melez
türünü belirleyin.
H
```

Eğer yanıtınız "E" ise $n_a \times n_a$ boyutunda melezleme dizeyi girilmelidir. Dizeyi girdikten sonra işleyiş, seçilen melezlenecek öğecik için bu dizeyin ekranda görüntülemesi ile devam eder.

```
5 atomu icin sp,sp2,sp3 veya melezleme yapılmayacak
(Yok) seceneklerinden birini sp/sp2/sp3/Y den
birini yazarak seciniz sonra <enter> a basınız ==>
sp3
5 atomu icin dörtüzlü melezleme dizeyi
.5000 .8660 .0000 .0000
.5000 -.2887 .8165 .0000
.5000 -.2887 -.4082 .7071
.5000 -.2887 -.4082 -.7071
Muz baglari yapan atomlari girecek misiniz?<E/H>
H
```

Bu melez hangi atomlara yöneltilsin?
 Yöneltilecek atom ikilisini virgülle ayırarak girin==>
 1,2
 5 atomu için döndürülmüş melezleme düzeyi
 .5000 .0000 .8660 .0000
 .5000 .8165 -.2887 .0000
 .5000 -.4082 -.2887 -.7071
 .5000 -.4082 -.2887 .7071
 Hamilton düzeyini sadeleştirmek ister misiniz? <E/H>
 E

Eğer yanıt "H" olsaydı, aşağıdaki sadeleştirmeleri yapmadan doğrudan DEF resmini çizmeye geçer ve Şekil 3.5 de görülen DEF resmini çizer.

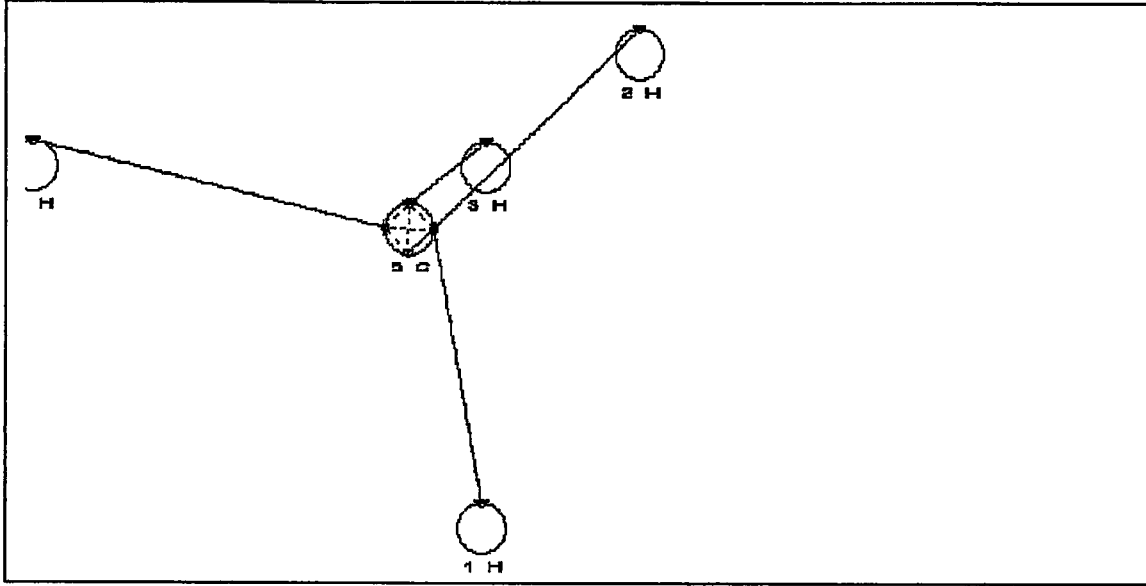
Tüm köşegen elemanlarından ortalamayı (O) çıkarır veya girilen bir sabiti (S) çıkarır veya hiç bir değişiklik yapmaz.
 Bu işlemler için, O/S/Herhangi bir karakter giriniz==>
 O

Burada girilenler "O", "S" den hariç bir karaktere basılırsa (hatta "o" ve "s" ye bile), Hamilton düzeyde hiç bir değişiklik yapmaz.

Ortalamayı köşegenden çıkarıyor.
 $h'uv = huv - (\text{ortalama}) * \text{Suv}$
 Ortalama = -13.748960 eV
 En yakın olmayan komsulara ait VIF çizgileri ihmal edilsin mi? <E/H>
 E
 Tüm çizgi kuvveti ($\text{abs}(huv')$), $\text{abs}(b)$ den küçükse huv' sıfır sayılacaktır ve VIF resminde görülmeyecektir.
 Şimdi bu yi giriniz==>.
 0
 Tüm atomici çizgiler değişmeden kalacak mı? <E/H>
 E
 AŞAĞIDAKİ DİZEY DEĞERLİK NOKTALARI ARASINDAKİ ÇİZGİLERİN KUVVETİNİ VERİR. ÖRNEĞİN CH₄ MOLEKÜLÜ İÇİN İLK DÖRT ATOM HİDROJENE, 5.ATOM İSE KARBONA AİTTİR. BU YÜZDEN CH₄ İÇİN DİZEYDE İLK DÖRT YÖRÜNGE HİDROJENE, 5-8 ARASINDAKİLER İSE KARBONA AİTTİR.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1488	.0000	.0000	.0000	-7.4356	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.1499	.0000	.0000	.0000	-7.4331	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.1506	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4326
4	.0000	.0000	.0000	.1498	.0000	.0000	-7.4345	.0000
5	-7.4356	.0000	.0000	.0000	-.1524	-2.4984	-2.5000	-2.4999
6	.0000	-7.4331	.0000	.0000	-2.4984	-.1483	-2.5002	-2.5000
7	.0000	.0000	.0000	-7.4345	-2.5000	-2.5002	-.1508	-2.4990
8	.0000	.0000	-7.4326	.0000	-2.4999	-2.5000	-2.4990	-.1476

Bir atomici çizgiyi değiştirmek için, çizginin 2 uc noktasını ve yeni çizgi kuvvetini giriniz.
 Çıkmak için <0,0,0> giriniz ==>
 0,0,0
 VIF in resmini görmek ister misiniz? <E/H>
 E
 Molekül xy-düzlemine izdüşürülecektir.
 Bu önce döndürülmelidir.
 z eksenini etrafında döndürme acisini girin ==>
 15
 y eksenini etrafında döndürme acisini girin ==>
 45



Yukarıda görüldüğü gibi DEF resmi ekranda görülür. Şimdi bu resmin ekrandaki yerleri değiştirilerek, daha güzel çizilecektir.

Eğer VIF resmini daha iyi çizmek isterseniz,
Ya atomların ekrana yazıldıkları yerlerini değiştirmelisiniz
(Ekran pixel olarak 800x600 dur) ya da resmi tekrar
döndürmelisiniz.

O halde aşağıdakilerden birini seçin.

- 1- Atomların yeni yerlerini girer
- 2- Resmi tekrar döndürür
- 3- Resmi hiç değiştirmeden işleme devam eder

Seçiminiz ? [1-3]

1

Atom sıra numarası, pixel(x), pixel(y)

1	379	475
2	509	101
3	382	190
4	7	190
5	319	239

Atomun sıra numarasını giriniz.(çıkış için <0>)==>

1

1 için iki tane pixel numarası giriniz==>

600

150

Atomun sıra numarasını giriniz.(çıkış için <0>)==>

2

2 için iki tane pixel numarası giriniz==>

600

450

Atomun sıra numarasını giriniz.(çıkış için <0>)==>

3

3 için iki tane pixel numarası giriniz==>

200

150

Atomun sıra numarasını giriniz.(çıkış için <0>)==>

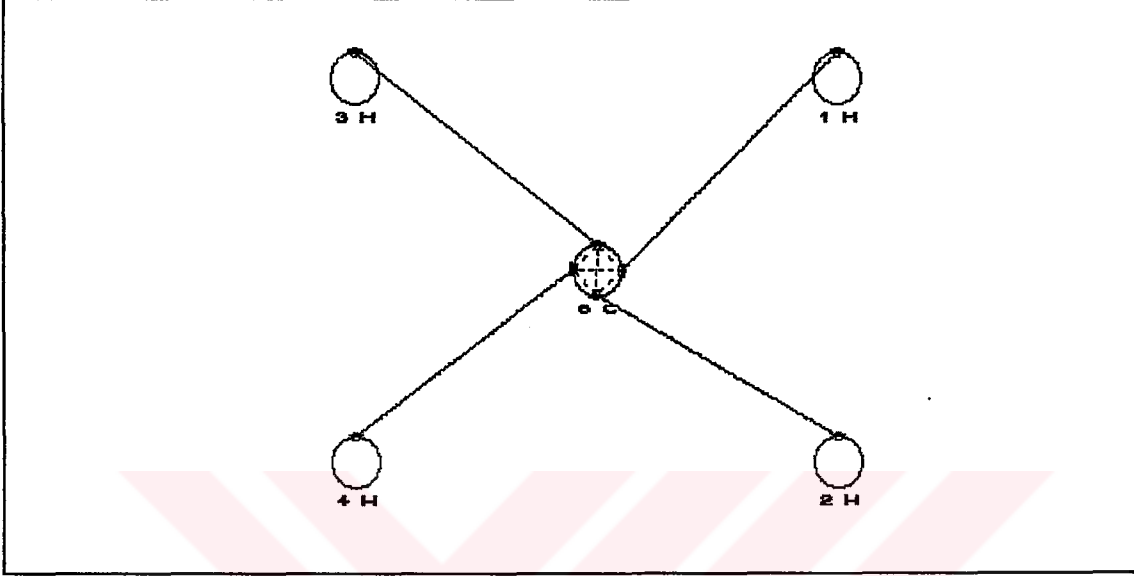
4

4 için iki tane pixel numarası giriniz==>

200

450

```
Atomun sıra numarasini giriniz.(cikis icin <0>)==>
5
5 icin iki tane pixel numarasini giriniz==>
400
300
Atomun sıra numarasini giriniz.(cikis icin <0>)==>
0
```



Şeklinde yeni DEF resmi çizilmiş olur.

Eğer VIF resmini daha iyi çizmek isterseniz,
Ya atomların ekrana yazıldıkları yerlerini değiştirmelisiniz
(Ekran pixel olarak 800x600 dur) ya da resmi tekrar
döndürmelisiniz.

0 halde aşağıdakilerden birini seçin.

- 1- Atomların yeni yerlerini girer
- 2- Resmi tekrar döndürür
- 3- Resmi hiç değiştirmeden işleme devam eder

Seçiminiz ? [1-3]

3

Tekrar resmindeki öğeciklerin yeni yerleri girilebilir, resim döndürülebilir. Burada "3" seçilerek, işleme devam edilmiştir.

Şimdi elde edilen sonuçlar bir dosyaya ya da ekrana yazılır. Her elde edilen sonuç işe yaramayabilir. Bunun için istenilen bilgilerin görülebilmesi için elde edilenlerden oluşan bir listeden bu istekler seçilir. Böylece istenilen bilgiler, eğer bir dosya adı girilmişse hem dosyaya hem de ekrana, eğer bir dosya adı girilmemişse de sadece ekrana yazılır.

Dosyaya kısa bir aciklama ekleyebilirsiniz.
 Lütfen aciklamayi giriniz(girmeyecekseniz <enter> a basin).
 BU DOSYADA MELEZ ATOMU 1,2 H ATOMLARINA YONELTTIM.
 Asagidakilerden herhangi birini görüntüleyip/kayit edebilirsiniz.
 Lütfen görmek istediklerinizin numarasini giriniz.

- 1) Uzaklik Dizeyi
- 2) AO da Overlap Dizeyi
- 3) Melezlenmis AO da Overlap Dizeyi
- 4) AO da Hamilton Dizeyi
- 5) Melezlenmis AO da Hamilton Dizeyi
- 6) Kulakli VIF Sadelestirmelerini iceren Hamilton Dizeyi
- 7) Kulaksiz VIF Sadelestirmelerini iceren Hamilton Dizeyi
- 8) $h'=h-(\text{alfa})\cdot S$
- 9) Satirlarda AO lar, Sütünlarda MO lar
- 10) Satirlarda Melezlenmis AO lar, Sütünlarda Melezlenmis MO lar
- 11) Ei(EHT), Ei(HAO), Ei(EHT)-alfa, EHTD(kulakli) ve EHTD(kulaksiz)

CIKIS icin <0> giriniz.

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
0

Uzaklik Dizeyi (ang.)

	1	2	3	4	5
1	.0000	1.8203	1.8203	1.8203	1.1147
2	1.8203	.0000	1.8203	1.8204	1.1147
3	1.8203	1.8203	.0000	1.8203	1.1147
4	1.8203	1.8204	1.8203	.0000	1.1147
5	1.1147	1.1147	1.1147	1.1147	.0000

Devam etmek icin <enter> a basiniz.

AO da Overlap dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1387	.1387	.1387	.4786	.0000	.4828	.0000
2	.1387	1.0000	.1387	.1387	.4786	.4552	-.1609	.0000
3	.1387	.1387	1.0000	.1387	.4786	-.2276	-.1609	.3942
4	.1387	.1387	.1387	1.0000	.4786	-.2276	-.1609	-.3942
5	.4786	.4786	.4786	.4786	1.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.4552	-.2276	-.2276	.0000	1.0000	.0000	.0000
7	.4828	-.1609	-.1609	-.1609	.0000	.0000	1.0000	.0000
8	.0000	.0000	.3942	-.3942	.0000	.0000	.0000	1.0000

Devam etmek icin <enter> a basiniz.

:

:

Farkli bir melezleme yapmak ister misiniz?<E/H>

H

Eğer yanıt "E" olursa, melezlenecek öğecik sıra numarasının girildiği yere dönülüp, aynı işleyiş tekrar eder. Sonuçta yukarıdaki işleyişe göre CH4.HAO isimli dosya elde edilir.

Tüm bilgilerin dosyada olması istendiğinden CH4.HAO aşağıdaki gibidir.

METAN

Atom sembolleri, sıra numaraları, x, y ve z koordinatları

H	1	-.3560	1.3730	.0000
H	2	.6950	-.1130	.0000
H	3	-.8810	-.1130	.9100
H	4	-.8810	-.1130	-.9100
C	5	-.3560	.2580	.0000

5 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

5 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	.0000	.8660	.0000
.5000	.8165	-.2887	.0000
.5000	-.4082	-.2887	-.7071
.5000	-.4082	-.2887	.7071

Ortalamayı köşegenen çıkarıyor.

$h'_{uv} = h_{uv} - (\text{ortalama}) * S_{uv}$

Ortalama = -13.748960 eV

h_{VIF} de en yakın olmayan komşular arası çizgiler ihmal edildi.

Tüm atom içi çizgiler .0000 küçük olacak şekilde $S_{uv} * (\text{ortalama})$ ya esitlenmiştir.

Atom içi çizgileri değişmedi.

BU DOSYADA MELEZ ATOMU 1,2 H ATOMLARINA YONELTİLDİ.

Uzaklık Dizeyi (ang.)

	1	2	3	4	5
1	.0000	1.8203	1.8203	1.8203	1.1147
2	1.8203	.0000	1.8203	1.8204	1.1147
3	1.8203	1.8203	.0000	1.8203	1.1147
4	1.8203	1.8204	1.8203	.0000	1.1147
5	1.1147	1.1147	1.1147	1.1147	.0000

AO da Overlap dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1387	.1387	.1387	.4786	.0000	.4828	.0000
2	.1387	1.0000	.1387	.1387	.4786	.4552	-.1609	.0000
3	.1387	.1387	1.0000	.1387	.4786	-.2276	-.1609	.3942
4	.1387	.1387	.1387	1.0000	.4786	-.2276	-.1609	-.3942
5	.4786	.4786	.4786	.4786	1.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.4552	-.2276	-.2276	.0000	1.0000	.0000	.0000
7	.4828	-.1609	-.1609	-.1609	.0000	.0000	1.0000	.0000
8	.0000	.0000	.3942	-.3942	.0000	.0000	.0000	1.0000

Melezlenmiş AO da Overlap Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1387	.1387	.1387	.6574	.0999	.0999	.0999
2	.1387	1.0000	.1387	.1387	.1000	.6574	.0999	.0999
3	.1387	.1387	1.0000	.1387	.1000	.0999	.0999	.6574
4	.1387	.1387	.1387	1.0000	.1000	.0999	.6574	.0999
5	.6574	.1000	.1000	.1000	1.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0999	.6574	.0999	.0999	.0000	1.0000	.0000	.0000
7	.0999	.0999	.0999	.6574	.0000	.0000	1.0000	.0000
8	.0999	.0999	.6574	.0999	.0000	.0000	.0000	1.0000

AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.6001	-3.2999	-3.3006	-3.3019	-14.6534	.0011	-10.5629	.0010
2	-3.2999	-13.5991	-3.3001	-3.3006	-14.6517	-9.9568	3.5211	.0000
3	-3.3006	-3.3001	-13.5983	-3.3004	-14.6515	4.9780	3.5196	-8.6228
4	-3.3019	-3.3006	-3.3004	-13.5992	-14.6531	4.9786	3.5202	8.6238
5	-14.6534	-14.6517	-14.6515	-14.6531	-21.3974	.0006	-.0012	.0012
6	.0011	-9.9568	4.9780	4.9786	.0006	-11.3971	.0011	-.0009
7	-10.5629	3.5211	3.5196	3.5202	-.0012	.0011	-11.4012	-.0006
8	.0010	.0000	-8.6228	8.6238	.0012	-.0009	-.0006	-11.3992

Melezlenmiş AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.6001	-3.2999	-3.3006	-3.3019	-16.4744	-4.2766	-4.2786	-4.2772
2	-3.2999	-13.5991	-3.3001	-3.3006	-4.2765	-16.4719	-4.2775	-4.2774
3	-3.3006	-3.3001	-13.5983	-3.3004	-4.2777	-4.2772	-4.2768	-16.4713
4	-3.3019	-3.3006	-3.3004	-13.5992	-4.2780	-4.2778	-16.4732	-4.2773
5	-16.4744	-4.2765	-4.2777	-4.2780	-13.9013	-2.4984	-2.5000	-2.4999
6	-4.2766	-16.4719	-4.2772	-4.2778	-2.4984	-13.8972	-2.5002	-2.5000
7	-4.2786	-4.2775	-4.2768	-16.4732	-2.5000	-2.5002	-13.8998	-2.4990
8	-4.2772	-4.2774	-16.4713	-4.2773	-2.4999	-2.5000	-2.4990	-13.8966

h'=h-(alfa)*S

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1488	-1.3930	-1.3936	-1.3949	-7.4356	-2.9027	-2.9047	-2.9033
2	-1.3930	.1499	-1.3931	-1.3936	-2.9022	-7.4331	-2.9038	-2.9037
3	-1.3936	-1.3931	.1506	-1.3934	-2.9034	-2.9035	-2.9029	-7.4326
4	-1.3949	-1.3936	-1.3934	.1498	-2.9037	-2.9041	-7.4345	-2.9034
5	-7.4356	-2.9022	-2.9034	-2.9037	-.1524	-2.4984	-2.5000	-2.4999
6	-2.9027	-7.4331	-2.9035	-2.9041	-2.4984	-.1483	-2.5002	-2.5000
7	-2.9047	-2.9038	-2.9029	-7.4345	-2.5000	-2.5002	-.1508	-2.4990
8	-2.9033	-2.9037	-7.4326	-2.9034	-2.4999	-2.5000	-2.4990	-.1476

VIF(kulakli) e Karşılık Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1488	.0000	.0000	.0000	-7.4356	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.1499	.0000	.0000	.0000	-7.4331	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.1506	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4326
4	.0000	.0000	.0000	.1498	.0000	.0000	-7.4345	.0000
5	-7.4356	.0000	.0000	.0000	-.1524	-2.4984	-2.5000	-2.4999
6	.0000	-7.4331	.0000	.0000	-2.4984	-.1483	-2.5002	-2.5000
7	.0000	.0000	.0000	-7.4345	-2.5000	-2.5002	-.1508	-2.4990
8	.0000	.0000	-7.4326	.0000	-2.4999	-2.5000	-2.4990	-.1476

VIF(kulaksız) e Karşılık Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4356	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4331	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4326
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4345	.0000
5	-7.4356	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4984	-2.5000	-2.4999
6	.0000	-7.4331	.0000	.0000	-2.4984	.0000	-2.5002	-2.5000
7	.0000	.0000	.0000	-7.4345	-2.5000	-2.5002	.0000	-2.4990
8	.0000	.0000	-7.4326	.0000	-2.4999	-2.5000	-2.4990	.0000

Satırlarda AO lar, Sütünlarda MO lar.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6867	.0296	-.3728	.9646	-.4816	.2424	.0362	.1697
2	.6867	.6979	.7571	-.0987	-.0094	-.3600	-.4030	.1697
3	.6867	.2169	-.7582	-.6694	.3812	.3704	-.0981	.1697
4	.6867	-.9444	.3739	-.1965	.1099	-.2528	.4648	.1697
5	-1.5546	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.6459
6	.0000	-.8193	-.7326	-.2580	-.1796	-.2950	-.4131	.0000
7	.0000	-.0323	.4068	-1.0525	-.4799	.2415	.0361	.0000
8	.0000	-.7760	.7565	.3162	.1655	.3802	-.3435	.0000

Satırlarda Melezlenmiş AO lar, Sütünlarda Melezlenmiş MO lar.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6867	.0296	-.3728	.9646	-.4816	.2424	.0362	.1697
2	.6867	.6979	.7571	-.0987	-.0094	-.3600	-.4030	.1697
3	.6867	.2169	-.7582	-.6694	.3812	.3704	-.0981	.1697
4	.6867	-.9444	.3739	-.1965	.1099	-.2528	.4648	.1697
5	-.7773	-.0280	.3523	-.9115	-.4156	.2091	.0313	.3230
6	-.7773	-.6597	-.7156	.0932	-.0081	-.3106	-.3477	.3230
7	-.7773	.8925	-.3533	.1856	.0948	-.2181	.4011	.3230
8	-.7773	-.2049	.7166	.6327	.3289	.3196	-.0847	.3230

EHT den gelen özdeğerler

29.0936000
3.66880000
3.66860000

HAO dan gelen özdeğerler

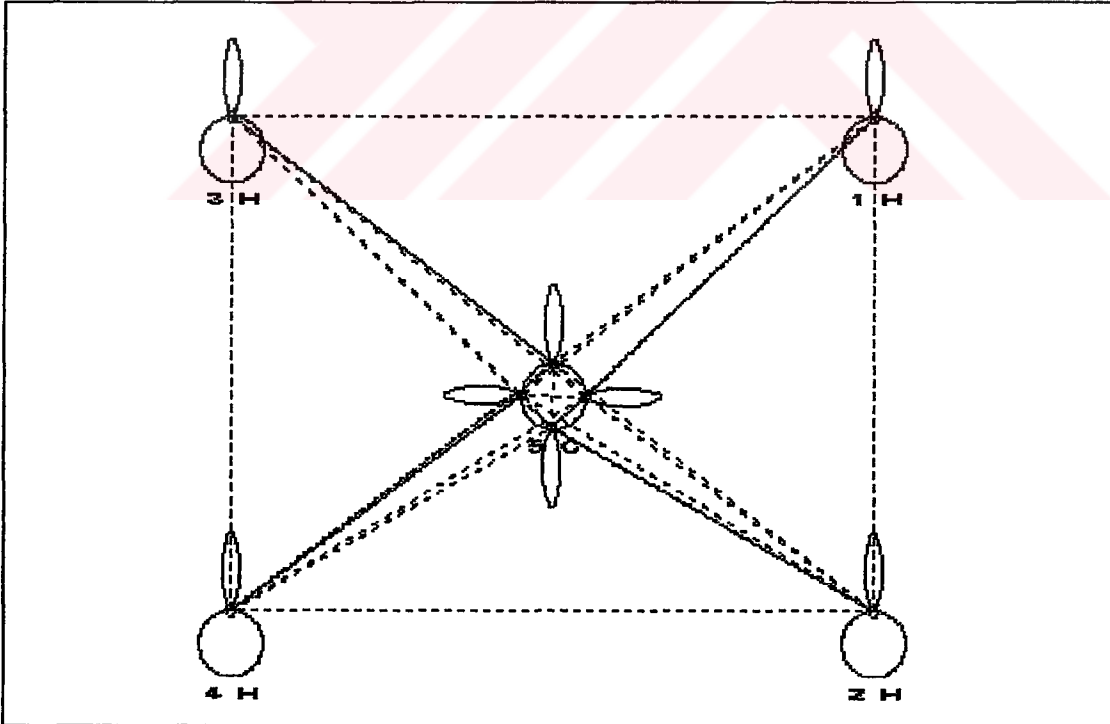
29.0936058
3.66879935
3.66860022

Ei-alfa

42.8425586
17.4177586
17.4175586

3.66850000	3.66849897	17.4174586
-15.5115000	-15.5115004	-1.76254141
-15.5116000	-15.5115996	-1.76264141
-15.5116000	-15.5116009	-1.76264141
-24.4878000	-24.4877997	-10.7388414
EHTD (kulakli)	EHTD (kulaksiz)	
23.2876958	23.2809632	
23.2855456	23.2755666	
23.2825418	23.2732521	
14.7575876	14.7372651	
-4.28210832	-4.31187278	
-4.28312557	-4.31222534	
-4.28465363	-4.31295819	
-7.65136956	-7.50633191	

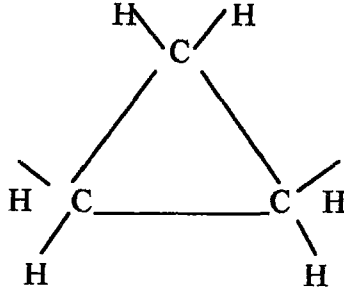
CH_4 'ün $DBD=\{n_+=n_-=4, n_0=0\}$ idi (Şekil 1.13). EHTD'den görüldüğü gibi $DBD=\{n_+=n_-=4, n_0=0\}$ dür. Yukarıdaki VIF resmindeki kesiksiz çizgiler VP ler arasındaki etkileşimin kuvvetli olduğunu gösterir. Şekil 3.5 de görüldüğü gibi kesikli çizgiler etkileşimi zayıf olan VP ler arasına çizilmiştir. Tüm çizgi kuvvetleri yukarıdaki $CH_4.HAO$ dosyasındaki melezlenmiş Hamilton dizeyinden görülebilir. Fakat etkileşimi zayıf olan çizgiler bazı sadeleştirme işlemleri ile VIF resminden atıldığı için, böyle VIF resimlerdeki çizgilerin kuvvetlerine sadeleştirilmiş Hamilton dizeyinden bakılmalıdır.



Şekil 3.5

3.4. Bilgisayar Yazılımının Sonuç Bilgilerinin Değerlendirilmesi

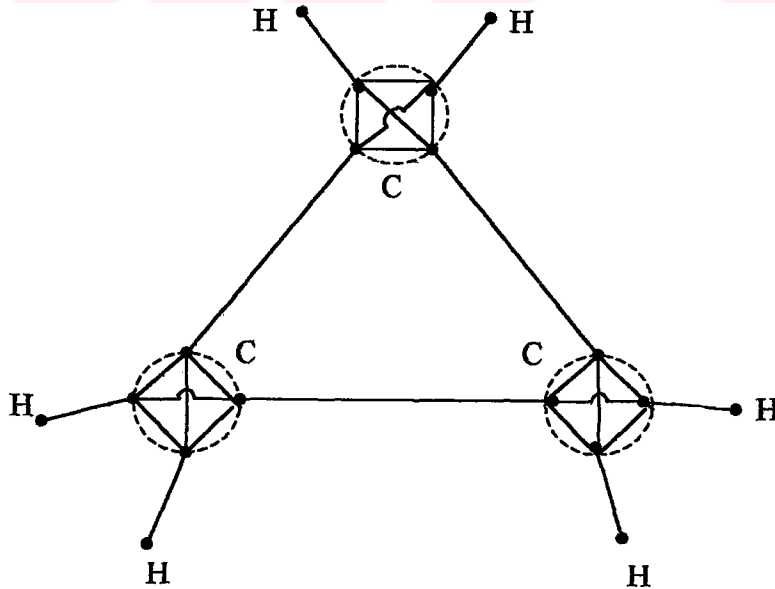
Programın sonuç bilgilerini değerlendirmek için doğada kararlı olarak bulunan tek halkalı siklopropan (C_3H_6) özdeciği üzerinde çalışıldı. Bu özdeciğin yapısal formülü aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.6

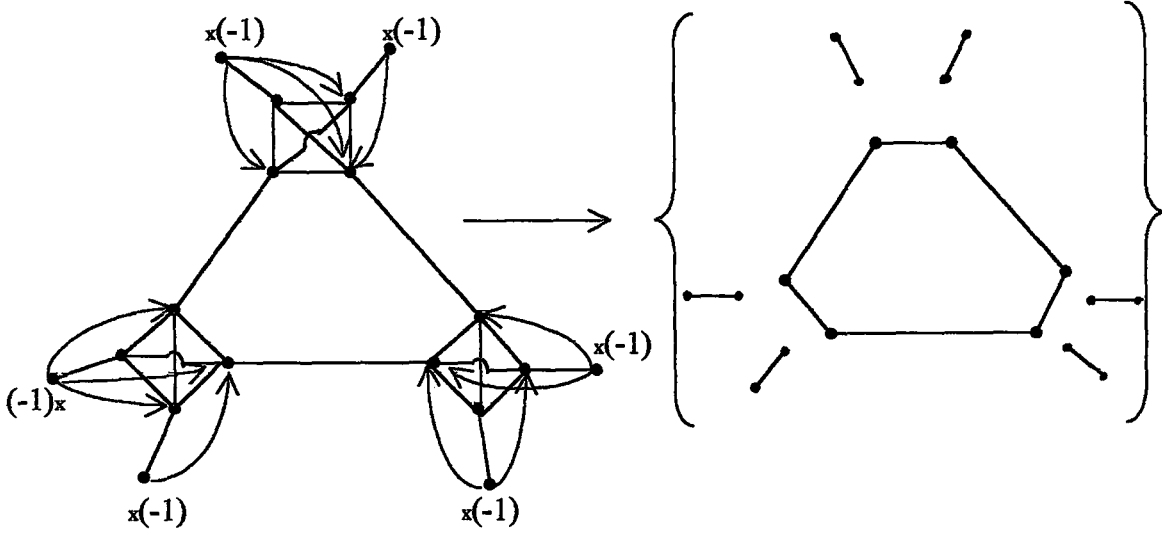
Birinci baş grup elementleri için VIF dörtyüzlü ile başlar. Eğer sonuç özdecikdeki melezlemelerin dörtyüzlüden farklı olduğu ortaya çıkarsa, o zaman resimsel eşdeğişim kuralları bunları gösterecektir.

C_3H_6 özdeciğinin VIF'i aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.7

Şimdi bu VIF iki kuralla indirgin:



İlk VIF in indirgenmesinden sonra geriye bir altıgen ve 6 tane çizgi kalır. Altıgenin $DBD=\{n_+=n_-=3, n_0=0\}$ idi (Örnek 1.3). Geriye kalan 6 tane çizginin de $DBD=\{n_+=n_-=6, n_0=0\}$ dır. O halde C_3H_6 'nın $DBD = \{n_+=n_-=9, n_0=0\}$ olur. HAO bilgisayar yazılımının çalışması sonucunda aşağıdaki $C_3H_6.HAO$ dosyası elde edilir.

C3H6

Atom sembolleri, sıra numaralari, x, y ve z koordinatlari

H	1	-1.3760	.0600	-.9190
H	2	-1.3760	.0600	.9190
H	3	-1.3760	2.5590	.9190
H	4	-1.3760	2.5590	-.9190
H	5	.7880	1.3090	.9190
H	6	.7880	1.3090	-.9190
C	7	-1.0830	.5670	.0000
C	8	-1.0830	2.0510	.0000
C	9	.2020	1.3090	.0000

7 atomu icin dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

7 atomu icin döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	-.2329	-.4029	-.7304
.5000	-.2669	-.4619	.6822
.5000	-.3623	.7862	.0241
.5000	.8621	.0786	.0241

8 atomu icin dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

8 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000 -.2328 .4036 .7300
 .5000 -.2663 .4617 -.6826
 .5000 -.3630 -.7859 -.0237
 .5000 .8621 -.0793 -.0237

9 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000 .8660 .0000 .0000
 .5000 -.2887 .8165 .0000
 .5000 -.2887 -.4082 .7071
 .5000 -.2887 -.4082 -.7071

9 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000 .4656 .0000 .7302
 .5000 .5332 .0000 -.6824
 .5000 -.4994 .7071 -.0239
 .5000 -.4994 -.7071 -.0239

Ortalamayı kösegenden cikariyor.

$h'_{uv} = h_{uv} - (\text{ortalama}) * S_{uv}$

Ortalama = -13.799690 eV

h_{VIF} de en yakın olmayan komsular arasi cizgiler ihmal edildi.

Tüm atom içi cizgiler 1.0000 küçük olacak şekilde $S_{uv} * (\text{ortalama})$ ya esitlenmiştir.

Atom içi cizgileri degismedi.

C3H6 molekülü için $b > 1.49$ alındı.

Uzaklik Dizeyi (ang.)

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	1.8380	3.1021	2.4990	3.1018	2.4986	1.0897	2.2123
2	1.8380	.0000	2.4990	3.1021	2.4986	3.1018	1.0897	2.2123
3	3.1021	2.4990	.0000	1.8380	2.4991	3.1022	2.2132	1.0902
4	2.4990	3.1021	1.8380	.0000	3.1022	2.4991	2.2132	1.0902
5	3.1018	2.4986	2.4991	3.1022	.0000	1.8380	2.2126	2.2126
6	2.4986	3.1018	3.1022	2.4991	1.8380	.0000	2.2126	2.2126
7	1.0897	1.0897	2.2132	2.2132	2.2126	2.2126	.0000	1.4840
8	2.2123	2.2123	1.0902	1.0902	2.2126	2.2126	1.4840	.0000
9	2.2124	2.2124	2.2129	2.2129	1.0899	1.0899	1.4838	1.4838

	9
1	2.2124
2	2.2124
3	2.2129
4	2.2129
5	1.0899
6	1.0899
7	1.4838
8	1.4838
9	.0000

AO da Overlap dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1347	.0137	.0425	.0137	.0425	.4925	-.1321
2	.1347	1.0000	.0425	.0137	.0425	.0137	.4925	-.1321
3	.0137	.0425	1.0000	.1347	.0425	.0137	.0941	-.0160
4	.0425	.0137	.1347	1.0000	.0137	.0425	.0941	-.0160
5	.0137	.0425	.0425	.0137	1.0000	.1347	.0941	.1023
6	.0425	.0137	.0137	.0425	.1347	1.0000	.0941	.1023
7	.4925	.4925	.0941	.0941	.0941	.0941	1.0000	.0000
8	-.1321	-.1321	-.0160	-.0160	.1023	.1023	.0000	1.0000
9	-.2288	-.2288	.1088	.1088	.0406	.0406	.0000	.0000
10	-.4145	.4145	.0502	-.0502	.0502	-.0502	.0000	.0000
11	.0941	.0941	.4925	.4925	.0941	.0941	.3660	.0000
12	-.0160	-.0160	-.1321	-.1321	.1022	.1022	.0000	.2116
13	-.1088	-.1088	.2288	.2288	-.0406	-.0406	-.3846	.0000
14	-.0502	.0502	.4145	-.4145	.0502	-.0502	.0000	.0000
15	.0941	.0941	.0941	.0941	.4925	.4925	.3660	.3331
16	-.0862	-.0862	-.0862	-.0862	.2642	.2642	-.3331	-.1962
17	-.0683	-.0683	.0683	.0683	.0000	.0000	-.1923	-.2355

18	-.0502	.0502	.0502	-.0502	.4145	-.4145	.0000	.0000
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-.2288	-.4145	.0941	-.0160	-.1088	-.0502	.0941	-.0862
2	-.2288	.4145	.0941	-.0160	-.1088	.0502	.0941	-.0862
3	.1088	.0502	.4925	-.1321	.2288	.4145	.0941	-.0862
4	.1088	-.0502	.4925	-.1321	.2288	-.4145	.0941	-.0862
5	.0406	.0502	.0941	.1022	-.0406	.0502	.4925	.2642
6	.0406	-.0502	.0941	.1022	-.0406	-.0502	.4925	.2642
7	.0000	.0000	.3660	.0000	-.3846	.0000	.3660	-.3331
8	.0000	.0000	.0000	.2116	.0000	.0000	.3331	-.1962
9	1.0000	.0000	.3846	.0000	-.3322	.0000	.1923	-.2355
10	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.2116	.0000	.0000
11	.3846	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.3660	-.3331
12	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.3331	-.1962
13	-.3322	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	-.1923	.2355
14	.0000	.2116	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000
15	.1923	.0000	.3660	.3331	-.1923	.0000	1.0000	.0000
16	-.2355	.0000	-.3331	-.1962	.2355	.0000	.0000	1.0000
17	.0757	.0000	.1923	.2355	.0757	.0000	.0000	.0000
18	.0000	.2116	.0000	.0000	.0000	.2116	.0000	.0000

	17	18
1	-.0683	-.0502
2	-.0683	.0502
3	.0683	.0502
4	.0683	-.0502
5	.0000	.4145
6	.0000	-.4145
7	-.1923	.0000
8	-.2355	.0000
9	.0757	.0000
10	.0000	.2116
11	.1923	.0000
12	.2355	.0000
13	.0757	.0000
14	.0000	.2116
15	.0000	.0000
16	.0000	.0000
17	1.0000	.0000
18	.0000	1.0000

Melezlenmis AO da Overlap Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1347	.0137	.0425	.0137	.0425	.6719	.1044
2	.1347	1.0000	.0425	.0137	.0425	.0137	.0665	.6700
3	.0137	.0425	1.0000	.1347	.0425	.0137	-.0297	.0353
4	.0425	.0137	.1347	1.0000	.0137	.0425	.0436	-.0332
5	.0137	.0425	.0425	.0137	1.0000	.1347	-.0298	.0352
6	.0425	.0137	.0137	.0425	.1347	1.0000	.0435	-.0333
7	.6719	.0665	-.0297	.0436	-.0298	.0435	1.0000	.0000
8	.1044	.6700	.0353	-.0332	.0352	-.0333	.0000	1.0000
9	.1042	.1242	.1396	.1372	.0431	.0407	.0000	.0000
10	.1044	.1244	.0430	.0406	.1396	.1372	.0000	.0000
11	-.0298	.0435	.6719	.0667	.0435	-.0298	-.1109	.1055
12	.0353	-.0332	.1041	.6700	-.0332	.0354	.1056	-.0988
13	.1396	.1372	.1045	.1242	.0407	.0431	.0815	.0503
14	.0431	.0407	.1044	.1241	.1372	.1396	-.0202	-.0464
15	-.0297	.0436	.0436	-.0297	.6719	.0666	-.1110	.1055
16	.0353	-.0332	-.0332	.0353	.1043	.6700	.1056	-.0988
17	.0430	.0406	.1372	.1396	.1044	.1242	-.0201	-.0464
18	.1396	.1372	.0406	.0430	.1044	.1242	.0814	.0501
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.1042	.1044	-.0298	.0353	.1396	.0431	-.0297	.0353
2	.1242	.1244	.0435	-.0332	.1372	.0407	.0436	-.0332
3	.1396	.0430	.6719	.1041	.1045	.1044	.0436	-.0332
4	.1372	.0406	.0667	.6700	.1242	.1241	-.0297	.0353

5	.0431	.1396	.0435	-.0332	.0407	.1372	.6719	.1043
6	.0407	.1372	-.0298	.0354	.0431	.1396	.0666	.6700
7	.0000	.0000	-.1109	.1056	.0815	-.0202	-.1110	.1056
8	.0000	.0000	.1055	-.0988	.0503	-.0464	.1055	-.0988
9	1.0000	.0000	.0813	.0503	.6268	.2125	-.0202	-.0464
10	.0000	1.0000	-.0203	-.0463	.2119	.2811	.0814	.0503
11	.0813	-.0203	1.0000	.0000	.0000	.0000	.1147	-.1053
12	.0503	-.0463	.0000	1.0000	.0000	.0000	-.1053	.0983
13	.6268	.2119	.0000	.0000	1.0000	.0000	-.0276	-.0395
14	.2125	.2811	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0740	.0572
15	-.0202	.0814	.1147	-.1053	-.0276	.0740	1.0000	.0000
16	-.0464	.0503	-.1053	.0983	-.0395	.0572	.0000	1.0000
17	.2812	.2121	.0740	.0573	.2122	.6271	.0000	.0000
18	.2123	.6268	-.0277	-.0394	.2813	.2125	.0000	.0000

17	18	
1	.0430	.1396
2	.0406	.1372
3	.1372	.0406
4	.1396	.0430
5	.1044	.1044
6	.1242	.1242
7	-.0201	.0814
8	-.0464	.0501
9	.2812	.2123
10	.2121	.6268
11	.0740	-.0277
12	.0573	-.0394
13	.2122	.2813
14	.6271	.2125
15	.0000	.0000
16	.0000	.0000
17	1.0000	.0000
18	.0000	1.0000

AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5998	-3.2075	-.3293	-1.0136	-.3290	-1.0144	-15.0848	2.8884
2	-3.2075	-13.5998	-1.0136	-.3293	-1.0144	-.3290	-15.0848	2.8884
3	-.3293	-1.0136	-13.5986	-3.2054	-1.0145	-.3308	-2.8797	.3479
4	-1.0136	-.3293	-3.2054	-13.5986	-.3308	-1.0145	-2.8797	.3479
5	-.3290	-1.0144	-1.0145	-.3308	-13.6017	-3.2091	-2.8825	-2.2374
6	-1.0144	-.3290	-.3308	-1.0145	-3.2091	-13.6017	-2.8825	-2.2374
7	-15.0848	-15.0848	-2.8797	-2.8797	-2.8825	-2.8825	-21.3981	-.0009
8	2.8884	2.8884	.3479	.3479	-2.2374	-2.2374	-.0009	-11.4008
9	5.0024	5.0024	-2.3800	-2.3800	-.8890	-.8890	.0000	-.0014
10	9.0667	-9.0667	-1.0968	1.0968	-1.0978	1.0978	.0000	.0000
11	-2.8803	-2.8803	-15.0832	-15.0832	-2.8818	-2.8818	-13.7090	-.0011
12	.3497	.3497	2.8885	2.8885	-2.2374	-2.2374	.0005	-4.2238
13	2.3812	2.3812	-5.0024	-5.0024	.8891	.8891	11.0408	.0009
14	1.0975	-1.0975	-9.0676	9.0676	-1.0969	1.0969	.0000	.0000
15	-2.8805	-2.8805	-2.8811	-2.8811	-15.0876	-15.0876	-13.7108	-9.5640
16	1.8878	1.8878	1.8869	1.8869	-5.7761	-5.7761	9.5602	3.9169
17	1.4931	1.4931	-1.4909	-1.4909	.0001	.0001	5.5216	4.6974
18	1.0978	-1.0978	-1.0968	1.0968	-9.0670	9.0670	.0000	.0000
9	10	11	12	13	14	15	16	
1	5.0024	9.0667	-2.8803	.3497	2.3812	1.0975	-2.8805	1.8878
2	5.0024	-9.0667	-2.8803	.3497	2.3812	-1.0975	-2.8805	1.8878
3	-2.3800	-1.0968	-15.0832	2.8885	-5.0024	-9.0676	-2.8811	1.8869
4	-2.3800	1.0968	-15.0832	2.8885	-5.0024	9.0676	-2.8811	1.8869
5	-.8890	-1.0978	-2.8818	-2.2374	.8891	-1.0969	-15.0876	-5.7761
6	-.8890	1.0978	-2.8818	-2.2374	.8891	1.0969	-15.0876	-5.7761
7	.0000	.0000	-13.7090	.0005	11.0408	.0000	-13.7108	9.5602
8	-.0014	.0000	-.0011	-4.2238	.0009	.0000	-9.5640	3.9169
9	-11.3990	.0000	-11.0387	-.0018	6.6294	.0000	-5.5206	4.6986
10	.0000	-11.3976	.0000	.0000	.0000	-4.2196	.0000	.0000
11	-11.0387	.0000	-21.3953	-.0006	.0000	.0000	-13.7105	9.5607

12	-.0018	.0000	-.0006	-11.4029	.0013	.0000	-9.5639	3.9176
13	6.6294	.0000	.0000	.0013	-11.4003	.0000	5.5212	-4.6987
14	.0000	-4.2196	.0000	.0000	.0000	-11.3993	.0000	.0000
15	-5.5206	.0000	-13.7105	-9.5639	5.5212	.0000	-21.4029	.0012
16	4.6986	.0000	9.5607	3.9176	-4.6987	.0000	.0012	-11.4004
17	-1.5087	.0000	-5.5190	-4.6996	-1.5087	.0000	.0004	.0005
18	.0000	-4.2203	.0000	.0000	.0000	-4.2199	.0000	.0000
	17	18						
1	1.4931	1.0978						
2	1.4931	-1.0978						
3	-1.4909	-1.0968						
4	-1.4909	1.0968						
5	.0001	-9.0670						
6	.0001	9.0670						
7	5.5216	.0000						
8	4.6974	.0000						
9	-1.5087	.0000						
10	.0000	-4.2203						
11	-5.5190	.0000						
12	-4.6996	.0000						
13	-1.5087	.0000						
14	.0000	-4.2199						
15	.0004	.0000						
16	.0005	.0000						
17	-11.4001	.0000						
18	.0000	-11.3977						

Melezlenmis AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5998	-3.2075	-.3293	-1.0136	-.3290	-1.0144	-16.8525	-4.4384
2	-3.2075	-13.5998	-1.0136	-.3293	-1.0144	-.3290	-3.6086	-16.8093
3	-.3293	-1.0136	-13.5986	-3.2054	-1.0145	-.3308	.2392	-1.1817
4	-1.0136	-.3293	-3.2054	-13.5986	-.3308	-1.0145	-1.3629	.3148
5	-.3290	-1.0144	-1.0145	-.3308	-13.6017	-3.2091	.2398	-1.1823
6	-1.0144	-.3290	-.3308	-1.0145	-3.2091	-13.6017	-1.3638	.3155
7	-16.8525	-3.6086	.2392	-1.3629	.2398	-1.3638	-13.8982	-2.5007
8	-4.4384	-16.8093	-1.1817	.3148	-1.1823	.3155	-2.5007	-13.8983
9	-4.4377	-4.8742	-3.4635	-3.4107	-1.3559	-1.3030	-2.4996	-2.4996
10	-4.4409	-4.8774	-1.3534	-1.3006	-3.4665	-3.4136	-2.4992	-2.4990
11	.2406	-1.3618	-16.8524	-3.6129	-1.3621	.2395	1.9672	-2.2501
12	-1.1829	.3153	-4.4312	-16.8098	.3142	-1.1833	-2.2535	1.9215
13	-3.4645	-3.4124	-4.4434	-4.8739	-1.3014	-1.3535	-3.8728	-3.1510
14	-1.3537	-1.3016	-4.4394	-4.8699	-3.4142	-3.4663	-.6537	-.0317
15	.2404	-1.3628	-1.3629	.2390	-16.8540	-3.6125	1.9683	-2.2503
16	-1.1827	.3156	.3141	-1.1829	-4.4367	-16.8110	-2.2523	1.9225
17	-1.3535	-1.3010	-3.4109	-3.4634	-4.4422	-4.8757	-.6533	-.0304
18	-3.4651	-3.4126	-1.3024	-1.3549	-4.4423	-4.8759	-3.8705	-3.1471
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-4.4377	-4.4409	.2406	-1.1829	-3.4645	-1.3537	.2404	-1.1827
2	-4.8742	-4.8774	-1.3618	.3153	-3.4124	-1.3016	-1.3628	.3156
3	-3.4635	-1.3534	-16.8524	-4.4312	-4.4434	-4.4394	-1.3629	.3141
4	-3.4107	-1.3006	-3.6129	-16.8098	-4.8739	-4.8699	.2390	-1.1829
5	-1.3559	-3.4665	-1.3621	.3142	-1.3014	-3.4142	-16.8540	-4.4367
6	-1.3030	-3.4136	.2395	-1.1833	-1.3535	-3.4663	-3.6125	-16.8110
7	-2.4996	-2.4992	1.9672	-2.2535	-3.8728	-.6537	1.9683	-2.2523
8	-2.4996	-2.4990	-2.2501	1.9215	-3.1510	-.0317	-2.2503	1.9225
9	-13.8978	-2.5004	-3.8656	-3.1492	-16.7538	-7.2973	-.6545	-.0339
10	-2.5004	-13.9011	-.6498	-.0327	-7.2860	-7.4775	-3.8715	-3.1515
11	-3.8656	-.6498	-13.8987	-2.4995	-2.4988	-2.4980	-2.5318	1.9534
12	-3.1492	-.0327	-2.4995	-13.8989	-2.4987	-2.4978	1.9536	-2.0092
13	-16.7538	-7.2860	-2.4988	-2.4987	-13.8984	-2.4990	-.5052	-.1699
14	-7.2973	-7.4775	-2.4980	-2.4978	-2.4990	-13.9016	-3.7239	-3.2886
15	-.6545	-3.8715	-2.5318	1.9536	-.5052	-3.7239	-13.8991	-2.5014
16	-.0339	-3.1515	1.9534	-2.0092	-.1699	-3.2886	-2.5014	-13.8992
17	-7.4763	-7.2912	-3.7202	-3.2902	-7.2918	-16.7630	-2.5004	-2.5002
18	-7.2962	-16.7550	-.5037	-.1725	-7.4787	-7.3003	-2.5010	-2.5009

	17	18								
1	-1.3535	-3.4651								
2	-1.3010	-3.4126								
3	-3.4109	-1.3024								
4	-3.4634	-1.3549								
5	-4.4422	-4.4423								
6	-4.8757	-4.8759								
7	-.6533	-3.8705								
8	-.0304	-3.1471								
9	-7.4763	-7.2962								
10	-7.2912	-16.7550								
11	-3.7202	-.5037								
12	-3.2902	-.1725								
13	-7.2918	-7.4787								
14	-16.7630	-7.3003								
15	-2.5004	-2.5010								
16	-2.5002	-2.5009								
17	-13.9015	-2.5014								
18	-2.5014	-13.9014								
h'=h-(alfa)*S										
	1	2	3	4	5	6	7	8		
1	.1999	-1.3486	-.1403	-.4272	-.1400	-.4280	-7.5801	-2.9976		
2	-1.3486	.1999	-.4272	-.1403	-.4280	-.1400	-2.6914	-7.5640		
3	-.1403	-.4272	.2010	-1.3466	-.4280	-.1417	-.1711	-.6943		
4	-.4272	-.1403	-1.3466	.2010	-.1417	-.4280	-.7612	-.1430		
5	-.1400	-.4280	-.4280	-.1417	.1980	-1.3502	-.1714	-.6960		
6	-.4280	-.1400	-.1417	-.4280	-1.3502	.1980	-.7631	-.1434		
7	-7.5801	-2.6914	-.1711	-.7612	-.1714	-.7631	-.0985	-2.5007		
8	-2.9976	-7.5640	-.6943	-.1430	-.6960	-.1434	-2.5007	-.0987		
9	-2.9991	-3.1602	-1.5372	-1.5177	-.7610	-.7415	-2.4996	-2.4996		
10	-3.0001	-3.1613	-.7598	-.7403	-1.5394	-1.5199	-2.4992	-2.4990		
11	-.1704	-.7613	-7.5799	-2.6921	-.7615	-.1713	.4365	-.7938		
12	-.6952	-.1427	-2.9941	-7.5641	-.1436	-.6954	-.7957	.5587		
13	-1.5387	-1.5194	-3.0008	-3.1597	-.7402	-.7594	-2.7481	-2.4569		
14	-.7592	-.7400	-2.9990	-3.1580	-1.5211	-1.5403	-.9318	-.6713		
15	-.1701	-.7616	-.7616	-.1715	-7.5815	-2.6935	.4369	-.7940		
16	-.6950	-.1422	-.1436	-.6952	-2.9976	-7.5655	-.7952	.5597		
17	-.7601	-.7407	-1.5176	-1.5370	-3.0016	-3.1617	-.9312	-.6705		
18	-1.5387	-1.5193	-.7421	-.7614	-3.0017	-3.1618	-2.7469	-2.4551		
	9	10	11	12	13	14	15	16		
1	-2.9991	-3.0001	-.1704	-.6952	-1.5387	-.7592	-.1701	-.6950		
2	-3.1602	-3.1613	-.7613	-.1427	-1.5194	-.7400	-.7616	-.1422		
3	-1.5372	-.7598	-7.5799	-2.9941	-3.0008	-2.9990	-.7616	-.1436		
4	-1.5177	-.7403	-2.6921	-7.5641	-3.1597	-3.1580	-.1715	-.6952		
5	-.7610	-1.5394	-.7615	-.1436	-.7402	-1.5211	-7.5815	-2.9976		
6	-.7415	-1.5199	-.1713	-.6954	-.7594	-1.5403	-2.6935	-7.5655		
7	-2.4996	-2.4992	.4365	-.7957	-2.7481	-.9318	.4369	-.7952		
8	-2.4996	-2.4990	-.7938	.5587	-2.4569	-.6713	-.7940	.5597		
9	-.0981	-2.5004	-2.7443	-2.4557	-8.1041	-4.3654	-.9331	-.6737		
10	-2.5004	-.1014	-.9295	-.6714	-4.3615	-3.5986	-2.7477	-2.4575		
11	-2.7443	-.9295	-.0990	-2.4995	-2.4988	-2.4980	-.9490	.5008		
12	-2.4557	-.6714	-2.4995	-.0992	-2.4987	-2.4978	.5004	-.6521		
13	-8.1041	-4.3615	-2.4988	-2.4987	-.0988	-2.4990	-.8864	-.7148		
14	-4.3654	-3.5986	-2.4980	-2.4978	-2.4990	-.1020	-2.7023	-2.4997		
15	-.9331	-2.7477	-.9490	.5004	-.8864	-2.7023	-.0994	-2.5014		
16	-.6737	-2.4575	.5008	-.6521	-.7148	-2.4997	-2.5014	-.0995		
17	-3.5957	-4.3646	-2.6993	-2.4989	-4.3629	-8.1092	-2.5004	-2.5002		
18	-4.3659	-8.1058	-.8857	-.7158	-3.5968	-4.3677	-2.5010	-2.5009		
	17	18								
1	-.7601	-1.5387								
2	-.7407	-1.5193								
3	-1.5176	-.7421								
4	-1.5370	-.7614								

5	-3.0016	-3.0017						
6	-3.1617	-3.1618						
7	-.9312	-2.7469						
8	-.6705	-2.4551						
9	-3.5957	-4.3659						
10	-4.3646	-8.1058						
11	-2.6993	-.8857						
12	-2.4989	-.7158						
13	-4.3629	-3.5968						
14	-8.1092	-4.3677						
15	-2.5004	-2.5010						
16	-2.5002	-2.5009						
17	-.1018	-2.5014						
18	-2.5014	-.1017						
VIF(kulakli) e Karsilik Hamilton Dizeyi								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1999	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5801	.0000
2	.0000	.1999	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5640
3	.0000	.0000	.2010	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.2010	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.1980	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1980	.0000	.0000
7	-7.5801	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-.0985	-2.5007
8	.0000	-7.5640	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5007	-.0987
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4996	-2.4996
10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4992	-2.4990
11	.0000	.0000	-7.5799	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	.0000	.0000	-7.5641	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5815	.0000	.0000	.0000
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5655	.0000	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	-7.5799	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	-7.5641	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5815	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5655
7	-2.4996	-2.4992	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	-2.4996	-2.4990	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
9	-.0981	-2.5004	.0000	.0000	-8.1041	.0000	.0000	.0000
10	-2.5004	-.1014	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	-.0990	-2.4995	-2.4988	-2.4980	.0000	.0000
12	.0000	.0000	-2.4995	-.0992	-2.4987	-2.4978	.0000	.0000
13	-8.1041	.0000	-2.4988	-2.4987	-.0988	-2.4990	.0000	.0000
14	.0000	.0000	-2.4980	-2.4978	-2.4990	-.1020	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-.0994	-2.5014
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5014	-.0995
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-8.1092	-2.5004	-2.5002
18	.0000	-8.1058	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5010	-2.5009
	17	18						
1	.0000	.0000						
2	.0000	.0000						
3	.0000	.0000						
4	.0000	.0000						
5	.0000	.0000						
6	.0000	.0000						
7	.0000	.0000						
8	.0000	.0000						
9	.0000	.0000						
10	.0000	-8.1058						
11	.0000	.0000						

12 .0000 .0000
 13 .0000 .0000
 14 -8.1092 .0000
 15 -2.5004 -2.5010
 16 -2.5002 -2.5009
 17 -.1018 -2.5014
 18 -2.5014 -.1017

VIF(kulaksız) e Karsilik Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5801	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5640
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
7	-7.5801	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5007
8	.0000	-7.5640	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5007
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4996	-2.4996
10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4992	-2.4990
11	.0000	.0000	-7.5799	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	.0000	.0000	-7.5641	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5815	.0000	.0000	.0000
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5655	.0000	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000

	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	-7.5799	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	-7.5641	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5815	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5655
7	-2.4996	-2.4992	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	-2.4996	-2.4990	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
9	.0000	-2.5004	.0000	.0000	-8.1041	.0000	.0000	.0000
10	-2.5004	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	-2.4995	-2.4988	-2.4980	.0000	.0000
12	.0000	.0000	-2.4995	.0000	-2.4987	-2.4978	.0000	.0000
13	-8.1041	.0000	-2.4988	-2.4987	.0000	-2.4990	.0000	.0000
14	.0000	.0000	-2.4980	-2.4978	-2.4990	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5014
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5014	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-8.1092	-2.5004	-2.5002
18	.0000	-8.1058	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5010	-2.5009

	17	18
1	.0000	.0000
2	.0000	.0000
3	.0000	.0000
4	.0000	.0000
5	.0000	.0000
6	.0000	.0000
7	.0000	.0000
8	.0000	.0000
9	.0000	.0000
10	.0000	-8.1058
11	.0000	.0000
12	.0000	.0000
13	.0000	.0000
14	-8.1092	.0000
15	-2.5004	-2.5010
16	-2.5002	-2.5009
17	.0000	-2.5014
18	-2.5014	.0000

Satirlarda AO lar, Sütünlarda MO lar.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.3554	.3548	-.5294	-.4404	.5615	.3838	.4239	-.5071
2	.3554	.3548	-.5294	.4404	-.5615	.3838	.4239	.5071
3	.1297	-.4852	-.5294	.2661	.6622	.1753	-.5443	.5071
4	.1297	-.4852	-.5294	-.2661	-.6622	.1753	-.5443	-.5071
5	-.4850	.1303	-.5294	-.7065	-.1006	-.5590	.1204	.5071
6	-.4850	.1303	-.5294	.7065	.1006	-.5590	.1204	-.5071
7	-1.0726	-1.0711	.6118	.0000	.0000	-.0279	-.0308	.0000
8	-.4473	.1143	-.2221	.0000	.0000	.5466	.2808	.0000
9	-.1269	-.4506	-.3847	.0000	.0000	.5756	.8224	.0000
10	.0000	.0000	.0000	-.6828	.8706	.0000	.0000	-.5548
11	-.3914	1.4643	.6118	.0000	.0000	-.0127	.0395	.0000
12	-.4444	.1251	-.2221	.0000	.0000	.3826	-.4809	.0000
13	-.1161	-.4535	.3847	.0000	.0000	-.1861	.9864	.0000
14	.0000	.0000	.0000	-.4125	-1.0266	.0000	.0000	-.5548
15	1.4639	-.3932	.6118	.0000	.0000	.0406	-.0087	.0000
16	-.4552	.1222	.4442	.0000	.0000	1.1243	-.2421	.0000
17	-.1190	-.4427	.0000	.0000	.0000	.0527	.2447	.0000
18	.0000	.0000	.0000	1.0954	.1560	.0000	.0000	-.5548
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0000	-.0911	-.1083	-.3156	.2407	.1867	.2136	.1882
2	.0000	-.0911	-.1083	.3156	-.2407	.1867	-.2136	.1882
3	.0000	-.0482	.1330	.0506	.3936	.1867	-.2136	.0583
4	.0000	-.0482	.1330	-.0506	-.3936	.1867	.2136	.0583
5	.0000	.1393	-.0248	-.3662	-.1530	.1867	-.2136	-.2465
6	.0000	.1393	-.0248	.3662	.1530	.1867	.2136	-.2465
7	.0000	.0293	.0348	.0000	.0000	-.0265	.0000	.3454
8	.6958	-.3471	.4665	.0000	.0000	-.1852	.0000	-.1296
9	-.4017	.3989	-.0334	.0000	.0000	-.3209	.0000	-.0492
10	.0000	.0000	.0000	.3474	-.2649	.0000	-.2915	.0000
11	.0000	.0155	-.0428	.0000	.0000	-.0265	.0000	.1070
12	-.6958	-.4865	-.3183	.0000	.0000	-.1852	.0000	-.1249
13	-.4017	-.3860	.1060	.0000	.0000	.3209	.0000	-.0337
14	.0000	.0000	.0000	.0557	.4332	.0000	-.2915	.0000
15	.0000	-.0448	.0080	.0000	.0000	-.0265	.0000	-.4523
16	.0000	.2629	-.0467	.0000	.0000	.3705	.0000	-.1407
17	.8034	-.1143	-.6433	.0000	.0000	.0000	.0000	-.0374
18	.0000	.0000	.0000	-.4031	-.1684	.0000	-.2915	.0000
	17	18						
1	.1759	.0395						
2	.1759	.0395						
3	-.2509	.0395						
4	-.2509	.0395						
5	.0750	.0395						
6	.0750	.0395						
7	.3229	.4040						
8	.0310	.0031						
9	-.1339	.0054						
10	.0000	.0000						
11	-.4607	.4040						
12	.0465	.0031						
13	-.1386	-.0054						
14	.0000	.0000						
15	.1376	.4040						
16	.0428	-.0063						
17	-.1228	.0000						
18	.0000	.0000						

Satirlarda Melezlenmis AO lar, Sütünlarda Melezlenmis MO lar.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.3554	.3548	-.5294	-.4404	.5615	.3838	.4239	-.5071
2	.3554	.3548	-.5294	.4404	-.5615	.3838	.4239	.5071
3	.1297	-.4852	-.5294	.2661	.6622	.1753	-.5443	.5071

4	.1297	-.4852	-.5294	-.2661	-.6622	.1753	-.5443	-.5071
5	-.4850	.1303	-.5294	-.7065	-.1006	-.5590	.1204	.5071
6	-.4850	.1303	-.5294	.7065	.1006	-.5590	.1204	-.5071
7	-.3810	-.3806	.5126	.4987	-.6359	-.3732	-.4122	.4052
8	-.3583	-.3579	.5428	-.4658	.5939	-.4257	-.4702	-.3785
9	-.4739	-.9312	.0839	-.0164	.0210	.2406	.5294	-.0134
10	-.9319	-.4724	.0842	-.0164	.0210	.5025	.2913	-.0134
11	-.1391	.5200	.5128	-.3012	-.7495	-.1705	.5297	-.4050
12	-.1309	.4894	.5426	.2816	.7007	-.1942	.6032	.3787
13	.0569	1.0431	.0842	.0098	.0244	.0010	-.5809	.0132
14	-.5696	.8760	.0839	.0098	.0244	.3382	-.4731	.0132
15	.5200	-.1397	.5127	.7998	.1139	.5438	-.1171	-.4051
16	.4892	-.1314	.5428	-.7475	-.1064	.6198	-.1334	.3786
17	.8752	-.5707	.0840	-.0262	-.0037	-.5040	.2896	.0133
18	1.0434	.0554	.0840	-.0262	-.0037	-.5785	-.0565	.0133
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0000	-.0911	-.1083	-.3156	.2407	.1867	.2136	.1882
2	.0000	-.0911	-.1083	.3156	-.2407	.1867	-.2136	.1882
3	.0000	-.0482	.1330	.0506	.3936	.1867	-.2136	.0583
4	.0000	-.0482	.1330	-.0506	-.3936	.1867	.2136	.0583
5	.0000	.1393	-.0248	-.3662	-.1530	.1867	-.2136	-.2465
6	.0000	.1393	-.0248	.3662	.1530	.1867	.2136	-.2465
7	-.0002	-.0652	-.0778	-.2537	.1934	.1592	.2129	.2227
8	-.0002	-.0769	-.0917	.2370	-.1807	.1844	-.1988	.2300
9	-.5679	.4540	-.1779	.0084	-.0064	-.1984	-.0070	.1810
10	.5683	-.2532	.4169	.0084	-.0064	-.1981	-.0070	.0571
11	-.0002	-.0348	.0955	.0407	.3163	.1593	-.2128	.0690
12	-.0002	-.0409	.1123	-.0380	-.2957	.1842	.1989	.0712
13	.5682	.4877	.0108	-.0013	-.0103	-.1982	.0069	.1253
14	-.5679	-.3810	-.3042	-.0013	-.0103	-.1984	.0069	-.0515
15	.0000	.1000	-.0177	-.2944	-.1229	.1593	-.2128	-.2916
16	.0000	.1178	-.0209	.2751	.1149	.1843	.1989	-.3012
17	.5681	-.2345	-.4276	.0096	.0040	-.1983	.0070	-.1823
18	-.5681	-.0729	.4822	.0096	.0040	-.1983	.0070	-.1294
	17	18						
1	.1759	.0395						
2	.1759	.0395						
3	-.2509	.0395						
4	-.2509	.0395						
5	.0750	.0395						
6	.0750	.0395						
7	.2082	.1991						
8	.2150	.1987						
9	.0449	.2051						
10	.1777	.2051						
11	-.2971	.1991						
12	-.3067	.1987						
13	-.1383	.2051						
14	-.1792	.2051						
15	.0887	.1990						
16	.0916	.1986						
17	-.0394	.2051						
18	.1343	.2051						
	EHT den gelen özdegerler		HAO dan gelen özdegerler				Ei-alfa	
	37.7783000		37.7783031				51.5779902	
	37.7778000		37.7778005				51.5774902	
	16.3662000		16.3662000				30.1658902	
	9.74360000		9.74360093				23.5432902	
	9.74350000		9.74349992				23.5431902	
	6.71810000		6.71810164				20.5177902	
	6.71800000		6.71799998				20.5176902	
	1.55430000		1.55430040				15.3539902	
	-3.39410000		-3.39410024				10.4055902	
	-13.1973000		-13.1972992				.602390247	
	-13.1973000		-13.1973008				.602390247	

-14.9333000
 -14.9333000
 -15.3888000
 -16.6922000
 -21.0413000
 -21.0414000
 -28.3593000

-14.9332999
 -14.9333000
 -15.3888005
 -16.6922005
 -21.0413007
 -21.0413994
 -28.3592996

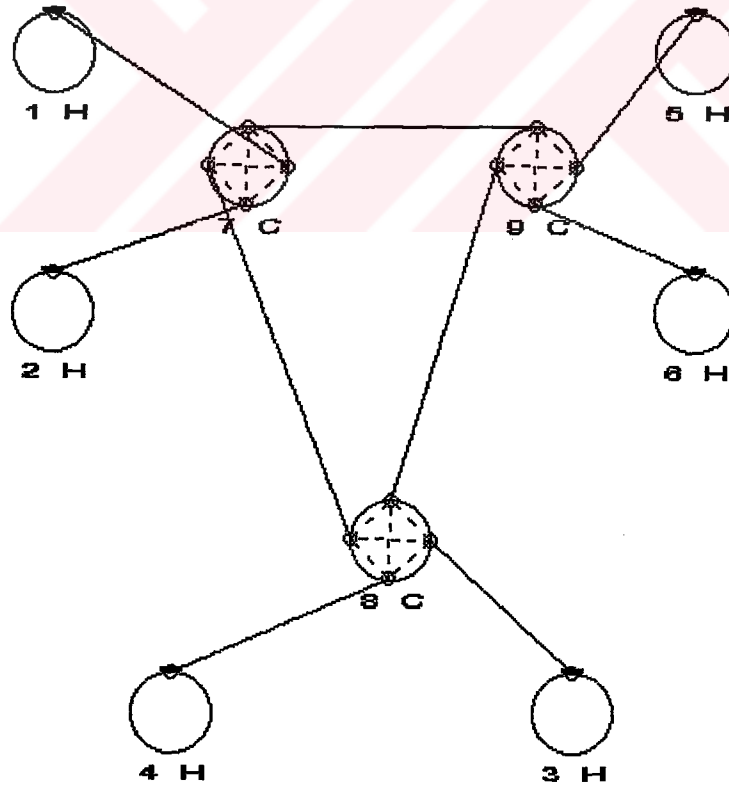
-1.13360975
 -1.13360975
 -1.58910975
 -2.89250975
 -7.24160975
 -7.24170975
 -14.5596098

EHTD (kulakli)

30.0758943
 30.0625822
 29.0571101
 29.0509552
 20.7545879
 20.3422699
 18.7141345
 14.5983324
 14.5886850
 -3.49849728
 -3.91706312
 -4.62789391
 -4.62941840
 -4.79341852
 -4.79780435
 -6.83282371
 -9.86423460
 -9.86839704

EHTD (kulaksiz)

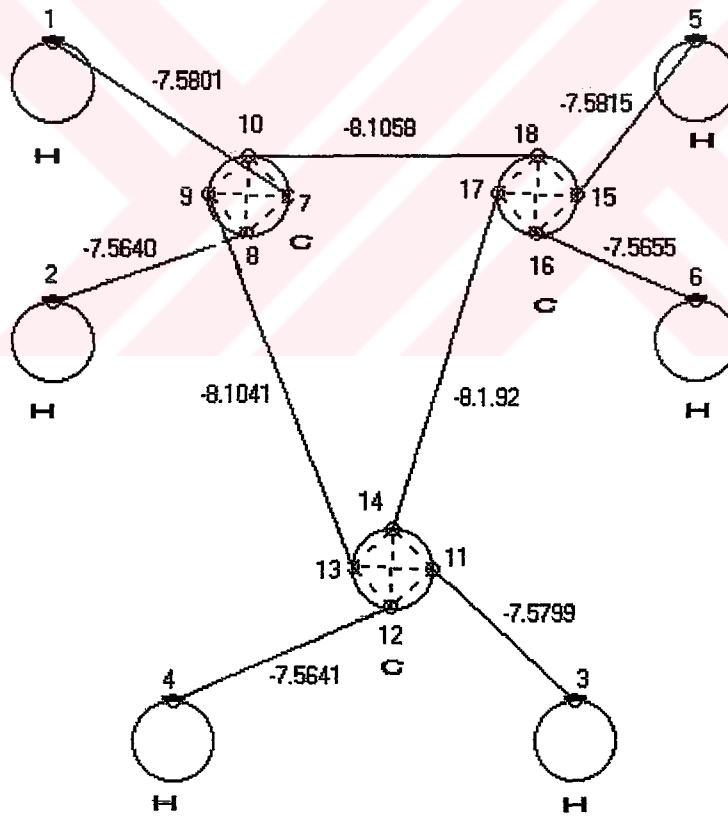
29.9492114
 29.9335662
 29.1907848
 29.1803232
 20.5698316
 20.5370987
 18.5599215
 14.6340714
 14.6254943
 -3.55952063
 -3.94567594
 -4.61403604
 -4.61537994
 -4.85468863
 -4.85862766
 -6.76931534
 -9.71201761
 -9.71643047



Şekil 3.8

Şekil 3.8'den görüldüğü bilgisayar yazılımı ile elde edilen resim (nicel yolla), Şekil 3.9'da nitel yolla çizilen VIF'in aynısıdır. Bilgisayar yazılımının çalışması sonunda elde edilen C3H6.HAO dosyasındaki EHTD özdeğerlerinden görüldüğü gibi, $DBD = \{n_+ = n_- = 9, n_0 = 0\}$ olur.

C_3H_6 nın doğada kararlı olarak bulunduğunu, VIF yöntemi ve HAO bilgisayar yazılımı ile gösterilmiş olur. Gerçekten de özdeciğin bilgisayar yazılımının çalışması sonunda VP ler arasındaki etkileşim çizgileri kesiksiz çizgiler olarak çizilir. Bu da VP ler arasındaki etkileşimin kuvvetli olduğunu gösterir. Ve VP'ler arasındaki etkileşimi Şekil 3.8 üzerine yazarsak,



Şekil 3.9

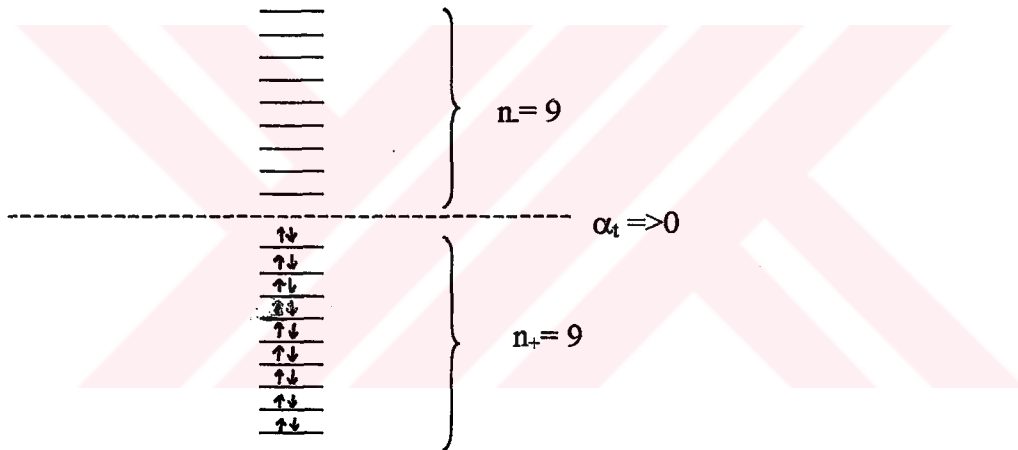
elde ederiz. Bu şeklin etkileşim çizgilerinin kuvvetini gösteren, en son indirgenmiş olan Hamilton dizeyidir.

C_3H_6 özdecığının eksicik sayısı, her yörüngeye ikişer tane yerleştirilmek üzere,

$$3 C : 3 \times 4 e^- = 12 e^-$$

$$6 H : 6 \times 1 e^- = 6 e^-$$

Toplam $18 e^-$ eksicığı vardır.



Yukarıdaki eksicik yerleştirmesinden anlaşılacağı gibi eksicikler bağ yapan yörüngemsilerin üzerindedir. Bu yüzden de özdecik kararlıdır.

4. ÖRÜT KURAMI, ATOM VE MOLEKÜL FİZİĞİNE UYGULANMASI

4.1 İki Adımlı Tepkimeler

Çizelge 1.1 de $\rho=2$ adımlı işlergelere karşılık gelen iskeletler görülmektedir. İki adımlı işlergeler için 3 adet sınıf vardır. Bu iskeletlere karşılık gelen işlergeler ve örütler ise Çizelge 4.1 ve 4.2 deki gibidir (Sinanoğlu vd.,1978).

Görünen (overall) hız yasası sürekli durum çözümleri ve onların kararlılığı da iskeletin tipine bağlı olacaktır. Eğer iskeletler


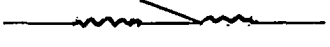
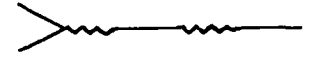
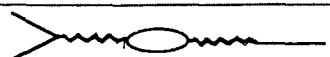

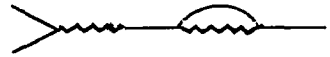
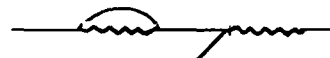





şeklinde ise, doyan(saturating) hız yasası ile sonuçlanır. Eğer işlergenin iskeleti bir ağaç dalı şeklinde ise tepkime derişikliği artan bir hız yasası ile sonuçlanır (Sinanoğlu vd.,1975).


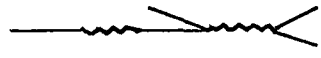
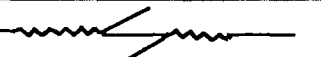

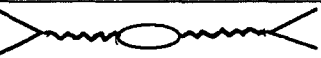



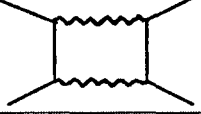

Çizelge 4.1 $\rho=2$ adımlı G.T. $A \Rightarrow B$ şeklinde olanlar

$\gamma=3, r=0$ 		(I) $A \rightarrow X \rightarrow B$
		(I) $A \rightarrow X + Y \rightarrow B$
		(I) $A + X \rightarrow X + Y$ (II) $Y \rightarrow B$
		(I) $A + X \rightarrow Y + Z \rightarrow X + B$
		(I) $A + Y \rightarrow B + X$ (II) $X \rightarrow Y$
		(I) $A + X \rightarrow Y \rightarrow X + B$
		(I) $A + X \rightarrow Y + B$ (II) $Y + Z \rightarrow Z + X$
		(I) $A + X \rightarrow X + Y$ (II) $Y + Z \rightarrow Z + B$

Çizelge 4.2 $\rho=2$ adımlı G.T. $A+B \Rightarrow C$ şeklinde olanlar

$\gamma=3, r=0$ 		(I) $A \rightarrow X$ (II) $B+X \rightarrow C$
		(I) $A+B \rightarrow X$ (II) $X \rightarrow C$
		(I) $A+B \rightarrow 2X$ (II) $2X \rightarrow C$
$\gamma=2, r=1$ 		(I) $A+B \rightarrow X$ (II) $X+Y \rightarrow Y+C$
		(I) $A+X \rightarrow X+Y$ (II) $Y \rightarrow B$
$\gamma=2, r=1$ 		(I) $A+X \rightarrow Y \rightarrow X+B$
$\gamma=1, r=2$ 	YOK	

Çizelge 4.3 $\rho=2$ adımlı G.T. $A+B \Rightarrow C+D$ şeklinde olanlar

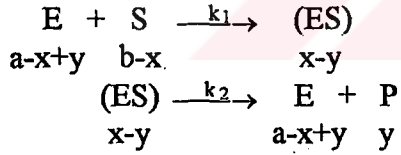
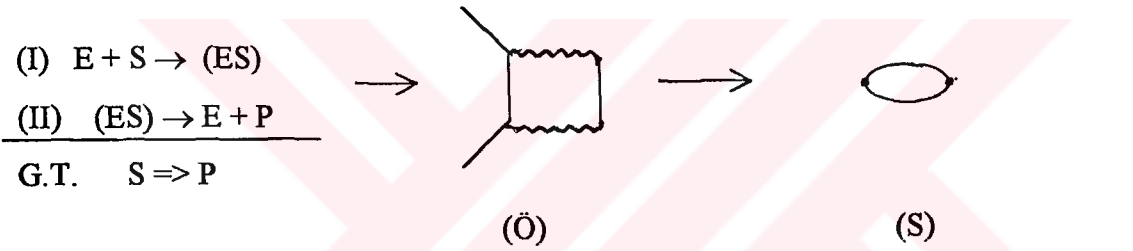
$\gamma=3, r=0$ 		(I) $A \rightarrow X$ (II) $B+X \rightarrow C+D$
		(I) $A \rightarrow C+X$ (II) $X+B \rightarrow D$
		(I) $A+B \rightarrow X$ (II) $X \rightarrow C+D$
		(I) $A+B \rightarrow 2X$ (II) $2X \rightarrow C+D$
		(I) $A+X \rightarrow X+Y$ (II) $Y+B \rightarrow C+D$
		(I) $A+X \rightarrow C+Y$ (II) $Y+B \rightarrow X+D$
	YOK	

4.2 İki Adımlı İşlergenin Hız Denklemleri ve Bunların PHASER ve MATHEMATICA Bilgisayar Yazılımları ile Çözümleri

Aşağıdaki 1. ve 2. işlergelerin iskeletleri doyan(saturating) hız yasası ile sonuçlanır. 3. işlergenin iskeleti bir ağaç dalı şeklinde olduğundan tepkime derişikliđi artan bir hız yasası ile sonuçlanmalıdır.

Şimdi iki adımlı üç tane işlergenin hız denklemleri yazılarak, PHASER (Koçak, 1986) ve MATHEMATICA 2.1 ile bunların çözümleri bulunacaktır.

1) *Henry-Michelis-Menten işlergesi ele alımsın.*



$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} - \frac{dy}{dt} = k_1(a-x+y)(b-x) - k_2(x-y) \\ \frac{dy}{dt} = k_2(x-y) \end{cases} \quad (4.1)$$

Bu denklem takımı şu şekilde de yazılabilir:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = k_1(a-x+y)(b-x) \\ \frac{dy}{dt} = k_2(x-y) \end{cases} \quad (4.2)$$

Bu doğrusal olmayan denklem takımının çözümü PHASER ile aşağıdaki gibi olur:

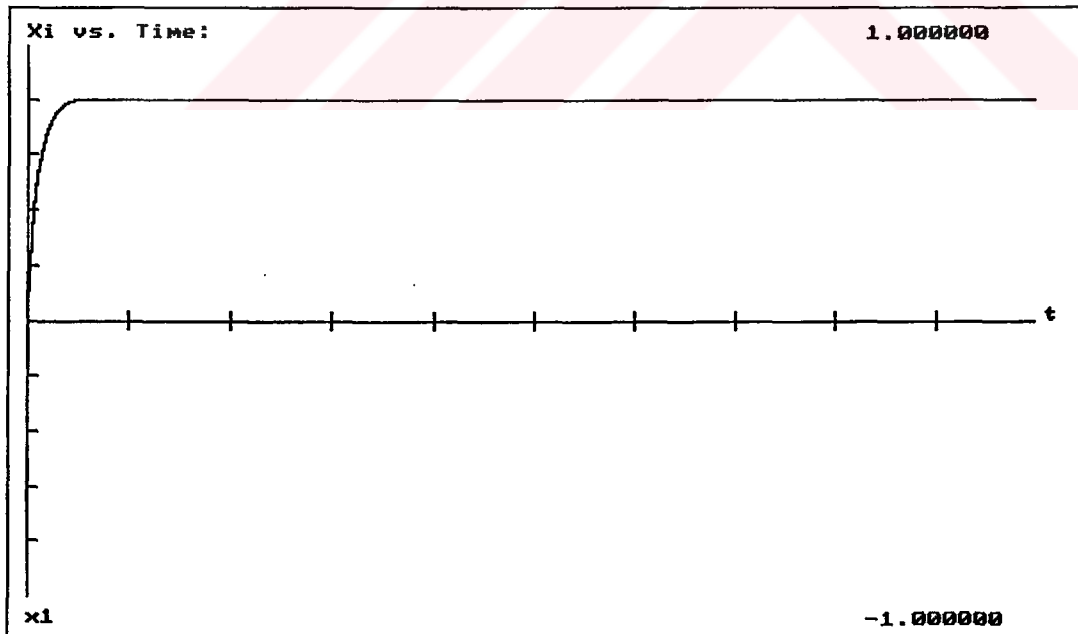
```

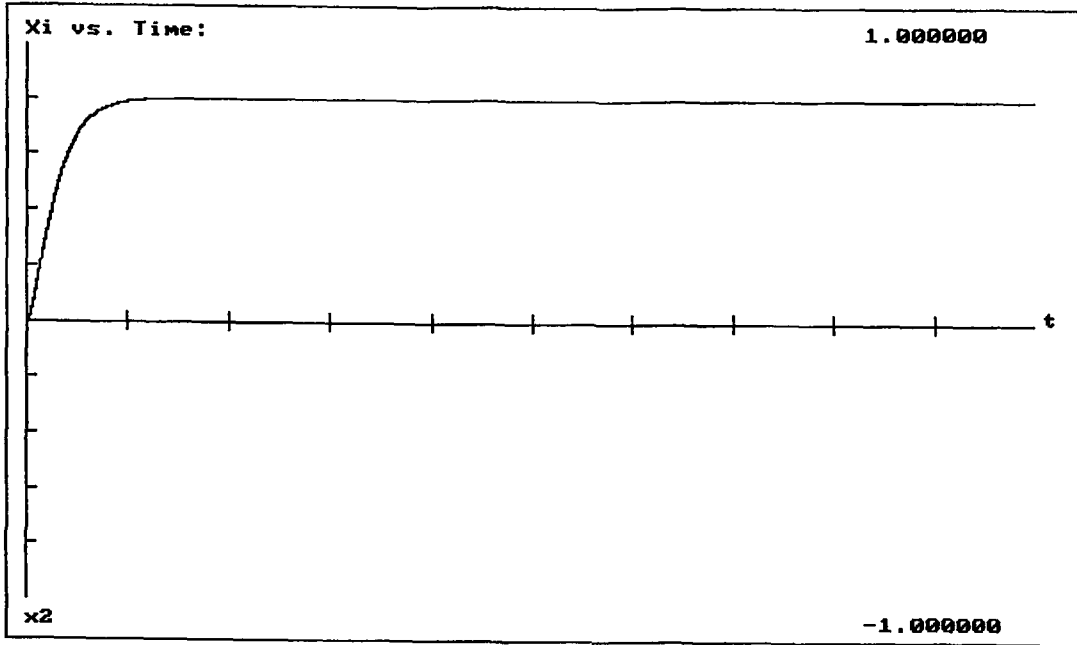
EQUATION:

x1' = k*(a-x1+x2)*(b-x1)
x2' = l*(x1-x2)

SETUP:
Equation: tz21      Dimension: 2      Algorithm: Runge-Kutta
Parameters: a=1.0000 b=0.8000 k=10.000 l=3.2000
Time Start: 0.000000 Time End: 15.00000
Step Size: 0.001000 Jumps/Plt: 1
3d Projection: X axis: x1 Y axis: x2 Z axis:
Map Poincare Plane: Ax + By + Cz + D = 0 P
Init Conds: 0.0000 0.0000

```





Aynı tepkimenin farklı deęiřtirgenler için sonuçları ise ařaęıda görölmektedir.

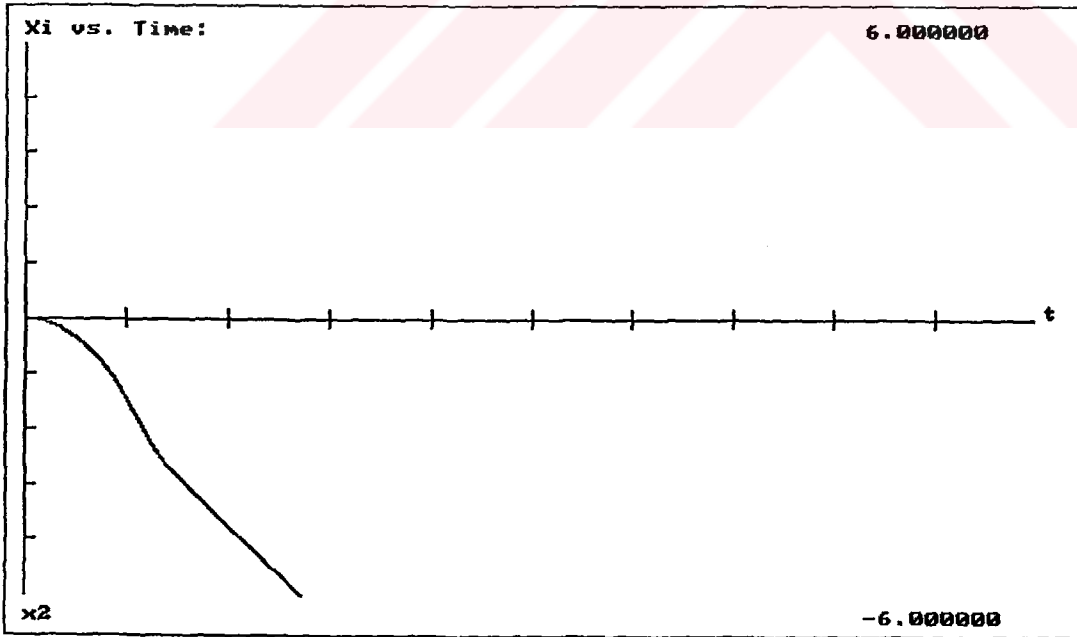
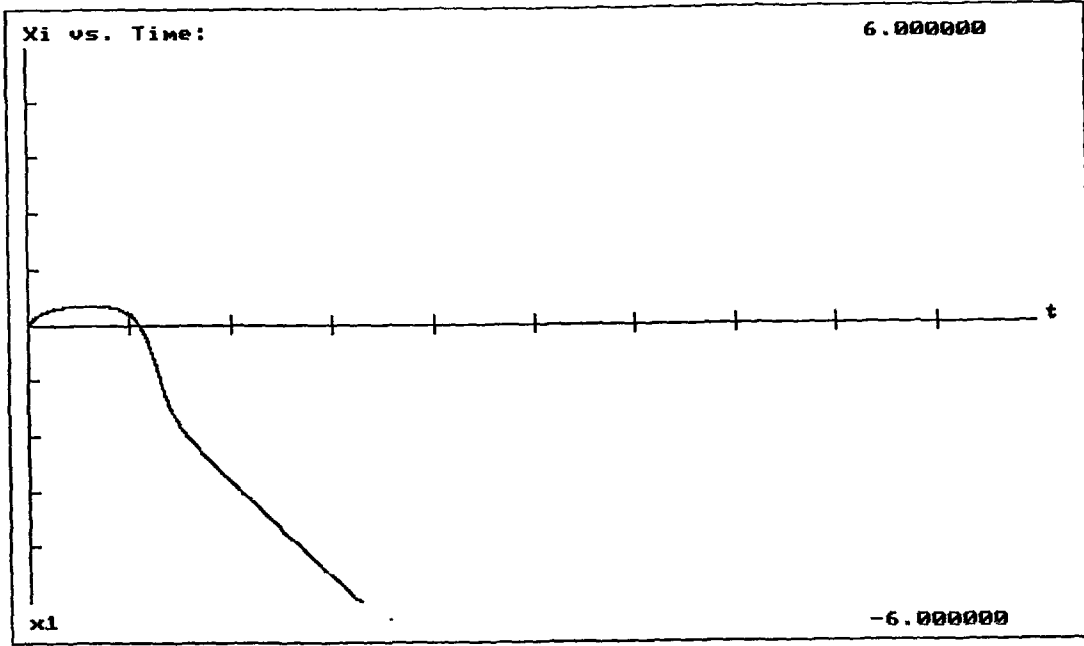
EQUATION:

$$x1' = k*(a-x1+x2)*(b-x1)$$

$$x2' = l*(x1-x2)$$

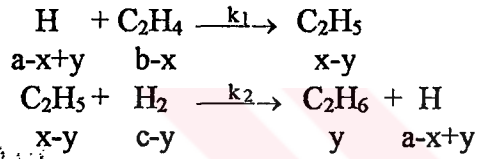
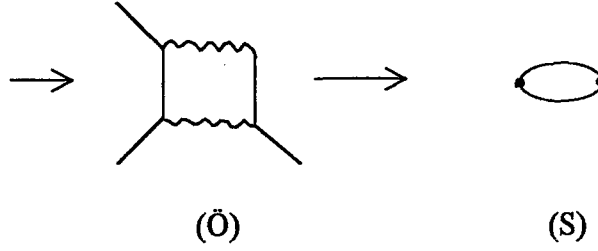
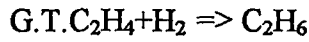
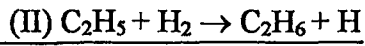
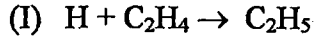
SETUP:

Equation: tz21 Dimension: 2 Algorithm: Runge-Kutta
Parameters: a=1.0000 b=0.5000 k=10.000 l=-3.200
Time Start: 0.000000 Time End: 6.000000
Step Size: 0.001000 Jumps/Plt: 1
3d Projection: X axis: x1 Y axis: x2 Z axis:
Map Poincare Plane: Ax + By + Cz + D = 0 P
Init Conds: 0.0000 0.0000



Yukarıdaki denklem takımlarının MATHEMATICA 2.1 ile çözümü ise Ek 1 de ve Farklı değiştergenler için çözümleri ise Ek 2 dedir.

2) Bir iki adımlı zincir tepkime ele alınsın.



$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} - \frac{dy}{dt} = k_1(a-x+y)(b-x) - k_2(x-y)(c-y) \\ \frac{dy}{dt} = k_2(x-y)(c-y) \end{cases} \quad (4.3)$$

Bu denklem takımı şu şekilde de yazılabilir:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = k_1(a-x+y)(b-x) \\ \frac{dy}{dt} = k_2(x-y)(c-y) \end{cases} \quad (4.4)$$

Bu doğrusal olamayan denklem takımının çözümü PHASER ise aşağıdaki gibi olur:

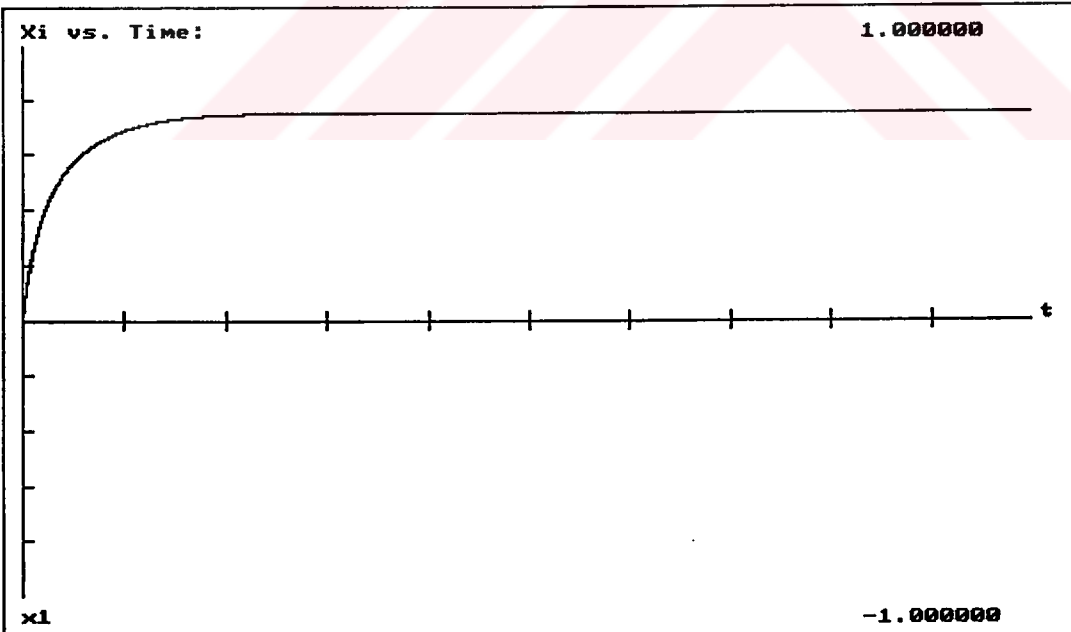
EQUATION:

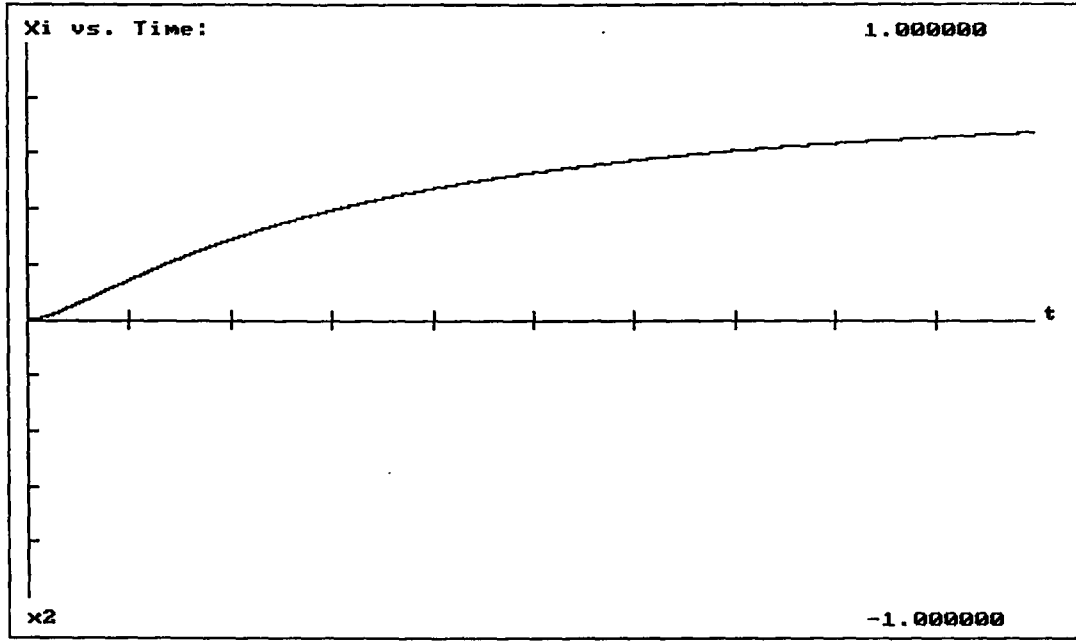
$$x_1' = k*(a-x_1+x_2)*(b-x_1)$$

$$x_2' = l*(x_1-x_2)*(c-x_2)$$

SETUP:

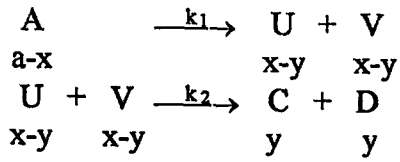
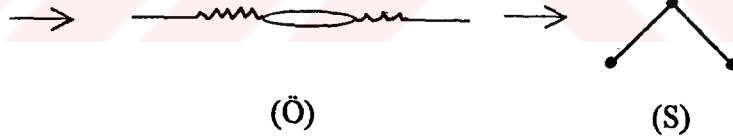
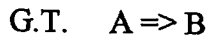
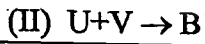
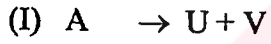
Equation: tz3 Dimension: 2 Algorithm: Runge-Kutta
 Parameters: a=1.0000 b=0.7500 c=1.6000 k=3.0100 l=0.1400
 Time Start: 0.000000 Time End: 15.00000
 Step Size: 0.001000 Jumps/Plt: 1
 3d Projection: X axis: x1 Y axis: x2 Z axis:
 Map Poincare Plane: Ax + By + Cz + D = 0 P
 Init Conds: 0.0000 0.0000





Bu denklem takımının MATHEMATICA 2.1 ile çözümü ise EK3 deki gibidir.

3) Son olarak da farklı bir iskelete karşılık gelen bir işlerge ele alımsın.



$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} - \frac{dy}{dt} = k_1(a-x) - k_2(x-y)^2 \\ \frac{dy}{dt} = k_2(x-y)^2 \end{cases} \quad (4.5)$$

Bu denklem takımı şu şekilde de yazılabilir:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = k_1(a-x) \\ \frac{dy}{dt} = k_2(x-y)^2 \end{cases} \quad (4.6)$$

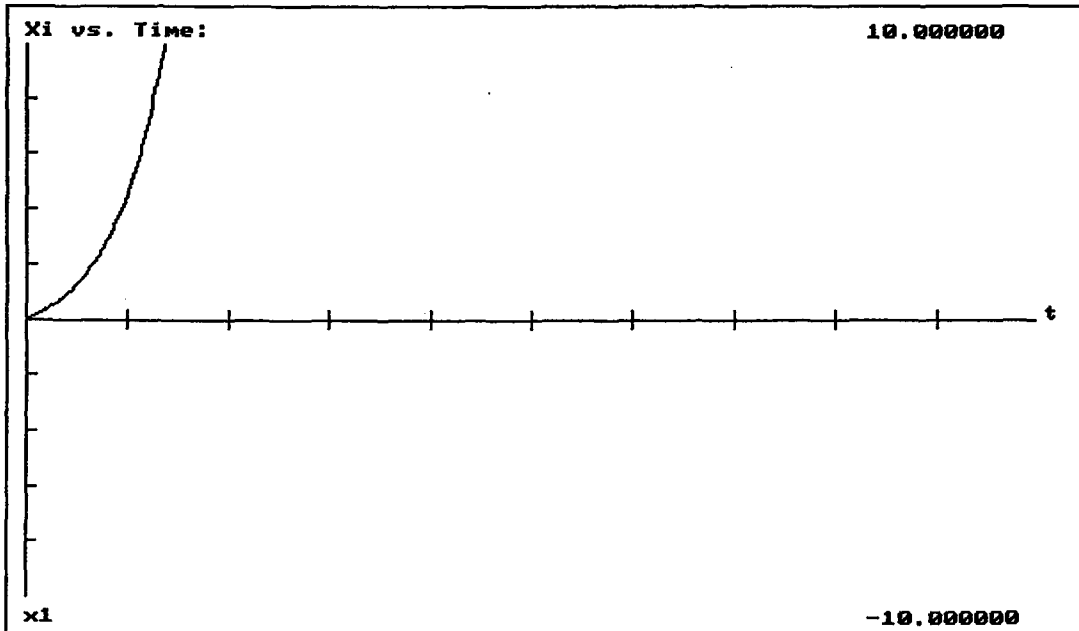
Bu doğrusal olmayan denklem takımının çözümü PHASER ile aşağıdaki gibi olur:

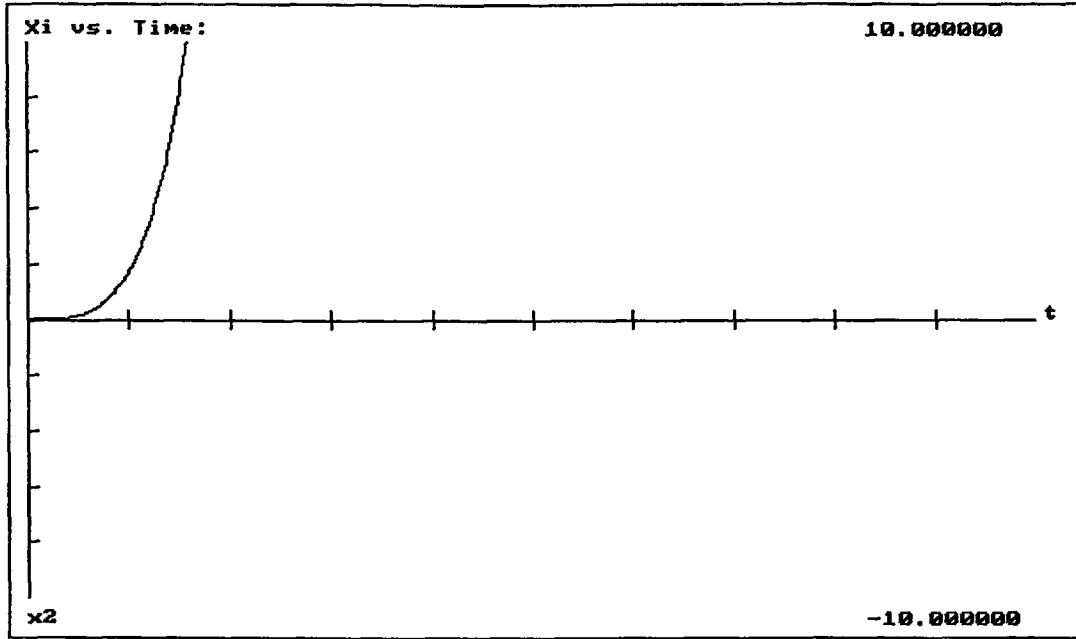
EQUATION:

$$\begin{aligned} x1' &= k*(a-x1) \\ x2' &= l*(x1-x2)^2.000 \end{aligned}$$

SETUP:

Equation: denk3 Dimension: 2 Algorithm: Runge-Kutta
 Parameters: a=-0.800 k=-3.200 l=1.3000
 Time Start: 0.000000 Time End: 6.000000
 Step Size: 0.010000 Jumps/Plt: 1
 3d Projection: X axis: x1 Y axis: x2 Z axis:
 Map Poincare Plane: Ax + By + Cz + D = 0 P
 Init Conds: 0.0000 0.0000





Bu denklemin de MATHEMATICA 2.1 ile çözümü EK4 deki gibidir.

SONUÇLAR

Bu çalışmada L. Mirsky'nin (2.3) denklemi

$$S(A) \leq \left(2 \|A\|_F^2 - \frac{2}{n} |\text{tr}(A)|^2 \right)^{1/2}$$

“yapısal deęiřtirim ilkesi” nde sözü edilen çizitlere uygulanarak, bu çizitleri temsil eden Hermit işlerinin en alt ve en üst özdeęerleri arasındaki aralık bulunur. Bunu çizitsel olarak ifade eden üst sınır formülü (2.4) denklemi

$$S(A) \leq 2\sqrt{d}$$

olarak elde edilmiştir.

H.Yuan'a ait en alt özdeęeri veren (2.5) denklemi ile

$$\lambda_1 \leq (2d-n+1)^{1/2}$$

en alt özdeęerin üst sınırı elde edilir. Böylece çizitlerin en alt ve en üst özdeęerler hakkında fikir edinilebilir. (2.4) ve (2.5) formüllerinin hata çözümlemesi de yapılmıştır. Bu özdeęerler nicem kimyasında enerji düzeylerine karşılık gelirler.

Bu uygulamaların sonucunda, aynı tepe sayısına sahip çizitlerde çizgi sayısı arttıkça en alt özdeęerin deęerinin büyüdüęünü ifade eden teorem elde edilmiştir (Teorem 2.2).

Atlamalı çizitlerde $n^+ = n^-$ olduğundan en alt özdeęerle en üst özdeęerin büyüklükleri birbirine eşittir bu yüzden en alt özdeęerle en üst özdeęerin arasındaki aralık en alt veya en üst özdeęerin iki katıdır.

Kulaklı çizitler için $S(A)$ aralığının üst sınırını veren formül yeniden düzenlendiğinde kulak kuvvetleri $|\xi| \neq 1$ için (2.11) denklemi,

$$S(A) \leq \left(4.d + 2. \sum_{i=1}^n |\xi_i|^2 - \frac{2}{n} \left| \sum_{i=1}^n \xi_i \right|^2 \right)^{1/2}$$

$|\xi_i|=1$ için ise, d : kenar sayısı, k : kulak sayısı olmak üzere,

$$S(A) \leq \left(4.d + 2.k - \frac{2}{n} k^2 \right)^{1/2}$$

(2.12) denklemi elde edilir.

Teorem 2.3 ile n -gen şeklindeki çizitlerde kenar sayısı tek olduğunda; Hückel durumundaki DBD, Möbius durumunda ters döndüğü ifade edilir. Bunun bir sonucu olarak, kenarları -1 kuvvetinde olan n -gen şeklindeki çizitlerde, çift kenar sayılı olanlar Hückel durumuna indirgenir.

Çizit sınıf sayısının üst sınırını veren denklem (2.15)

$$s(\text{DBD}) \leq \frac{(n+1)(n+2)}{2} - 2n \quad (2.15)$$

olarak bulunmuştur. Bu denklem kulaklı çizitleri içermez. Kulaklı çizitlerin sayısı $2n$ olarak (2.14) denkleminde elde edilmiştir. Tüm çizitleri kapsayan denklem ise (2.13) denklemi olarak elde edilir.

DEF kuramının nicel kısmını göstermek amacıyla ilk yapısı oluşturulan bilgisayar yazılımının (Sinanoğlu vd, 1994) Windows 95 ortamında kullanılan MSFORTRAN 4.0' a uyarlaması yapılarak, yeni alt programlar eklendi. Grafik kısmı tamamlandı.

Özellikle HAO yazılımı için gerekli giriş dosyasının hazırlanmasında HyperChem 1.0 kullanılarak süreden oldukça tasarruf edildi.

HyperChem'in çıkış dosyası, yapılan CEVIR.FOR bilgisayar yazılımı ile EHT yazılımına uygun giriş dosyası haline getirilir.

Yazılımın akışı metan özdeciği üzerinde anlatılmıştır. Yazılımın sonuçları ise siklopropan özdeciğinde anlatılmaktadır.

Son olarak da, Sinanoğlu'nun "Örüt Kuramı" ile bir tepkime işlgesinin hız denklemleri yazılarak, çözümleri PHASER ve MATHEMATICA 2.1 bilgisayar yazılımları ile bulunmuştur.



KAYNAKLAR

Coulson, C.A. ve Streitweiser, A., Jr., (1965), Dictionary of Pi-Electron Calculations, Freeman, San Francisco.

Deutsch, E., (1976), "On the Spread of Matrices and Polynomials", Linear Algebra and Its Applications, 22:49-55.

Hoffman, R., Howell, J., Rossi, A., Wallace, D., Harki, K, QCPE, Program No. QCMP011.

Koçak, H., (1986), Differential and Difference Systems in Mechanics and Physics, Springer-Verlag, New York.

Rojo, O. ve Jiménez, R., (1994), "A Decreasing Sequence of Upper Bounds for Perron Root", Computers Math. Applic., 28 (8) : 9-15.

Sinanoğlu, O., (1975), a) "Theory of Chemical Reaction Network. All Possible Mechanisms or Synthetic Pathways with Given Number of Reaction Steps or Species", Journal of American Chemical Society, 97(9):2309-2320. b) "Bir Kimyasal Maddeyi Yapmak için Gerekli Bütün Mümkün Organik Bireşim Yollarını, Verilen Bir Tepkimenin ise Bütün İşlergelerini Bulmak için Kuram-Üç Adımlı İşlergeler-", Türk Kimya Dergisi, 3:157-164.

Sinanoğlu, O. ve Lee, L.S., (1978), "Finding All Possible a priori Mechanisms for a Given Type of Overall Reaction. The Cases of 1) Molecular Rearrangements ($A \Rightarrow B$); and 2) Molecular Associations ($A+B \Rightarrow C$) Reaction Types", Theoretica Chimica Acta (Berl.), 48:287-299.

Sinanoğlu, O., (1984), a) "Structural Covariance of Graphs", Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65 : 255-265. b) "A Principle of Linear Covariance for Quantum Mechanics and The Electronic Structure Theory of Molecules and Other Atom Clusters", Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65 : 233-242. c) "Deformational Covariance of Graphs", Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65 : 267-270. d) "Non-Unitary Classification of Molecular Electronic Structures and Other Atom Cluster", Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65: 249-254. e) "A Theorem for Qualitative Deductions in Organic or Inorganic Chemistry Regarding the Relative Stabilities, Distortions and Reactions of Molecules", Chemical Physics Letters, 103 (4) : 315-322.

Sinanoğlu, O., (1985), "New Method for Qualitative Quantum Chemical Deductions on Organic or Inorganic Molecules or Clusters Directly from Structural Formulas or ORTEP Diagrams", Theoretica Chimica Acta, 65:251-270.

Sinanoğlu, O., (1988), a) "The New Pictorial Structural Covariance Method for Qualitative Quantum Chemistry II: Arenes With or Without Polyene Side Chains and Polyene Bridges", Journal of Mathematical Chemistry, 2:117-136. b) "The New Pictorial Structural Covariance Method for Qualitative Quantum Chemistry III: Fused Polycyclics and Their Ions", Journal of Mathematical Chemistry, 2:137-154. c) "Ten Classes of

Bicyclo[p.q.o] Pi-Hydrocabons, and Their Anions and Cations. Electronic Rules Directly From Structural Formulas”, *Tedrahedron Letters*, 29(8):889-892.

Sinanođlu, O., (1989), “Are Oxygen Rings (O_n) and Their Negative Ions (O_n^-) Unsatable?”, *International Journal of Quantum Chemistry*, 36:545-552.

Sinanođlu, O., (1992), “Nonorthogonality and the MO Energy Level Patterns of Molecules Deduced Directly from Structural Formulas by New VIF Methods as Compared with Mashine Computations”, *Internatinal Journal of Quantum Chemistry:Quantum Chemistry Symposium*, 26 : 137-151.

Sinanođlu, O., (1993), “Autocatalytic and Other General Networks fo Chemical Mechanisms, Pathways and Cycles: Their Systematic and Topological Generation”, *Journal of Mathematical Chemistry*, 12 : 319-363.

Sinanođlu, O., Alia, J. ve Hastings M.,(1994), “ Valency Interaction in $AH_m^{0\pm}$ (Hybrides of Main Group Elements, Radicals, Cations, Anions) and MO Level Patterns Directly from the Pictorial “VIF” Method Compared with Computer Calculations”, *Journal of Phys. Chem.*,98 : 5867-5877.

Pamuk, Ö.,(1989), “Sinanođlu’nun Yapısal Elektronik Yöntemi”, *TÜBİTAK Bilim ve Teknik Dergisi*, 22(254): 23-27.

Yuan, H., (1988), “A Bound on the Spectral Radius of Graphs”, *Linear Algebra Appl.*, 108: 135-139.

•

Bu tezde kullanılan terimler aşağıdaki sözlüklerden alınmıştır.

Oktay Sinanođlu, *Fiziksel Kimya Terimleri sözlüğü*, 1978, TDK, Ankara.

Dođan Çoker ve Timur Karaçay, *Matematik Terimleri Sözlüğü*, 1983, TDK, Ankara.

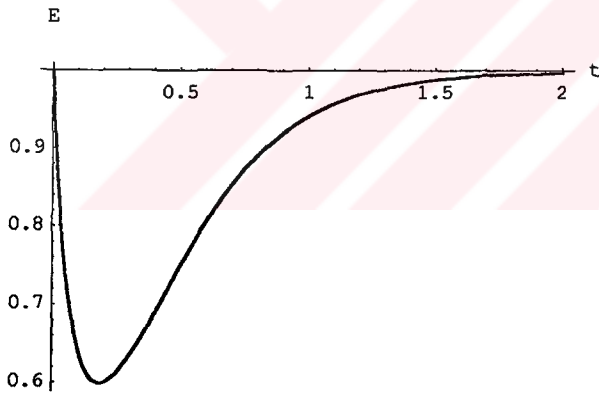
EKLER

Ek 1 Denklem 4.2'nin Mathematica 2.1 ile çözümü

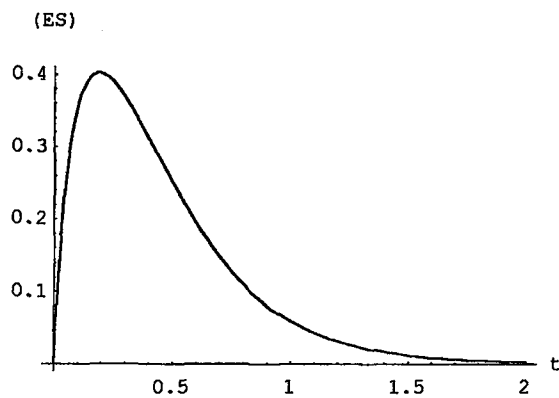
```

a=1;b=0.8;
k1=10;k2=3.2;
Cozum2= NDSolve[{x'[t]==k1*(a-x[t]+y[t])*(b-x[t]),
                 y'[t]==k2*(x[t]-y[t]),x[0]==0,y[0]==0},
                 {x[t],y[t]},{t,0,6}];
Plot[Evaluate[a-x[t]+y[t] /. Cozum2],{t,0,2},
     AxesLabel->{"t","E"},PlotRange->All]
Plot[Evaluate[x[t]-y[t] /. Cozum2],{t,0,2},
     AxesLabel->{"t","(ES)"},PlotRange->All]
Plot[Evaluate[b-x[t] /. Cozum2],{t,0,2},
     AxesLabel->{"t","S"},PlotRange->All]
xg=Plot[Evaluate[x[t] /. Cozum2],{t,0,2},
        AxesLabel->{"t","x(t)"},PlotRange->All]
yg=Plot[Evaluate[y[t] /. Cozum2],{t,0,2},
        AxesLabel->{"t","y(t)"},PlotRange->All,
        PlotStyle->{Dashing[{0.01}]}]
sg1=Show[xg,yg,AxesLabel->{"t","x(t) y(t)"}]

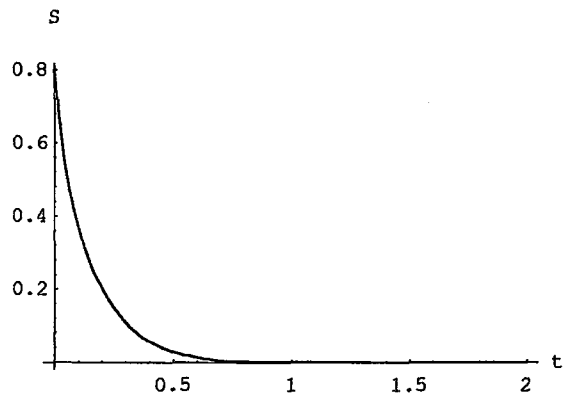
```



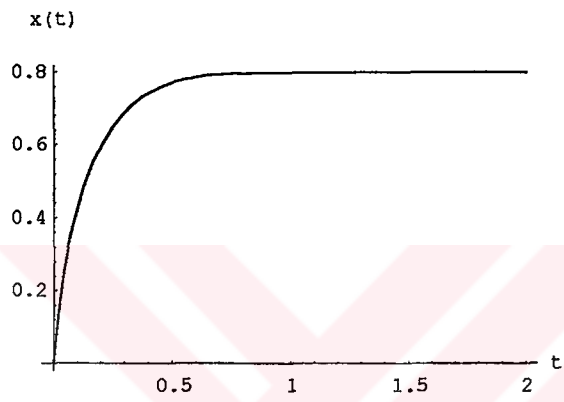
-Graphics-



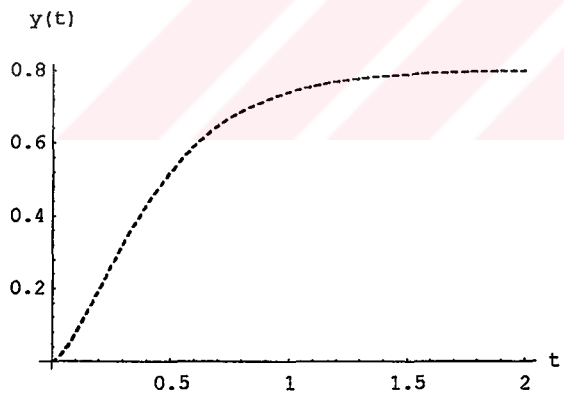
-Graphics-



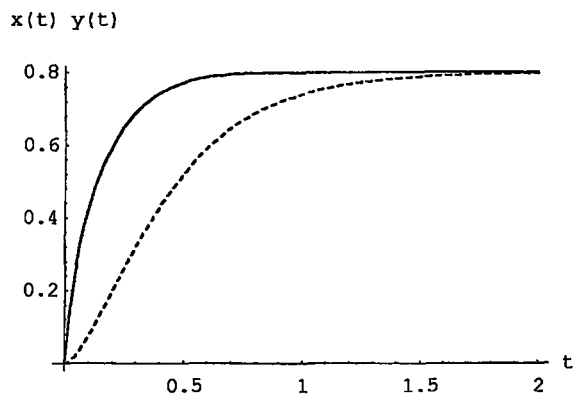
-Graphics-



-Graphics-



-Graphics-



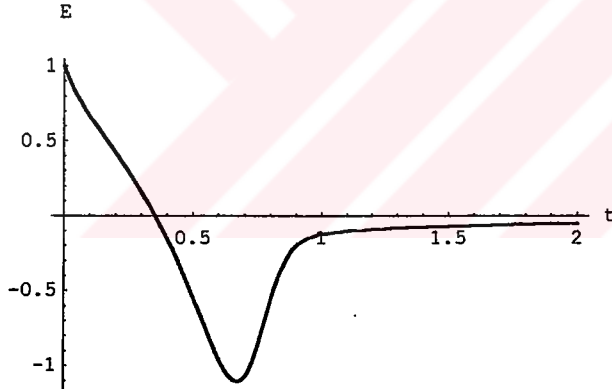
-Graphics-

Ek 2 Denklem 4.2'nin farklı deęiřtirgenler için Mathematica 2.1 ile çözümü

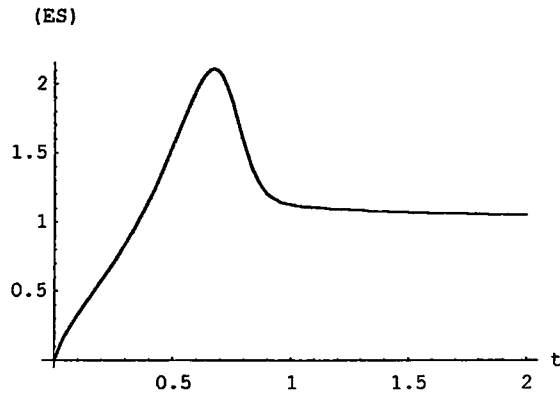
```

a=1;b=0.5;
k1=10;k2=-3.2;
Cozum1= NDSolve[{{x'[t]==k1*(a-x[t]+y[t])*(b-x[t]),
                 y'[t]==k2*(x[t]-y[t]),x[0]==0,y[0]==0},
                 {x[t],y[t]},{t,0,6}}];
Plot[Evaluate[a-x[t]+y[t] /. Cozum1},{t,0,2},
      AxesLabel->{"t","E"},PlotRange->All]
Plot[Evaluate[x[t]-y[t] /. Cozum1},{t,0,2},
      AxesLabel->{"t","(ES)"},PlotRange->All]
Plot[Evaluate[b-x[t] /. Cozum1},{t,0,2},
      AxesLabel->{"t","S"},PlotRange->All]
xg=Plot[Evaluate[x[t] /. Cozum1},{t,0,2},
        AxesLabel->{"t","x(t)"},PlotRange->All]
yg=Plot[Evaluate[y[t] /. Cozum1},{t,0,2},
        AxesLabel->{"t","y(t)"},PlotRange->All,
        PlotStyle->{Dashing[{0.01}]}]
sg1=Show[xg,yg,AxesLabel->{"t","x(t) y(t)"}]

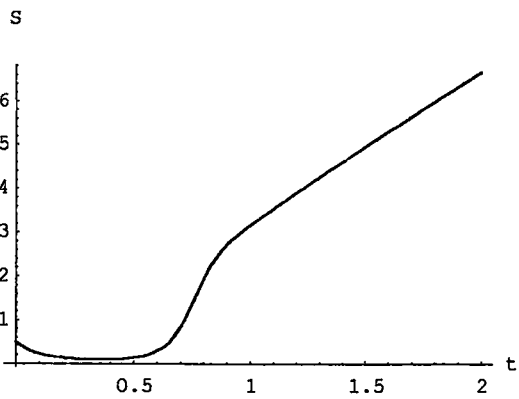
```



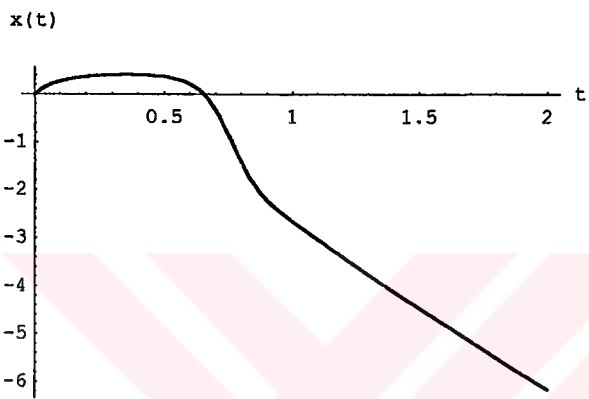
-Graphics-



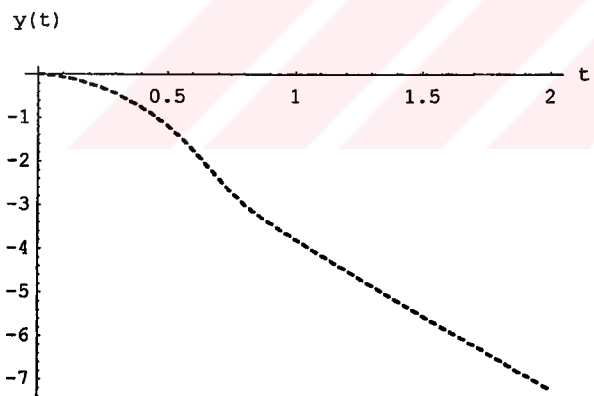
-Graphics-



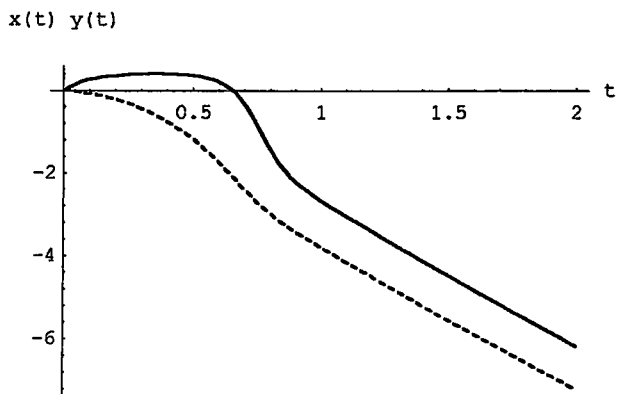
-Graphics-



-Graphics-



-Graphics-



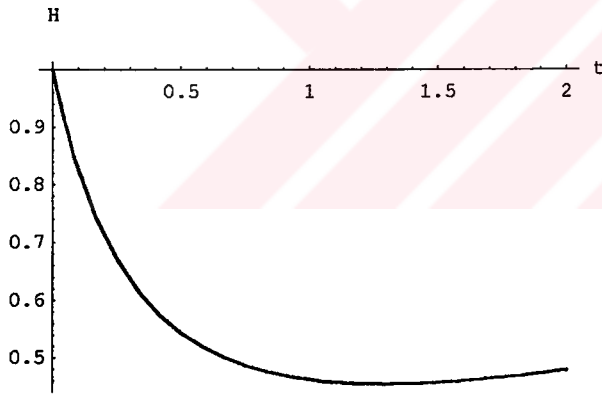
-Graphics-

Ek 3 Denklem 4.4'ün Mathematica 2.1 ile çözümü

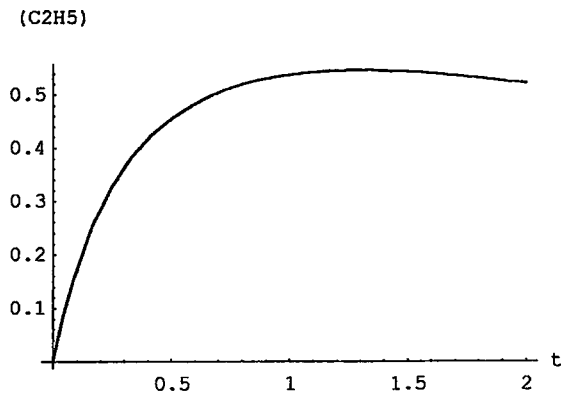
```

a=1;b=0.75;c=1.6;
k1=3.01;k2=0.14;
Cozum1= NDSolve[{{x'[t]==k1*(a-x[t]+y[t])*(b-x[t]),
  y'[t]==k2*(x[t]-y[t])*(c-y[t]),x[0]==0,y[0]==0},
  {x[t],y[t]},{t,0,15}}];
Plot[Evaluate[a-x[t]+y[t] /. Cozum1},{t,0,2},
  AxesLabel->{"t","H"},PlotRange->All]
Plot[Evaluate[x[t]-y[t] /. Cozum1},{t,0,2},
  AxesLabel->{"t","(C2H5)"},PlotRange->All]
Plot[Evaluate[b-x[t] /. Cozum1},{t,0,2},
  AxesLabel->{"t","C2H4"},PlotRange->All]
Plot[Evaluate[c-y[t] /. Cozum1},{t,0,2},
  AxesLabel->{"t","H2"},PlotRange->All]
xg=Plot[Evaluate[x[t] /. Cozum1},{t,0,2},
  AxesLabel->{"t","x(t)"},PlotRange->All]
yg=Plot[Evaluate[y[t] /. Cozum1},{t,0,2},
  AxesLabel->{"t","y(t)"},PlotRange->All,
  PlotStyle->{Dashing[{0.01}]}]
sg=Show[xg,yg,AxesLabel->{"t","x(t) y(t)"}]

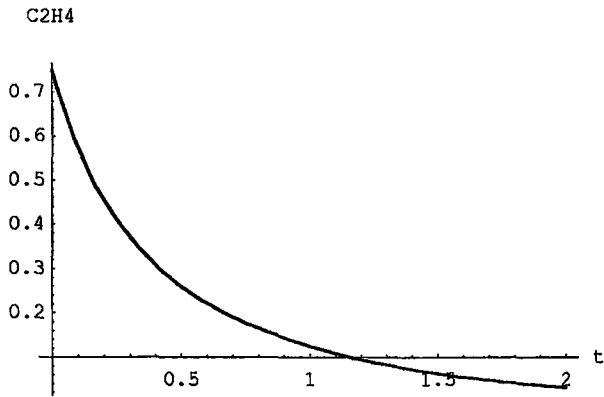
```



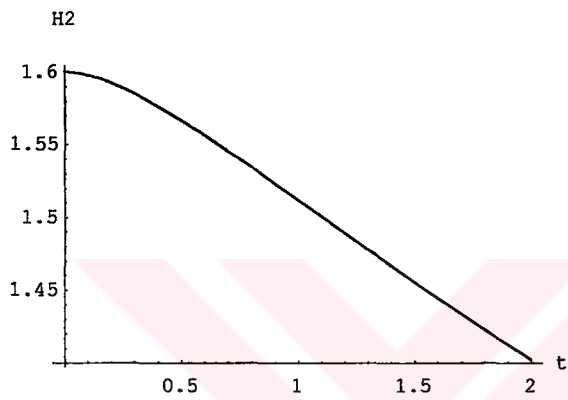
-Graphics-



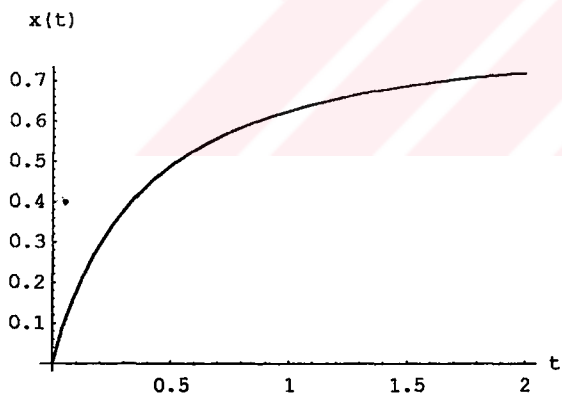
-Graphics-



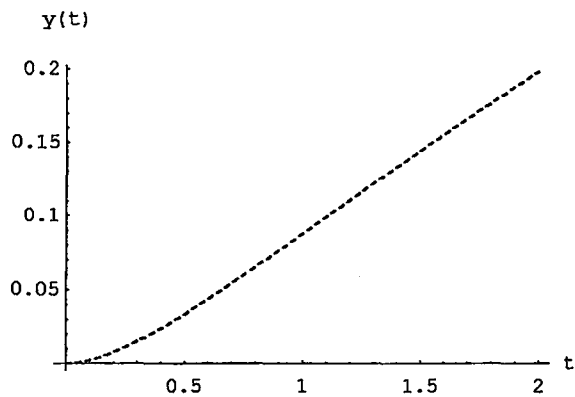
-Graphics-



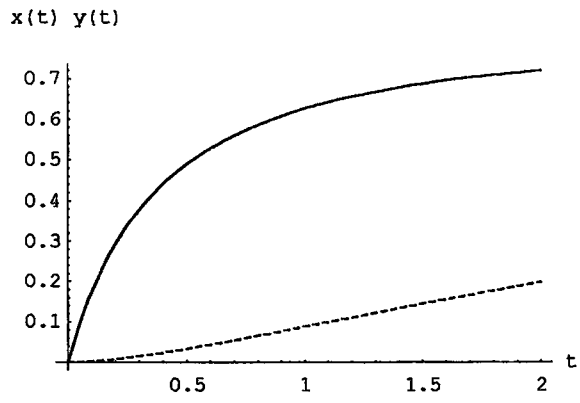
-Graphics-



-Graphics-



-Graphics-



-Graphics-

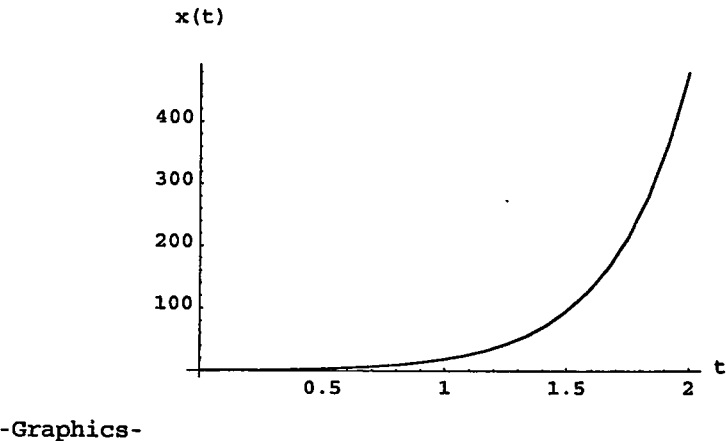
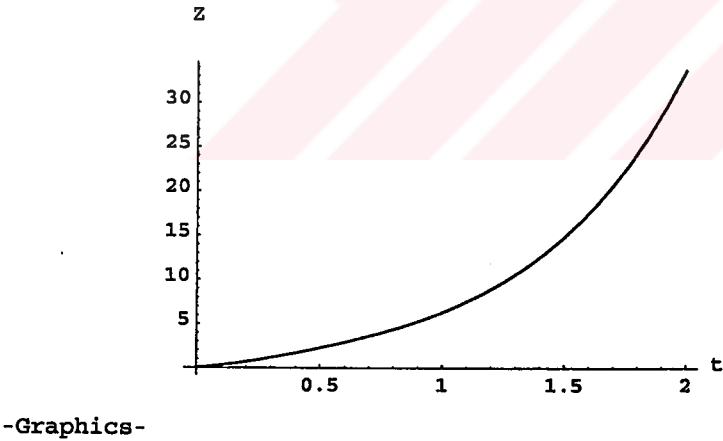
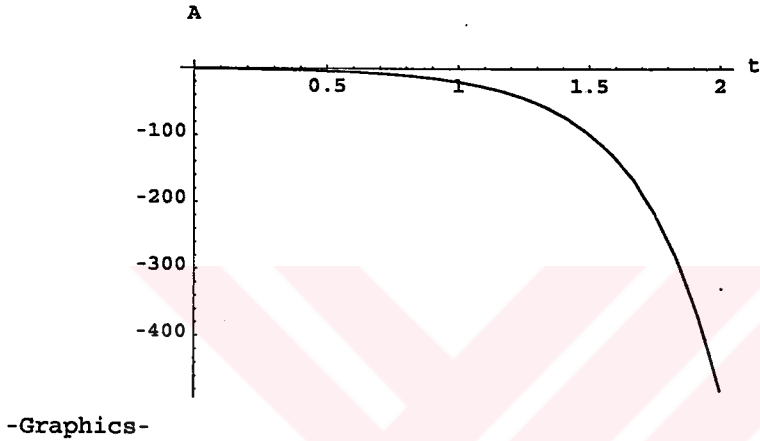


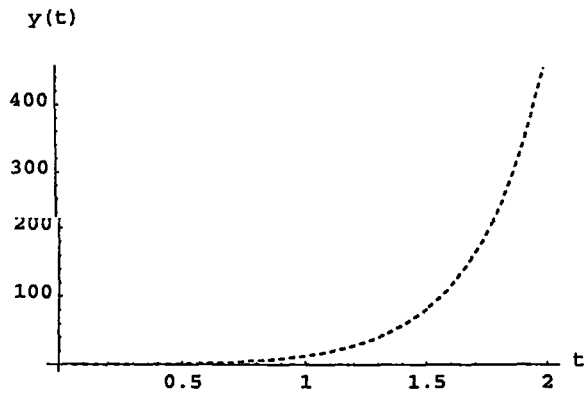
Ek 4 Denklem 4.6'nın Mathematica 2.1 ile çözümü

```

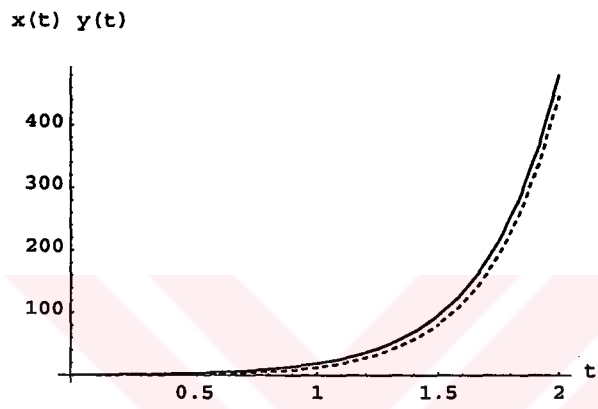
a=-0.8;k1=-3.2;k2=1.3;
Cozum1= NDSolve[{x'[t]==k1*(a-x[t]),
                 y'[t]==k2*(x[t]-y[t])^2,
                 x[0]==0,y[0]==0},{x[t],y[t]},{t,0,6}];
Plot[Evaluate[a-x[t] /. Cozum1],{t,0,2},
     AxesLabel->{"t","A"},PlotRange->All]
Plot[Evaluate[x[t]-y[t] /. Cozum1],{t,0,2},
     AxesLabel->{"t","Z"},PlotRange->All]
xg=Plot[Evaluate[x[t] /. Cozum1],{t,0,2},
     AxesLabel->{"t","x(t)"},PlotRange->All]
yg=Plot[Evaluate[y[t] /. Cozum1],{t,0,2},
     AxesLabel->{"t","y(t)"},PlotRange->All,
     PlotStyle->{Dashing[{0.01}]}]
sg=Show[xg,yg,AxesLabel->{"t","x(t) y(t)"}]

```





-Graphics-



-Graphics-

ÖZGEÇMİŞ

Doğum Tarihi	30.01.1969	
Doğum Yeri	Antalya	
Lise	1983-1986	İstanbul Küçükçekmece Lisesi
Lisans	1986-1990	Yıldız Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümü
Yüksek Lisans	1991-1993	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı
Doktora	1994-1999	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı
Çalıştığı Kurum	1991-Devam ediyor	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümü Araştırma görevlisi