Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Т. Оздоган, М. Орбей, Письмо в редакцию, *Матем. заметки*, 2007, том 82, выпуск 1, 156

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm3763>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.196.121.252

26 апреля 2023 г., 14:09:02

Письмо в редакцию
Т. Оздоган, М. Орбей

В нашей статье “Формула разложения для произведения двух нормированных присоединенных функций Лежандра и ее преимущества при вычислении многоцентровых интегралов” (Математические заметки, 2006, т. 80, № 1, 144–148) была плохо построена табл. 1. Она должна выглядеть следующим образом.

Таблица 1. Сравнение значений двухцентровых интегралов перекрытия (в атомной системе единиц) необходимого времени работы ЦП для двух различных процедур

<i>n</i>	<i>l</i>	<i>n'</i>	<i>l'</i>	λ	<i>p</i>	<i>t</i>	Работа [13]	ЦП (мсек)
12	7	12	7	3	15	0.3	2.29354178100625E-02	3 560
17	8	14	6	4	30	0.8	9.13905848808666E-07	1 390
21	16	19	13	11	0.5	0.2	9.49677653441923E-05	10 180
26	10	26	10	8	40	0.6	-6.16109990069403E-05	8 080

<i>n</i>	<i>l</i>	<i>n'</i>	<i>l'</i>	λ	<i>p</i>	<i>t</i>	Работа [4]	ЦП (мсек)
12	7	12	7	3	15	0.3	2.29354178095047E-02	10
17	8	14	6	4	30	0.8	9.14266771067075E-07	14
21	16	19	13	11	0.5	0.2	9.49677653399829E-05	95
26	10	26	10	8	40	0.6	-6.18053677005182E-05	48

Время работы ЦП дано в миллисекундах (мсек); фазовый коэффициент не учитывается в [13].

Одновременно хотелось бы отметить, что дата поступления нашей статьи указана неточно. Правильная дата поступления статьи 18 марта 2003 г. После даты поступления нашей статьи, Гусейнов с соавтором (I. I. Guseinov, B. A. Mamedov, *J. Mol. Struct.-Theochem*, **677** (2004), 7–10) опубликовали алгоритм генерации и хранения коэффициентов разложения произведения двух нормированных присоединенных функций Лежандра. Мы считаем, что использование приведенных в нашей статье формул для хранения коэффициентов разложения окажет существенное влияние на снижение требований к времени работы ЦП, затрачиваемом при расчете двухцентровых интегралов перекрытия по слейтеровским орбиталям. Также отметим, что учет свойств симметрии, приводимых Гусейновым (I. I. Guseinov, B. A. Mamedov, *J. Mol. Struct.-Theochem*, **677** (2004), 7–10) и нами (Т. Özdoğan, *Z. Naturforsch*, **59a** (2004), 743–749), позволит сократить время работы ЦП при использовании обоих методов.

Т. Оздоган
Университет Ондокуз Майис
E-mail: telhat@gmail.com

Поступило
30.01.2007

М. Орбей
Университет Ондокуз Майис
E-mail: morbay@omu.edu.tr