

**T.C.
RECEP TAYYIP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**MOLEKÜLLERİN ELEKTRON MOMENTUM DAĞILIMLARI,
COMPTON PROFİLLERİ ve MOMENTUMLARIN BEKLENEN
DEĞERLERİNİN HARTREE-FOCK-ROOTHAAN TEORİSİ ve
BAZI UYGULAMALAR**

Melek ERASLAN

Tez Danışmanı:

Prof. Dr. Telhat ÖZDOĞAN

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

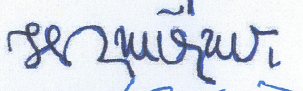
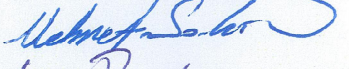
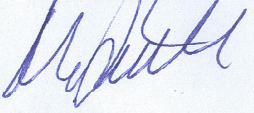
RİZE 2014


T.C.

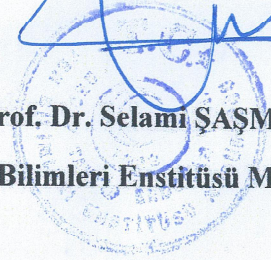
RECEP TAYYIP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MOLEKÜLLERİN ELEKTRON MOMENTUM DAĞILIMLARI,
COMPTON PROFİLLERİ ve MOMENTUMLARIN BEKLENEN
DEĞERLERİNİN HARTREE-FOCK-ROOTHAAN TEORİSİ ve
BAZI UYGULAMALAR

Bu çalışma, 27 / 05 / 2014 tarihinde yapılan sınav ile Fizik Anabilim Dalı'nda oy
birliği ile YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

	Ünvanı, Adı, Soyadı	İmzası
Tez Danışmanı	: Prof. Dr. Telhat ÖZDOĞAN	
Jüri Üyesi	: Prof. Dr. Mehmet ŞAHİN	
Jüri Üyesi	: Yard. Doç. Dr. Mustafa EMİRİK	


Prof. Dr. Selami ŞAŞMAZ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü



ÖNSÖZ

Bu çalışma Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalında “Yüksek Lisans Bitirme Çalışması” olarak hazırlanmıştır. Çalışmanın amacı; literatürde eksik teorisiyle varolan genel ve analitik ifadeler vermek yerine, belli bazı moleküllere uygulanabilecek dar bir çerçeveye sığdırılmış ayrıntıdan uzak ifadeler barındıran moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri için yeni genel ve analitik bir teorenin literatüre kazandırılmasıdır.

Tez konum temel amacının dışında; doğru düşünmeyi, her şeyi sorgulamayı, verimli çalışmayı ve sabrederek hedefe ulaşmayı somutlaştırarak uygulamayı ülkü edinmiş ve bu kapsamda üstün bir başarıya ulaşmıştır.

Bu hedefe ulaşmam için rotamı belirleyen, tezin hazırlanma aşamasının yanı sıra yüksek lisans hayatımın ilk gününden itibaren bir şekilde yanımda olduğunu bana hissettiren, her türlü desteğiyle yanımda olan, kısıtlı zamanlarında bile çalışabilmem için fırsatlar yaratan, sadece eğitimci yönüyle değil insani ve ahlaki değerleriyle de örnek aldığım, öğrencisi olarak anılmaktan gurur ve onur duyduğum, feyiz kaynağım çok değerli danışmanım Prof. Dr. Telhat ÖZDOĞAN’a saygılarımı sunar; emeklerine, fedakarlığına, büyük özverisine teşekkürü ve minnettarlığı bir borç bilirim.

Tezimin hazırlanması için öğrencisi olmadığım halde bana fırsat sunan Amasya Üniversitesi rektörü Prof. Dr. Metin ORBAY ve tüm idari kadrosuna teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca yoğun çalışma tempomda ihmal ettiğim, evlatları olma şerefine nail olduğum hayat kaynağım anneme babama, canımdan parça kardeşlerime, moral kaynağım dost ve arkadaşlarıma özürlerimi sunuyor anlayışları, hoşgörülerini ve hayatımdaki varlıkları için sonsuz teşekkür ediyorum.

Melek ERASLAN

2014

ÖZET

Moleküllerin Elektron Momentum Dağılımları, Compton Profilleri ve Momentumların Beklenen Değerlerinin Hartree-Fock-Roothaan Teorisi ve Bazı Uygulamalar

Elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri; atom, molekül veya kristallerin elektronik yapılarının incelenmesinde yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Doppler etkisinden dolayı kaymış Compton çizgisine Compton profili adı verilir. Diğer bir deyişle; Compton profili elektron momentumunun saçılma vektörü üzerindeki izdüşümüdür.

Atom veya moleküllerin elektron momentum dağılımları ve Compton profillerini bütün enerji değerleri için deneysel olarak elde etmek oldukça zaman alıcı ve masraflıdır. Bu yüzden atom ve moleküllerin momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerlerini teorik olarak hesaplamak oldukça önemlidir. Atomların elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerleri literatürde sıkça çalışılmakta ve teorisinde herhangi bir eksiklik bulunmamaktadır. Ancak moleküllerin bu özellikleri ile ilgili literatürdeki çalışmalar çoğunlukla belli bazı moleküllere özel uygulama niteliğindeki çalışmalar veya nümerik hesaplamalardır. Yani, moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerlerinin hesaplanması ile ilgili tam teorik, genel ve analitik ifadeler mevcut değildir.

Bu çalışmanın birinci kısmında moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerleri için Hartree-Fock-Roothaan metodu kullanılarak bütün moleküllere uygulanabilecek genel ve analitik ifadeler elde edilmiş ve elde edilen ifadelerin Maple-16 sembolik programlama dilinde programları yazılmıştır.

Bu çalışmanın ikinci kısmında ise moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen ifadeler kullanılarak H_2^+ , H_2 , HeH^+ , LiH , Li_2 , HF , F_2 , H_2O ve CH_4 moleküllerinin ilgili özellikleri hesaplanmış ve bu çalışmada sunulan teorinin ve yazılan bilgisayar

programının dođruluđu, elde edilen sonuçlar literatürdeki deđerler ile karşılaştırılarak incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: elektron momentum dağılımı, Compton profili, momentumların beklenen deđerı, Hartree-Fock-Roothaan metodu, yardımcı moleküler integral.

SUMMARY

Hartree-Fock-Roothaan Theory of Electron Momentum Distributions, Compton Profiles and the Expectation Values of Momentums of Molecules and Some Applications

Electron momentum distributions, Compton profiles and expectation values of momentums used extensively in the investigation of the electronic structure of atoms, molecules and crystals. Shifted Compton line due to Doppler effect is called as Compton profile. In other words; Compton profile is the projection of electron momentum on the scattering vector.

It is quite time consuming and expensive to get atomic or molecular electron momentum distributions and Compton profiles experimentally for all energy values. Therefore, it is quite important to calculate electron momentum distributions, Compton profiles and expectation values of momentums theoretically. Electron momentum distributions, Compton profiles and expectation values of momentums for atoms are studied in literature frequently and there is not deficiency in their theory. However, the studies in literature about these properties of molecules are especially applications studies on some special molecules or numeric calculations. That is, there are not full theoretical, general and analytical studies about the calculation electron momentum distributions, Compton profiles and expectation values of momentums for molecules.

In the first stage of this work, general and analytical expressions of electron momentum distributions, Compton profiles and expectation values of momentums for molecules have been derived by using Hartree-Fock-Roothaan method and computer programs for these expressions have been constructed in Maple-16 symbolic programming language.

In the second section of this study, using obtained expressions for electron momentum distributions, Compton profiles and expectation values of momentums, related properties of molecules H_2^+ , H_2 , HeH^+ , LiH , Li_2 , HF , F_2 , H_2O and CH_4 have been calculated, and the availability of the proposed theory and the constructed

computer programs have been investigated by comparing the obtained results with the available literature values.

Keywords: electron momentum distribution, Compton profile, expectation value of momentums, Hartree-Fock-Roothaan method, auxiliary molecular integral.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
ÖNSÖZ	I
ÖZET	II
SUMMARY	IV
İÇİNDEKİLER	VI
ŞEKİLLER DİZİNİ	VIII
TABLolar DİZİNİ	X
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	XIII
1. GENEL BİLGİLER	1
1.1. Giriş	1
1.2. İnelastik Saçılmanın Kinematığı	5
1.3. Saçılma Teorisi	8
1.4. Hartree-Fock Metodu	9
1.4.1. Baz Setleri (LCAO)	11
1.4.2. Elektronik enerji	12
1.4.3. Varyasyonel Prensip	14
1.4.4. Hartree-Fock-Roothaan Denklemleri	15
1.4.5. Öz-uyumlu Alan (SCF) Metodu	16
1.5. Literatür Özeti	17
1.6. Tezin Amacı	20
2. YAPILAN ÇALIŞMALAR	22
2.1. Materyal	22
2.1.1. Elektron Momentum Dağılımı	22
2.1.2. Compton Profili	22
2.1.3. Momentumların Beklenen Değerleri	23
2.2. Metot	23
2.2.1. Moleküllerin Elektron Momentum Dağılımı	23
2.2.2. Moleküllerin Compton Profillerinin HFR Teorisi	25
2.2.3. Momentumların Beklenen Değerleri	26
2.2.4. Yardımcı Moleküler İntegraller	27
3. BULGULAR	45
3.1. Giriş	45

Sayfa No

3.2. H_2^+ Molekülü	45
3.3. H_2 Molekülü	48
3.4. HeH^+ Molekülü	51
3.5. LiH Molekülü	53
3.6. Li_2 Molekülü	56
3.7. HF Molekülü	60
3.8. F_2 Molekülü	63
3.9. H_2O Molekülü	66
3.10. CH_4 Molekülü	69
4. TARTIŞMA VE SONUÇLAR	73
4.1. Elektron Momentum Dağılımı ile İlgili Hesaplamalar	75
4.2. Compton Profili ile İlgili Hesaplamalar	78
4.3. Momentumların Beklenen Değerleri ile İlgili Hesaplamalar	80
5. ÖNERİLER	83
6. KAYNAKLAR	84
7. EKLER	91
EK A. Slater Tipli Orbitalerin Fourier Dönüşümü	91
EK B. Elektron Momentum Dağılımı Yardımcı Moleküler İntegralleri	93
EK C. $K_{lm,l'm'}(p,R)$ Kırınım Çarpanı ve $C^L(lm,l'm')$ Gaunt Katsayıları	99
EK D. Compton Profili Yardımcı Moleküler İntegralleri	102
EK E. $C_{m'}^m(\alpha,\beta;q,R)$ ve $S_{m'}^m(\alpha,\beta;q,R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri	104
EK F. $J_{m'}^{ml}(\alpha,\beta;q,R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri	108
EK G. $C_{m'}^m(\alpha,\beta;R)$ ve $S_{m'}^m(\alpha,\beta;R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri	110
EK H. $I_{m'}^{ml}(\alpha,\beta;R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri	114
EK I. $C_{m'}^m(\alpha,q;R)$ ve $S_{m'}^m(\alpha,q;R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri	116
EK J. $E_{m'}(\alpha)$ Yardımcı Moleküler İntegrali	130
EK K. $G_{m'}(\gamma,Q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali	132
EK L. $J_{m'}^m(\alpha,\beta;q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali	137
EK M. $F_{m'}(\alpha,q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali	141
ÖZGEÇMİŞ	145

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No

Şekil 1.1. $\omega = \omega_1 - \omega_2$ enerjili ve $\vec{k} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$ momentumlu quasi parçacık için iki boyutlu dispersiyon ilişkisi.....	4
Şekil 1.2. Yoğun maddenin elektronları tarafından saçılan ω enerjili ve \vec{k} momentumlu bir fotonun baskın etkileşimleri	4
Şekil 1.3. Saçılan X-ışını spektrumu.....	6
Şekil 1.4. Öz-uyumlu alan prosedürü	17
Şekil 3.1. H_2^+ molekülünün elektron momentum dağılımı.....	46
Şekil 3.2. H_2^+ molekülünün Compton profil değişimi.....	47
Şekil 3.3. H_2 molekülünün elektron momentum dağılımı	49
Şekil 3.4. H_2 molekülünün Compton profil değişimi	50
Şekil 3.5. HeH^+ molekülünün elektron momentum dağılımı	52
Şekil 3.6. HeH^+ molekülünün Compton profil değişimi	52
Şekil 3.7. LiH molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları	54
Şekil 3.8. LiH molekülünün elektron momentum dağılımı.....	54
Şekil 3.9. LiH molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri.....	55
Şekil 3.10. LiH molekülünün Compton profil değişimi	55
Şekil 3.11. Li_2 molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları	58
Şekil 3.12. Li_2 molekülünün elektron momentum dağılımı.....	58
Şekil 3.13. Li_2 molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri.....	59
Şekil 3.14. Li_2 molekülünün Compton profil değişimi	59
Şekil 3.15. HF molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları	61
Şekil 3.16. HF molekülünün elektron momentum dağılımı	61
Şekil 3.17. HF molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri	62
Şekil 3.18. HF molekülünün Compton profil değişimi.....	62
Şekil 3.19. F_2 molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları.	64
Şekil 3.20. F_2 molekülünün elektron momentum dağılımı	64
Şekil 3.21. F_2 molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri.....	65
Şekil 3.22. F_2 molekülünün Compton profil değişimi	65

Sayfa No

Şekil 3.23. H_2O molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları.	67
Şekil 3.24. H_2O molekülünün elektron momentum dağılımı	67
Şekil 3.25. H_2O molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri...	68
Şekil 3.26. H_2O molekülünün Compton profil değişimi	68
Şekil 3.27. CH_4 molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları...	70
Şekil 3.28. CH_4 molekülünün elektron momentum dağılımı	70
Şekil 3.29. CH_4 molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri....	71
Şekil 3.30. CH_4 molekülünün Compton profil değişimi	71

TABLolar DİZİNİ

Sayfa No

Tablo 2.1. $F_{mn}^l(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri.....	33
Tablo 2.2. $F_{mn}^l(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri	34
Tablo 2.3. $E_{mn}^l(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri	37
Tablo 2.4. $E_{mn}^l(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri	38
Tablo 2.5. $I_{mn}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri	42
Tablo 2.6. $I_{mn}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri	45
Tablo 3.1. Atomların perdeleme sabitleri	45
Tablo 3.2. H_2^+ molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu	46
Tablo 3.3. H_2^+ molekülünün elektron momentum dağılımları.....	46
Tablo 3.4. H_2^+ molekülünün Compton profil değerleri.....	47
Tablo 3.5. H_2^+ molekülünün momentumlarının beklenen değerleri	48
Tablo 3.6. H_2 molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu	48
Tablo 3.7. H_2 molekülünün elektron momentum dağılımları	49
Tablo 3.8. H_2 molekülünün Compton profil değerleri.....	50
Tablo 3.9. H_2 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri.....	50
Tablo 3.10. HeH^+ molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu.....	51
Tablo 3.11. HeH^+ molekülünün elektron momentum dağılımları	51
Tablo 3.12. HeH^+ molekülünün Compton profil değerleri	51
Tablo 3.13. HeH^+ molekülünün momentumlarının beklenen değerleri.....	53
Tablo 3.14. LiH molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu.....	53
Tablo 3.15. LiH molekülünün elektron momentum dağılımları	54
Tablo 3.16. LiH molekülünün Compton profil değerleri.....	55
Tablo 3.17. LiH molekülünün momentumlarının beklenen değerleri.....	56
Tablo 3.18. Li_2 molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu	57
Tablo 3.19. Li_2 molekülünün elektron momentum dağılımları	58
Tablo 3.20. Li_2 molekülünün Compton profil değerleri	59

Sayfa No

Tablo 3.21. Li_2 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri.....	60
Tablo 3.22. HF molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu	60
Tablo 3.23. HF molekülünün elektron momentum dağılımları.....	61
Tablo 3.24. HF molekülünün Compton profil değerleri	62
Tablo 3.25. HF molekülünün momentumlarının beklenen değerleri	62
Tablo 3.26. F_2 molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu	63
Tablo 3.27. F_2 molekülünün elektron momentum dağılımları	64
Tablo 3.28. F_2 molekülünün Compton profil değerleri	65
Tablo 3.29. F_2 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri	65
Tablo 3.30. H_2O molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu	66
Tablo 3.31. H_2O molekülünün elektron momentum dağılımları	67
Tablo 3.32. H_2O molekülünün Compton profil değerleri	68
Tablo 3.33. H_2O molekülünün momentumlarının beklenen değerleri.....	69
Tablo 3.34. CH_4 molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu.....	70
Tablo 3.35. CH_4 molekülünün elektron momentum dağılımları	70
Tablo 3.36. CH_4 molekülünün Compton profil değerleri	71
Tablo 3.37. CH_4 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri.....	72
Tablo A.1. Slater tipli orbitallerin Fourier dönüşümünün radyal kısmı.....	92
Tablo B.1. Elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralleri -1	93
Tablo B.2. Elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralleri -2	94
Tablo B.3. Elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralleri -3	95
Tablo B.4. Elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralleri -4	97
Tablo C.1. $K_{lm,l'm'}(p, R)$ kırınım çarpanının bazı sembolik değerleri	99
Tablo C.2. $C^L(lm, l'm')$ Gaunt katsayılarının bazı sembolik değerleri.....	100
Tablo D.1. Compton profili yardımcı moleküler integralleri -1	102
Tablo D.2. Compton profili yardımcı moleküler integralleri -2	103
Tablo E.1. $C_{m'}^m(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri	105
Tablo E.2. $S_{m'}^m(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri .	107
Tablo F.1. $J_{m'}^m(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri..	108

Sayfa No

Tablo F.2. $J_{mn}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri... 109	109
Tablo G.1. $C_{mn}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri 111	111
Tablo G.2. $S_{mn}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri ... 113	113
Tablo H.1. $I_{mn}^{ml}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri.... 114	114
Tablo H.2. $I_{mn}^{ml}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri 115	115
Tablo I.1. $C_{mn}(\alpha, q; R)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri..... 122	122
Tablo I.2. $S_{mn}(\alpha, q; R)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri..... 123	123
Tablo I.3. $C_{mn}(\alpha, R)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri 124	124
Tablo I.4. $\bar{C}_{mn}(\alpha, q; R)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri..... 125	125
Tablo I.5. $S_{mn}(\alpha, R)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri..... 126	126
Tablo I.6. $\bar{S}_{mn}(\alpha, q; R)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri..... 127	127
Tablo I.7. $M_{mn}(\alpha, q)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri..... 128	128
Tablo I.8. $I_n(\alpha, q)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri 129	129
Tablo I.9. $I_{-n}(\alpha, q)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri 129	129
Tablo J.1. $E_{mn}(\alpha)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri..... 131	131
Tablo K.1. $G_{mn}(\gamma, Q)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri..... 135	135
Tablo K.2. $G_{-mn}(\gamma, Q)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri 136	136
Tablo L.1. $J_{mn}^m(\alpha, \beta; q)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri 139	139
Tablo L.2. $J_{mn}^m(\alpha, \beta; q)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri 140	140
Tablo M.1. $F_{mn}(\alpha, q)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri..... 144	144

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler

h	: Planck sabiti ($\hbar = h/2\pi$)
ν	: frekans
c	: ışık hızı
\vec{k}	: dalga vektörü
ω	: enerji
Ω	: katı açısı
c_{jk}	: lineer kombinasyon katsayısı
ε_i	: orbital enerjisi
Z	: çekirdek yükü
E_0	: taban durum enerjisi
\vec{p}	: lineer momentum
\vec{A}	: elektromanyetik alanın vektör potansiyeli
\vec{q}	: foton momentum transfer vektörünün büyüklüğü
θ	: saçılma açısı
\vec{k}_{TF}	: Thomas-Fermi perdeleme momentumu
\vec{v}_F	: elektron Fermi hızı
$\hat{J}(\vec{x}_1)$: Coulomb operatörü
$\hat{K}(\vec{x}_1)$: exchange operatörü

J_{ij}	: Coulomb integrali
K_{ij}	: exchange integrali
r_e	: klasik elektron yarıçapı
\hat{F}	: Fock operatörü
$F_{\mu\nu}$: Fock matrisi
$S_{\mu\nu}$: overlap matrisi
$P_{\lambda,r}$: yük yoğunluk matrisi
σ_{Th}	: Thomson tesir kesiti
$\rho(r)$: elektron yoğunluğu
$\psi(\vec{r})$: elektron dalga fonksiyonu
$e^{i\vec{q}\vec{r}}$: düzlem dalga
$\chi_{nlm}(\alpha, \vec{r})$: atomik orbital
$S_{lm}(\theta, \varphi)$: küresel harmonik
$U_{nlm}(\alpha, \vec{p})$: Slater tipli atomik orbitallerin Fourier dönüşümü
$f_{nl}(\alpha, q)$: Slater tipli orbitallerin Fourier dönüşümünün radyal kısmı

Kısaltmalar

LCAO	: atomik orbitallerin lineer kombinasyonu
GTO	: Gaussian tipli orbitaller
STO	: Slater tipli orbitaller
HFR	: Hartree-Fock-Roothaan

1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

Bir madde hakkında bilgi sahibi olmak ya da yapısını belirlemek için üzerine ışık gönderip madde ile etkileşmesini sağlamak gerekir. Bu etkileşme ise genellikle spektroskopik yöntemlerinden biri olan X -ışını spektroskopisi ile incelenir. Bu spektroskopik yöntemin çalışma esası, genellikle X -ışınlarının soğurulması, yayımlanması, kırınımı ya da saçılmasına dayanır. Maddenin yapısını belirlemek için üzerine ışın gönderildiğinde, madde ve ışın arasında bir etkileşim meydana gelir. Bu etkileşim neticesinde; gelen radyasyonun doğrultusunda veya enerjisinde meydana gelen değişme sürecine *saçılma* denir. Elektromanyetik radyasyonun madde ile etkileşmesinde meydana gelen saçılma, saçılan ışının enerjisine ve faz ilişkisine göre *koherent* ve *inkoherent* saçılma olarak iki gruba ayrılır. Gelen fotonun enerjisi ile saçılan fotonun enerjisi aynı olan saçılmaya *koherent saçılma* denir. *İnkoherent saçılma* ise, bir fotonun genellikle başlangıçta durgun olan serbest elektronlardan veya bağlanma enerjisi foton enerjisine göre küçük olan elektronlardan enerji kaybetmesi olarak bilinir. Bu işlemde, gelen foton serbest bir elektronla etkileşerek daha düşük bir enerji ile saçılır ve kalan fotonların enerjileri nispeten büyük olduğunda, fotonların atomun bağlı elektronları tarafından saçılmaları da inkoherent veya Compton saçılması olarak isimlendirilir. İnelastik, inkoherent veya modifiye X -ışını saçılması ifadelerinin hepsi X -ışınlarının yoğun madde ile etkileşimlerini ifade eder. İnelastik saçılmalardan ilk ve en çok çalışılan Compton saçılması olduğu için, inelastik saçılma kastedilirken çoğu zaman Compton saçılması ifadesi kullanılır (Schülke, 2007).

İnkoherent saçılmanın tarihi gelişimi, 1895 yılında Röntgen tarafından X -ışınlarının ve 1900'lü yıllarda Radyumdan yayınlanan gama radyasyonunun Villard tarafından keşfedilmesiyle (Villard, 1900) başlamıştır. O zamanlar X -ışınlarının yansımaları, kırılması veya polarizasyonu bilinmediği için bu konular Röntgen'e bir muamma gibi geliyordu. Röntgen, X ve gama ışınlarının diğer elektromanyetik radyasyonlardan farklı olduğunu düşünüyordu. Bununla birlikte Thomson, X ve gama ışınlarını, gerilmiş bir ip boyunca bir pulsun mekanik yayılmasına benzer esasa dayanan elektromanyetik puls teorisi ile birleştirmiş ve bunları maddedeki elektronlar tarafından saçılmış olabilecek pulslar gibi göstermiştir (Thomson, 1903). Barkla'nın saçılma tesir kesitinin elektron yoğunluğu ile orantılı olduğunu, daha da önemlisi, yaptığı tekli ve

çoklu saçılma deneylerinde X -ışınlarının polarize olduğunu göstermesi Thomson teorisine önemli bir destek olmuştur (Barkla, 1903). 1920 yılında Gray'ın hem gama ışınları hem de X -ışınları ile yaptığı deneylerde saçıcılardaki farklı elektronlardan saçılan fotonların düşük enerji bölgelerindeki saçılmaların dalga boyundaki değişimleri belirlenmiştir (Thomson, 1980). İnkoherent saçılma tesir kesiti, elektronları serbest ve durgun kabul eden Klein-Nishina tarafından teorik olarak incelenmiştir (Klein ve Nishina, 1929). Bu olaylar 1929'da Klein-Nishina'nın saçılma tesir kesitinin açısı ile değişimini keşfetmesi ve birkaç yıl sonra da diğer özelliklerin Compton tarafından tam olarak açıklanmasına kadar anlaşılammıştır. Ancak araştırmacılar daha sonraki yıllarda, özellikle düşük enerjilerde teori ile deneysel neticelerin uyum içinde olmadıklarını tespit etmişlerdir. Böylece inkoherent saçılmaya bağlı elektronların katkılarını araştırmak için bazı araştırmacılar K tabakasından inkoherent saçılma diferansiyel tesir kesiti çalışırken, bazıları da hedeften inkoherent saçılan fotonları tespit etmek suretiyle diferansiyel tesir kesiti üzerine çalışmışlardır. Yapılan bu çalışmalar, düşük atom numaralı elementlerin referans alınarak pik alanlarının karşılaştırılması genel prensibine dayanmaktadır (Cooper, 1985).

İnkoherent saçılma ile ilgili çalışmalar; reaktör kaplama, endüstriyel radyografi, medikal fizik, radyobiyojoloji, radyoterapi, enerji depolama, görüntüleme, astronomi, madde analizi, kalitatif ve kantitatif analiz gibi pek çok alanda kullanılmaktadır. Ayrıca X -ışınlarının elektronlardan inkoherent saçılması, dalga fonksiyonlarının belirlenmesinde de kullanılmaktadır (Bushuev ve Kuz'min, 1977). Geçen yıllar boyunca Compton saçılması daha geniş ve farklı bilim dallarında uygulama bulunduğundan önemi gittikçe artmaktadır (Schülke, 2007; Cooper vd., 2004).

Compton spektroskopisi, diğer spektroskopik yöntemlerden farklıdır. Çünkü Compton spektroskopisinde diğer spektroskopik yöntemlerden farklı olarak enerji yerine momentum daha önemlidir. Bununla birlikte, inelastik X -ışını saçılmasının en ilginç özelliği, deneme parçacığının quasi parçacık (parçacığımsı) olmasıdır. Bu quasi parçacığın enerji ve momentumu önemli bir fonksiyonla ifade edildiği için herbir quasi momentum için geniş bir enerji aralığı söz konusudur. Bu durum ω_1 enerjili ve \vec{k}_1 dalga vektörlü gelen fotonun ε enerjili ve \vec{p} momentumlu bir elektronla etkileştiği ve bu etkileşmeden ω_2 enerjili ve \vec{k}_2 dalga vektörlü başka bir foton çıktığı kabul edilerek

kolayca anlaşılabilir. Etkileşimde enerji ve momentumunun korunması durumunda etkileşim $\omega = \omega_1 - \omega_2$ enerjili ve $\vec{k} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$ momentumlu quasi parçacığın absorpsiyonuna karşılık gelir. Burada ω ve \vec{k} 'nin her ikisi ω_1 ve θ saçılma açısına bağlıdır (Cooper vd., 2004).

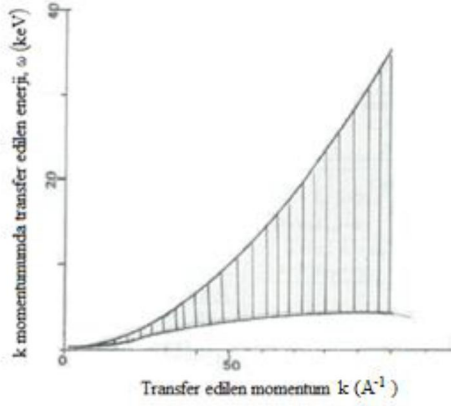
Yukarıda söylediklerimizi açıklayalım. Bunun için ω_{cp} ve \vec{k} sırasıyla Compton enerji kayması ve başlangıçta durgun olan elektrona aktarılan momentum olsun. ω_{cp} ve k arasındaki ilişki

$$\omega_{cp} = \frac{2\omega_1^2 \sin(\theta/2)}{2\omega_1 \sin^2(\theta/2) + mc^2} = \frac{1.917 k^2 \omega_1}{1.947 k^2 + 511 \omega_1} \quad (1.1)$$

ifadesi ile verilir. Burada ω_1 keV ve k ise \AA^{-1} boyutundadır. Saçılan elektron \vec{p} başlangıç momentumuna sahip ise (1.1) denklemi

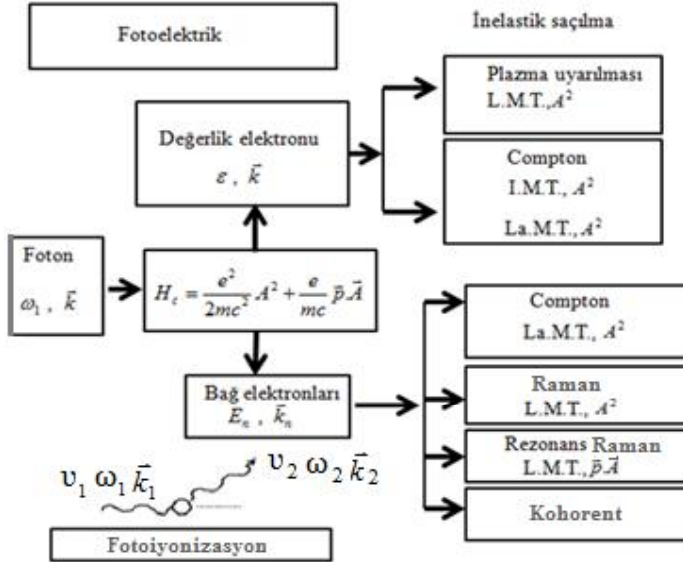
$$\omega = \frac{0.986 qk + 0.261 k^2}{0.986 qk + 0.261 k^2 + 68.5 \omega_1} \omega_2 \quad (1.2)$$

denkleme dönüşür. Burada q , \vec{p} momentumunun \vec{k} doğrultusundaki izdüşümüdür (atomik birimlerde). Bu yüzden bir fotonun Compton saçılmasını serbest parçacık ve quasi parçacığın absorpsiyonu ile birlikte gözönüne alabiliriz (quasi parçacığın dispersiyonu Şekil 1.1'de verilmiştir). Şekil 1.1'de görüldüğü gibi; katılarda temel uyarılmaların enerji spektrumu oldukça geniş olduğu halde momentumları Brillouin bölgesi ile sınırlıdır. Bu durum yoğun maddelerin çalışılmasında inelastik saçılmanın önemini açıklamaktadır. Bir foton demeti yoğun maddenin bir parçasına çarparsa baskın olan etkileşim ω , \vec{k} ve ε , \vec{p} 'ye bağlı olur. ω ve \vec{k} sırasıyla quasi parçacığın enerji ve momentumunu ve ε ve \vec{p} ise etkileşen elektronu enerji ve momentumunu ifade eder (Cooper vd., 2004).



Şekil 1.1. $\omega = \omega_1 - \omega_2$ enerjili ve $\vec{k} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$ momentumlu quasi parçacık için iki boyutlu dispersiyon ilişkisi. (Taralı alan ω_1 ve θ 'in uygun kombinasyonunda enerji ve momentumu ifade eder).

Şekil 1.2'de parametrik saçılma ve koherent Compton saçılması hariç bütün inelastik saçılmalar listelenmiştir. Literatürde bu konu ile ilgili oldukça çalışma olmasına rağmen bütün etkileri içeren çalışmalar mevcut değildir. Literatürde varolan çalışmaların çoğu Compton saçılması üzerinedir ve dolayısıyla review çalışmalar oldukça sınırlıdır.



Şekil 1.2. Yoğun maddenin elektronları tarafından saçılan ω enerjili ve \vec{k} momentumlu bir fotonun baskın etkileşimleri

1933 yılında DuMond'un meşhur makalesinin (DuMond, 1929; DuMond, 1933) yayımlanmasından sonra Cooper'ın Compton saçılması ile ilgili review çalışması (Cooper, 1985) ve Bushuev ve Kuz'min'in inelastik saçılmasının bütün etkileri konulu review çalışması yayınlanmıştır (Bushuev ve Kuz'min, 1977).

Kristallografi çalışanlar için Compton saçılması, ilk yıllarda oldukça problemlili ve çözülemeyen parazitik bir etki olarak nitelendiriliyordu. İnelastik X -ışını tarihi, altın çağlarını karanlık yıllarında yaşamıştır. Bu çağlar, 1920'li yılların ortaları ile 1930'lu yılların ortalarıdır. 1930'lu yıllarda foton dedeksiyon sistemlerinin yetersizliğinden dolayı bilim adamlarının bu konuya ilgisi azaltmıştır. Ancak 1960 yılında güçlü X -ışını kaynakları ve synchrotron radyasyonu gibi sistemlerin gelişmesiyle bu konuya olan ilgi tekrar artmaya başlamıştır (Cooper vd., 2004).

1.2. İnelastik Saçılmanın Kinematığı

İnelastik X -ışını saçılması spektrumunda enerji ve momentumunun korunumu kullanılarak pik pozisyonundan çok faydalı bilgiler elde edilir. Momentumun korunumu sadece elektron ve quazi parçacık için uygulanacak şekilde transfer edilen momentum yeterince büyük olduğunda ($k \gg p$), etkileşmenin geniş momentum transfer bölgesinde meydana geldiği kabul edilir. Zıt durumlarda etkileşmenin düşük momentum transfer bölgesinde meydana geldiği kabul edilir. Bu iki bölgenin limitleri çok basit modellerle tanımlanmıştır. Bu iki bölge arasında ara momentum transfer bölgesi olarak isimlendirilen gri bir bölge vardır (Alexandropoulos ve Theodoridou, 1988).

Geniş momentum transfer bölgesinde elektronlar Compton etkisine sebep olacak şekilde serbest davranırlar. Morfolojik olarak, Compton spektrumu numunenin deneysel dizilişine bağlı olan maksimum ile karakterize edilir (Alexandropoulos ve Theodoridou, 1988).

Enerji ve momentumun korunumu

$$\omega = \omega_1 - \omega_2 = \frac{1}{2} m t_1 (p_2^2 - p_1^2) \quad (1.3)$$

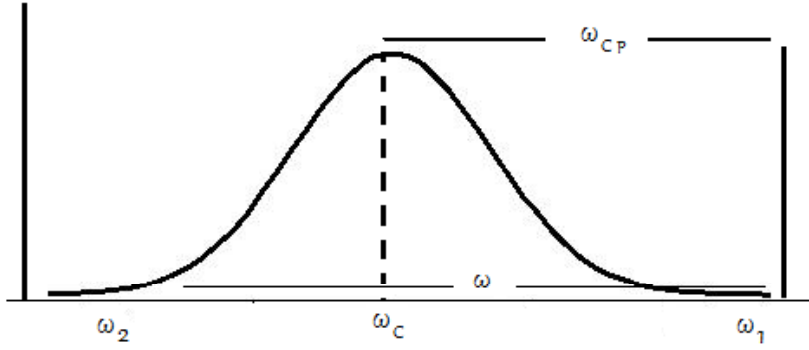
$$k = k_1 - k_2 = \hbar^{-1} (p_2 - p_1) \quad (1.4)$$

ifadeleri kullanılarak elektrona transfer edilen enerji ve momentum arasında

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{kp}{m} \quad (1.5)$$

denklemini elde edilir (Compton, 1923).

Denklem (1.5)'ten elde edilen bir Compton spektrumunun sınırları Şekil 1.3'te gösterilmiştir:



Şekil 1.3. Saçılan X-ışını spektrumu

Compton spektrumunda (1.3) denkleminde

$$\omega_c = \frac{mc^2 \omega_1}{2\omega_1 \sin^2(\theta/2) + mc^2} \quad (1.6.a)$$

$$\omega_{cp} = \omega_1 - \omega_c \frac{2\omega_1^2 \sin^2(\theta/2)}{2\omega_1 \sin^2(\theta/2) + mc^2} \quad (1.6.b)$$

$$\omega_2 = \frac{68.5 \omega_1}{q \sin^2(\theta/2) + 68.5 \left(\frac{2}{mc^2} \right) \omega_1 \sin^2(\theta/2) + 68.5} \quad (1.6.c)$$

$$\omega = \omega_1 - \omega_2 \frac{q \sin(\theta/2) + 68.5 \left(\frac{2}{mc^2} \right) \omega_1 \sin^2(\theta/2)}{9 \sin(\theta/2) + 68.5 \left(\frac{2}{mc^2} \right) \omega_1 \sin^2(\theta/2) + 68.5} \quad (1.6.d)$$

ifadeleri yazılabilir (Alexandropoulos ve Theodoridou, 1988).

$E_n \ll \omega$ bağlanma enerjili lokalize olmuş (yerelleşmiş) iç yörünge elektronları kaymış piki olan geniş bir Compton spektrumu verir. Saçılma açısının veya gelen

fotonun enerjisinin azalmasıyla transfer edilen momentumdaki azalma Compton profilinde bir bozulmaya neden olur (Alexandropoulos ve Theodoridou, 1988).

Sonuç olarak; Thomas-Fermi perdeleme momentumundan çok küçük momentum durumu ($k \ll k_{TF}$) için değerlik bandında plazmalar meydana gelmesinden dolayı spektrumda çok dar bir çizgi oluşur. Bu durumda, momentumun korunumu elektrona uygulanmaz, ancak bütün olarak elektron gazına uygulanır. Bu çizginin konumu saçılan materyal ve momentum transferine bağlıdır. Dejenere elektron gazının en basit durumunda; plazmon enerjisi ω_p ve momentum transferi \vec{k} arasındaki dispersiyon bağıntısı

$$\omega_p(k) = \omega_p(0) \frac{3}{10} \frac{v_F^2 k^2}{\omega_p(k)} \quad (1.7)$$

şeklinde verilir. Burada $\omega_p(0)$ $k = 0$ 'daki plazmon enerjisi ve v_F ise elektron Fermi hızıdır. Bu düşük momentum transfer bölgesindeki saçılma plazmon dispersiyon bağıntısını çalışmak için bir teknik olarak kullanılabilir. Bu teknik özellikle vakum ve yüksek sıcaklığa duyarlı materyallerin çalışılmasında daha hassastır (Alexandropoulos ve Theodoridou, 1988).

İki parçacığın çarpışması esnasında momentumun korunumunun gerçekleşmediği çarpışmalardaki diğer etkiler, Raman ve Rezonans Raman'dır. Compton saçılmasına göre transfer edilen momentum oldukça büyük olmasına rağmen, Raman ve Rezonans Raman'ın düşük transfer bölgesinde gerçekleştiği kabul edilir. Bu iki etkideki spektral özellikler sadece numunenin özelliklerine bağlıdır fakat deneysel şartlarla belirlenen θ ve ω_1 'e bağlı değildir (Alexandropoulos ve Theodoridou, 1988).

Bu kısımda; inelastik X-ışını saçılması etkileri, deneysel şartlarda belirleyici özellikler olan enerji spektrumuna göre üç kategoride sınıflandırılacaktır (Alexandropoulos ve Theodoridou, 1988):

- a) Spektrum maksimumunun sadece θ ve ω_1 deneysel parametrelerine bağlı olduğu Compton etkisi,
- b) Plazmon pikinin hem deneysel şartlara ve hem de numunenin elektronik yapısına bağlı olduğu Plazma uyarılması,

- c) Enerji spektrumu süreksizliğinin sadece bağlı elektron enerjilerine bağlı olduğu Raman ve Rezonans Raman etkisi.

1.3. Saçılma Teorisi

İnelastik saçılmanın teorik incelenmesi genellikle zayıf çiftlenim limitinde yapılır. Zayıf çiftlenim limitinde saçılan foton tarafından \vec{p} momentumlu elektronun pertürbasyonu, sadece \vec{A} vektör potansiyeli ile tarif edilen gelen elektromanyetik dalganın pertürbasyonu olarak düşünülür. Bu etkileşim için çiftlenim Hamilton operatörü

$$H_c = \frac{e^2 A^2}{2mc^2} + \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A} \quad (1.8)$$

ifadesi ile verilir. Zayıf çiftlenim limitinde relativistik olmayan inelastik saçılma tesir kesiti

$$\frac{d^2 \sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\omega_2}{\omega_1} \sum_f \sum_i |M_{fi}|^2 \sigma(E_f - E_i - \omega) \quad (1.9)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $|M_{fi}|$

$$\begin{aligned} |M_{fi}| = & \langle f | e^{i\vec{k}\vec{r}} | i \rangle (\hat{e}_1 \hat{e}_2) + \frac{1}{m} \sum_n \frac{\langle f | \hat{e}_2 \vec{p} e^{-i\vec{k}_2 \vec{r}} | n \rangle \langle n | \vec{p} \hat{e}_1 e^{i\vec{k}_1 \vec{r}} | i \rangle}{E_n - E_0 - \omega_1 - i\Gamma_0} \\ & + \frac{1}{m} \sum_n \frac{\langle f | \hat{e}_1 \vec{p} e^{i\vec{k}_1 \vec{r}} | n \rangle \langle n | \vec{p} \hat{e}_2 e^{-i\vec{k}_2 \vec{r}} | i \rangle}{E_n - E_0 - \omega_2 - i\Gamma_0} \end{aligned} \quad (1.10)$$

şeklinde verilen matris elemanıdır ve $|i\rangle$ ve $|f\rangle$ sırasıyla başlangıç ve son elektronik durum dalga fonksiyonunu ifade eder (Schülke, 2007).

Burada $|n\rangle$ hayali durum ve Γ_0 ise uyarılma sırasında oluşan holün yaşam zamanıdır. Relativistik olmayan birinci dereceden pertürbasyonda, çiftlenim Hamilton operatörünün etkin terimi A^2 'dir. Denklem (1.10)'daki ikinci ve üçüncü terimler ihmal edilirse, (1.9) denklemi

$$\frac{d^2 \sigma}{d\omega d\Omega} = \sum_f \sum_i \langle f | e^{i\vec{k}\vec{r}} | i \rangle^2 \sigma(E_f - E_i - \omega) \quad (1.11)$$

ifadesine indirgenir. Bu ifade *Compton tesir kesiti* ifadesi olarak bilinir. Çiftlenim Hamilton operatörü içerisindeki $\vec{p} \cdot \vec{A}$ 'lı terimden kaynaklanan etkiler genellikle ihmal edilir. Denklem (1.11); Compton profili ve elektronların bir boyutlu momentum dağılım fonksiyonu arasında bir matematiksel ilişkiyi ifade eder (implus yaklaşımı) (Schülke, 2007).

\vec{k} saçılma vektörü doğrultusunda \vec{p} elektron momentumunun izdüşümü için yeni bir değişken tanımlayalım:

$$q = \frac{\vec{p} \cdot \vec{k}}{|\vec{p}| |\vec{k}|} \quad (1.12)$$

Bu yeni q değişkeni ω_1 , ω_2 , ω_c ve θ deneysel parametrelerine bağlı bir değişkendir:

$$q \propto \frac{(\omega_c - \omega_2)\omega_1}{\omega_c \omega_2 \sin(\theta/2)} \quad (1.13)$$

Yeni q değişkeni (1.11) denkleminde kullanılırsa, Compton tesir kesiti için

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \sigma_{Th} \frac{\omega_2}{\omega_1} \frac{m}{k} \sum_i J_i(q) \quad (1.14)$$

ifadesi elde edilir. Burada σ_{Th} Thomson saçılması tesir kesitidir ve $J(q)$ ise Compton profili olarak isimlendirilir (Schülke, 2007).

1.4. Hartree-Fock Metodu

Kuantum kimyasal metotlar; atomlar, moleküller ve katıların özelliklerini belirlemek için kuantum mekaniği prensiplerini kullanırlar. Kuantum mekaniğinin temel denklemi

$$\hat{H} \Psi = E \Psi \quad (1.15)$$

ile verilen Schrödinger denklemdir. Schrödinger denklemi tek elektronlu moleküler sistemler hariç diğer sistemler için tam olarak çözülemez ve bu yüzden tam çözümün yapılabilmesi için bazı yaklaşımlar yapılır. Denklem (1.15)'in çözümü olan Ψ bütün

parçacıkların uzay ve spin koordinatlarının fonksiyonudur. Bu çözümler $E_{öz}$ enerjili durumları dalga fonksiyonu olarak isimlendirilir.

Çekirdekler elektronlara göre yaklaşık 1834 kat daha ağır olduğu için elektronlara göre çok daha yavaş hareket ederler. Çekirdeklerin hareketini elektronların hareketine göre durgun kabul eden yaklaşım Born-Oppenheimer yaklaşıklığı olarak bilinir. Bu yaklaşıklıkta; Hamilton operatörü zamandan bağımsız ve relativistik değildir.

Genel olarak; M çekirdekli ve N elektronlu bir moleküler sistemin relativistik olmayan elektronik Hamilton operatörü atomik birimlerde (Helgaker vd., 2000):

$$\hat{H}_{el} = -\frac{1}{2} \sum_i^N \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{Z_I}{r_{Ii}} + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (1.16)$$

ile verilir. Schrödinger denkleminin çözümü olan $\Psi_{el}(\vec{r}, m_s; \vec{R})$ dalga fonksiyonu

$$\hat{H}_{el} \Psi_{el}(\vec{r}, m_s; \vec{R}) = E_{el}(\vec{R}) \Psi_{el}(\vec{r}, m_s; \vec{R}) \quad (1.17)$$

şeklinde tanımlanır. (1.17) denkleminde $E_{el}(\vec{R})$ sabit nükleer koordinatlar için elektronik enerjiyi temsil eden potansiyel enerjidir. Böylece E_t toplam enerjisi elektronik enerji ile nükleer etkileşim enerjisinin toplamı şeklinde

$$E_t = E_{el}(\vec{R}_0) + \sum_{I=1}^{N-1} \sum_{J=I+1}^N \frac{Z_I Z_J}{R_{IJ}} \quad (1.18)$$

ifadesiyle verilir. Elektronların ayırt edilemez parçacıklar olduğu dikkate alınırsa fermiyonik karakterleri Pauli dışarılama ilkesinin sağlanmasını gerektirir. Yani toplam çok elektron dalga fonksiyonu elektronların yer değiştirmesine göre antisimetrik olmalıdır. Hartree-Fock yaklaşımında, dalga fonksiyonunun sağlanması gereken Pauli dışarılama ilkesinden dolayı dalga fonksiyonları Slater determinantı şeklinde aşağıdaki gibi tanımlanır (Helgaker vd., 2000):

$$\Psi(\vec{r}, m_s) = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(1)\alpha(1) & \Psi_1(2)\alpha(2) & \dots & \Psi_1(2n)\alpha(2n) \\ \Psi_1(1)\beta(1) & \Psi_1(2)\beta(2) & \dots & \Psi_1(2n)\beta(2n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_n(1)\alpha(1) & \Psi_n(2)\alpha(2) & \dots & \Psi_n(2n)\alpha(2n) \\ \Psi_n(1)\beta(1) & \Psi_n(2)\beta(2) & \dots & \Psi_n(2n)\beta(2n) \end{vmatrix} \quad (1.19)$$

Yukarıdaki Slater determinantının elemanları *spin orbitalleri* olarak isimlendirilir. Spin orbitalleri, uzay ve spin koordinatlarına bağlıdır:

$$\phi_i(\vec{x}_i) = \phi_i(\vec{r}_i, m_{s_i}) = \Psi_i(\vec{r}_i) \xi(m_{s_i}) \quad (1.20)$$

Burada $m_{s_i} = 1/2$ için $\xi(m_{s_i}) = \alpha$ ve $m_{s_i} = -1/2$ için $\xi(m_{s_i}) = \beta$ 'dir (Helgaker vd., 2000).

Hartree-Fock yaklaşımında spin orbitalleri tek elektron Hamilton operatörünün özfonksiyonlarıdır ve özdeğer denklemleri

$$\hat{F}(i)\phi(i) = E_i \phi(i) \quad (1.21)$$

ifadesi ile verilir. Tek elektron Hamilton operatörü aynı zamanda Fock operatörü (\hat{F}) olarak da bilinir (Helgaker vd., 2000).

1.4.1. Baz Setleri (LCAO)

Baz seti açılımları, Slater determinantındaki uzay koordinatlarına bağlı moleküler orbitalleri yaklaşık bir şekilde yazmak için kullanılır. Bu açılıma göre; her bir moleküler orbital Ψ_j tek elektron dalga fonksiyonlarının χ_k lineer kombinasyonu şeklinde ifade edilir:

$$\Psi_j = \sum_{k=1}^M c_{jk} \chi_k \quad (1.22)$$

Burada atomik orbitallere benzer bir yapısı olan χ_k tek elektron dalga fonksiyonları veya baz fonksiyonları olarak isimlendirilir. (1.22) ifadesi içerisindeki c_{jk} açılım katsayıları varyasyonel prensip ile belirlenir ve M ise baz setinin genişliğidir (Helgaker vd., 2000).

Literatürde çoğunlukla kullanılan baz fonksiyonları; Slater tipli ve Gaussian tipli baz fonksiyonlarıdır.

a) Slater Tipli Orbitaler (STO)

Slater tipli orbitaler, elektron yoğunluğunu en iyi temsil eden orbitalerdir. Tipik bir Slater tipli orbital aşağıdaki gibi ifade edilir (Slater, 1930):

$$\chi_{nlm}(\alpha, \vec{r}) = N_n(\alpha) r^{n-1} e^{-\alpha r} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.23)$$

Burada $S_{lm}(\theta, \varphi)$ kompleks veya reel küresel harmonikleri ifade eder (Jeffrey ve Dai, 1995) ve $N_n(\alpha)$ ise normalizasyon sabitidir ve

$$N_n(\alpha) = \frac{(2\alpha)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} \quad (1.24)$$

şeklinde tanımlanır.

b) Gaussian Tipli Orbitaler (GTO)

Slater tipli orbitaler kullanıldığında ortaya çıkan çok merkezli moleküler integrallerin zorluğundan kaçınmak için önerilmiş orbitalerdir ve tipik bir Gaussian tipli orbital aşağıdaki gibi ifade edilir (Boys, 1950):

$$\chi_{nlm}(\alpha, \vec{r}) = N_n(\alpha) r^{n-1} e^{-\alpha r^2} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.25)$$

Burada $S_{lm}(\theta, \varphi)$ reel veya kompleks küresel harmonikleri ifade eder (Jeffrey ve Dai, 1995) ve $N_n(\alpha)$ ise normalizasyon sabitidir.

STO'lar kullanıldığında ortaya çıkan çok merkezli moleküler integralleri hesaplamak oldukça güçtür. Bu yüzden önerildiği günden 1980'li yıllara kadar STO'lar aktif bir şekilde kullanılmamış ancak uygulamalı matematik ve bilgisayar teknolojisindeki son gelişmelerle beraber STO'lar günümüzde elektronik yapı hesaplamalarında yaygın bir şekilde kullanılmaktadır (Özdoğan ve Ruiz, 2008).

1.4.2. Elektronik enerji

Kuantum mekaniğinin temel postülatına göre elektronik enerji

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (1.26)$$

ifadesi ile verilir. Burada Ψ , sistemi temsil eden dalga fonksiyonu ve $\hat{H} = \hat{H}_{el}$ ise (1.22) denkleminde verilen elektronik Hamilton operatörüdür. Elektronik Hamilton operatörü, tek elektronlu (\hat{h}) ve iki elektronlu (\hat{g}) katkılar şeklinde aşağıdaki gibi verilir:

$$\hat{H}_{el} = \hat{h} + \hat{g} \quad (1.27)$$

Burada \hat{h} tek elektronlu Hamilton operatörüdür ve

$$\hat{h} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{Z_I}{r_{Ii}} \quad (1.28)$$

ile verilir. İki elektronlu Hamilton operatörü katkısı ise

$$\hat{g} = \frac{1}{2} (\hat{J} - \hat{K}) \quad (1.29)$$

şeklinde verilir. Burada \hat{J} Coulomb ve \hat{K} ise exchange (değiş-tokuş) operatörleridir ve

$$\hat{J}(\vec{x}_1) = \int dx_2 \frac{\rho(\vec{x}_2, \vec{x}_2)}{r_{12}} \quad (1.30)$$

$$\hat{K}(\vec{x}_1) = \int dx_2 \frac{\rho(\vec{x}_2, \vec{x}_2)}{r_{12}} \hat{P}_{x_1 x_2} \quad (1.31)$$

şeklinde tanımlanırlar. Denklem (1.30) ve (1.31)'de $\rho(\vec{x}, \vec{x})$ yoğunluk matrisidir ve

$$\rho(\vec{x}, \vec{x}') = \sum_{i=1}^n \Psi_i(\vec{x}) \Psi_i^*(\vec{x}') \quad (1.32)$$

ile verilir. Yukarıdaki ifadeler elektronik enerji ifadesinde kullanılırsa

$$E = 2 \sum_{i=1}^n \langle i | \hat{h} | i \rangle + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n (2J_{ij} - K_{ij}) \quad (1.33)$$

elde edilir. Burada $\langle i | \hat{h} | i \rangle$ tek elektron integralleridir ve

$$\langle i | \hat{h} | i \rangle = \int \Psi_i^*(1) \hat{h} \Psi_i(1) dV_1 = h_{ii} \quad (1.34)$$

ile verilir ve (1.16) denkleminde verilen Hamilton operatöründeki 1. ve 3. terimlerin katkılarını içerir (Helgaker vd., 2000).

Denklem (1.33)'de J_{ij} ve K_{ij} sırasıyla iki-elektronlu Coulomb ve exchange integralleridir ve aşağıdaki gibi tanımlanırlar (Helgaker vd., 2000):

Coulomb integrali

$$J_{ij} = \int \Psi_i^*(1) \left[\Psi_i^*(2) \frac{1}{r_{12}} \Psi_j(2) dV_2 \right] \Psi_i(1) dV_1 \quad (1.35)$$

Exchange integrali

$$K_{ij} = \int \Psi_i^*(1) \left[\Psi_i^*(2) \frac{1}{r_{12}} \Psi_j(2) dV_2 \right] \Psi_j(1) dV_1. \quad (1.36)$$

1.4.3. Varyasyonel Prensip

Varyasyonel prensibe göre; keyfi bir Ψ' fonksiyonu verilen sistemin en düşük enerjili tam Ψ özfonksiyonlarını bulmak için kullanılır. Bu durumda $E' \geq E$ dir. Burada E taban durum dalga fonksiyonu Ψ 'nin tam enerji özdeğeridir. E' enerjisinin beklenen değerinin minimizasyonu yapılarak sistemi en iyi temsil eden dalga fonksiyonları bulunabilir:

$$\frac{\delta E'}{\delta \Psi_i} = 0. \quad (1.37)$$

Burada

$$\frac{\langle \Psi' | \hat{H}' | \Psi' \rangle}{\langle \Psi' | \Psi' \rangle} = E' \geq E \quad (1.38)$$

ile verilir. (1.24) denkleminin (1.29) denkleminde yerine yazılarak E' enerjisi Ψ_i 'ye göre değiştirilir. Daha sonra enerji matrisi diyagonalize edilerek Hartree-Fock integro-diferansiyel denklemi

$$\left[\hat{h}(1) + \sum_{j=1}^n (2J_j(1) - \hat{K}_j(1)) \right] \Psi_i(1) = \varepsilon_i \Psi_i(1) \quad (1.39)$$

Burada $i=1,2,3,4,\dots,n$ ile verilir ve buna göre denklem (1.39)

$$\hat{F}\Psi_i = \varepsilon_i \Psi_i \quad (1.40)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem (1.39)'un her iki tarafını soldan Ψ_i^* ile çarpıp elektronların koordinatları üzerinden integre edilirse

$$\varepsilon_i = \langle i | \hat{h}(1) | i \rangle + \sum_{j=1}^n \langle i | 2\hat{J}_j(1) - \hat{K}_j(1) | i \rangle = \langle i | \hat{F} | i \rangle \quad (1.41)$$

ifadesi elde edilir. Burada \hat{F} Hartree-Fock Hamilton operatörü veya Fock operatörü olarak bilinir ve

$$\hat{F} = \hat{h}(i) + \sum_{j=1}^n (2\hat{J}_j(i) - \hat{K}_j(i)) \quad (1.42)$$

şeklinde tanımlanır (Helgaker vd., 2000).

1.4.4. Hartree-Fock-Roothaan Denklemleri

Denklem (1.39)'un her iki tarafı soldan $\Psi_i^*(1)$ ile çarpılıp, ortaya çıkan ifadeye (1.22) denklemi kullanılırsa Hartree-Fock integro-diferansiyel denklemi

$$\sum_{\nu} c_{\nu i} \left[h_{\mu\nu} + \sum_{\lambda,\sigma} P_{\sigma\lambda} \left(\langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle - \frac{1}{2} \langle \mu\sigma | \lambda\nu \rangle \right) \right] = \sum_{\nu} c_{\nu i} \varepsilon_i \langle \mu | \nu \rangle \quad (1.43)$$

elde edilir. Burada; $\langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle$ iki-elektronlu Coulomb integrali, $\langle \mu\sigma | \lambda\nu \rangle$ ise iki-elektronlu exchange integralidir. Yukarıdaki denklemde yer alan integraller ve terimler

$$P_{\lambda\sigma} = 2 \sum_j c_{\lambda j} c_{\sigma j}^* \quad (1.44)$$

$$S_{\mu\nu} = \langle \mu | \nu \rangle \quad (1.45)$$

$$F_{\mu\nu} = \left[h_{\mu\nu} + \sum_{\lambda,\sigma} \langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle - \frac{1}{2} \langle \mu\sigma | \lambda\nu \rangle \right] = h_{\mu\nu} + g_{\mu\nu} \quad (1.46)$$

$$h_{\mu\nu} = \left\langle \chi_{\mu}^*(\mathbf{1}) \left| \left[\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \sum_{I=1}^N \frac{Z_I}{r_{1I}} \right] \right| \chi_{\nu}(\mathbf{1}) \right\rangle \quad (1.47)$$

şeklinde tanımlanır. (1.43) denklemi ile verilen denklem aslında denklemler setidir ve

$$\sum_{\nu} c_{\nu i} (F_{\mu\nu} - \varepsilon_i S_{\mu\nu}) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (1.48)$$

şeklinde ifade edilir. Bu denklemler Hartree-Fock-Roothaan (HFR) denklemleri olarak bilinir. Burada $P_{\lambda\sigma}$ yük yoğunluk matrisi, $S_{\mu\nu}$ overlap matrisi ve $F_{\mu\nu}$ ise Fock matrisidir ve bu matrisler kare matrislerdir (Helgaker vd., 2000).

Denklem (1.39) ile verilen HFR denklemleri kısaltılmış formda aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$FC = S\varepsilon C \quad (1.49)$$

Burada C bir kare matristir ve i . nci sütunu $c_{\nu i}$ moleküler orbital katsayılarıdır ve matris diyagonalizasyonu ile bulunur. Baz fonksiyonları ortogonaldır ve bazı fonksiyonlarının üniter dönüşümleri moleküler orbitalleri verir:

$$S^{(-1/2)} F S^{(-1/2)} S^{(1/2)} C \varepsilon \quad (1.50)$$

$$F'V = \varepsilon V \quad (1.51)$$

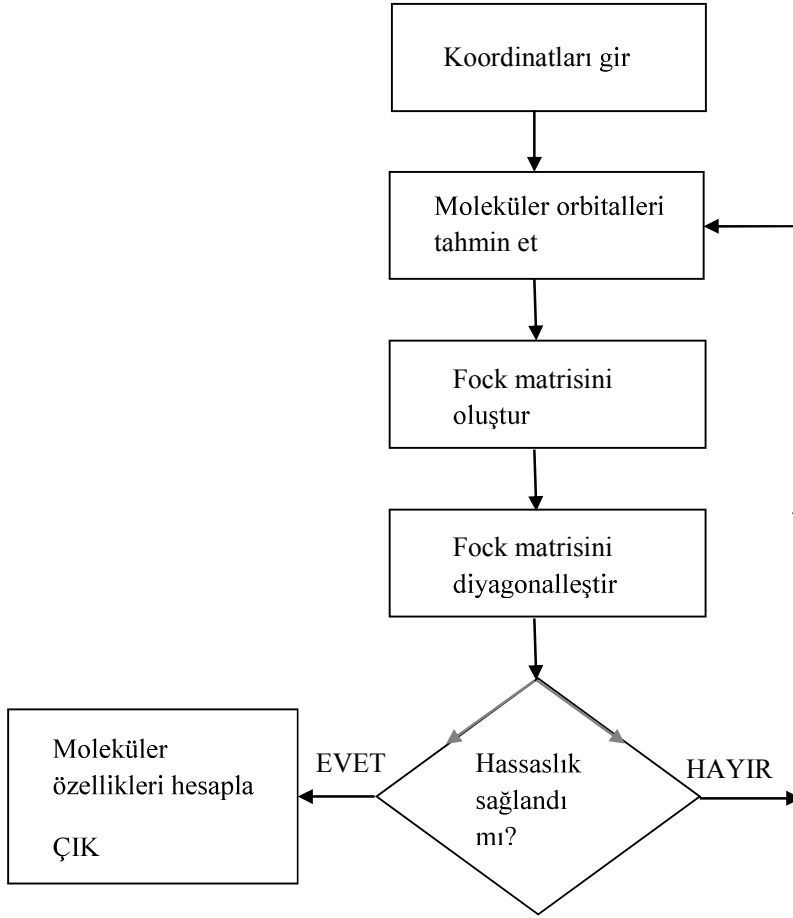
Hartree-Fock metodunda toplam elektronik enerji (1.23) denklemiyle verilir. LCAO metodu kullanılarak HFR metodundaki elektronik enerji

$$E_{el} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} P_{\mu\nu} (h_{\mu\nu} + F_{\mu\nu}) \quad (1.52)$$

ifadesi ile verilir (Helgaker vd., 2000).

1.4.5. Öz-uyumlu Alan (SCF) Metodu

Bu metot varyasyonel bir prosedürdür. Bu metotta önce bir deneme dalga fonksiyonu seçilir ve enerji minimizasyonu yapılarak sistemi en iyi temsil eden dalga fonksiyonu ve bu dalga fonksiyonu ile bulunabilecek en iyi enerji bulunur. Bu prosedür aşağıdaki şekilde gösterilmiştir (Helgaker vd., 2000):



Şekil 1.4. Öz-uyumlu alan (SCF) prosedürü

1.5. Literatür Özeti

1920’li yılların başında Compton olayı keşfedildi ve Compton (Compton, 1923) ile Debye (Debye, 1923) tarafından doğru bir şekilde yorumlandı. Birkaç yıl sonra Dumond berilyumun Compton profilinin Fermi-Dirac istatistiğinin sonucu ile uyumlu olduğunu gözlemledi (Dumond, 1929). İlerleyen yıllarda, Compton profili ve elektron momentum dağılımı arasındaki ilişki Dumond ve çalışma arkadaşları tarafından sistematik bir şekilde incelendi (Dumond ve Kirkpatrick, 1931; Dumond ve Kirkpatrick, 1931; Dumond ve Hoyt, 1931; Dumond, Kirkpatrick, ve Alden, 1932). Kappeler katı haldeki lityum, karbon, sodyum florid ve gaz haldeki neon, oksijen ve hidrojenin Compton profillerini ölçtü ve teori ile çok uyumlu sonuçlar elde etti (Kappeler, 1936). Ancak lityumun Compton profili için elde edilen ölçümler teorik değerle 2,5 kat uyumsuzluk gösteriyordu. Bu uyumsuzluğu açıklamak için pek çok bilim adamı yıllarca

çalıştıysa da sebebi uzun süre açıklanamadı. Yüksek duyarlıklı dedektörlerin keşfedilmesiyle birlikte bu uyumsuzluğun teoride değil, deney cihazlarının eksikliğinden kaynaklandığı ortaya çıktı. 1960'ların ortalarında Cooper'ın başarılı deneyleri bilim dünyasının ilgisini Compton saçılmasına çekmeyi sağladı (Cooper vd., 1965). Daha sonra Platzman ve Tzoar tarafından impuls yaklaşımı önerilerek Compton profili yorumları yapıldı (Platzman ve Tzoar, 1965). İlerleyen yıllarda elektron korelasyonunun Compton profili üzerindeki etkisi Lam ve Platzman tarafından incelendi. X ışını kaynakları düşük enerji ve şiddetlere sahip olduğu için, Compton saçılması çalışmaları ile 1960'lı yıllarda ağır elementler deneysel olarak çalışılmamıştır (Lam ve Platzman, 1974).

1970'li yılların sonlarında yeni nesil dedektörlerin üretilmesi ile birlikte daha ağır ve kompleks materyaller çalışılabilmiştir. Compton saçılması ile ilgili bu gelişme üzerine, Compton saçılması elektronik yapı incelemelerinde çok önemli bir metot olmuş ve literatürde bu güne kadar en çok çalışılan konu olmuştur (Cooper vd., 2004).

Atom ve moleküllerin Compton profilleri ve momentum dağılımları ile ilgili ilk çalışma DuMond ve arkadaşları (DuMond, 1929) tarafından yapılmıştır. DuMond'un bu çalışmaları ilk olmasından dolayı matematiksel açıdan eksiktir. 1940'lı yıllarda, DuMond'un önerdiği Compton profilleri ve momentum dağılımları ile ilgili teoriler $2 \leq Z \leq 10$ aralığındaki atomlara Duncanson ve Coulson tarafından uygulanmıştır (Duncanson, 1943; Duncanson ve Coulson, 1945; Duncanson ve Coulson, 1948).

Atom ve moleküllerin Compton profillerinin teorisi Kaijser ve Smith tarafından (Kaijser ve Smith, 1977) detaylı bir şekilde incelenmiş ancak herhangi bir uygulama yapılmamıştır. Bunun yanı sıra, çalışmalarında verilen ifadelerin uygulanabilirliği oldukça zor ve matematiksel açıdan karmaşıktır.

Atomların momentumlarının beklenen değerleri Hartree-Fock-Roothaan (HFR) metodu ile hesaplanması Delavega ve Miguel tarafından (Delavega ve Miguel, 1993; Delavega ve Miguel, 1994; Delavega ve Miguel, 1995) yapılmış ve oldukça başarılı sonuçlar elde edilmiştir.

İmpuls yaklaşımı kullanılarak, periyodik tablodaki atomların Compton profillerinin HFR teorisi ve bazı uygulamalar Biggs, Mendelsohn ve Mann tarafından

yapılmış (Biggs vd., 1975; Mendelsohn ve Smith, 1977) ve deneysel sonuçlarla uyumlu değerler elde edilmiştir.

Yoğunluk matrisi kullanılarak atomların Compton profilleri ve elektron momentum dağılımları Benesh ve Smith (Benesh ve Smith, 1973; Benesh ve Smith, 1972) tarafından hesaplanmış ve deney sonuçları ile uyumlu sonuçlar bulunmuştur.

Öte yandan, atomların Compton profilleri ile ilgili referans niteliğinde kitaplar ise Schülke (Schülke, 2007), Cooper (Cooper vd., 2004), Williams (Williams, 1977) ve Coppens (Coppens, 1997) tarafından yayınlanmıştır.

Yukarıda atomlar ile ilgili bölümde adı geçen çalışmalar incelendiğinde, atomların momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerlerinin hesaplanması ile ilgili bir problemin olmadığı görülebilir. Ancak moleküllerin momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerleri ile ilgili literatürdeki çalışmalar incelendiğinde ciddi eksikliklerin olduğu görülecektir. Aşağıda moleküllerin momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerleri ile ilgili literatürdeki çalışmalar incelenecektir.

DuMond ve arkadaşlarının Compton profilleri ile ilgili ilk çalışmaları (DuMond, 1929; DuMond, 1933) sonraki araştırmacılara bir kaynak olması açısından oldukça önemlidir. DuMond'un çalışmalarında verilen ifadeler yüzeysel ve uygulanabilirliği zordur.

Epstein ve arkadaşları, bazı hidrokarbon ve Bohr'lu yapıların momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerlerini Öz-uyumlu alan metodu ile hesaplamıştır (Epstein ve Lipscomb, 1970; Epstein, 1970; Epstein, 1973).

LiF ve LiCl iyonik kristallerinin Compton profilleri, Aikala ve arkadaşları tarafından (Aikala, 1979; Aikala vd., 1973) kristallerin yoğunluk matrisi kullanılarak hesaplanmıştır.

H_2 molekülünün Compton profilleri Thulstrup tarafından momentum dağılımları kullanılmadan Öz-uyumlu alan metoduyla teorik olarak hesaplanmıştır (Thulstrup, 1976).

Atom ve moleküllerin Compton profillerinin Fourier analizi ile ilgili teori Weyrich ve arkadaşları tarafından verilmiş ve bazı özel simetriye sahip moleküllere uygulanmıştır (Weyrich vd, 1979; Saenz vd., 1997).

Bazı moleküllerin Compton profilleri Öz-uyumlu alan metodu ile Hirst ve arkadaşları tarafından hesaplanmıştır (Hirst ve Liebmann, 1975; Hirst ve Liebmann, 1975).

Moleküller ile ilgili yukarıda adı geçen çalışmalar incelendiğinde; çoğunun uygulama niteliğinde olup sadece bazı özel simetrilere sahip moleküller ile ilgili olduğu ve aynı zamanda hesaplamaların analitik değil, nümerik olduğu görülmektedir. Bu çalışmalardan Duncanson ve Coulson (Duncanson, 1943; Duncanson ve Coulson, 1945; Duncanson ve Coulson, 1948), Weyrich ve arkadaşları (Weyrich vd., 1979; Saenz vd., 1997) ile Kaijser ve Smith'in (Kaijser ve Smith, 1977) çalışmaları teorik açıdan oldukça zengin, ancak bazı moleküllere özel olduğu için de sınırlıdır. Moleküllerin momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerleri ile ilgili kaynaklarda (Kaijser ve Smith, 1977) detaylı bir şekilde verilmiştir.

1.6. Tezin Amacı

Atomların elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerleri literatürde sıkça çalışılmaktadır. Moleküllerin, ilgili özellikleri için literatürde oldukça fazla deneysel çalışmalar olmasına rağmen teorik çalışmalar sınırlıdır. Literatürde moleküllerin ilgili özellikleri, atomik özelliklerinin ağırlıklı katkılarının toplamı şeklinde ifade edilmektedir. Literatürde varolan diğer çalışmalar ise baz fonksiyonu olarak elektron yoğunluğunu iyi temsil etmeyen GTO'ları kullanan ve ortaya çıkan yardımcı moleküler integralleri nümerik olarak hesaplayan çalışmalardır. Moleküllerin ilgili özellikleri için literatürde varolan çalışmaların çoğu da belli bazı moleküllere özel çalışmalardır.

Moleküllerin momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerleri ile ilgili çalışmalar deneysel olarak çok çalışılsa bile bu moleküler özellikler ile ilgili teorik çalışmalar sınırlıdır. Bu çalışmalar incelendiğinde; bazı problemleri kabullerin yapıldığı gözlenebilir. Bunlar:

- i. Literatürde bu moleküler özellikler hesaplanırken; elektron yoğunluğunu en iyi temsil eden baz fonksiyonlarının (STO) kullanılması yerine bu baz

fonksiyonlarını elde etmek amacıyla GTO'ların lineer toplamı kullanılmaktadır. Elektronik yapı hesaplamaları ve dolayısıyla moleküler özellik hesabı da kullanılan baz fonksiyonunun seçimine duyarlı olduğu çok iyi bilindiği için elde edilecek sonuçlar hassas olmayabilir.

ii. Literatürde bu moleküler özellikler hesaplanırken; ortaya çıkan moleküler integraller nümerik yöntemlerle hesaplanmaktadır ve bu durum da hesaplamalarda deneysel sonuçlarla bazı uyumsuzluklar verebilir.

Literatürde bu moleküler özellikler hesaplanırken; elde edilen ifadeler genel olmayıp sadece belli bazı simetrilere sahip moleküllere ait ifadelerdir veya sadece uygulama niteliğindedir.

Bu çalışmanın ilk amacı; moleküllerin momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri için Hartree-Fock-Roothaan metodu ile genel ve analitik ifadeler türetmektir. Bu çalışmada, baz fonksiyonu olarak STO kullanılacağı için (Helgaker vd., 2000), ilgili moleküler özellikler daha hassas ve doğru bir şekilde hesaplanarak elektronik yapıları incelenecektir.

Bu çalışmanın ikinci amacı ise, bu moleküler özellikler için elde edeceğimiz genel analitik ifadelerin Maple-16 sembolik programlama dilinde programlarını yazmak ve yazılan programlar kullanılarak H_2^+ , H_2 , HeH^+ , LiH , Li_2 , HF , F_2 , H_2O ve CH_4 moleküllerinin momentum dağılımları, momentumların beklenen değerleri ve Compton profillerini hesaplamak ve literatürdeki değerler ile karşılaştırmaktır.

2. YAPILAN ÇALIŞMALAR

2.1. Materyal

2.1.1. Elektron Momentum Dağılımı

Elektron momentum dağılımı, elektronun kuantum sistemlerindeki davranışını anlamak için önemli bir parametredir. Bu parametre orbitaller ve bağlar dolayısıyla gözlenebilir bir niceliktir. Aynı zamanda, metallerdeki Fermi yüzeyi ile yapıdaki fizik ve kimyanın anlaşılabilmesine imkân verir. Elektron momentum dağılımı Compton saçılması deneyleriyle incelenebilen bir niceliktir (Cooper, 1985).

Tek elektronlu sistemler için elektron momentum dağılımı $I(p)$

$$I(p) = \int_{\Omega_p} \psi^*(\vec{p})\psi(\vec{p})p^2 d\Omega_p \quad (2.1)$$

ifadesi ile verilir (Duncanson, 1943). Burada $\psi(\vec{p})$ momentum uzayı dalga fonksiyonudur.

2.1.2. Compton Profili

Compton saçılmasında, Doppler etkisinden dolayı kaymış Compton çizgi spektrumu olarak da bilinen Compton profili, direkt olarak ölçülebilen bir parametre olup, moleküler yapının bağ yapısı hakkında bilgiler verir (Cooper, 1985).

Compton profili ve elektron momentum dağılımındaki pikler dış yörüngede yavaşça dolanan elektronlardan kaynaklanır. Yüksek momentum değerlerinde iç yörünge elektronları baskın bir katkı yapar ve profili değiştirir.

Moleküllerin Compton profilleri ile moleküllerin momentum dağılım fonksiyonları arasında

$$J(q) = \frac{1}{2} \int_q^\infty p^{-1} I(p) dp \quad (2.2)$$

şeklinde bir ilişki vardır. Burada q foton momentum transferidir (Duncanson ve Coulson, 1945).

2.1.3. Momentumların Beklenen Değerleri

Tek elektronlu sistemlerde momentumların beklenen değerleri ile momentum dağılım fonksiyonları arasında

$$\langle p^\sigma \rangle = \int_0^\infty p^\sigma I(p) dp \quad (2.3.a)$$

$$= 2(\sigma + 1) \int_0^\infty p^\sigma J(q) dq \quad (2.3.b)$$

şeklinde ifadeler vardır (Epstein, 1973; Benesh ve Smith, 1973). Momentumların beklenen değerleri incelenen sistem ile ilgili önemli bilgiler verir. $\langle p^\sigma \rangle$ ifadesinde

$\sigma = -1$ Compton profilinin maksimumu,

$\sigma = 0$ elektron sayısı,

$\sigma = 1$ lineer momentum,

$\sigma = 2$ kinetik enerji,

$\sigma = 3$ Patterson fonksiyonunun başlangıç değeri,

$\sigma = 4$ ise relativistik kinetik enerji

ile ilgili direkt bilgiler verir (Wang ve Smith, 1994).

Momentumların negatif kuvvetleri için ise aşağıdaki ifadeler kullanılabilir (Thakkar vd., 1980):

$$\langle p^{-1} \rangle = 2J(0) \quad (2.4.a)$$

$$\langle p^{-2} \rangle = -2 \int_0^\infty q^{-2} J'(q) dq = 2 \int_0^\infty q^{-2} [J(0) - J(q)] dq. \quad (2.4.b)$$

2.2. Metot

2.2.1. Moleküllerin Elektron Momentum Dağılımı

Tek elektronlu sistemlerin elektron momentum dağılımı için verilen (2.1) denklemi çok elektronlu atomik veya moleküler sistemler için

$$I(p) = 2 \sum_{j=1}^{N/2} \eta_j \int_{\Omega} \Psi_j^*(\vec{p}) \Psi_j(\vec{p}) p^2 d\Omega \quad (2.5)$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Burada $\Psi_j(\vec{p})$, momentum uzayında j . moleküler orbital dalga fonksiyonu ve η_j ise j . moleküler orbitalin doluluk oranıdır. Denklem (2.5)'te moleküler orbitaller için LCAO açılımı

$$\Psi_j(\vec{p}) = \sum_{k=1}^M c_{jk} U_k(\alpha_k, \vec{p}) e^{i\vec{p}\vec{r}_k} \equiv \sum_{k=1}^M c_{jk} U_{n_k l_k m_k}(\alpha_k, \vec{p}) e^{i\vec{p}\vec{r}_k} \quad (2.6)$$

kullanılırsa, moleküllerin elektron momentum dağılımları için

$$I(p) = 2 \sum_{j=1}^{N/2} \eta_j \sum_{k=1}^M c_{jk} \sum_{s=1}^M c_{js} I_{n_k l_k m_k, n_s l_s m_s}(\alpha_k, \alpha_s; p, R_{ks}) \quad (2.7)$$

ifadesi elde edilir. Burada; c_{jk} lineer kombinasyon katsayıları ve $I_{n l m, n' l' m'}(\alpha, \beta; p, R)$ ise

$$I_{n l m, n' l' m'}(\alpha, \beta; p, R) = \int_{\Omega} U_{n l m}^*(\alpha, \vec{p}) U_{n' l' m'}(\beta, \vec{p}) p^2 e^{-i\vec{p}\vec{R}} d\Omega \quad (2.8)$$

ile tanımlanan *elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralidir*. Bu ifadede $U_{n l m}(\alpha, \vec{p})$ fonksiyonu Slater tipli orbitallerin Fourier dönüşümüdür ve EK A'da verilmiştir. $U_{n l m}(\alpha, \vec{p})$ için (A.3) ve $e^{-i\vec{p}\vec{R}}$ düzlem dalgası için (A.2) kullanılırsa

$$I_{n l m, n' l' m'}(\alpha, \beta; p, R) = f_{n l}(\alpha, p) f_{n' l'}(\beta, p) p^2 K_{l m, l' m'}(p, R) \quad (2.9)$$

ifadesi elde edilir. Burada $f_{n l}(\alpha, p)$ fonksiyonu denklem (A.4) ile tanımlanan Slater tipli orbitallerin Fourier dönüşümünün radyal kısmıdır ve Tablo A.1'de bazı sembolik değerleri verilmiştir.

Denklem (2.9)'daki $K_{l m, l' m'}(p, R)$ fonksiyonu ise *kırınım çarpanı* olarak isimlendirilir ve

$$K_{l m, l' m'}(p, R) = (-1)^{\frac{l+l'}{2}} \int_{\Omega} S_{l m}^*(\Omega) e^{-i\vec{p}\vec{R}} S_{l' m'}(\Omega) d\Omega \quad (2.10)$$

şeklinde tanımlanır. Denklem (A.2) ile verilen düzlem dalga açılımı ve üç küresel harmoniğin çarpımının katı açılı üzerinden integrali için

$$\int_{\Omega} Y_{l m}^*(\Omega) Y_{l' m'}(\Omega) Y_{L M}(\Omega) d\Omega = \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} C^L(l m, l' m') \delta_{M, m'-m} \quad (2.11)$$

ifadesi (Gaunt, 1929) kullanılırsa, $K_{l m, l' m'}(p, R)$ kırınım çarpanı

$$K_{lm,l'm'}(p,R) = \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} (2) (-1)^{\frac{l+3l'+3L}{2}} (2L+1) C^L(lm,l'm') j_L(pR) \delta_{m,m'} \quad (2.12)$$

şeklinde bir ifade bulunur. Elektron momentum dağılım yardımcı moleküler integralinin $I_{nlm,n'l'm'}(\alpha, \beta; p, R)$ bazı sembolik sonuçları EK B'de verilmiştir. (2.10) ve (2.12) ile tanımlanan kırınım çarpanı $K_{lm,l'm'}(p, R)$ ve ifadesinde ortaya çıkan $C^L(lm, l'm')$ Gaunt katsayılarının bazı sembolik değerleri EK C'de verilmiştir.

N tane elektrondan oluşan moleküler bir sistemin j . nci moleküler orbitali için elektron momentum dağılımı

$$\int_0^{\infty} I_j(p) dp = N_j \quad (2.13)$$

normalizasyon şartını sağlamalıdır.

2.2.2. Moleküllerin Compton Profillerinin HFR Teorisi

Tek elektronlu sistemlerin Compton profilleri için bilinen (2.2) ifadesi çok atomlu, çok elektronlu moleküler sistemler için

$$J(q) = 2 \sum_{j=1}^{N/2} \eta_j \sum_{k=1}^M c_{jk} \sum_{s=1}^M c_{js} J_{n_k l_k m_k, n_s l_s m_s}(\alpha_k, \alpha_s; q; R_{ks}) \quad (2.14)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $J_{nlm,n'l'm'}(\alpha, \beta, q; R)$ fonksiyonu *moleküler Compton profili yardımcı moleküler integrali* olarak isimlendirilir ve

$$J_{nlm,n'l'm'}(\alpha, \beta; q, R) = \frac{1}{2} \int_q^{\infty} p^{-1} I_{nlm,n'l'm'}(\alpha, \beta; p, R) dp \quad (2.15)$$

ile tanımlanır. Denklem (2.9) denklem (2.15)'te kullanılırsa

$$J_{nlm,n'l'm'}(\alpha, \beta; q, R) = \delta_{m,m'} \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} (2) (-1)^{\frac{l+3l'+3L}{2}} \frac{(2L+1)}{2} C^L(lm, l'm') \times \sum_{s=0}^{E((n-l)/2)} B_{nl}^s(\alpha) \sum_{s'=0}^{E((n'-l')/2)} B_{n'l'}^{s'}(\beta) J_{n+1, n'+1}^{l+l'+2s+2s'+1, L}(\alpha, \beta, q; R) \quad (2.16)$$

bulunur. Burada $J_{m'}^{m'l}(\alpha, \beta; q, R)$ Compton profili yardımcı moleküler integralidir ve Bölüm (2.2.4)'te detaylı bir şekilde incelenmiştir. $J_{nlm,n'l'm'}(\alpha, \beta; q, R)$ Compton profili yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri EK D'de verilmiştir.

N tane elektrondan oluşan moleküler bir sistemin j . nci moleküler orbitali için elektron momentum dağılımı

$$\int_0^{\infty} J_j(q) dq = N_j / 2 \quad (2.17)$$

normalizasyon şartını sağlamalıdır.

2.2.3. Momentumların Beklenen Değerleri

Moleküllerin momentumlarının beklenen değerleri ile momentum dağılım fonksiyonları arasındaki (2.3.a) bağıntısı kullanılırsa, momentumların beklenen değerleri için

$$\langle p^\sigma \rangle = 2 \sum_{j=1}^{N/2} \eta_j \sum_{k=1}^M c_{jk} \sum_{s=1}^M c_{js} Z_{n_k l_k m_k, n_s l_s m_s}^\sigma(\alpha_k, \alpha_s; R_{ks}) \quad (2.18)$$

ifadesi elde edilir. Burada η_j j . moleküler orbitalin doluluk oranı c_{jk} lineer kombinasyon katsayısı ve $Z_{n_k l_k m_k, n_s l_s m_s}^\sigma(\alpha_k, \alpha_s; R_{ks})$ ise

$$\begin{aligned} Z_{nlm, n'l'm'}^\sigma(\alpha, \beta; R) &= \int_0^{\infty} p^\sigma I_{nlm, n'l'm'}(\alpha, \beta; p, R) dp \\ &= \int_0^{\infty} p^{\sigma+2} f_{nl}(\alpha, p) f_{n'l'}(\beta, p) K_{lm, l'm'}(p, R) dp \end{aligned} \quad (2.19)$$

ile tanımlanan moleküler integraldir. Bu ifadede kırınım çarpanı $K_{lm, l'm'}(p, R)$ için (2.12) denklemini kullanılırsa $Z_{nlm, n'l'm'}^\sigma(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali için

$$Z_{nlm, n'l'm'}^\sigma(\alpha, \beta; R) = \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} (2) (-1)^{\frac{l+3l'+3L}{2}} (2L+1) C^L(lm, l'm') D_{nl, n'l'}^{\sigma+2, L}(\alpha, \beta; R) \delta_{mm'} \quad (2.20)$$

ifadesi elde edilir. Burada $D_{nl, n'l'}^{\sigma, L}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$D_{nl, n'l'}^{mL}(\alpha, \beta; R) = \int_0^{\infty} f_{nl}(\alpha, p) f_{n'l'}(\beta, p) p^m j_L(pR) dp \quad (2.21)$$

şeklinde tanımlanır. Bu denklemde $f_{nl}(\alpha, p)$ fonksiyonu STO'ların Fourier dönüşümünün radyal kısmı (A.4) ve $j_L(pR)$ ise küresel Bessel fonksiyonudur (Jeffrey ve Dai, 1995). Denklem (A.4) denklem (2.21)'de yazılırsa

$$\begin{aligned}
D_{nl,n'l}^{mL}(\alpha, \beta; R) &= \int_0^{\infty} f_{nl}(\alpha, p) f_{n'l}(\beta, p) p^m j_L(pR) dp \\
&= \sum_{s=0}^{E((n-l)/2)} B_{nl}^s(\alpha) \sum_{s'=0}^{E((n'-l')/2)} B_{n'l'}^{s'}(\beta) I_{n+1, n'+1}^{l+l'+m+2s+2s', L}(\alpha, \beta; R)
\end{aligned} \tag{2.22}$$

ifadesi elde edilir. Burada $I_{m'}^{ml}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali Bölüm (2.2.4)'te detaylı bir şekilde incelenmiştir.

$R=0$ durumunda, (2.19) denklemi

$$\begin{aligned}
Z_{nl,n'l}^{\sigma}(\alpha, \alpha) &= \int_0^{\infty} p^{\sigma+2} f_{nl}(\alpha, p) f_{n'l}(\alpha, p) dp \\
&= \sum_{s=0}^{E((n-l)/2)} B_{nl}^s(\alpha) \sum_{s'=0}^{E((n-l)/2)} B_{n'l}^{s'}(\alpha) I_{n+1, n'+1}^{2l+2s+2s'+\sigma+2}(\alpha, \alpha)
\end{aligned} \tag{2.23}$$

ifadesine indirgenir. Burada $I_{m'}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integrali Bölüm (2.2.4.c)'de ayrıntılı olarak ele alınmıştır.

2.2.4. Yardımcı Moleküler İntegraller

a) $J_{m'}^{m'l}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integrali

$J_{m'}^{m'l}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integrali

$$J_{m'}^{m'l}(\alpha, \beta; q, R) = \int_q^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^{n'}} j_l(pR) dp \tag{2.24}$$

şeklinde tanımlanır.

i. Analitik Formül

Denklem (2.24)'te $(p^2 + \alpha^2)^{-n} (p^2 + \beta^2)^{-n'}$ ifadesi için (Özdoğan, 2004):

$$(p^2 + \alpha^2)^{-n} (p^2 + \beta^2)^{-n'} = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) (p^2 + \alpha^2)^{-s-1} + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'}^{s'}(\beta, \alpha) (p^2 + \beta^2)^{-s'-1} \tag{2.25}$$

kullanılırsa,

$$J_{m'}^{m'l}(\alpha, \beta; q, R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) F_{m, s+1}^l(\alpha, q; R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'}^{s'}(\beta, \alpha) F_{m, s'+1}^l(\beta, q; R) \tag{2.26}$$

bağıntısını elde edilir. Denklem (2.25) ve (2.26)'daki $\eta_{nn'}^s(\alpha, \beta)$ parametresi

$$\eta_{nn'}^s(\alpha, \beta) = (-1)^{n'} F_{n'-1}^l(n+n'-s-2)(\alpha^2 - \beta^2)^{s-(n+n'-1)} \quad (2.27)$$

şeklinde tanımlanır. Denklem (2.26)'da $F_{mn}^l(\alpha, q; R)$ fonksiyonu bir yardımcı moleküler integraldir ve Bölüm (2.2.4.c)'de ayrıntılı olarak ele alınmıştır.

$J_{nn'}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integrali $\alpha = \beta$ özel durumunda

$$J_{nn'}^{ml}(\alpha, \alpha; q, R) = F_{m, n+n'}^l(\alpha, q; R) \quad (2.28)$$

ifadesine indirgenir.

ii. Tekrarlama Bağlıntıları

$J_{nn'}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integrali için (2.24) denkleminde pay ve payda $(p^2 + \alpha^2)$ ile çarpılırsa,

$$J_{nn'}^{ml}(\alpha, \beta; q, R) = J_{n+1, n'}^{m+2, l}(\alpha, \beta; q, R) + \alpha^2 J_{n+1, n'}^{ml}(\alpha, \beta; q, R) \quad (2.29)$$

tekrarlama bağıntısı elde edilir. Benzer şekilde

$$J_{nn'}^{ml}(\alpha, \beta; q, R) = J_{n, n'+1}^{m+2, l}(\alpha, \beta; q, R) + \beta^2 J_{n, n'+1}^{ml}(\alpha, \beta; q, R) \quad (2.30)$$

tekrarlama bağıntısı da yazılabilir. Bu tekrarlarbağıntılarının başlangıç değerleri olan $J_{nn'}^{0l}(\alpha, \beta; q, R)$ ve $J_{nn'}^{1l}(\alpha, \beta; q, R)$ integralleri denklem (2.26) yardımı ile

$$J_{nn'}^{0l}(\alpha, \beta; q, R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{nn'}^s(\alpha, \beta) F_{0, s+1}^l(\alpha, q; R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'n}^{s'}(\beta, \alpha) F_{0, s'+1}^l(\beta, q; R) \quad (2.31)$$

$$J_{nn'}^{1l}(\alpha, \beta; q, R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{nn'}^s(\alpha, \beta) F_{1, s+1}^l(\alpha, q; R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'n}^{s'}(\beta, \alpha) F_{1, s'+1}^l(\beta, q; R) \quad (2.32)$$

şeklinde tanımlanır.

$J_{nn'}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integrali küresel Bessel fonksiyonlarını içerdiği için, küresel Bessel fonksiyonlarının tekrarlarbağıntısı kullanılarak alternatif bir tekrarlarbağıntısı da bulunabilir. Küresel Bessel fonksiyonlarının

$$j_{n-1}(x) + j_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x} j_n(x) \quad (2.33)$$

tekrarlama bağıntısı (Jeffrey ve Dai, 1995) kullanılarak

$$J_{m'}^{m_l}(\alpha, \beta; q, R) = \frac{(2l-1)}{R} J_{m'}^{m_l, l-1}(\alpha, \beta; q, R) - J_{m'}^{m_l, l-2}(\alpha, \beta; q, R) \quad (2.34)$$

ifadesi elde edilir. Bu tekrarlama bağıntılarının başlangıç değerleri olan $J_{m'}^{m_0}(\alpha, \beta; q, R)$

ve $J_{m'}^{m_1}(\alpha, \beta; q, R)$ integralleri

$$J_{m'}^{m_0}(\alpha, \beta; q, R) = \frac{1}{R} S_{m'}^{m-1}(\alpha, \beta; q, R) \quad (2.35)$$

$$J_{m'}^{m_1}(\alpha, \beta; q, R) = \frac{1}{R^2} S_{m'}^{m-2}(\alpha, \beta; q, R) - C_{m'}^{m-2}(\alpha, \beta; q, R) \quad (2.36)$$

şeklinde tanımlanır.

$C_{m'}^m(\alpha, \beta; q, R)$ ve $S_{m'}^m(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralleri EK E'de ve $J_{m'}^{m_l}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik ve nümerik sonuçlarla karşılaştırmalı değerleri EK F'de incelenmiştir.

b) $I_{m'}^{m_l}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali

$I_{m'}^{m_l}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$I_{m'}^{m_l}(\alpha, \beta; R) = \int_0^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^{n'}} j_l(pR) dp \quad (2.37)$$

şeklinde tanımlanır.

i. Analitik Formül

Denklem (2.37)'de $(p^2 + \alpha^2)^{-n} (p^2 + \beta^2)^{-n'}$ ifadesi için denklem (2.25) kullanılırsa,

$$I_{m'}^{m_l}(\alpha, \beta; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) E_{m, s+1}^l(\alpha, R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'}^{s'}(\beta, \alpha) E_{m, s'+1}^l(\beta, R) \quad (2.38)$$

bağıntısı elde edilir.

$I_{m'}^{ml}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali $\alpha = \beta$ özel durumunda

✓ $(m \wedge l \text{ çift}) \vee (m \wedge l \text{ tek})$ durumlarında

$$I_{m'}^{ml}(\alpha, \alpha; R) = \alpha^{m-2n-2n'+1} \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^Q (-1)^k \frac{2^{l-1}(l+k)!}{k!(2l+2k+1)!} \left(\frac{R}{\alpha}\right)^{l+2k} \times B\left(\frac{2n+2n'-m-l-2k+1}{2}, \frac{m+l+2k+1}{2}\right) \quad (2.39.a)$$

✓ $(m \text{ çift} \wedge l \text{ tek}) \vee (m \text{ tek} \wedge l \text{ çift})$ durumlarında

$$I_{m'}^{ml}(\alpha, \alpha; R) = E_{m, n+n'}^l(\alpha, R) \quad (2.39.b)$$

ifadelerine indirgenir. Denklem (2.38) ve (2.39)'da $E_{mn}^l(\alpha, R)$ fonksiyonu bir yardımcı moleküler integraldir ve Bölüm (2.2.4.c)'de ayrıntılı olarak ele alınmıştır.

ii. Tekrarlama Bağıntıları

$I_{m'}^{ml}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali için (2.37) denkleminin pay ve paydası $(p^2 + \alpha^2)$ ile çarpılırsa,

$$I_{m'}^{ml}(\alpha, \beta; R) = I_{n+1, n'}^{m+2, l}(\alpha, \beta; R) + \alpha^2 I_{n+1, n'}^{ml}(\alpha, \beta; R) \quad (2.40)$$

tekrarlama bağıntısı elde edilir. Benzer şekilde

$$I_{m'}^{ml}(\alpha, \beta; R) = I_{n, n'+1}^{m+2, l}(\alpha, \beta; R) + \beta^2 I_{n, n'+1}^{ml}(\alpha, \beta; R) \quad (2.41)$$

tekrarlama bağıntısı da yazılabilir. Bu tekrarlamaya bağıntılarının başlangıç değerleri olan $I_{m'}^{0l}(\alpha, \beta; R)$, $I_{m'}^{1l}(\alpha, \beta; R)$, $I_{0n'}^{ml}(\alpha, \beta; R)$ ve $I_{n0}^{ml}(\alpha, \beta; R)$ integralleri denklem (2.38) yardımı ile

$$I_{m'}^{0l}(\alpha, \beta; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) E_{0, s+1}^l(\alpha, R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'n}^{s'}(\beta, \alpha) E_{0, s'+1}^l(\beta, R) \quad (2.42)$$

$$I_{m'}^{1l}(\alpha, \beta; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) E_{1, s+1}^l(\alpha, R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'n}^{s'}(\beta, \alpha) E_{1, s'+1}^l(\beta, R) \quad (2.43)$$

$$I_{0n'}^{ml}(\alpha, \beta; R) = E_{mn'}^l(\beta, R) \quad (2.44)$$

$$I_{n0}^{ml}(\alpha, \beta; R) = E_{mn}^l(\alpha, R) \quad (2.45)$$

şeklinde tanımlanır.

$I_{m'}^{m,l}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali küresel Bessel fonksiyonlarını içerdiği için, küresel Bessel fonksiyonlarının tekrarlama bağıntısı kullanılarak alternatif bir tekrarlama bağıntısı da bulunabilir. Küresel Bessel fonksiyonlarının tekrarlama bağıntısı denklem (2.33) kullanılarak

$$I_{m'}^{m,l}(\alpha, \beta; R) = \frac{(2l-1)}{R} I_{m'}^{m-1,l-1}(\alpha, \beta; R) - I_{m'}^{m,l-2}(\alpha, \beta; R) \quad (2.46)$$

ifadesi elde edilir. Bu tekrarlama bağıntılarının başlangıç değerleri olan $I_{m'}^{m,0}(\alpha, \beta; R)$ ve $I_{m'}^{m,1}(\alpha, \beta; R)$ integralleri

$$I_{m'}^{m,0}(\alpha, \beta; R) = \frac{1}{R} S_{m'}^{m-1}(\alpha, \beta; R) \quad (2.47)$$

$$I_{m'}^{m,1}(\alpha, \beta; R) = \frac{1}{R^2} S_{m'}^{m-2}(\alpha, \beta; R) - C_{m'}^{m-2}(\alpha, \beta; R) \quad (2.48)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $C_{m'}^m(\alpha, \beta; R)$ ve $S_{m'}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralleri, EK G'de incelenmiş ve bazı sembolik değerleri tablolar halinde verilmiştir.

$I_{m'}^{m,l}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik ve karşılaştırmalı nümerik değerleri ise EK H'de tablolar halinde verilmiştir.

c) Temel Yardımcı İntegraller

i. $F_{m'}^l(\alpha; q, R)$ yardımcı moleküler integrali

$F_{m'}^l(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$F_{m'}^l(\alpha; q, R) = \int_q^\infty \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} j_l(pR) dp \quad (2.49)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $j_n(x)$ küresel Bessel fonksiyonudur.

✓ Analitik Formül

$F_{m'}^l(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali için

$$j_n(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{m=0}^{n-k} \left\{ A_{n;km} \frac{\cos x}{x^{k+m+1}} + B_{n;km} \frac{\sin x}{x^{k+m+1}} \right\} \quad (2.50)$$

ifadesi (Özdoğan ve Eraslan, 2014) kullanılırsa,

$$F_{mn}^l(\alpha; q, R) = \sum_{k=0}^{l-1} \sum_{s=0}^{l-k} \frac{1}{R^{k+s+1}} \{A_{lks} C_{m-k-s-1, n}(\alpha; q, R) + B_{lks} S_{m-k-s-1, n}(\alpha; q, R)\} \quad (2.51)$$

bağıntısı elde edilir. Denklem (2.50) ve (2.51)'de $A_{n,km}$ ve $B_{n,km}$ katsayıları

$$A_{n,km} = (-1)^{m+n} a_{nk} \frac{(n-k)!}{(n-k-m)!} (-1)^{\frac{n-k-m-1}{2}} \quad (2.52)$$

$$B_{n,km} = (-1)^{m+n} a_{nk} \frac{(n-k)!}{(n-k-m)!} (-1)^{\frac{n-k-m}{2}} \quad (2.53)$$

ile verilir. Denklem (2.52) ve (2.53)'te geçen a_{nk} katsayıları

$$a_{nk} = a_{n-1, k} - (n-3)a_{n-1, k-1} \quad ; \quad a_{n0} = 1 \quad (2.54)$$

şeklinde tanımlanır.

✓ Tekrarlama Bağlıntıları

$F_{mn}^l(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali küresel Bessel fonksiyonlarını içerdiği için, denklem (2.33)'te verilen küresel Bessel fonksiyonlarının tekrarlama bağıntısı kullanılarak

$$F_{mn}^l(\alpha, q; R) = \frac{2l-1}{R} F_{m-1, n}^{l-1}(\alpha, q; R) - F_{mn}^{l-2}(\alpha, q; R) \quad (2.55)$$

şeklinde tekrarlama bağıntısı elde edilir. Bu tekrarlama bağıntılarının başlangıç değerleri olan $F_{mn}^0(\alpha, q; R)$ ve $F_{mn}^1(\alpha, q; R)$ integralleri

$$F_{mn}^0(\alpha, q; R) = \frac{1}{R} S_{m-1, n}(\alpha, q; R) \quad (2.56)$$

$$F_{mn}^1(\alpha, q; R) = \frac{1}{R^2} S_{m-2, n}(\alpha, q; R) - \frac{1}{R} C_{m-1, n}(\alpha, q; R) \quad (2.57)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (2.56) ve denklem (2.57)'de geçen $C_{mn}(\alpha, q; R)$ ve $S_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralleri EK I'da verilmiştir. $F_{mn}^l(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik ve sembolik değerleri ise Tablo 2.1 ve Tablo 2.2'de verilmiştir.

Tablo 2.1. $F_{mn}^l(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri

l	m	n	α	q	R	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δf
0	0	0	0.5	0.4	1.4	0.7289010503534541321137285414	0.7289010503534541321137285414	0
		1	0.8	0.1	0.9	1.2442919961246009752870363559	1.2442919961246009752870363559	0
		2	0.5	0.5	1.3	0.8980646751622450859332715593	0.8980646751622450859332715593	0
		3	0.4	0.6	2.2	0.6597457135964144354418254382	0.6597457135964144354418254381	10^{-36}
		4	0.7	0.2	2.4	2.3681290672539275154008130394	2.3681290672539275154008130394	0
	5	0.8	0.7	1.5	0.0649267725337125764809210857	0.0649267725337125764809210857	0	
	2	1	0.3	0.7	0.8	0.9140274250214668002781304515	0.9140274250214668002781304515	0
		2	0.1	0.1	2.9	4.4599083093351735427098057058	4.4599083093351735427098057058	0
		3	0.7	0.8	1.1	0.1525549135306909938591669250	0.1525549135306909938591669250	0
		4	0.4	0.5	1.9	1.1407392854835512618559123893	1.1407392854835512618559123894	10^{-34}
		5	0.8	0.5	0.1	0.1410588777684180291957360903	0.1410588777684180291957360903	0
	4	2	0.2	0.3	1.4	0.6788655397230196742902873134	0.6788655397230196742902873134	0
		3	0.7	0.7	2.1	0.0481164088727810670369298344	0.0481164088727810670369298344	0
		4	0.6	0.9	1.5	0.0764907935979359797833938340	0.0764907935979359797833938340	0
		5	0.6	0.8	1.7	0.0639076146845459343946084821	0.0639076146845459343946084821	0
1		1	1	0.7	0.2	2.4	0.2744656705112103353959876283	0.2744656705112103353959876283
	2		0.5	0.4	1.4	0.3519978611053716733792895244	0.3519978611053716733792895244	0
	3		0.8	0.7	1.9	0.0735488924663070805067930185	0.0735488924663070805067930185	0
	4		0.5	0.5	1.3	0.3539144239006422463511851419	0.3539144239006422463511851419	0
	5		0.4	0.6	2.2	0.6786517857131879343261676426	0.6786517857131879343261676426	0
	3	2	0.8	0.5	0.1	0.7246987335547118858299997942	0.7246987335547118858299997942	0
		3	0.2	0.3	1.4	0.7716451401589292384597750817	0.7716451401589292384597750820	10^{-32}
		4	0.7	0.7	2.1	0.0629326890026669645414892272	0.0629326890026669645414892272	0
		5	0.6	0.9	1.5	0.0321493871105032150838005379	0.0321493871105032150838005379	0
		5	3	0.6	0.8	1.7	0.1836091017923750753002147553	0.1836091017923750753002147553
4	0.8		0.7	1.9	0.0525464876387765553738704301	0.0525464876387765553738704301	0	
5	0.5		0.5	1.3	0.1406384077628851078131420630	0.1406384077628851078131420632	10^{-37}	
2	2	1	0.4	0.6	2.2	0.3013950820209266804195956198	0.3013950820209266804195956198	0
		2	0.1	0.1	2.9	0.4480138041101858652509412800	0.4480138041101858652509412900	10^{-26}
		3	0.7	0.8	1.1	0.0288752403511943481860064586	0.0288752403511943481860064587	10^{-32}
		4	0.4	0.5	1.9	0.1619782483279484043113699624	0.1619782483279484043113699624	0
		5	0.8	0.5	0.8	0.0037994464017792536023973791	0.0037994464017792536023973791	0
	4	2	0.5	0.5	1.3	0.5197571214291835524801983735	0.5197571214291835524801983735	0
		3	0.4	0.6	2.2	0.1624245755332419459048728915	0.1624245755332419459048728914	10^{-27}
		4	0.8	0.5	0.1	0.0003760274138784749905735438	0.0003760274138784749905735475	10^{-26}
		5	0.2	0.3	1.4	0.5384683053918144371655395965	0.5384683053918144371655396931	10^{-25}
		6	3	2.6	0.7	5.4	-0.00001351135625711527518587149	-0.00001351135625711527514440681
	4		0.8	2.6	4.5	-0.00135264212308057473681779296	-0.00135264212308057473682640027	10^{-27}
	5		0.2	0.4	0.7	0.0000130721495839916310989454	0.0000130721495839916310989456	10^{-32}

Tablo 2.2. $F_{mn}^l(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri

l	m	n	$F_{mn}^l(\alpha, q; R)$	
0	0	0	$S_{-1,0}(\alpha, q; R) / 2$	
		1	$S_{-1,1}(\alpha, q; R) / 2$	
		2	$S_{-1,2}(\alpha, q; R) / 2$	
		3	$S_{-1,3}(\alpha, q; R) / 2$	
	2	1	$S_{1,1}(\alpha, q; R) / 2$	
		2	$S_{1,2}(\alpha, q; R) / 2$	
		3	$S_{1,3}(\alpha, q; R) / 2$	
	4	2	$S_{3,2}(\alpha, q; R) / 2$	
		3	$S_{3,3}(\alpha, q; R) / 2$	
		4	$S_{3,4}(\alpha, q; R) / 2$	
	1	1	1	$(-C_{0,1}(\alpha, q; R) / R) + (S_{-1,1}(\alpha, q; R) / R^2)$
			2	$(-C_{0,2}(\alpha, q; R) / R) + (S_{-1,2}(\alpha, q; R) / R^2)$
3			$(-C_{0,3}(\alpha, q; R) / R) + (S_{-1,3}(\alpha, q; R) / R^2)$	
3		2	$(-C_{2,2}(\alpha, q; R) / R) + (S_{1,2}(\alpha, q; R) / R^2)$	
		3	$(-C_{2,3}(\alpha, q; R) / R) + (S_{1,3}(\alpha, q; R) / R^2)$	
		4	$(-C_{2,4}(\alpha, q; R) / R) + (S_{1,4}(\alpha, q; R) / R^2)$	
5		3	$(-C_{4,3}(\alpha, q; R) / R) + (S_{3,3}(\alpha, q; R) / R^2)$	
		4	$(-C_{4,4}(\alpha, q; R) / R) + (S_{3,4}(\alpha, q; R) / R^2)$	
		5	$(-C_{4,5}(\alpha, q; R) / R) + (S_{3,5}(\alpha, q; R) / R^2)$	
2		2	1	$(-S_{1,1}(\alpha, q; R) / R) - (3C_{0,1}(\alpha, q; R) / R^2) + (3S_{-1,1}(\alpha, q; R) / R^3)$
			2	$(-S_{1,2}(\alpha, q; R) / R) - (3C_{0,2}(\alpha, q; R) / R^2) + (3S_{-1,2}(\alpha, q; R) / R^3)$
			3	$(-S_{1,3}(\alpha, q; R) / R) - (3C_{0,3}(\alpha, q; R) / R^2) + (3S_{-1,3}(\alpha, q; R) / R^3)$
	4	2	$(-S_{3,2}(\alpha, q; R) / R) - (3C_{2,2}(\alpha, q; R) / R^2) + (3S_{1,2}(\alpha, q; R) / R^3)$	
		3	$(-S_{3,3}(\alpha, q; R) / R) - (3C_{2,3}(\alpha, q; R) / R^2) + (3S_{1,3}(\alpha, q; R) / R^3)$	
		4	$(-S_{3,4}(\alpha, q; R) / R) - (3C_{2,4}(\alpha, q; R) / R^2) + (3S_{1,4}(\alpha, q; R) / R^3)$	
	6	3	$(-S_{5,3}(\alpha, q; R) / R) - (3C_{4,3}(\alpha, q; R) / R^2) + (3S_{3,3}(\alpha, q; R) / R^3)$	
		4	$(-S_{5,4}(\alpha, q; R) / R) - (3C_{4,4}(\alpha, q; R) / R^2) + (3S_{3,4}(\alpha, q; R) / R^3)$	
		5	$(-S_{5,5}(\alpha, q; R) / R) - (3C_{4,5}(\alpha, q; R) / R^2) + (3S_{3,5}(\alpha, q; R) / R^3)$	

ii. $E_{mn}^l(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali

$E_{mn}^l(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali

$$E_{mn}^l(\alpha, R) = \int_0^{\infty} \frac{P^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} j_l(pR) dp \quad (2.58)$$

şeklinde tanımlanır.

✓ **Analitik Formül**

Denklem (2.58)'de yeralan $j_l(x)$ küresel Bessel fonksiyonları için elde ettiğimiz (Özdoğan ve Eraslan, 2014) denklem (2.50) kullanılırsa $m = l + 2k$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) durumu için

$$E_{mn}^l(\alpha, R) = \sum_{k=0}^{l-1} \sum_{s=0}^{l-k} \frac{A_{l,ks}}{R^{k+s+1}} \left\{ (-1)^{\frac{l-k-s-1}{2}} \eta_{l-k-s}^{(-)} C_{m-k-s-1,n}(\alpha, R) + (-1)^{\frac{l-k-s}{2}} \eta_{l-k-s}^{(+)} S_{m-k-s-1,n}(\alpha, R) \right\} \quad (2.59)$$

ifadesi elde edilir.

$m < l$ (m, l tek veya çift) durumu için ise küresel Bessel fonksiyonlarının seri açılım ifadesi (Jeffrey ve Dai, 1995)

$$j_l(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{2^l (l+k)!}{k! (2l+2k+1)!} x^{l+2k} \quad (2.60)$$

kullanılırsa

$$E_{mn}^l(\alpha, R) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k 2^l (l+k)!}{k! (2l+2k+1)!} R^{l+2k} \int_0^{\infty} \frac{P^{m+l+2k}}{(p^2 + \alpha^2)^n} dp \quad (2.61)$$

bulunur. Bu ifadede yeralan

$$\int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + \alpha^2)^n} dx = \int_0^{\infty} \frac{x^{m-1}}{(x^2 + \alpha^2)^n} x dx \quad (2.62)$$

integrali için $x^2 + \alpha^2 = y$ dönüşümü uygulanırsa

$$\int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + \alpha^2)^n} dx = \frac{1}{2} \int_{\alpha^2}^{\infty} \frac{(y - \alpha^2)^{\frac{m-1}{2}}}{y^n} dy \quad (2.63)$$

elde edilir. Denklem (2.63)'te $y = \alpha^2 z$ dönüşümü ile

$$\int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + \alpha^2)^n} dx = \frac{\alpha^{m-2n+1}}{2} \int_1^{\infty} \frac{(z-1)^{\frac{m-1}{2}}}{z^n} dz \quad (2.64)$$

bağıntısı ve son olarak $z-1=t$ dönüşümü uygulanarak da

$$\int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + \alpha^2)^n} dx = \frac{\alpha^{m-2n+1}}{2} B\left(\frac{m+1}{2}, n - \frac{m+1}{2}\right) \quad (2.65)$$

ifadesi elde edilir. (2.65) ifadesinde $m \rightarrow m+l+2k$ yazılarak, $E_{mm}^l(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali için

$$E_{mm}^l(\alpha, R) = \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^Q \frac{(-1)^k 2^l (l+k)!}{k! (2l+2k+1)!} \alpha^{m-2n+l+2k+1} R^{l+2k} \frac{1}{2} B\left(\frac{2n-m-l-2k-1}{2}, \frac{m+l+2k+1}{2}\right) \quad (2.66)$$

ifadesi bulunur. Bu ifade Q 'nun küçük değerlerinde ($Q \approx 6$) bile oldukça hassas sonuçlar vermektedir.

✓ Tekrarlama Bağlıntıları

$E_{mm}^l(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali küresel Bessel fonksiyonlarını içerdiği için, denklem (2.33)'te verilen küresel Bessel fonksiyonlarının tekrarlama bağıntısı kullanılarak

$$E_{mm}^l(\alpha, R) = \frac{2l-1}{R} E_{m-1,n}^{l-1}(\alpha, R) - E_{mm}^{l-2}(\alpha, R) \quad (2.67)$$

şeklinde tekrarlama bağıntısı elde edilir. Bu tekrarlama bağıntılarının başlangıç değerleri olan $E_{mm}^0(\alpha, R)$ ve $E_{mm}^1(\alpha, R)$ integralleri

$$E_{mm}^0(\alpha, R) = R^{-1} S_{m-1,n}(\alpha, R) \quad (2.68)$$

$$E_{mm}^1(\alpha, R) = R^{-2} S_{m-2,n}(\alpha, R) - R^{-1} C_{m-1,n}(\alpha, R) \quad (2.69)$$

ifadeleri ile verilir. Denklem (2.68) ve denklem (2.69)'da geçen $C_{mm}(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali EK I.3'te, $S_{mm}(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali EK I.4'te ve $E_{mm}^l(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik ve sembolik değerleri ise Tablo 2.3 ve Tablo 2.4'te verilmiştir.

Tablo 2.3. $E_{mn}^l(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri

l	m	n	α	R	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δf
0	0	0	0.5	1.4	1.121997376282069013736658351171251	1.121997376282069013736658351171251	0
		1	0.8	0.9	1.399666095614312197210304578653694	1.399666095614312197210304578653694	0
		2	0.5	1.3	5.960120270271155809667280466093544	5.960120270271155809667280466093544	0
		3	0.4	2.2	55.24692836346835917764964652784320	55.24692836346835917764964652784320	0
		4	0.7	2.4	5.464645815096394149366567825725351	5.464645815096394149366567825725351	0
	2	5	0.8	1.5	5.464645815096394149366567825725351	5.464645815096394149366567825725351	0
		1	0.3	0.8	1.544540193397335455048852471205312	1.544540193397335455048852471205312	0
		2	0.1	2.9	7.177998743836756793162794162533763	7.177998743836756793162794162533763	0
		3	0.7	1.1	0.469139807478688607973753557368484	0.469139807478688607973753557368484	0
		4	0.4	1.9	8.754565337282918585543992035768654	8.754565337282918585543992035768654	0
	4	5	0.8	0.1	0.292396462105112144408667926366505	0.292396462105112144408667926366505	0
		2	0.2	1.4	0.729269142456973834041663244772814	0.729269142456973834041663244772814	0
		3	0.7	2.1	0.098675740103356346023892983171719	0.098675740103356346023892983171719	0
		4	0.6	1.5	0.301209533800364003174830713119117	0.301209533800364003174830713119117	0
	1	1	5	0.6	1.7	0.364203427876824745432850240329090	0.364203427876824745432850240329090
1			0.7	2.4	0.278561307436089055074123611568056	0.278561307436089055074123611568056	0
2			0.5	1.4	0.437791632127525340085937813050512	0.437791632127525340085937813050512	0
3			0.8	1.9	0.166286604401195584449774513816471	0.166286604401195584449774513816471	0
4			0.5	1.3	1.307071682442916852653391043696601	1.307071682442916852653391043696601	0
1	3	5	0.4	2.2	26.24242261009943237301170380653961	26.24242261009943237301170380653961	0
		2	0.8	0.1	0.725013883054226463098130821511632	0.725013883054226463098130821511632	0
		3	0.2	1.4	1.038784534313712728722136598658950	1.038784534313712728722136598658950	0
		4	0.7	2.1	0.113785750726092518524283692079433	0.113785750726092518524283692079433	0
	5	0.6	1.5	0.208852469435963026229991899114419	0.208852469435963026229991899114419	0	
	5	3	0.6	1.7	0.210991899788049592980046164406519	0.210991899788049592980046164406519	0
2	2	4	0.8	1.9	0.059155330495830222717514013604989	0.059155330495830222717514013604989	0
		5	0.5	1.3	0.173841577796634709631487391210244	0.173841577796634709631487391210244	0
		1	0.4	2.2	0.312942675738890469089339212973570	0.312942675738890469089339212973570	0
		2	0.1	2.9	0.452029407029365481691252755732052	0.452029407029365481691252755732052	0
		3	0.7	1.1	0.035953540163292782242818161453560	0.035953540163292782242818161453560	0
	4	4	0.4	1.9	0.319591110006353035256559820860847	0.319591110006353035256559820860847	0
		5	0.8	0.8	0.004573752413776084282792472418863	0.004573752413776084282792472418863	0
		2	0.5	1.3	0.520402123506053003192499565666160	0.520402123506053003192499565666160	0
		3	0.4	2.2	0.179173355373848007516191054853785	0.179173355373848007516191054853785	0
		4	0.8	0.1	0.000377611397424076282863609802870	0.000377611397424076282863609802870	0
6	5	0.2	1.4	0.969532232026131880140660825415020	0.969532232026131880140660825415020	0	
	3	2.6	5.4	-0.000003978692956901803104443965810	-0.000003978692956901803104443965810	0	
	4	0.8	4.5	0.009657000642278343994288808740760	0.009657000642278343994288808740760	0	
5	0.2	0.7	0.059769225095468487333605157722900	0.059769225095468487333605157722900	0		

Tablo 2.4. $E_{mn}^l(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri ($P = \alpha R$)

l	m	n	$E_{mn}^l(\alpha, R)$
0	0	0	$\frac{\pi\alpha}{2P}$
		1	$-\frac{\pi}{2\alpha} \frac{(e^{-P}-1)}{P}$
		2	$-\frac{\pi}{4\alpha^3} \frac{([P+2]e^{-P}-2)}{P}$
		3	$-\frac{\pi}{16\alpha^5} \frac{[(P^2+5\alpha+8)e^{-P}-8]}{P}$
		4	$-\frac{\pi}{96\alpha^7} \frac{[(P^3+9P^2+33P+48)e^{-P}-48]}{P}$
	2	1	$\frac{\pi}{2} \frac{\alpha}{P} e^{-P}$
		2	$\frac{\pi}{4a} e^{-P}$
		3	$\frac{\pi}{16\alpha^3} (P+1)e^{-P}$
		4	$\frac{\pi}{96\alpha^5} (P^2+3P+3)e^{-P}$
	4	2	$-\frac{\pi}{4} \frac{(P-2)\alpha}{P} e^{-P}$
		3	$-\frac{\pi}{16\alpha} (P-3)e^{-P}$
		4	$-\frac{\pi}{96\alpha^3} (P^2-3P-3)e^{-P}$
1	1	1	$-\frac{\pi}{2} \frac{[(P+1)e^{-P}-1]}{P^2}$
		2	$-\frac{\pi}{4} \frac{[(P^2+2P+2)e^{-P}-2]}{\alpha^2 P^2}$
		3	$-\frac{\pi}{16} \frac{[(P^3+4P^2+8P+8)e^{-P}-8]}{\alpha^4 P^2}$
		4	$-\frac{\pi}{96} \frac{[(P^4+7P^3+24P^2+48P+48)e^{-P}-48]}{\alpha^6 P^2}$
1	3	2	$\frac{\pi}{4} e^{-P}$
		3	$\frac{\pi}{16\alpha^2} P e^{-P}$
		4	$\frac{\pi}{96\alpha^2} P(P+1)e^{-P}$
	5	3	$-\frac{\pi}{16} (P-4)e^{-P}$
		4	$-\frac{\pi}{96\alpha^2} (P-5)P e^{-P}$
	5	5	$-\frac{\pi}{768\alpha^3} (P^2-5P-5)e^{-P}$

l	m	n	$E_{mn}^l(\alpha, R)$
2	2	1	$-\frac{\pi \alpha \left[(P^2 + 3P + 3)e^{-P} - 3 \right]}{2 P^3}$
		2	$-\frac{\pi \left[(P^3 + 3P^2 + 6P + 6)e^{-P} - 6 \right]}{4 P^3 \alpha}$
		3	$-\frac{\pi \left[(P^4 + 4P^3 + 12P^2 + 24P + 24)e^{-P} - 24 \right]}{16 P^3 \alpha^3}$
	4	2	$\frac{\pi (P+1)\alpha}{4 P} e^{-P}$
		3	$\frac{\pi}{16\alpha} P e^{-P}$
		4	$\frac{\pi}{96\alpha^3} P^2 e^{-P}$
	6	3	$-\frac{\pi (P^2 - 4P - 4)\alpha}{16 P} e^{-P}$
		4	$-\frac{\pi P(P-6)}{96 \alpha} e^{-P}$
		5	$-\frac{\pi}{768\alpha^3} (P-7)P^2 e^{-P}$

iii. $I_{m'}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integrali

$I_{m'}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integrali

$$I_{m'}^m(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^{n'}} dp \quad (2.70)$$

şeklinde tanımlanır.

Anolitik Formül

✓ m 'nin çift değerleri

$I_{m'}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integrali içinde $(p^2 + \alpha^2)^{-n} (p^2 + \beta^2)^{-n'}$ ifadesi için denklem (2.25) kullanılırsa

$$I_{m'}^m(\alpha, \beta) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) E_{m, s+1}(\alpha) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'}^{s'}(\beta, \alpha) E_{m, s'+1}(\beta) \quad (2.71)$$

bağıntısı elde edilir.

✓ m 'nin tek değerleri

Denklem (2.70)'te $\frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n}$ ifadesi için elde ettiğimiz

$$\begin{aligned} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} &= \sum_{j=0}^{(m-1)/2} (-1)^j F_j \left(\frac{m-1}{2} \right) \alpha^{2j} \frac{p}{(p^2 + \alpha^2)^{n - ((m-1)/2) + j}} \\ &= \sum_{j=0}^{(m-1)/2} (-1)^j F_j \left(\frac{m-1}{2} \right) \beta^{2j} \frac{p}{(p^2 + \beta^2)^{n' - ((m-1)/2) + j}} \end{aligned} \quad (2.72)$$

bağıntılar kullanılırsa,

$$\begin{aligned} I_{m'}^m(\alpha, \beta) &= \sum_{j=0}^{(m-1)/2} (-1)^j F_j \left(\frac{m-1}{2} \right) \frac{\alpha^{2j}}{2} G_{n - ((m-1)/2) + j, n'}(\beta^2 - \alpha^2, \alpha^2); \beta > \alpha \text{ ise} \\ &= \sum_{j=0}^{(m-1)/2} (-1)^j F_j \left(\frac{m-1}{2} \right) \frac{\beta^{2j}}{2} G_{n, n' - ((m-1)/2) + j}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2); \alpha > \beta \text{ ise} \end{aligned} \quad (2.73)$$

ifadeleri elde edilir. Burada $G_{mn}(\gamma, Q)$ fonksiyonu EK K'de incelenmiş, analitik ve tekrarlama bağıntıları verilmiştir.

$\alpha = \beta$ durumunda $I_{m'}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integrali

$$I_{m'}^m(\alpha, \alpha) = E_{m, n+n'}(\alpha) \quad (2.74)$$

ifadesine indirgenir.

Tekrarlama Bağlıları

$I_{m'}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integrali için verilen (2.70) ifadesinin pay ve paydası $p^2 + \alpha^2$ ile çarpılırsa,

$$I_{m'}^m(\alpha, \beta) = I_{n-1, n'}^{m-2}(\alpha, \beta) - \alpha^2 I_{m'}^{m-2}(\alpha, \beta) \quad (2.75)$$

ifadesi elde edilir. (2.70) ifadesinin pay ve paydası $p^2 + \beta^2$ ile çarpılırsa,

$$I_{m'}^m(\alpha, \beta) = I_{n-1, n'}^{m-2}(\alpha, \beta) - \beta^2 I_{m'}^{m-2}(\alpha, \beta) \quad (2.76)$$

bulunur. Denklem (2.75) ve (2.76) ile verilen tekrarlama bağlantılarının başlangıç değerleri aşağıda verilmiştir:

$$I_{0n'}^m(\alpha, \beta) = E_{mn'}(\beta) \quad I_{n0}^m(\alpha, \beta) = E_{mn}(\alpha) \quad (2.77)$$

$$I_{n0}^0(\alpha, \beta) = E_{n0}(\alpha) \quad I_{0n'}^1(\alpha, \beta) = E_{1n'}(\beta) \quad (2.78)$$

$$I_{m'}^0(\alpha, \beta) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'n'}^s(\alpha, \beta) E_{0, s+1}(\alpha) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'n}^{s'}(\beta, \alpha) E_{0, s'+1}(\beta) \quad (2.79)$$

$$I_{m'}^1(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} G_{m'}(\beta^2 - \alpha^2, \alpha^2) \quad (2.80)$$

Bu kısımda verilen denklemlerde geçen $\eta_{m'}^s(\alpha, \beta)$ fonksiyonları denklem (2.27)'de verilmiş, $E_{mn}(\alpha)$ ve $G_{mn}(\gamma, Q)$ fonksiyonları ise sırasıyla EK J ve EK K'de incelenmiştir. $I_{m'}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik ve sembolik değerleri ise Tablo 2.5 ve Tablo 2.6'da verilmiştir.

Tablo 2.5. $I_{m'}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri

m	n	n'	α	β	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δf
0	1	2	0.5	1.4	0.5232900873043738686939584712059	0.5232900873043738686939584712059	0
	2	5	0.5	1.3	0.3441777438485534763845600792840	0.3441777438485534763845600792840	0
	3	4	0.4	2.2	0.1008190380915798713235167676263	0.1008190380915798713235167676263	0
	4	7	0.7	2.4	0.0000256748483938640367509745745	0.0000256748483938640367509745745	0
	5	8	0.8	1.5	0.0038794534027931324545077093543	0.0038794534027931324545077093543	0
1	1	2	0.7	2.4	0.0278933205936310049279625491063	0.0278933205936310049279625491063	0
	2	4	0.5	1.4	0.0753334605330394686724147949707	0.0753334605330394686724147949707	0
	3	7	0.8	1.9	0.0000430593330427218144647173691	0.0000430593330427218144647173691	0
	4	8	0.5	1.3	0.1085327568683329201815923000004	0.1085327568683329201815923000004	0
	5	9	0.4	2.2	0.0001195719928150828804691786875	0.0001195719928150828804691786875	0
2	1	4	0.3	0.8	0.8696973541384712699863973942157	0.8696973541384712699863973942157	0
	2	8	0.1	2.9	2.5395393308207554522819930485E-7	2.5395393308207554522819930485E-7	0
	3	9	0.7	1.1	0.0164943276532490894443639033271	0.0164943276532490894443639033271	0
	4	7	0.4	1.9	0.0009467048222607066871699969644	0.0009467048222607066871699969644	0
	5	1	0.8	0.1	2.0942503865706708353847090937004	2.0942503865706708353847090937004	0
3	1	2	0.6	1.7	0.1390549149435020093116060845479	0.1390549149435020093116060845479	0
	2	4	0.2	1.4	0.0498789274442618237664658452874	0.0498789274442618237664658452874	0
	3	4	0.8	0.1	2937.7476589559635140050249819135	2937.7476589559635140050249819135	0
	4	5	0.7	2.1	0.0001148677922982176601739813857	0.0001148677922982176601739813857	0
	5	6	0.6	1.5	0.0037025873948493640627290408318	0.0037025873948493640627290408318	0
4	1	7	0.2	8.7	1.482646491046340040071484817E-12	1.482646491046340040071484817E-12	0
	2	4	0.2	1.4	0.0245667875702006990170720284338	0.0245667875702006990170720284338	0
	3	3	0.7	2.1	0.0023283252785307525376909396192	0.0023283252785307525376909396192	0
	4	1	0.6	1.5	0.1451311259048225720086425493834	0.1451311259048225720086425493834	0
	5	4	0.9	1.7	0.0003466348291968137169742089423	0.0003466348291968137169742089423	0
5	1	8	14.7	4.2	1.218491986796151394777369918E-11	1.218491986796151394777369918E-11	0
	2	9	5.5	5.5	1.980908755992109704636002219E-15	1.980908755992109704636002219E-15	0
	3	2	0.6	1.7	0.0365634250591227132351808515295	0.0365634250591227132351808515295	0
	4	1	0.8	1.9	0.0400440270164212248885207742600	0.0400440270164212248885207742600	0
	5	4	0.5	1.3	0.0348583661306956654771738607459	0.0348583661306956654771738607459	0
6	1	8	1.2	14.8	9.0405046427481583584308251581923	9.0405046427481583584308251581923	0
	2	9	11.7	12.3	4.394021950494414805551795977E-20	4.394021950494414805551795977E-20	0
	3	4	2.6	5.4	3.4676576693740081328624303509E-7	3.4676576693740081328624303509E-7	0
	4	7	0.8	4.5	9.535418109273456123949071553E-11	9.535418109273456123949071553E-11	0
	5	4	0.2	0.7	58.543629708370898885017803526801	58.543629708370898885017803526801	0
7	1	6	0.4	2.2	0.0001404224126342799513819699454	0.0001404224126342799513819699454	0
	2	3	0.1	2.9	0.0296570655695838892749264756653	0.0296570655695838892749264756653	0
	3	5	0.7	1.1	0.0054616847782009017797971918449	0.0054616847782009017797971918449	0
	4	8	0.4	1.9	0.0000040121131710175310709895786	0.0000040121131710175310709895786	0
	5	9	0.8	0.8	0.0151636667480490130630412979142	0.0151636667480490130630412979142	0

Tablo 2.6. $I_{m'}^m(\alpha, \beta)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri

m	n	n'	$I_{m'}^m(\alpha, \beta)$
0	1	2	$\frac{\pi}{4} \frac{(\alpha + 2\beta)}{\alpha\beta^3(\alpha + \beta)^2}$
	2	5	$\frac{\pi}{256} \frac{(35\alpha^5 + 210\beta\alpha^4 + 515\beta^2\alpha^3 + 240\beta^3\alpha^2 + 384\beta^4\alpha + 64\beta^5)}{\alpha^3\beta^9(\alpha + \beta)^6}$
	3	4	$\frac{\pi}{32} \frac{(5\alpha^5 + 30\beta\alpha^4 + 72\beta^2\alpha^3 + 82\beta^3\alpha^2 + 36\beta^4\alpha + 6\beta^5)}{\alpha^5\beta^7(\alpha + \beta)^6}$
	4	4	$\frac{\pi}{32} \frac{(5\alpha^6 + 35\beta\alpha^5 + 101\beta^2\alpha^4 + 147\beta^3\alpha^3 + 101\alpha^2\beta^4\alpha + 35\beta^5\alpha + 5\beta^6)}{\alpha^7\beta^7(\alpha + \beta)^7}$
1	1	3	$\frac{1}{2}G_{31}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)$
	2	1	$\frac{1}{2}G_{12}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)$
	3	4	$\frac{1}{2}G_{43}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)$
	4	2	$\frac{1}{2}G_{24}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)$
2	1	5	$\frac{\pi}{256} \frac{(5\alpha^3 + 25\beta\alpha^2 + 47\beta^2\alpha + 35\beta^3)}{\beta^7(\alpha + \beta)^5}$
	2	6	$\frac{\pi}{512} \frac{(7\alpha^4 + 49\beta\alpha^3 + 141\alpha^2\beta^2 + 203\beta^3\alpha + 128\beta^4)}{\alpha\beta^9(\alpha + \beta)^7}$
	3	2	$\frac{\pi}{16} \frac{(4\alpha + \beta)}{\alpha^3\beta(\alpha + \beta)^4}$
3	2	4	$\frac{1}{2}[G_{32}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - G_{42}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)]$
	3	7	$\frac{1}{2}[G_{63}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - G_{73}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)]$
	4	8	$\frac{1}{2}[G_{74}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - G_{84}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)]$
4	2	1	$\frac{\pi}{4} \frac{(\alpha + 2\beta)}{(\alpha + \beta)^2}$
	3	4	$\frac{\pi}{32} \frac{(\alpha + 6\beta)}{\alpha\beta^3(\alpha + \beta)^6}$
	4	3	$\frac{\pi}{32} \frac{(6\alpha + \beta)}{\alpha^3\beta(\alpha + \beta)^6}$

m	n	n'	$I_{nn'}^m(\alpha, \beta)$
5	3	9	$\frac{1}{2}[G_{73}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - G_{93}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)] - G_{83}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)$
	4	4	$\frac{1}{2}[G_{24}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - G_{44}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)] - G_{34}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)$
	5	6	$\frac{1}{2}[G_{45}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - G_{65}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)] - G_{55}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)$
6	3	3	$\frac{3\pi}{16} \frac{1}{(\alpha + \beta)^5}$
	4	5	$\frac{5\pi}{256} \frac{(\alpha + 8\beta)}{\alpha\beta^3(\alpha + \beta)^8}$
	5	8	$\frac{5\pi}{4096} \frac{(\alpha^5 + 12\beta\alpha^4 + 61\alpha^3\beta^2 + 160\beta^3\alpha^2 + 192\beta^4\alpha + 16\beta^5)}{\alpha\beta^3(\alpha + \beta)^8}$
7	8	5	$\frac{1}{2}[G_{28}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - G_{58}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) + 3G_{48}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - 3G_{38}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)]$
	9	4	$\frac{1}{2}[G_{19}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - G_{49}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) + 3G_{39}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - 3G_{29}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)]$
	9	8	$\frac{1}{2}[G_{59}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - G_{89}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) + 3G_{79}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2) - 3G_{69}(\alpha^2 - \beta^2, \beta^2)]$

3. BULGULAR

3.1. Giriş

Bu bölümde; Bölüm (2)'de elde edilen matematiksel ifadeler ve bu ifadelerin Maple programları kullanılarak H_2^+ , H_2 , HeH^+ , LiH , Li_2 , HF , F_2 , H_2O ve CH_4 moleküllerinin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar literatürde varolan sonuçlarla karşılaştırmalı bir şekilde tablolar halinde verilmiştir.

Bu bölümde, çalışılan molekülleri oluşturan atomların perdeleme sabitleri Tablo (3.1)'de verilmiştir:

Tablo 3.1. Atomların perdeleme sabitleri (Clementi ve Raimondi, 1963)

A.O. Atom	1s	2s	2p
H	1.2280	-	-
He	1.6875	-	-
C	5.6727	1.6083	1.5679
O	7.6579	2.2458	2.2266
F	8.6501	2.5638	2.5500

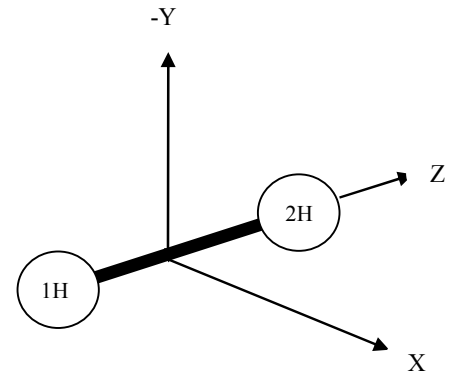
3.2. H_2^+ Molekülü ($^2\Sigma_g^+ : 1\sigma_g^1$)

H_2^+ molekülü $D_{\infty h}$ nokta grubu simetrisine sahip lineer bir moleküldür. H_2^+ molekülü en basit yapıya sahip lineer bir molekül olduğu için bazı özelliklerin hesaplanmasında sıkça çalışılan prototip bir moleküldür (URL-1).

H_2^+ molekülünün geometrisi, taban durum HFR dalga fonksiyonu ve bu molekül için hesaplanan elektron momentum dağılımı, Compton profili ve momentumların beklenen değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir.

Moleküler Geometri			
	X	Y	Z
1H	0.0000	0.0000	-1.0000
2H	0.0000	0.0000	1.0000

R(H-H)= 2 a.b. E= -1.205268 Hartree

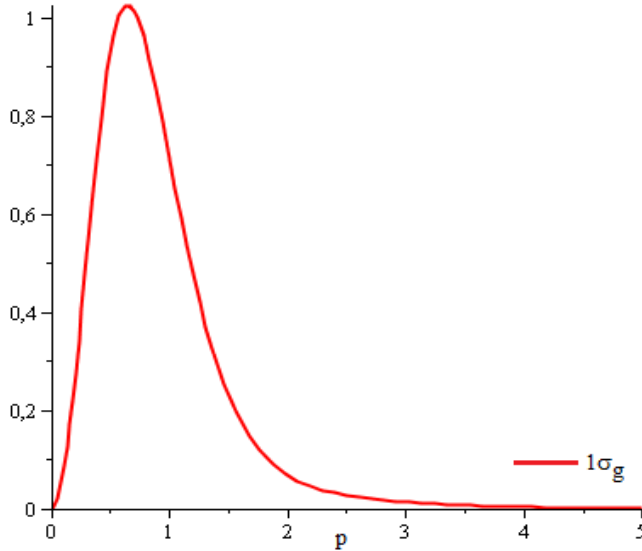


Tablo 3.2. H_2^+ molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu (Coulson, 1941)

c_{pi}	$1\sigma_g$
χ_p	-0.602634
1H 1s	0.58823529411
2H 1s	0.58823529411

Tablo 3.3. H_2^+ molekülünün elektron momentum dağılımları

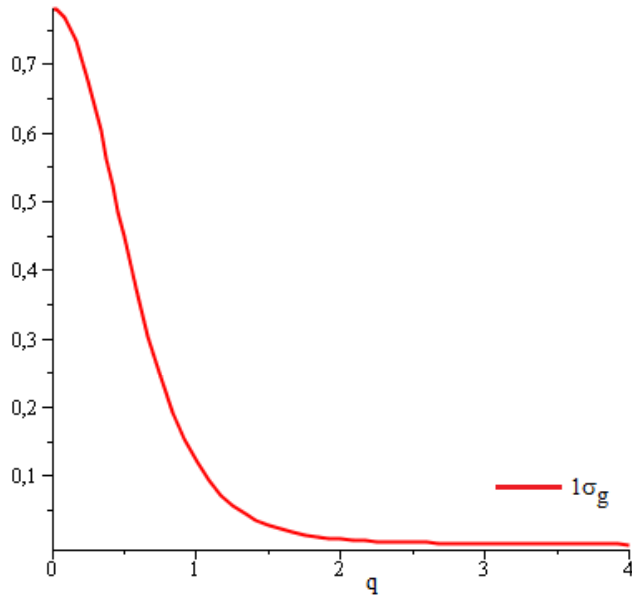
p	Bu Çalışma	Literatür		
		(Coulson, 1941)	(Thomas, 1972)	(Liu ve Smith, 1978)
0.0	0.0000	0.0000	-	-
0.1	0.0727	0.0738	-	-
0.2	0.2662	0.2706	-	-
0.3	0.5188	0.5273	0.4068	0.4121
0.4	0.7592	0.7717	-	-
0.5	0.9333	0.9487	0.7951	0.8056
0.6	1.0172	1.0340	-	-
0.7	1.0145	1.0313	0.9540	0.9665
0.8	0.9459	0.9615	-	-
0.9	0.8372	0.8510	-	-
1.0	0.7120	0.7237	-	-
1.2	0.4731	0.4809	-	-
1.4	0.2938	0.2986	-	-
1.6	0.1777	0.1806	-	-
1.8	0.1083	0.1100	-	-
2.0	0.0682	0.0693	-	-



Şekil 3.1. H_2^+ molekülünün elektron momentum dağılımı

Tablo 3.4. H_2^+ molekülünün Compton profil değerleri

q	Bu Çalışma	Literatür	
		(Coulson, 1941)	(Schneider, 1973)
0.0	0.7820	0.7949	0.7762
0.1	0.7636	0.7762	0.7582
0.2	0.7114	0.7232	0.7071
0.3	0.6339	0.6444	0.6311
0.4	0.5423	0.5513	0.5410
0.5	0.4475	0.4549	0.4475
0.6	0.3580	0.3639	0.3590
0.7	0.2792	0.2838	0.2808
0.8	0.2134	0.2169	0.2152
0.9	0.1607	0.1634	0.1625
1.0	0.1198	0.1218	0.1215
1.2	0.0658	0.0669	0.0671
1.4	0.0365	0.0371	0.0374
1.6	0.0209	0.0213	0.0216
1.8	0.0127	0.0129	0.0131
2.0	0.0081	0.0083	0.0084



Şekil 3.2. H_2^+ molekülünün Compton profil değişimi

Tablo 3.5. H_2^+ molekülünün momentumlarının beklenen değerleri

$\langle p^\sigma \rangle$	Bu Çalışma	(Coulson, 1941)
σ		
-2	4.1568429880	4.2256379870
-1	1.5640904100	1.5899758230
1	0.9086304744	0.9236681446
2	1.1538737990	1.1729702010
3	2.1964716600	2.2328228700
4	7.6930097280	7.8203276420

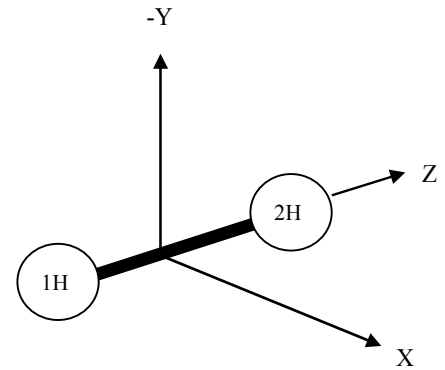
3.3. H_2 Molekülü ($X^1 \sum_g^+ : 1\sigma_g^2$)

H_2 molekülü $D_{\infty h}$ nokta grubu simetrisine sahip lineer bir moleküldür. H_2 molekülü en basit yapıya sahip lineer bir molekül olduğu için bazı özelliklerin hesaplanmasında sıkça çalışılan prototip bir moleküldür. Ticari gübrelere azot bağlanmasında, katı ve sıvı yağların doyumlama işleminde metanol, amonyak ve hidroklorik asit gibi bileşiklerin eldesinde kullanılır. Kaynak yapımında, hidrojen balonlarını şişirmede ve petrolün işlenmesinde kullanılmasının yanında günümüzde daha çok roketlerde olmak üzere yakıt olarak da kullanılır (URL-1).

H_2 molekülünün geometrisi, taban durum HFR dalga fonksiyonu ve bu molekül için hesaplanan elektron momentum dağılımı, Compton profili ve momentumların beklenen değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir.

Moleküler Geometri			
	X	Y	Z
1H	0.0000	0.0000	-1.0000
2H	0.0000	0.0000	1.0000

R(H-H)= 2.0 a.b., E= -1.13362952 Hartree

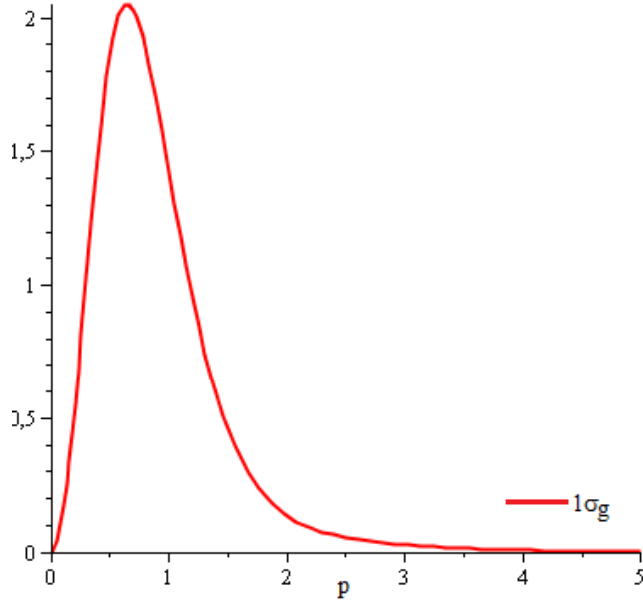


Tablo 3.6. H_2 molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu (Coulson, 1941)

χ_p	c_{pi}	$1\sigma_g$
		-0.56681476
1H	1s	0.58823529411
2H	1s	0.58823529411

Tablo 3.7. H_2 molekülünün elektron momentum dağılımları

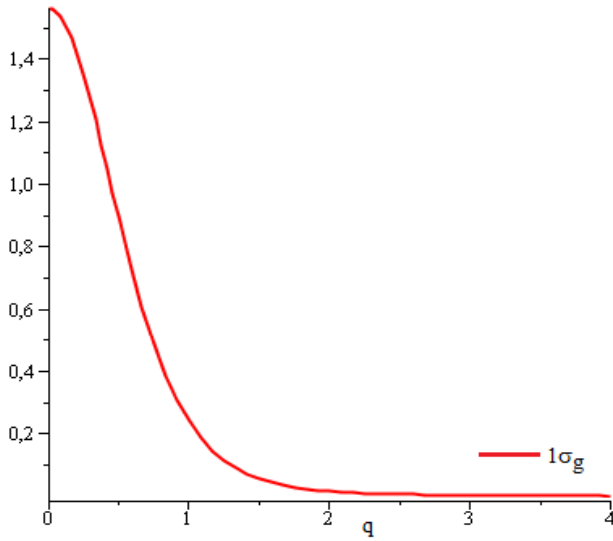
P	Bu Çalışma	(Coulson, 1941)
0.0	0.0000	0.0000
0.1	0.1454	0.1478
0.2	0.5324	0.5412
0.3	1.0376	1.0547
0.4	1.5184	1.5434
0.5	1.8667	1.8976
0.6	2.0345	2.0681
0.7	2.0291	2.0626
0.8	1.8917	1.9230
0.9	1.6745	1.7021
1.0	1.4239	1.4475
1.2	0.9462	0.9619
1.4	0.5876	0.5973
1.6	0.3554	0.3613
1.8	0.2166	0.2201
2.0	0.1365	0.1387



Şekil 3.3. H_2 molekülünün elektron momentum dağılımı

Tablo 3.8. H_2 molekülünün Compton profil değerleri

q	Bu Çalışma	Literatür	
		(Eisenberger, 1970)	(Brown ve Smith, 1972)
0.0	1.564	1.553	1.573
0.1	1.527	1.516	1.532
0.2	1.422	1.412	1.416
0.3	1.267	1.258	1.249
0.4	1.084	1.077	1.060
0.5	0.895	0.890	0.871
0.6	0.716	0.715	0.699
0.7	0.558	0.562	0.551
0.8	0.427	0.433	0.429
0.9	0.321	0.330	0.330
1.0	0.240	0.250	0.253
1.2	0.132	0.141	0.147
1.4	0.073	0.079	0.085
1.6	0.042	0.045	0.049
1.8	0.025	0.026	0.029
2.0	0.016	0.016	0.017

**Şekil 3.4.** H_2 molekülünün Compton profil değişimi**Tablo 3.9.** H_2 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri

$\langle p^\sigma \rangle$	Bu Çalışma	Literatür				
		(Wang ve Smith, 1994)	(Benesch, 1976)	(Smith vd., 1977)	(Barlas vd., 1978)	
σ						
-2	8.3136	8.3743	8.1586	8.2507	8.3120	7.9690
-1	3.1281	3.1224	3.0756	3.0944	3.0990	3.0390
1	1.8173	1.8184	1.8551	1.8375	1.8310	1.8300
2	2.3077	2.2445	2.3483	2.2901	2.2580	2.3410
3	4.3930	3.8877	4.1833	3.9500	3.8000	3.3000
4	15.386	10.762	11.843	-	-	-

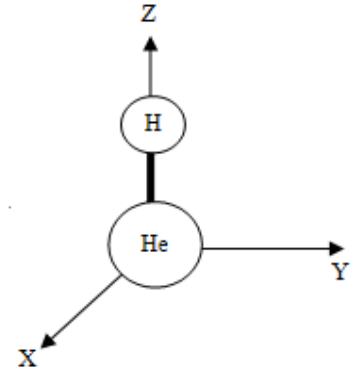
3.4. HeH^+ Molekülü ($X^1\Sigma^+ : 1\sigma^2$)

HeH^+ molekülü $C_{\infty v}$ nokta grubu simetrisine sahip, en basit heteronükleer iki atomlu moleküllerden biridir. Bir protonun gaz halindeki bir helyum atomu ile reaksiyona girmesi sonucunda oluşan pozitif yüklü bir iyondur. Moleküler hidrojen ile izoelektroniktir. Basit bir elektronik yapısı olduğu için elektronik yapı hesaplamalarında iki atomlu prototip molekül olarak sıkça çalışılmaktadır. Buna rağmen, bu molekülün saçılma ile ilgili parametrelerinin çoğu hesaplanmamıştır (URL-1).

HeH^+ molekülünün geometrisi, taban durum HFR dalga fonksiyonu ve bu molekül için hesaplanan elektron momentum dağılımı, Compton profili ve momentumların beklenen değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir.

Moleküler Geometri			
	X	Y	Z
He	0.000000	0.000000	0.000000
H	0.000000	0.000000	1.400000

R(He-H)=1.4 a.b. E= -2.932325 Hartree

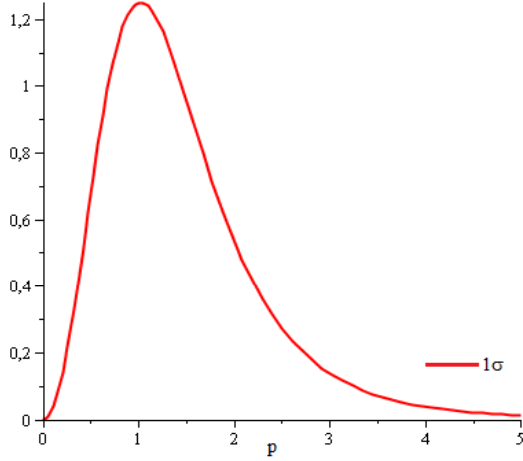


Tablo 3.10. HeH^+ molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu (Jorgensen ve Simons, 1981)

c_{pi}		1σ
χ_p		-1.4661625
He	1s	-0.0574
H	1s	0.9984

Tablo 3.11. HeH^+ molekülünün elektron momentum dağılımları

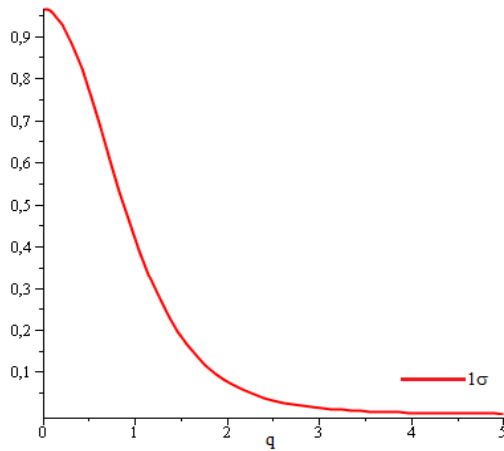
p	Bu Çalışma	p	Bu Çalışma
0.0	0.0000	0.8	1.1518
0.1	0.0351	0.9	1.2243
0.2	0.1361	1.0	1.2514
0.3	0.2908	1.2	1.1947
0.4	0.4802	1.4	1.0458
0.5	0.6815	1.6	0.8641
0.6	0.8719	1.8	0.6875
0.7	1.0327	2.0	0.5343



Şekil 3.5. HeH^+ molekülünün elektron momentum dağılımı

Tablo 3.12. HeH^+ molekülünün Compton profil değerleri

q	Bu Çalışma	(Reed ve Banyard, 1980)
0.0	0.96640	0.99216
0.1	0.95759	-
0.2	0.93168	-
0.3	0.89022	-
0.4	0.83571	-
0.5	0.77133	0.77864
0.6	0.70063	-
0.7	0.62716	-
0.8	0.55407	-
0.9	0.48391	-
1.0	0.41852	0.41120
4.0	0.0038104	0.0041078
10.0	0.000023328	0.000034905



Şekil 3.6. HeH^+ molekülünün Compton profil değişimi

Tablo 3.13. HeH^+ molekülünün momentumlarının beklenen değerleri

$\langle p^\sigma \rangle$	Bu Çalışma	(Fischer vd., 1993)
σ		
-2	3.4931	-
-1	2.0026	2.0448
1	2.8512	-
2	5.8273	5.6920
3	18.0967	-
4	105.4046	94.3300

3.5. LiH Molekülü ($X^1\Sigma^+ : 1\sigma^2 2\sigma^2$)

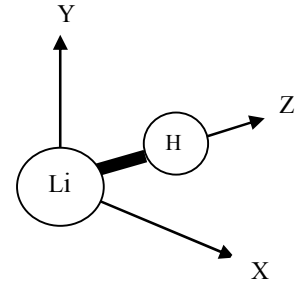
LiH molekülü $C_{\infty v}$ nokta grubu simetrisine sahip, en basit heteronükleer iki atomlu moleküllerden biridir. Basit bir elektronik yapısı olduğu için elektronik yapı hesaplamalarında prototip iki atomlu molekül olarak sıkça çalışılmaktadır. Hidrojen gazı üretiminde, elektronik tüp ve kimyasal sentezlerde kullanılır (URL-1).

LiH molekülünün geometrisi, taban durum HFR dalga fonksiyonu ve bu molekül için hesaplanan elektron momentum dağılımı, Compton profili ve momentumların beklenen değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir.

Moleküler Geometri

	X	Y	Z
Li	0.0000	0.0000	0.0000
H	0.0000	0.0000	3.0150

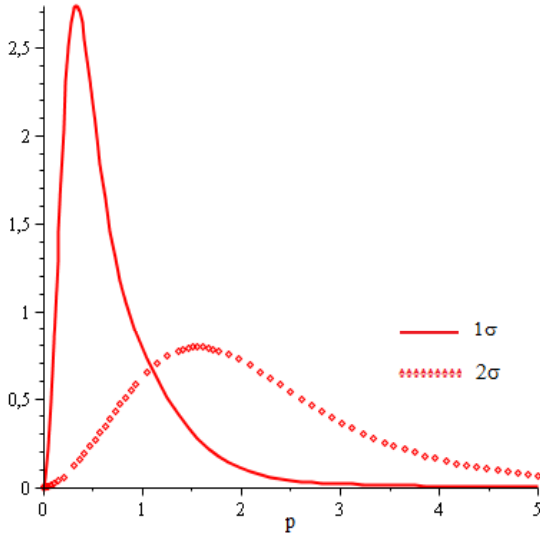
R(Li-H)= 3.015 a.b. E = -7.94632616 Hartree

**Tablo 3.14.** LiH molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu (Orbay ve Özdoğan, 2001)

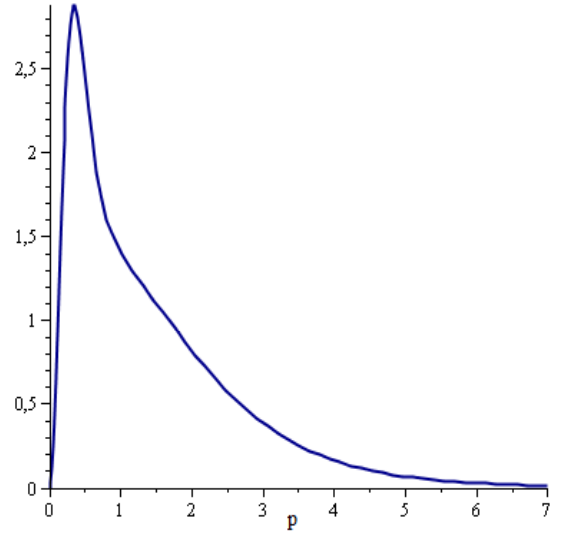
c_{pi}	1σ	2σ
χ_p	-2.449207	-0.293636
Li 1s (2.69063)	0.997134	-0.146528
2s (0.63961)	0.015426	0.362628
H 1s (1.00000)	0.002339	0.785305

Tablo 3.15. *LiH* molekülünün elektron momentum dağılımları

p	Orbital katkıları		Toplam
	1σ	2σ	
0.0	0.0000	0.0000	0.0000
0.1	0.0155	0.7222	0.7068
0.2	0.0567	2.0587	2.0020
0.3	0.1135	2.8136	2.7002
0.4	0.1792	2.7986	2.6194
0.5	0.2511	2.4343	2.1832
0.6	0.3273	2.0595	1.7322
0.7	0.4056	1.7867	1.3811
0.8	0.4829	1.6093	1.1265
0.9	0.5558	1.4926	0.9368
1.0	0.6216	1.4083	0.7867
1.2	0.7234	1.2776	0.5542
1.4	0.7792	1.1600	0.3808
1.6	0.7905	1.0438	0.2534
1.8	0.7654	0.9293	0.1640
2.0	0.7144	0.8191	0.1046



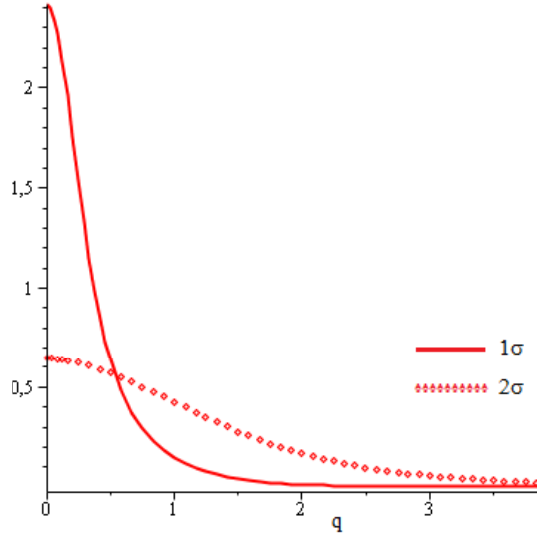
Şekil 3.7. *LiH* molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları



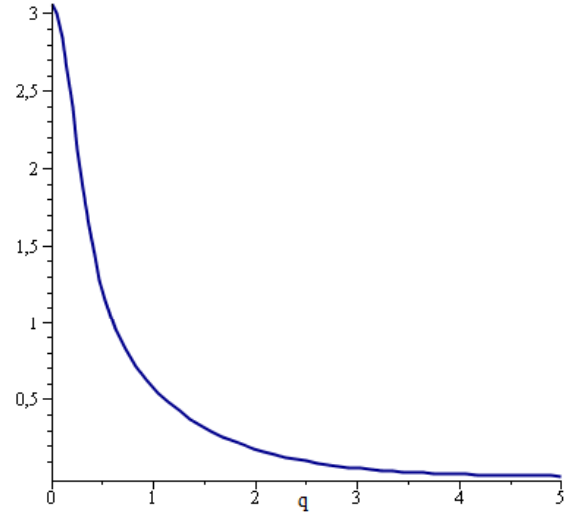
Şekil 3.8. *LiH* molekülünün elektron momentum dağılımı

Tablo 3.16. *LiH* molekülünün Compton profil değerleri

q	Bu Çalışma			(Mahapatra, 1986)
	Orbital katkıları		Toplam	
	1σ	2σ		
0.0	0.6466	2.4187	3.0653	2.2880
0.1	0.6427	2.2308	2.8735	2.2590
0.2	0.6316	1.7837	2.4152	2.1740
0.3	0.6149	1.2970	1.9119	2.0320
0.4	0.5941	0.9069	1.5011	1.8380
0.5	0.5704	0.6368	1.2072	1.5990
0.6	0.5441	0.4583	1.0024	1.3320
0.7	0.5160	0.3387	0.8547	1.0700
0.8	0.4864	0.2552	0.7416	0.8480
0.9	0.4558	0.1946	0.6504	0.6820
1.0	0.4248	0.1493	0.5741	0.5650
1.2	0.3633	0.0884	0.4517	0.4220
1.4	0.3051	0.0525	0.3576	0.3300
1.6	0.2524	0.0315	0.2839	0.2630
1.8	0.2065	0.0193	0.2258	0.2100
2.0	0.1674	0.0123	0.1797	0.1680



Şekil 3.9. *LiH* molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri



Şekil 3.10. *LiH* molekülünün Compton profil değişimi

Tablo 3.17. *LiH* molekülünün momentumlarının beklenen değerleri

$\langle p^\sigma \rangle$	Bu Çalışma	(Roy ve Thakkar, 2002)
σ		
-2	24.45630924	-
-1	6.130580338	-
1	5.963293479	-
2	16.10719030	15.97467048
3	69.49999987	-
4	539.4576874	-

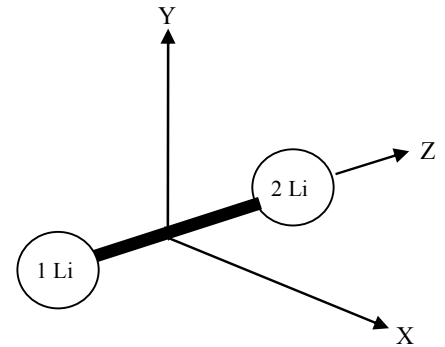
3.6. Li_2 Molekülü ($X^1\Sigma_g^+ : 1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2$)

Li_2 molekülü $D_{\infty h}$ nokta grubu simetrisine sahip lineer bir moleküldür. Seramik ve cam yapımında, pil üretiminde yağlayıcı ve alaşım sertleştirici maddelerin bileşiminde A vitamini sentezinde, nükleer santrallerde soğutucu görevinde ve roketlerde itici kuvvet sağlamada kullanılır. Katı elementler içinde en yüksek özgül ısı kapasitesine sahip olması nedeniyle ısı iletiminde kullanılan sıvıların bileşiminde yer alır. Ancak su ya da asit gibi çözücülerle karşılaştığında yüksek bir patlama ya da parlama özelliğine sahip olması ve özellikle sinir sistemi için zehirli etki göstermesi nedeniyle dikkatli kullanılması gerekir (URL-1).

Li_2 molekülünün geometrisi, taban durum HFR dalga fonksiyonu ve bu molekül için hesaplanan elektron momentum dağılımı, Compton profili ve momentumların beklenen değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir.

Moleküler Geometri			
	X	Y	Z
1 Li	0.0000	0.0000	-2.5255
2 Li	0.0000	0.0000	2.5255

R(Li-Li)= 5.051a.b., E= -14.87152 Hartree

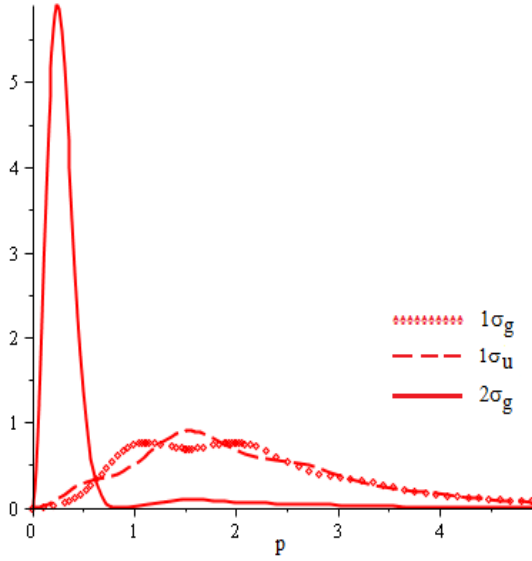
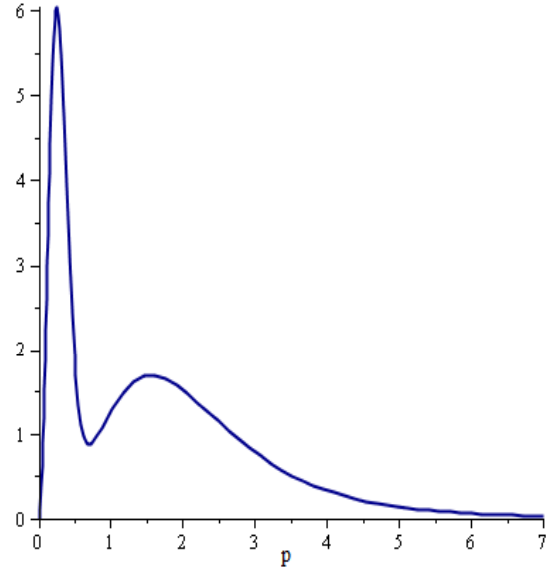


Tablo 3.18. Li_2 molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu (Cade ve Huo, 1967)

χ_p	c_{pi}	$1\sigma_g$ -2.45232	$2\sigma_g$ -0.18163	χ_p	c_{pi}	$1\sigma_u$ -2.45199
1 Li	1s (2.26431)	0.89740	-0.19114	1 Li	1s (2.26431)	0.89740
	1s' (4.47100)	0.16642	-0.01486		1s' (4.47100)	0.16642
	2s (0.66543)	-0.00021	0.77312		2s (0.66543)	-0.00021
	3s (1.53283)	0.00102	0.00219		2s' (1.53283)	0.00102
	3s' (2.70256)	-0.06020	-0.03397		3s (2.70256)	-0.06020
	3s'' (3.97749)	-0.00176	0.00447		2p (0.74023)	0.00019
	2p (0.74023)	0.00019	0.15654		2p' (1.50000)	0.00175
	2p' (1.50000)	0.00175	-0.00093	2 Li	1s (2.26431)	-0.89740
	2p'' (2.28685)	-0.00874	0.00446		1s' (4.47100)	-0.16642
	2p''' (2.97070)	0.00319	0.00177		2s (0.66543)	0.00021
	3d (1.15115)	0.00031	0.00948		2s' (1.53283)	-0.00102
2 Li	1s (2.26431)	0.89740	-0.19114		3s (2.70256)	0.06020
	1s' (4.47100)	0.16642	-0.01486		2p (0.74023)	0.00019
	2s (0.66543)	-0.00021	0.77312		2p' (1.50000)	0.00175
	3s (1.53283)	0.00102	0.00219			
	3s' (2.70256)	-0.06020	-0.03397			
	3s'' (3.97749)	-0.00176	0.00447			
	2p (0.74023)	-0.00019	-0.15654			
	2p' (1.50000)	-0.00175	0.00093			
	2p'' (2.28685)	0.00874	-0.00446			
	2p''' (2.97070)	-0.00319	-0.00177			
	3d (1.15115)	0.00031	0.00948			

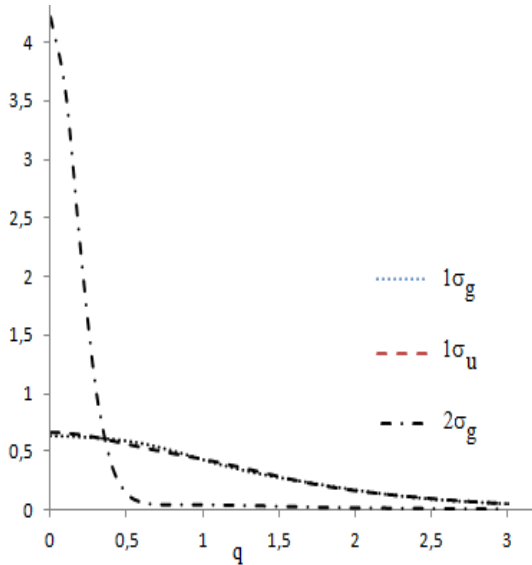
Tablo 3.19. Li_2 molekülünün elektron momentum dağılımları

p	Bu Çalışma				(Duncanson, 1943)
	Orbital katkıları			Toplam	
	$1\sigma_g$	$1\sigma_u$	$2\sigma_g$		
0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.1	0.0253	0.0005	2.4247	2.4505	2.4001
0.2	0.0934	0.0080	5.6558	5.7572	6.5209
0.3	0.1835	0.0364	5.3873	5.6072	7.9701
0.4	0.2718	0.0999	3.0795	3.4512	6.4589
0.5	0.3408	0.2043	1.2487	1.7937	4.1396
0.6	0.3863	0.3421	0.4338	1.1621	2.4524
0.7	0.4171	0.4941	0.1805	1.0917	1.5994
0.8	0.4495	0.6355	0.1056	1.1905	1.2883
0.9	0.4989	0.7435	0.0703	1.3127	1.2381
1.0	0.5726	0.8054	0.0522	1.4303	1.2902
1.2	0.7675	0.8021	0.0650	1.6346	1.4530
1.4	0.9170	0.7313	0.0976	1.7459	1.5658
1.6	0.9214	0.7062	0.1037	1.7313	1.5933
1.8	0.8030	0.7324	0.0851	1.6205	1.5449
2.0	0.6613	0.7397	0.0619	1.4629	1.4430

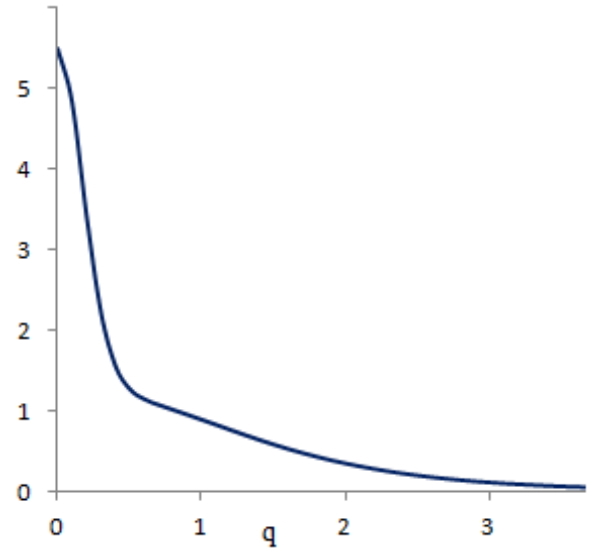
**Şekil 3.11.** Li_2 molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları**Şekil 3.12.** Li_2 molekülünün elektron momentum dağılımı

Tablo 3.20. Li_2 molekülünün Compton profil değerleri

q	Bu Çalışma				(Duncanson, 1943)
	Orbital katkıları			Toplam	
	$1\sigma_g$	$1\sigma_u$	$2\sigma_g$		
0.0	0.6985	0.6313	4.2567	5.5865	6.8544
0.1	0.6920	0.6313	3.5912	4.9145	6.2129
0.2	0.6738	0.6303	2.1879	3.4920	4.7221
0.3	0.6465	0.6264	1.0066	2.2796	3.2020
0.4	0.6139	0.6174	0.3840	1.6153	2.1356
0.5	0.5797	0.6010	0.1487	1.3294	1.5412
0.6	0.5464	0.5765	0.0773	1.2002	1.2452
0.7	0.5155	0.5444	0.0554	1.1153	1.0928
0.8	0.4866	0.5067	0.0462	1.0395	0.9983
0.9	0.4588	0.4659	0.0411	0.9658	0.9246
1.0	0.4308	0.4249	0.0379	0.8936	0.8583
1.2	0.3701	0.3506	0.0330	0.7538	0.7335
1.4	0.3046	0.2915	0.0267	0.6228	0.6167
1.6	0.2424	0.2439	0.0198	0.5060	0.5108
1.8	0.1912	0.2016	0.0142	0.4069	0.4181
2.0	0.1527	0.1626	0.0103	0.3255	0.3391



Şekil 3.13. Li_2 molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri



Şekil 3.14. Li_2 molekülünün Compton profil değişimi

Tablo 3.21. Li_2 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri

$\langle p^\sigma \rangle$	Bu Çalışma	(Roy ve Thakkar, 2002)
σ		
-2	63.88566904	-
-1	10.98956772	-
1	10.04050903	-
2	30.32405603	29.74312452
3	137.5495021	-
4	1087.820529	-

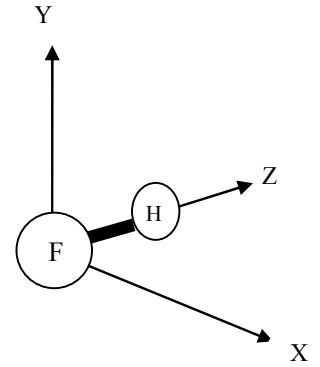
3.7. HF Molekülü ($X^1\Sigma^+ : 1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 1\pi^4$)

HF molekülü $C_{\infty v}$ nokta grubu simetrisine sahip lineer bir moleküldür. Hidrojen bağlı sistemlere iyi bir model olduğu için literatürde sıkça çalışılmaktadır. HF molekülü, büyük ölçüde organik flörürlerin elde edilmesinde ayrıca camın aşındırılması işinde çok kullanılır (URL-1).

HF molekülünün geometrisi, taban durum HFR dalga fonksiyonu ve bu molekül için hesaplanan elektron momentum dağılımı, Compton profili ve momentumların beklenen değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir.

Moleküler Geometri			
	X	Y	Z
H	0.0000	0.0000	1.7330
F	0.0000	0.0000	0.0000

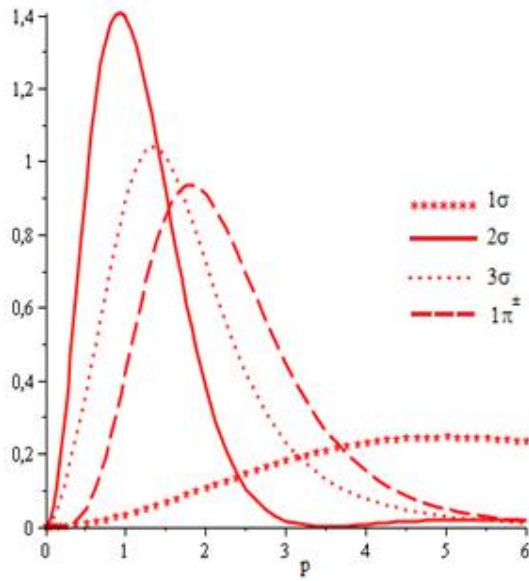
R(H-F)= 1.73 a.b., E= -99.5361 Hartree

**Tablo 3.22.** HF molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu (Özdoğan, 2000)

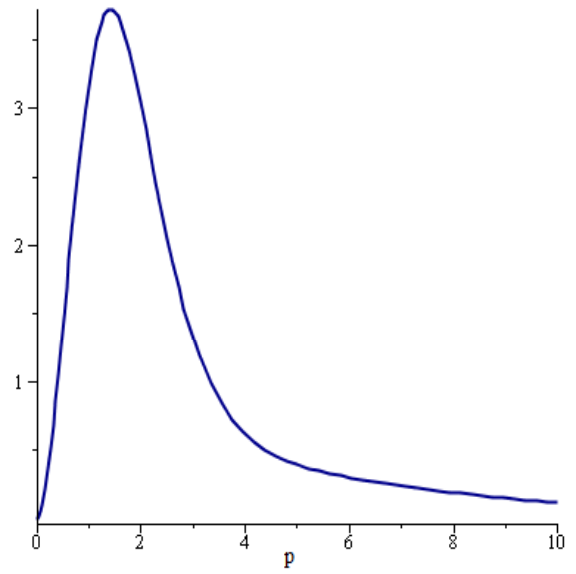
c_{pi}	1σ	2σ	3σ	$1\pi^+$	$1\pi^-$
χ_p	-26.26617	-1.48877	-0.60581	-0.46866	-0.46866
H 1s	0.00331	0.15370	-0.51592	0.00000	0.00000
F 1s	-0.99710	-0.23713	-0.07571	0.00000	0.00000
2s	-0.01272	0.93971	0.42250	0.00000	0.00000
2P _x	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000
2P _y	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000
2P _z	-0.00201	0.09051	-0.71151	0.00000	0.00000

Tablo 3.23. HF molekülünün elektron momentum dağılımları

p	Orbital katkıları				Toplam
	1σ	2σ	3σ	$1\pi^\pm$	
0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.1	0.0003	0.0584	0.0229	0.0001	0.0822
0.2	0.0014	0.2199	0.0841	0.0016	0.3098
0.3	0.0032	0.4496	0.1673	0.0075	0.6374
0.4	0.0057	0.7042	0.2592	0.0223	1.0172
0.5	0.0089	0.9455	0.3552	0.0502	1.4150
0.6	0.0128	1.1470	0.4564	0.0945	1.8123
0.7	0.0174	1.2946	0.5630	0.1565	2.1976
0.8	0.0226	1.3843	0.6713	0.2350	2.5613
0.9	0.0282	1.4188	0.7743	0.3269	2.8919
1.0	0.0343	1.4049	0.8638	0.4271	3.1776
1.2	0.0475	1.2665	0.9787	0.6292	3.5771
1.4	0.0617	1.0422	0.9965	0.7968	3.7226
1.6	0.0767	0.7948	0.9340	0.9012	3.6364
1.8	0.0921	0.5670	0.8230	0.9351	3.3787
2.0	0.1077	0.3802	0.6934	0.9082	3.0208



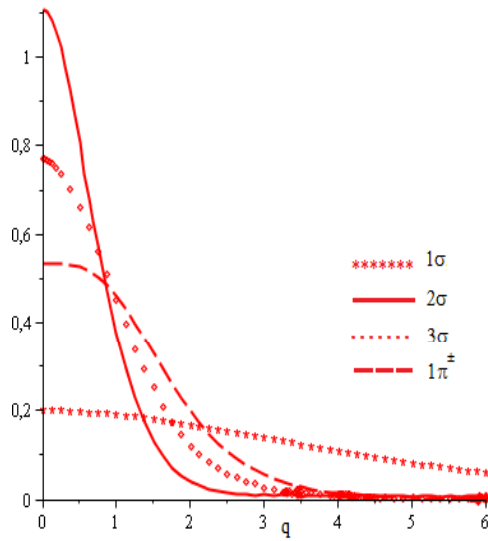
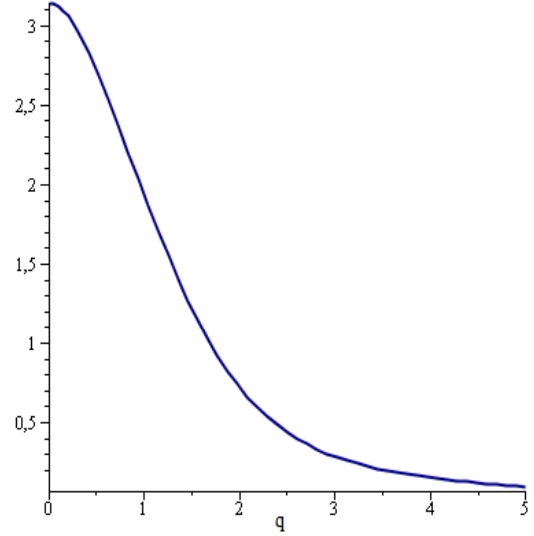
Şekil 3.15. HF molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları



Şekil 3.16. HF molekülünün elektron momentum dağılımı

Tablo 3.24. HF molekülünün Compton profil değerleri

q	Orbital katkıları				Toplam
	1σ	2σ	3σ	$1\pi^\pm$	
0.0	0.1994	1.1019	0.7778	0.5326	3.1443
0.1	0.1993	1.0873	0.7717	0.5326	3.1235
0.2	0.1991	1.0452	0.7546	0.5324	3.0637
0.3	0.1986	0.9802	0.7290	0.5316	2.9712
0.4	0.1980	0.8989	0.6975	0.5297	2.8539
0.5	0.1972	0.8080	0.6622	0.5258	2.7191
0.6	0.1962	0.7134	0.6240	0.5194	2.5725
0.7	0.1951	0.6199	0.5833	0.5099	2.4182
0.8	0.1937	0.5311	0.5406	0.4970	2.2595
0.9	0.1922	0.4491	0.4964	0.4806	2.0989
1.0	0.1906	0.3752	0.4516	0.4608	1.9389
1.2	0.1869	0.2534	0.3638	0.4128	1.6297
1.4	0.1827	0.1647	0.2841	0.3577	1.3469
1.6	0.1781	0.1038	0.2168	0.3007	1.1001
1.8	0.1731	0.0641	0.1629	0.2463	0.8927
2.0	0.1679	0.0395	0.1213	0.1975	0.7237

**Şekil 3.17.** HF molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri**Şekil 3.18.** HF molekülünün Compton profil değişimi**Tablo 3.25.** HF molekülünün momentumlarının beklenen değerleri

$\langle p^\sigma \rangle$	Bu Çalışma	Literatür	
		(Wang ve Smith, 1994)	(Moccia, 1964)
σ			
-2	8.0513	7.4441	-
-1	6.2886	6.4317	6.4600
1	30.790	30.389	30.360
2	199.15	200.08	200.02
3	2489.9	2545.2	-
4	60635	62018	-

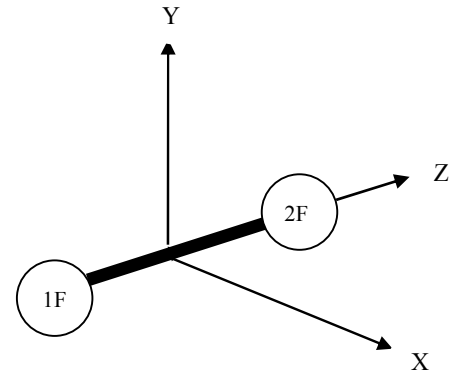
3.8. F_2 Molekülü ($X^1 \sum_g^+ : 1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 1\pi_u^4 3\sigma_g^2 1\pi_g^4$)

F_2 molekülü $D_{\infty h}$ nokta grubu simetrisine sahip lineer bir moleküldür. Bazı laser sistemlerinde kullanıldığı için literatürde sıkça çalışılmasına rağmen, bu molekülün saçılma ile ilgili özellikleri henüz tam olarak bilinmemektedir (URL-1).

F_2 molekülünün moleküler geometrisi, taban durum HFR dalga fonksiyonu ve bu molekül için hesaplanan elektron momentum dağılımı, Compton profili ve momentumların beklenen değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir.

Moleküler Geometri			
	X	Y	Z
1F	0.0000	0.0000	-1.3400
2F	0.0000	0.0000	1.3400

R(F-F)= 2.680 a.b., E= -199.5695 Hartree

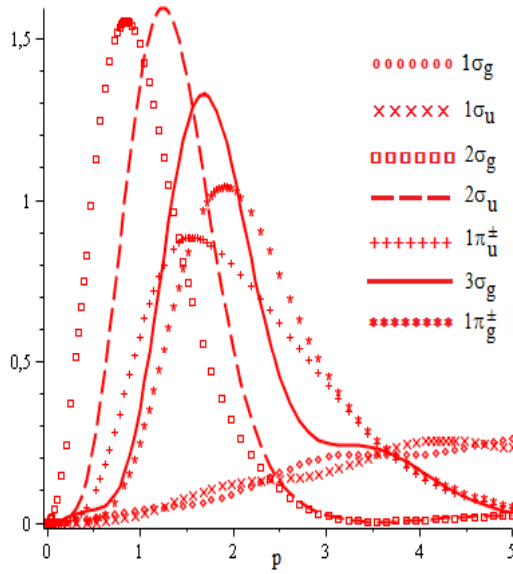


Tablo 3.26. F_2 molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu (Özdoğan, 2000)

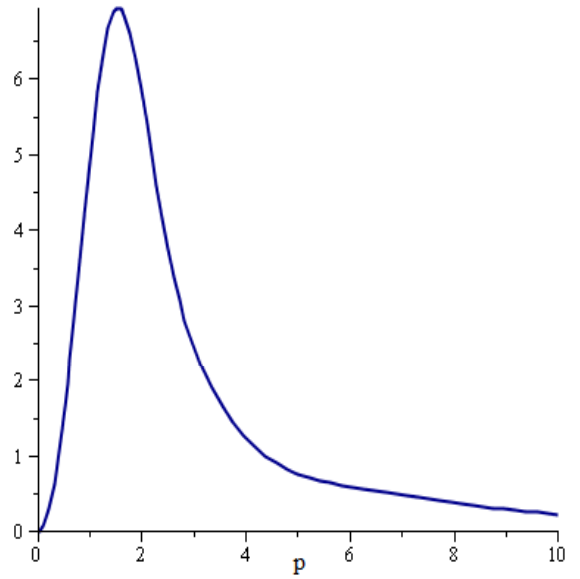
χ_p	c_{pi}	$1\sigma_g$	$1\sigma_u$	$2\sigma_g$	$2\sigma_u$	$1\pi_u^+$	$1\pi_u^-$	$3\sigma_g$	$1\pi_g^+$	$1\pi_g^-$
		-26.38175	-26.38159	-1.63256	-1.36781	-0.61417	-0.61417	-0.65672	-0.47923	-0.47923
1F	1s	0.73300	-0.67629	-0.16892	0.18230	0.00000	0.00000	-0.03783	0.00000	0.00000
	2s	0.00893	-0.00681	0.66888	-0.76060	0.00000	0.00000	0.18031	0.00000	0.00000
	2p _x	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.68974	0.00000	0.00000	0.72588	0.00000
	2p _y	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.68974	0.00000	0.00000	0.72588
	2p _z	-0.00135	-0.00016	-0.08448	-0.07105	0.00000	0.00000	0.65031	0.00000	0.00000
2F	1s	0.73320	0.67629	-0.16889	-0.18234	0.00000	0.00000	-0.03784	0.00000	0.00000
	2s	-0.00835	-0.00751	0.66873	0.76072	0.00000	0.00000	0.18034	0.00000	0.00000
	2p _x	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.68943	0.00000	0.00000	-0.72610	0.00000
	2p _y	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.68943	0.00000	0.00000	0.72617
	2p _z	0.00135	-0.00016	0.08450	-0.07102	0.00000	0.00000	-0.65035	0.00000	0.00000

Tablo 3.27. F_2 molekülünün elektron momentum dağılımları

p	Orbital katkıları							Toplam
	$1\sigma_g$	$1\sigma_u$	$2\sigma_g$	$2\sigma_u$	$1\pi_u^\pm$	$3\sigma_g$	$1\pi_g^\pm$	
0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.1	0.0008	4.6E-06	0.0609	0.0005	0.0002	0.0043	7.5E-07	0.0670
0.2	0.0031	7.3E-05	0.2328	0.0082	0.0029	0.0151	4.6E-05	0.2652
0.3	0.0067	0.0004	0.4855	0.0388	0.0138	0.0270	0.0005	0.5870
0.4	0.0113	0.0011	0.7766	0.1110	0.0401	0.0355	0.0026	1.0209
0.5	0.0165	0.0026	1.0610	0.2388	0.0875	0.0408	0.0089	1.5524
0.6	0.0220	0.0051	1.2992	0.4245	0.1586	0.0495	0.0235	2.1643
0.7	0.0273	0.0088	1.4646	0.6567	0.2514	0.0738	0.0512	2.8364
0.8	0.0322	0.0139	1.5456	0.9117	0.3597	0.1279	0.0967	3.5440
0.9	0.0367	0.0205	1.5448	1.1590	0.4746	0.2223	0.1630	4.2585
1.0	0.0404	0.0285	1.4757	1.3685	0.5863	0.3601	0.2506	4.9471
1.2	0.0464	0.0481	1.2110	1.5885	0.7674	0.7305	0.4759	6.1112
1.4	0.0521	0.0703	0.9006	1.5093	0.8653	1.0997	0.7206	6.8040
1.6	0.0601	0.0918	0.6358	1.2180	0.8848	1.3088	0.9191	6.9223
1.8	0.0727	0.1098	0.4406	0.8578	0.8529	1.2893	1.0262	6.5284
2.0	0.0912	0.1225	0.3032	0.5405	0.7958	1.0866	1.0325	5.8008



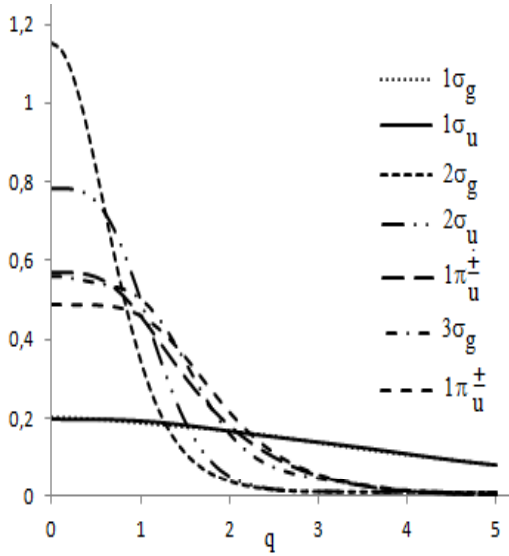
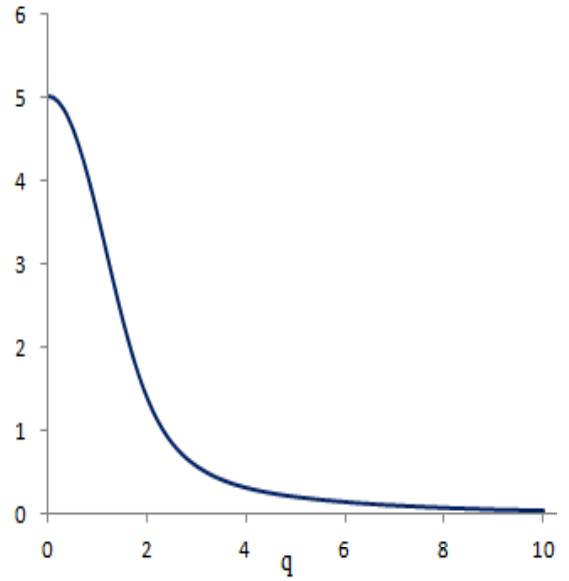
Şekil 3.19. F_2 molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları



Şekil 3.20. F_2 molekülünün elektron momentum dağılımı

Tablo 3.28. F_2 molekülünün Compton profil değerleri

q	Bu çalışma								Toplam	(Snyder ve Weber, 1978)
	Orbital katkıları									
	$1\sigma_g$	$1\sigma_u$	$2\sigma_g$	$2\sigma_u$	$1\pi_u^\pm$	$3\sigma_g$	$1\pi_g^\pm$			
0.0	0.2026	0.1965	1.1530	0.7834	0.5712	0.5585	0.4897	5.0159	5.3500	
0.1	0.2024	0.1965	1.1377	0.7834	0.5714	0.5574	0.4897	4.9991	5.3320	
0.2	0.2018	0.1965	1.0930	0.7824	0.5708	0.5543	0.4897	4.9491	5.2760	
0.3	0.2009	0.1964	1.0230	0.7784	0.5694	0.5501	0.4897	4.8669	5.1830	
0.4	0.1996	0.1963	0.9334	0.7684	0.5658	0.5456	0.4895	4.7541	5.0510	
0.5	0.1981	0.1962	0.8312	0.7497	0.5590	0.5414	0.4889	4.6124	4.8810	
0.6	0.1963	0.1958	0.7235	0.7202	0.5481	0.5373	0.4876	4.4444	4.6720	
0.7	0.1944	0.1953	0.6166	0.6790	0.5325	0.5327	0.4848	4.2526	4.4280	
0.8	0.1924	0.1946	0.5157	0.6269	0.5122	0.5262	0.4800	4.0403	4.1520	
0.9	0.1904	0.1936	0.4243	0.5659	0.4877	0.5162	0.4725	3.8110	3.8520	
1.0	0.1884	0.1923	0.3445	0.4992	0.4598	0.5011	0.4618	3.5686	3.5380	
1.2	0.1844	0.1888	0.2208	0.3624	0.3978	0.4526	0.4293	3.0634	2.9070	
1.4	0.1806	0.1843	0.1392	0.2412	0.3344	0.3818	0.3834	2.5628	2.3320	
1.6	0.1769	0.1789	0.0881	0.1492	0.2756	0.3004	0.3284	2.1015	1.8560	
1.8	0.1730	0.1730	0.0566	0.0878	0.2243	0.2227	0.2707	1.7030	1.4880	
2.0	0.1688	0.1668	0.0372	0.0512	0.1807	0.1595	0.2160	1.3769	1.2100	

**Şekil 3.21.** F_2 molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri**Şekil 3.22.** F_2 molekülünün Compton profil değişimi**Tablo 3.29.** F_2 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri

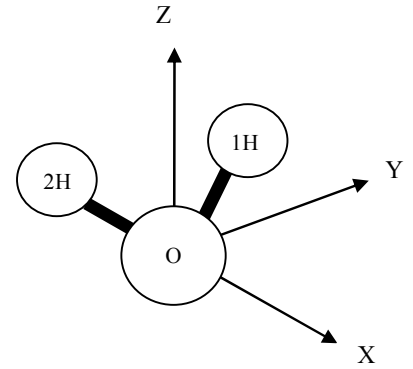
σ	$\langle p^\sigma \rangle$		
	Bu Çalışma	(Wang ve Smith, 1994)	
-2	10.161	11.605	11.688
-1	10.033	10.710	10.721
1	59.155	58.405	58.543
2	394.40	397.14	398.27
3	4978.0	5091.1	5098.8
4	121484	124362	124488

3.9. H_2O Molekülü ($^1 A_1 : 1a_1^2 2a_1^2 1b_2^2 3a_1^2 1b_1^2$)

H_2O molekülü C_{2v} nokta grubu simetrisine sahip bir moleküldür. Soluduğumuz havadan günlük yaşamımıza, sanattan ekonomiye kadar her alanda su, hayatın devamlılığını sağlar. Ayrıca buharlı makinelerden hidroelektrik santrallere, ilaç yapımından tekstile ve kozmetiğe kadar birçok alanda kaynak olarak su kullanılmaktadır. H_2O molekülünün saçılma parametreleri ile ilgili literatürde pek çok çalışma olmasına rağmen oldukça artan bir ilgiyle çalışılmaya devam edilmektedir (URL-1).

H_2O molekülünün geometrisi, taban durum HFR dalga fonksiyonu ve bu molekül için hesaplanan elektron momentum dağılımı, Compton profili ve momentumların beklenen değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir.

Moleküler Geometri			
	X	Y	Z
O	0.0000	0.0000	-0.0651
1H	0.0000	0.7570	0.5208
2H	0.0000	-0.7570	0.5208
R(O-H)=1.810 a.b., R(H-H)=2.873 a.b., E= -76.0506 Hartree			

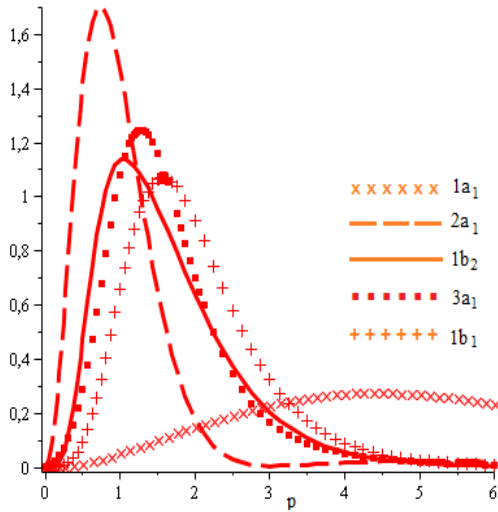


Tablo 3.30. H_2O molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu (Tufan vd., 2007)

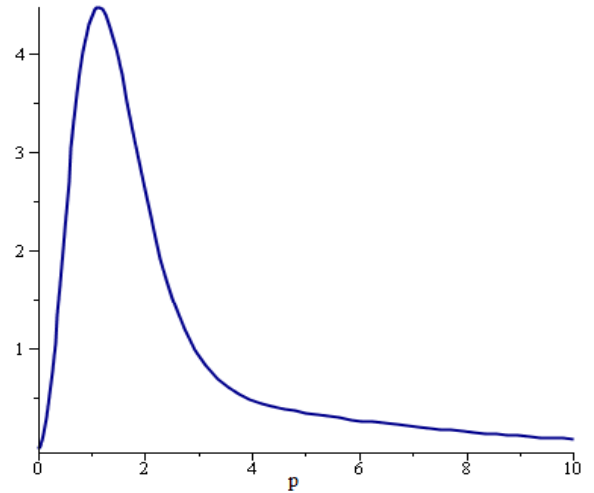
c_{pi}		$1a_1$	$2a_1$	$1b_2$	$3a_1$	$1b_1$
χ_p		-20.2411	-1.2774	-0.6247	-0.4568	-0.3930
1H	1s	-0.006140	0.159527	-0.444475	0.272579	0.000000
2H	1s	-0.006140	0.159527	0.444475	0.272579	0.000000
O	1s	0.994094	-0.232138	0.000000	0.104484	0.000000
	2s	0.026884	0.827726	0.000000	-0.544181	0.000000
	2p _x	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000
	2p _y	0.000000	0.000000	0.608269	0.000000	0.000000
	2p _z	0.004526	0.135922	0.000000	0.777559	0.000000

Tablo 3.31. H_2O molekülünün elektron momentum dağılımları

p	Orbital katkıları					Toplam
	$1a_1$	$2a_1$	$1b_2$	$3a_1$	$1b_1$	
0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.1	0.0005	0.1067	0.0011	0.0145	0.0002	0.1191
0.2	0.0020	0.3928	0.0160	0.1153	0.0030	0.4612
0.3	0.0046	0.7741	0.0665	0.1994	0.0144	0.9819
0.4	0.0084	1.1551	0.1621	0.3154	0.0420	1.6140
0.5	0.0135	1.4639	0.2898	0.4680	0.0924	2.2813
0.6	0.0198	1.6643	0.4239	0.6506	0.1690	2.9150
0.7	0.0271	1.7517	0.5405	0.6506	0.8271	3.4646
0.8	0.0353	1.7411	0.6260	0.8455	0.3925	3.9007
0.9	0.0441	1.6552	0.6779	1.0297	0.5254	4.2118
1.0	0.0534	1.5183	0.7005	1.1831	0.6592	4.3993
1.2	0.0727	1.1730	0.6854	1.3516	0.8914	4.4458
1.4	0.0923	0.8265	0.6272	1.3333	1.0334	4.1608
1.6	0.1120	0.5388	0.5520	1.1855	1.0702	3.6818
1.8	0.1313	0.3272	0.4719	0.9801	1.0196	3.1282
2.0	0.1503	0.1852	0.3939	0.7707	0.9130	2.5851



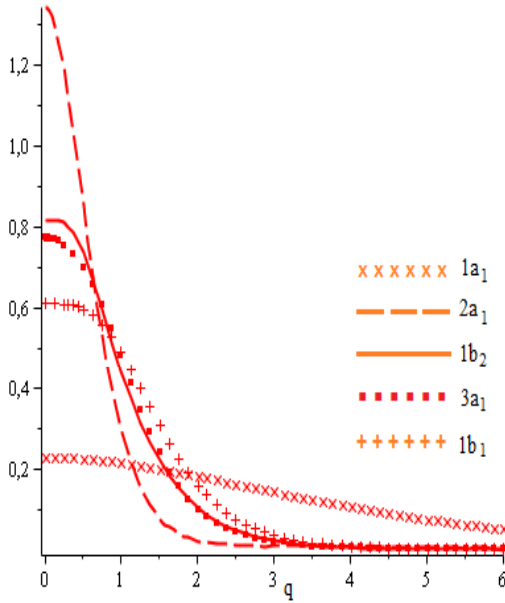
Şekil 3.23. H_2O molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları



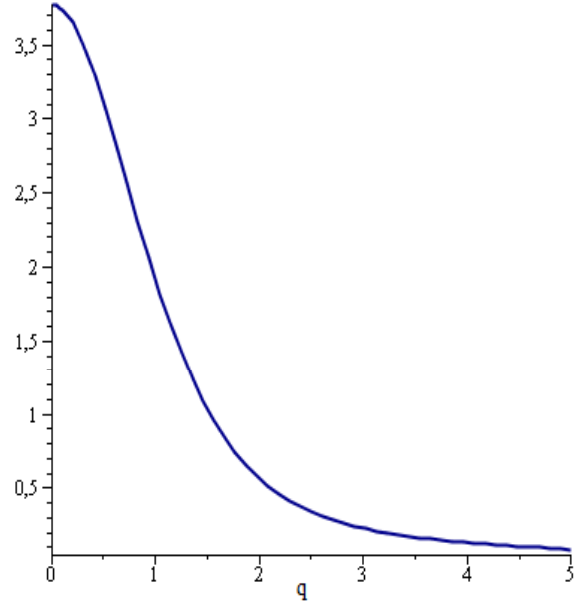
Şekil 3.24. H_2O molekülünün elektron momentum dağılımı

Tablo 3.32. H_2O molekülünün Compton profil değerleri

q	Bu çalışma						Literatür		
	Orbital katkıları					Toplam	(Tanner ve Epstein, 1974)	(Snyder ve Weber, 1975)	(Ahlenius ve Lindner, 1975)
	$1a_1$	$2a_1$	$1b_2$	$3a_1$	$1b_1$				
0.0	0.2282	1.3424	0.8176	0.7749	0.6099	3.7731	3.7930	3.7500	3.7130
0.1	0.2281	1.3162	0.8174	0.7716	0.6099	3.7431	3.7750	3.7330	3.6960
0.2	0.2278	1.2418	0.8141	0.7620	0.6096	3.6553	3.7170	3.6810	3.6436
0.3	0.2271	1.1305	0.8024	0.7469	0.6081	3.5151	3.6140	3.5890	3.5523
0.4	0.2262	0.9970	0.7771	0.7268	0.6044	3.3314	3.4620	3.4520	3.4185
0.5	0.2250	0.8552	0.7370	0.7011	0.5972	3.1155	3.2610	3.2700	3.2413
0.6	0.2235	0.7165	0.6845	0.6689	0.5856	2.8791	3.0210	3.0440	3.0243
0.7	0.2217	0.5885	0.6242	0.6298	0.5689	2.6331	2.7530	2.7860	2.7758
0.8	0.2197	0.4751	0.5608	0.5843	0.5469	2.3869	2.4730	2.5080	2.5077
0.9	0.2173	0.3779	0.4985	0.5339	0.5200	2.1475	2.1940	2.2240	2.2334
1.0	0.2147	0.2967	0.4395	0.4805	0.4889	1.9203	1.9280	1.9490	1.9656
1.2	0.2090	0.1770	0.3363	0.3738	0.4180	1.5141	1.4600	1.4620	1.4866
1.4	0.2027	0.1023	0.2540	0.2783	0.3433	1.1805	1.0960	1.0870	1.1114
1.6	0.1959	0.0584	0.1900	0.2009	0.2725	0.9176	0.8270	0.8180	0.8389
1.8	0.1887	0.0339	0.1411	0.1424	0.2106	0.7166	0.6370	0.6320	0.6463
2.0	0.18131	0.0210	0.1041	0.1002	0.1595	0.5660	0.5030	0.5010	0.5107



Şekil 3.25. H_2O molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri



Şekil 3.26. H_2O molekülünün Compton profil değişimi

Tablo 3.33. H_2O molekülünün momentumlarının beklenen değerleri

$\langle p^\sigma \rangle$	Bu Çalışma	Literatür	
		(Wang ve Smith, 1994)	(Moccia, 1964)
σ			
-2	11.225	10.096	-
-1	7.5463	7.5575	7.2100
1	26.354	26.036	25.935
2	151.89	152.03	151.82
3	1703.1	1739.2	-
4	36931	37962	-

3.10. CH_4 Molekülü (${}^1A_1 : 1a_1^2 2a_1^2 1t_{2x}^2 1t_{2y}^2 1t_{2z}^2$)

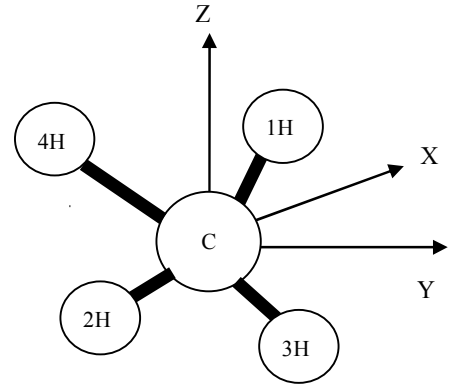
CH_4 (Metan) molekülü T_d nokta grubu simetrisine sahip, simetrisi çok yüksek olan bir moleküldür. CH_4 molekülü, kuantum kimyasının temellerinin atıldığı günlerden beri sıkça çalışılmaktadır. Buna rağmen, saçılma parametreleri ile ilgili çalışmalar günümüzde de artan bir ilgiyle çalışılmaktadır. Maden ocaklarında sıkışmış halde iken serbest hale geçerse havanın oksijeni ile grizu denen patlama reaksiyonunu verir; daha çok petrol kaynaklarındaki yer gazlarında ve bataklıklarda bulunur (URL-1).

CH_4 molekülünün geometrisi, taban durum HFR dalga fonksiyonu ve bu molekül için hesaplanan elektron momentum dağılımı, Compton profili ve momentumların beklenen değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir.

Moleküler Geometri

	X	Y	Z
C	0.0000	0.0000	0.0000
1H	1.1931	1.1931	0.1931
2H	-1.1931	1.1931	-1.1931
3H	1.1931	-1.1931	-1.1931
4H	-1.1931	-1.1931	-1.1931

R(C-H) = 2.067 a.b., R(H-H) = 2.379 a.b., E = -40.3780 Hartree

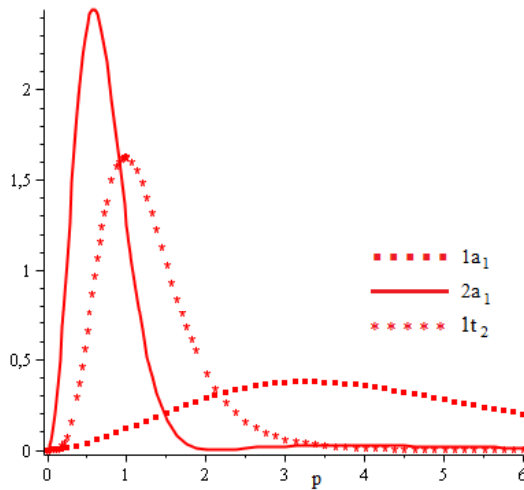


Tablo 3.34. CH_4 molekülünün taban durum HFR dalga fonksiyonu (Tufan vd., 2007)

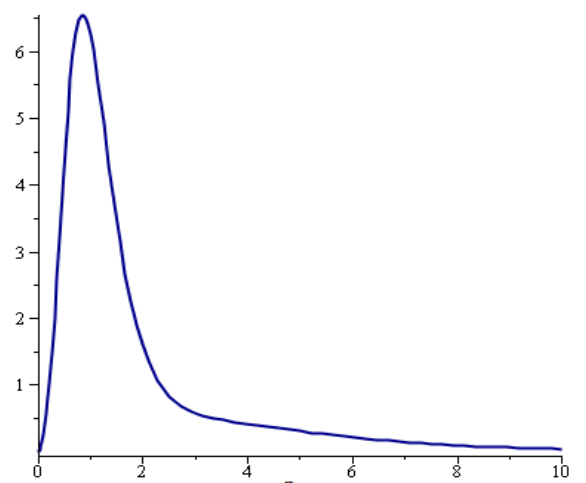
χ_p \ c_{pi}	$1a_1$ -11.0841	$2a_1$ -0.6780	$1t_{2x}$ -0.2641	$1t_{2y}$ -0.2641	$1t_{2z}$ -0.2641
1H 1s	-0.001435	0.118902	0.383199	-0.383199	-0.383199
2H 1s	-0.001435	0.118902	-0.383199	0.383199	-0.383199
3H 1s	-0.001435	0.118902	-0.383199	-0.383199	0.383199
4H 1s	0.001435	0.118902	0.383199	0.383199	0.383199
C 1s	0.994183	-0.258283	0.000000	0.000000	0.000000
2s	0.022651	0.946362	0.000000	0.000000	0.000000
2p _x	0.000000	0.000000	0.530824	0.000000	0.000000
2p _y	0.000000	0.000000	0.000000	0.530824	0.000000
2p _z	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.530824

Tablo 3.35. CH_4 molekülünün elektron momentum dağılımları

p	Orbital katkıları			Toplam
	$1a_1$	$2a_1$	$1t_2$	
0.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.1	0.0015	0.2093	0.0024	0.2181
0.2	0.0061	0.7532	0.0343	0.8621
0.3	0.0135	1.4274	0.1446	1.8746
0.4	0.0235	2.0125	0.3590	3.1130
0.5	0.0356	2.3641	0.6559	4.3673
0.6	0.0494	2.4424	0.9792	5.4295
0.7	0.0646	2.2894	1.2686	6.1599
0.8	0.0806	1.9864	1.4813	6.5110
0.9	0.0974	1.6169	1.5995	6.5128
1.0	0.1145	1.2459	1.6263	6.2396
1.2	0.1496	0.6408	1.4749	5.2150
1.4	0.1848	0.2741	1.1860	4.0171
1.6	0.2195	0.0940	0.8826	2.9613
1.8	0.2524	0.0222	0.6249	2.1493
2.0	0.2826	0.0022	0.4289	1.5716



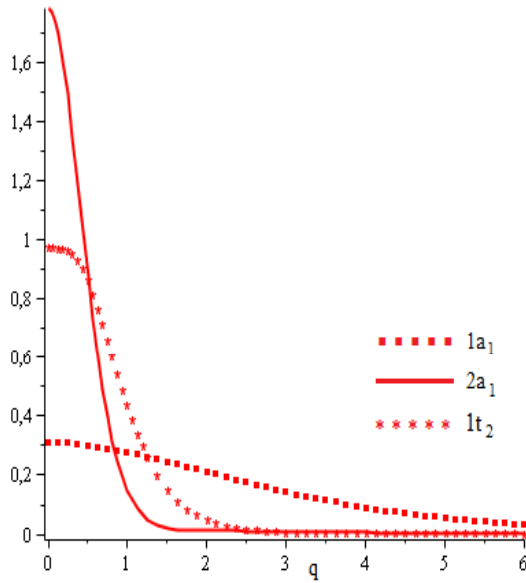
Şekil 3.27. CH_4 molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımları



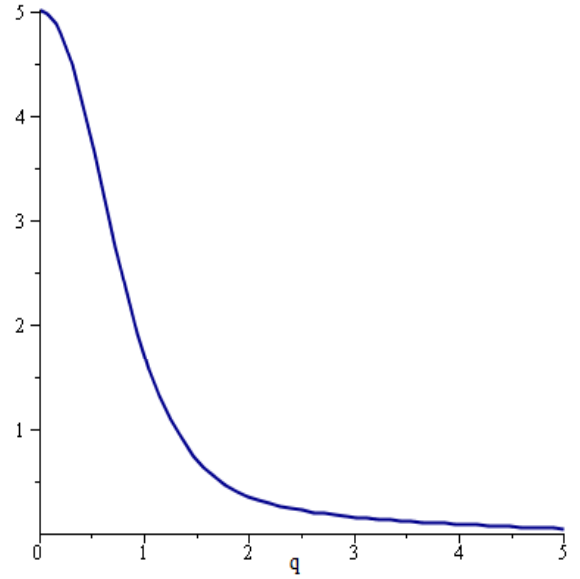
Şekil 3.28. CH_4 molekülünün elektron momentum dağılımı

Tablo 3.36. CH_4 molekülünün Compton profil değerleri

q	Bu çalışma				Literatür		
	Orbital katkıları			Toplam	(Eisenberger ve Marra, 1971)	(Ahlenius ve Lindner, 1975)	(Paakari ve Merisalo, 1978)
	$1a_1$	$2a_1$	$1t_2$				
0.0	0.3080	1.7881	0.9723	5.0133	4.9860	5.0240	5.0060
0.1	0.3076	1.7348	0.9720	4.9587	4.9300	4.9792	4.9530
0.2	0.3065	1.5859	0.9678	4.7960	4.7690	4.8411	4.7980
0.3	0.3046	1.3697	0.9521	4.5308	4.5030	4.6037	4.5490
0.4	0.3020	1.1222	0.9178	4.1779	4.1730	4.2695	4.2220
0.5	0.2987	0.8762	0.8624	3.7624	3.7720	3.8567	3.8360
0.6	0.2949	0.6553	0.7883	3.3152	3.3350	3.3947	3.4110
0.7	0.2905	0.4716	0.7016	2.8668	2.8910	2.9202	2.9720
0.8	0.2857	0.3280	0.6094	2.4421	2.4550	2.4651	2.5380
0.9	0.2804	0.2215	0.5183	2.0570	2.0510	2.0521	2.1280
1.0	0.2749	0.1460	0.4329	1.7199	1.6850	1.6936	1.7560
1.2	0.2629	0.0609	0.2897	1.1932	1.1140	1.1448	1.1580
1.4	0.2500	0.0268	0.1865	0.8365	0.7650	0.7860	0.7630
1.6	0.2365	0.0152	0.1173	0.6039	0.5750	0.5615	0.5320
1.8	0.2227	0.0121	0.0731	0.4543	0.4730	0.4232	0.4060
2.0	0.2086	0.0116	0.0455	0.3569	0.3860	0.3368	0.3340



Şekil 3.29. CH_4 molekülünün moleküler orbitallerinin Compton profil değişimleri



Şekil 3.30. CH_4 molekülünün Compton profil değişimi

Tablo 3.37. CH_4 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri

$\langle p^\sigma \rangle$	σ	Bu çalışma	Literatür	
			(Wang ve Smith, 1994)	(Allavena, 1965)
	-2	18.464	17.682	-
	-1	10.026	10.088	10.800
	1	19.153	18.829	18.225
	2	80.981	80.269	78.528
	3	675.24	689.49	-
	4	10892	11381	-

4. TARTIŞMA VE SONUÇLAR

İnelastik saçılma ve özellikle Compton saçılması, elektronik yapı çalışmalarında yapı analizi için kullanılan önemli bir araçtır. Compton saçılması ile atom, molekül veya kristallerin elektronik momentum dağılımları hakkında bilgiler elde edilerek yapı hakkında tahminlerde bulunulabilir. Compton saçılmasında, Doppler etkisinden dolayı kaymış Compton çizgi spektrumu olarak da bilinen Compton profili, direkt olarak ölçülebilen bir parametre olup, moleküler yapının bağ yapısı hakkında bilgiler verir. Elektron momentum dağılımı ve Compton profili ilk olarak 1920'li yıllarda DuMond tarafından çalışılmış ve daha sonra 1940'lı yıllarda Duncanson ve Coulson tarafından sistematik olarak ele alınarak bilinen bazı atom ve moleküllere uygulanmıştır.

Elektron momentum dağılımı ve Compton profilinden faydalanarak elde edilen momentumların beklenen değerleri, $\langle p^\sigma \rangle$, moleküler yapı ile ilgili önemli bilgiler vermektedir. Örneğin; $\langle p^\sigma \rangle$ ifadesinde $\sigma = -1$: Compton profilinin maksimumu, $\sigma = 0$: elektron sayısı, $\sigma = 1$: lineer momentum, $\sigma = 2$: kinetik enerjisi, $\sigma = 3$: Patterson fonksiyonunun başlangıç değeri ve $\sigma = 4$: relativistik kinetik enerji ile ilgili direkt bilgiler verir. Bu yüzden; elektron momentum dağılımları ve buna bağlı olarak elde edilebilen momentumların beklenen değerlerini elde etmek önemlidir. Bunun yanı sıra elektron momentum dağılımlarına bağlı olarak elde edilebilen Compton profili de moleküler yapı hakkında bilgi sahibi olmak için elde edilmesi gereken önemli bir parametredir.

Literatürde atomların elektron momentum dağılımları ve Compton profillerinin teorisi ve uygulamaları ile ilgili oldukça fazla çalışma olmasına rağmen, moleküllerin ilgili özellikleri ile ilgili teorik çalışmalar oldukça sınırlıdır. Bu çalışmalarda; moleküllerin elektron momentum dağılımları ve Compton profilleri çoğunlukla molekülü oluşturan atomların ağırlıklı katkılarının toplamı şeklinde hesaplanmaktadır. Oysa, çok iyi bilindiği gibi, molekül kendini oluşturan atomların özelliklerinden farklı yeni bir yapıdır. Dolayısıyla, molekül oluşumundaki bağları dikkate almayan bu yaklaşım eksik veya yanıltıcı denilebilir. Literatürde moleküllerin elektron momentum dağılımları ve Compton profilleri hesaplanırken kimyasal bağ dikkate almayan yaklaşımın yanı sıra bazı sakıncalı yaklaşımlarda kullanılmaktadır. Bunlar elektron yoğunluğunu iyi temsil etmeyen bazı fonksiyonlarının kullanımı ve hesaplamalarda

ortaya çıkan moleküler integrallerin hesaplanmasında nümerik yöntemlerin kullanılması şeklinde sıralanabilir. Çok iyi bilindiği gibi moleküler özelliklerin hassas hesabı seçilen baz fonksiyonuna oldukça duyarlıdır. Ayrıca ortaya çıkan yardımcı moleküler integrallerin hesaplanmasında nümerik yöntemlerin kullanılmasından dolayı, bu integrallerin sayısının oldukça fazla olduğu göz önüne alınırsa, hassas sonuçlar elde edilemeyeceği sonucuna varılabilir. Bu yüzden; moleküllerin elektron momentum dağılımları ve Compton profilleriyle ilgili hesaplamalarda elektron yoğunluğunu iyi temsil eden baz fonksiyonu kullanılmalı ve ayrıca ortaya çıkan moleküler integraller mümkün olduğunca analitik yöntemlerle hesaplanmalıdır.

Bu çalışmada; atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri için birleşik HFR teorisi verilmiştir. Literatürdeki çalışmalardan farklı olarak; elektron yoğunluğunu en iyi temsil eden STO'lar kullanılmış ve ortaya çıkan yardımcı moleküler integraller ise analitik olarak hesaplanmıştır.

Moleküllerin elektron momentum dağılımları için elde edilen ifade; yapısında HFR-LCAO lineer kombinasyon katsayıları ve elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralini, $I_{nlm,n'l'm'}(\alpha, \beta; p, R)$, içermektedir. Moleküllerin elektron momentum dağılımlarının doğru hesaplanabilmesi, elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralinin hassas bir şekilde hesaplanabilmesine bağlıdır. Bu amaçla, elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integrali için analitik bir ifade elde edilmiştir. Elde edilen ifade; STO'ların Fourier dönüşümünün radyal kısmı olan $f_{nl}(\alpha, p)$ fonksiyonu ve $K_{lm,l'm'}(p, R)$ kırınım çarpanını içerir. $K_{lm,l'm'}(p, R)$ kırınım çarpanı, incelenen yapı atom olduğunda 1, molekül olduğunda ise küresel Bessel fonksiyonu ve Gaunt katsayılarından oluşur. Moleküllerin elektron momentum dağılımlarının doğru bir şekilde hesaplanması, $f_{nl}(\alpha, p)$ fonksiyonu, Gaunt katsayıları ve küresel Bessel fonksiyonunun hassas bir şekilde hesaplanmasına bağlıdır.

Moleküllerin Compton profilleri için elde edilen ifade; yapısında HFR-LCAO lineer kombinasyon katsayıları ve Compton profil yardımcı moleküler integralini, $J_{nlm,n'l'm'}(\alpha, \beta; p, R)$, içermektedir. Moleküllerin Compton profillerinin hassas hesaplanabilmesi, Compton profil yardımcı moleküler integralinin hassas bir şekilde hesaplanabilmesine bağlıdır. Bu amaçla, Compton profil yardımcı moleküler integrali

için analitik bir ifade elde edilmiştir. Compton profil yardımcı moleküler integrali yapısında $B_{nl}^s(\alpha)$ fonksiyonu, Gaunt katsayıları ve $J_{ml}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralini içerir. Compton profil yardımcı moleküler integralini hesaplamak için $J_{ml}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integrali detaylı bir şekilde ele alınmıştır. $m \geq l + 2k$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) durumlarında tam çözüm elde edilebilmesine rağmen diğer durumlarda sonsuz seri çözümleri bulunabilmiştir. Ancak bu seri çözüm ifadelerinin çok çabuk yığıldığı ve sonuçların nümerik sonuçlarla uyumlu olduğu gözlenmiştir.

Moleküllerin momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen ifade; yapısında HFR-LCAO lineer kombinasyon katsayıları ve $Z_{nlm, n'l'm'}^\sigma(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralini içermektedir. Moleküllerin momentumlarının beklenen değerlerinin hassas hesaplanabilmesi, $Z_{nlm, n'l'm'}^\sigma(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin hassas bir şekilde hesaplanabilmesine bağlıdır. Bu amaçla, $Z_{nlm, n'l'm'}^\sigma(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali için analitik bir ifade elde edilmiştir. Elde edilen ifade yapısında Gaunt katsayıları ve $D_{nl, n'l}^{mL}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralini içerir. Moleküllerin momentumlarının beklenen değerlerinin doğru bir şekilde elde edilebilmesi bu parametrelerin hassas bir şekilde hesaplanabilmesine bağlıdır.

Atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri için sunulan birleşik HFR teorilerinin hesaplamalı sonuçları ve literatürle karşılaştırmalı değerlendirmeleri aşağıda üç ana başlık altında incelenmiştir.

4.1. Elektron Momentum Dağılımları ile İlgili Hesaplamalar

Atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımlarının birleşik HFR teorisi için elde edilen ifadelerin Maple-13 sembolik programlama dilinde bilgisayar programları yazılmış ve uygulama olarak; H_2^+ , H_2 , HeH^+ , LiH , Li_2 , HF , F_2 , H_2O ve CH_4 moleküllerin ilgili özellikleri hesaplanarak literatürde varolan değerlerle karşılaştırılmıştır.

H_2^+ molekülünün elektron momentum dağılımı için elde edilen sonuçlar Tablo 3.3'te literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.3'ten görüldüğü gibi elde edilen sonuçlar literatürle uyumludur. Liu ve Smith (Liu ve Smith, 1978) ile Thomas'ın

çalışmalarında (Thomas, 1972) ortaya çıkan yardımcı moleküler integraller nümerik yöntemlerle hesaplamıştır. Bu yüzden sonuçlarımız Liu ve Smith ile Thomas'ın sonuçlarıyla yaklaşık % 15-20, Coulson'un (Coulson, 1941) sonuçlarıyla ise yaklaşık % 1.5 civarında hata vermektedir. H_2^+ molekülünün elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği için elde edilen Şekil 3.1'e bakıldığında $p = 0.68$ noktasında literatür sonuçlarıyla uyumlu bir maksimumun olduğu görülebilir.

H_2 molekülünün elektron momentum dağılımı için elde edilen sonuçlar Tablo 3.7'de literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.7'den görüldüğü gibi elde edilen sonuçlar literatürle uyumludur. Coulson'un (Coulson, 1941) çalışmasında, antisimetriklik ilkesine uymayan Hartree çarpım dalga fonksiyonu kullanıldığı için çalışmamızla arasındaki yaklaşık hata % 1.5 civarındadır. H_2 molekülünün elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği için elde edilen Şekil 3.3'e bakıldığında $p = 0.65$ noktasında literatür sonuçlarıyla uyumlu bir maksimumun olduğu görülebilir.

HeH^+ molekülünün elektron momentum dağılımları için elde edilen sonuçlar literatürde ilgili çalışmalar mevcut olmadığından karşılaştırma yapılamamıştır. HeH^+ molekülünün elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği için elde edilen Şekil 3.5'e bakıldığında $p = 1.04$ noktasında bir maksimumun olduğu görülebilir.

LiH molekülünün elektron momentum dağılımları için elde edilen sonuçlar literatürde ilgili çalışmalar mevcut olmadığından karşılaştırma yapılamamıştır. LiH molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımının momentuma göre değişimi Şekil 3.7'de verilmiştir. LiH molekülünün toplam elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği olan Şekil 3.8'e bakıldığında, $p = 0.56$ noktasında bir maksimumun olduğu görülebilir.

Li_2 molekülünün elektron momentum dağılımı için elde edilen sonuçlar Tablo 3.19'da literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Duncanson (Duncanson vd., 1943) çalışmalarında antisimetriklik ilkesine uymayan Hartree çarpım dalga fonksiyonu kullanılmış olmasına rağmen Duncanson'un sonuçlarıyla çalışmamız arasındaki yaklaşık hata % 19.5 civarındadır. Li_2 molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımının momentuma göre değişimleri Şekil 3.11'de verilmiştir. Li_2

molekülünün toplam elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği olan Şekil 3.12'ye bakıldığında, $p = 0.24$ noktasında literatür sonuçlarıyla uyumlu bir maksimumun olduğu görülebilir.

HF molekülünün elektron momentum dağılımları için elde edilen sonuçlar literatürde ilgili çalışmalar olmadığından karşılaştırma yapılamamıştır. HF molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği Şekil 3.15'te verilmiştir. HF molekülünün elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği olan Şekil 3.16'ya bakıldığında, $p = 1.46$ noktasında literatür sonuçlarıyla uyumlu bir maksimumun olduğu görülebilir.

F_2 molekülünün elektron momentum dağılımları için elde edilen sonuçlar literatürde ilgili çalışmalar olmadığından karşılaştırma yapılamamıştır. F_2 molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği Şekil 3.19'da verilmiştir. F_2 molekülünün elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği olan Şekil 3.20'ye bakıldığında, $p = 1.6$ noktasında literatür sonuçlarıyla uyumlu bir maksimumun olduğu görülebilir.

H_2O molekülünün elektron momentum dağılımları için elde edilen sonuçlar literatürde ilgili çalışmalar mevcut olmadığından karşılaştırma yapılamamıştır. H_2O molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği Şekil 3.23'te verilmiştir. H_2O molekülünün elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği olan Şekil 3.24'e bakıldığında, $p = 1.12$ noktasında literatür sonuçlarıyla uyumlu bir maksimumun olduğu görülebilir.

CH_4 molekülünün elektron momentum dağılımları için elde edilen sonuçlar literatürde ilgili çalışmalar mevcut olmadığından karşılaştırma yapılamamıştır. CH_4 molekülünün moleküler orbitallerinin elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği Şekil 3.27'de verilmiştir. CH_4 molekülünün elektron momentum dağılımının momentuma göre değişim grafiği olan Şekil 3.28'e bakıldığında, $p = 0.85$ noktasında literatür sonuçlarıyla uyumlu bir maksimumun olduğu görülebilir.

4.2. Compton Profilleri ile İlgili Hesaplamalar

Atom ve moleküllerin Compton profillerinin birleşik HFR teorisi için elde edilen ifadelerin Maple-13 sembolik programlama dilinde bilgisayar programları yazılmış ve uygulama olarak; H_2^+ , H_2 , HeH^+ , LiH , Li_2 , HF , F_2 , H_2O ve CH_4 moleküllerin ilgili özellikleri hesaplanarak literatürde varolan değerlerle karşılaştırılmıştır.

H_2^+ molekülünün Compton profili için elde edilen sonuçlar Tablo 3.4'te literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.4'ten görüldüğü gibi, elde edilen sonuçlar Coulson (Coulson, 1941) ve Schneider (Schneider, 1973) çalışmalarındaki değerlerle karşılaştırıldığında yaklaşık % 1-2 hata gözlenmiştir. H_2^+ molekülünün Compton profillerinin foton momentum transfer vektörünün büyüklüğüne göre değişimi Şekil 3.2'de verilmiştir.

H_2 molekülünün Compton profili için elde edilen sonuçlar Tablo 3.8'de literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.8'den görüldüğü gibi, elde edilen sonuçlar Eisenberger (Eisenberger, 1970) ve Brown'un (Brown ve Smith, 1972) çalışmalarındaki sonuçlarla yaklaşık % 2-4 hata ile uyum sağlamaktadır. H_2 molekülünün Compton profillerinin foton momentum transfer vektörünün büyüklüğüne göre değişimi Şekil 3.4'te verilmiştir.

HeH^+ molekülünün Compton profili için elde edilen sonuçlar Tablo 3.12'de literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.12'den görüldüğü gibi, elde edilen sonuçlar Reed'in (Reed ve Banyard, 1980) çalışmalarındaki sonuçlarla kısmen karşılaştırılmış ve yaklaşık % 8.7 hata ile uyum sağlandığı görülmüştür. HeH^+ molekülünün Compton profillerinin foton momentum transfer vektörünün büyüklüğüne göre değişimi Şekil 3.6'da verilmiştir.

LiH molekülünün Compton profili için elde edilen sonuçlar Tablo 3.16'da literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.16'dan görüldüğü gibi, Mahapatra'nın (Mahapatra, 1986) sonuçlarıyla $q < 1.0$ için yaklaşık % 20 hata gözlenirken, $q > 1.0$ için bu hata yaklaşık % 7 civarında tespit edilmiştir. LiH molekülünün moleküler orbital ve toplam Compton profillerinin foton momentum transfer vektörünün büyüklüğüne göre değişimleri, sırasıyla, Şekil 3.9 ve Şekil 3.10'da

verilmiştir. Compton profillerinin değişim grafiklerine bakıldığında literatürle uyumlu oldukları görülmektedir.

Li_2 molekülünün Compton profili için elde edilen sonuçlar Tablo 3.20'de literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.20'den görüldüğü gibi, Duncanson'un (Duncanson vd., 1943) değerleriyle $q < 0.7$ için yaklaşık % 20 hata ile uyum gösterirken bu hata q 'nın artan değerlerinde gittikçe azalmaktadır. Li_2 molekülünün moleküler orbital ve toplam Compton profillerinin foton momentum transfer vektörünün büyüklüğüne göre değişimleri, sırasıyla, Şekil 3.13 ve Şekil 3.14'te verilmiştir. Compton profillerinin değişim grafiklerine bakıldığında literatürle uyumlu oldukları görülmektedir.

HF molekülünün Compton profilleri için elde edilen sonuçlar literatürde ilgili çalışmalar mevcut olmadığından karşılaştırma yapılamamıştır. HF molekülünün moleküler orbital ve toplam Compton profillerinin foton momentum transfer vektörünün büyüklüğüne göre değişimleri, sırasıyla, Şekil 3.17 ve Şekil 3.18'de verilmiştir.

F_2 molekülünün Compton profili için elde edilen sonuçlar Tablo 3.28'de literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.28'den görüldüğü gibi, Snyder'in (Snyder ve Weber, 1978) çalışmalarındaki değerlerle karşılaştırılmış ve genel olarak yaklaşık % 6 civarında bir hata ile uyum sağlanmıştır. F_2 molekülünün moleküler orbital ve toplam Compton profillerinin foton momentum transfer vektörünün büyüklüğüne göre değişimleri, sırasıyla, Şekil 3.21 ve Şekil 3.22'de verilmiştir. Compton profillerinin değişim grafiklerine bakıldığında literatürle uyumlu oldukları görülmektedir.

H_2O molekülünün Compton profili için elde edilen sonuçlar Tablo 3.32'de literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.32'den görüldüğü gibi, Snyder, Tanner (Tanner ve Epstein, 1974) ve Ahlenius'un (Ahlenius ve Lindner, 1975) sonuçlarıyla karşılaştırıldığında yaklaşık % 4-5 civarında bir hata ile uyumlu sonuçlar bulunmuştur. H_2O molekülünün moleküler orbital ve toplam Compton profillerinin foton momentum transfer vektörünün büyüklüğüne göre değişimleri, sırasıyla, Şekil 3.25 ve Şekil 3.26'da verilmiştir. Compton profillerinin değişim grafiklerine bakıldığında literatürle uyumlu oldukları görülmektedir.

CH_4 molekülünün Compton profili için elde edilen sonuçlar Tablo 3.36'da literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.36'dan görüldüğü gibi, elde edilen sonuçların Eisenberger (Eisenberger ve Marra, 1971), Ahlenius (Ahlenius ve Lindner, 1975) ve Paakari'nin (Paakari ve Merisalo, 1978) çalışmalarındaki değerlerle yaklaşık % 2-4 civarında bir hata ile uyumlu olduğu görülmüştür. CH_4 molekülünün moleküler orbital ve toplam Compton profillerinin foton momentum transfer vektörünün büyüklüğüne göre değişimleri, sırasıyla, Şekil 3.29 ve Şekil 3.30'da verilmiştir. Compton profillerinin değişim grafiklerine bakıldığında literatürle uyumlu oldukları görülmektedir.

4.3. Momentumların Beklenen Değerleri ile İlgili Hesaplamalar

Atom ve moleküllerin momentumlarının beklenen değerlerinin birleşik HFR teorisi için elde edilen ifadelerin Maple-13 sembolik programlama dilinde bilgisayar programları yazılmış ve uygulama olarak; H_2^+ , H_2 , HeH^+ , LiH , Li_2 , HF , F_2 , H_2O ve CH_4 moleküllerin ilgili özellikleri hesaplanarak literatürde varolan değerlerle karşılaştırılmıştır.

H_2^+ molekülünün momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar Tablo 3.5'te literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.5'ten görüldüğü gibi; elde edilen sonuçlar, Coulson'un (Coulson, 1941) çalışmalarındaki değerlerle karşılaştırıldığında yaklaşık % 1-2 civarında hata gözlenmiştir.

H_2 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar Tablo 3.9'da literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.9'dan görüldüğü gibi; elde edilen sonuçlar, Wang ve Smith (Wang ve Smith, 1994), Benesch (Benesch, 1976), Smith (Smith vd., 1977) ve Barlas'ın çalışmalarındaki (Barlas vd., 1978) sonuçlarla yaklaşık % 3-10 civarında hata ile uyum sağlamaktadır.

HeH^+ molekülünün momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar Tablo 3.13'te literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.13'ten görüldüğü gibi; elde edilen sonuçlar, Fischer'in çalışmasındaki (Fischer vd., 1993) sonuçlarla kısmen karşılaştırılmış ve yaklaşık % 5.39 hata ile uyum sağlandığı görülmüştür.

LiH molekülünün momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar Tablo 3.17’de literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.17’den görüldüğü gibi; elde edilen sonuçlar, Roy ve Thakkar’ın çalışmasındaki (Roy ve Thakkar, 2002) sonuçlarla kısmen karşılaştırılmış ve yaklaşık % 0.83 hata ile uyum sağlandığı görülmüştür.

Li_2 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar Tablo 3.21’de literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.21’den görüldüğü gibi; elde edilen sonuçlar, Roy ve Thakkar’ın çalışmasındaki (Roy ve Thakkar, 2002) sonuçlarla kısmen karşılaştırılmış ve yaklaşık % 1.95 hata ile uyum sağlandığı görülmüştür.

HF molekülünün momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar Tablo 3.25’te literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.25’ten görüldüğü gibi; elde edilen sonuçlar, Wang ve Smith (Wang ve Smith, 1994) ve Moccia’nın çalışmalarındaki (Moccia, 1964) sonuçlarla kısmen karşılaştırılmış ve yaklaşık % 1.5-3 hata ile uyum sağlandığı görülmüştür.

F_2 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar Tablo 3.29’da literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.29’dan görüldüğü gibi; elde edilen sonuçlar, Wang ve Smith’in (Wang ve Smith, 1994) çalışmasındaki sonuçlarla kısmen karşılaştırılmış ve yaklaşık % 4.21 hata ile uyum sağlandığı görülmüştür.

H_2O molekülünün momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar Tablo 3.33’te literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.33’ten görüldüğü gibi; elde edilen sonuçlar, Wang ve Smith (Wang ve Smith, 1994) ve Moccia’nın çalışmalarındaki (Moccia, 1964) sonuçlarla kısmen karşılaştırılmış ve yaklaşık % 2-3 hata ile uyum sağlandığı görülmüştür.

CH_4 molekülünün momentumlarının beklenen değerleri için elde edilen sonuçlar Tablo 3.37’de literatürle karşılaştırmalı bir şekilde verilmiştir. Tablo 3.37’den görüldüğü gibi; elde edilen sonuçlar, Wang ve Smith (Wang ve Smith, 1994) ve Allavena’nın çalışmalarındaki (Allavena, 1965) sonuçlarla kısmen karşılaştırılmış ve yaklaşık % 2-5 hata ile uyum sağlandığı görülmüştür.

Sonuç olarak; atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri için sunulan HFR teorilerinden yararlanılarak yazılan bilgisayar programları kullanılarak H_2^+ , H_2 , HeH^+ , LiH , Li_2 , HF , F_2 , H_2O ve CH_4 moleküllerinin hesaplanan ilgili moleküler özelliklerinin literatür sonuçları ile uyumu kimyasal hassaslık sınırları içerisinde ve bu yüzden sunulan teoriler, HFR dalga fonksiyonu bilinen bütün atom ve moleküllere uygulanabilir.

5. ÖNERİLER

Bu çalışmada; atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri için sunulan algoritma kullanılarak, yapılabilecek çalışmalar aşağıda maddeler halinde verilmiştir:

1. Atom ve moleküllerin Compton profilleri konum uzayı dalga fonksiyonu kullanılarak hesaplanabilir.
2. Atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri için relativistik HFR teorisi kullanılarak hesaplamalar yapılabilir.
3. Atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri için korelasyon etkisi hesaplanabilir.
4. Kohn-Sham potansiyeli kullanılarak elde edilecek elektronik dalga fonksiyonu ile atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri hesaplanabilir.
5. Atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri Density Functional Theory (DFT) ile hesaplanarak, momentuma bağlı özelliklerin hesaplanmasında HFR teorisi ile DFT'nin başarıları karşılaştırılabilir.
6. Compton diferansiyel tesir kesiti Compton profiline $\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = X(\omega, \omega_0, \Delta k)J(q)$ bağlı bir nicelik olduğu için (Eisenberger, 1970), Compton diferansiyel tesir kesiti bu çalışmadaki ifadelerden ve programlardan faydalanılarak hesaplanabilir.
7. Bu çalışmada elde edilen sonuçlar kullanılarak kristallerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri hesaplanabilir.
8. Atom ve moleküllerin elektron momentum dağılımları, Compton profilleri ve momentumların beklenen değerleri için bu çalışmada elde edilen ifadeler genel ve analitik ifadeler olup elektronik dalga fonksiyonu bilinen bütün atom ve moleküllere uygulanarak ilgili özellikleri hesaplanabilir.

6. KAYNAKLAR

- Ahlenius, T. and Lindner, P., 1975.** Compton profiles and momentum expectation values for the H_2O , NH_3 and CH_4 molecules. *Chem. Phys. Lett.*, 34, 123-127.
- Aikala, O., 1979.** Theoretical Compton profiles of LiF crystal. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 12, L581-L585.
- Aikala, O., Jokela, V. and Mansikka, K., 1973.** Calculation of the Compton profiles for ionic crystals. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 6, 1116-1124.
- Alexandropoulos, N.G. and Theodoridou, I., 1988.** X-Ray inelastic scattering spectroscopy and its applications in solid state physics. *X-Ray Spectroscopy in Atomic and Solid State Physics*, 187, 279-299.
- Allavena, M. 1965.** *Cahiers Phys.*, 19, 401.
- Arfken, G. and Weber, H., 2001.** *Mathematical Methods for Physicists (Fifth Ed.)*. USA: Academic Press.
- Barkla, C.G., 1903.** Secondary radiation from gases subject to X-rays. *Phil. Magazine Ser. 6*, 5, 685-698.
- Barlas, A.D., Rueckner, W.H. and Wellenstein, H.F., 1978.** A critical evaluation of high energy electron impact spectroscopy to measure Compton profiles. *J. Phys. B: Atom Mol. Phys.*, 11, 3381-3400.
- Benesch, R., 1976.** Momentum distributions and Compton profiles from two-electron atomic wavefunctions containing exponential correlation terms. *J. Phys. B: Atom Mol. Phys.*, 9, 2587-2594.
- Benesh, R. and Smith, V.H., 1973.** Density matrix methods in X-ray scattering and momentum space calculations. W. Price, S. Chissick, and T. Ravensdale - in *Wave Mechanics-the First Fifty Years* (s. 357-377). Butterworths, London.
- Benesh, R. and Smith, V.H., 1972.** Radial Momentum Distributions $I_0(p)$ and Compton profiles $J(q)$. The 1S Be Atom Ground State. *Phys. Rev. A*, 5, 114-125.
- Biggs, F., Mendelsohn, L. and Mann, J., 1975.** Hartree-Fock Compton profiles for the elements. *Atom. Data Nucl. Data Tables*, 16, 201-309.

- Boys, S.F., 1950.** Electronic Wavefunctions. I. A general method of calculation for stationary states of any molecular system. *Proc. Roy. Soc. (London) A*, 200, 542-554.
- Brown, R.E. and Smith, V.H., 1972.** Discrepancy between Theory and Experiment for the Compton Profile of Molecular Hydrogen. *Phys. Rev.*, A5, 140-143.
- Bushuev, V. and Kuz'min, R., 1977.** Inelastic scattering of *X*-ray and synchrotron radiation in crystals, coherent effects in inelastic scattering. *Sov. Phys. USP.*, 20, 406-431.
- Cade, P.E. and Huo, W.M., 1967.** Electronic structure of diatomic molecules. VI. A. Hartree-Fock wavefunctions and energy quantities for the ground states of the first row hydrides, AH. *J. Chem. Phys.*, 47, 614-639.
- Clementi, E., 1962.** SCF-MO wave functions for the hydrogen fluoride molecule. *J. Chem. Phys.*, 36, 33-44.
- Clementi, E. and Raimondi, D.L., 1963.** Atomic screening constants from SCF functions. *J. Chem. Phys.*, 38, 2686-2689.
- Compton, A.H., 1923.** A quantum theory of the scattering of *X*-rays by light elements. *Phys. Rev.*, 21, 483-502.
- Cooper, M.J., 1985.** Compton scattering and elektron momentum determinations. *Rep. Prog. Phys.*, 48, 415-481.
- Cooper, M.J., Leake, J.A. and Weiss, R.J., 1965.** The Compton profile of lithium. *Phil. Mag.*, 12, 797-800.
- Cooper, M.J., Mijnaerends, P.E., Shiotani, N., Sakai, N., and Bansil, A., 2004.** *X-Ray Compton Scattering*. Oxford University Press, New York.
- Coppens, P., 1997.** *X-ray Charge Densities and Chemical Bonding*. New York: Oxford Univ. Press.
- Coulson, C., 1941.** Momentum Distribution in Molecular Systems. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 37, 55-66.
- Debye, P., 1923.** Zerstreun von Röntgenstrahlen und Quantentheorie. *Phys. Zeit.*, 24, 161-166.

- Delavega, J.M.G. and Miguel, B., 1993.** Orbital and Total Atomic Momentum Expectation Values with Roothaan-Hartree-Fock Wave Functions. *Atom. Data Nucl. Data Tables*, 54, 1-51.
- Delavega, J.M.G. and Miguel, B., 1994.** Roothaan-Hartree-Fock Momentum Expectation Values for Heavy Elements ($Z=55-92$). *Atom. Data Nucl. Data Tables*, 58, 307-315.
- Delavega, J.M.G. and Miguel, B., 1995.** Roothaan-Hartree-Fock-Slater Momentum Expectation Values for U-Lr Atoms. *Atom. Data Nucl. Data Tables*, 60, 321-330.
- DuMond, J.W., 1929.** Compton modified line structure and its relations to the electron theory of solid bodies. *Phys.Rev.*, 33, 643-658.
- DuMond, J.W., 1933.** The linear momenta of electrons in atoms and it solid bodies as revealed by X-ray scattering. *Rev. Mod. Phys.*, 5, 1-33.
- DuMond, J.W. and Kilpatrick, H.A., 1931.** Experimental Evidence for electron velocities as the cause of Compton line breadth with the multicrystal spectrograph. *Phys. Rev.*, 37, 136-159.
- DuMond, J.W. and Kilpatrick, H.A., 1931.** Depedence of Compton line breadth on primary wave-length with the multi-crystal spectrograph. *Phys. Rev.*, 38, 1094-1108.
- DuMond, J.W., Kilpatrick, H.A. and Alden, L., 1932.** A search for preferentially directed electron velocities in crystalline graphite with the multicrystal spectrograph. *Phys. Rev.*, 40, 165-177.
- Duncanson, W.E., 1943.** Momentum distribution in molecular systems Part VII. Momentum distribution and shape of the Compton line for Li_2 and N_2 . *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 39, 180-188.
- Duncanson, W.E. and Coulson, C., 1948.** Electron Momenta in Atoms. *Proc. Phys. Soc.*, 60, 175-183.
- Duncanson, W.E. and Coulson, C., 1945.** Theoretical shape of the Compton profile for atoms from H to Ne . *Proc. Phys. Soc.*, 57, 190-198.
- Eisenberger, P., 1970.** Electron Momentum Density of He and H_2 ; Compton X-Ray Scattering. *Phys. Rev. A*, 2, 1678-1686.

- Eisenberger, P. and Marra, W.C., 1971.** Identification of Localized Bonds in the Hydrocarbons. *Phys. Rev. Lett.*, 27, 1413–1416.
- Epstein, I.R., 1973.** Compton scattering and the Chemistry of momentum space. *Acc. Chem. Res.*, 6, 145-152.
- Epstein, I.R., 1970.** Electronic Momentum Distributions and Compton Profiles of Polyatomic Molecules. *J. Chem. Phys.*, 52, 3838-3841.
- Epstein, I.R. and Lipscomb, W.N., 1970.** Molecular Momentum Distributions and Compton Profiles. I. General Theory and Boron hydrides. *J. Chem. Phys.*, 53, 4418-4437.
- Fischer, P., Windt, L.D. and Defranceschi, M. 1993.** Electronic structure of H_2 and HeH^+ computed directly in momentum space. *J. Chem. Phys.*, 99, 7788-7889.
- Gaunt, J., 1929.** The Triplets of Helium. *Phil. Trans. Roy. Soc. (London) A*, 228, 151-196.
- Geller, M., 1963.** Two center integrals over solid spherical harmonics. *J. Chem. Phys.*, 39, 84-89.
- Helgaker, T., Jorgensen, P. and Olsen, J., 2000.** *Molecular Electronic Structure Theory*. New York: John Wiley and Sons Ltd.
- Hirst, D. and Liebmann, S., 1975.** Molecular Compton profiles from SCF-MO wavefunctions II. Comparison of the three membered ring systems C_3H_6 , C_2H_5N , C_2H_4O with acyclic isomers. *Mol. Phys.*, 30, 1693-1699.
- Hirst, D. and Liebmann, S., 1975.** Molecular Compton profiles from SCF-MO wavefunctions. I. CH_3F , CH_3NH_2 and C_2H_6 . *Mol. Phys.*, 30, 597-607.
- Hoyt, A. and DuMond, J.W., 1931.** Breadth of the Compton Modified Line With the Double Crystal Spectrometer. *Phys. Rev.*, 37, 1443-1451.
- Jeffrey, A. and Dai, H.H., 1995.** *Handbook of Mathematical Formulas and Integrals*. San Diego: Academic Press.
- Jorgensen, P. and Simons, J., 1981.** *Second quantization-based methods in quantum chemistry*. London: Academic Press.

- Kaijser, P. and Smith, V.H., 1977.** Evaluation of Momentum Distributions and Compton Profiles for Atomic and Molecular Systems. *Adv. Quantum Chem.*, 10, 37-76.
- Kappeler, H., 1936.** Messung der Form und Breite der Comptonlinie für die Gase Ne, O₂, N₂ und für die festen Stoffe Li, C und NaF. *Ann der Physik*, 27, 129-168.
- Klein, O. and Nishina, Y., 1929.** Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen relativistischen Quantendynamik von Dirac. *Z. Phys.*, 52, 853-869.
- Liu, J. and Smith, V.H., 1978.** Theoretical Compton profiles and momentum distributions for H_2^+ and H_2 . *Mol. Phys.*, 35, 145-154.
- Mahapatra, D.P., 1986.** Compton profile of *LiH*: A calculation based on the renormalised free-atom model. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 19, 2129-2136.
- Mendelsohn, L. and Smith, V.H., 1977.** Atoms, in *Compton Scattering: The Investigation of Electron Momentum Distributions*. B. Williams. New York: McGraw-Hill.
- Moccia, R., 1964.** One-Center Basis Set SCF MO's. I. *HF*, *CH₄*, and *SiH₄*. *J. Chem. Phys.*, 40, 2164-2176.
- Orbay, M. ve Özdoğan, T., 2001.** Electric multipole moments for some first-row diatomic hydride molecules. *Commun. Theor. Phys.*, 35, 585-588.
- Özdoğan, T., 2000.** Elektrik multipol moment tensörlerinin birleşik teorisi ve çok atomlu moleküllere uygulanması. Samsun, Türkiye: Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, Türkiye, 101 sayfa.
- Özdoğan, T., 2004.** Evaluation of two center overlap integrals using Fourier transform. *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 69, 279-291.
- Özdoğan, T. ve Eraslan, M., 2014.** Hazırlanıyor.
- Özdoğan, T. and Ruiz, M.B., 2008.** *Recent Advances in Computational Chemistry. Molecular Integrals Over Slater Orbitals*. Kerela: Trasworld Research.
- Paakari, T. and Merisalo, M., 1978.** Compton profile of *CH₄* gas. *Chem. Phys. Lett.*, 53, 313-316.

- Platzman, P.M. and Tzoar, N., 1965.** X Ray scattering from an electron gas. *Phys. Rev.*, 139, A410-A418.
- Reed, C.E. and Banyard, K.E., 1980.** Momentum distributions for two-electron systems: the Coulomb shift and correlation coefficients for the HeH^+ molecular ion. *J. Phys. B.*, 13, 1519-1530.
- Roy, A.K. and Thakkar, A.J., 2002.** MacLaurin expansions of electron momentum densities for 78 diatomic molecules: a numerical Hartree-Fock study. *Chem. Phys. Lett.*, 362, 428-434.
- Saenz, A., Asthalter, T. and Weyrich, W., 1997.** Methods for the calculation of spherically averaged Compton profiles with GTOs. *Int. J. Quantum Chem.*, 65, 213-223.
- Schneider, B., 1973.** Ph. D. Thesis. University of Ottawa.
- Schülke, W., 2007.** *Electron Dynamics by Inelastic X-Ray Scattering*. USA: Oxford University Press.
- Slater, J.C., 1930.** Atomic Shielding Constants. *Phys. Rev.*, 36, 57-64.
- Smith, V.H., Thakkar, A.J., Henneker, W.H., Liu, J.W., Liu, B. and Brown, R.E., 1977.** Accurate Compton profiles for H_2 and D_2 including the effects of electron correlation and molecular vibration and rotation. *J. Chem. Phys.*, 67, 3676-3682.
- Snyder, L.C. and Weber, T.A., 1978.** Molecular orbital theory of the Compton profile of F_2 . *J. Chem. Phys.*, 68, 2974-2979.
- Snyder, L.C. and Weber, T.A., 1975.** The Compton profile of water: Computed from an SCF-MO wavefunction in a double-zeta Gaussian basis set. *J. Chem. Phys.*, 63, 113-114.
- Tanner, A.C. and Epstein, I.R., 1974.** Compton profile and electron momentum distribution of water. *J. Chem. Phys.*, 61, 4251-4257.
- Thakkar, A.J., Simas, A.M., and Smith V.H., 1980.** Extraction of momentum expectation values from Compton profiles. *Mol. Phys.*, 41, 1153-1162.
- Thomas, M., 1972.** The effect of vibrational motion on wavefunctions in momentum space. *Mol. Phys.*, 23, 571-579.

- Thomson, J.J., 1903.** *Conduction of Electricity through Gases*. Cambridge: Cambridge Univ. Press.
- Thomson, J.J., 1980.** *Modern Phys.*, New York: John Wiley and Sons.
- Thulstrup, P. W., 1976.** The calculation of anisotropic Compton profiles from LCAO-type molecular orbitals. *J. Chem. Phys.*, 65, 3386-3387.
- Tufan, M.Ç., Gümüş, H. ve Kabadayi, Ö., 2007.** Calculation of the electronic stopping cross-sections of compounds for low energy protons by using molecular orbitals. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*, 256, 118-121.
- Villard, P., 1900.** Sur la réflexion et la réfraction des rayons cathodiques et des rayons déviables du radium. *Comptes Rendus*, 130, 1010-1012.
- Wang, J. and Smith, V.H., 1994.** Spherically averaged molecular electron densities and radial moments in position and momentum spaces. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 27, 5159-5173.
- Weinhold, F., 1971.** Dickinson Energy of H_2^+ . *J. Chem. Phys.*, 54, 530-532.
- Werner, H. J., Konwles, P. J., Amos, R. D., Berning, A., Cooper, D. L., Deegan, M. J., Dobbyn, A.J., Eckert, F., Hampel, C., Leininger, T., Lindh, R., Lloyd, A.W., Meyer, W., Mura, M.E., Nickla, A., Palmieri, P., Peterson, K., Pitzer, R., Pulay, P., Rauhut, G., Schfltz, M., Stoll, H., Stone, A.J. and Thoresteinsson, T., 2010.** MOLPRO, *A Package of Ab Initio Programs*.
<http://www.molpro.net>
- Weyrich, W., Pattison, P. and Williams, B.G., 1979.** Fourier analysis of the Compton profile: Atoms and Molecules. *Chem. Phys.*, 41, 271-284.
- Williams, B.G., 1977.** *Compton Scattering The Investigation of Electron Momentum Distributions*. New York: McGraw-Hil.
- URL–1, Wikipedia: The free encyclopedia., 2014,** FL: Wikipedia Foundation, Inc. Retrieved April 13, 2014, from <http://www.wikipedia.org>

7. EKLER

EK A. Slater Tipli Orbitalerin Fourier Dönüşümü

Konum uzayında verilen herhangi bir $f(\vec{r})$ fonksiyonunun momentum uzayındaki karşılığı, yani Fourier dönüşümü $g(\vec{p})$:

$$g(\vec{p}) = (2\pi)^{-(3/2)} \int f(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\vec{r}} d^3r \quad (\text{A.1})$$

ile verilir (Jeffrey ve Dai, 1995). Burada $f(\vec{r})$ için (1.23) denklemi ile verilen Slater tipli orbital tanımı ve $e^{-i\vec{p}\vec{r}}$ düzlem dalgası için

$$e^{\pm i\vec{p}\vec{r}} = 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L (\pm i)^L j_L(pr) S_{LM}(\hat{p}) S_{LM}^*(\hat{r}) \quad (\text{A.2})$$

kullanılırsa (Arfken ve Weber, 2001), Slater tipli orbitalerin Fourier dönüşümü için

$$U_{nlm}(\alpha, \vec{p}) = (-i)^l f_{nl}(\alpha, p) S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (\text{A.3})$$

ifadesi elde edilir (Geller, 1963). Bu denklemde $f_{nl}(\alpha, p)$ Slater tipli orbitalerin Fourier dönüşümünün radyal kısmıdır ve

$$f_{nl}(\alpha, p) = \frac{1}{(p^2 + \alpha^2)^{n+1}} \sum_{s=0}^{E\left(\frac{n-l}{2}\right)} B_{nl}^s(\alpha) p^{l+2s} \quad (\text{A.4})$$

şeklinde tanımlanır. Burada $B_{nl}^s(\alpha)$ açılım katsayısı

$$B_{nl}^s(\alpha) = \frac{(-1)^s}{\sqrt{\pi}} 2^{n+l+1} \alpha^{2n-l-2s+(l/2)} \frac{F_{2l+2s+1}(n+l+1)F_s(l+s)}{\sqrt{F_l(2l)F_{n-l}(2n)F_{n-l}(n+l)}} \quad (\text{A.5})$$

ifadesiyle verilir (Geller, 1963). $F_m(n)$ binom katsayısı ve $E\left(\frac{n}{2}\right)$ sembolü

$$F_m(n) = \frac{n!}{m!(n-m)!} \quad (\text{A.6})$$

$$E\left(\frac{n}{2}\right) = \frac{n}{2} - \frac{1}{4} [1 - (-1)^n] \quad (\text{A.7})$$

şeklinde tanımlanır.

Tablo A.1. Slater tipli orbitallerin Fourier dönüşümünün radyal kısmı

n	l	$f_{nl}(\alpha, p)$
1	0	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{5/2}}{(p^2 + \alpha^2)^2}$
2	0	$-\frac{4\sqrt{6}}{3\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{5/2}(-3\alpha^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^3}$
	1	$\frac{16\sqrt{6}}{3\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{7/2} p}{(p^2 + \alpha^2)^3}$
3	0	$-\frac{32\sqrt{5}}{5\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{9/2}(-\alpha^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^4}$
	1	$-\frac{32\sqrt{5}}{15\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{7/2} p(-5\alpha^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^4}$
	2	$\frac{64\sqrt{5}}{5\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{9/2} p^2}{(p^2 + \alpha^2)^4}$
4	0	$\frac{16\sqrt{70}}{35\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{9/2}(-5\alpha^4 - 10\alpha^2 p^2 + p^4)}{(p^2 + \alpha^2)^5}$
	1	$-\frac{32\sqrt{70}}{35\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{11/2} p(-5\alpha^2 + 3p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^5}$
	2	$-\frac{32\sqrt{70}}{35\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{9/2} p^2(-7\alpha^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^5}$
	3	$\frac{256\sqrt{70}}{35\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{11/2} p^3}{(p^2 + \alpha^2)^5}$
5	0	$\frac{64\sqrt{7}}{21\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{13/2}(3\alpha^4 - 10\alpha^2 p^2 + 3p^4)}{(p^2 + \alpha^2)^6}$
	1	$\frac{64\sqrt{7}}{105\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{11/2} p(35\alpha^4 - 42\alpha^2 p^2 + 3p^4)}{(p^2 + \alpha^2)^6}$
	2	$-\frac{512\sqrt{7}}{105\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{13/2} p^2(-7\alpha^2 + 3p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^6}$
	3	$-\frac{512\sqrt{7}}{105\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{11/2} p^3(-9\alpha^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^6}$
	4	$\frac{1024\sqrt{7}}{21\sqrt{\pi}} \frac{\alpha^{13/2} p^4}{(p^2 + \alpha^2)^6}$

EK B. Elektron Momentum Dağılımı Yardımcı Moleküler İntegralleri

Tablo B.1. Elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralleri -1 ($\alpha = \beta$)

n	l	m	n'	l	m	$I_{nlm,n'l'm}(\alpha, \alpha; p, 0)$
1	0	0	1	0	0	$\frac{32p^2\alpha^5}{\pi(p^2 + \alpha^2)^4}$
			2	0	0	$-\frac{32\sqrt{3}}{3\pi} \frac{p^2\alpha^5(-3\alpha^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^5}$
			3	0	0	$-\frac{128\sqrt{10}}{5\pi} \frac{p^2\alpha^7(-\alpha^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^6}$
2	0	0	2	0	0	$\frac{32}{3\pi} \frac{p^2\alpha^5(-3\alpha^2 + p^2)^2}{(p^2 + \alpha^2)^6}$
			3	0	0	$\frac{128\sqrt{30}}{15\pi} \frac{p^2\alpha^7(-3\alpha^2 + p^2)(-\alpha^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^7}$
2	1	1	2	1	1	$\frac{512}{3\pi} \frac{p^4\alpha^7}{(p^2 + \alpha^2)^6}$
			3	1	1	$-\frac{512\sqrt{30}}{45\pi} \frac{p^4\alpha^7(-5\alpha^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^7}$
3	0	0	3	0	0	$\frac{1024}{5\pi} \frac{p^2\alpha^9(-\alpha^2 + p^2)^2}{(p^2 + \alpha^2)^8}$
3	1	0	3	1	0	$\frac{1024}{45\pi} \frac{p^4\alpha^7(-5\alpha^2 + p^2)^2}{(p^2 + \alpha^2)^8}$
3	2	0	3	2	0	$\frac{4096}{5\pi} \frac{p^6\alpha^9}{(p^2 + \alpha^2)^8}$

Tablo B.2. Elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralleri -2 ($\alpha \neq \beta$)

n	l	m	n'	l	m	$I_{nlm,n'l'm}(\alpha, \beta; p, 0)$
1	0	0	1	0	0	$\frac{32p^2(\alpha\beta)^{5/2}}{\pi(p^2 + \alpha^2)^2(p^2 + \beta^2)^2}$
			2	0	0	$-\frac{32\sqrt{3}}{3\pi} \frac{p^2(\alpha\beta)^{5/2}(-3\beta^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^2(p^2 + \beta^2)^3}$
			3	0	0	$-\frac{128\sqrt{10}}{5\pi} \frac{p^2\alpha^{5/2}\beta^{9/2}(-\beta^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^2(p^2 + \beta^2)^4}$
2	0	0	2	0	0	$\frac{32}{3\pi} \frac{p^2(\alpha\beta)^{5/2}(-3\alpha^2 + p^2)(-3\beta^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^3}$
			3	0	0	$\frac{128\sqrt{30}}{15\pi} \frac{p^2\alpha^{5/2}\beta^{9/2}(-3\alpha^2 + p^2)(-3\beta^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^4}$
2	1	1	2	1	1	$\frac{512}{3\pi} \frac{p^4(\alpha\beta)^{7/2}}{(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^3}$
			3	1	1	$-\frac{512\sqrt{30}}{45\pi} \frac{p^4(\alpha\beta)^{7/2}(-5\beta^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^4}$
3	0	0	3	0	0	$\frac{1024}{5\pi} \frac{p^2(\alpha\beta)^{9/2}(-\alpha^2 + p^2)(\beta^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^4(p^2 + \beta^2)^4}$
3	1	0	3	1	0	$\frac{1024}{45\pi} \frac{p^4(\alpha\beta)^{7/2}(-5\alpha^2 + p^2)(-5\beta^2 + p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^4(p^2 + \beta^2)^4}$
3	2	0	3	2	0	$\frac{4096}{5\pi} \frac{p^6(\alpha\beta)^{9/2}}{(p^2 + \alpha^2)^4(p^2 + \beta^2)^4}$

Tablo B.3. Elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralleri -3
 $(\alpha = \beta, R \neq 0, X = pR)$

n	l	m	n'	l'	m	$I_{nlm,n'l'm}(\alpha, \alpha; p, R)$
1	0	0	1	0	0	$\frac{32\alpha^5 p^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^4} j_0(X)$
			2	0	0	$\frac{32}{\sqrt{3}} \frac{\alpha^5 p^2 (3\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^5} j_0(X)$
			2	1	0	$-\frac{32\alpha^5 p^2 (3\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^5} j_1(X)$
			3	0	0	$\frac{128\sqrt{10}}{5} \frac{\alpha^7 p^2 (\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^6} j_0(X)$
			3	1	0	$-\frac{128\sqrt{30}}{5} \frac{\alpha^7 p^2 (\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^6} j_1(X)$
2	0	0	1	0	0	$\frac{32}{\sqrt{3}} \frac{\alpha^5 p^2 (3\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^5} j_0(X)$
			2	0	0	$\frac{32}{3} \frac{\alpha^5 p^2 (3\alpha^2 - p^2)^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^6} j_0(X)$
			2	1	0	$-\frac{32}{\sqrt{3}} \frac{\alpha^5 p^2 (3\alpha^2 - p^2)^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^6} j_1(X)$
			3	0	0	$\frac{128\sqrt{30}}{15} \frac{\alpha^7 p^2 (3\alpha^2 - p^2)(\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^7} j_0(X)$
			3	1	0	$-\frac{128\sqrt{10}}{5} \frac{\alpha^7 p^2 (3\alpha^2 - p^2)(\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^7} j_1(X)$
3	2	0	$\frac{128\sqrt{6}}{3} \frac{\alpha^7 p^2 (3\alpha^2 - p^2)(\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^7} j_2(X)$			
2	1	0	1	0	0	$\frac{128\alpha^5 p^4}{\pi(p^2 + \alpha^2)^5} j_1(X)$
			2	0	0	$\frac{512}{\sqrt{3}} \frac{\alpha^7 p^4}{\pi(p^2 + \alpha^2)^6} j_1(X)$
			2	1	0	$\frac{512}{3} \frac{\alpha^7 p^4}{\pi(p^2 + \alpha^2)^6} [j_0(X) - 2j_2(X)]$
			3	0	0	$\frac{512\sqrt{10}}{15} \frac{\alpha^7 p^4 (5\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^7} j_1(X)$
2	1	0	3	1	0	$\frac{512\sqrt{30}}{45} \frac{\alpha^7 p^4 (5\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^7} [j_0(X) - 2j_2(X)]$
			3	2	0	$-\frac{512\sqrt{2}}{15} \frac{\alpha^7 p^4 (5\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^7} [2j_1(X) - 3j_3(X)]$

n	l	m	n'	l'	m	$I_{nlm,n'l'm}(\alpha, \alpha; p, R)$
2	1	1	2	1	1	$\frac{512}{3} \frac{\alpha^7 p^4}{\pi(p^2 + \alpha^2)^6} [j_0(X) + j_2(X)]$
			3	1	1	$\frac{512\sqrt{30}}{45} \frac{\alpha^7 p^4 (5\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^7} [j_0(X) + j_2(X)]$
			3	2	1	$-\frac{512\sqrt{6}}{15} \frac{\alpha^7 p^4 (5\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^7} [j_1(X) + j_3(X)]$
3	0	0	3	0	0	$\frac{1024}{5} \frac{\alpha^9 p^2 (\alpha^2 - p^2)^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^8} j_0(X)$
			3	1	0	$-\frac{1024\sqrt{3}}{5} \frac{\alpha^9 p^2 (\alpha^2 - p^2)^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^8} j_1(X)$
			3	2	0	$\frac{1024}{\sqrt{5}} \frac{\alpha^9 (\alpha^2 - p^2)^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^8} j_2(X)$
3	1	0	3	1	0	$\frac{1024}{45} \frac{\alpha^7 p^4 (5\alpha^2 - p^2)^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^8} [j_0(X) - 2j_2(X)]$
			3	2	0	$-\frac{1024\sqrt{15}}{225} \frac{\alpha^7 p^4 (5\alpha^2 - p^2)^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^8} [2j_1(X) - 3j_3(X)]$
3	1	1	3	1	1	$\frac{1024}{45} \frac{\alpha^7 p^4 (5\alpha^2 - p^2)^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^8} [j_0(X) + j_2(X)]$

Tablo B.4. Elektron momentum dağılımı yardımcı moleküler integralleri -4
 $(\alpha \neq \beta, R \neq 0, X = pR)$

n	l	m	n'	l'	m	$I_{nlm,n'l'm}(\alpha, \beta; p, R)$
1	0	0	1	0	0	$\frac{32(\alpha\beta)^{5/2} p^2}{\pi(p^2 + \alpha^2)^2(p^2 + \beta^2)^2} j_0(X)$
			2	0	0	$\frac{32}{\sqrt{3}} \frac{(\alpha\beta)^{5/2} p^2(3\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^2(p^2 + \beta^2)^3} j_0(X)$
			2	1	0	$-\frac{32}{\pi} \frac{(\alpha\beta)^{5/2} p^2(3\beta^2 - p^2)}{(p^2 + \alpha^2)^2(p^2 + \beta^2)^3} j_1(X)$
			3	0	0	$\frac{128\sqrt{10}}{5} \frac{\alpha^{5/2} \beta^{9/2} p^2(\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^2(p^2 + \beta^2)^4} j_0(X)$
			3	1	0	$-\frac{128\sqrt{30}}{5} \frac{\alpha^{5/2} \beta^{9/2} p^2(\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^2(p^2 + \beta^2)^4} j_1(X)$
2	0	0	1	0	0	$\frac{32}{\sqrt{3}} \frac{(\alpha\beta)^{5/2} p^2(3\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^2} j_0(X)$
			2	0	0	$\frac{32}{3} \frac{(\alpha\beta)^{5/2} p^2(3\alpha^2 - p^2)(3\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^3} j_0(X)$
			2	1	0	$\frac{32}{\sqrt{3}} \frac{\alpha^{5/2} \beta^{5/2} p^2(3\alpha^2 - p^2)(3\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^3} j_1(X)$
			3	0	0	$\frac{128\sqrt{30}}{15} \frac{\alpha^{5/2} \beta^{9/2} p^2(3\alpha^2 - p^2)(\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^4} j_0(X)$
			3	1	0	$-\frac{128\sqrt{10}}{5} \frac{\alpha^{5/2} \beta^{9/2} p^2(3\alpha^2 - p^2)(\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^4} j_1(X)$
3	2	0	$\frac{128\sqrt{6}}{3} \frac{\alpha^{5/2} \beta^{9/2} p^2(3\alpha^2 - p^2)(\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^4} j_2(X)$			
2	1	0	1	0	0	$\frac{128\alpha^{7/2} \beta^{3/2} p^4}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^2} j_1(X)$
			2	0	0	$\frac{512}{\sqrt{3}} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4(3\alpha^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^3} j_1(X)$
			2	1	0	$\frac{512}{3} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^3} [j_0(X) - 2j_2(X)]$
			3	0	0	$\frac{512\sqrt{10}}{15} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4(5\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^4} j_1(X)$
2	1	0	3	1	0	$\frac{512\sqrt{30}}{45} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4(5\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^4} [j_0(X) - 2j_2(X)]$
			3	2	0	$-\frac{512\sqrt{2}}{15} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4(5\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3(p^2 + \beta^2)^4} [2j_1(X) - 3j_3(X)]$

n	l	m	n'	l'	m	$I_{nlm,n'l'm}(\alpha, \beta; p, R)$
2	1	1	2	1	1	$\frac{512}{3} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3 (p^2 + \beta^2)^3} [j_0(X) + j_2(X)]$
			3	1	1	$\frac{512\sqrt{30}}{45} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4 (5\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3 (p^2 + \beta^2)^4} [j_0(X) + j_2(X)]$
			3	2	1	$-\frac{512\sqrt{6}}{15} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4 (5\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^3 (p^2 + \beta^2)^4} [j_1(X) + j_3(X)]$
3	0	0	3	0	0	$\frac{1024}{5} \frac{(\alpha\beta)^{9/2} p^2 (\alpha^2 - p^2)(\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^4 (p^2 + \beta^2)^4} j_0(X)$
			3	1	0	$\frac{1024\sqrt{3}}{5} \frac{(\alpha\beta)^{9/2} p^2 (\alpha^2 - p^2)(\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^4 (p^2 + \beta^2)^4} j_1(X)$
			3	2	0	$\frac{1024}{\sqrt{5}} \frac{(\alpha\beta)^{9/2} p^2 (\alpha^2 - p^2)(\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^4 (p^2 + \beta^2)^4} j_2(X)$
3	1	0	3	1	0	$\frac{1024}{45} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4 (5\alpha^2 - p^2)(5\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^4 (p^2 + \beta^2)^4} [j_0(X) - 2j_2(X)]$
			3	2	0	$-\frac{1024\sqrt{15}}{225} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4 (5\alpha^2 - p^2)(5\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^4 (p^2 + \beta^2)^4} [2j_1(X) - 3j_3(X)]$
3	1	1	3	1	1	$\frac{1024}{45} \frac{(\alpha\beta)^{7/2} p^4 (5\alpha^2 - p^2)(5\beta^2 - p^2)}{\pi(p^2 + \alpha^2)^4 (p^2 + \beta^2)^4} [j_0(X) + j_2(X)]$

EK C. $K_{lm,l'm'}(p, R)$ Kırınım Çarpanı ve $C^L(lm, l'm')$ Gaunt Katsayıları

Tablo C.1. $K_{lm,l'm'}(p, R)$ kırınım çarpanının bazı sembolik değerleri ($X = pR$)

l	m	l'	m'	$K_{lm,l'm'}(p, R)$
0	0	0	0	$j_0(X)$
		1	0	$-\sqrt{3}j_1(X)$
		2	0	$\sqrt{5}j_2(X)$
		3	0	$-\sqrt{7}j_3(X)$
1	0	1	0	$j_0(X) - 2j_2(X)$
		2	0	$\frac{\sqrt{15}}{5}[-2j_1(X) + 3j_3(X)]$
		3	0	$\frac{\sqrt{21}}{7}[3j_2(X) - 4j_4(X)]$
	1	1	1	$j_0(X) + j_2(X)$
		2	1	$-\frac{3\sqrt{5}}{5}[j_1(X) + j_3(X)]$
		3	1	$\frac{3\sqrt{14}}{7}[j_2(X) + j_4(X)]$
2	0	2	0	$\frac{1}{7}[7j_0(X) - 10j_2(X) + 18j_4(X)]$
		3	0	$\sqrt{35}\left[\frac{-9}{35}j_1(X) + \frac{4}{15}j_3(X) - \frac{10}{21}j_5(X)\right]$
	1	2	1	$\frac{1}{7}[7j_0(X) - 5j_2(X) - 12j_4(X)]$
		3	1	$\sqrt{70}\left[\frac{-6}{35}j_1(X) + \frac{1}{15}j_3(X) + \frac{5}{21}j_5(X)\right]$
	2	2	2	$\frac{1}{7}[7j_0(X) + 10j_2(X) + 3j_4(X)]$
		3	2	$\frac{\sqrt{7}}{21}[-9j_1(X) - 14j_3(X) - 5j_5(X)]$
3	0	3	0	$\frac{1}{33}[33j_0(X) - 44j_2(X) + 54j_4(X) - 100j_6(X)]$

Tablo C.2. $C^L(lm, l'm')$ Gaunt katsayılarının bazı sembolik değerleri

l	m	l'	m'	L							
				0	1	2	3	4	5		
0	0	0	0	1	0	0	0	0	0		
		1	± 1	0	$\sqrt{1/3}$	0	0	0	0		
			0	0	$\sqrt{1/3}$	0	0	0	0		
		2	± 2	0	0	$\sqrt{1/5}$	0	0	0		
			± 1	0	0	$\sqrt{1/5}$	0	0	0		
			0	0	0	$\sqrt{1/5}$	0	0	0		
		3	± 3	0	0	0	$\sqrt{1/7}$	0	0		
			± 2	0	0	0	$\sqrt{1/7}$	0	0		
			± 1	0	0	0	$\sqrt{1/7}$	0	0		
			0	0	0	0	$\sqrt{1/7}$	0	0		
		1	± 1	1	± 1	1	0	$-\sqrt{1/25}$	0	0	0
					∓ 1	0	0	$\sqrt{6/25}$	0	0	0
0	0				0	$\sqrt{3/25}$	0	0	0		
2	± 2			0	$\sqrt{6/15}$	0	$-\sqrt{3/245}$	0	0		
	∓ 2			0	0	0	$\sqrt{45/245}$	0	0		
	± 1			0	$\sqrt{3/15}$	0	$-\sqrt{9/245}$	0	0		
	∓ 1			0	0	0	$\sqrt{30/245}$	0	0		
	0			0	$-\sqrt{1/15}$	0	$\sqrt{18/245}$	0	0		
3	± 3			0	0	$\sqrt{45/175}$	0	$-\sqrt{1/189}$	0		
	∓ 3			0	0	0	0	$\sqrt{28/189}$	0		
	± 2			0	0	$\sqrt{30/175}$	0	$-\sqrt{3/189}$	0		
	∓ 2			0	0	0	0	$\sqrt{21/189}$	0		
	± 1			0	0	$\sqrt{18/175}$	0	$-\sqrt{6/189}$	0		
	∓ 1			0	0	$-\sqrt{3/175}$	0	$\sqrt{15/189}$	0		
	0			0	0	$-\sqrt{9/175}$	0	$\sqrt{10/189}$	0		
0	0			1	0	1	0	$\sqrt{4/25}$	0	0	
				2	± 2	0	0	0	$\sqrt{15/245}$	0	0
					± 1	0	$\sqrt{3/15}$	0	$-\sqrt{24/245}$	0	0
		0	0		$\sqrt{4/15}$	0	$\sqrt{27/245}$	0	0		
		3	± 3	0	0	0	0	$\sqrt{7/189}$	0		
			± 2	0	0	$\sqrt{15/175}$	0	$\sqrt{12/189}$	0		
			± 1	0	0	$\sqrt{2/175}$	0	$\sqrt{15/189}$	0		
			0	0	0	$\sqrt{27/175}$	0	$\sqrt{16/189}$	0		
		2	± 2	± 2	0	0	$-\sqrt{4/49}$	0	$\sqrt{1/441}$	0	
∓ 2	0			0	0	0	$\sqrt{70/441}$	0			
± 1	0			0	$\sqrt{6/49}$	0	$-\sqrt{5/441}$	0			

l	m	l'	m'	L						
				0	1	2	3	4	5	
2	± 2	2	∓ 1	0	0	0	0	$\sqrt{35/441}$	0	
			0	0	0	$-\sqrt{4/49}$	0	$\sqrt{15/441}$	0	
	3	± 3	0	$\sqrt{15/35}$	0	$-\sqrt{10/315}$	0	$\sqrt{10/15246}$		
			∓ 3	0	0	0	0	$\sqrt{2100/15246}$		
			± 2	0	$\sqrt{5/35}$	0	$-\sqrt{20/315}$	0	$\sqrt{50/15246}$	
			∓ 2	0	0	0	0	$\sqrt{1260/15246}$		
			± 1	0	$-\sqrt{1/35}$	0	$\sqrt{24/315}$	0	$-\sqrt{150/15246}$	
			∓ 1	0	0	0	0	$\sqrt{700/15246}$		
			0	0	0	0	$-\sqrt{20/315}$	0	$\sqrt{350/15246}$	
	± 1	2	± 2	0	0	$\sqrt{6/49}$	0	$\sqrt{5/441}$	0	
			∓ 2	0	0	0	0	$\sqrt{35/441}$	0	
			± 1	0	0	$\sqrt{1/49}$	0	$-\sqrt{16/441}$	0	
			∓ 1	0	0	$\sqrt{6/49}$	0	$\sqrt{40/441}$	0	
			0	0	0	$\sqrt{1/49}$	0	$\sqrt{30/441}$	0	
		3	± 3	0	0	0	$\sqrt{25/315}$	0	$-\sqrt{70/15246}$	
∓ 3			0	0	0	0	0	$\sqrt{840/15246}$		
± 2			0	$\sqrt{10/35}$	0	$\sqrt{15/315}$	0	$-\sqrt{240/15246}$		
∓ 2			0	0	0	$\sqrt{25/315}$	0	$\sqrt{1120/15246}$		
± 1			0	$\sqrt{8/35}$	0	$\sqrt{2/315}$	0	$-\sqrt{500/15246}$		
0	2	0	1	0	$\sqrt{4/49}$	0	$\sqrt{36/441}$	0		
			3	± 3	0	0	0	$-\sqrt{25/315}$	0	$\sqrt{280/15246}$
				± 2	0	0	0	0	0	$\sqrt{630/15246}$
				± 1	0	$\sqrt{6/35}$	0	$\sqrt{9/315}$	0	$\sqrt{900/15246}$
				0	0	$\sqrt{9/35}$	0	$\sqrt{16/315}$	0	$\sqrt{1000/15246}$
	3	± 3	± 3	1	0	$-\sqrt{25/225}$	0	$\sqrt{9/1089}$	0	
			± 2	0	0	$\sqrt{25/225}$	0	$-\sqrt{30/1089}$	0	
			± 1	0	0	$-\sqrt{10/225}$	0	$\sqrt{54/1089}$	0	
			0	0	0	0	0	$-\sqrt{63/1089}$	0	
	3	± 2	± 2	1	0	0	0	$-\sqrt{49/1089}$	0	
			± 1	0	0	$-\sqrt{15/225}$	0	$\sqrt{32/1089}$	0	
			0	0	0	$-\sqrt{20/225}$	0	$-\sqrt{3/1089}$	0	
		± 1	± 1	1	0	$\sqrt{9/225}$	0	$\sqrt{1/1089}$	0	
			∓ 1	0	0	$\sqrt{24/225}$	0	0	0	
			0	0	0	$\sqrt{2/225}$	0	$\sqrt{15/1089}$	0	
0		3	0	1	0	$\sqrt{16/225}$	0	0		

EK D. Compton Profili Yardımcı Moleküler İntegralleri

Tablo D.1. Compton profili yardımcı moleküler integralleri -1 ($R = 0$)

n	l	m	n'	l'	m'	$J_{nlm,n'l'm'}(\alpha, \alpha; q, 0)$
1	0	0	1	0	0	$\frac{8}{3\pi} \frac{\alpha^5}{(q^2 + \alpha^2)^3}$
			2	0	0	$-\frac{8\sqrt{3}}{9\pi} \frac{(-2\alpha^2 + q^2)\alpha^5}{(q^2 + \alpha^2)^4}$
			3	0	0	$-\frac{8\sqrt{10}}{25\pi} \frac{(-3\alpha^2 + 5q^2)\alpha^7}{(q^2 + \alpha^2)^5}$
2	0	0	2	0	0	$\frac{8}{45\pi} \frac{(23\alpha^4 - 20\alpha^2 q^2 + 5q^4)\alpha^5}{(q^2 + \alpha^2)^5}$
			3	0	0	$\frac{8\sqrt{30}}{225\pi} \frac{(23\alpha^4 - 42\alpha^2 q^2 + 15q^4)\alpha^7}{(q^2 + \alpha^2)^6}$
2	1	1	2	1	1	$\frac{32}{15\pi} \frac{(\alpha^2 + 5q^2)\alpha^7}{(q^2 + \alpha^2)^5}$
			3	1	1	$-\frac{32\sqrt{30}}{225\pi} \frac{(-3\alpha^4 - 18\alpha^2 q^2 + 5q^4)\alpha^7}{(q^2 + \alpha^2)^6}$
3	0	0	3	0	0	$\frac{256}{525\pi} \frac{(11\alpha^4 - 28\alpha^2 q^2 + 21q^4)\alpha^9}{(q^2 + \alpha^2)^7}$
3	1	0	3	1	0	$\frac{64}{1575\pi} \frac{(71\alpha^6 + 497\alpha^4 q^2 - 2595\alpha^2 q^4 + 35q^6)\alpha^7}{(q^2 + \alpha^2)^7}$
3	2	0	3	2	0	$\frac{1024}{525\pi} \frac{(\alpha^4 + 7\alpha^2 q^2 + 21q^4)\alpha^9}{(q^2 + \alpha^2)^7}$

Tablo D.2. Compton profili yardımcı moleküler integralleri -2 ($R \neq 0$)

n	l	m	n'	l	m	$J_{n'lm, n'lm}(\alpha, \beta, q, R)$
			1	0	0	$\frac{16}{\pi}(\alpha\beta)^{5/2} J_{22}^{10}(\alpha, \beta, q, R)$
1	0	0	2	0	0	$\frac{16}{\sqrt{3}\pi}(\alpha\beta)^{5/2} [3\beta^2 J_{23}^{10}(\alpha, \beta, q, R) - J_{23}^{30}(\alpha, \beta, q, R)]$
			3	0	0	$\frac{64\sqrt{10}}{5\pi}\alpha^{5/2}\beta^{9/2} [\beta^2 J_{24}^{10}(\alpha, \beta, q, R) - J_{24}^{30}(\alpha, \beta, q, R)]$
			2	0	0	$\frac{16}{3\pi}(\alpha\beta)^{5/2} [9\alpha^2\beta^2 J_{33}^{10}(\alpha, \beta, q, R) - 3(\alpha^2 + \beta^2) J_{33}^{30}(\alpha, \beta, q, R) + J_{33}^{50}(\alpha, \beta, q, R)]$
2	0	0	2	1	0	$\frac{64\sqrt{3}}{3\pi}\alpha^{5/2}\beta^{7/2} [J_{33}^{40}(\alpha, \beta, q, R) - 3\alpha^2 J_{33}^{21}(\alpha, \beta, q, R)]$
			3	0	0	$\frac{64\sqrt{30}}{15\pi}\alpha^{5/2}\beta^{9/2} [3\alpha^2\beta^2 J_{34}^{10}(\alpha, \beta, q, R) - 3(\alpha^2 + \beta^2) J_{34}^{30}(\alpha, \beta, q, R) + J_{34}^{50}(\alpha, \beta, q, R)]$
			2	1	1	$\frac{256}{3\pi}(\alpha\beta)^{7/2} [J_{33}^{30}(\alpha, \beta, q, R) + J_{33}^{32}(\alpha, \beta, q, R)]$
2	1	1	3	1	1	$\frac{256\sqrt{30}}{45\pi}(\alpha\beta)^{7/2} [5\beta^2 (J_{34}^{30}(\alpha, \beta, q, R) + J_{34}^{32}(\alpha, \beta, q, R)) - (J_{34}^{50}(\alpha, \beta, q, R) + J_{34}^{52}(\alpha, \beta, q, R))]$
			3	0	0	$\frac{512}{5\pi}(\alpha\beta)^{9/2} [\alpha^2\beta^2 J_{44}^{10}(\alpha, \beta, q, R) - (\alpha^2 + \beta^2) J_{44}^{30}(\alpha, \beta, q, R) + J_{44}^{50}(\alpha, \beta, q, R)]$
3	1	0	3	1	0	$\frac{512}{45\pi}(\alpha\beta)^{7/2} [25\alpha^2\beta^2 (J_{44}^{30}(\alpha, \beta, q, R) - 2J_{44}^{32}(\alpha, \beta, q, R)) - 5(\alpha^2 + \beta^2) [J_{44}^{50}(\alpha, \beta, q, R) - 2J_{44}^{52}(\alpha, \beta, q, R)] + J_{44}^{70}(\alpha, \beta, q, R) - 2J_{44}^{72}(\alpha, \beta, q, R)]$
			3	2	0	$\frac{2048}{35\pi}(\alpha\beta)^{9/2} [7J_{44}^{50}(\alpha, \beta, q, R) - 10J_{44}^{52}(\alpha, \beta, q, R) + 18J_{44}^{54}(\alpha, \beta, q, R)]$

EK E. $C_{m'}^m(\alpha, \beta, q; R)$ ve $S_{m'}^m(\alpha, \beta, q; R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri

E.1. $C_{m'}^m(\alpha, \beta, q; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$C_{m'}^m(\alpha, \beta, q; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$C_{m'}^m(\alpha, \beta, q; R) = \int_q^\infty \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^{n'}} \cos(pR) dp \quad (E.1)$$

şeklinde tanımlanır. Bu integrali hesaplamak için denklem (2.25) kullanılırsa

$$C_{m'}^m(\alpha, \beta, q; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) C_{m, s+1}(\alpha, q; R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'}^{s'}(\beta, \alpha) C_{m, s'+1}(\beta, q; R) \quad (E.2)$$

bağıntısı elde edilir. $\alpha = \beta$ özel durumunda $C_{m'}^m(\alpha, \beta, q; R)$ integrali

$$C_{m'}^m(\alpha, \alpha, q; R) = C_{m, n+n'}(\alpha, q; R) \quad (E.3)$$

ifadesine indirgenir. Burada $C_{m'}^m(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali EK I'da incelenmiştir.

$C_{m'}^m(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integrali için elde edilen (E.2) analitik ifadesine alternatif bir ifade (E.1)'de cosinüs fonksiyonunun seri açılımı (Jeffrey ve Dai, 1995)

$$\cos(x) = \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^Q (-1)^k \frac{x^{2k}}{(2k)!} \quad (E.4)$$

kullanılarak

$$C_{m'}^m(\alpha, \beta, q; R) = \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^Q (-1)^k \frac{R^{l+2k}}{(2k)!} J_{m'}^{m+2k}(\alpha, \beta; q) \quad (E.5)$$

şeklinde bulunur. Burada $J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$ yardımcı moleküler integrali EK L'de verilmiştir. $C_{m'}^m(\alpha, \beta, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo E.1'de verilmiştir.

Tablo E.1. $C_{m'}^m(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri

n	n'	m	$C_{m'}^m(\alpha, \beta; q, R)$
1	1	0	$-\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)} [C_{01}(\alpha, q; R) - C_{01}(\beta, q; R)]$
		2	$-\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [C_{21}(\alpha, q; R) - C_{21}(\beta, q; R)]$
	2	0	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [C_{01}(\alpha, q; R) - C_{01}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{02}(\beta, q; R)]$
2		$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [C_{21}(\alpha, q; R) - C_{21}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{22}(\beta, q; R)]$	
4		$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [C_{41}(\alpha, q; R) - C_{41}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{42}(\beta, q; R)]$	
2	0	0	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [2C_{01}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{02}(\alpha, q; R) - 2C_{01}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{02}(\beta, q; R)]$
		2	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [2C_{21}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{22}(\alpha, q; R) - 2C_{21}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{22}(\beta, q; R)]$
	4	2	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [2C_{41}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{42}(\alpha, q; R) - 2C_{41}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{42}(\beta, q; R)]$
		6	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [2C_{61}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{62}(\alpha, q; R) - 2C_{61}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) C_{62}(\beta, q; R)]$

E.2. $S_{mn'}^m(\alpha, \beta; q, R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$S_{mn'}^m(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integrali

$$S_{mn'}^m(\alpha, \beta; q, R) = \int_q^\infty \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^{n'}} \sin(pR) dp \quad (E.6)$$

şeklinde tanımlanır. Bu integrali hesaplamak için denklem (2.25) kullanılırsa

$$S_{mn'}^m(\alpha, \beta; q, R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{mn'}^s(\alpha, \beta) S_{m, s+1}(\alpha, q; R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'n}^{s'}(\beta, \alpha) S_{m, s'+1}(\beta, q; R) \quad (E.7)$$

bağıntısı elde edilir. $\alpha = \beta$ özel durumunda $S_{mn'}^m(\alpha, \beta, q; R)$ integrali

$$S_{mn'}^m(\alpha, \alpha; q, R) = S_{m, n+n'}(\alpha, q; R) \quad (E.8)$$

ifadesine indirgenir. Bu kısımda ortaya çıkan $S_{mn'}^m(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali EK I'da incelenmiştir.

$S_{mn'}^m(\alpha, \beta, q; R)$ yardımcı moleküler integrali için elde edilen (E.7) analitik ifadesine alternatif bir ifade (E.6)'da sinüs fonksiyonunun seri açılımı (Jeffrey ve Dai, 1995)

$$\sin(x) = \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^Q (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!} \quad (E.9)$$

kullanılarak

$$S_{mn'}^m(\alpha, \beta, q; R) = \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^Q (-1)^k \frac{R^{l+2k+1}}{(2k+1)!} J_{mn'}^{m+2k+1}(\alpha, \beta; q) \quad (E.10)$$

şeklinde bulunur. Burada $J_{mn'}^m(\alpha, \beta; q)$ yardımcı moleküler integrali EK L'de verilmiştir. $S_{mn'}^m(\alpha, \beta, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo E.2'de verilmiştir.

Tablo E.2. $S_{nm}^m(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri

n	n'	m	$S_{nm}^m(\alpha, \beta; q, R)$
	1	1	$-\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)} [S_{11}(\alpha, q; R) - S_{11}(\beta, q; R)]$
1	1	1	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [S_{11}(\alpha, q; R) - S_{11}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) S_{12}(\beta, q; R)]$
	2	3	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [S_{31}(\alpha, q; R) - S_{31}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) S_{32}(\beta, q; R)]$
	5	5	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [S_{51}(\alpha, q; R) - S_{51}(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) S_{52}(\beta, q; R)]$
2	1	1	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [2S_{11}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) (S_{12}(\alpha, q; R) + S_{12}(\beta, q; R)) - 2S_{11}(\beta, q; R)]$
	2	3	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [2S_{31}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) (S_{32}(\alpha, q; R) + S_{32}(\beta, q; R)) - 2S_{31}(\beta, q; R)]$
	5	5	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [2S_{51}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) (S_{52}(\alpha, q; R) + S_{52}(\beta, q; R)) - 2S_{51}(\beta, q; R)]$
3	1	1	$-\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [S_{11}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) S_{12}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2)^2 S_{13}(\alpha, q; R) - S_{11}(\beta, q; R)]$
	1	3	$-\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [S_{31}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) S_{32}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2)^2 S_{33}(\alpha, q; R) - S_{31}(\beta, q; R)]$
	1	5	$-\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [S_{51}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) S_{52}(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2)^2 S_{53}(\alpha, q; R) - S_{51}(\beta, q; R)]$

EK F. $J_{mn}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri

Tablo F.1. $J_{mn}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri

l	n	n'	m	$J_{mn}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$
0	1	1	0	$-\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)} [-F_{10}^0(\alpha, q; R) + F_{10}^0(\beta, q; R)]$
1	1	2	1	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [F_{11}^1(\alpha, q; R) - F_{11}^1(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) F_{12}^1(\beta, q; R)]$
1	2	1	3	$-\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [F_{31}^1(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) F_{32}^1(\alpha, q; R) - F_{31}^1(\beta, q; R)]$
2	1	2	2	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [F_{21}^2(\alpha, q; R) - F_{21}^2(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) F_{22}^2(\beta, q; R)]$
2	1	2	4	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3} [2F_{41}^2(\alpha, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) F_{42}^2(\alpha, q; R) - 2F_{41}^2(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2) F_{42}^2(\beta, q; R)]$
3	2	3	3	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^4} [-3F_{31}^3(\alpha, q; R) - (\alpha^2 - \beta^2) F_{32}^3(\alpha, q; R) + 3F_{31}^3(\beta, q; R) - 2(\alpha^2 - \beta^2) F_{32}^3(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2)^2 F_{33}^3(\beta, q; R)]$
1	2	3	5	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^4} [-3F_{51}^1(\alpha, q; R) - (\alpha^2 - \beta^2) F_{52}^1(\alpha, q; R) + 3F_{51}^1(\beta, q; R) - 2(\alpha^2 - \beta^2) F_{52}^1(\beta, q; R) + (\alpha^2 - \beta^2)^2 F_{53}^1(\beta, q; R)]$

Tablo F.2. $J_{m'}^{ml}(\alpha, \beta; q, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri

l	n	n'	m	α	β	q	R	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δ_f
0	1	1	0	0.1	2.5	7.3	2.2	-0.0000842540967550350281871843108	-0.0000842540967549296015231418326	10^{-15}
1	2	3	5	6.4	15.8	0.7	1.5	-1.5234037803283996221441669599E-10	-1.5234037803283996221441669599E-10	0
2	5	1	4	4.1	7.7	8.7	1.5	-2.820103802427842553051096577E-10	-2.820103802427842553051096577E-10	0
3	4	6	7	1.5	0.7	0.5	1.8	0.00003052736347100562401194435567	0.00003052736347100562401194435567	0
4	6	8	6	4	0.3	2.2	6.9	-2.44078795240001468456232203911E-14	-2.44078795240001468456232203911E-14	0
5	3	5	9	2.4	6.8	3.2	2.4	-6.4716340058021714395850548529E-10	-6.4716340058021714395850548529E-10	0
6	7	9	8	4	2.4	5.2	1.9	7.4253530017281673839272692963E-23	7.4253530017281673839272692963E-23	0
7	8	7	11	6.7	2.2	2.7	1.2	5.6529235727741803303654402092E-19	5.6529235727741803303654402092E-19	0
8	5	6	10	9.5	4.5	8.4	1.3	1.161894239761828499989977869E-15	1.161894239761828499989977869E-15	0
9	9	4	13	0.7	0.7	0.8	2.9	2.62128813184870779608432752477E-7	2.62128813184870779608432752477E-7	0
10	10	6	10	3.8	0.5	1.8	1.5	6.32102746906496293234250577486E-19	6.32102746906496293234250577486E-19	0

EK G. $C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R)$ ve $S_{nn'}^m(\alpha, \beta; R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri

G.1. $C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R) = \int_0^\infty \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^{n'}} \cos(pR) dp \quad (G.1)$$

şeklinde tanımlanır.

i. Analitik Formül

Bu integrali hesaplamak için denklem (2.25) ifadesi kullanılırsa

$$C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{nn'}^s(\alpha, \beta) C_{m, s+1}(\alpha, R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'n}^{s'}(\beta, \alpha) C_{m, s'+1}(\beta, R) \quad (G.2)$$

elde edilir. $\alpha = \beta$ özel durumu için $C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$C_{nn'}^m(\alpha, \alpha; R) = C_{m, n+n'}(\alpha, R) \quad (G.3)$$

ifadesine indirgenir. $C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo G.1'de verilmiştir.

ii. Tekrarlama Formülleri

$C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali için (G.1) denkleminde pay ve payda $(p^2 + \alpha^2)$ ile çarpılırsa,

$$C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R) = C_{n+1, n'}^m(\alpha, \beta; R) + \alpha^2 C_{n+1, n'}^m(\alpha, \beta; R) \quad (G.4)$$

$$C_{nn'}^m(\alpha, \beta; R) = C_{n, n'+1}^m(\alpha, \beta; R) + \beta^2 C_{n, n'+1}^m(\alpha, \beta; R) \quad (G.5)$$

denklemleri elde edilir. Denklem (G.4) ve (G.5)'te başlangıç değerleri olan $C_{nn'}^0(\alpha, \beta; R)$ ve $C_{nn'}^1(\alpha, \beta; R)$

$$C_{nn'}^0(\alpha, \beta; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{nn'}^s(\alpha, \beta) C_{0, s+1}(\alpha, R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'n}^{s'}(\beta, \alpha) C_{0, s'+1}(\beta, R) \quad (G.6)$$

$$C_{nn'}^1(\alpha, \beta; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{nn'}^s(\alpha, \beta) C_{1, s+1}(\alpha, R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'n}^{s'}(\beta, \alpha) C_{1, s'+1}(\beta, R) \quad (G.7)$$

şeklinde tanımlanır. (G.1)-(G-7) denklemlerinde adıgeçen $C_{nn'}^m(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali Bölüm I.3'de incelenmiştir.

Tablo G.1. $C_{nm}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri

n	n'	m	$C_{nm}^m(\alpha, \beta; R)$
1	1	0	$-\frac{\pi}{2\alpha\beta} \frac{(\beta e^{-\alpha R} - \alpha e^{-\beta R})}{(\alpha^2 - \beta^2)}$
		2	$\frac{\pi}{2} \frac{(\alpha e^{-\alpha R} - \beta e^{-\beta R})}{(\alpha^2 - \beta^2)}$
	2	0	$\frac{\pi}{4\alpha\beta^3} \frac{2\beta^3 e^{-\alpha R} + (-3\alpha\beta^2 + \alpha^3 + \alpha^3\beta R - \alpha\beta^3 R)e^{-\beta R}}{(\alpha^2 - \beta^2)^2}$
		4	$-\frac{\pi}{4\beta} \frac{2\alpha\beta e^{-\alpha R} + (-\beta^2 - \alpha^2 + \alpha^2\beta R - \beta^3 R)e^{-\beta R}}{(\alpha^2 - \beta^2)^2}$
2	2	0	$\frac{\pi}{4} \frac{2\alpha^3 e^{-\alpha R} + (\beta^3 - 3\beta\alpha^2 + \alpha^2\beta^2 R - \beta^4 R)e^{-\beta R}}{(\alpha^2 - \beta^2)^2}$
		6	$-\frac{\pi}{4} \frac{2\alpha^3 e^{-\alpha R} + (\beta^3 - 3\beta\alpha^2 + \alpha^2\beta^2 R - \beta^4 R)e^{-\beta R}}{(\alpha^2 - \beta^2)^2}$
	4	0	$\frac{\pi}{4(\alpha\beta)^3} \left\{ 5\alpha^2\beta^3 - \beta^5 + \beta^3\alpha^3 R - \beta^5\alpha R \right\} e^{-\alpha R} + \left\{ -5\alpha^3\beta^2 + \alpha^5 + \alpha^5\beta R - \alpha^3\beta^3 R \right\} e^{-\beta R}$
		2	$-\frac{\pi}{4\alpha\beta} \left\{ 5\alpha^2\beta + \beta^3 + \beta\alpha^3 R - \beta^3\alpha R \right\} e^{-\alpha R} + \left\{ -3\alpha\beta^2 - \alpha^3 + \alpha^3\beta R - \alpha\beta^3 R \right\} e^{-\beta R}$
6	4	$\frac{\pi}{4} \left\{ \alpha^3 + 3\alpha\beta^2 + \alpha^4 R - \beta^2\alpha^2 R \right\} e^{-\alpha R} + \left\{ -\beta^3 - \beta\alpha^2 + \alpha^2\beta^2 R - \beta^4 R \right\} e^{-\beta R}$	
	6	$-\frac{\pi}{4} \left\{ \alpha^5 + 5\alpha^3\beta^2 + \alpha^6 R - \beta^2\alpha^4 R \right\} e^{-\alpha R} + \left\{ \beta^5 - 5\beta^3\alpha^2 + \alpha^2\beta^4 R - \beta^6 R \right\} e^{-\beta R}$	

G.2. $S_{m'}^m(\alpha, \beta; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$S_{m'}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$S_{m'}^m(\alpha, \beta; R) = \int_0^\infty \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^{n'}} \sin(pR) dp \quad (G.8)$$

şeklinde tanımlanır.

i. Analitik Formül

Bu integrali hesaplamak için denklem (2.25) ifadesi kullanılırsa

$$S_{m'}^m(\alpha, \beta; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) S_{m, s+1}(\alpha, R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'}^{s'}(\beta, \alpha) S_{m, s'+1}(\beta, R) \quad (G.9)$$

elde edilir. $\alpha = \beta$ özel durumu için $S_{m'}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$S_{m'}^m(\alpha, \alpha; R) = S_{m, n+n'}(\alpha, R) \quad (G.10)$$

ifadesine indirgenir. $S_{m'}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo G.2'de verilmiştir.

ii. Tekrarlama Formülleri

$S_{m'}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integrali için (G.8) denkleminde pay ve payda $(p^2 + \alpha^2)$ ile çarpılırsa,

$$S_{m'}^m(\alpha, \beta; R) = S_{n+1, n'}^{m+2}(\alpha, \beta; R) + \alpha^2 S_{n+1, n'}^m(\alpha, \beta; R) \quad (G.11)$$

$$S_{m'}^m(\alpha, \beta; R) = S_{n, n'+1}^{m+2}(\alpha, \beta; R) + \beta^2 S_{n, n'+1}^m(\alpha, \beta; R) \quad (G.12)$$

denklemleri elde edilir. Denklem (G.11) ve (G.12)'de başlangıç değerleri olan $S_{m'}^0(\alpha, \beta; R)$ ve $S_{m'}^1(\alpha, \beta; R)$

$$S_{m'}^0(\alpha, \beta; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) S_{0, s+1}(\alpha, R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'}^{s'}(\beta, \alpha) S_{0, s'+1}(\beta, R) \quad (G.13)$$

$$S_{m'}^1(\alpha, \beta; R) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) S_{1, s+1}(\alpha, R) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'}^{s'}(\beta, \alpha) S_{1, s'+1}(\beta, R) \quad (G.14)$$

şeklinde tanımlanır. (G.8)-(G.14) denklemlerinde adıgeçen $S_{m'}^m(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali Bölüm I.4'de incelenmiştir.

Tablo G.2. $S_{mi}^m(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri ($\alpha \neq \beta$)

n	n'	m	$S_{mi}^m(\alpha, \beta; R)$
	1	1	$-\frac{\pi}{2} \frac{(e^{-\alpha R} - e^{-\beta R})}{(\alpha^2 - \beta^2)}$
1		1	$\frac{\pi}{4\beta} \frac{(2\beta e^{-\alpha R} + (-2\beta + \alpha^2 R - \beta^2 R)e^{-\beta R})}{(\alpha^2 - \beta^2)^2}$
	2	3	$-\frac{\pi}{4} \frac{(2\alpha^2 e^{-\alpha R} + (-2\alpha^2 + \alpha^2 \beta R - \beta^3 R)e^{-\beta R})}{(\alpha^2 - \beta^2)^2}$
	5	5	$\frac{\pi}{4} \frac{(2\alpha^4 e^{-\alpha R} + (2\beta^4 - 4\alpha^2 \beta^2 + \beta^3 \alpha^2 R - \beta^5 R)e^{-\beta R})}{(\alpha^2 - \beta^2)^2}$
2		1	$\frac{\pi}{4\alpha\beta} \left\{ 4\alpha\beta + \alpha^2 \beta R - \beta^3 R \right\} e^{-\alpha R} + \left\{ -4\alpha\beta + \alpha^3 R - \alpha\beta^2 R \right\} e^{-\beta R}$
	2	3	$-\frac{\pi}{4} \frac{\left\{ 2\alpha^2 + 2\beta^2 + \alpha^3 R - \beta^2 \alpha R \right\} e^{-\alpha R} + \left\{ -2\beta^2 - 2\alpha^2 + \alpha^2 \beta R - \beta^3 R \right\} e^{-\beta R}}{(\alpha^2 - \beta^2)^3}$
	5	5	$\frac{\pi}{4} \frac{\left\{ 4\alpha^2 \beta^2 + \alpha^5 R - \alpha^3 \beta^2 R \right\} e^{-\alpha R} + \left\{ -4\alpha^2 \beta^2 + \alpha^2 \beta^3 R - \beta^5 R \right\} e^{-\beta R}}{(\alpha^2 - \beta^2)^3}$
3		1	$\frac{\pi}{16\alpha^3} \left\{ -8\alpha^3 - 5\alpha^4 R + 6\alpha^2 \beta^2 R - \beta^4 R - \alpha^5 R^2 + 2\alpha^3 \beta^2 R^2 - \alpha\beta^4 R^2 \right\} e^{-\alpha R} + 8\alpha^3 e^{-\beta R}$
	1	3	$\frac{\pi}{16\alpha} \frac{\left\{ 8\alpha\beta^2 + \alpha^4 R + 2\alpha^2 \beta^2 R - 3\beta^4 R + \alpha^5 R^2 - 2\alpha^3 \beta^2 R^2 + \alpha\beta^4 R^2 \right\} e^{-\alpha R} - 8\alpha\beta^2 e^{-\beta R}}{(\alpha^2 - \beta^2)^3}$
	5	5	$-\frac{\pi}{16} \frac{\left\{ -3\alpha^5 R + 10\alpha^3 \beta^2 R + 8\beta^4 - 7\alpha\beta^4 R + \alpha^6 R^2 - 2\alpha^4 \beta^2 R^2 + \alpha^2 \beta^4 R^2 \right\} e^{-\alpha R} - 8\beta^4 e^{-\beta R}}{(\alpha^2 - \beta^2)^3}$

EK H. $I_{nr}^{ml}(\alpha, \beta; R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri

Tablo H.1. $I_{nr}^{ml}(\alpha, \beta; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri ($\alpha \neq \beta$)

l	n	n'	m	$I_{nr}^{ml}(\alpha, \beta; R)$
0	1	1	0	$-\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)} [E_{01}^0(\alpha, R) - E_{01}^0(\beta, R)]$
1	1	2	1	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [E_{11}^1(\alpha, R) - E_{11}^1(\beta, R) + (\alpha^2 - \beta^2) E_{12}^1(\beta, R)]$
1	2	1	3	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [-E_{31}^1(\alpha, R) + (\alpha^2 - \beta^2) E_{32}^1(\alpha, R) - E_{31}^1(\beta, R)]$
2	1	2	2	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [E_{21}^2(\alpha, R) - E_{21}^2(\beta, R) + (\alpha^2 - \beta^2) E_{22}^2(\beta, R)]$
2	1	2	4	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} [E_{41}^2(\alpha, R) - E_{41}^2(\beta, R) + (\alpha^2 - \beta^2) E_{42}^2(\alpha, R)]$
3	2	3	3	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^4} [-3E_{31}^3(\alpha, R) - (\alpha^2 - \beta^2) E_{32}^3(\alpha, R) + 3E_{31}^3(\beta, R) - 2(\alpha^2 - \beta^2) E_{32}^3(\beta, R) + (\alpha^2 - \beta^2)^2 E_{33}^3(\beta, R)]$
1	2	3	5	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^4} [-3E_{51}^1(\alpha, R) - (\alpha^2 - \beta^2) E_{52}^1(\alpha, R) + 3E_{51}^1(\beta, R) - 2(\alpha^2 - \beta^2) E_{52}^1(\beta, R) + (\alpha^2 - \beta^2)^2 E_{53}^1(\beta, R)]$

Tablo H.2. $I_{m'}^{m'}$ (α, β, R) yardımcı moleküler integralinin bazı nümerik değerleri

l	n	n'	m	α	β	R	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δf
0	1	1	0	0.1	2.5	2.2	2.241402562832242145895816128152603	2.241402562832242145895816128152603	0
1	2	3	5	6.4	15.8	1.5	-1.52138415447871543818579691002E-10	-1.52138415447871543818579691002E-10	0
2	5	1	4	4.1	7.7	1.5	3.288645792758347007821535842002E-8	3.288645792758347007821535842002E-8	0
3	4	6	7	1.5	0.7	1.8	0.000031114736593436051847726789946	0.000031114736593436051847726789946	0
4	6	8	6	4	0.3	6.9	2.145486072815635039873369111431E-7	2.145486072815635039873369111431E-7	0
5	3	5	9	2.4	6.8	2.4	7.65285395954671880061901412146E-10	7.65285395954671880061901412146E-10	0
6	7	9	8	4	2.4	1.9	6.15190835881001628709465720572E-18	6.15190835881001628709465720572E-18	0
7	8	7	11	6.7	2.2	1.2	5.76059922368478934919357280435E-19	5.76059922368478934919357280435E-19	0
8	5	6	10	9.5	4.5	1.3	1.6425961364010663868800194690E-14	1.6425961364010663868800194690E-14	0
9	9	4	13	0.7	0.7	2.9	2.646527492864597054416040037880E-7	2.646527492864597054416040037880E-7	0
10	10	6	10	3.8	0.5	1.5	6.54253282025659608320156765155E-19	6.54253282025659608320156765155E-19	0

EK I. $C_{mn}(\alpha, q; R)$ ve $S_{mn}(\alpha, q; R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri

I.1. $C_{mn}(\alpha, q; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$C_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$C_{mn}(\alpha, q; R) = \int_q^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} \cos(pR) dp \quad (I.1)$$

şeklinde tanımlanır. Bu integrali çözmek için

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = \int_0^q f(x) dx + \int_q^{\infty} f(x) dx \quad (I.2)$$

şeklindeki integrallerin toplama özelliği kullanılarak

şeklinde yazılabilir. Bu denklemdeki $C_{mn}(\alpha, R)$ ve $\bar{C}_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralleri Bölüm I.3'te incelenmiştir.

$C_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı değerleri nümerik sonuçlarla karşılaştırmalı bir şekilde Tablo I.1'de verilmiştir.

I.2. $S_{mn}(\alpha, q; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$S_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$S_{mn}(\alpha, q; R) = \int_q^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} \sin(pR) dp \quad (I.3)$$

şeklinde tanımlanır. $S_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralini çözmek için denklem (I.2)'den faydalanırsak

$$S_{mn}(\alpha, q; R) = S_{mn}(\alpha, R) - \bar{S}_{mn}(\alpha, q; R) \quad (I.4)$$

ifadesini elde ederiz. Bu denklemdeki $S_{mn}(\alpha, R)$ ve $\bar{S}_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integraller Bölüm I.4'te incelenmiştir.

$S_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı değerleri nümerik sonuçlarla karşılaştırmalı bir şekilde Tablo I.2’de verilmiştir.

I.3. $C_{mn}(\alpha, R)$ ve $\bar{C}_{mn}(\alpha, q; R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri

$C_{mn}(\alpha, R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$C_{mn}(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali

$$C_{mn}(\alpha, R) = \int_0^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} \cos(pR) dp \quad (I.5)$$

şeklinde tanımlanır.

Anolitik Formül

Denklem (I.5)’i çözmek için Rezidü teoremi uygulanırsa,

$$C_{mn}(\alpha, R) = \pi e^{-\alpha R} \sum_{k=0}^{n-1} F_{n-k-1} (2n-k-2) \sum_{s=0}^k \frac{(-1)^{(m/2)-s} F_s(m)}{2^{m-s} (k-s)!} (2\alpha)^{k-s+m-2n+1} R^{k-s} \quad (I.6)$$

ifadesi bulunur.

Tekrarlama Bağıntısı

$C_{mn}(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali için (I.5) denkleminde pay ve payda $(p^2 + \alpha^2)$ ile çarpılırsa,

$$C_{mn}(\alpha, R) = C_{m+2, n+1}(\alpha, R) + \alpha^2 C_{m, n+1}(\alpha, R) \quad (I.7)$$

şeklinde tekrarlama bağıntısı elde edilir. Bu tekrarlama bağıntılarının başlangıç değerleri olan $C_{0n}(\alpha, R)$ integrali yine Rezidü teoremi aracılığı ile

$$C_{0n}(\alpha, R) = \pi e^{-\alpha R} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{F_k(n+k-1)}{(n-k-1)!} \frac{R^{n-k-1}}{(2\alpha)^{n+k}} \quad (I.8)$$

şeklinde elde edilir.

$C_{mn}(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo I.3’te verilmiştir.

$\bar{C}_{mn}(\alpha, q; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$\bar{C}_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$\bar{C}_{mn}(\alpha, q; R) = \int_0^q \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} \cos(pR) dp \quad (I.9)$$

şeklinde tanımlanır. Bu denkleme analitik bir ifade bulmak için, (E.4) ile verilen cosinüs fonksiyonunun seri açılımı (Jeffrey ve Dai, 1995) ifadesi kullanılırsa

$$\bar{C}_{mn}(\alpha, q; R) = \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^Q (-1)^k \frac{R^{2k}}{(2k)!} M_{m+2k,n}(\alpha, q) \quad (I.10)$$

elde edilir. Bu denklemdaki $M_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali Bölüm I.5'te incelenmiştir.

$\bar{C}_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı değerleri nümerik sonuçlarla karşılaştırmalı bir şekilde Tablo I.4'de verilmiştir.

I.4. $S_{mn}(\alpha, R)$ ve $\bar{S}_{mn}(\alpha, q; R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri

$S_{mn}(\alpha, R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$S_{mn}(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali

$$S_{mn}(\alpha, R) = \int_0^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} \sin(pR) dp \quad (I.11)$$

şeklinde tanımlanır.

Analitik Formül

Denklem (I.11) ile verilen ifadeye analitik bir ifade bulmak için Rezidü teoremi kullanılırsa,

$$S_{mn}(\alpha, R) = \pi e^{-\alpha R} \sum_{k=0}^{n-1} F_{n-k-1} (2n-k-2) \sum_{s=0}^k \frac{(-1)^{((3m+1)/2)-s} F_s(m)}{2^{m-s} (k-s)!} (2\alpha)^{k-s+m-2n+1} R^{k-s} \quad (I.12)$$

ifadesi bulunur.

Tekrarlama Bağıntısı

$S_{mn}(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integrali için (I.11) denkleminde pay ve payda $(p^2 + \alpha^2)$ ile çarpılırsa,

$$S_{mn}(\alpha, R) = S_{m+2, n+1}(\alpha, R) + \alpha^2 S_{m, n+1}(\alpha, R) \quad (I.13)$$

şeklinde tekrarlama bağıntısı elde edilir. Bu tekrarlama bağıntılarının başlangıç değeri olan $S_{-1, n}(\alpha, R)$ integrali Rezidü teoremi kullanılarak

$$S_{-1, n}(\alpha, R) = \frac{\pi}{2\alpha^{2n}} \left\{ 1 - e^{-\alpha R} \sum_{k=0}^{n-1} F_k(n+k-1) \sum_{s=0}^{n-k-1} \frac{1}{2^{n+k-1} (n-k-s-1)!} (\alpha R)^{n-k-s-1} \right\} \quad (I.14)$$

şeklinde elde edilir. $S_{mn}(\alpha, R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo I.5'de verilmiştir.

$\bar{S}_{mn}(\alpha, q; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$\bar{S}_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integrali

$$\bar{S}_{mn}(\alpha, q; R) = \int_0^q \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} \sin(pR) dp \quad (I.15)$$

şeklinde tanımlanır. Bu denkleme analitik bir ifade bulmak için, (E.9) ile verilen sinüs fonksiyonunun seri açılımı (Jeffrey ve Dai, 1995) ifadesi kullanılırsa

$$\bar{S}_{mn}(\alpha, q; R) = \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^Q (-1)^k \frac{R^{2k+1}}{(2k+1)!} M_{m+2k+1, n}(\alpha, q) \quad (I.16)$$

bağıntısı bulunur. Bu denklemdeki $M_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali Bölüm I.5'te incelenmiştir.

$\bar{S}_{mn}(\alpha, q; R)$ yardımcı moleküler integralinin bazı değerleri nümerik sonuçlarla karşılaştırmalı bir şekilde Tablo I.6'da verilmiştir.

I.5. $M_{mn}(\alpha, q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$M_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali

$$M_{mn}(\alpha, q) = \int_0^q \frac{x^m}{(x^2 + \alpha^2)^n} dx \quad (I.17)$$

şeklinde tanımlanır. Hesaplamalarımızda $M_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali için m 'nin sadece çift değeri ile karşılaşırız. $M_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integraline ait analitik bir ifade bulmak için

$$\frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} = \sum_{j=0}^{m/2} (-1)^j F_j \left(\frac{m}{2} \right) \frac{\alpha^{2j}}{(p^2 + \alpha^2)^{n - \frac{m}{2} + j}} \quad (I.18)$$

ifadesi kullanılırsa,

$$M_{mn}(\alpha, q) = \sum_{j=0}^{m/2} (-1)^j F_j \left(\frac{m}{2} \right) \alpha^{2j} I_{n - \left(\frac{m}{2} \right) + j}(\alpha, q) \quad (I.19)$$

bağıntısı elde edilir. $m = 0$ özel durumunda $M_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali

$$M_{0n}(\alpha, q) = I_n(\alpha, q) \quad (I.20)$$

ifadesine indirgenir. Burada $I_n(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali Bölüm I.6'da incelenmiştir.

$M_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo I.7'de verilmiştir.

I.6. $I_n(\alpha, q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$I_n(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali

$$I_n(\alpha, q) = \int_0^q \frac{dx}{(x^2 + \alpha^2)^n} \quad (I.21)$$

şeklinde tanımlanır. Bu ifade $n \geq 0$ ve $n < 0$ durumları için ayrı ayrı çözülmelidir.

$n \geq 0$ durumu

Bu durum için $x = \alpha \tan \theta$ dönüşümü yapılırsa,

$$I_n(\alpha, q) = \frac{\alpha^{1-2n}}{2^{2n-2}} \left\{ F_{n-1}(2n-2) \arctan\left(\frac{q}{\alpha}\right) + \sum_{k=0}^{n-2} \frac{F_k(2n-2)}{n-k-1} \sum_{s=0}^{\lfloor \frac{2n-2k-3}{2} \rfloor} (-1)^s F_{2s+1}(2n-2k-2) \frac{\alpha^{2n-2k-2s-3} q^{2s+1}}{(q^2 + \alpha^2)^{n-k-1}} \right\} \quad (I.22)$$

bağıntısı elde edilir. $I_n(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo I.8'de verilmiştir.

$n < 0$ durumu

$n < 0$ durumunda $I_n(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali

$$I_{-n}(\alpha, q) = \int_0^q (x^2 + \alpha^2)^n dx \quad (I.23)$$

şekline dönüşür. Burada $(x^2 + \alpha^2)^n$ için binom açılımı kullanılırsa,

$$I_{-n}(\alpha, q) = \sum_{k=0}^n F_k(n) \alpha^{2k} \frac{q^{2n-2k+1}}{2n-2k+1} \quad (I.24)$$

bağıntısı elde edilir.

$I_{-n}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo I.9'da verilmiştir.

Tablo I.1. $C_{mn}(\alpha, q; R)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri

m	n	α	q	R	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δf
0	1	0.2	0.9	0.7	0.219371172725712533767808	0.219371172725712533767808	0
	2	0.7	0.6	1.4	0.093913213852907411302922	0.093913213852907411302922	0
	3	0.6	5.4	2.2	0.000014029366527442503727	0.000014029366527442503727	0
	4	0.4	3.2	1.4	0.000011109297469443733357	0.000011109297469443733357	0
	5	0.7	0.5	2.4	0.024074461119064199447375	0.024074461119064199447375	0
2	3	0.1	0.5	1.5	1.090130079141785566730775	1.090130079141785566730775	0
	4	1.4	0.7	0.8	0.005634500289886438410092	0.005634500289886438410092	0
	5	2.1	0.1	0.4	0.000274669407193596159433	0.000274669407193596159433	0
	6	2.4	0.8	0.7	0.000005396385469761582456	0.000005396385469761582456	0
	7	0.4	0.2	0.5	352.6762518083755763906138	352.6762518083755763906138	0
4	5	0.8	2.9	0.4	0.000085138747066513505785	0.000085138747066513505785	0
	6	1.1	1.1	0.7	0.001501453905984125977721	0.001501453905984125977721	0
	7	3.5	0.5	0.8	-4.341246288104969646012E-8	-4.341246288104969646012E-8	0
	8	2.6	0.8	0.3	1.489951669482826911614E-7	1.489951669482826911614E-7	0
	9	0.6	0.5	0.1	0.656194504824593311396973	0.656194504824593311396973	0
6	7	0.7	0.2	5.7	-0.028319463015019592338186	-0.028319463015019592338186	0
	8	0.5	0.4	0.8	1.035195595616253703253244	1.035195595616253703253244	0
	9	0.8	0.1	1.9	0.007322924706659886005354	0.007322924706659886005354	0
	10	0.5	0.5	0.7	1.563736186768990498050903	1.563736186768990498050903	0
	11	0.4	0.8	0.8	0.167168417032961729046145	0.167168417032961729046145	0
8	9	0.4	2.2	0.7	-0.000011687325310980490453	-0.000011687325310980490453	0
	10	4.7	0.3	0.7	-2.06165912788822835409E-11	-2.06165912788822835409E-11	0
	11	0.7	0.7	8.2	0.007166177610543437331742	0.007166177610543437331742	0
	12	0.1	0.9	1.5	0.034770167521636634035257	0.034770167521636634035257	0
	13	0.6	0.8	1.7	0.000866300316208471967267	0.000866300316208471967267	0

Tablo I.2. $S_{mn}(\alpha, q; R)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri

m	n	α	q	R	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δf
1	1	0.2	0.9	0.7	0.937182266336517447767679	0.937182266336517447767679	0
	2	0.7	0.6	1.4	0.387932426140533645718215	0.387932426140533645718215	0
	3	0.6	5.4	2.2	0.000042381629297432987837	0.000042381629297432987837	0
	4	0.4	3.2	1.4	-0.000099950878666712994146	-0.000099950878666712994146	0
	5	0.7	0.5	2.4	0.382291824835152992874073	0.382291824835152992874073	0
3	3	0.1	0.5	1.5	1.420936233455809861844326	1.420936233455809861844326	0
	4	1.4	0.7	0.8	0.014961701602126468678949	0.014961701602126468678949	0
	5	2.1	0.1	0.4	0.000300577388265323086135	0.000300577388265323086135	0
	6	2.4	0.8	0.7	0.000017257453514490390323	0.000017257453514490390323	0
	7	0.4	0.2	0.5	16.36557368169003904630006	16.36557368169003904630006	0
5	5	0.8	2.9	0.4	0.002497158224767217012163	0.002497158224767217012163	0
	6	1.1	1.1	0.7	0.003970419053793498281540	0.003970419053793498281540	0
	7	3.5	0.5	0.8	1.585051181027013470294E-7	1.585051181027013470294E-7	0
	8	2.6	0.8	0.3	1.903580272996567976474425	1.903580272996567976474425	0
	9	0.6	0.5	0.1	1.585051181027013470294E-7	1.585051181027013470294E-7	0
7	7	0.7	0.2	5.7	-0.016850883224695766358252	-0.016850883224695766358252	0
	8	0.5	0.4	0.8	0.311226682362139264828246	0.311226682362139264828246	0
	9	0.8	0.1	1.9	0.014435655279701899635534	0.014435655279701899635534	0
	10	0.5	0.5	0.7	0.430509086068957089088014	0.430509086068957089088014	0
	11	0.4	0.8	0.8	0.124011717401001473499749	0.124011717401001473499749	0
9	9	0.4	2.2	0.7	0.000171338449668421554337	0.000171338449668421554337	0
	10	4.7	0.3	0.7	-9.57889402100615500644E-12	-9.57889402100615500644E-12	0
	11	0.7	0.7	8.2	0.002971766926083052684304	0.002971766926083052684304	0
	12	0.1	0.9	1.5	0.270918499431474448162627	0.270918499431474448162627	0
	13	0.6	0.8	1.7	0.013388115095788598478830	0.013388115095788598478830	0

Tablo I.3. $C_{mn}(\alpha, R)$ fonksiyonunun bazı sembolik deęerleri ($P = \alpha R$)

m	n	$C_{mn}(\alpha, R)$	
0	1	$\frac{\pi}{2\alpha} e^{-P}$	
	2	$\frac{\pi}{4\alpha^3} (1 + P) e^{-P}$	
	3	$\frac{\pi}{16\alpha^5} (3 + 3P + P^2) e^{-P}$	
	4	$\frac{\pi}{96\alpha^7} (15 + 15P + 6P^2 + P^3) e^{-P}$	
	5	$\frac{\pi}{768\alpha^9} (105 + 105P + 45P^2 + 10P^3 + P^4) e^{-P}$	
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^{11}} (945 + 945P + 420P^2 + 105P^3 + 15P^4 + P^5) e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^{13}} (10395 + 10395P + 4725P^2 + 1260P^3 + P^4 + 21P^5 + P^6) e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{15}} (135135 + 135135P + 62370P^2 + 17325P^3 + 3150P^4 + 378P^5 + 28P^6 + P^7) e^{-P}$	
2	2	$\frac{\pi}{4\alpha} (1 - P) e^{-P}$	
	3	$\frac{\pi}{16\alpha^3} (1 + P - P^2) e^{-P}$	
	4	$\frac{\pi}{96\alpha^5} (3 + 3P - P^3) e^{-P}$	
	5	$\frac{\pi}{768\alpha^7} (15 + 15P + 3P^2 - 2P^3 - P^4) e^{-P}$	
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^9} (105 + 105P + 30P^2 - 5P^3 - 5P^4 - P^5) e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^{11}} (945 + 945P + 315P^2 - 30P^4 - P^5 - P^6) e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{13}} (10395 + 10395P + 3780P^2 + 315P^3 - 210P^4 - 84P^5 - 14P^6 - P^7) e^{-P}$	
	4	3	$\frac{\pi}{16\alpha} (3 - 5P + P^2) e^{-P}$
4		$\frac{\pi}{96\alpha^3} (3 + 3P - 6P^2 + P^3) e^{-P}$	
5		$\frac{\pi}{768\alpha^5} (9 + 9P - 3P^2 - 6P^3 + P^4) e^{-P}$	
6		$\frac{\pi}{7680\alpha^7} (45 + 45P - 15P^3 - 10P^4 + P^5) e^{-P}$	
7		$\frac{\pi}{92160\alpha^9} (315 + 315P + 45P^2 - 60P^3 - 30P^4 - 3P^5 + P^6) e^{-P}$	
8		$\frac{\pi}{1290240\alpha^{11}} (2835 + 2835P + 630P^2 - 315P^3 - 210P^4 - 42P^5 + P^7) e^{-P}$	
6		4	$\frac{\pi}{96\alpha} (15 - 33P + 12P^2 - P^3) e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^3} (15 + 15P - 45P^2 + 14P^3 - P^4) e^{-P}$
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^5} (45 + 45P - 30P^2 - 45P^3 + 15P^4 - P^5) e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^7} (225 + 225P - 45P^2 - 120P^3 - 30P^4 + 15P^5 - P^6) e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^9} (1575 + 1575P - 525P^3 - 210P^4 + 14P^6 - P^7) e^{-P}$	

Tablo I.4. $\bar{C}_{mn}(\alpha, q; R)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri

m	n	α	q	R	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δf
0	0	0.5	0.4	1.4	0.379418712800631002751335315	0.379418712800631002751335315	0
	1	0.8	0.1	0.9	0.155234845887998413259796663	0.155234845887998413259796663	0
	2	0.5	0.5	1.3	4.904670544260174219244115064	4.904670544260174219244115064	0
	3	0.4	0.6	2.2	51.14919576391194976842948052	51.14919576391194976842948052	0
	4	0.7	0.2	2.4	3.023829870800069361221064906	3.023829870800069361221064907	10^{-32}
2	2	0.3	0.7	0.8	1.267290034864268816062657413	1.267290034864268816062657413	0
	3	0.1	0.1	2.9	96.31057552419864753614002216	96.31057552419864753614002216	0
	4	0.7	0.8	1.1	0.398845937792687287792537866	0.398845937792687287792537866	0
	5	0.4	0.5	1.9	30.47943248295191812037731031	30.47943248295191812037731031	0
	6	0.8	0.7	1.5	0.221426994784110128453836004	0.221426994784110128453836004	0
4	4	0.2	0.3	1.4	6.727928852182506039049979620	6.727928852182506039049979620	0
	5	0.7	0.7	2.1	0.053284402685231124954180246	0.053284402685231124954180246	0
	6	0.6	0.9	1.5	0.432315029088835270744919823	0.432315029088835270744919823	0
	7	0.6	0.8	1.7	0.717247845983505110058187315	0.717247845983505110058187315	0
	8	0.8	0.5	0.1	0.037162589976792465408918708	0.037162589976792465408918708	0
6	6	0.5	0.4	1.4	0.088804315927194448873102233	0.088804315927194448873102233	0
	7	0.8	0.7	1.9	0.006739695711437966658262934	0.006739695711437966658262935	10^{-36}
	8	0.5	0.5	1.3	1.123759125937878247565376511	1.123759125937878247565376512	10^{-37}
	9	0.4	0.6	2.2	37.09257681859494450814901456	37.09257681859494450814901457	10^{-32}
	10	0.7	0.2	2.4	0.001144884383757557701372624	0.001144884383757557701372625	10^{-39}
8	8	0.2	0.3	1.4	218.8547336315718343817841784	218.8547336315718343817841784	0
	9	0.7	0.7	2.1	0.008513384198779161252309201	0.008513384198779161252309201	0
	10	0.6	0.9	1.5	0.146917554419894745113637136	0.146917554419894745113637138	10^{-38}
	11	0.6	0.8	1.7	0.217835777017575017815171303	0.217835777017575017815171299	10^{-37}
	12	0.8	0.5	0.1	0.002022064116690911112100300	0.002022064116690911112100300	0

Tablo I.5. $S_{mn}(\alpha, R)$ fonksiyonunun bazı sembolik deęerleri ($P = \alpha R$)

m	n	$S_{mn}(\alpha, R)$	
1	1	$\frac{\pi}{2}e^{-P}$	
	2	$\frac{\pi}{4\alpha^2}Pe^{-P}$	
	3	$\frac{\pi}{16\alpha^4}P(1+P)e^{-P}$	
	4	$\frac{\pi}{96\alpha^6}P(3+3P+P^2)e^{-P}$	
	5	$\frac{\pi}{768\alpha^8}(15+15P+6P^2+P^3)e^{-P}$	
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^{11}}(945+945P+420P^2+105P^3+15P^4+P^5)e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi R}{92160\alpha^{11}}(945+945P+420P^2+105P^3+15P^4+P^5)e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi R}{1290240\alpha^{13}}(10395+10395P+4725P^2+1260P^3+210P^4+21P^5+P^6)e^{-P}$	
3	2	$\frac{\pi}{4}(2-P)e^{-P}$	
	3	$\frac{\pi}{16\alpha^2}P(3-P)e^{-P}$	
	4	$\frac{\pi}{96\alpha^4}P(3+3P-P^2)e^{-P}$	
	5	$\frac{\pi}{768\alpha^6}(9+9P+2P^2-P^3)e^{-P}$	
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^8}P(45+45P+15P^2-P^4)e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi R}{92160\alpha^9}(315+315P+120P^2+15P^3-3P^4-3P^5)e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi R}{1290240\alpha^{11}}(2835+2835P+1155P^2-210P^3-7P^5-P^6)e^{-P}$	
	5	3	$\frac{\pi}{16}(8-7P+P^2)e^{-P}$
4		$\frac{\pi}{96\alpha^2}(15-9P+P^2)e^{-P}$	
5		$\frac{\pi}{768\alpha^5}(9+9P-3P^2-6P^3+P^4)e^{-P}$	
6		$\frac{\pi}{7680\alpha^6}P(45+45P+5P^2-10P^3+P^4)e^{-P}$	
7		$\frac{\pi R}{92160\alpha^7}(225+225P+60P^2-15P^3-9P^4+5P^5)e^{-P}$	
8		$\frac{\pi R}{1290240\alpha^7}(1575+1575P+525P^2-42P^4-7P^5+P^6)e^{-P}$	
7		4	$\frac{\pi}{96}(48-57P+15P^2-P^3)e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^2}P(105-87P+18P^2-P^3)e^{-P}$
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^4}P(105+105P-105P^2+20P^3-P^4)e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi R}{92160\alpha^5}(315+315P-105P^3+21P^4-P^5)e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^7}(1575+1575P+315P^2-210P^3-84P^4-21P^5-P^6)e^{-P}$	

Tablo I.6. $\bar{S}_{mn}(\alpha, q; R)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri

m	n	α	q	R	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δf
1	1	0.5	0.4	1.4	0.085113570216227072216814526	0.085113570216227072216814528	10^{-35}
	2	0.8	0.1	0.9	0.000718335112667709281328132	0.000718335112667709281328132	0
	3	0.5	0.5	1.3	0.988315211485170608818157172	0.988315211485170608818157172	0
	4	0.4	0.6	2.2	17.60655951797482392677789113	17.60655951797482392677789112	10^{-38}
	5	0.7	0.2	2.4	0.175604243716648517854747771	0.175604243716648517854747771	0
3	3	0.8	0.7	1.5	0.049953616928977565963186638	0.049953616928977565963186638	0
	4	0.3	0.7	0.8	2.346348235730145665248068406	2.346348235730145665248068406	0
	5	0.1	0.1	2.9	5298.339287282737622152560287	5298.339287282737622152560288	10^{-32}
	6	0.7	0.8	1.1	0.179648350408104699567380615	0.179648350408104699567380615	0
	7	0.4	0.5	1.9	67.51655219850039032850594008	67.51655219850039032850594007	10^{-33}
5	5	0.8	0.5	0.1	0.000289522756464302393197632	0.000289522756464302393197632	0
	6	0.2	0.3	1.4	54.70592600627525070104202969	54.70592600627525070104202969	0
	7	0.7	0.7	2.1	0.786372757983655978501027199	0.786372757983655978501027203	10^{-37}
	8	0.6	0.9	1.5	0.474442563893828481198729997	0.474442563893828481198729997	0
	9	0.6	0.8	1.7	0.844046242143419140382031897	0.844046242143419140382031897	0
7	7	0.7	0.2	2.4	0.000012459512403019928470425	0.000012459512403019928470425	0
	8	0.5	0.4	1.4	0.107780575399619324543389171	0.107780575399619324543389172	10^{-34}
	9	0.8	0.7	1.9	0.006760975925588491398696677	0.006760975925588491398696677	0
	10	0.5	0.5	1.3	1.348156531995001083457717731	1.348156531995001083457717703	10^{-39}
	11	0.4	0.6	2.2	133.3341089200395703115662905	133.3341089200395703115662922	10^{-25}
9	9	0.8	0.5	0.1	0.000020470655984887256608228	0.000020470655984887256608228	0
	10	0.2	0.3	1.4	1843.631725398132212621126240	1843.631725398132212621126255	10^{-31}
	11	0.7	0.7	2.1	0.015719860100644249622998151	0.015719860100644249622998152	10^{-32}
	12	0.6	0.9	1.5	0.182395470224234500844296725	0.182395470224234500844296701	10^{-34}
	13	0.6	0.8	1.7	0.305235904124664618808007804	0.305235904124664618808007792	10^{-34}

Tablo I.7. $M_{mn}(\alpha, q)$ fonksiyonunun bazı sembolik deęerleri ($Y = \arctan(q/\alpha)$)

m	n	$M_{mn}(\alpha, q)$
1	0	$\frac{q^2}{2}$
	1	$\frac{1}{2} \ln\left(\frac{q^2 + \alpha^2}{\alpha}\right)$
	2	$\frac{2Y}{\pi\alpha^2}$
	3	$\frac{1}{12} \frac{16Y(q^2 + \alpha^2)^{3/2} + \pi(3\alpha^2q - q^3)}{\pi\alpha^4(q^2 + \alpha^2)^{3/2}}$
	4	$\frac{1}{120} \frac{128Y(q^2 + \alpha^2)^{3/2} + \pi q(45\alpha^4 + 10\alpha^2q^2 - 11q^4)}{\pi\alpha^6(q^2 + \alpha^2)^{5/2}}$
2	1	$q - \alpha Y$
	2	$\frac{1}{2} \frac{Y(q^2 + \alpha^2) - \alpha q}{\alpha(q^2 + \alpha^2)}$
	3	$\frac{1}{8} \frac{Y(q^2 + \alpha^2)^2 + \alpha q(q^2 - \alpha^2)}{\alpha^3(q^2 + \alpha^2)^2}$
	4	$\frac{1}{48} \frac{3Y(q^2 + \alpha^2)^3 + \alpha q(8\alpha^2q^2 - 3\alpha^4 + 3q^4)}{\alpha^5(q^2 + \alpha^2)^3}$
3	1	$\frac{q^2}{2}$
	2	$-\frac{3Y}{\pi}$
	3	$\frac{1}{8} \frac{q(-3\alpha^2 + q^2)}{\alpha^2(q^2 + \alpha^2)^{3/2}}$
	4	$\frac{1}{240} \frac{-64Y(q^2 + \alpha^2)^{5/2} + \pi q(10\alpha^2q^2 - 75\alpha^4 + 13q^4)}{\pi\alpha^4(q^2 + \alpha^2)^{5/2}}$
4	1	$\frac{q^3}{3} - \alpha^2q + \alpha^3Y$
	2	$-\frac{1}{2} \frac{3Y(\alpha q^2 + \alpha^3) - q(2q^2 + 3\alpha^2)}{(q^2 + \alpha^2)}$
	3	$\frac{1}{8} \frac{3Y(q^2 + \alpha^2)^2 - \alpha q(5q^2 + 3\alpha^2)}{\alpha(q^2 + \alpha^2)^2}$
	4	$\frac{1}{48} \frac{3Y(q^2 + \alpha^2)^3 + \alpha q(-8\alpha^2q^2 - 3\alpha^4 + 3q^4)}{\alpha^3(q^2 + \alpha^2)^3}$
5	1	$\frac{1}{2} \left(\frac{q^4}{2} - \alpha^2q^2\right)$
	2	$\frac{1}{4\pi} (15\alpha^2Y + 2q^2\pi)$
	3	$-\frac{5}{32} \frac{16Y(q^2 + \alpha^2)^{3/2} - \pi q(3\alpha^2 + q^2)}{\pi(q^2 + \alpha^2)^{3/2}}$
	4	$\frac{1}{192} \frac{-128Y(q^2 + \alpha^2)^{5/2} - \pi q(50\alpha^2q^2 - 15\alpha^4 - 7q^4)}{\pi\alpha^2(q^2 + \alpha^2)^{5/2}}$

Tablo I.8. $I_n(\alpha, q)$ fonksiyonunun bazı sembolik deęerleri ($Y = \arctan(q/\alpha)$)

n	$I_n(\alpha, q)$
0	q
1	$\frac{Y}{\alpha}$
2	$\frac{(q^2 + \alpha^2)Y + \alpha q}{2\alpha^3(q^2 + \alpha^2)}$
3	$\frac{3(q^2 + \alpha^2)^2 Y + (3\alpha q^3 + 5\alpha^3 q)}{8\alpha^5(q^2 + \alpha^2)}$
4	$\frac{15(q^2 + \alpha^2)^3 + (15\alpha q^5 + 40\alpha^3 q^3 + 33\alpha^5 q)}{48\alpha^7(q^2 + \alpha^2)^3}$
5	$\frac{105(q^2 + \alpha^2)^4 Y + (385\alpha^3 q^5 + 511\alpha^5 q^3 + 279\alpha^7 q)}{384\alpha^9(q^2 + \alpha^2)^4}$

Tablo I.9. $I_{-n}(\alpha, q)$ fonksiyonunun bazı sembolik deęerleri

n	$I_{-n}(\alpha, q)$
0	q
1	$\frac{q^3}{3} + \alpha^2 q$
2	$\frac{q^5}{5} + \frac{2}{3}\alpha^2 q^3 + \alpha^4 q$
3	$\frac{q^7}{7} + \frac{3}{5}\alpha^2 q^5 + \alpha^4 q^3 + \alpha^6 q$
4	$\frac{q^9}{9} + \frac{4}{7}\alpha^2 q^7 + \frac{6}{5}\alpha^4 q^5 + \frac{4}{3}\alpha^6 q^3 + \alpha^8 q$
5	$\frac{q^{11}}{11} + \frac{5}{9}\alpha^2 q^9 + \frac{10}{7}\alpha^4 q^7 + 2\alpha^6 q^5 + \frac{5}{3}\alpha^8 q^3 + \alpha^{10} q$

EK J. $E_{mn}(\alpha)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$E_{mn}(\alpha)$ yardımcı moleküler integrali

$$E_{mn}(\alpha) = \int_0^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n} dp \quad (\text{J.1})$$

şeklinde tanımlanır.

Anolitik Formül

✓ m 'in çift değeri

$E_{mn}(\alpha)$ yardımcı moleküler integralini m 'in çift değerlerinde çözmek için (I.18) denkleminle verilen ifade kullanılırsa

$$E_{mn}(\alpha) = \pi \alpha^{m-2n+1} \sum_{j=0}^{m/2} (-1)^j F_j \left(\frac{m}{2} \right) F_{n+j-\frac{m}{2}-1} (2n+2j-m-2) 2^{m-2n+1-2j} \quad (\text{J.2})$$

ifadesi bulunur.

✓ m 'in tek değeri

$E_{mn}(\alpha)$ yardımcı moleküler integralini m 'nin tek değerlerinde çözmek için (2.72) denkleminle verilen ifade kullanılırsa

$$E_{mn}(\alpha) = \alpha^{m-2n+1} \sum_{k=0}^{\frac{m-1}{2}} (-1)^k F_k \left(\frac{m-1}{2} \right) \frac{1}{(2n-m+2k-1)} \quad (\text{J.3})$$

ifadesi bulunur. $E_{mn}(\alpha)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo J.1'de verilmiştir.

Tekrarlama Bağınıtları

$E_{mn}(\alpha)$ yardımcı moleküler integrali için verilen (J.1) ifadesinin pay ve paydası $p^2 + \alpha^2$ ile çarpılırsa,

$$E_{mn}(\alpha) = E_{m-2,n-1}(\alpha) - \alpha^2 E_{m-2,n}(\alpha) \quad (\text{J.4})$$

ifadesi elde edilir. Bu tekrarlamaya bağıntısında başlangıç değerleri ise

$$E_{0n}(\alpha) = \pi \frac{(2n-2)!}{(n-1)!} (2\alpha)^{1-2n} \quad (\text{J.5})$$

$$E_{1n}(\alpha) = \frac{1}{2(n-1)\alpha^{2n-2}} \quad (\text{J.6})$$

şeklinde verilir.

Tablo J.1. $E_{mn}(\alpha)$ fonksiyonunun bazı sembolik değerleri

m	n	$E_{mn}(\alpha)$	m	n	$E_{mn}(\alpha)$
1	2	$\frac{1}{2\alpha^2}$	4	4	$\frac{\pi}{32\alpha^3}$
	3	$\frac{1}{4\alpha^4}$		5	$\frac{3\pi}{256\alpha^5}$
	4	$\frac{1}{6\alpha^6}$		6	$\frac{3\pi}{512\alpha^7}$
	5	$\frac{1}{8\alpha^8}$	5	5	$\frac{1}{24\alpha^4}$
2	2	$\frac{\pi}{4\alpha}$		6	$\frac{1}{60\alpha^6}$
	3	$\frac{\pi}{16\alpha^3}$		7	$\frac{1}{120\alpha^8}$
	4	$\frac{\pi}{32\alpha^5}$		8	$\frac{1}{210\alpha^{10}}$
	5	$\frac{5\pi}{256\alpha^7}$	6	6	$\frac{3\pi}{512\alpha^5}$
3	3	$\frac{1}{4\alpha^2}$		7	$\frac{5\pi}{2048\alpha^7}$
	4	$\frac{1}{12\alpha^4}$		8	$\frac{5\pi}{4096\alpha^9}$
	5	$\frac{1}{24\alpha^6}$		9	$\frac{45\pi}{65536\alpha^{11}}$

EK K. $G_{mn}(\gamma, Q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$G_{mn}(\gamma, Q)$ yardımcı moleküler integrali

$$G_{mn}(\gamma, Q) = \int_Q^{\infty} \frac{dy}{y^m (y + \gamma)^n} \quad (\text{K.1})$$

şeklinde tanımlanır. Burada $\frac{1}{(y + \gamma)^n}$ ifadesi için

$$\frac{1}{(y + \gamma)^n} = \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{d\gamma^{n-1}} \frac{1}{y + \gamma} \quad (\text{K.2})$$

tanımı kullanılırsa

$$G_{mn}(\gamma, Q) = \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{d\gamma^{n-1}} \frac{1}{(y + \gamma)} G_{m1}(\gamma, Q) \quad (\text{K.3})$$

ifadesi elde edilir. Burada $G_{m1}(\gamma, Q)$ yardımcı moleküler integrali

$$G_{m1}(\gamma, Q) = \int_Q^{\infty} \frac{dy}{y^m (y + \gamma)} \quad (\text{K.4})$$

şeklinde tanımlanır. Analitik bir ifade bulmak için (K.4) ifadesinde $\frac{1}{y^m (y + \gamma)}$ için

$$\frac{1}{y^m (y + \gamma)} = \frac{(-1)^m}{\gamma^m} \frac{1}{(y + \gamma)} - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{m-k}}{\gamma^{m-k}} \frac{1}{y^{k+1}} \quad (\text{K.5})$$

formülünü kullanırsak,

$$G_{m1}(\gamma, Q) = \frac{(-1)^m}{\gamma^m} \ln\left(\frac{Q}{Q + \gamma}\right) - \sum_{k=1}^{m-1} \frac{(-1)^{m-k}}{\gamma^{m-k}} \frac{1}{k Q^k} \quad (\text{K.6})$$

bağıntısını elde ederiz. (K.6) ifadesi (K.3) ifadesinde yerine yazılıp ilgili türevler alınır, $G_{mn}(\gamma, Q)$ yardımcı moleküler integrali için

$$G_{mn}(\gamma, Q) = \frac{(-1)^m}{\gamma^{m+n-1}} F_{m-1}(m+n-2) \ln\left(\frac{Q}{Q + \gamma}\right) - \sum_{k=1}^{m-1} \frac{(-1)^{m-k}}{k} \frac{F_{n-1}(m+n-k-2)}{Q^k \gamma^{m+n-k-1}} + (-1)^m \sum_{s=0}^{n-2} \frac{F_s(m+s-1)}{(n-s-1)(Q + \gamma)^{n-s-1} \gamma^{m+s}} \quad (\text{K.7})$$

analitik bağıntısını buluruz. $G_{mn}(\gamma, Q)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo K.1’de verilmiştir.

Tekrarlama bağıntısı

$G_{mn}(\gamma, Q)$ yardımcı moleküler integrali için verilen (K.1) ifadesinin pay ve paydası $y + \gamma$ ile çarpılırsa,

$$G_{mn}(\gamma, Q) = \frac{1}{\gamma} G_{m,n-1}(\gamma, Q) - G_{m-1,n}(\gamma, Q) \quad (\text{K.8})$$

tekrarlama bağıntısı elde edilir. Bu tekrarlama bağıntısının başlangıç değerleri $G_{1n}(\gamma, Q)$ ve $G_{m1}(\gamma, Q)$ ’dir. $G_{m1}(\gamma, Q)$ ifadesine ait analitik formül denklem (K.6) ile verilmiştir. Başlangıç değerlerinden $G_{1n}(\gamma, Q)$ ise

$$G_{1n}(\gamma, Q) = \int_Q^{\infty} \frac{dy}{y(y+\gamma)^n} \quad (\text{K.9})$$

şeklinde tanımlanan bir yardımcı moleküler integraldir. Bu integrale ait analitik bir ifade bulmak için, integral içerisinde yer alan $\frac{1}{y(y+\gamma)^n}$ ifadesini

$$\frac{1}{y(y+\gamma)^n} = \frac{1}{\gamma^n} \frac{1}{y} - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{F_{k+1}(n)}{\gamma^{k+1}} \frac{y^k}{(y+\gamma)^n} \quad (\text{K.10})$$

ile yeniden tanımlarız. Bu ifade (K.9) ifadesinde yerine yazılıp ilgili türevler alınır, $G_{1n}(\gamma, Q)$ yardımcı moleküler integrali için

$$G_{1n}(\gamma, Q) = \frac{1}{\gamma^n} \ln\left(\frac{Q+\gamma}{Q}\right) - \frac{1}{\gamma^n} \sum_{s=1}^{n-1} (-1)^s \frac{F_s(n-1)}{s} \frac{\gamma^s}{(Q+\gamma)^s} - \sum_{k=0}^{n-2} \frac{F_{k+1}(n)}{\gamma^{k+1}} \sum_{s=0}^k (-1)^s \frac{F_s(k)}{(n-k+s-1)} \frac{\gamma^s}{(Q+\gamma)^{n-k+s-1}} \quad (\text{K.11})$$

analitik bağıntısını buluruz.

Bazı durumlarda $G_{-mn}(\gamma, Q)$ yardımcı moleküler integrali ile karşılaşılır. $G_{-mn}(\gamma, Q)$ yardımcı moleküler integrali

$$G_{-mn}(\gamma, Q) = \int_Q^{\infty} \frac{y^m}{(y + \gamma)^n} dy \quad (\text{K.12})$$

şeklinde tanımlanır. Bu integrale analitik bir ifade bulmak için $y + \gamma = x$ şeklinde değişken değişikliği yapılır ve binom açılımından faydalanılırsa

$$G_{-mn}(\gamma, Q) = \sum_{k=0}^m F_k(m) Q^k g_{m-k,n}(Q + \gamma) \quad (\text{K.13})$$

ifadesi elde edilir. Burada $g_{mn}(z)$ fonksiyonu

$$g_{mn}(z) = \int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x + z)^n} dx \quad (\text{K.14})$$

şeklinde tanımlanır. Bu ifadede pay ve payda $x + z$ ile çarpılırsa

$$g_{mn}(z) = g_{m-1,n-1}(z) - z g_{m-1,n}(z); \quad (n \geq 2) \quad (\text{K.15})$$

ifadesi elde edilir. Bu tekrarlılama bağıntısının başlangıç değeri olan $g_{0n}(z)$ ve $g_{1n}(z)$ için $x + z = y$ değişken değişikliği yapılırsa

$$g_{0n}(z) = \frac{1}{(n-1)z^{n-1}}; \quad (n \geq 2) \quad (\text{K.16})$$

$$g_{1n}(z) = \frac{1}{(n-2)z^{n-2}} - \frac{z}{(n-1)z^{n-1}} \quad (n \geq 3) \quad (\text{K.17})$$

ifadesi bulunur. $G_{-mn}(\gamma, Q)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo K.2'de verilmiştir.

Tablo K.1. $G_{mn}(\gamma, Q)$ fonksiyonunun bazı sembolik deęerleri ($Z = \ln((Q + \gamma)/Q)$)

m	n	$G_{mn}(\gamma, Q)$
0	2	$\frac{1}{(Q + \gamma)}$
	3	$\frac{1}{2(Q + \gamma)^2}$
	4	$\frac{1}{3(Q + \gamma)^3}$
	5	$\frac{1}{4(Q + \gamma)^4}$
1	1	$\frac{Z}{\gamma}$
	2	$\frac{(Q + \gamma)Z - \gamma}{\gamma^2(Q + \gamma)}$
	3	$\frac{2(Q + \gamma)^2 Z - (3\gamma^2 + 2\gamma Q)}{2\gamma^3(Q + \gamma)^2}$
	4	$\frac{6(Q + \gamma)^3 Z - (11\gamma^3 + 15\gamma^2 Q + 6\gamma Q^2)}{6\gamma^4(Q + \gamma)^3}$
2	0	$\frac{1}{Q}$
	1	$-\frac{QZ - \gamma}{\gamma^2 Q}$
	2	$-\frac{2(Q^2 + \gamma)Z - (\gamma^2 + 2\gamma Q)}{\gamma^3 Q(Q + \gamma)}$
	3	$-\frac{6Q(Q + \gamma)^2 Z - (2\gamma^3 + 9\gamma^2 Q + 6\gamma Q^2)}{2\gamma^4 Q(Q + \gamma)^2}$
4	$-\frac{Q(Q + \gamma)^3 Z - (3\gamma^4 + 22\gamma^3 Q + 30\gamma^2 Q^2 + 12\gamma Q^3)}{3\gamma^5 Q(Q + \gamma)^3}$	
3	0	$\frac{1}{2Q^2}$
	1	$\frac{2Q^2 Z + (\gamma^2 - 2\gamma Q)}{2\gamma^3 Q^2}$
	2	$\frac{6Q^2(Q + \gamma)Z + (\gamma^3 - 3\gamma^2 Q - 6\gamma Q^2)}{2\gamma^4 Q^2(Q + \gamma)}$
	3	$\frac{12Q^2(Q + \gamma)^2 Z + (\gamma^4 - 4\gamma^3 Q - 18\gamma^2 Q^2 - 12\gamma Q^3)}{2\gamma^5 Q^2(Q + \gamma)^2}$
4	$\frac{60Q^2(Q + \gamma)^3 Z + (3\gamma^5 - 15\gamma^4 Q - 110\gamma^3 Q^2 - 150\gamma^2 Q^3 - 60\gamma Q^4)}{6\gamma^6 Q^2(Q + \gamma)^3}$	

Tablo K.2. $G_{-mn}(\gamma, Q)$ fonksiyonunun bazı sembolik deęerleri

m	n	$G_{-mn}(\gamma, Q)$
0	2	$\frac{1}{(\gamma + Q)}$
	3	$\frac{1}{2(\gamma + Q)^2}$
	4	$\frac{1}{3(\gamma + Q)^3}$
	5	$\frac{1}{4(\gamma + Q)^4}$
1	3	$\frac{\gamma + 2Q}{2(\gamma + Q)^2}$
	4	$\frac{\gamma + 3Q}{6(\gamma + Q)^3}$
	5	$\frac{\gamma + 4Q}{12(\gamma + Q)^4}$
	6	$\frac{\gamma + 5Q}{20(\gamma + Q)^5}$
2	4	$\frac{\gamma^2 + 3\gamma Q + 3Q^2}{3(\gamma + Q)^3}$
	5	$\frac{\gamma^2 + 4\gamma Q + 6Q^2}{12(\gamma + Q)^4}$
	6	$\frac{\gamma^2 + 5\gamma Q + 10Q^2}{30(\gamma + Q)^5}$
	7	$\frac{\gamma^2 + 6\gamma Q + 15Q^2}{60(\gamma + Q)^6}$
3	5	$\frac{\gamma^3 + 4\gamma^2 Q + 6\gamma Q^2 + 4Q^3}{4(\gamma + Q)^4}$
	6	$\frac{\gamma^3 + 5\gamma^2 Q + 10\gamma Q^2 + 10Q^3}{20(\gamma + Q)^5}$
	7	$\frac{\gamma^3 + 6\gamma^2 Q + 15\gamma Q^2 + 20Q^3}{60(\gamma + Q)^6}$
	8	$\frac{\gamma^3 + 7\gamma^2 Q + 21\gamma Q^2 + 35Q^3}{140(\gamma + Q)^7}$

EK L. $J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$ yardımcı moleküler integrali

$$J_{m'}^m(\alpha, \beta; q) = \int_q^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^{n'}} dp \quad (\text{L.1})$$

şeklinde tanımlanır.

✓ m 'nin çift değerleri

$J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$ yardımcı moleküler integrali içinde denklem (2.25) kullanılırsa

$$J_{m'}^m(\alpha, \beta; q) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m's}^s(\alpha, \beta) F_{m, s+1}(\alpha, q) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{m'n}^{s'}(\beta, \alpha) F_{m, s'+1}(\beta, q) \quad (\text{L.2})$$

bağıntısı elde edilir.

✓ m 'nin tek değerleri

Denklem (2.72) denklem (L.1)'de kullanılırsa,

$$\begin{aligned} J_{m'}^m(\alpha, \beta; q) &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\frac{m-1}{2}} (-1)^k F_k \left(\frac{m-1}{2} \right) \alpha^{2k} G_{n - \left(\frac{m-1}{2} \right) + k, n'}(\beta^2 - \alpha^2, q^2 + \alpha^2); \beta > \alpha \text{ ise} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\frac{m-1}{2}} (-1)^k F_k \left(\frac{m-1}{2} \right) \beta^{2k} G_{n' - \left(\frac{m-1}{2} \right) + k, n}(\alpha^2 - \beta^2, q^2 + \beta^2); \beta < \alpha \text{ ise} \end{aligned} \quad (\text{L.3})$$

ifadeleri elde edilir. Burada $G_{mn}(\gamma, Q)$ fonksiyonu EK K'de incelenmiş, analitik ve tekrarlama bağıntıları verilmiştir. $J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik ve nümerik değerleri ise Tablo L.1 ve Tablo L.2'de verilmiştir.

$\alpha = \beta$ özel durumu için $J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$ yardımcı moleküler integrali

$$J_{m'}^m(\alpha, \alpha; q) = F_{m, n+n'}(\alpha, q) \quad (\text{L.4})$$

ifadesine indirgenir. İfadede yer alan $F_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali EK M'de incelenmiş, analitik ve tekrarlama bağıntıları verilmiştir.

Tekrarlama Bağıntıları

$J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$ yardımcı moleküler integrali için verilen (L.1) ifadesinin pay ve paydası $p^2 + \alpha^2$ ile çarpılırsa,

$$J_{m'}^m(\alpha, \beta; q) = J_{n+1, n'}^{m+2}(\alpha, \beta; q) + \alpha^2 J_{n+1, n'}^m(\alpha, \beta; q) \quad (\text{L.5})$$

ifadesi elde edilir. Bu tekrarlama bağıntısında başlangıç değeri $J_{m'}^0(\alpha, \beta; q)$ ise

$$J_{m'}^0(\alpha, \beta; q) = \int_q^\infty \frac{dp}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^{n'}} \quad (\text{L.6})$$

şeklinde verilir. Bu yardımcı moleküler integrali içinde denklem (2.25) kullanılırsa

$$J_{m'}^0(\alpha, \beta; q) = \sum_{s=0}^{n-1} \eta_{m'}^s(\alpha, \beta) F_{0, s+1}(\alpha, q) + \sum_{s'=0}^{n'-1} \eta_{n'}^{s'}(\beta, \alpha) F_{0, s'+1}(\beta, q) \quad (\text{L.7})$$

bağıntısı elde edilir. Burada $F_{m'}(\alpha, q)$ fonksiyonu EK M'de incelenmiş, analitik ve tekrarlama bağıntıları verilmiştir.

Tablo L.1. $J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$ fonksiyonunun bazı sembolik deęerleri

$$|\gamma = (\alpha^2 - \beta^2), Q = (q^2 + \beta^2)|$$

n	n'	m	$J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$
1	1	0	$\frac{-F_{01}(\alpha, q) + F_{01}(\beta, q)}{\gamma}$
1	2	0	$\frac{F_{01}(\alpha, q) - F_{01}(\beta, q) + \gamma F_{02}(\beta, q)}{\gamma^2}$
1	2	1	$\frac{1}{2}G_{21}(\gamma, Q)$
1	2	2	$\frac{F_{21}(\alpha, q) - F_{21}(\beta, q) + \gamma F_{22}(\beta, q)}{\gamma^2}$
1	2	4	$\frac{F_{41}(\alpha, q) - F_{41}(\beta, q) + \gamma F_{42}(\beta, q)}{\gamma^2}$
2	1	2	$\frac{-F_{21}(\alpha, q) - F_{21}(\beta, q) + \gamma F_{22}(\alpha, q)}{\gamma^2}$
2	1	3	$\frac{1}{2}[G_{02}(\gamma, Q) - \beta^2 G_{12}(\gamma, Q)]$
2	1	4	$\frac{-F_{41}(\alpha, q) - F_{41}(\beta, q) + \gamma F_{42}(\alpha, q)}{\gamma^2}$
2	2	2	$\frac{2[F_{21}(\alpha, q) - F_{21}(\beta, q)] + \gamma[F_{22}(\alpha, q) + F_{22}(\beta, q)]}{\gamma^3}$
2	2	1	$\frac{1}{2}G_{22}(\gamma, Q)$
2	2	3	$\frac{1}{2}[G_{12}(\gamma, Q) - \beta^2 G_{22}(\gamma, Q)]$
2	3	3	$\frac{1}{2}[G_{22}(\gamma, Q) - \beta^2 G_{32}(\gamma, Q)]$
2	3	5	$\frac{1}{2}[G_{12}(\gamma, Q) - \beta^4 G_{32}(\gamma, Q)] - \beta^2 G_{22}(\gamma, Q)$
2	3	7	$\frac{1}{2}[G_{02}(\gamma, Q) - \beta^6 G_{32}(\gamma, Q)] + \frac{3}{2}[\beta^4 G_{22}(\gamma, Q) - \beta^2 G_{12}(\gamma, Q)]$
3	1	1	$\frac{1}{2}G_{13}(\gamma, Q)$
3	1	2	$\frac{F_{21}(\alpha, q) + \gamma F_{22}(\alpha, q) + W^2 F_{23}(\alpha, q) - F_{21}(\beta, q)}{\gamma^3}$
3	1	3	$\frac{1}{2}[G_{03}(\gamma, Q) - \beta^2 G_{13}(\gamma, Q)]$
3	2	1	$\frac{1}{2}G_{23}(\gamma, Q)$

Tablo L.2. $J_{m'}^m(\alpha, \beta; q)$ fonksiyonunun bazı nümerik değerleri

n	n'	m	α	β	q	Bu Çalışma	Nümerik (Maple)	Δf
1	1	0	0.1	2.5	2.2	0.01836157112880064060354024676661	0.01836157112880064060354024676661	0
2	3	5	6.4	5.8	1.5	0.00003128393745619951001406742983	0.00003128393745619951001406742983	0
5	1	4	4.1	7.7	1.5	3.86106185301245756294285209299E-7	3.86106185301245756294285209299E-7	0
4	6	7	1.5	0.7	1.8	0.00000573505451184082045004274443	0.00000573505451184082045004274443	0
6	8	6	4	0.3	6.9	2.3061799934171229970177729913E-20	2.3061799934171229970177729913E-20	0
3	5	9	8.4	6.8	2.4	2.89038508244063797662181663283E-8	2.89038508244063797662181663283E-8	0
7	9	8	4	2.4	1.9	1.5806072327361818140360533786E-16	1.5806072327361818140360533786E-16	0
8	7	11	6.7	2.2	1.2	5.8905221788021128102958681224E-17	5.8905221788021128102958681224E-17	0
5	6	10	9.5	4.5	1.3	2.9697783496553631296761796262E-13	2.9697783496553631296761796262E-13	0
9	4	13	0.7	0.7	2.9	1.25559832795070875433748708565E-7	1.25559832795070875433748708565E-7	0
10	6	10	3.8	0.5	1.5	5.3084575760945234712814942049E-14	5.3084575760945234712814942049E-14	0

EK M. $F_{mn}(\alpha, q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$F_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali

$$F_{mn}(\alpha, q) = \int_q^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + \alpha^2)^n} dx \quad (\text{M.1})$$

şeklinde tanımlanır.

✓ m 'nin çift değerleri

$F_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali içinde denklem (I.18) kullanılırsa,

$$F_{mn}(\alpha, q) = \sum_{j=0}^{m/2} (-1)^j F_j(m/2) \alpha^{2j} F_{0, n-(m/2)+j}(\alpha, q) \quad (\text{M.2})$$

elde edilir. $F_{0s}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali

$$F_{0s}(\alpha, q) = \int_q^{\infty} \frac{dx}{(x^2 + \alpha^2)^n} \quad (\text{M.3})$$

şeklinde tanımlanır. $x = \alpha \tan \theta$ değişken değişikliği yapılırsa

$$F_{0s}(\alpha, q) = \alpha^{1-2s} \int_Q^{\frac{\pi}{2}} \cos^{2(s-1)} \theta d\theta \quad (\text{M.4})$$

ifadesi elde edilir. Bu ifadedeki integral için

$$\int \cos^{2n} \theta d\theta = \frac{F_n(2n)\theta}{2n} + \frac{1}{2^{2n-1}} \sum_{k=0}^{n-1} F_k(2n) \frac{\sin(2n-2k)\theta}{2n-2k} \quad (\text{M.5})$$

tanımı (Jeffrey ve Dai, 1995) kullanılırsa

$$F_{0s}(\alpha, q) = \frac{\alpha^{1-2n}}{(2n-2)} F_{n-1}(2n-2) \left(\frac{\pi}{2} - Q \right) - \frac{1}{2^{2n-2}} \sum_{k=0}^{n-2} \frac{F_k(2n-2)}{(n-k-1)} \sum_{u=0}^{n-k-1} (-1)^u F_{2u+1}(2n-2k-2) \frac{\alpha^{2n-2k-2u-3} q^{2u+1}}{(q^2 + \alpha^2)^{n-k-1}} \quad (\text{M.6})$$

elde edilir. Burada elde edilen ifade (M.2)'de yerine yazılırsa ($s = n - (m/2) + j$),

$F_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali için

$$F_{mn}(\alpha, q) = \sum_{j=0}^{m/2} (-1)^j F_j(m/2) \alpha^{1-2n+m} \left\{ \frac{F_{n-(m/2)+j-1}(N)}{2^N} \left(\frac{\pi}{2} - Q \right) - \frac{1}{2^{N-1}} \sum_{k=0}^{n-(m/2)+j-2} \frac{F_k(N)}{(N-2k)} \sum_{u=0}^{E\left(\frac{N-2k-1}{2}\right)} (-1)^u F_{2u+1}(N-2k) \frac{\alpha^{N-2k-2u-1} q^{2u+1}}{(q^2 + \alpha^2)^{n-\frac{m}{2}+j-k-1}} \right\} \quad (\text{M.7})$$

bağıntısı elde edilir. Burada

$$N = 2n - m + 2j - 2; \quad Q = \arctan\left(\frac{q}{\alpha}\right) \quad (\text{M.8})$$

ile tanımlanır.

✓ ***m*'nin tek değerleri**

$F_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali içinde denklem (2.72) kullanılırsa,

$$F_{mn}(\alpha, q) = \sum_{j=0}^{\frac{m-1}{2}} (-1)^j F_j\left(\frac{m-1}{2}\right) \alpha^{2j} F_{1, n - ((m-1)/2) + j}(\alpha, q) \quad (\text{M.9})$$

elde edilir. $F_{1s}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali

$$F_{1s}(\alpha, q) = \int_q^{\infty} \frac{x}{(x^2 + \alpha^2)^s} dx \quad (\text{M.10})$$

şeklinde tanımlanır. $x^2 + \alpha^2 = y$ değişken değişikliği yapılırsa

$$F_{1s}(\alpha, q) = \frac{1}{2(s-1)(q^2 + \alpha^2)^{s-1}} \quad (\text{M.11})$$

ifadesi elde edilir. Burada elde edilen ifade (M.9)'da yerine yazılırsa ($s \rightarrow n - (m-1/2) + j$), $F_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali için

$$F_{mn}(\alpha, q) = \frac{(-1)^{\frac{m-1}{2}}}{2} \sum_{k=0}^{\frac{m-1}{2}} (-1)^k F_k\left(\frac{m-1}{2}\right) \frac{\alpha^{m-2k-1}}{n-k-1} (q^2 + \alpha^2)^{k-n+1} \quad (\text{M.12})$$

ifadesi elde edilir.

$F_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integralinin bazı sembolik değerleri Tablo M.1’de verilmiştir.

Tekrarlama Bağlıları

$F_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali için verilen (M.1) ifadesinin pay ve paydası $p^2 + \alpha^2$ ile çarpılırsa,

$$F_{mn}(\alpha, q) = F_{m+2, n+1}(\alpha, q) + \alpha^2 F_{m, n+1}(\alpha, q) \quad (\text{M.13})$$

ifadesi elde edilir. Bu tekrarlama bağıntısında yeralan başlangıç değerleri $F_{0s}(\alpha, q)$ ve $F_{1s}(\alpha, q)$ ise sırasıyla denklem (M.6) ve denklem (M.11)’de verilmiştir.

Tablo M.1. $F_{mn}(\alpha, q)$ fonksiyonunun bazı sembolik deęerleri ($Y = \arctan(q/\alpha)$)

m	n	$F_{mn}(\alpha, q)$
1	2	$\frac{1}{2(q^2 + \alpha^2)}$
	3	$\frac{1}{4(q^2 + \alpha^2)^2}$
	4	$\frac{1}{6(q^2 + \alpha^2)^3}$
	5	$\frac{1}{8(q^2 + \alpha^2)^4}$
2	2	$\frac{1}{4} \frac{(q^2 + \alpha^2)(\pi - 2Y) + 2\alpha q}{\alpha(q^2 + \alpha^2)}$
	3	$\frac{1}{16} \frac{(q^2 + \alpha^2)^2(\pi - 2Y) + 2\alpha q(\alpha^2 - q^2)}{\alpha^3(q^2 + \alpha^2)^2}$
	4	$\frac{1}{96} \frac{3\pi(q^2 + \alpha^2)^3 - 6Y(q^2 + \alpha^2)^3 - \alpha q(16\alpha^2 q^2 - 6\alpha^4 + 6q^4)}{\alpha^5(q^2 + \alpha^2)^3}$
	5	$\frac{1}{768} \frac{15\pi(q^2 + \alpha^2)^4 - 30Y(q^2 + \alpha^2)^4 - \alpha q(146\alpha^4 q^2 + 110\alpha^2 q^4 - 30\alpha^6 + 30q^6)}{\alpha^5(q^2 + \alpha^2)^3}$
3	3	$\frac{\alpha^2 + 2q^2}{4(q^2 + \alpha^2)^2}$
	4	$\frac{\alpha^2 + 3q^2}{12(q^2 + \alpha^2)^3}$
	5	$\frac{\alpha^2 + 4q^2}{24(q^2 + \alpha^2)^4}$
4	4	$\frac{1}{96} \frac{3\pi(q^2 + \alpha^2)^3 - 6Y(q^2 + \alpha^2)^3 - \alpha q(-16\alpha^2 q^2 - 6\alpha^4 + 6q^4)}{\alpha^3(q^2 + \alpha^2)^3}$
	5	$\frac{1}{256} \frac{3\pi(q^2 + \alpha^2)^4 - 6Y(q^2 + \alpha^2)^4 - \alpha q(-22\alpha^4 q^2 + 22\alpha^2 q^4 - 30\alpha^6 + 30q^6)}{\alpha^5(q^2 + \alpha^2)^3}$
5	5	$\frac{1}{24} \frac{\alpha^4 + 4\alpha^2 q^2 + 6q^4}{(q^2 + \alpha^2)^4}$
	6	$\frac{1}{60} \frac{\alpha^4 + 5\alpha^2 q^2 + 10q^4}{(q^2 + \alpha^2)^5}$
	7	$\frac{1}{120} \frac{\alpha^4 + 6\alpha^2 q^2 + 15q^4}{(q^2 + \alpha^2)^6}$

ÖZGEÇMİŞ

04.07.1989 Bayburt doğumludur. İlköğrenimini İstanbul Avcılar Mareşal Fevzi Çakmak İlköğretim Okulun'da okudu. Lise öğrenimini Avcılar 50.Yıl İnsa Lisesi'nde tamamladı. 2008 yılında Rize Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nü kazandı. 2012 yılında bu bölümden bölüm ikincisi olarak mezun oldu. Aynı yıl Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik ana bilim dalında yüksek lisans programına kayıt yaptırdı. Halen yüksek lisans eğitimine devam etmektedir.