

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

**TAM VE KESİRLİ İNDİSLİ COULOMB-YUKAWA BENZERİ  
POTANSİYELLERİ İÇEREN ATOMİK ÇEKİRDEK ÇEKİM  
İNTEGRALLERİNDE ÜSTEL TİPLİ STANDART KONVENSİYON BAZ  
FONKSİYONLARININ KULLANILMASI**

**EMEL YAPAR**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**YARD. DOÇ. DR. NURŞEN SEÇKİN GÖRGÜN**

**EDİRNE, 2014**

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

Prof. Dr. Mustafa ÖZCAN  
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Bu tezin YÜKSEK LİSANS tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

Prof. Dr. Serap ŞENTÜRK DALGIÇ  
Anabilim Dalı Başkanı

Bu tez tarafımda okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

Yard. Doç. Dr. Nurşen SEÇKİN GÖRGÜN  
Tez Danışmanı

Bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından FİZİK Anabilim Dalında bir YÜKSEK LİSANS tezi olarak oy birliği ile kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Prof. Dr. Mustafa ÖZCAN

Yard. Doç. Dr. Nurşen SEÇKİN GÖRGÜN

Yard. Doç. Dr. Mehmet SEZGİN

Tarih: 20/06/2014

**T.Ü. FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**FİZİK YÜKSEK LİSANS PROGRAMI**  
**DOĞRULUK BEYANI**

İlgili tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını ve kullanılan tüm literatür bilgilerinin kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını beyan ederim.

20/06/2014

Emel YAPAR

Yüksek Lisans Tezi

Tam ve Kesirli İndisli Coulomb-Yukawa Benzeri Potansiyelleri İçeren Atomik Çekirdek Çekim İntegrallerinde Üstel Tipli Standart Konvensiyon Baz Fonksiyonlarının Kullanılması

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

## ÖZET

Bu çalışmada, standart konvensiyonda eksponansiyel tip baz fonksiyonları kullanılarak Hartree-Fock-Roothaan (HFR) denklemlerinde ortaya çıkan tam ve kesirli indisli Coulomb-Yukawa benzeri potansiyelleri içeren atomik çekirdek çekim integralleri hesaplandı. Bu integrallerin hesaplanmasında, öz-sürtünme kuantum sayıları için kesirli  $\alpha^*$  ( $-\infty < \alpha^* < 3$ ) ve tam  $\alpha$  ( $\alpha^* = \alpha, -\infty < \alpha \leq 2$ ) ile  $\psi^{(\alpha^*)}$  eksponansiyel tip tam ortonormal ( $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs) baz kümeleri yardımı ile Guseinov tarafından önerilen tek bölgeli toplama teoremleri tam ve kesirli  $\chi$  –Slater tipi orbitaller (sırasıyla  $\chi$  –ISTOs ve  $\chi$  –NISTOs) için kullanıldı. Bu integrallerde kullanılacak serinin yakınsaklığı kuantum sayılarının, potansiyel parametrelerinin ve orbitallerin konumunun keyfi değerleri göz önüne alınarak test edildi.

Yıl :2014

Sayfa Sayısı :62

Anahtar Kelimeler :Üstel tipli orbitaller, Çekirdek çekim integralleri, Öz-sürtünme kuantum sayısı, Tek bölgeli toplama teoremleri

Thesis of Master

Use of exponential type basis functions in standard convention in atomic nuclear attraction integrals containing Coulomb-Yukawa like potentials with integer and noninteger indices

Department of Physics, Faculty of Sciences, Trakya University

### ABSTRACT

In this study, atomic nuclear attraction integrals containing Coulomb-Yukawa like potentials with integer and non integer indices appearing in the Hartree-Fock-Roothaan (HFR) equations have been evaluated using exponential type basis functions in standard convention. In evaluation of these integrals are used one-range addition theorems for integer and noninteger  $\chi$ -Slater type orbitals (respectively  $\chi$ -ISTOs and  $\chi$ -NISTOs) established by Guseinov with the help of complete orthonormal sets of  $\psi^{(\alpha^*)}$ -exponential type orbitals ( $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs) with noninteger  $\alpha^*$  ( $-\infty < \alpha^* < 3$ ) and integer  $\alpha$  ( $\alpha^* = \alpha, -\infty < \alpha \leq 2$ ) for self-frictional quantum numbers. The convergence of series values of series expansion formulae of these integrals is tested by calculating concrete cases for arbitrary values of potential parameters, quantum numbers and locations of orbitals.

Year :2014

Number of pages :62

KeyWords :Exponential type orbitals, Nuclear attractions integrals, Self-frictional quantum number, One-range addition theorems

## TEŐEKKÜR

Tez alıőmam boyunca desteęini benden hibir zaman esirgemeyen, öęrenmeyi ve öęretmeyi bırakmayan deęerli danıőmanım Yrd. Do. Dr. Nurően SEKİN GÖRGÜN'e, engin bilgi ve tecrübeleriyle bizlere yol gösteren sayın Prof. Dr. İsrail HÜSEYİN (GUSEİNOV)'a, sadece ocukluęumda deęil, yetiőkin yaőamım boyunca da her zaman yolumu aydınlattıęı ve bana ok iyi bir örnek olduęu iin babam Selim YAPAR'a, canımdan ok sevdięim annem Hacer YAPAR'a, her zaman yanımda oldukları ve beni daima gözü kapalı destekledikleri iin aęabeylerim Ensari ve Ender YAPAR'a teőekkürü bir bor bilirim.

Emel YAPAR

# İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY SAYFASI.....	ii
TEZ DOĞRULUK BEYANI.....	iii
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	viii
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	x
TABLolar LİSTESİ.....	xii
<b>BÖLÜM I-GİRİŞ.....</b>	<b>1</b>
<b>BÖLÜM II-GENEL BİLGİLER</b>	
2.1. Önceki Çalışmalar.....	5
2.2. Hartree-Fock Yöntemi.....	6
2.3. Hartree-Fock-Roothaan Yöntemi.....	9
2.4. Atomik Baz Fonksiyonları.....	11
<b>BÖLÜM III-MATERYAL VE METOD</b>	
3.1. Tam Ortonormal Standart $\psi^{(\alpha^*)}$ - Üstel Tipli Orbitaler.....	15
3.2. Tek Bölge Toplama Teoremleri.....	19
3.3. Coulomb-Yukawa Benzeri Potansiyelleri İçeren Çekirdek Çekim İntegrallerinin Hesabı.....	22
3.3.1. Analitik Çözüm ( $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETO üzerinden).....	23
3.3.2 Analitik Çözüm (STOs'a geçiş).....	25
3.3.3 Seri Çözüm ( $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETO üzerinden).....	27
3.3.4 Seri Çözüm (STOs'a geçiş).....	29
<b>SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....</b>	<b>33</b>
<b>KAYNAKLAR.....</b>	<b>57</b>
<b>EKLER.....</b>	<b>60</b>
<b>ÖZGEÇMİŞ.....</b>	<b>62</b>

## SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılan simgeler ve kısaltmalar aşağıda açıklamaları ile birlikte verilmiştir.

<u>Simge</u>	<u>Açıklamalar</u>
$n$	Baş kuantum sayısı
$l$	Yörüngesel kuantum sayısı
$m$	Manyetik kuantum sayısı
$\zeta$	Perdelenme sabiti
LCAO	Atomik orbitallerin çizgisel birleşimi
GTO	Gaussian tip orbital
STO	Slater tip orbital
ETO	Üstel tip orbital
HF	Hartree-Fock
HFR	Hartree-Fock-Roothaan
SCF	Öz Uyumlu Alan
$S_{lm}(\theta, \varphi)$	Reel küresel harmonikler
$Y_{lm}(\theta, \varphi)$	Kompleks küresel harmonikler
${}_1F_1(\eta; \gamma; x)$	Konfluent hipergeometrik fonksiyon
$\Gamma(x)$	Gamma fonksiyonu
$L^{(p^*)} - GLPs$	Genelleştirilmiş Laguerre Polinomu
$\mathcal{L}_{nl}^{(\alpha^*)} - MLPs$	Modifiye Laguerre Polinomu
$\chi$ -ISTOs	Tam n baş kuantum sayılı STO
$\chi$ -NISTOs	Kesirli n baş kuantum sayılı STO
$\hat{F}$	Fock işlemcisi
$S_{pq}$	Örtme integrali



$C^{v|\sigma|}(lm, l' m')$

$J_{kk}^{ii}$

$K_{kk}^{ii}$

$C_{qi}$

Genelleştirilmiş Gaunt fonksiyonu

Coulomb integralı

Değiş-tokuş integralı

Açılım katsayıları

## ŞEKİLLER LİSTESİ

- Şekil 1** Kuantum öz-sürtünme teorisine göre elektronların etkisinde kaldığı nükleer çekim ( $\vec{F}_N$ ) ve öz-sürtünme ( $\vec{F}_L$ ) kuvvetleri.....17
- Şekil 2**  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $K_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2 0}(2.3,4.6; 1.2)$  nin  $\alpha^* = -1,7$  değerine göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması.....49
- Şekil 3**  $\Psi^{(\alpha^*)}$  ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $K_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2 0}(2.3,4.6; 1.2)$  nin  $\alpha^* = -0,7$  değerine göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması.....50
- Şekil 4**  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $K_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2 0}(2.3,4.6; 1.2)$  nin  $\alpha^* = -2,7$  değerine göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması.....51
- Şekil 5**  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $K_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2 0}(2.3,4.6; 1.2)$  nin  $\alpha^* = 0,7$  değerine göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması.....52
- Şekil 6**  $\chi$  –ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $I_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2 0}(2.3,4.6; 1.2)$  nin  $\alpha^* = -1,7$  değerine göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması.....53
- Şekil 7**  $\chi$  –ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $I_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2 0}(2.3,4.6; 1.2)$  nin  $\alpha^* = -0,7$  değerine göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması.....54

**Şekil 8**  $\chi$  –ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $I_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2 0}(2.3,4.6; 1.2)$  nin  $\alpha^* = -2,7$  değerine göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması.....55

**Şekil 9**  $\chi$  –ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $I_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2 0}(2.3,4.6; 1.2)$  nin  $\alpha^* = 0,7$  değerlerine göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması.....56

## TABLolar LİSTESİ

- Tablo-1**  $\alpha^* = 2.6, 1.7, 0.3$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....35
- Tablo-2**  $\alpha^* = -0.8, -1.7, -2.9$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....36
- Tablo-3**  $\alpha^* = 1.9, 2.8, -3.2$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....37
- Tablo-4**  $\alpha^* = 0.7, -2.1, -4.1$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....38
- Tablo-5**  $\alpha^* = \alpha = 2, 1, 0$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....39
- Tablo-6**  $\alpha^* = \alpha = -1, -2, -3$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....40
- Tablo-7**  $\alpha^* = \alpha = -4, -6, -7, -8$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....41
- Tablo-8**  $\alpha^* = 2.6, 1.7, 0.3$  için  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $I_{nlm, n' l' m'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının karşılaştırılması (a. u. de).....42

<b>Tablo-9</b> $\alpha^* = -0.8, -1.7, -2.9$ için $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ hesaplama metotlarının karşılaştırılması (a. u. de).....	43
<b>Tablo-10</b> $\alpha^* = -3.2, 2.8, 1.9$ için $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ hesaplama metotlarının karşılaştırılması (a. u. de).....	44
<b>Tablo-11</b> $\alpha^* = 0.7, -2.1, -4.1$ için $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ hesaplama metotlarının karşılaştırılması (a. u. de).....	45
<b>Tablo-12</b> $\alpha^* = \alpha = 2, 1, 0$ için $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....	46
<b>Tablo-13</b> $\alpha^* = \alpha = -1, -2, -3$ için $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....	47
<b>Tablo-14</b> $\alpha^* = \alpha = -4, -6, -7, -8$ için $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de).....	48

## BÖLÜM-I

### GİRİŞ

17.yüzyılda Newton tarafından '**Philosophiae Naturalis Principia Mathematica**' (1687; **Doğa Felsefesinin Matematik İlkeleri**) adlı eserin ortaya koyulmasıyla klasik fiziğin temelleri atılmıştır. Newton bu eserinde Kopernik, Kepler, Descartes ve Galileo'nun çalışmalarından faydalanmış ve onların bu çalışmalarını evrenselleştirmiştir. Klasik fizik, dönemine göre kusursuz sayılmıştır. Ancak, ondokuzuncu yüzyılın sonları ile yirminci yüzyılın başlarına doğru birçok olay klasik fizikte büyük yenilikler yapılmasının gerekliliğini ortaya koymuştur. Kuantum mekaniğinin keşfiyle klasik fizikte çözülmesi mümkün olmayan problemlerin çözümüne dair yapılan çalışmalar birçok yeniliğe yol açmıştır. Yapılan yeni buluşlar sayesinde tüm temel bilimlerde gözle görülür ilerlemeler olmuştur.

Atom ve moleküller kuantum mekaniksel sistemler olduğu için, yapıları hakkında teorik olarak bilgi sahibi olabilmek, sisteme ait özdeğer denklemlerinin çözülmesi ile mümkündür. Kuantum mekaniğine göre sistemin durumu Schrödinger denkleminin çözümünden gelen  $\Psi_{nlm}$  dalga fonksiyonuyla belirlenir.

Schrödinger denklemini Hidrojen ve Hidrojene benzer iyonik yapılar dışındaki karmaşık sistemler için bilgisayar teknolojisindeki ve uygulamalı matematikteki tüm gelişmelere rağmen henüz analitik olarak çözmek mümkün değildir. Tam çözümler yerine bir takım yaklaşıklıklar altında Schrödinger denklemine çözümler aranmaktadır.

Elektronik yapı hesaplamalarında kullanılan kuantum kimyasal yöntemleri yarı deneysel ve kuramsal olarak iki gruba ayırmak mümkündür. Yarı deneysel yöntemlerde bazı parametreler deneysel verilerden elde edilir ve buna dayalı uygulamalar yapılır. Bu yöntem

tam kuramsal hesabı çok uzun süren veya yapılamayan büyük moleküllerin incelenmesinde sıklıkla kullanılır. Yarı deneysel yöntemlerin amacı Schrödinger denkleminin tam çözümüne en yakın sonuçların elde edilebileceği bir model oluşturmak ve modeli uygun matematiksel denklemlerle ifade etmektir. İkinci grup ise, kuramsal yöntem olarak bilinen *ab-initio* yöntemidir. *Ab-initio* yönteminde hesap yapılan molekül için ışık hızı, Planck sabiti, elektronların kütlesi gibi temel fiziksel sabitler hariç deneysel verilerden faydalanılmadan hesaplamalar yapılabilir. Bu hesaplamalar genel olarak çok iyi nitel sonuçlar verir ve molekül küçüldükçe nitel sonuçların kesinliği artar. Kuramsal yöntemde kullanılan en yaygın yöntemlerden biri Hartree-Fock-Roothaan (HFR) yöntemidir [1, 2, 3]. Bu yöntem atom-molekül sisteminin elektron yapısına uygulanır. HFR günümüzde çok elektronlu atom, molekül ve çekirdek sistemlerinin relativistik ve relativistik olmayan fiziksel özelliklerini belirlemede kullanılır [4, 5].

HFR teorisine göre, atomik veya moleküler sistemlerin determinant dalga fonksiyonları bir ve iki elektronlu çok-merkezli integraller vasıtasıyla ifade edilir. Bu integraller *ab initio* ve yarı deneysel metotların temelini oluşturur. Çok-merkezli integrallerin analitik ifadelerinin her zaman çözümü olmayabilir. Bu konudaki esas zorluk bu integrallerin çözümünün yapılabileceği algoritmaların geliştirilmesidir.

Bir ve iki elektronlu çok merkezli integrallerin hesaplama sonuçlarının güvenilirliği elektronik yapı hesaplamalarında kullanılan fonksiyonların baz kümelerine bağlıdır. Bundan dolayı bu baz fonksiyonlarının seçimi oldukça önemlidir.

Atomik ve moleküler yapı hesaplamalarında kullanılan baz fonksiyonları radyal bölümünde  $e^{-\zeta r^2}$  şeklinde ifade edilen Gaussian tipi orbitaller (GTOs) [6] ve  $e^{-\zeta r}$  şeklinde bir çarpan içeren eksponansiyel tip orbitaller (ETOs) olarak ikiye ayrılabilir. Bu iki baz fonksiyonunun kullanım yerlerine göre avantajları ve dezavantajları mevcuttur. GTOs'in kullanılmasındaki en büyük avantaj çok merkezli integrallerin çözümünde sağladığı kolaylıktır. Fakat GTOs çekirdekten çok uzak ve çekirdeğe yakın durumlarda içerdiği  $r^2$  çarpanından kaynaklanan eksponansiyel bir azalmadan dolayı elektronik dalga fonksiyonunun fiziksel özelliklerini iyi bir şekilde temsil edemez.

ETOs, elektronik dalga fonksiyonunun özelliklerini çekirdeğe yakın ve çekirdekten uzak mesafelerde GTOs' e göre daha iyi temsil etmektedirler. ETOs üzerinden çok merkezli integrallerin hesabı için geliştirilen birçok metot vardır. Bunlara örnek olarak yer değiştiren bir merkez civarındaki ETOs'lerin açılım metodu [7, 8, 9, 10], B-fonksiyon metodu [11, 12],

Fourier dönüşüm metodu verilebilir. Geliştirilmeye çalışılan bu metotlar büyük hacimli formüllere sahiptirler. Dolayısıyla çok-merkezli integrallerin nümerik hesabında sıkıntılara neden olmaktadır.

ETOs arasında, Slater Tipi Orbitaller (STOs) en basit analitik fonksiyonlardır. STOs baş kuantum sayılarına göre ortogonal olmadıkları için farklı atomik ve moleküler problemlerin çözümü sırasında zorluklar ortaya çıkarmaktadırlar.

STOs tam ve kesirli n baş kuantum sayılı Slater Tipi Orbitaller (sırasıyla,  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs) olarak iki biçimde tanımlanabilir. Tam ve kesirli n baş kuantum sayılı Slater Tipi Orbitaller üzerinden çok-merkezli atomik ve moleküler integrallerin hesabı için en umut verici yöntemlerden biri  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs için toplama teoremlerinin (additions theorems) kullanımınıdır. Atomik ve elektronik yapı hesaplamalarında toplama teoremlerinin temel olarak iki farklı türü literatürde ortaya çıkmaktadır [13, 14]. Birinci tür toplama teoremleri, Coulomb potansiyelinin Laplace açılımının tipik iki bölge yapısına sahiptir. İkinci tür toplama teoremi ise tek bölgeli toplama teoremidir. Atomik ve moleküler yapı hesaplamalarının büyük bir çoğunluğunda tek bölgeli toplama teoremleri, iki parçacığın koordinatlarına bağlı olan operatörleri ve dalga fonksiyonlarını dönüştürmek için gereklidir. Tek bölgeli toplama teoremleri çok-merkezli integral hesaplamalarında integralleri basitleştirmek için oldukça uygun olduğundan kullanımı avantajlı olan bir yöntemdir. Ayrıca, hesaplamalarda iki bölgeli toplama teoremlerine göre daha etkili olmaktadır.

Coulomb-Yukawa benzeri korelasyon etkileşme potansiyelleri için çok-merkezli integrallerin hesabı yıllardır ilgi çekmektedir [15, 16, 17, 18, 19, 20]. Bu potansiyeller birçok konuda önem taşımaktadır. Örneğin, Yukawa potansiyeli atomun elektronunun oluşturduğu potansiyeli daha verimli tahmin etmek için kullanılabilir. Yukawa potansiyelinin plazmada kullanılması Debye-Hückel potansiyelinin, katı-hal fiziğinde kullanımı ise Thomas-Fermi potansiyelinin verimliliğini artırabilir. Ayrıca Yukawa potansiyeli basınç altındaki hidrojen incelemeleri için de önemlidir. Bu nedenle, mümkün olduğunca Yukawa potansiyelinin çok farklı sunumlarının olması istenilir.

Bu tezde, tam ve kesirli n baş kuantum sayılı Slater Tipi Orbitaller ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren atomik çekirdek çekim integrallerin analitik ve nümerik hesaplamaları sunulacaktır. Hesaplamalarda standart konvensiyonda tanımlanan tam ortonormal  $\psi^{(\alpha^*)}$ -üstel tipli orbital kümeleri kullanılarak elde edilen tam ve kesirli n baş kuantum sayılı Slater tipi orbitaller için tek bölgeli toplama teoremlerinden faydalanıldı.



Çalışmanın ikinci bölümünde temel bilgi oluşturmak amacıyla daha önce yapılmış olan yaklaşım yöntemleri ve kullanılan baz fonksiyonları hakkında ayrıntılı bilgiler sunuldu. Üçüncü bölümde kullandığımız  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs'leri,  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs üzerinden  $\psi^{(\alpha^*)}$ -tam ortonormal standart baz fonksiyon kümeleri kullanılarak elde edilen tek bölge toplama teoremlerini tanıtıldı. Tam ve kesirli n baş kuantum sayılı Slater Tipi Orbitaller ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren atomik çekirdek çekim integrallerinin analitik ve nümerik hesaplamaları verildi.

## BÖLÜM-II

### GENEL BİLGİLER

#### 2.1. Önceki Çalışmalar

Çok elektronlu sistemler, basit bir boyutlu sistemlere ve tek elektronlu atomlara kıyasla oldukça karmaşık bir yapıya sahiptir. Fakat böyle sistemleri, uygun yaklaşımlar kullanarak, makul bir şekilde incelemek mümkündür. Çok elektronlu sistemleri çözmeye yönelik ilk kullanışlı yöntem Hartree [21] tarafından önerilmiştir. Hartree tarafından önerilen bu metot Öz Uyumlu Alan Metodu (Self-Consistent Field (SFC) ) olarak bilinir. Bu metot sayesinde çok elektronlu bir atomun enerji ve dalga fonksiyonları nümerik olarak hesaplanabilir.

Hartree'nin öz uyumlu alan metodunda  $N$  elektronlu bir sistemde her bir elektronun diğer  $(N-1)$  tane elektronun ortalama potansiyel alanında olduğu farz edilmiştir. Fakat toplam dalga fonksiyonu için herhangi bir kısıtlama getirilmemiştir. Fock ve Slater birbirlerinden bağımsız olarak Pauli'nin "çok elektronlu bir atomda bütün kuantum sayıları aynı olan birden fazla elektron bulunamaz" prensibini ve "atomik sistemin toplam dalga fonksiyonunun anti-simetrik olması gerektiği" nin dikkate alınmasını önermişlerdir. Yaptıkları çalışmalarla Hartree'nin önerdiği yöntemde elektronun spin ve anti-simetrik dalga fonksiyonu özelliğini içermediği anlaşılmıştır. Bu özelliklerin de yönteme ilave edilmesi gerektiği ortaya çıkmıştır. Böylece bu yöntem Hartree-Fock (HF) öz uyumlu alan olarak adlandırılmaktadır [22].

HF metodu kullanılarak bazı atomların yapılarını incelemek mümkün olmuştur. Fakat problem çözümü sırasında çok sayıda diferansiyel denklem ile karşılaşıldığından, HF metodu yetersiz kalmaktadır. Bundan dolayı, HF denkleminin Roothaan tarafından geliştirilen

Hartree-Fock-Roothaan (HFR) formundan yararlanır. HFR, HF metodunun tek elektronlu moleküler orbitallerinin, atomik orbitallerin lineer toplamı şeklinde yazılabileceğini önermiştir [23].

## 2.2 Hartree-Fock Yöntemi

Hartree tarafından formüle edilen yaklaşımın başlangıç noktası zamandan bağımsız parçacık modelidir. Bu modele göre her elektron, çekirdeğin çekici alanı ve diğer elektronlardan ötürü olan itme etkileşmelerinin ortalama etkisini hesaba katan, bir etkin potansiyelde hareket eder. Bundan dolayı, çok elektronlu sistemdeki her elektron, kendi dalga fonksiyonu ile tanımlanır. Hartree N elektronlu bir sistemin dalga fonksiyonunu tek elektronlu dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde ifade etmiştir. Fock Hartree denklemlerinde dalga fonksiyonlarının anti-simetrik olması gerektiğini ileri sürmüştür. Böylece bulunan yeni denklemler sistemine Hartree-Fock (HF) denklemler sistemi denir.

Hartree-Fock yönteminde sistemin dalga fonksiyonu, anti-simetri özelliğini de sağlayacak şekilde seçilir. Elektronlardan oluşan sistemin dalga fonksiyonu, Pauli dışlama ilkesi gereği, sistemdeki iki elektronun yer değiştirmesi altında anti-simetrik olmalıdır.

$$\Psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = -\Psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots). \quad (2.2.1)$$

(2.2.1) nolu denklemi sağlayan en basit dalga fonksiyonu Slater determinanı ile verilir:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \dots & \psi_2(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \psi_N(\vec{r}_2) & \dots & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.2.2)$$

$1/\sqrt{N!}$  katsayısı dalga fonksiyonunun normalleştirici çarpanıdır. Burada  $\psi(r)$  atom-spin orbitalleri olarak tanımlanır.

Determinantın herhangi iki satırını veya iki sütununu kendi aralarında yer değiştirdiğimiz zaman determinantın işareti değişir. Determinantın iki satırı veya iki sütunu eşit ise bu determinantın değeri sıfır olur.

Slater determinanı aynı zamanda,

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \varepsilon_P \psi_1(P_1) \psi_2(P_2) \dots \psi_N(P_N) \quad (2.2.3)$$

biçiminde de gösterilebilir. Burada P indisi (1, 2, 3, ..., N) sayılarının permutasyonunu temsil etmektedir. Ayrıca eğer  $(P_1, P_2, \dots, P_N)$  permutasyonu, (1, 2, 3, ..., N) sırasında sayı çiftlerinin yer değiştirmesinden çift sayıda fark ediyorsa  $\varepsilon_P = +1$  ve eğer  $(P_1, P_2, \dots, P_N)$  permutasyonu, (1, 2, 3, ..., N) diziliminden tek sayıda yer değiştirme fark ediyorsa  $\varepsilon_P = -1$  dir.

Sistemin enerjisi,

$$E = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\int \Psi^* \hat{H} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \quad (2.2.4)$$

olarak verilmektedir. Burada  $d\tau$  elektronların uzay koordinatlarına göre integrallenmesini ve spin koordinatlarına göre de toplamını göstermektedir.

HF metodunda elektronik sistemin anti-simetrik özellik taşıyan determinant şeklindeki dalga fonksiyonu, (2.2.2) deki gibi Slater determinantı ile verilir. Slater determinant dalga fonksiyonu elektronik yapı hesaplamalarının temelini oluşturur. Bundan dolayı, atomik-moleküler sistemin özelliklerinin incelenmesi determinant dalga fonksiyonlarının belirlenmesine bağlıdır.

Hartree atomik birimlerde (a.u.) sadece elektriksel etkileşmeler dikkate alındığında spinden bağımsız N elektronlu atomun Hamiltoniyeni tek ve iki elektronlu işlemcilerle bağlı olarak Z atomun numarasını göstermek üzere,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j(\neq i)=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.2.5)$$

yapısına sahiptir. Burada atom çekirdeğinden olan uzaklığa göre i. elektronun koordinatı  $r_i$  ile elektronlar arası mesafe de  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  ile gösterilir.  $r_{ij}$  ile belirlenen iki elektronlu işlemci sebebiyle N elektronlu atoma ait Schrödinger denklemi tam olarak çözülemez. HF yaklaşım yöntemleri uygulanırken Hamiltoniyendeki iki elektronlu etkileşme potansiyel işlemcisi yaklaşık olarak alınan tek elektronlu potansiyel ile yer değiştirir ve N elektronlu atom için etkin Hamiltoniyen

$$\hat{H}^{etkin} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + V_i^{etkin}(r_i) \right) \quad (2.2.6)$$

biçiminde yazılır. Bu Hamiltoniyen için öz fonksiyonlar  $\psi_N(r)$  tek elektronlu ortonormal dalga fonksiyonlarının oluşturulan (2.2.2) ile verilen Slater determinantlarıdır.

Genel olarak kapalı kabuklu atomlar veya onların iyonları ( $Z \cong N$ ) için  $V_i^{etkin}$  potansiyeli merkezci potansiyel kabul edilir. Açık kabuklu atomlar için bu yaklaşım her zaman geçerli değildir. Atomun durumunun tek bir Slater determinanı ile temsili kaba bir yaklaşım olarak kalır.

Kapalı kabuklu atomun enerji ifadesi için, pertürbasyon yönteminin sıfıncı yaklaşımında (2.2.2) ile verilen determinant dalga fonksiyonu kullanılır. Bu determinant dalga fonksiyonu çok elektronlu kapalı kabuklu atomlar için tektir. Atomun enerjisini bulmak için determinant dalga fonksiyonlarına göre matris elemanları hesaplanmalıdır.

Denklem (2.2.4) ile verilen varyasyon yöntemine göre, spine bağlı olmayan HF enerji ifadesi kapalı kabuklu atomlar için bir sistemin enerjisi,

$$E = 2 \sum_{i=1}^{N/2} h_i + \sum_{i,k=1}^{N/2} (2J_{kk}^{ii} - K_{kk}^{ii}) \quad (2.2.7)$$

biçiminde verilmektedir. Burada N elektron sayısı olmak üzere,  $h_i$  kinetik enerji ve nükleer çekim integralinden oluşan tek elektronlu integrali göstermektedir.  $J_{kk}^{ii}$  ve  $K_{kk}^{ii}$  sırasıyla Coulomb ve değiş-tokuş (exchange) integrallerini gösterir. Bu integrallerin açık hali aşağıdaki gibidir:

$$h_i = \int \psi_i^*(1) \hat{h}_i \psi_i(1) dv_1 \quad (2.2.8)$$

$$J_{kk}^{ii} = \int \int \psi_i^*(1) \psi_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} \psi_i(1) \psi_j(2) dv_1 dv_2 \quad (2.2.9)$$

$$K_{kk}^{ii} = \int \int \psi_i^*(1) \psi_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} \psi_j(1) \psi_i(2) dv_1 dv_2. \quad (2.2.10)$$

Elde edilen (2.2.7) denkleminde (2.2.8), (2.2.9) ve (2.2.10) ifadeleri yerleştirildiğinde toplam enerjinin  $\psi_i$  ile gösterilen atom orbitaline bağlı olduğu görülür. Bu atom orbitalleri aynı zamanda  $\int \psi_i^* \psi_k dv = \delta_{ik}$  ortonormallik şartını sağlamalıdır. Bu özellik dikkate alınarak varyasyon ilkesi toplam enerjinin (2.2.7) ifadesine uygulandığında ( $\delta E = 0$ ) atom orbitalleri için HF denklemleri bulunmuş olur. Bağımlı varyasyonları elemek için Lagrange'ın belirsiz

çarpınlar yöntemi kullanılarak, normalleştirilmiş orbitallerin bağımsızlığı için  $\lambda_{ki} = 2\varepsilon_{ki}$  durumu seçilir. Böylece HF denklemleri ,

$$\hat{F}\psi_i = \sum_s \psi_s \varepsilon_{si} \quad (2.2.11)$$

şeklinde ortaya çıkar. Elde edilen bu denklemi özdeğer problemi olarak çözmek için üniter-bilimsel dönüşümlerden faydalanılır ( $Q^+Q = QQ^+ = I$ ). Böylece  $\hat{F}' = F$ ,  $\varepsilon' = Q' \varepsilon Q$  eşitliklerinin sağlandığı görülür. Bu nedenle toplam enerji ve orbital enerji değerleri bu dönüşümler altında değişmediğinden integro-diferansiyel HF denklemleri

$$\hat{F}\psi_i(1) = \varepsilon_i \psi_i(1) \quad i = 1,2,3, \dots, N \quad (2.2.12)$$

şeklinde orbitallere (i orbitali ifade eder) bağlı olarak elde edilir. Burada  $\hat{F}$  Fock işlemcisidir ve

$$\hat{F} = \hat{h} + \hat{G} ,$$

$$\hat{h} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r} , \quad (2.2.13)$$

$$\hat{G} = \sum_k (2\hat{J}_{kk} - \hat{K}_{kk})$$

olarak tanımlanır. Burada  $\hat{h}$  tek elektronlu işlemciyi gösterirken,  $\hat{G}$  iki elektronlu işlemcisi içindeki Coulomb ve değiş-tokuş işlemcileri sırasıyla:

$$\hat{J}_{kk}(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_1) = \left[ \int \frac{\psi_k^*(\vec{r}_2)\psi_k(\vec{r}_2)}{r_{12}} dv_2 \right] \psi_i(\vec{r}_1) \quad (2.2.14)$$

$$\hat{K}_{kk}(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_1) = \left[ \int \frac{\psi_k^*(\vec{r}_2)\psi_i(\vec{r}_2)}{r_{12}} dv_2 \right] \psi_k(\vec{r}_1) \quad (2.2.15)$$

şeklinde tanımlanır. Atom orbitalleri  $\psi_i$  için (2.2.12) ile verilen HF denklemleri enerjinin minimum olma şartı göz önüne alınarak iterasyon (tekrarlamalı) yöntemiyle sayısal olarak çözülebilir.

### 2.3. Hartree-Fock-Roothaan Yöntemi

Hartree-Fock (HF) denklemleri sadece sayısal olarak çözülebilmektedir. Bu nedenle, bu denklemin çözümü atomlar ve tek elektronlu moleküller için yapılabilmektedir. Moleküler

orbitaller için sayısal çözüm yapılabilmesi için bu yöntemin geliştirilmesi gerekir. 1951 yılında, C.C.J. Roothaan ve G.G.Hall [23, 24] tarafından birbirinden bağımsız olarak geliştirilen atom orbitallerinin lineer kombinasyonu (LCAO (linear combination of atomic orbitals)) yöntemi dalga fonksiyonunun analitik ifadesini elde etmek için HF yönteminde kullanılır. Sayısal çözüm yerine analitik çözüm yapılır. Moleküllere ait özelliklerin hesaplanması analitik çözüm gerektirdiğinden, atomlar için hesaplamalara da bu yöntem kullanılarak başlanır. Bu yöntemin atomlar için elde edilen sonuçları moleküllerin hesabında veri olarak kullanılır.

Atomik-moleküler kuantum mekaniksel hesaplamalar, LCAO yönteminde olduğu gibi,  $\psi_i$  ile belirtilen atomik veya moleküler orbitallerin oluşturulmasıyla başlar.  $\psi_i$  orbitalleri önceden seçilen, analitik ifadesi olan temel-taban (baz) fonksiyonlarının doğrusal kombinasyonları olarak seri ile açılımı yapılarak başlatılır. Elektronik dizgeyi temsil eden ve Slater determinant dalga fonksiyonunu oluşturan tek elektronlu orbitaller  $\psi_i$ , bir lineer kombinasyon ile seçilen baz fonksiyonlarına açılım yapılarak yaklaşımda bulunulur:

$$\psi_i = \sum_q^m C_{qi} \chi_q \quad (2.3.1)$$

Burada  $i$  atom orbitalini ve  $q \equiv nlm$  kuantum sayılarını göstermek üzere,  $1 \leq i \leq n$  ( $n=N/2$ ,  $N$  elektron sayısı) ve  $m \geq n$  sınır koşulları vardır.  $m \geq n$  ifadesi de açılımın üst sınırının varolan orbital sayısına eşit veya büyük olmasını gerektirir. Eğer  $m = n$  şeklinde üst sınır belirlenirse, yani her orbital için bir tane  $\chi_q$  baz fonksiyonu seçilirse minimal baz yaklaşımı yapılmış olur.  $m > n$  durumu böylece genişletilmiş baz yaklaşımını belirtmektedir. Burada,  $\chi_q$  çözümü yapılacak probleme en uygun seçilen baz fonksiyonu ve  $C_{qi}$  ise açılım katsayılarıdır. Günümüzde atom ve moleküllerin elektronlarının özelliklerine bağlı olayların incelenmesinde kullanılan dalga fonksiyonları, (2.3.1) ile verilen atomik orbitallerin doğrusal kombinasyonlarından oluşturulur (LCAO).

HF yöntemi analitik yaklaşımın kullanılmasıyla moleküllere uygulanabilir hale gelmiş ve Hartree-Fock-Roothaan (HFR) yöntemi olarak adlandırılmıştır. Roothaan (1951) ilk olarak elektron dizilimi kapalı, yani tüm orbitalleri dolu olan, sistemler için HFR denklemlerini oluşturmuştur. (2.3.1) denklemi HF denkleminde, (2.2.12) denkleminde, kullanılırsa,

$$\hat{F} \sum_{q=1}^N C_{qi} \chi_q(1) = \varepsilon_i \sum_{q=1}^N C_{qi} \chi_q(1) \quad (2.3.2)$$

denklemini elde edilmektedir. Bu denklemin her iki tarafını da soldan  $\chi_p^*$  çarptığımız zaman,

$$\sum_{q=1}^N (F_{pq} - \varepsilon_i S_{pq}) C_{qi} = 0 \quad (2.3.3)$$

bulunur. Burada  $\varepsilon_i$  i numaralı orbitalin enerjisini,  $S_{pq}$  ise örtme matrisini ifade etmektedir. Örtme matrisinin integral matrisi

$$S_{pq} = \int \chi_p^*(\vec{r}_1) \chi_q(\vec{r}_1) dV_1 \quad (2.3.4)$$

olarak tanımlanır. Elde ettiğimiz (2.3.3) doğrusal denklem sistemi HFR denklemleri olarak adlandırılır. Burada  $F_{pq}$  işlemcisi Fock işlemcisidir ve açık hali,

$$F_{pq} = H_{pq} + G_{pq} \quad (2.3.5)$$

$$H_{pq} = \int \chi_p^*(\vec{r}_1) \left[ -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \sum_A \frac{Z_A}{r_{A1}} \right] \chi_q(\vec{r}_1) dV_1 \quad (2.3.6)$$

$$G_{pq} = \sum_{j=1}^{n=N/2} \sum_{r=1}^m \sum_{s=1}^m C_{rj}^* C_{sj} (2I_{rs}^{pq} - I_{rq}^{ps}) \quad (2.3.7)$$

$I_{rs}^{pq}$  ve  $I_{rq}^{ps}$  iki elektronlu integralleri temsil etmek üzere;

$$I_{rs}^{pq} = \iint \chi_r^*(x_1) \chi_p^*(x_2) \frac{1}{r_{21}} \chi_s(x_1) \chi_q(x_2) dv_1 dv_2, \quad (2.3.8)$$

$$I_{rq}^{ps} = \iint \chi_r^*(x_1) \chi_p^*(x_2) \frac{1}{r_{21}} \chi_q(x_1) \chi_s(x_2) dv_1 dv_2. \quad (2.3.9)$$

denklemini ile verilir.

## 2.4. Atomik Baz Fonksiyonları

Baz fonksiyonu, incelenen atomun çekirdeği etrafındaki elektronun hareketini tanımlayan bir elektronlu dalga fonksiyonudur. Baz fonksiyonlarının seçimi, hesaplama sonuçlarının güvenilirliği açısından oldukça önemlidir. Bir ve iki elektronlu çok merkezli integrallerin etkin hesabı elektronik yapı hesaplamalarında kullanılan fonksiyonların baz kümelerine bağlıdır. Az sayıda fonksiyon kullanılarak moleküler integrallerin iyi temsil



edilmesi ve hesaplamalarda ortaya çıkan integrallerin kolay çözülebilir olması baz fonksiyonu seçiminde dikkat edilmesi gereken özelliklerdendir.

Hesaplamalarda kullanılacak dalga fonksiyonu  $r \rightarrow 0$  limitinde zirve koşulunu sağlamalıdır. Bu koşul matematiksel olarak

$$-\frac{1}{2Z\rho(0)}\left(\frac{d\rho(r)}{dr}\right)_{r=0} = 1 \quad (2.4.1)$$

şeklinde ifade edilmiştir [25]. Burada  $Z$  atom numarası ve  $\rho(r)$  küresel yük yoğunluğudur. Eşitlikteki oran Schrödinger denkleminin kesin çözümünde tam olarak bire eşit olacaktır. Yapılan yaklaşımlarda kullanılan fonksiyonlarının kalitesi elde edilen enerji değerinin yanında zirve oranının bire yakınlığı ile de değerlendirilebilir. Elektronların dalga fonksiyonunda bulunması gereken diğer özellik çekirdekten uzaklaştıkça üstel olarak azalmasıdır. [26]. Bu iki asimptotik koşul elektronların fiziksel durumunun iyi temsil edilmesi için önemlidir. Baz fonksiyonu seçiminde bu iki özelliğin de dikkate alınması önemlidir.

Atomik hesaplamalarda kullanılan baz fonksiyonlarının en genel hali aşağıdaki gibi ifade edilmektedir:

$$f_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_n(r)Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (2.4.2)$$

burada  $R_n(r)$  ile gösterilen radyal kısım,  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  ise küresel harmoniklerdir.

Atomik ve moleküler yapı hesaplamalarında kullanılan baz fonksiyonları radyal bölümünde  $e^{-\zeta r^2}$  şeklinde ifade edilen Gaussian tipi orbitaller (GTOs) [27] ve  $e^{-\zeta r}$  şeklinde bir çarpan içeren üstel tipli orbitaller (ETOs) olarak ikiye ayrılabilir. GTOs'lerin ifadesi

$$f_{nlm}(r, \theta, \varphi) = r^{2n} e^{-\zeta r^2} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (2.4.3)$$

dir, burada  $\zeta$  parametresi orbital üssü olarak tanımlanmaktadır.

GTOs, çekirdeğe çok yakın durumda zirve koşulunu sağlamaz. İçerdiği  $r^2$  şeklindeki çarpanın dolaylı olarak çekirdekten uzaklaştıkça hızlı bir şekilde sifira gider. Bu yüzden GTOs kullanılarak elektronik dalga fonksiyonunun özellikleri uygun bir şekilde temsil edilemez. Moleküler orbitalleri oluştururken çok sayıda GTOs kullanılması gerekir. Fiziksel olarak çok uygun olmamasına rağmen moleküler hesaplamalarda ortaya çıkan çok merkezli integrallerin çözümü kolay olduğundan, GTOs baz fonksiyonları kuantum kimyasında yaygın olarak kullanılır [28]. ETOs'ler GTOs'lere uygun bir alternatiftir. Çünkü ETOs'ler [29, 30, 31, 32,

33] çekirdeğe çok yakın ve çekirdekten çok uzak mesafelerde elektronik dalga fonksiyonunu daha iyi bir şekilde temsil ederler.

ETO'lerin genel yapısı ise aşağıdaki gibidir:

$$f_{nlm}(r, \theta, \varphi) = r^{n-1} e^{-\zeta r} Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (2.4.4)$$

ETOs arasında tam ve kesirli n baş kuantum sayılı Slater Tipi Orbitaler (sırasıyla,  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs) [34, 35] atom ve moleküler yapı hesaplamalarında [36, 37, 38] kullanılan en basit analitik fonksiyonlardır.  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs sırasıyla;

$$\chi_{nlm}(\zeta; \vec{r}) = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\zeta r} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.4.5)$$

$$\chi_{n^*lm}(\zeta; \vec{r}) = \frac{(2\zeta)^{n^*+\frac{1}{2}}}{[\Gamma(2n^* + 1)]^{1/2}} r^{n^*-1} e^{-\zeta r} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.4.6)$$

denklemleri ile verilmektedir. Burada  $S_{lm}(\theta, \varphi)$  reel küresel harmoniklerdir,  $\Gamma(2n^* + 1)$  Gamma fonksiyonudur.

$\chi$ -NISTOs 'in kullanılması ilk olarak Parr ve Joy [39] tarafından öne sürülmüştür. Helyum (He) ve Hidrojen molekülü ( $H_2$ ) için yapılan hesaplamalar ile  $\chi$ -NISTOs'in kullanımının etkinliği gösterilmiştir [39]. Bu düşünce hesaplamalarda ortaya çıkan bazı güçlükler nedeniyle az sayıda da olsa moleküllere ve korelasyon hesaplamalarına uygulanmıştır. Yapılan çalışmalara rağmen bu düşüncenin kullanımı yaklaşık 30 yıllık bir duraklama dönemi geçirmiştir. Koga ve ark. [40] tarafından minimal baz olarak ele alınıp incelenen  $\chi$ -NISTOs bu konudaki çalışmalara tekrar dönülmesini sağlamıştır. Bu çalışmadan sonra, çift perdelenme sabiti kullanılan  $\chi$ -NISTOs kullanılarak hesaplamalar yapılmıştır [41]. Ancak,  $\chi$ -NISTOs'in genişletilmiş baz kümesi ile yapılmış hesaplamaları tüm atomlar için yoktur. Bunun nedeni bu baz kümesinin kullanılması için gereken çeşitli parametrelerin elde edilmesindeki güçlüktür. Günümüzde, enerjinin minimumluğunu sağlayan genişletilmiş bazda  $\chi$ -NISTOs kümesi bulunmamaktadır. Literatürdeki bu çalışmalardan görülmektedir ki,  $\chi$ -NISTOs'lar atom ve molekül hesaplamaları için  $\chi$ -ISTOs'den daha esnek baz fonksiyonudurlar. Dalga fonksiyonunun kalitesini arttırlar ve  $\chi$ -ISTOs'a göre daha iyi enerji değeri verdiği görülmektedir.  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs'ler atom ve molekül sistemlerinin fiziksel ve kimyasal özelliklerini temsil etmesi yönünden deneysel sonuçlarla uyum sağlamaktadır [42]. Ancak bu baz fonksiyonları baş kuantum sayısına göre ortogonal

değildirler. Bu durum, çok merkezli integrallerin hesaplamalarında  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs'ın kullanımında bazı güçlükler yaratır. Ortaya çıkan güçlükler moleküler yapı hesaplamalarında  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs'ın kullanımını kısıtlamaktadır.

Bu konudaki zorlukların ortadan kaldırılmasında Guseinov tarafından önerilen standart konvensiyonda (standart convention) tanımlanan tam ortonormallik özelliğine sahip  $\psi^{(\alpha^*)}$ -Üstel Tip Orbital ( $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs) kümelerinden faydalanılır. Burada öz-sürtünme (self-frictional) kuantum sayısı olarak adlandırılan  $\alpha^*$  parametresi tam ( $\alpha^* = \alpha, -\infty < \alpha \leq 2$ ) ve kesirli ( $\alpha^* \neq \alpha, -\infty < \alpha^* < 3$ ) değerler almaktadır [43, 44]. Klasik elektrodinamikte Lorentz tarafından önerilen sönüm (damping) veya sürtünme (frictional) kuvvetinin kuantum mekaniksel benzerinin incelenmesi sonucu elde edilen fonksiyonların  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs olduğu kanıtlanmıştır [45].  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs fonksiyonlar kümesi standart konvensiyon olarak kabul edilen genelleştirilmiş Laguerre polinomlarına dayalı olarak elde edilmiştir. Bilindiği gibi, tek-elektronlu H atomunun Schrödinger denkleminin radyal kısmının çözümlenmesinde assosiye Laguerre polinomları  $L_q^p(x)$  ortaya çıkmaktadır. Assosiye Laguerre polinomlarında p indisi tam sayı değerlerini alırken genelleştirilmiş Laguerre polinomlarında p indisi kesirli veya tam sayı değerlerini alabilmektedir.

## BÖLÜM-III

### MATERYAL VE METOT

#### 3.1 Tam Ortonormal Standart $\psi^{(\alpha^*)}$ - Üstel Tipli Orbitaler

$\psi^{(\alpha^*)}$  fonksiyonları bir üstel tipli fonksiyon çeşididir ve aynı zamanda tam ortonormal fonksiyonlar kümesidir. Radyal bölümü, genelleştirilmiş Laguerre polinomları içermektedir. Laguerre polinomları  $L_p^q(x)$  olarak tanımlanmaktadır. Burada p indisi tam sayı değerlerini alırken q indisi hem tam sayı hem de kesirli değerleri alabilmektedir. İndisler hakkındaki bu durum matematikte standart konvensiyon olarak adlandırılmaktadır.

Guseinov, Hylleraas'ın tam fonksiyonlar sistemini genelleştirerek  $\psi^{(\alpha^*)}$  -ETOs fonksiyonlarını önermiştir. [43,44]

$$\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) = R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r)S_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.1.1)$$

Tam ortonormal  $\psi^{(\alpha^*)}$  -ETOs baz fonksiyonu  $\psi^{(\alpha^*)}$  -üstel tipli orbitaler olarak adlandırılır. Burada  $\alpha^*$  öz-sürtünme kuantum sayısıdır (tam sayı değerli  $\alpha^* = \alpha, -\infty < \alpha \leq 2$ ; kesirli  $\alpha^* \neq \alpha, -\infty < \alpha^* < 3$ ). Burada  $\alpha^*$ 'a değerler vererek her değer için farklı bir tam ortonormal fonksiyonlar kümesi elde edilir.  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs Slater tipi orbitalerin sonlu lineer kombinasyonları şeklinde ifade edilebilir. Sürtünme kuvvetlerinin yönü  $\alpha$ 'nın değerlerinden belirlenebilir. Yani çekici ve itici kuvvetler sırasıyla,  $\alpha^* = \alpha$ 'nın çift değerleri için ( $\alpha \leq 0$ ) ve tek değerleri için ( $\alpha > 0$ )değerlerini almaktadırlar. Literatürde [46] bulunan Coulomb-Sturmian ve hidrojen benzeri dalga fonksiyonu  $\alpha = 1$  değerinden ( $\psi'_{nlm} \equiv \psi_{nlm}$ ), Lambda fonksiyonu  $\alpha = 0$  ( $\psi_{nlm}^0 = \Lambda_{nlm}$ ) değerinden bulunabilir.

$\psi^{(\alpha^*)}$ -üstel tipli fonksiyonlar çekirdek çekim potansiyeli ve parçacığın kendisi tarafından üretilen alanın potansiyelini içeren  $V_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r)$  merkezci simetrik potansiyeli için yazılan Schrödinger denkleminin çözümüdür:

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) \right] \psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) = \varepsilon \psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) \quad (3.1.2)$$

$$V_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) = U_n(\zeta, r) + U_n^{(\alpha^*)}(\zeta, r). \quad (3.1.3)$$

Burada  $V_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r)$  toplam potansiyeli,  $\zeta$  üstel perdeleme parametresine;  $n$  (baş kuantum sayısı),  $l$  (açısal momentum kuantum sayısı) kuantum sayılarına ve  $\alpha^*$  öz-sürtünme (self-frictional) kuantum sayılarına bağlıdır [44].  $V_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r)$  potansiyeli

$$U_n(\zeta, r) = -\frac{2\zeta^2}{x}n \text{ ve } x = 2\zeta r \quad (3.1.4)$$

çekirdek çekim potansiyeli ve

$$U_n^{(\alpha^*)}(\zeta, r) = -\frac{2\zeta^2(1-\alpha^*)}{x} \frac{L_{n-l-2}^{(p^*+1)}(x)}{L_{n-l-1}^{(p^*)}(x)} \quad (3.1.5)$$

Lorentz kuantum sürtünme potansiyelinden (yer değiştiren bir noktada parçacığın kendisi tarafından üretilen alanın potansiyeli) oluşmaktadır.

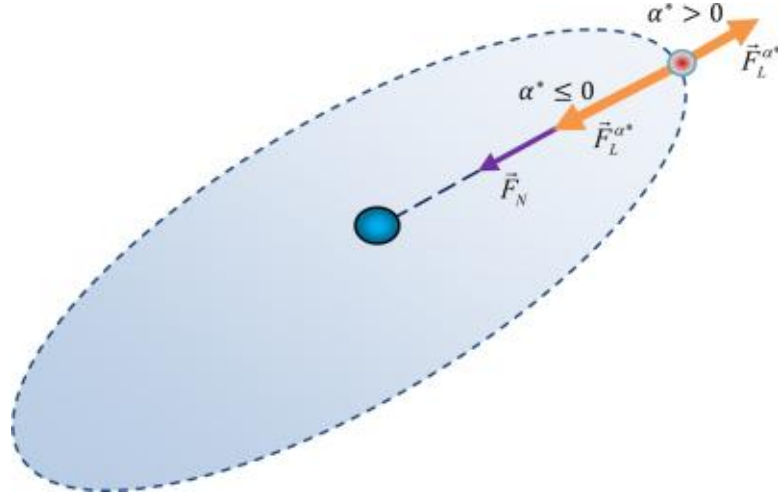
Kuantum sürtünme kuvvetleri sayesinde sürekli spektrum öz değer ifadesinde içerilmez

$$\varepsilon = -\frac{1}{2}\zeta^2. \quad (3.1.6)$$

Bu öz değer, parçacığın doğasına göre seçilebilen perdeleme sabitine bağlı üstel parametreye bağlı olmaktadır.

Kuantum sürtünme potansiyelini içeren Schrödinger denklemi, klasik elektrodinamiğin Lorentz denklemine tam benzerlik göstermektedir [47].

Literatürde ilk olarak Guseinov tarafından Lorentz sönümlenme teorisi (damping theory) genişletilerek önerilmiştir [48]. Kuantum öz-sürtünme teorisine göre, elektronlar atomik çekirdeklerin etrafında iki farklı kuvvet altında hareket ederler. Bu kuvvetler, nükleer çekim ve öz-sürtünme çekici ( $\alpha^* \leq 0$  için) ya da itici ( $\alpha^* > 0$  için) kuvvetleridir.



**Şekil 1** Kuantum öz-sürtünme teorisine göre elektronların etkisinde kaldığı nükleer çekim ( $\vec{F}_N$ ) ve öz-sürtünme ( $\vec{F}_L$ ) kuvvetleri

$$\vec{F} = \vec{F}_N + \vec{F}_L \quad (3.1.7)$$

$$\vec{F}_L = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{\vec{r}} \quad (3.1.8)$$

Burada  $\ddot{\vec{r}}$  elektronun ivmesinin zamana göre türevidir. Bu denklemden ortaya çıkan Lorentz sürtünme kuvveti, yükün ivmesinin zamana göre türevine bağlıdır. Böylece, koordinat uzayında belirtilen  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs'in tam ortonormal kümelerinin kökeni Lorentz kuantum sürtünme kuvvetidir.

Genelde, çekirdek çekim potansiyeli dört-boyutlu dönme grubundaki dönüşümlere göre simetrik değildir. Eğer parçacığın kendisi tarafından üretilen alan hesaba katılırsa  $\alpha^*$ ,  $n$ ,  $l$  ve  $\zeta$ 'nin keyfi değerleriyle,  $V_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r)$  toplam merkezci simetrik potansiyeli dört-boyutlu uzaydaki dönmelere göre değişmez (invariant) kalır. Buna göre,  $\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r})$  öz fonksiyonları tam ortonormal kümeler olur.

$\psi^{(\alpha^*)}$  -ETO'ler  $\left(\frac{n'}{\zeta r}\right)^{\alpha^*}$  ağırlık fonksiyonuna göre ortonormaldirler:

$$\int \psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) \bar{\psi}_{n'l'm'}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) d^3\vec{r} = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (3.1.9)$$

burada

$$\bar{\psi}_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) = \left(\frac{2n}{x}\right)^{\alpha^*} \psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) \quad (3.1.10)$$

olarak tanımlanır ve hacim elemanı  $dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = r^2 dr d\Omega$  dır.

Modifiye Laguerre polinomları için ortogonalite bağıntısı:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^2 \mathcal{L}_{nl}^{(\alpha^*)}(x) \bar{\mathcal{L}}_{n'l'}^{(\alpha^*)}(x) dx = \delta_{nn'} \quad (3.1.11)$$

Genelleştirilmiş Laguerre polinomları için ortogonalite bağıntısı:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^{p^*} L_{n-l-1}^{(p^*)}(x) L_{n'-l-1}^{(p^*)}(x) dx = \frac{\Gamma(q^* + 1)}{(n-l-1)!} \delta_{nn'} \quad (3.1.12)$$

olarak tanımlanır.

$\psi^{(\alpha^*)}$ -ETO'ler aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) = R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) S_{lm}(\theta, \varphi), \quad (3.1.13)$$

burada  $S_{lm}(\theta, \varphi)$  normalize kompleks veya reel küresel harmoniklerdir. Radyal kısım

$$R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) = (2\zeta)^{\frac{3}{2}} R_{nl}^{(\alpha^*)}(x) \quad (3.1.14)$$

$$R_{nl}^{(\alpha^*)}(x) = e^{-\frac{x}{2}} \mathcal{L}_{nl}^{(\alpha^*)}(x) \quad (3.1.15)$$

yapısına sahiptir. Burada  $\mathcal{L}_{nl}^{(\alpha^*)}(x)$  modifiye Laguerre polinomlarıdır ve

$$\mathcal{L}_{nl}^{(\alpha^*)}(x) = \left[ \frac{(n-l-1)!}{(2n)^{\alpha^*} \Gamma(q^*+1)} \right]^{\frac{1}{2}} x^l L_{n-l-1}^{(p^*)}(x) \quad (3.1.16)$$

şeklinde ifade edilir. Genelleştirilmiş Laguerre polinomları ( $L^{(p^*)}$ \_GLPs) ise

$$L_{n-l-1}^{(p^*)}(x) = \frac{\Gamma(q^*+1)}{(n-l-1)! \Gamma(p^*+1)} {}_1F_1(-[n-l-1]; p^*+1; x) \quad (3.1.17)$$

bağıntısı ile tanımlanır. Burada  ${}_1F_1(\eta; \gamma; x)$  (Ek-A.4) ile verilen konfluent hipergeometrik fonksiyondur.

Modifiye Laguerre polinomları yeniden

$$\mathcal{L}_{nl}^{(\alpha^*)}(x) = \left[ \frac{\Gamma(q^*+1)}{(2n)^{\alpha^*} (n-l-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{x^l}{\Gamma(p^*+1)} {}_1F_1(-[n-l-1]; p^*+1; x) \quad (3.1.18)$$

bağıntısı ile yazılabilir. Burada,  $x = 2\zeta r$ ,  $p^* = 2l + 2 - \alpha^*$ ,  $q^* = n + l + 1 - \alpha^*$  ve  $\alpha^*$ ,  $-\infty < \alpha^* < 3$  aralığındadır. (Ek-A.4) ve (Ek-A.5) dikkate alınarak (3.1.17) daki konfluent hipergeometrik fonksiyon;

$${}_1F_1(-[n-l-1]; p^* + 1; x) = \sum_{k=l+1}^n \frac{(-[n-l-1])_{k-l-1} x^{k-l-1}}{(p^* + 1)_{k-l-1} (k-l-1)!} \quad (3.1.19)$$

yapısında yazılabilir.

Buna göre (3.1.17) denklemini ile verilen genelleştirilmiş Laguerre polinomu

$$L_{n-l-1}^{(p^*)}(x) = \frac{\Gamma(q^* + 1)}{(n-l-1)! \Gamma(p^* + 1)} \sum_{k=l+1}^n \frac{(-[n-l-1])_{k-l-1} x^{k-l-1}}{(p^* + 1)_{k-l-1} (k-l-1)!} \quad (3.1.20)$$

ile ifade edilir.

### 3.2. Tek Bölge Toplama Teoremleri

Atomik ve moleküler yapı hesaplamalarında iki nokta arasındaki uzaklığa bağlı ( $a$  ve  $b$  veya  $r_{21}$ ) herhangi bir fonksiyonu, bu noktaların koordinatlarını içeren iki fonksiyonun çarpımı şeklinde ifade etmek için toplama teoremlerinden yararlanır. Literatürde toplama teoremleri olarak önemli iki farklı yöntem rastlanmaktadır, tek bölge (one-range) ve iki bölge (two-ranges) toplama teoremleri. İki bölge toplama teoremleri, Coulomb potansiyelinin Laplace açılımının tipik iki bölge şekline sahiptir:

$$\frac{1}{r_{21}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} S_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2) S_{lm}(\theta_1, \varphi_1). \quad (3.2.1)$$

Burada  $r_{<} = \min(r_1, r_2)$   $r_{>} = \max(r_1, r_2)$  dir ve  $S_{lm}$  kompleks ( $S_{lm} \equiv Y_{lm}$ ) ya da reel küresel harmoniklerdir.

Guseinov tarafından geliştirilen “tek bölge toplama teoremlerinde” ise tam ortonormal fonksiyonlar kümesi kullanılarak, baz fonksiyonları farklı bir merkeze taşınır [49, 50]. Keyfi bir fonksiyonun tam ortonormal fonksiyonların seri açılımı şeklinde yazılabilmesinden yararlanarak, farklı merkezlerdeki STO’lar bir merkeze taşınarak, çok merkezli integrallerdeki, çok merkez problemi çözülmeye çalışılır. Bu yöntem “tek bölge toplama teoremi” olarak adlandırılır. Bu teorem yardımıyla uzay iki bölgeye ayrılmadan değişkenler birbirinden ayrılabilir.



Tek bölgeci toplama teoremleri simetrik ve simetrik olmayan tek bölgeci toplama teoremleri olarak iki türe ayrılmaktadır. Bu iki tür de birbirlerinden açılım katsayılarına göre ayırt edilirler. Simetrik ve simetrik olmayan tek bölgeci toplama teoremlerinin açılım katsayıları sırasıyla, STO'ler ve örtme integralleridir. Atomik ve moleküler elektronik yapı hesaplamalarının büyük bir çoğunluğunda tek bölgeci toplama teoremleri, iki parçacığın koordinatlarına bağlı olan operatörleri ve dalga fonksiyonlarını dönüştürmek için gereklidir. Tek bölgeci toplama teoremlerinin kullanımı, çok merkezli integrallerde integrali basitleştirmek için uygun olduklarından iki bölgeci toplama teoremlerine göre daha etkili olmaktadır.

$\chi$ -ISTO'ler için tek bölgeci toplama teoremleri  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs'in tam ortonormal standart kümeleri kullanılarak elde edilir.  $\chi$  - STOs'e ait simetrik olmayan tek bölgeci toplama teoremlerini elde etmek için STO, yer değiştiren bir merkezde  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs'in tam ortonormal standart kümelerinin terimlerinde seriye açılır:

$$\psi_{uvs}^{(\alpha^*)}(\xi, \vec{r}) = \sum_{k=v+1}^u \tilde{\omega}_{uk}^{(\alpha^*)v} \chi_{kvs}(\xi, \vec{r}) \quad (3.2.2)$$

Burada  $\tilde{\omega}_{uk}^{(\alpha^*)v}$  açılım katsayısı:

$$\tilde{\omega}_{uk}^{(\alpha^*)v} = \left[ \frac{(2k)! \Gamma(q_u^* + 1)}{(2u)^{\alpha^*} [u - (v + 1)]!} \right]^{1/2} \tilde{\alpha}_{uk}^{(\alpha^*)v}, \quad (3.2.3)$$

$$\tilde{\alpha}_{uk}^{(\alpha^*)v} = \frac{(-[u - (v + 1)])_{k-(v+1)}}{\Gamma(p_v^* + 1)(p_v^* + 1)_{k-(v+1)}[k - (v + 1)]!} \quad (3.2.4)$$

yapısına sahiptir ve  $p_v^* = 2v + 2 - \alpha^*$  ve  $q_u^* = u + v + 1 - \alpha^*$  olarak tanımlanır.

$\chi$ -NISTO'ler için tek merkezli tek bölgeci toplama teoremleri için ise  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs 'in tam ortonormal standart kümeleri yardımıyla aşağıdaki seri açılımlar kullanılır.

$\xi \neq \beta$  için;

$$\chi_{u^*vs}(\beta, \vec{r}) = \sum_{u=v+1}^{\infty} \omega_{uu^*}^{(\alpha^*)v}(\xi, \beta) \psi_{uvs}^{(\alpha^*)}(\xi, \vec{r}). \quad (3.2.5)$$

Burada  $\omega_{uu^*}^{(\alpha^*)v}(\xi, \beta)$  açılım katsayısı:

$$\omega_{uu^*}^{(\alpha^*)v}(\xi, \beta) = \frac{\Gamma(u^* + v - \alpha^* + 2)}{\Gamma(p_v^* + 1)} \left[ \frac{(2u)^{\alpha^*} \Gamma(q_u^* + 1)}{[u - (v + 1)]! \Gamma(2u^* + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\beta}{\xi} \right)^{u^*+1} \left( \frac{2}{\frac{\beta}{\xi} + 1} \right)^{u^*+u-\alpha^*+2} \\ \times {}_2F_1 \left( -[u - (v + 1)]; u^* + u - \alpha^* + 2; p_v^* + 1; \frac{2}{\beta/\xi + 1} \right) \quad (3.2.6)$$

olarak tanımlanır. (3.2.5) de (3.2.2) kullanıldığında

$$\chi_{u^*vs}(\beta, \vec{r}) = \sum_{u=v+1}^{\infty} \omega_{uu^*}^{(\alpha^*)v}(\xi, \beta) \sum_{k=v+1}^u \tilde{\omega}_{uk}^{(\alpha^*)v} \chi_{kvs}(\xi, \vec{r}) \quad (3.2.7)$$

elde edilir.

$\xi = \beta$  için;

$$\chi_{u^*vs}(\beta, \vec{r}) = \sum_{u=v+1}^{\infty} \omega_{uu^*}^{(\alpha^*)v} \psi_{uvs}^{(\alpha^*)}(\beta, \vec{r}) \quad (3.2.8)$$

yapısı bulunur. Burada  $\omega_{uu^*}^{(\alpha^*)v}$  açılım katsayısı

$$\omega_{uu^*}^{(\alpha^*)v} = \frac{\Gamma(u - u^*) \Gamma(u^* + v - \alpha^* + 2)}{\Gamma(v + 1 - u^*)} \left[ \frac{(2u)^{\alpha^*}}{[u - (v + 1)]! \Gamma(2u^* + 1) \Gamma(q_u^* + 1)} \right]^{1/2} \quad (3.2.9)$$

biçiminde tanımlıdır. (3.2.8) de (3.2.2) kullanıldığında

$$\chi_{u^*vs}(\beta, \vec{r}) = \sum_{u=v+1}^{\infty} \omega_{uu^*}^{(\alpha^*)v} \sum_{k=v+1}^u \tilde{\omega}_{uk}^{(\alpha^*)v} \chi_{kvs}(\beta, \vec{r}) \quad (3.2.10)$$

ifadesini elde ederiz.  $\chi$ -NISTOs larde ortaya çıkan  $r^{n^*}$  ifadesini (3.2.3), (3.2.4) ve modifiye Laguerre polinomları (3.1.5) kullanılarak:

$$r^{n^*} = \sum_{u=l+1}^{\infty} \sum_{n=l+1}^u \tilde{Y}_{un, \mu^*}^{(\alpha^*)l} r^{n+s-1} \quad (3.2.11)$$

biçiminde yazabiliriz, burada  $n^* = s + \mu^*$ , ( $s, n^*$ 'ın tam kısmı;  $\mu^*, n^*$ 'ın kesirli kısmı)

$n^* > 1, s \geq 1, 0 < \mu^* < 1$  olarak tanımlanır. Denklem (3.2.11) deki  $\tilde{Y}_{un, \mu^*}^{(\alpha^*)l}$  ifadesi

$$\tilde{Y}_{un, \mu^*}^{(\alpha^*)l} = \tilde{\Omega}_{un}^{(\alpha^*)l} \sum_{k=l+1}^u \tilde{\Omega}_{uk}^{(\alpha^*)l} \Gamma(\mu^* - \alpha^* + k + 2) \quad (3.2.12)$$

$$\tilde{\Omega}_{un}^{(\alpha^*)l} = \left[ \frac{\Gamma(q_u^* + 1)}{[u - (l + 1)]!} \right]^{1/2} \tilde{a}_{un}^{(\alpha^*)l} \quad (3.2.13)$$

yapısına sahiptir. Burada  $q_u^* = u + l + 1 - \alpha^*$  dır.

### 3.3. Coulomb-Yukawa Benzeri Potansiyelleri İçeren Çekirdek Çekim İntegrallerinin Hesabı

Bu bölümde tam ve kesirli n baş kuantum sayılı Slater Tipi Orbitaler ( $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs) ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren atomik çekirdek çekim integrallerinin analitik hesabını elde edeceğiz. Hesaplamalarda literatürde üretilmiş  $\psi^{(\alpha^*)}$ -tam ortonormal standart baz fonksiyonları yardımı ile bulunan  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs için tek bölge toplama teoremlerinden faydalanacağız.

Coulomb-Yukawa benzeri korelasyon etkileşme potansiyeli:

$$f^{q^*}(\xi, \vec{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} r^{\mu^*-1} e^{-\xi r} S_{\nu\sigma}(\theta, \varphi) \quad (3.3.1)$$

yapısındadır ve  $q^* = \mu^* \nu \sigma$  olarak tanımlanır. Eğer  $\xi = 0$  olarak alırsak; (3.3.1) denklemi

$$f^{q^*}(0, \vec{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} r^{\mu^*-1} S_{\nu\sigma}(\theta, \varphi) \quad (3.3.2)$$

yapısına dönüşür. Bu ifade  $\mu^* \neq 0$ ,  $\nu \neq 0$ ,  $\sigma \neq 0$  durumunda genelleştirilmiş Coulomb potansiyeli (generalized Coulomb potential) olarak adlandırılır. Genelleştirilmiş sözünün kullanılmasının nedeni (3.3.2) formülünün Coulomb potansiyelinin genelleştirilmiş ifadesi nedeniyledir. Yani (3.3.2) denkleminde  $\mu^*=0$ ,  $\nu=0$ ,  $\sigma=0$  alındığında;

$$f^{000}(0, \vec{r}) = \sqrt{4\pi} \frac{1}{r} S_{00}(\theta, \varphi) = \sqrt{4\pi} \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{r} \quad (3.3.3)$$

Coulomb potansiyeli elde edilir. Coulomb potansiyelinin genelleştirilmesinden elde edilen potansiyeller multipole tip potansiyellerdir.

$\xi \neq 0$  durumu ise (3.3.1) ifadesini gösterir. Bu ifade genelleştirilmiş Yukawa benzeri potansiyel (generalized Yukawa like potentials) olarak adlandırılır. Coulomb benzeri potansiyel ( $\xi = 0$ ) kısmında incelendiği gibi  $\xi \neq 0$  durumunda (3.3.1) ifadesi genelleştirilmiş Yukawa benzeri multipol potansiyel (generalized Yukawa like multipole

potential) olacaktır. Böyle tanımlanmasının nedeni  $\mu^*=0$ ,  $\nu=0$ ,  $\sigma=0$  olduğunda Yukawa'nın önerdiği potansiyelin bulunmasıdır:

$$f^{000}(\xi, \vec{r}) = \frac{e^{-\xi r}}{r} \quad (3.3.4)$$

Başka bir değişle Yukawa potansiyelinin geliştirilmesinde Yukawa benzeri dipol, kuadropol, oktopol vs. potansiyeller elde edilir.  $\mu \geq 0$  durumunda (3.3.1) formülü Coulomb ( $\xi = 0$ )-Yukawa ( $\xi > 0$ ) benzeri potansiyel olarak adlandırılır.

### 3.3.1 Analitik Çözüm ( $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETO üzerinden)

Bu bölümde hesaplamak istediğimiz Coulomb-Yukawa benzeri potansiyellerin çekirdek çekim integrallerinin genel ifadesi

$$\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*) \mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \int \psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) \psi_{n' l' m'}^{(\alpha^*)}(\zeta', \vec{r}) f^{\mu^* \nu \sigma}(\xi, \vec{r}) d^3 \vec{r} \quad (3.3.1.1)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Daha önce (3.1.1) ifadesinde gösterdiğimiz gibi  $\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r})$  ifadesini reel ve küresel kısımlarına ayırırsak

$$\begin{aligned} & \mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*) \mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) \\ &= \int R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) S_{lm}^*(\theta, \varphi) R_{n' l'}^{(\alpha^*)}(\zeta', r) S_{l' m'}(\theta, \varphi) f^{\mu^* \nu \sigma}(\xi, \vec{r}) S_{\nu \sigma}(\theta, \varphi) d^3 \vec{r} \end{aligned} \quad (3.3.1.2)$$

yapısını elde etmiş oluruz.

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*) \mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) &= \int_0^\infty R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) R_{n' l'}^{(\alpha^*)}(\zeta', r) f^{\mu^* \nu \sigma}(\xi, \vec{r}) r^2 dr \\ &\times \int_0^\pi \int_0^{2\pi} S_{lm}^*(\theta, \varphi) S_{l' m'}(\theta, \varphi) S_{\nu \sigma}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi, \end{aligned} \quad (3.3.1.3)$$

küresel kısım:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} S_{lm}^*(\theta, \varphi) S_{l' m'}(\theta, \varphi) S_{\nu \sigma}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \sqrt{\frac{2\nu+1}{4\pi}} C^{|\sigma|}(\nu, l, l', m, m') A_{mm'}^\sigma \quad (3.3.1.4)$$

şeklinde ifade edilir.

Burada  $C^{v|\sigma|}(lm, l' m')$  genelleştirilmiş Gaunt katsayısıdır. Kompleks küresel harmoniklerin açılımında kullanılan katsayıların [51, 52] gerçek küresel harmonikleri kapsayacak şekilde genelleştirilmiş halidir.

Reel kısma ait olan integraller ise

$$\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sqrt{\frac{2\nu+1}{4\pi}} C^{v|\sigma|}(lm, l' m') A_{mm'}^\sigma I_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu}(\zeta, \zeta'; \xi) \quad (3.3.1.5)$$

biçiminde yazılır. Burada

$$I_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu}(\zeta, \zeta'; \xi) = \int_0^\infty R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) R_{n'l'}^{(\alpha^*)}(\zeta', r) f^{\mu^* \nu \sigma}(\xi, \vec{r}) r^2 dr \quad (3.3.1.6)$$

yapısında. (3.1.14) ifadesini göz önünde bulundurursak:

$$R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) = (2\zeta)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{x}{2}} \sum_{k=l+1}^n \frac{\tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l}}{\sqrt{(2k)!}} x^{k-1} \quad (3.3.1.7)$$

denklemini yazabiliriz.

$$f^{\mu^* \nu \sigma}(\xi, \vec{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} \frac{y^{\mu^*-1} e^{-y/2}}{(2\xi)^{\mu^*-1}} \quad (3.3.1.8)$$

Burada  $y = 2\xi r$  dir.

(3.3.1.8) ve (3.3.1.7) denklemlerini (3.3.1.6) denkleminde yerine yazıp gerekli düzenlemeleri yaptığımızda:

$$I_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^* \nu}(\zeta, \zeta'; \xi) = \frac{(2\zeta)^{3/2} (2\zeta')^{3/2}}{(2\xi)^{\mu^*-1}} \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'+l'=k}^{n'} \frac{\tilde{\gamma}_{nk, n' k'}^{(\alpha^*)l, (\alpha^*)l'}}{\sqrt{(2k)! (2k')!}} \times \int_0^\infty e^{-(\zeta+\zeta'+\xi)r} x^{k-1} x'^{k'-1} y^{\mu^*-1} r^2 dr \quad (3.3.1.9)$$

elde edilir. Burada  $\tilde{\gamma}_{nk, n' k'}^{(\alpha^*)l, (\alpha^*)l'} = \tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l} \tilde{\omega}_{n' k'}^{(\alpha^*)l'}$  dir.

Gerekli ara işlemler yapıp tekrar düzenlendiğinde

$$I_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} \frac{1}{(2\xi)^{\mu^*-1}} \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'+l'}^{n'} \frac{\tilde{Y}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'}}{\sqrt{(2k)!(2k')!}} \\ \times \mathcal{X}^{k+\frac{1}{2}} \mathcal{X}'^{k'+\frac{1}{2}} \mathcal{Y}^{\mu^*-1} \Gamma(k+k'+\mu^*) \quad (3.3.1.10)$$

bulunur. Burada  $\mathcal{X} = \frac{2\zeta}{\zeta+\zeta'+\xi}$ ,  $\mathcal{X}' = \frac{2\zeta'}{\zeta+\zeta'+\xi}$ ,  $\mathcal{Y} = \frac{2\xi}{\zeta+\zeta'+\xi}$  olarak tanımlanır.

Reel kısma ait bulduğumuz integral ifadesini (3.3.1.5) numaralı denklemde yerine yazarsak:

$$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sqrt{\frac{2\nu+1}{4\pi}} C^{v|\sigma|}(lm, l'm') A_{mm'}^\sigma \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} \frac{1}{(2\xi)^{\mu^*-1}} \\ \times \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'+l'}^{n'} \frac{\tilde{Y}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'}}{\sqrt{(2k)!(2k')!}} \mathcal{X}^{k+\frac{1}{2}} \mathcal{X}'^{k'+\frac{1}{2}} \mathcal{Y}^{\mu^*-1} \Gamma(k+k'+\mu^*) \quad (3.3.1.11)$$

sonucuna ulaşmış oluruz.

### 3.3.2. Analitik Çözüm (STOs'a geçiş)

Bu bölümde  $\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\xi, \vec{r})$  ifadesinden  $\chi_{klm}(\xi, \vec{r})$  ifadesine geçişi kullanarak Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyeli içeren çekirdek çekim integralleri için genel bir yapı oluşturacağız.  $\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\xi, \vec{r})$  ifadesinden  $\chi_{klm}(\xi, \vec{r})$  ifadesine geçiş

$$\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) = \sum_{k=l+1}^n \tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l} \chi_{klm}(\zeta, \vec{r}) \quad (3.3.2.1)$$

yapısı ile olmaktadır.  $\tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l}$  ifadesinin açık şeklini kısım 3.2.'de (3.2.3) ve (3.2.4) denklemleri ile vermiştik.

$$\chi_{klm}(\zeta, \vec{r}) = R_k(\zeta, r) S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.3.2.2)$$

$$R_k(\zeta, r) = \frac{(2\zeta)^{k+1/2}}{\sqrt{(2k)!}} r^{k-1} e^{-\zeta r} \quad (3.3.2.3)$$

$$\chi_{klm}(\zeta, \vec{r}) = \frac{(2\zeta)^{k+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2k)!}} r^{k-1} e^{-\zeta r} S_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.3.2.4)$$

Elde ettiğimiz bu ifadeleri kısım 3.3.1. deki (3.3.1.1) ifadesinde yerine yazalım:

$$\begin{aligned} & \mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) \\ &= \int \sum_{k=l+1}^n \tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l} \chi_{klm}^*(\zeta, \vec{r}) \sum_{k'=l'+1}^{n'} \tilde{\omega}_{n'k'}^{(\alpha^*)l'} \chi_{k'l'm'}(\zeta', \vec{r}) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) d^3\vec{r} \end{aligned} \quad (3.3.2.5)$$

daha önce  $\tilde{\gamma}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'} = \tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l} \tilde{\omega}_{n'k'}^{(\alpha^*)l'}$  olduğunu göstermiştik. Göstermiş olduğumuz bu eşitliği de kullanırsak

$$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'=l'+1}^{n'} \tilde{\gamma}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'} I_{klm,k'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) \quad (3.3.2.6)$$

ifadesini elde etmiş oluruz. Burada

$$I_{klm,k'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \int \chi_{klm}^*(\zeta, \vec{r}) \chi_{k'l'm'}(\zeta', \vec{r}) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) d^3\vec{r} \quad (3.3.2.7)$$

dır. (3.3.2.7) integralini çözebilmemiz için (3.3.1.4) (3.3.1.8) ve (3.3.2.2) bağıntılarından faydalanıp gerekli ara işlemler yapılırsa

$$I_{klm,k'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = C^{v|\sigma|} (lm, l' m') A_{mm'}^{\sigma} \int_0^{\infty} R_k(\zeta, r) R_{k'}(\zeta', r) r^{\mu^*-1} e^{-\xi r} r^2 dr \quad (3.3.2.8)$$

ifadesi elde edilir. Şimdi reel kısma ait olan integralleri çözeceğiz

$$I_{klm,k'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = C^{v|\sigma|} (lm, l' m') A_{mm'}^{\sigma} I_{kk'}^{\mu^*}(\zeta, \zeta'; \xi) \quad (3.3.2.9)$$

$$I_{kk'}^{\mu^*}(\zeta, \zeta'; \xi) = \int_0^{\infty} R_k(\zeta, r) R_{k'}(\zeta', r) r^{\mu^*-1} e^{-\xi r} r^2 dr, \quad (3.3.2.10)$$

daha önce yazmış olduğumuz (3.3.2.3) denklemini kullanarak

$$I_{kk'}^{\mu^*}(\zeta, \zeta'; \xi) = \frac{(2\zeta)^{k+1/2} (2\zeta')^{k'+1/2}}{\sqrt{(2k)!(2k')!}} \int_0^{\infty} e^{-(\zeta+\zeta'+\xi)r} r^{k+k'+\mu^*-1} dr \quad (3.3.2.11)$$

yapısını elde ederiz. Yukarıda yazmış olduğumuz integrali çözebilmemiz için

$$\int_0^{\infty} e^{-px} x^n dx = \frac{n!}{p^{n+1}}$$

integral yapısından faydalanmamız gerekir. Burada n sayısı eğer kesirli (noninteger) sayı ise  $n! = \Gamma(n + 1)$  olarak almamız gerekir. Yaptığımız ara işlemlerden sonra integralimiz

$$I_{kk'}^{\mu^*}(\zeta, \zeta'; \xi) = \frac{(2\zeta)^{k+1/2}(2\zeta')^{k'+1/2}}{\sqrt{(2k)!(2k')!}} \frac{\Gamma(k+k'+\mu^*)}{(\zeta+\zeta'+\xi)^{k+k'+\mu^*}} \quad (3.3.2.12)$$

şeklini alır.  $t = \frac{\zeta-\zeta'}{\zeta+\zeta'}$  ve  $\zeta+\zeta' = \varepsilon$  değişken değişimlerini yaptıktan sonra integralimizin son hali

$$I_{kk'}^{\mu^*}(\zeta, \zeta'; \xi) = \frac{\Gamma(k+k'+\mu^*)}{\sqrt{(2k)!(2k')!}(\varepsilon+\xi)^{\mu^*-1}} \left(\frac{\varepsilon(1+t)}{\varepsilon+\xi}\right)^{k+1/2} \left(\frac{\varepsilon(1-t)}{\varepsilon+\xi}\right)^{k'+1/2} \quad (3.3.2.13)$$

olur. Elde ettiğimiz integral sonuçlarını (3.3.2.6) da yerine yazarsak:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) &= \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'=l'+1}^{n'} \tilde{\gamma}_{nk, n' k'}^{(\alpha^*)l, (\alpha^*)l'} C^{v|\sigma|}(lm, l' m') A_{mm'}^\sigma \\ &\times \frac{\Gamma(k+k'+\mu^*)}{\sqrt{(2k)!(2k')!}(\varepsilon+\xi)^{\mu^*-1}} \left(\frac{\varepsilon(1+t)}{\varepsilon+\xi}\right)^{k+1/2} \left(\frac{\varepsilon(1-t)}{\varepsilon+\xi}\right)^{k'+1/2} \end{aligned} \quad (3.3.2.14)$$

ifadesini bulmuş oluruz.

### 3.3.3 Seri çözüm( $\psi^{(\alpha^*)}$ - ETOs üzerinden)

Coulomb-Yukawa benzeri potansiyellerin çekirdek çekim integrallerinin genel ifadesi

$$\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \int \psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) \psi_{n' l' m'}^{(\alpha^*)}(\zeta', \vec{r}) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) d^3\vec{r} \quad (3.3.3.1)$$

şeklindedir. Daha önce (3.1.1) ifadesinde gösterdiğimiz gibi  $\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r})$  ifadesini reel ve küresel kısımlarına ayırırsak:

$$\begin{aligned} &\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) \\ &= \int R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) S_{lm}^*(\theta, \varphi) R_{n' l'}^{(\alpha^*)}(\zeta', r) S_{l' m'}(\theta, \varphi) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) S_{v\sigma}(\theta, \varphi) d^3\vec{r} \end{aligned} \quad (3.3.3.2)$$

yapısını elde etmiş oluruz.



$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) &= \int_0^\pi R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) R_{n'l'}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) r^2 dr \\ &\times \int_0^\pi \int_0^{2\pi} S_{lm}^*(\theta, \varphi) S_{l'm'}(\theta, \varphi) S_{v\sigma}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi. \end{aligned} \quad (3.3.3.3)$$

Küresel kısım

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} S_{lm}^*(\theta, \varphi) S_{l'm'}(\theta, \varphi) S_{v\sigma}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \sqrt{\frac{2\nu+1}{4\pi}} C^{\nu|\sigma|}(lm, l'm') A_{mm'}^\sigma \quad (3.3.3.4)$$

şeklinde ifade edilir.

Burada  $C^{\nu|\sigma|}(lm, l'm')$  genelleştirilmiş Gaunt katsayısıdır. Kompleks küresel harmoniklerin açılımında kullanılan katsayıların gerçek küresel harmonikleri kapsayacak şekilde genelleştirilmiş halidir.

Reel kısma ait olan integraller ise

$$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sqrt{\frac{2\nu+1}{4\pi}} C^{\nu|\sigma|}(lm, l'm') A_{mm'}^\sigma I_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v}(\zeta, \zeta'; \xi) \quad (3.3.3.5)$$

biçiminde yazılır. Burada

$$I_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v}(\zeta, \zeta'; \xi) = \int_0^\pi R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) R_{n'l'}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) r^2 dr \quad (3.3.3.6)$$

yapısındadır. (3.1.14) ifadesini göz önünde bulundurursak

$$R_{nl}^{(\alpha^*)}(\zeta, r) = (2\zeta)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{x}{2}} \sum_{k=l+1}^n \frac{\tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l}}{\sqrt{(2k)!}} x^{k-1} \quad (3.3.3.7)$$

denklemini yazabiliriz.

Coulomb-Yukawa potansiyelleri

$$f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} \frac{y^{\mu^*-1} e^{-y/2}}{(2\xi)^{\mu^*-1}} \quad (3.3.3.8)$$

ile verilir, burada  $y = 2\xi r$  dir. (3.2.11) yapısını kullanarak

$$I_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v}(\zeta, \zeta'; \xi) = \frac{(2\zeta)^{3/2}(2\zeta')^{3/2}}{(2\xi)^{\mu^*-1}} \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'+l'}^{n'} \frac{\tilde{Y}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'}}{\sqrt{(2k)!(2k')!}} \\ \times \sum_{u=v+1}^N \sum_{\mu=v+1}^u \tilde{Y}_{u\mu,u^*}^{(\alpha^*)v} \int_0^\infty e^{-(x+x'+y)/2} x^{k-1} x'^{k'-1} y^{\mu+s-2} r^2 dr \quad (3.3.3.9)$$

elde ederiz.

$$\tilde{Y}_{u\mu,u^*}^{(\alpha^*)v} = \tilde{\Omega}_{u\mu}^{(\alpha^*)v} \sum_{k=v+1}^u \tilde{\Omega}_{uk}^{(\alpha^*)v} \Gamma(\mu^* - \alpha^* + k + 2) \quad (3.3.3.10)$$

yapısına sahiptir. Gerekli ara işlemler yapıpıp tekrar düzenlendiğinde

$$I_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} \frac{1}{(2\xi)^{\mu^*-1}} \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'+l'}^{n'} \frac{\tilde{Y}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'}}{\sqrt{(2k)!(2k')!}} \\ \times \sum_{u=v+1}^N \sum_{\mu=v+1}^u \tilde{Y}_{u\mu,u^*}^{(\alpha^*)v} \mathcal{X}^{k+\frac{1}{2}} \mathcal{X}'^{k'+\frac{1}{2}} \mathcal{Y}^{\mu+s-2} (k+k'+\mu+s-2)! \quad (3.3.3.11)$$

bulunur. Burada  $\mathcal{X} = \frac{2\zeta}{\zeta+\zeta'+\xi}$ ,  $\mathcal{X}' = \frac{2\zeta'}{\zeta+\zeta'+\xi}$ ,  $\mathcal{Y} = \frac{2\xi}{\zeta+\zeta'+\xi}$  olarak tanımlanır.

Reel kısma ait bulduğumuz integral ifadesini (3.3.3.1) numaralı denklemde yerine yazarsak

$$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) \\ = C^{v|\sigma|} (lm, l'm') A_{mm'}^\sigma \frac{1}{(2\xi)^{\mu^*-1}} \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'+l'}^{n'} \frac{\tilde{Y}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'}}{\sqrt{(2k)!(2k')!}} \\ \times \sum_{u=v+1}^N \sum_{\mu=v+1}^u \tilde{Y}_{u\mu,u^*}^{(\alpha^*)v} \mathcal{X}^{k+\frac{1}{2}} \mathcal{X}'^{k'+\frac{1}{2}} \mathcal{Y}^{\mu+s-2} (k+k'+\mu+s-2)! \quad (3.3.3.12)$$

ifadesini elde etmiş oluruz.

### 3.3.4.Seri Çözümler (STOs'a geçiş)

Bu bölümde  $\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\xi, \vec{r})$  ifadesinden  $\chi_{klm}(\xi, \vec{r})$  ifadesine geçişi kullanarak Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyeli içeren çekirdek çekim integralleri için genel bir yapı oluşturacağız.

$$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \int \psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) \psi_{n'l'm'}^{(\alpha^*)}(\zeta', \vec{r}) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) d^3\vec{r} \quad (3.3.4.1)$$

$$\psi_{nlm}^{(\alpha^*)}(\zeta, \vec{r}) = \sum_{k=l+1}^n \tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l} \chi_{klm}(\zeta, \vec{r}) \quad (3.3.4.2)$$

$\tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l}$  ifadesinin açık şeklini kısım 3.2.'de bölümde (3.2.3) ve (3.2.4) denklemleri ile vermiştik. STOs açık hali kısım 3.2.2.'de (3.2.2.2) denklemini ile

$$\chi_{klm}(\zeta, \vec{r}) = R_k(\zeta, r) S_{lm}(\theta, \varphi)$$

verilmekteydi.

$$R_k(\zeta, r) = \frac{(2\zeta)^{k+1/2}}{\sqrt{(2k)!}} r^{k-1} e^{-\zeta r}, \quad (3.3.4.3)$$

$$\chi_{klm}(\zeta, \vec{r}) = \frac{(2\zeta)^{k+1/2}}{\sqrt{(2k)!}} r^{k-1} e^{-\zeta r} S_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.3.4.4)$$

Elde ettiğimiz bu ifadeleri (3.3.4.1) ifadesinde yerine yazalım:

$$\begin{aligned} & \mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) \\ &= \int \sum_{k=l+1}^n \tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l} \chi_{klm}^*(\zeta, \vec{r}) \sum_{k'=l'+1}^{n'} \tilde{\omega}_{n'k'}^{(\alpha^*)l'} \chi_{k'l'm'}(\zeta', \vec{r}) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) d^3\vec{r} \end{aligned} \quad (3.3.4.5)$$

daha önce  $\tilde{\gamma}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'} = \tilde{\omega}_{nk}^{(\alpha^*)l} \tilde{\omega}_{n'k'}^{(\alpha^*)l'}$  olduğunu göstermiştik.

Göstermiş olduğumuz eşitliği de kullanırsak:

$$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'=l'+1}^{n'} \tilde{\gamma}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'} I_{klm,k'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) \quad (3.3.4.6)$$

ifadesini elde etmiş oluruz. Burada

$$I_{klm,k'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \int \chi_{klm}^*(\zeta, \vec{r}) \chi_{k'l'm'}(\zeta', \vec{r}) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) d^3\vec{r} \quad (3.3.4.7)$$

dır. (3.3.4.7) integralini çözebilmemiz için (3.3.1.4) (3.3.1.8) ve (3.3.2.2) bağıntılarından faydalanıp gerekli ara işlemler yapılırsa:

$$I_{klm,k'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sqrt{\frac{2\nu+1}{4\pi}} C^{\nu|\sigma|}(lm, l'm') A_{mm'}^\sigma \int_0^\infty R_k(\zeta, r) R_{k'}(\zeta', r) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) r^2 dr \quad (3.3.4.8)$$

ifadesi elde edilir. Şimdi reel kısma ait olan integralleri çözeceğiz:

$$I_{klm,k'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sqrt{\frac{2\nu+1}{4\pi}} C^{\nu|\sigma|}(lm, l'm') A_{mm'}^\sigma I_{kk'}^{\mu^*}(\zeta, \zeta'; \xi) \quad (3.3.4.9)$$

$$I_{kk'}^{\mu^*}(\zeta, \zeta'; \xi) = \int_0^\infty R_k(\zeta, r) R_{k'}(\zeta', r) f^{\mu^*v\sigma}(\xi, \vec{r}) r^2 dr \quad (3.3.4.10)$$

Daha önce yazmış olduğumuz (3.3.3.2) denklemini kullanırsak

$$I_{kk'}^{\mu^*}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} \left(\frac{2\zeta}{\zeta+\zeta'+\xi}\right)^{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{2\zeta'}{\zeta+\zeta'+\xi}\right)^{k'+\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{(2k)!(2k')!} (2\xi)^{\mu^*-1}} \\ \times \sum_{u=v+1}^{\infty} \sum_{\eta=v+1}^u \tilde{Y}_{u\eta, u^*}^{(\alpha^*)v} \left(\frac{2\xi}{\zeta+\zeta'+\xi}\right)^{\mu+\eta-1} (k+k'+\mu+\eta-1)! \quad (3.3.4.11)$$

elde edilir. Bulduğumuz bu ifadeyi en genel ifademizde yerine yazarsak

$$\mathcal{K}_{nlm, n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) = \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'=l'+1}^{n'} \tilde{Y}_{nk, n'k'}^{(\alpha^*)l, (\alpha^*)l'} C^{\nu|\sigma|}(lm, l'm') A_{mm'}^\sigma \\ \times \frac{1}{\sqrt{(2k)!(2k')!} (2\xi)^{\mu^*-1}} \left(\frac{2\zeta}{\zeta+\zeta'+\xi}\right)^{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{2\zeta'}{\zeta+\zeta'+\xi}\right)^{k'+\frac{1}{2}} \\ \times \sum_{u=v+1}^{\infty} \sum_{\eta=v+1}^u \tilde{Y}_{u\eta, u^*}^{(\alpha^*)v} \left(\frac{2\xi}{\zeta+\zeta'+\xi}\right)^{\mu+\eta-1} (k+k'+\mu+\eta-1)! \quad (3.3.4.12)$$

bulunur.

$$a) \mathcal{X} = \frac{2\zeta}{\zeta+\zeta'+\xi}, \mathcal{X}' = \frac{2\zeta'}{\zeta+\zeta'+\xi}, \mathcal{Y} = \frac{2\xi}{\zeta+\zeta'+\xi} \quad \text{olarak alırsak}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) &= \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'=l'+1}^{n'} \tilde{\gamma}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'} C^{v|\sigma|}(lm, l'm') A_{mm'}^\sigma \\
&\times \frac{(\mathcal{X})^{k+\frac{1}{2}}(\mathcal{X}')^{k'+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2k)!(2k')!} (2\xi)^{\mu^*-1}} \sum_{u=v+1}^{\infty} \sum_{\eta=v+1}^u \tilde{Y}_{u\eta,u^*}^{(\alpha^*)v} (\mathcal{Y})^{\mu+\eta-1} (k+k'+\mu+\eta-1)! \quad (3.3.4.13)
\end{aligned}$$

elde edilir.

b)  $t = \frac{\zeta-\zeta'}{\zeta+\zeta'}$  ve  $\varepsilon = \zeta + \zeta'$  olarak tanımlarsak

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi) &= \sum_{k=l+1}^n \sum_{k'=l'+1}^{n'} \tilde{\gamma}_{nk,n'k'}^{(\alpha^*)l,(\alpha^*)l'} C^{v|\sigma|}(lm, l'm') A_{mm'}^\sigma \\
&\times \frac{1}{\sqrt{(2k)!(2k')!} (2\xi)^{\mu^*-1}} \left(\frac{\varepsilon(1+t)}{\varepsilon+\xi}\right)^{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{\varepsilon(1-t)}{\varepsilon+\xi}\right)^{k'+\frac{1}{2}} \\
&\times \sum_{u=v+1}^{\infty} \sum_{\eta=v+1}^u \tilde{Y}_{u\eta,u^*}^{(\alpha^*)v} \left(\frac{2\xi}{\varepsilon+\xi}\right)^{\mu+\eta-1} (k+k'+\mu+\eta-1)! \quad (3.3.4.14)
\end{aligned}$$

elde edilir.

## SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Kuantum mekaniğinde, Hidrojene benzer atomlar için standart olmayan baz fonksiyonları relativistik ve relativistik olmayan elektron yapı hesaplamalarında yaygın olarak kullanılmaktadır. Elektronik yapı hesaplamalarında, özellikle seri açılımlarının kullanıldığı durumlarda, yakınsaklıkla ilgili sorunlar ortaya çıkmaktadır. Bu sorunların tam ortonormal standart  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs baz fonksiyonları kullanılarak giderilebileceği düşünülmektedir.

Tezde kullanılan  $\chi$ -NISTOs'lar atom ve molekül hesaplamaları için  $\chi$ -ISTOs'den daha esnek baz fonksiyonudurlar, dalga fonksiyonunun kalitesini arttırlar ve  $\chi$ -ISTOs'a göre daha iyi enerji değerleri verdiği literatürde yer almaktadır.

Bu tezde, tam ve kesirli baş kuantum sayılı Coulomb-Yukawa benzeri potansiyelleri içeren atomik çekirdek çekim integrallerinin analitik ve nümerik hesabı konu edildi. Bu integral hesaplamalarında standart konvensiyonda tanımlanan tam ortonormal  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs kümeleri kullanılarak elde edilen  $\chi$ -ISTOs ve  $\chi$ -NISTOs için tek bölgeli toplama teoremlerinden faydalanıldı. Atomik çekirdek çekim integrallerinde kullanılan serilerin yakınsaklığı kuantum sayılarının, potansiyel parametrelerinin ve orbitallerin konumunun keyfi değerleri göz önüne alınarak incelendi.

Yapılan çalışmada, tam ve kesirli indisli Coulomb-Yukawa benzeri korelasyon etkileşme potansiyellerini içeren atomik çekirdek çekim integralleri için farklı analitik ifadeler sunuldu. İlk olarak standart konvensiyondaki tam ortonormal  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs kümeleri ve  $\chi$ -ISTOs üzerinden kesirli indisli Coulomb-Yukawa benzeri potansiyelleri içeren atomik çekirdek çekim integralleri hesaplandı. Bu hesaplamalarda standart tam ortonormal  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs kümeleri kullanılarak elde edilen  $\chi$ -ISTOs için tek bölgeli toplama teoremlerinden faydalanıldı. İkinci olarak ise  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs kümeleri ve  $\chi$ -ISTOs üzerinden tam indisli Coulomb-Yukawa benzeri potansiyelleri içeren atomik çekirdek çekim integrallerinin hesabı yapıldı. Hesaplamalarda kesirli indisli Coulomb-Yukawa benzeri potansiyellerinde standart tam ortonormal  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs kümeleri kullanılarak elde edilen  $\chi$ -NISTOs için tek bölgeli toplama teoremlerinden faydalanıldı. Elde edilen sonuçlar birbirleri ile karşılaştırıldı.

Denklem 3.3.1.1 yardımıyla elde edilen  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs üzerinden Coulomb-Yukawa benzeri potansiyellerin çekirdek çekim integralleri bu çalışmada belirlenen çok sayıdaki

formüller yardımıyla hesaplanabilmektedir. Bu formüllerin kullanılabilirliği  $\alpha^*$  öz sürtünme kuantum sayısının, orbital kuantum sayılarının ve perdeleme sabitlerinin keyfi değerlerinde analitik ve seri hesaplamaları yapılarak denendi. Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerinin atomik çekirdek çekim integrallerinin sayısal hesabı Mathematica 8.0 kullanılarak oluşturulan bilgisayar programı yardımıyla yapıldı.

Keyfi  $\alpha^*$  öz sürtünme kuantum sayısının, orbital kuantum sayılarının ve perdeleme sabitlerinin değerleri göz önüne alınarak Coulomb-Yukawa benzeri potansiyellerin atomik çekirdek çekim integrallerine ait hesaplama sonuçları analitik ve seri açılımları kullanılarak karşılaştırıldı.  $\alpha^*$ 'ın kesirli değerlerine göre (3.3.1.11)-(3.3.2.14) ve (3.3.3.12)-(3.3.4.12) denklemlerinin  $\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  integraline göre analitik ve sayısal hesaplama sonuçları Tablo 1-4'de,  $\alpha^*$ 'ın tam değerlerine göre hesaplamaları Tablo 5-7'de verildi.  $\alpha^*$ 'ın kesirli değerlerine göre (3.3.1.10)-(3.3.2.13) ve (3.3.3.11)-(3.3.4.11) denklemlerinin  $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  integraline göre analitik ve sayısal hesaplama sonuçları Tablo 8-11'de,  $\alpha^*$ 'ın tam değerlerine göre hesaplamaları Tablo 12-14'te verildi. Keyfi  $K_{210,210}^{(\alpha^*)3.4.2.0}(2.3,4.6; 1.2)$  ve  $I_{210,210}^{(\alpha^*)3.4.2}(2.3,4.6; 1.2)$  denklemlerinin analitik ve seri çözümlerinin birbirleriyle karşılaştırılması farklı  $\alpha^* = -1.7, -0.7, -2.7, 0.7$  değerleri için yapıldı. Bulunan sonuçlar sırasıyla, Şekil 2-5 ve Şekil 6-9'da sunuldu.

Elde edilen karşılaştırmalı değerlere göre analitik ve seri çözümlerin birbirleriyle uyumlu olduğu görüldü. Bu durum, tam ve kesirli n baş kuantum sayılı Slater Tipi Orbitaller ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren atomik çekirdek çekim integrallerinin doğru olarak hesaplanabildiğini göstermektedir.

Yapılan incelemelerden görülmüştür ki,  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs baz fonksiyonları kullanılarak elektronik yapı hesaplamalarında, seri açılımların kullanıldığı durumlarda yakınsaklıkla ilgili sorunların ortadan kaldırılabilmesi mümkün olabilecektir. Ayrıca,  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs baz fonksiyonlarından relativistik elektronik yapı hesaplamaları için de faydalanılabilir.

Bu nedenle, bu tezde elde edilen sonuçlar ileride yapılması arzu edilen relativistik elektronik yapı hesaplamalarını içeren çalışmalar için de kullanılabilir.

**Tablo-1**  $\alpha^* = 2.6, 1.7, 0.3$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*) \mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

n	l	m	$\zeta$	n'	l'	m'	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*) \mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.11)-(3.3.2.14) [a] ve (3.3.3.12)-(3.3.4.12) N=70		
												$\alpha^* = 2, 6$	$\alpha^* = 1, 7$	$\alpha^* = 0, 3$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.01182877833[a] -0.0118287804424	-0.007070455722[a] -0.007070455364	-0.004764234122[a] -0.00476423417394
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	-0.07586608033[a] -0.07586608033	0.2630104334[a] 0.2630104334	1.8745248582[a] 1.8745248582
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	-0.007219234873[a] -0.007219235651	0.008510544946[a] 0.008510547222	0.1054217027[a] 0.1054216917
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.03845209137[a] 0.03845211122	0.06198167370[a] 0.06198166330	0.07506424096[a] 0.07506424536
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.04286935488[a] 0.04286946786	0.08884586493[a] 0.08884575211	0.05958104734[a] 0.05958111001
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	-0.03754008890[a] -0.03754008892	-0.04402673000[a] -0.04402672999	-0.02179629251[a] -0.02179629251
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.0002388001569[a] 0.0002393969153	0.001244234672[a] 0.001244242505	0.008250040654[a] 0.008250038313
6	3	1	3,868	4	3	1	1,596	2,3	0	0	3,1	0.000642553311[a] 0.000642553312	0.000226022463[a] 0.000226022463	-0.000256520396[a] -0.000256520396



**Tablo-2**  $\alpha^* = -0.8, -1.7, -2.9$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

n	l	m	$\zeta$	n'	l'	m'	$\zeta'$	$\mu^*$	v	$\sigma$	$\xi$	$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.11)-(3.3.2.14) [a] ve (3.3.3.12)-(3.3.4.12) N=70		
												$\alpha^* = -0,8$	$\alpha^* = -1,7$	$\alpha^* = -2,9$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.002844535717[a] -0.002844535695	0.006794058795[a] 0.006794058762	0.03566492249[a] 0.0356649225170
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	2.6029792291[a] 2.6029792291	2.3689652633[a] 2.3689652633	1.4717662881[a] 1.47176628810
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.1538143016[a] 0.1538144724	0.1426413761[a] 0.1426420341	0.08990333601[a] 0.08990467863
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.06216138847[a] 0.06216138501	0.04483120028[a] 0.04483120920	0.02372728204[a] 0.02372716680
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.01650963094[a] 0.01650952361	0.005170414409[a] 0.005171695032	0.01108349967[a] 0.01109037600
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	0.007177270909[a] 0.007177270915	0.02389011759[a] 0.02389011757	0.02986208765[a] 0.02986208810
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.02788193475[a] 0.02788193521	0.06661970469[a] 0.06661970483	0.1830756728[a] 0.1830756727
6	3	1	3,868	4	3	1	1,596	2,3	0	0	3,1	-0.000035563043[a] -0.0000359665643	0.000514371493[a] 0.000514371493	0.00142619800[a] 0.00142619800

**Tablo-3**  $\alpha^* = 1.9, 2.8, -3.2$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*\nu\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

n	l	m	$\zeta$	n'	l'	m'	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*\nu\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.11)-(3.3.2.14) [a] ve (3.3.3.12)-(3.3.4.12) N=70		
												$\alpha^* = 1,9$	$\alpha^* = 2,8$	$\alpha^* = -3,2$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.00799522409380[a] -0.00799522372141	-0.0128970709245[a] -0.0128970751204	0.04497671192[a] 0.0449767118624
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	0.121322149847[a] 0.121322149847	-0.0607461481240[a] -0.0607461481240	1.2420990743[a] 1.2420990743
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.000843587209093[a] 0.000843587920251	-0.00519754899490[a] -0.00519754923721	0.07606905162[a] 0.07607048202
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.0573574866568[a] 0.0573574787707	0.0328537557868[a] 0.0328537789252	0.01960629322[a] 0.07607048202
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.0830674883480[a] 0.0830673751905	0.0269788265671[a] 0.0269790058439	0.01292700651[a] 0.01293555590
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	-0.0440139375526[a] -0.0440139375493	-0.0342365453015[a] -0.0342365453169	0.02897331149[a] 0.02897331226
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.000903065043933[a] 0.00090306505923	0.000146343439915[a] 0.000146363804025	0.2299737840[a] 0.2299737839
6	3	1	3,868	4	3	1	1,596	2,3	0	0	3,1	0.000304997041670[a] 0.00030499704167	0.000730878144111[a] 0.000730878144113	0.00163128763[a] 0.00163128763

**Tablo-4**  $\alpha^* = 0.7, -2.1, -4.1$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*\nu\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

n	l	m	$\zeta$	n'	l'	m'	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*\nu\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.11)-(3.3.2.14) [a] ve (3.3.3.12)-(3.3.4.12) N=70		
												$\alpha^* = 0,7$	$\alpha^* = -2,1$	$\alpha^* = -4,1$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.00479365981124[a] -0.00479365990064	0.0145041034011[a] 0.0145041034154	0.0735606946378[a] 0.0735606947914
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	1.39010165001[a] 1.39010165001	2.10230353295[a] 2.10230353295	0.673894084354[a] 0.673894084354
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.0752427569574[a] 0.0752427505530	0.127311819427[a] 0.127312739421	0.0415273003866[a] 0.0415287185702
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.0751293014594[a] 0.0751293071662	0.0371350930447[a] 0.0371350870960	0.0103314465087[a] 0.0103310520777
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.0767767146993[a] 0.0767767923147	0.00589757240399[a] 0.00590031823929	0.0152557509472[a] 0.0152682633138
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	-0.0313812121310[a] -0.0313812121367	0.0278709666959[a] 0.0278709667133	0.0232190595136[a] 0.0232190617929
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.00503919026146[a] 0.00503919022569	0.0950258415358[a] 0.0950258415351	0.431507225264[a] 0.43150722526
6	3	1	3,868	4	3	1	1,596	2,3	0	0	3,1	-0.000194522481471[a] -0.00019452248147	0.000817356893270[a] 0.0008173568933	0.00209175101333[a] 0.0020917510133

**Tablo-5**  $\alpha^* = \alpha = 2,1,0$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*\nu\sigma}(\zeta,\zeta';\xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

n	l	m	ζ	n'	l'	m'	ζ'	μ*	ν	σ	ξ	$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*\nu\sigma}(\zeta,\zeta';\xi)$ (3.3.1.11)-(3.3.2.14) [a] ve(3.3.3.12)-(3.3.4.12)N=70		
												α = 2	α = 1	α = 0
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.008502021240[a] -0.008502020927	-0.005062595685[a] -0.005062595717	-0.004752833055[a] -0.00475283305162
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	0.06514120992[a] 0.06514120992	1.0094474900[a] 1.0094474900	2.1807819400[a] 2.18078194009
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	-0.002049642242[a] -0.002049642242	0.05206554865[a] 0.05206554865	0.1249736801[a] 0.124973680133
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.05486643872[a] 0.05486643353	0.07315525162[a] 0.07315525288	0.07315525162[a] 0.07315525134
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.07910139137[a] 0.07910128982	0.08650024324[a] 0.08650027265	0.045826511156[a] 0.045826503369
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	-0.04367767366[a] -0.04367767366	-0.03718710120[a] -0.03718710120	-0.013807695619[a] -0.013807695619
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.0007637018355[a] 0.0007637556734	0.003407122135[a] 0.0034071147772	0.011716817308[a] 0.011716816446
6	3	1	3,868	4	3	1	1,596	2,3	0	0	3,1	0.000356277870[a] 0.000356277870	-0.0001050486908[a] -0.0001050486908	-0.0002542732589[a] -0.0002542732589

**Tablo-6**  $\alpha^* = \alpha = -1, -2, -3$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*) \mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

n	l	m	ζ	n'	l'	m'	ζ'	μ*	ν	σ	ξ	$\mathcal{K}_{nlm, n' l' m'}^{(\alpha^*) \mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.11)-(3.3.2.14) [a] ve (3.3.3.12) (3.3.4.12) N=70		
												$\alpha = -1$	$\alpha = -2$	$\alpha = -3$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.001550745192[a] -0.001550745193	0.01237608482[a] 0.01237608482	0.03871431354[a] 0.03871431354
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	2.6094857750[a] 2.60948577505	2.1746164769[a] 2.17461647697	1.3936797545[a] 1.3936797545
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.1549932950[a] 0.15499355010	0.1315166028[a] 0.13151745801	0.08520916515[a] 0.08521054215
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.05852420130[a] 0.05852420135	0.03901613420[a] 0.03901613419	0.02229493383[a] 0.02229479786
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.01199909173[a] 0.01199909367	0.005507026216[a] 0.005509356956	0.01174030726[a] 0.01174774640
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	0.01173581236[a] 0.01173581236	0.027078586708[a] 0.027078586708	0.02964647143[a] 0.02964647197
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.03414316635[a] 0.03414316679	0.08710548621[a] 0.08710548623	0.1977437645[a] 0.1977437644
6	3	1	3,868	4	3	1	1,596	2,3	0	0	3,1	0.00006320114125[a] 0.00006320114125	0.0007401012140[a] 0.0007401012140	0.001496749942[a] 0.001496749942

**Tablo-7**  $\alpha^* = \alpha = -4, -6, -7, -8$  için  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*\nu\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

n	l	m	$\zeta$	n'	l'	m'	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$\mathcal{K}_{nlm,n'l'm'}^{(\alpha^*)\mu^*\nu\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.11)-(3.3.2.14) [a] ve (3.3.3.12)-(3.3.4.12) N=70			
												$\alpha = -4$	$\alpha = -6$	$\alpha = -7$	$\alpha = -8$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	0.0705100805220[a] 0.0705100805220	0.108938551098[a] 0.108938582706	0.105332469813[a] 0.105332555935	0.0687293886973[a] 0.0687296276994
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	0.726400391403[a] 0.726400391403	0.121288516087[a] 0.121288516087	0.0405991982292[a] 0.0405991982292	0.00328468201018[a] 0.00328468201018
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.0447361726085[a] 0.0447376107774	0.007538105915818[a] 0.00753877451865	0.00253094419164[a] 0.00253127760674	0.000205676435621[a] 0.000205728382530
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.0111474669137[a] 0.0111470943027	0.00198177189576[a] 0.00198126988549	0.000720644325732[a] 0.000720277090793	0.0000739122385366[a] 0.0000738025762385
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.0152576323234[a] 0.0152698313200	0.00835374830130[a] 0.00836501459339	0.00436646383298[a] 0.00437400504147	0.000750086541927[a] 0.000752102529753
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	0.0239980527691[a] 0.0239980548517	0.00910838317147[a] 0.00910838858741	0.00459161884385[a] 0.00459162431223	0.000855628872796[a] 0.000855631944902
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.403950700479[a] 0.403950700479	1.27245703621[a] 1.27245703621	1.99166593583[a] 1.99166593583	3.91383743419[a] 3.91383743419
6	3	1	3,868	4	3	1	1,596	2,3	0	0	3,1	0.00205413752219[a] 0.00205413752219	0.00213522828610[a] 0.00213522828610	0.00178125427808[a] 0.00178125427808	0.000923688188768[a] 0.000923688189

**Tablo-8**  $\alpha^* = 2.6, 1.7, 0.3$  için  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metodlarının karşılaştırılması (a. u. de)

$n$	$\ell$	$m$	$\zeta$	$n'$	$\ell'$	$m'$	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.10)-(3.3.2.13) [a]ve (3.3.3.11)-(3.3.4.11) N=70		
												$\alpha^* = 2, 6$	$\alpha^* = 1, 7$	$\alpha^* = 0, 3$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.09376264015[a] - 0.09376265684	-0.05604506034[a] -0.05604505750	-0.03776443830[a] -0.03776443870
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	-0.2689382524[a] -0.2689382524	0.9323477111[a] 0.9323477111	6.6450176070[a] 6.6450176070
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	-0.02559152130[a] -0.02559152406	0.03016909632[a] 0.03016910439	0.3737102060[a] 0.3737101669
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	-0.09376264015[a] 0.1180472172	0.1902825063[a] 0.1902824744	0.2304457278[a] 0.2304457413
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.15196790630[a] 0.1519683068	0.3149503908[a] 0.3149499909	0.2112093136[a] 0.2112095357
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	-0.2304946535[a] -0.2304946537	-0.2703223720[a] -0.2703223719	-0.1338283695[a] -0.1338283696
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.003052187547[a] 0.003059814922	0.01590299445[a] 0.01590309457	0.1054466281[a] 0.1054465982

**Tablo-9**  $\alpha^* = -0.8, -1.7, -2.9$  için  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının karşılaştırılması (a. u. de)

$n$	$\ell$	$m$	$\zeta$	$n'$	$\ell'$	$m'$	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^*v\sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.10)-(3.3.2.13) [a]ve (3.3.3.11)-(3.3.4.11)N=70		
												$\alpha^* = -0,8$	$\alpha^* = -1,7$	$\alpha^* = -2,9$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.02254765212[a] -0.02254765193	0.05385415737[a] 0.05385415711	0.2827035218[a] 0.282703521957
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	9.2273211169[a] 9.22732111691	8.3977632074[a] 8.3977632074	5.2172756499[a] 5.21727564996
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.5452575025[a] 0.5452581081	0.5056505127[a] 0.50565284532	0.3186990282[a] 0.318703787716
2	1	0	2.3	2	1	0	4.6	3.4	2	0	1.2	0.1908342271[a] 0.1908342165	0.1376308938[a] 0.1376309212	0.07284228425[a] 0.07284193050
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.05852511790[a] 0.05852473743	0.01832864186[a] 0.01833318155	0.03928998335[a] 0.0393143593102
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1.7	0	0	2,5	0.04406815806[a] 0.04406815810	0.1466843723[a] 0.1466843722	0.1833520311[a] 0.183352033874
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.3563686688[a] 0.3563686747	0.8514895284[a] 0.8514895302	2.3399536079[a] 2.33995360691



**Tablo-10**  $\alpha^* = -3.2, 2.8, 1.9$  için  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metodlarının karşılaştırılması (a. u. de)

$n$	$\ell$	$m$	$\zeta$	$n'$	$\ell'$	$m'$	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.10)-(3.3.2.13) [a]ve (3.3.3.11)-(3.3.4.11)N=70		
												$\alpha^* = -3, 2$	$\alpha^* = 2, 8$	$\alpha^* = 1, 9$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	0.3565148603[a] 0.356514859762	-0.102230626508[a] -0.102230659768	-0.0633753798029[a] -0.0633753768510
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	4.4031265752[a] 4.40312657523	-0.215339488340[a] -0.215339488340	0.430075823391[a] 0.430075823391
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.2696577669[a] 0.269662837608	-0.0184248314626[a] -0.0184248323215	0.00299043879466[a] 0.00299044131565
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.06019093049[a] 0.06019037566	0.100860377259[a] 0.100860448293	0.176086343990[a] 0.176086319780
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.04582504494[a] 0.0458553517505	0.0956374500834[a] 0.0956380856031	0.294466579215[a] 0.294466178082
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	0.1778949808[a] 0.177894985546	-0.210211027169[a] -0.210211027264	-0.270243826917[a] -0.270243826896
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	2.9393746162[a] 2.93937461560	0.00187046621145[a] 0.00188775744507	0.0115423872256[a] 0.0115428039636

**Tablo-11**  $\alpha^* = 0.7, -2.1, -4.1$  için  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının karşılaştırılması (a. u. de)

$n$	$\ell$	$m$	$\zeta$	$n'$	$\ell'$	$m'$	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.10)-(3.3.2.13) [a]ve (3.3.3.11)-(3.3.4.11)N=70		
												$\alpha^* = 0,7$	$\alpha^* = -2,1$	$\alpha^* = -4,1$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.0379976855707[a] -0.0379976862793	0.114969017874[a] 0.114969017987	0.583090218178[a] 0.583090219396
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	4.92778204542[a] 4.92778204542	7.45247198551[a] 7.45247198551	2.38889232983[a] 2.38889232983
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.266728628644[a] 0.266728605941	0.451308649220[a] 0.451311910511	0.147210446976[a] 0.147215474306
2	1	0	2.3	2	1	0	4.6	3.4	2	0	1.2	0.230645462198[a] 0.230645479718	0.114003997544[a] 0.114003979282	0.0317173354322[a] 0.0317161245370
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.272166367257[a] 0.272166642397	0.0209063498369[a] 0.0209160835696	0.0540802290297[a] 0.0541245842143
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1.7	0	0	2,5	-0.192679395008[a] -0.192679395043	0.171126627577[a] 0.171126627684	0.142564102402 0.142564116397
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.0644076367390[a] 0.0644075698281	1.21455820576[a] 1.21455820563	5.51524335717[a] 5.51524335746

**Tablo-12**  $\alpha^* = \alpha = 2, 1, 0$  için  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metodlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

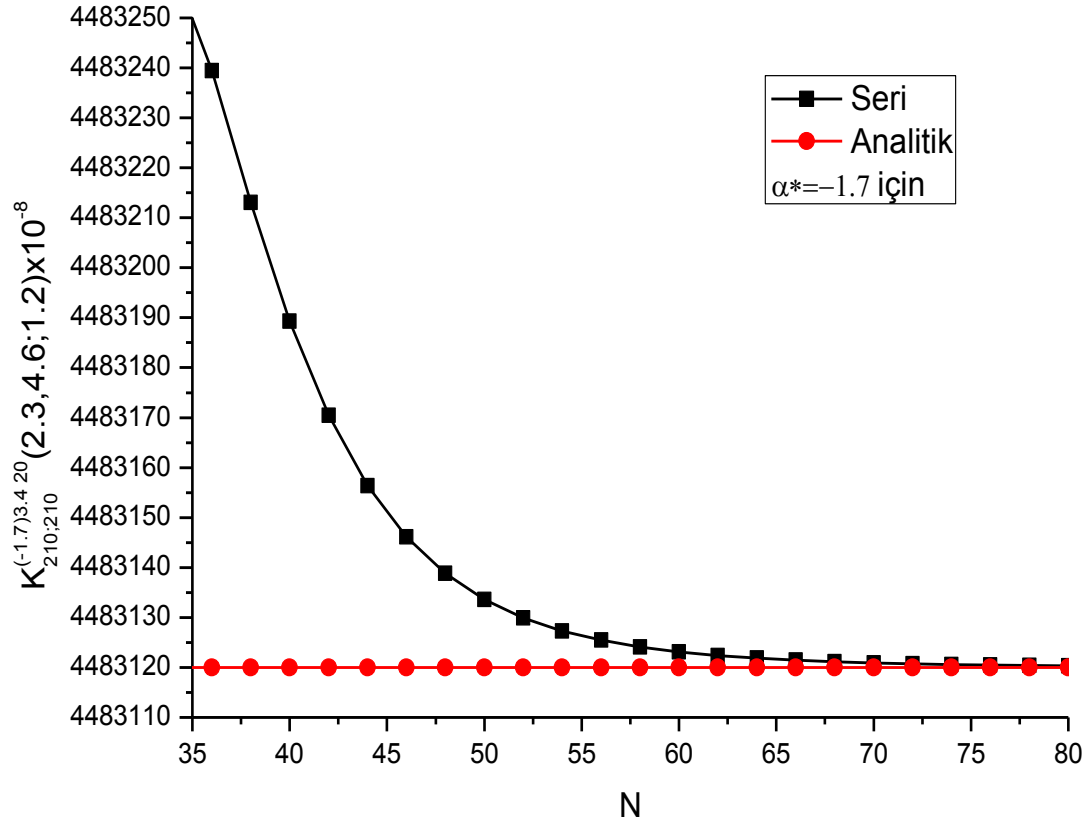
n	l	m	$\zeta$	n'	l'	m'	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.10)-(3.3.2.13) [a]ve (3.3.3.11)-(3.3.4.11)		
												N=70		
												$\alpha^* = 2$	$\alpha^* = 1$	$\alpha^* = 0$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.06739258573[a] -0.06739258324	-0.04012944735[a] -0.04012944760	-0.03767406598[a] -0.03767406594
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	0.2309195767[a] 0.230919576754	3.5783981820[a] 3.57839818200	7.7306706953[a] 7.73067069538
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	-0.007265792570[a] -0.007265792570	0.1845675644[a] 0.1845675644	0.4430201612[a] 0.4430201612
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.1684388763[a] 0.1684388604	0.2245851684[a] 0.2245851723	0.2245851684[a] 0.2245851676
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.2804071314[a] 0.2804067715	0.3066353785[a] 0.3066354827	0.1624507523[a] 0.162450724742
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	-0.2681791800[a] -0.2681791800	-0.2283273230[a] -0.2283273230	-0.08477870221[a] -0.0847787022144
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.009761137771[a] 0.009761825892	0.04354760853[a] 0.04354751448	0.1497567017[a] 0.149756690716

**Tablo-13**  $\alpha^* = \alpha = -1, -2, -3$  için  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metodlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

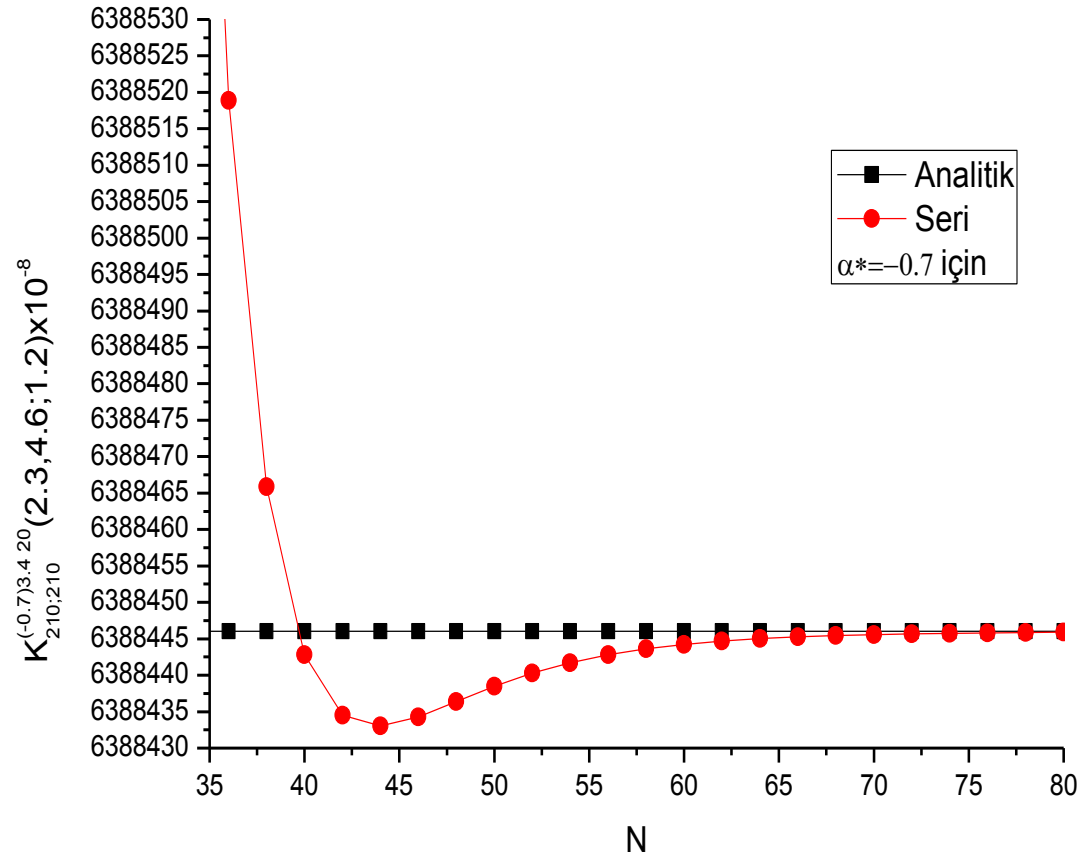
$n$	$\ell$	$m$	$\zeta$	$n'$	$\ell'$	$m'$	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$I_{nlm,n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.10)-(3.3.2.13) [a]ve (3.3.3.11)-(3.3.4.11) N=70		
												$\alpha^* = -1$	$\alpha^* = -2$	$\alpha^* = -3$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	-0.01229222150[a] -0.01229222151	0.09810094968[a] 0.09810094968	0.3068749913[a] 0.3068749913
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	9.2503862217[a] 9.2503862217	7.7088146976[a] 7.7088146976	4.9404660959[a] 4.94046609591
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.5494369253[a] 0.4430201612	0.4662142183[a] 0.4662172498	0.3020586258[a] 0.3020635071
2	1	0	2.3	2	1	0	4.6	3.4	2	0	1.2	0.1796681347[a] 0.1796681349	0.1197787565[a] 0.1197787565	0.06844500371[a] 0.06844458630
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.04253567268[a] 0.0425356795947	0.01952189964[a] 0.01953016190	0.04161830564[a] 0.04164467670
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	0.07205742141[a] 0.0720574214122	0.1662614459[a] 0.1662614459	0.1820281560[a] 0.1820281594
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	0.4363956392[a] 0.436395644973	1.1133254001[a] 1.11332540037	2.5274315703[a] 2.5274315693

**Tablo-14**  $\alpha^* = \alpha = -4, -6, -7, -8$  için  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrallerinin  $I_{nlm, n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$  hesaplama metotlarının N=70 için karşılaştırılması (a. u. de)

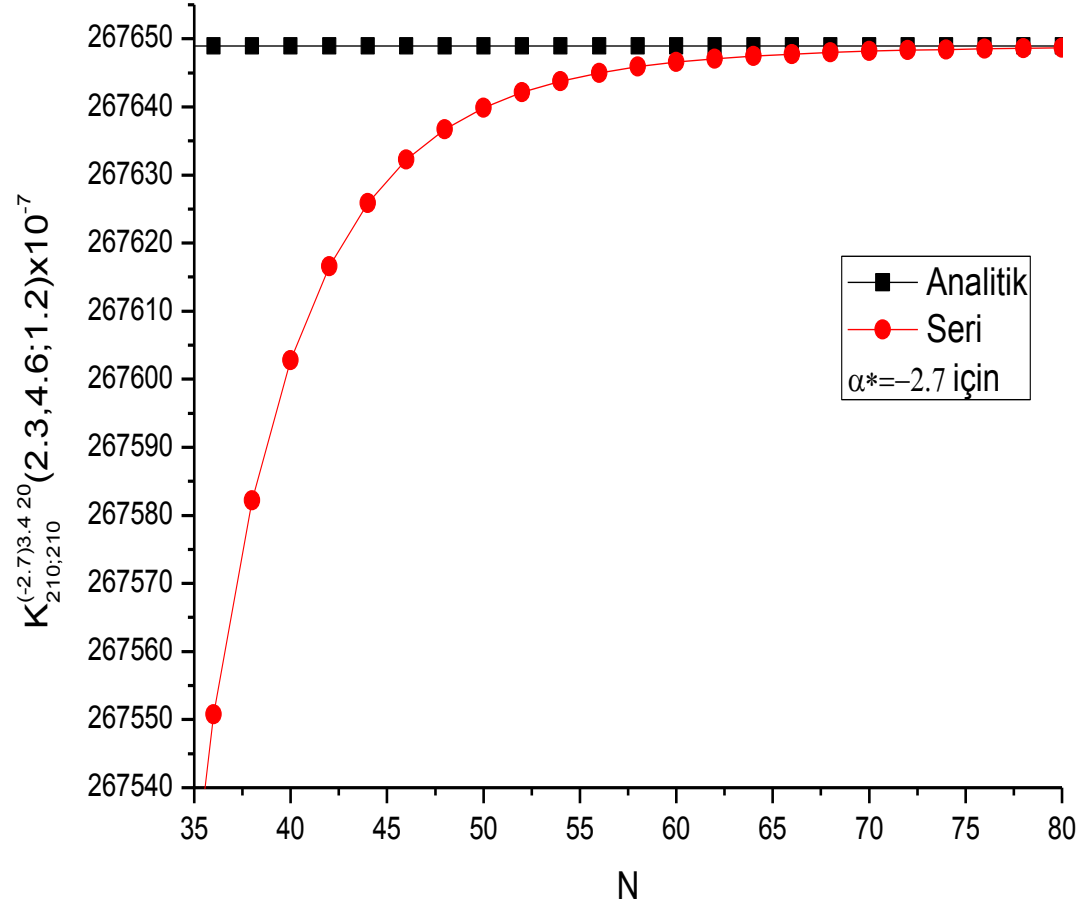
$n$	$\ell$	$m$	$\zeta$	$n'$	$\ell'$	$m'$	$\zeta'$	$\mu^*$	$\nu$	$\sigma$	$\xi$	$I_{nlm, n'l'm'}^{\mu^* \nu \sigma}(\zeta, \zeta'; \xi)$ (3.3.1.10)-(3.3.2.13) [a] ve (3.3.3.11)-(3.3.4.11) N=70			
												$\alpha^* = -4$	$\alpha^* = -6$	$\alpha^* = -7$	$\alpha^* = -8$
5	2	1	5,6819	4	2	1	2,0796	1,5	0	0	1,7	0.558909053778[a] 0.558909053778	0.863518266659[a] 0.863518517200	0.834934105872[a] 0.834934788531	0.711774584383[a] 0.711775875656
1	0	0	5,67	2	0	0	1,94	0	0	0	1,5	2.57502234208[a] 2.57502234208	0.429956594818[a] 0.429956594818	0.143920410490[a] 0.143920410490	0.0430550858295[a] 0.0430550858295
2	0	0	1,3	1	0	0	4,681	1,5	0	0	2,5	0.158585602829[a] 0.158590701005	0.0267218897180[a] 0.0267242598534	0.00897196355780[a] 0.00897314548355	0.00269059650441[a] 0.00269109709748
2	1	0	2,3	2	1	0	4,6	3,4	2	0	1,2	0.0342225018561[a] 0.0342213579477	0.00608400032997[a] 0.00608245916841	0.00221236375635[a] 0.00221123635239	0.000737454585451[a] 0.000736784362461
3	0	0	8,234	1	0	0	4,6	2,5	0	0	1,5	0.0540868983345[a] 0.0541301426518	0.0296132666923[a] 0.0296532046579	0.0154787112712[a] 0.0155054441593	0.00686768207654[a] 0.00688260912330
3	1	1	4,578	2	1	1	2,389	1,7	0	0	2,5	0.147347090024[a] 0.147347102811	0.0559251105934[a] 0.0559251438471	0.0281923571737[a] 0.0281923907493	0.0127625191389[a] 0.0127625465725
15	6	1	1,7	8	6	1	3,8	1,2	0	0	1,5	5.16303386596[a] 5.16303386619	16.2637142680[a] 16.2637142678	25.4561724096[a] 25.4561724096	36.9540615558[a] 36.9540615559



Şekil 2  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $K_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2^0}(2.3,4.6;1.2)$  nin  $\alpha^* = -1.7$  göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması (N=80)

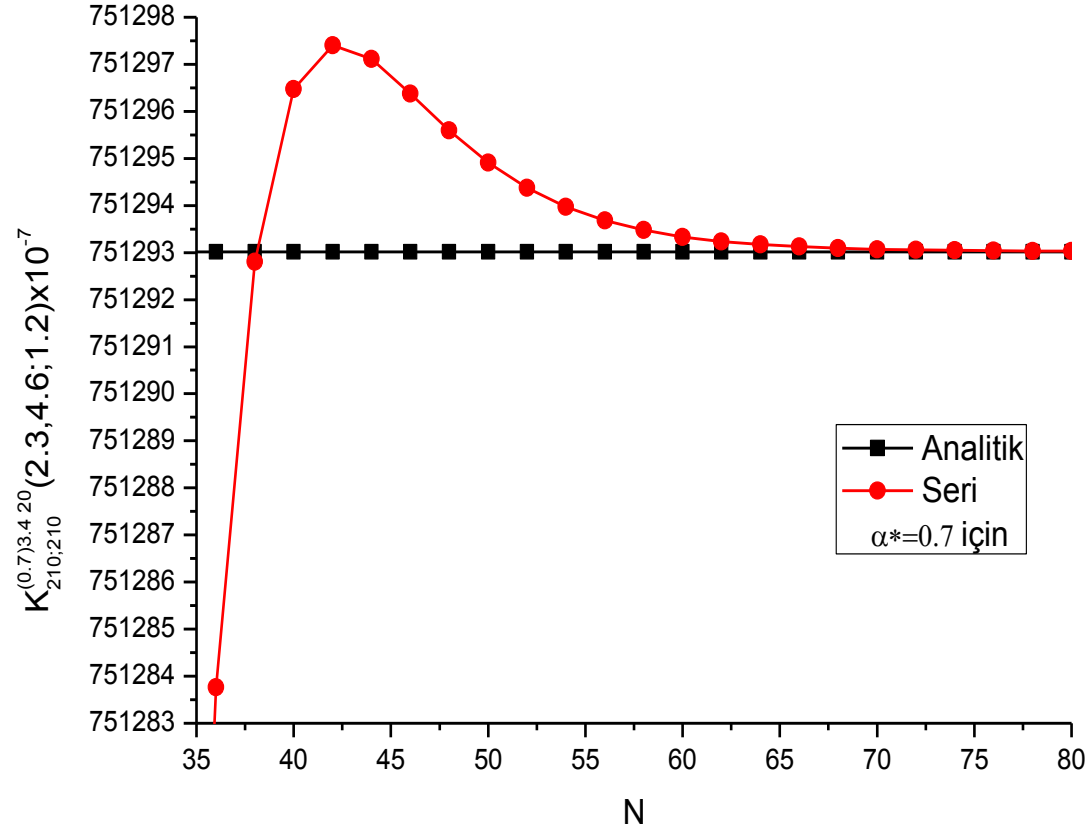


Şekil 3  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $K_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2^0}(2.3,4.6;1.2)$  nin  $\alpha^* = -0.7$  göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması (N=80)

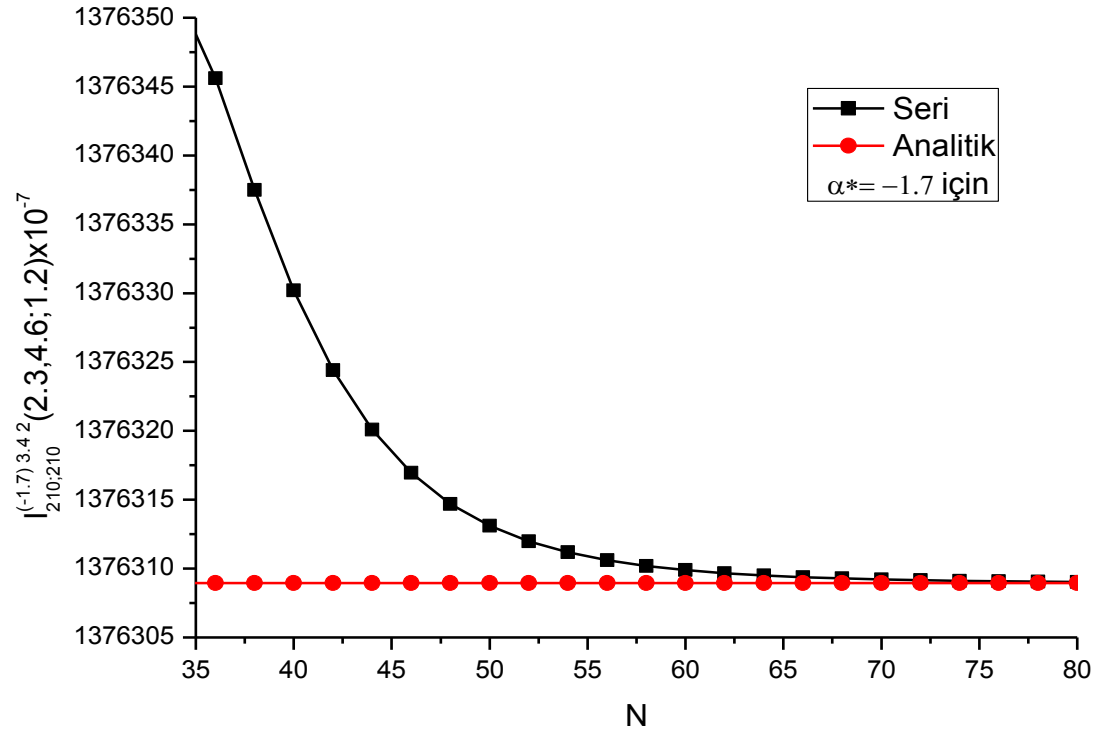


Şekil 4  $\Psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $K_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2^0}(2.3,4.6;1.2)$  nin  $\alpha^* = -2.7$  göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması (N=80)

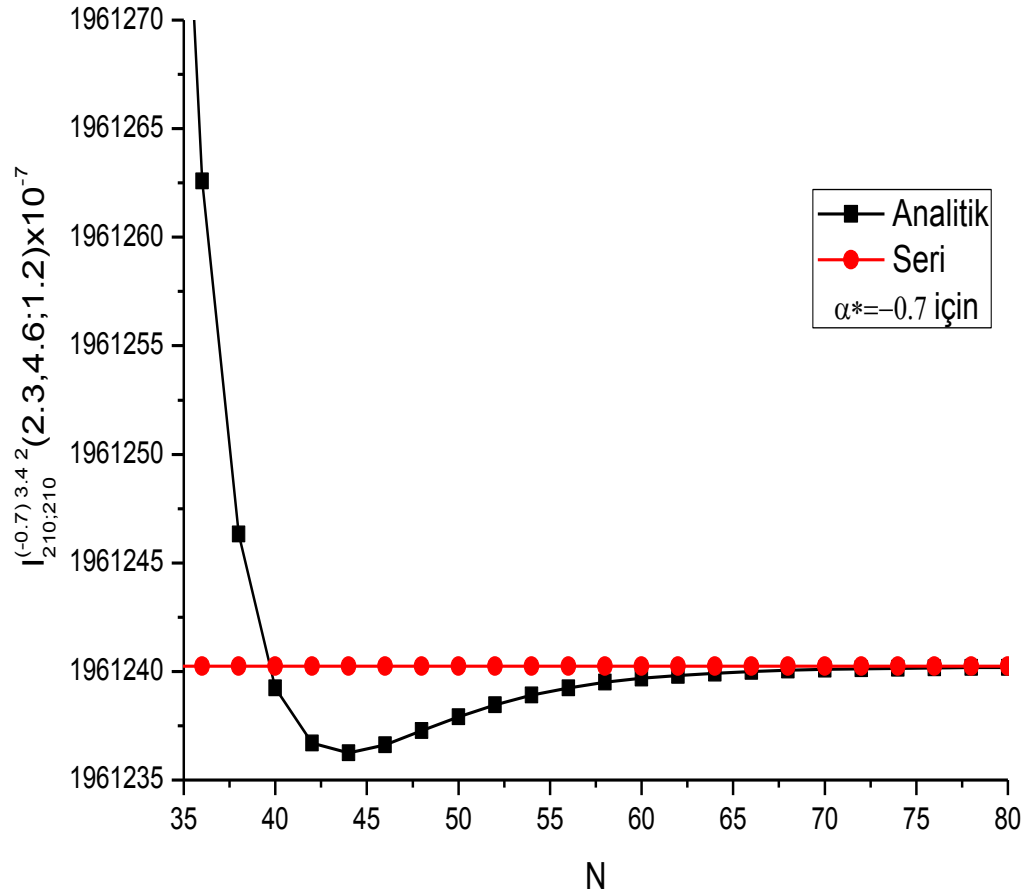




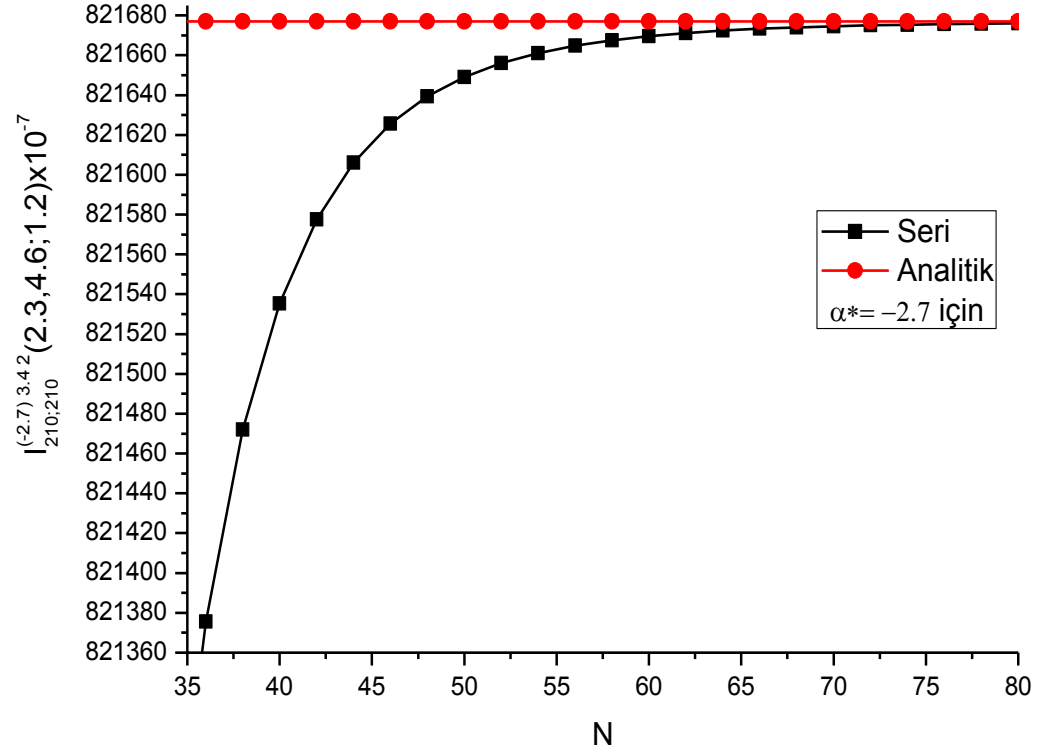
Şekil 5  $\psi^{(\alpha^*)}$ -ETOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $K_{210,210}^{(\alpha^*)3.4 2^0}(2.3,4.6;1.2)$  nin  $\alpha^* = 0.7$  göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması (N=80)



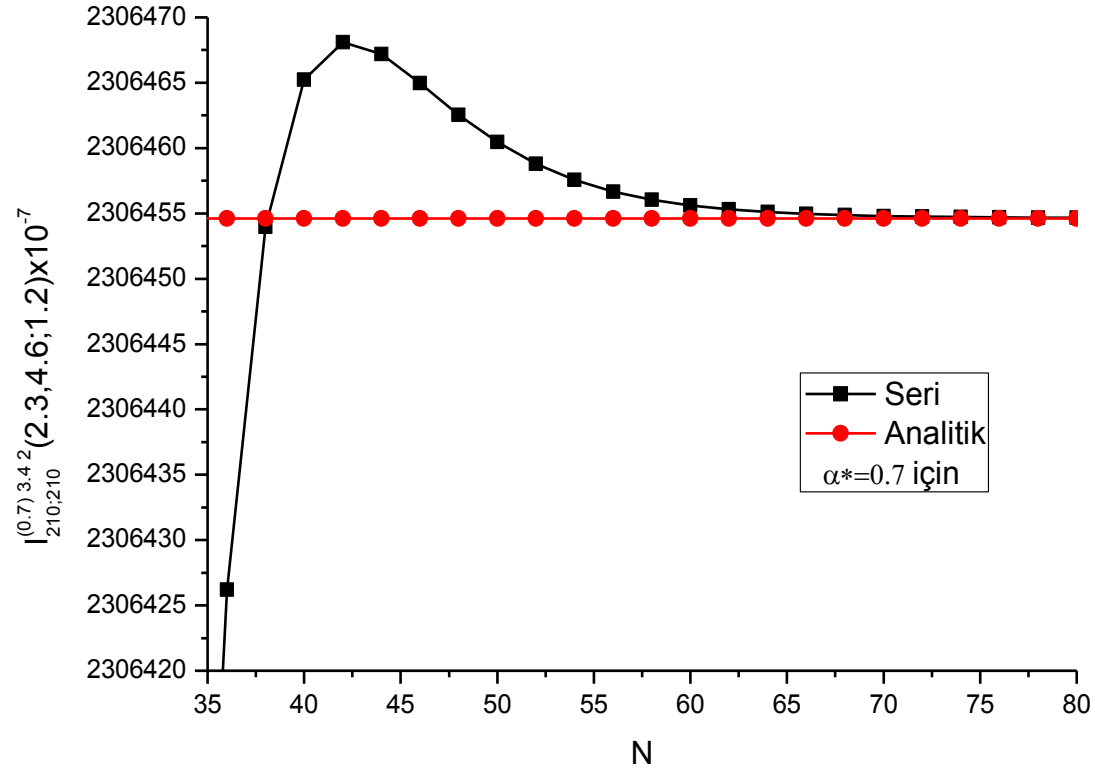
Şekil 6  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $I_{210,210}^{(\alpha^*)3.4,2}(2.3,4.6;1.2)$  nin  $\alpha^* = -1.7$  göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması (N=80)



**Şekil 7**  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $I_{210,210}^{(\alpha^*)3.4^2}(2.3,4.6;1.2)$  nin  $\alpha^* = -0.7$  göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması (N=80)



Şekil 8  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $I_{210,210}^{(\alpha^*)3.4.2}(2.3,4.6;1.2)$  nin  $\alpha^* = -2.7$  göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması (N=80)



Şekil 9  $\chi$ -ISTOs ve Coulomb-Yukawa benzeri etkileşme potansiyellerini içeren çekirdek çekim integrali  $I_{210,210}^{(\alpha^*)3.4,2}(2.3,4.6;1.2)$  nin  $\alpha^* = -0.7$  göre analitik ve seri çözümlerinin karşılaştırılması (N=80)

## KAYNAKÇA

- [1] Hartree D. R., 1957. *The Calculation of Atomic Structures*. Wiley, New York, 181 p. (1957).
- [2] Fock. *Näherungsmethode zur Lösung des Quanten mechanischen Mehrkörper problems*. Zeits. F. Physik., 61:126-148., (1930).
- [3] Roothaan C. C., *New Developments in Molecular Orbital Theory*. Rev Mod Phys., 23:69-89. (1951).
- [4] Levine I. N., *Quantum Chemistry (5<sup>th</sup>ed.)*. Prentice-Hall, New Jersey. 739 p., (2000).
- [5] Grant, Relativistic *Quantum Theory of Atoms and Molecules*, Springer and Business Media, New York, (2007).
- [6] Boys, S. F., Proc. Roy. Soc. Lond. A., 200, 542-544.(1955).
- [7] Coolidge, A. S., A *Quantum Mechanics Treatment of the Water Molecule*, PhysRev 42: 189-209 (1932).
- [8] Löwdin, P. O., *Model of Alkali Haledes*. Mat. Fys. Astron. A., 35, 9, (1947).
- [9] Barnett, M. P. and Coulson, J.,*The Evaluation of Molecular Integrals By The Zeta-Functions Method*. Academic Press (1963).
- [10] Harris, F. E. and Michels, H. H.,*Multicenter Integrals in Quantum Mechanics. I. Expansion of Slater-Type Orbitals About A New Origin*. J. Chem. Phys., 43, 165-169, (1965).
- [11] Steinborn, E. O., Filter, E., *Translations of Fields Represented By Spherical-Harmonics Exponsons for Molecular Calcilations. III. Translations of Reduced Bessel Functions, Slater-Types-Orbitals Other Functions*. Theor. Chim. Acta., 38, 273-276, (1975).
- [12] Trivedi, H. P. and Steinborn, E. O.,*Fourier Transform of A Two-Center Product of Exponential-Type Orbitals. Application to One- and Two-Electron Multicenter Integrals*. Phys. Rew. A. 27, 670, (1983).
- [13] Guseinov I. I.,*On the Unified Treatment of Complete Orthonormal Sets of Functions in Coordinate, Momentum and Four-Dimensional Spaces and Their Expansion and One-Range Addition Theorems*. J. Math. Chem., 43: 1024-1031, (2008).
- [14] Guseinov I. I. *One-Range Addition Theorems in Term of  $\psi^\alpha$ -ETOs for STOs and Coulomb-Yukawa Like Correlated Interaction Potentials of Integer and Noninteger Indices*. Chin, Phys. Lett., 25:4240-4243, (2008).
- [15] Guseinov I. I.,*Evaluation of Two- and Three-Center Overlap Integrals over Complete Orthonormal Sets of  $\Psi_\alpha$ -ETOs Using Their Addition Theorems*. J. Math.Chem., 38: 489-493,(2005).
- [16] Guseinov I. I. ve Mamedov B. A.,*On the Calculation of Arbitrary Multielectron Molecular Integrals over Slater-Type Orbitals Using Recurrence Relations for Overlap Integrals. III. Auxiliary Functions  $q_{nn} Q$  'and  $qG_{-m}$ '*. Int. J. Quant. Chem., 86: 440-449,(2002).
- [17] Guseinov ve B. Mamedov, *Calculations of overlap integrals over Slater type orbitals using recurrence relations for expansion coefficients*, Match-Commun.Math.Cmput.Chem. (52), 47-54 (2004).

- [18] Israfil I. Guseinov ve Nurşen Seçkin Görgün *Accurate and Fast Evaluation of Three-Center Nuclear Attraction Integrals of Coulomb Yukawa Like Correlated Interaction Potentials and Slater Type Orbitals* Bull. Chem. Soc. Jpn. Vol. 86, No. 1, 3136,(2013).
- [19] I. I. Guseinov ve B. A. Mamedov *Unified treatment for accurate and fast evaluation of the Fermi Dirac functions*, Chin. Phys. B Vol. 19, No. 5, 050501, (2010).
- [20] Israfil I. Guseinov *Analytical evaluation of Coulomb potential generated by multielectron molecule at arbitrary positions in space using one-range addition theorems of Slater type orbitals*, J Mol Model 17:3319–3323,(2011).
- [21] Hartree D. R., *The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field Part I. Theory and Methods. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 24 (1): 89-110. 79, (1928a).  
Hartree D. R., *The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field Part II. Some Results and Discussion. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 24 (1): 111-132, (1928b).
- [22] Prof. Dr. Abdulhalik Karabulut-Prof. Dr. Gökhan Budak, *Kuantum Fizik II* Nobel Yayını, İstanbul, Ekim (2011).
- [23] Roothaan, C. C. J. *A Study of Two-Center Integrals Useful in Calculations on Molecular Structure* I. J. Chem. Phys., 19, 1445, (1951).
- [24] Hall G. G., *The Molecular Orbital Theory of Chemical Valency. VIII. A Method of Calculating Ionization Potentials.* Proc. R. Soc. Lond. A, 205: 541-552, (1951).
- [25] Kato T., *On the Eigenfunctions of Many-Particle Systems in Quantum Mechanics.* Commun. Pure Appl. Math., 10: 151-177, (1957).
- [26] Agmon S., *Lectures on Exponential Decay of Solutions of Second-Order Elliptic Equations: Bounds on Eigenfunctions of N-Body Schrödinger Operators.* Princeton Univ. Press, Princeton. 118 p.(1982).
- [27] Boys, S. F., Proc. Roy. Soc. Lond. A., 200, 542-544.(1955).
- [28] Hehre W. J., Radom L., Schleyer P. ve Pople J., *Ab Initio Molecular Orbital Theory*, Wiley-Interscience, New York. 548 p, (1986).
- [29] Magnasco V. ve Rapallo A., *New Translation Method for STOs and Its Application to Calculation of Two-Center Two-Electron Integrals*, Int.J.Quant. Chem.,79:91-100, (2000).
- [30] Barnett, M. P., *Two-Center Nonexchange Integrals Over Slater Orbitals.* J. Chem. Phys. 113, 949,(2000).
- [31] Mekelleche, S. M. and Baba-Ahmed, A., *Calculation of the One-Electron Two-Center Integrals Over Slater-Type Orbitals by Means of the Elipsoidal Coordinates Method.* Int. J. Quant. Chem., 63, 843, (1997).
- [32] Rico J. F., Lopez R., Aguado A., Ema I. ve Ramirez G., *New Program for Molecular Calculations with Slater Type Orbitals.* Int. J. Quant. Chem., 81: 148-153,(2001).
- [33] Bouferguene, A., Fares, M., Rinaldi, D., *Integrals Over B-Functions Basis-Sets. 1.3-Center Molecular Integrals, a Numerical Study.* J. Chem. Phys., 100, 8156-8168, (1994).
- [34] Slater J. C., *Note on Hartree's Method.* Phys. Rev., 35:210-211, (1930a).
- [35] Slater J. C., *Atomic Shielding Constants.* Phys. Rev., 36(1): 57-64, (1930b).
- [36] Bouferguene A., Fares M. ve Hoggan P. E., *STOP: A Slater Type Orbital Package for Molecules Electronic Structure Determination.* Int. J. Quant. Chem., 57: 801-810,(1996).
- [37] Rico J. F., Lopez R., Aguado A., Ema I. ve Ramirez G., *Reference Program for Molecular Calculations with Slater Type Orbitals.*J. Comput. Chem., 19:1284-1293,(1998).
- [38] Rico J. F., Lopez R., Aguado A., Ema I. ve Ramirez G., *New Program for Molecular Calculations with Slater Type Orbitals.*Int. J. Quant. Chem., 81: 148-153, (2001).
- [39] Parr R. G. ve Joy H. W. *Why not use Slater Orbitals of Nonintegral Principal Quantum Number.*J. Chem. Phys.,26(2):424, (1957).
- [40] Koga T., Kanayama K. ve Thakkar A. J., *Noninteger Principal Quantum Numbers Increase the Efficiency of Slater Type Basis Sets.*Int. J. Quantum Chem., 62:1-11, (1997)

- [41] Koga T., Shimazaki T. ve Satoh T., *Noninteger Principal Quantum Numbers Increase the Efficiency of Slater Type Basis Sets: Double-Zeta Approximation*. J.Mol. Struct. (Theochem). 496: 95-100, (2000).
- [42] Rico J. F., Lopez R., Aguado A., Ema I. ve Ramirez G., *New Program for Molecular Calculations with Slater Type Orbitals*. Int. J. Quant. Chem., 81: 148-153, (2001).
- [43] Guseinov I. I., *New Complete Orthonormal Sets of Exponential-Type Orbitals and Their Application to Translation of Slater Orbitals*. Int. J. Quant. Chem., 90:114-118, (2002).
- [44] Guseinov I. I., *New Complete Orthonormal Sets of Exponential-Type Orbitals in Standard Convention and Their Origin*. Bull. Chem. Soc. Jpn. 85, No:12, 1306-1309, (2012).
- [45] Guseinov I.I., *In Sixth International Conference Proceedings* AIP Publishing: Istanbul, Vol. 899; S.A. Cetin, Ed; p. 65, ,(2007).
- [46] E.A. Hylleraas, Z.Phys. *Über den Grundzustand des Heliumatoms.*, 48,469, (1928).
- [47] Griffiths J, Barber VS, Morgan L, Young JD. *Systematic review and meta-analysis of studies of the timing of tracheostomy in adult patients undergoing artificial ventilation*. BMJ.;330: 1243-1248, (2005).
- [48].Guseinov I. I. *Pioneer of the Quantum Theory of Atomic, Molecular, and Nuclear Systems* International Journal of Quantum Chemistry, 114, 361-366, (2014).
- [49] Guseinov I. I., *On the Unified Treatment of Complete Orthonormal Sets of Functions in Coordinate, Momentum and Four-Dimensional Spaces and Their Expansion and One-Range Addition Theorems*. J. Math. Chem., 43: 1024-1031, (2008).
- [50] Guseinov I. I *One Range Addition Theorems for Noninteger n Slater Functions Using Complete Orthonormal Sets of Exponential Type Orbitals in Standard Convention*, Few-Body Syst. 54, 1306-1313, (2013).
- [51] Gaunt J. A., *On the triplets of helium*, Philos. Trans. Roy. Soc. (London) Ser.A 228:151-196, (1929).
- [52] Guseinov I. I. ve Mamedov B. A., *Algorithm for the storage of Clebsch-Gordan and Gaunt coefficients with same selection rule and its application to multicenter integrals*. J. Mol. Struct. (Theochem)., 715:177-181, (2005)
- [53] W. W. Bell *Special Functions for Scientists and Engineers* Dover Publications, Inc. Mineola, New York, (2004).



## EKLER

### Ek-A Genelleştirilmiş Laguerre Polinomları

Laguerre polinomları hidrojen benzeri tek elektronlu atom için Schrödinger denkleminin radyal kısmının çözümünde karşımıza çıkmaktadır. Kuantum mekaniğinde bazı fiziksel sistemlerin davranışlarının incelenmesi açısından oldukça önemlidir.

Laguerre diferansiyel denkleminin genel hali [53]

$$xy'' + (\alpha + 1 - x)y' + ny = 0 \quad (\text{Ek - A. 1})$$

ile tanımlanır. Frobenius seri çözümünden elde edilen (Ek-A.1) denkleminin genelleştirilmiş Laguerre polinomları aşağıdaki gibidir

$$L_0^\alpha(x) = 1$$

$$L_1^\alpha(x) = -x + \alpha + 1$$

$$L_2^\alpha(x) = \frac{1}{2} [x^2 - 2(\alpha + 2)x + (\alpha + 1)(\alpha + 2)]$$

$$L_3^\alpha(x) = \frac{1}{6} [-x^3 + 3(\alpha + 3)x^2 - 3(\alpha + 2)(\alpha + 3)x + (\alpha + 1)(\alpha + 2)(\alpha + 3)]$$

⋮

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(n + \alpha)!}{k! (n - k)! (k + \alpha)!} x^k. \quad (\text{Ek - A. 2})$$

Genelleştirilmiş Laguerre polinomları

$$L_n^k(x) = \frac{\Gamma(n + k + 1)}{(n)! \Gamma(k + 1)} {}_1F_1(-n; k + 1; x) \quad (\text{Ek - A. 3})$$

denkleminde verilmektedir. Burada  ${}_1F_1(\eta; \gamma; x)$  konfluent hipergeometrik fonksiyon ve  $\Gamma(x)$ , Gamma fonksiyonudur. Konfluent hipergeometrik fonksiyon aşağıdaki gibi tanımlanır:

$${}_1F_1(\eta; \gamma; x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\eta)_k}{(\gamma)_k} \frac{x^k}{k!} \quad (\text{Ek - A. 4})$$

Burada  $(\eta)_k$  Pochhammer sembolüdür ve

$$(\eta)_k = \eta(\eta + 1) \dots (\eta + k - 1) = \frac{\Gamma(\eta + k)}{\Gamma(\eta)} \quad (Ek - A.5)$$

$$(\eta)_0 = 1 \quad (Ek - A.6)$$

yapısına sahiptir.

## Ek-B Gamma Fonksiyonları

Literatürde Gamma fonksiyonun farklı formları karşımıza çıkmaktadır [53]. Bunların birkaçı aşağıdaki gibidir:

- $\Gamma(z)$  fonksiyonunun Euler sonsuz limit fonksiyonu,

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1.2.3 \dots n}{z(z+1)(z+2) \dots (z+n)} \quad (Ek - B.1)$$

Burada  $z \neq 0, -1, -2, \dots$  olarak tanımlanır.

- $\Gamma(z)$  fonksiyonunun Euler integral formu,

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt \quad \text{Re } z > 0 \quad (Ek - B.2)$$

- $\Gamma(z)$  fonksiyonunun Weierstrass sonsuz çarpım formu,

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = z e^{\gamma z} \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{z}{n}\right) e^{-z/n} \quad (Ek - B.3)$$

Fiziksel uygulamalarda çoğu zaman gamma fonksiyonunun ( $Ek - B.2$ ) formu kullanılır.

Gamma fonksiyonunun başlıca özellikleri şunlardır:

- i.  $\Gamma(1) = 1$ .
- ii.  $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ . ( $x > 0$ )
- iii.  $\Gamma(x+1) = x!$
- iv.  $\Gamma(x) = 2 \int_0^{\infty} e^{-t^2} t^{2x-1} dt$  ( $Ek - B.4$ )
- v.  $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$
- vi.  $\int_0^{\pi/2} \cos^{2x-1} \theta \sin^{2y-1} \theta d\theta = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{2\Gamma(x+y)}$ .

## ÖZGEÇMİŞ

1991 yılında Kırklareli-Demirköy’de doğdum. İlköğretimimi sırasıyla Balaban Köyü İlköğretim Okulu ve Fatih İlköğretim Okulunda tamamladım. Liseyi Kırklareli Atatürk Lisesinde bitirdim. 2008 yılında Uludağ Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde lisans eğitimime başladım ve 2012 yılında mezun oldum. Aynı yıl Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında yüksek lisans eğitimine başladım.

### ULUSAL/ULUSLAR ARASI TOPLANTILARDA SUNULAN BİLDİRİLER:

**1.** Türk Fizik Derneği Uluslar Arası 30. Fizik Kongresi ‘Calculation of atomic nuclear attraction integrals of exponential type orbitals in standard convention and Coulomb-Yukawa like potential’, N. Seçkin, Görgün, **E. Yapar**, (sözlü bildiri) 2-5 Eylül 2013 İstanbul/Türkiye.