İKİ ATOMLU MOLEKÜLLERDEN BAŞLAYARAK NANOMOLEKÜLLERİN YAPISININ İNCELENMESİ

Ferhunde GÖZÜYAŞARAN

Maddenin bütün hallerinin ve katıların gözlenebilir özellikleri elektronların ve çekirdeklerin hareketleri için Schrödinger çok parçacık denkleminin çözümleriyle kuantum mekaniği tarafından saptanır. Bütün bu özellikler denge özelliklerini ve denge durumunda bulunmadığındaki özellikleri içerir. Örneğin, dengede bir sistemin özellikleri bütün termodinamik davranışını içermektedir Bunlar durum denklemleri, faz diyagramları, öz ısı ve sıkıştırılabilirlik gibi özellikleri içermektedir. Bununla birlikte Schrödinger çok parçacık denkleminin yaklaşık çözümleri kabaca bile eldesine çalıştığımızda bu denklemin doğasındaki zorluklarla karşılaşılır. Genelde gözlenen bu denkleme birtakım yaklaşımlar yapmak olmuştur. Böylece ilgilenilen problemin temel enerjilerinin elde edilebileceği düşünülmektedir. Bu tezimizde biz, atom ve molekülün elektronları için Scrödinger denklemini çözmekte kullanılan tekniklerden ikisi olan Hartree Fock metodu ve Yoğunluk Fonksiyoneli teorisi üzerinde duracağız. Atom ve moleküllerin enerji hesaplamalarının temeli olan denklemleri oluşturup, hesapları yapabilmek için kullanılan Hartree-Fock (HF) ve Yoğunluk fonksiyonelleri teorisi yaklaşımlarını tarif edeceğiz. Son olarak da moleküller için kullanışlı Kohn-Sham tam değiştokuş methodu olarak ele alınan yerelleştirilmiş Hartree-Fock methodunun gerekliliğini, uygulanmasını ve önemini çeşitli kaynaklardan araştırarak vurgulayacağız. Burada kullanılan method ise LHF (Localized Hartree Fock) metodudur. Değiştokuş etkilerini tam olarak ele alan bir method olduğu vurgulanmaktadır. Bu sayede HF ve DFT ile incelemeye başladığımız küçük moleküllerden büyük moleküllerin incelenmesine bir geçiş sağlanabilmektedir.