

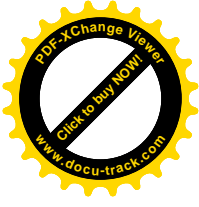
**T.C.**  
**RİZE ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**İKİ MERKEZLİ ÖRTME İNTEGRALİNİN**  
**FOURIER DÖNÜŞÜM METODU İLE**  
**HESAPLANMASI**

**AYŞE NALÇACI**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**  
**FİZİK ANABİLİMDALİ**

**RİZE-2011**



T.C.  
RİZE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**İKİ MERKEZLİ ÖRTME İNTEGRALİNİN  
FOURIER DÖNÜŞÜM METODU İLE  
HESAPLANMASI**

Ayşe NALÇACI

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Telhat ÖZDOĞAN

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**FİZİK ANABİLİMDALI**

RİZE-2011



T.C.

RİZE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI

İKİ MERKEZLİ ÖRTME İNTEGRALİNİN FOURIER DÖNÜŞÜM  
METODU İLE HESAPLANMASI

Ayşe NALÇACI  
YÜKSEK LİSANS

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 09/06/2011

Tezin Sözlü Savunma Tarihi : 30/06/2011

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Telhat ÖZDOĞAN

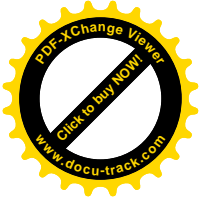
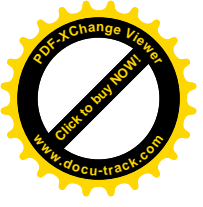
Jüri Üyesi : Prof. Dr. Metin ORBAY

Jüri Üyesi : Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN

Enstitü Müdürü : Doç. Dr. Fatih YILMAZ



RİZE-2011



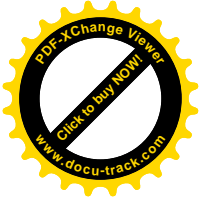
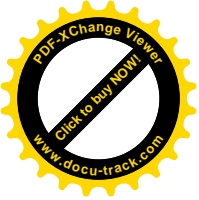
## ÖNSÖZ

Yüksek lisans çalışmalarım esnasında, bana her türlü kolaylığı sağlayan, karşılaştığım zorluklarda bana yol gösteren, bu çalışmam süresince bilgi ve deneyimlerinden her zaman yararlanabildiğim, manevi yönden beni destekleyen ve sürekli beni çalışmaya teşvik eden danışman hocam sayın Doç. Dr. Telhat ÖZDOĞAN' a en içten teşekkürümü bir borç bilirim.

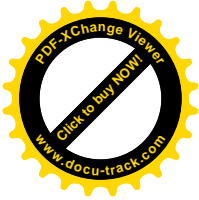
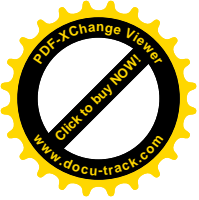
Çalışmam boyunca gösterdiği sabır ve anlayıştan dolayı sevgili eşim Pirahmet ÇOLAK'a sonsuz teşekkür ederim.

Ayrıca hayatımın her döneminde maddi ve manevi desteklerini eksik etmeyen aileme şükranlarımı sunarım.

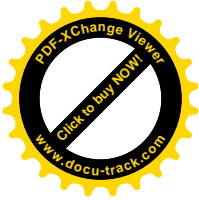
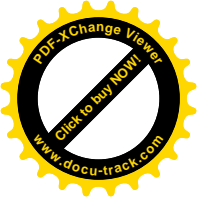
**AYŞE NALÇACI**



<b>İÇİNDEKİLER</b>	<b><u>Sayfa No</u></b>
ÖNSÖZ.....	I
İÇİNDEKİLER .....	II
ÖZET.....	IV
ABSTRACT.....	V
SEMBOLLER ve KISALTMALAR DİZİNİ.....	VI
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	VII
TABLolar DİZİNİ .....	VIII
1. GENELBİLGİLER .....	1
1.1. Giriş .....	1
1.2. Hartree-Fock/-Roothaan Metodu .....	2
1.3. Literatürde Kullanılan Baz Fonksiyonları.....	6
1.3.1. Slater Tipli Orbital (STO) .....	8
1.3.2. Gaussian Tipli Orbital (GTO) .....	9
1.3.3. Bessel Tipli Orbital (BTO) .....	9
1.3.4. Laguerre Tipli Orbital (LTO) .....	10
1.4. Moleküler İntegrallerin Sınıflandırılması .....	11
1.4.1. Bir-elektronlu Moleküler İntegraller .....	12
1.4.2. İki-elektronlu Moleküler İntegraller .....	14
1.5. Moleküler İntegralleri Hesaplama Yöntemleri .....	16
1.5.1. Tek Merkez Açılım Yöntemi .....	16
1.5.2. İntegral Dönüşüm Yöntemi .....	19
1.6. Tezin Amacı .....	24
2. YAPILAN ÇALIŞMALAR .....	25
2.1. Giriş .....	25
2.2. Slater Tipli Orbitallerin Fourier Dönüşümü .....	25



2.3.	$D_{nl}(\xi, p)$ ve $f_{nl}(\zeta, p)$ Yardımcı Fonksiyonları .....	26
2.4.	İki-merkezli Örtme İntegrali .....	28
2.5.	Yardımcı Yardımcı Moleküler İntegraller .....	30
2.5.1.	$D_{n,l;n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali .....	31
2.5.2.	$F_{m'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali .....	31
2.5.3.	$E_{mm}^L(\zeta, R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali .....	32
2.5.4.	$J_{mm}(\zeta, R)$ ve $I_{mm}(\zeta, R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri .....	34
2.6.	İki-merkezli Örtme İntegrallerinin İncelenmesi .....	36
2.6.1.	Lined-up Koordinat Sisteminde İki-merkezli Örtme İntegralleri .....	36
2.6.2.	Eşit Orbital Üstlerinde İki-merkezli Örtme İntegralleri .....	36
2.6.3.	İki-merkezli Örtme İntegrallerinin Bazı Simetri Özellikleri .....	37
3.	BULGULAR.....	38
3.1.	Giriş.....	38
3.2.	Nonlined-up Koordinat Sisteminde İki-merkezli Örtme İntegralleri .....	38
3.3.	Lined-up Koordinat Sisteminde İki-merkezli Örtme İntegralleri .....	38
3.4.	İki-merkezli Örtme İntegrallerinin Sembolik Değerleri .....	38
4.	TARTIŞMA.....	50
5.	SONUÇ ve ÖNERİLER .....	52
	KAYNAKLAR .....	53
	EKLER .....	59
	ÖZGEÇMİŞ.....	90

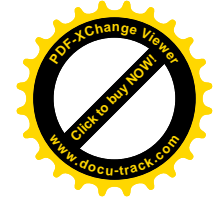
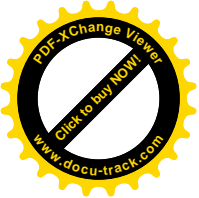


## ÖZET

Nonlined-up koordinat sisteminde Slater tipli orbitaller kullanılarak iki-merkezli örtme integralleri için genel analitik bir ifade verilmiştir. İki-merkezli örtme integralleri için elde edilen bu ifade;  $D_{nl,n'l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integralleri, Gaunt katsayıları ve küresel harmoniklerden oluşur. Bu ifade  $m = m'$  ve  $\theta = \varphi = 0$  özel durumu için lined-up koordinat sistemlerinde iki-merkezli örtme integrallerine indirgenir. İki-merkezli örtme integralleri için elde edilen bu ifadelerin hassas olarak hesaplanması,  $D_{nl,n'l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integralleri ve içerdiği yardımcı fonksiyonların hassas bir şekilde hesaplanmasına bağlıdır. STO'ler kullanılarak iki-merkezli örtme integrallerinin hassas olarak hesaplanması için, dikkatimizi  $E_{mn}^l(\zeta, R)$  yardımcı fonksiyonu ile ifade ettiğimiz  $D_{nl,n'l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integrallerin doğru hesabına odakladık. Bu doğrultuda,  $E_{mn}^l(\zeta, R)$  yardımcı fonksiyonu için analitik ve tekrarlama bağıntıları türettik. STO'ler kullanılarak iki-merkezli örtme integralleri için türettiğimiz Denklem (113) ile verilen ifadenin doğruluğunu ve hassaslığını test etmek için, elde edilen ifadelerin Maple 13 sembolik programlama dilinde programları yapılmıştır. Verilen algorithmadan elde ettiğimiz sonuçlara göre keyfi kuantum sayıları, orbital üstelleri ve çekirdekler arası mesafeleri için en az 10-doğru basamak sayılarıyla verilen mevcut literatür değerleri ile iyi uyumlu olduğu görülmektedir. Ayrıca, iki-merkezli örtme integrallerin hesaplanması için elde edilen genel ifade diğer literatür değerlerinde daha hızlı ve daha basit olduğunu iddia ediyoruz.

Sonuç olarak, STO'ler kullanılarak iki-merkezli örtme integralleri için algoritmamız başarılıdır ve atomların moleküllerin ve katıları elektronik yapı hesaplarında kullanılabilir.

**Anahtar Kelimeler:** Slater tipli orbital, örtme integrali, Gaunt katsayısı, yardımcı moleküler integraller



## ABSTRACT

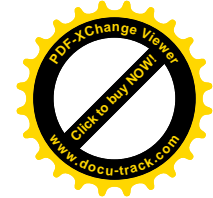
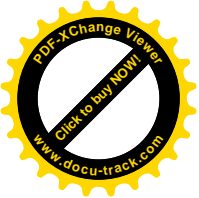
### Calculation of Two-center Overlap Integrals via Fourier Transform Method

An analytical general formula has been presented for the calculation of two-center overlap integrals over Slater type orbitals in nonlined-up coordinate systems. The obtained formulae for two-center overlap integrals contain auxiliary molecular integrals  $D_{nl,n'l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$ , Gaunt coefficients and spherical harmonics. This formula reduces to two-center overlap integrals in lined-up coordinate systems for the special case  $m = m'$  and  $\theta = \varphi = 0$ . The efficiency of the obtained formulae for two-center overlap integrals depends strictly on the accurate calculation of the auxiliary molecular integrals  $D_{nl,n'l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  and the auxiliary functions including. For the efficient calculation of two-center overlap integrals over STOs, we have focused our attention to the accurate calculation of the auxiliary molecular integrals  $D_{nl,n'l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  which we expressed through auxiliary functions  $E_{mm}^l(\zeta, R)$ . In this respect, we have derived analytical and recurrence relations for the auxiliary functions  $E_{mm}^l(\zeta, R)$ . In order to test the efficiency and accuracy of the derived formulae for two center overlap integrals over STOs given by Eq.(113), we have constructed computer programs in Mapple 13 symbolic programming language. It is shown that the results we obtained from the presented algorithm agree well with the available literature datas, giving at least 10-correct decimal digits for arbitrary quantum numbers, orbital exponents and internuclear distances. In addition, we argue that the obtained general formula for the calculation two-center overlap integrals is simpler and faster than other formula available in literature.

As a result, we conclude that our algorithm for two-center overlap integrals over STOs is successful and can be used in large scale electronic structure calculations of atoms, molecules and solids.

**Key Words:** Slater type orbital, overlap integral, Gaunt coefficient, auxiliary molecular function.





## SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ

HF : Hartree-Fock

HFR : Hartree-Fock-Roothaan

LCAO : Linear Combination of Atomic Orbitals

SCF : Self Consistent Field

CNDO : Complete Neglect of Differential Overlap

INDO : Intermediate Neglect of Differential Overlap

MINDO : Modified Intermediate Neglect of Diatomic Overlap

ETO : Exponansiyel Tipli Orbital

STO : Slater Tipli Orbital

GTO : Gaussian Tipli Orbital

BTO : Bessel Tipli Orbital

LTO : Laguerre Tipli Orbital

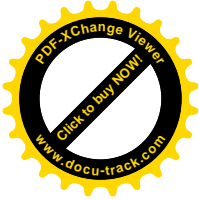
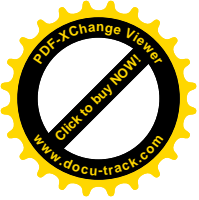
ERI : Elektron Repulsion İntegrali



## ŞEKİLLER DİZİNİ

## Sayfa No

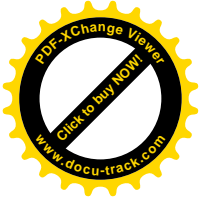
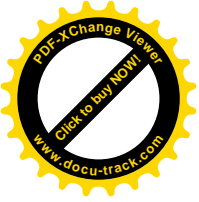
Şekil 1. $e^{-x}$ 'in grafiği .....	8
Şekil 2. $e^{-x^2}$ 'nin grafiği .....	8
Şekil 3. STO-nGTO açılımı .....	20



## TABLULAR DİZİNİ

## Sayfa No

Tablo 1. HFR de ortaya çıkan çok merkezli moleküler integraller .....	11
Tablo 2. Non-lined up koordinat sisteminde eşit orbital üstelleri için iki-merkezli örtme integralleri ve literatür ile karşılaştırılması.....	39
Tablo 3. Non-lined up koordinat sisteminde farklı orbital üstelleri için iki-merkezli örtme integralleri ve literatür ile karşılaştırılması.....	40
Tablo 4. Lined up koordinat sisteminde eşit orbital üstelleri için iki-merkezli örtme integralleri ve literatür ile karşılaştırılması.....	42
Tablo 5. Lined up koordinat sisteminde farklı orbital üstelleri için iki-merkezli örtme integralleri ve literatür ile karşılaştırılması .....	43
Tablo 6. İki-merkezli örtme integralinin sembolik değerleri .....	45
Tablo 7. $C_{lm}^k$ Katsayıları .....	61
Tablo 8. $J_{mn}(\alpha, R)$ fonksiyonunun sembolik değerleri .....	63
Tablo 9. $I_{mn}(\alpha, R)$ fonksiyonunu sembolik değerleri .....	65
Tablo 10. $E_{mn}^l(\alpha, R)$ fonksiyonunun sembolik değerleri .....	67
Tablo 11. $A_{nl}^s(\alpha)$ fonksiyonunun sembolik değerleri .....	70
Tablo 12. $A_{mm}^M$ fonksiyonunu sembolik değerleri .....	70
Tablo 13. $D_{nl}(\alpha, p)$ fonksiyonunun sembolik değerleri .....	71
Tablo 14. $D_{n,l;n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$ yardımcı fonksiyonunu bazı sembolik değerleri .....	75
Tablo 15. $F_{m'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$ yardımcı fonksiyonun bazı sembolik değerleri .....	77
Tablo 16. $H_{nlm,n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta')$ fonksiyonun bazı sembolik değerleri .....	81



## 1. GENEL BİLGİLER

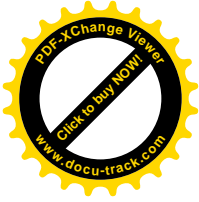
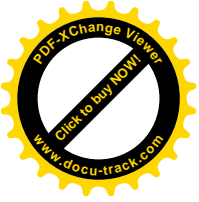
### 1.1. Giriş

Atomlar evrenin temel yapı taşlarıdır. Kütleli olan ve uzayda yer kaplayan tüm varlıklar birer maddedir. Evrendeki her tür madde, atom ve moleküllerden oluşur. Maddenin atom ve molekül adı verilen varlıklardan oluştuğu düşüncesi çok eskilere dayanır. Bilindiği kadarıyla, her şeyin yok edilemeyen ve bölünemeyen farklı elementlerden oluştuğu düşüncesini ilk ortaya atan kişi M.Ö. 5. yy. da yaşamış olan Miletli Leucippus'tur. Bu felsefi görüş günümüze kadar ulaşmıştır. Maddelerin fiziksel ve kimyasal özelliklerini incelemek için, bu maddeleri oluşturan moleküllerin yapılarının iyi bilinmesi gerekir. Her molekülün kendine özgü yapısı vardır. Bu yüzden, her maddenin de kendine özgü yapısı olur.

İki veya çok elektronlu moleküller kuantum mekaniksel sistemler olduğundan, yapılarını inceleyebilmek için öncelikle sisteme ait tam Hamiltonian yazılarak Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. Schrödinger denklemini hidrojen ve hidrojene benzer yapılar dışındaki karmaşık sistemler için, bilgisayar teknolojisindeki ve uygulamalı matematikteki tüm gelişmelere rağmen analitik olarak çözmek mümkün değildir. Bu denklemleri çözmek için bazı yaklaşık yöntemler ortaya atılarak Schrödinger denklemine çözümler aranmaktadır [1-3].

Bu yaklaşık yöntemler iki şekilde karşımıza çıkmaktadır. Bunlar; deneysel hiçbir veriden faydalanmayıp tam teorik hesap yapan (*ab initio*) yöntemler ve deneysel verilerden faydalanan yarı deneysel yöntemlerdir. Tam teorik yöntemler, moleküler sistemlerde en az yaklaşıklıkla matematiksel olarak problemleri çözmeyi amaçlamaktadır. Fiziksel özelliklerin yarı deneysel yöntemlerle hesaplanmasında bazı parametreler deneysel verilerden alınır. Bu yöntemlere CNDO, INDO ve MINDO örnek olarak verilebilir [4-6].

*Ab initio* yöntemleri bazı yaklaşıklıklara dayanmaktadır. Bunlardan ilki, *merkezi alan yaklaşıklığı*dır. Merkezi alan yaklaşıklığında; atomda incelenen elektronun, çekirdeğin ve diğer elektronların ortalama alanında hareket ettiği kabul edilir. Merkezi alan yaklaşıklığı, değerlik elektronu bir olan atomlar için iyi sonuçlar verir. Atomda değerlik elektronlarının sayısı arttıkça, merkezi alan yaklaşıklığının uygulanmasından elde edilen sonuçların hassaslığının azaldığı görülür [4-6].



Schrödinger denkleminin çözümü için yapılan ikinci yaklaşıklık ise *Born-Oppenheimer yaklaşıklığı*dır. Born-Oppenheimer yaklaşıklığına göre; çekirdek, elektronlardan oldukça ağırdır ve elektronlara göre oldukça yavaş hareket ederler. Bu yaklaşıklıkla çekirdek ve elektronların hareketleri ayrı ayrı incelenebilmektedir. Bu yüzden Hamiltonian operatöründe çekirdeğin kinetik enerjisi elektronların kinetik enerjisi yanında ihmal edilir. Hamiltonian ifadesi sadece elektronik Hamiltonian'den oluşur [4-6].

Çok elektronlu atomik veya moleküler sistemlerin elektronik yapısının hesaplanmasında kullanılan yöntemlerden en önemlisi Hartree-Fock teorisidir. Hartree-Fock teorisi, diğer *ab initio* teorilerine temel teşkil etmesi açısından önemli bir teoridir.

## 1.2. Hartree-Fock/-Roothaan Metodu

Hidrojen atomunda 3 tane  $(x_1, y_1, z_1)$ , Helyum atomu için 6 tane  $(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2)$  bağımsız parametre (koordinat) sayısı vardır.  $N$ -parçacıklı bir atomik veya moleküler sistem için bağımsız parametre sayısı  $3N$ 'dir. Örneğin; Cd atomu için 96 değişkenli Schrödinger denklemini çözmek gerekir.  $N$ -parçacıklı bir atomik veya moleküler sistem için bağımsız parametre sayısı 3'ten büyük olduğunda Schrödinger denklemini analitik olarak çözmek mümkün değildir ve bu yüzden Hartree-Fock metodu kullanılabilir.

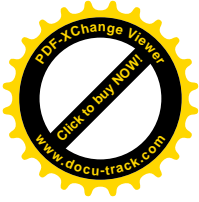
Relativistik etkilerin ve spin-yörünge çiftleniminin ihmal edildiği durumda zamandan bağımsız Schrödinger denklemi:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1)$$

ile verilir. Bu denklemde;  $\Psi$  sistemi temsil eden toplam dalga fonksiyonu,  $E$  toplam enerji ve  $\hat{H}$  ise relativistik olmayan toplam Hamiltonian işlemcisidir.  $M$  çekirdekli ve  $N$  elektronlu bir atomik veya moleküler sistem için relativistik olmayan toplam Hamiltonian işlemcisi aşağıdaki ifade ile verilir:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\sum_{i=1}^N \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{A=1}^M \frac{\nabla_A^2}{2} - \sum_{A=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{Z_A}{r_{Ai}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A=1}^M \sum_{B=A+1}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} . \\ &= \hat{T}_e + \hat{T}_C + \hat{V}_{e-C} + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{C-C} \end{aligned} \quad (2)$$

Burada;



- $\hat{T}_\zeta$  : çekirdeklerin toplam kinetik enerji işlemcisi,  
 $\hat{T}_e$  : elektronların toplam kinetik enerji işlemcisi,  
 $\hat{V}_{e-\zeta}$  : elektron ile çekirdek arasındaki nükleer çekim enerji işlemcisi,  
 $\hat{V}_{e-e}$  : elektronlar arasındaki Coulomb itme enerji işlemcisi,  
 $\hat{V}_{\zeta-\zeta}$  : çekirdekler arasındaki Coulomb itme enerji işlemcisi,

ile ifade edilir [1-3].

Born-Openheimer yaklaşıklığına göre; çekirdeğin kinetik enerjisi elektronların kinetik enerjisi yanında ihmal edilir. Bu yüzden Hamiltonian işlemcisi sadece elektronik Hamiltonian ve sabit olan çekirdekler arası Coulomb itme enerji işlemcisinden oluşur [4-6]:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{A=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{Z_A}{r_{Ai}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}, \quad (3)$$

Burada

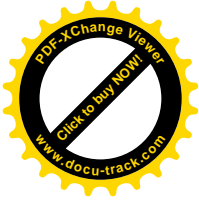
$$\hat{H}_{el} = -\sum_{i=1}^N \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{A=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{Z_A}{r_{Ai}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (4)$$

elektronik Hamiltonian işlemcisi olarak tanımlanır ve  $\hat{V}_{\zeta-\zeta} = \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}$  ise sabit olan

Coulomb itme enerjisidir. Toplam enerji ise elektronik enerji ve sabit olan  $\hat{V}_{\zeta-\zeta}$  toplamından oluşur:

$$E = E_{el} + V_{\zeta-\zeta}. \quad (5)$$

Hartree-Fock metodunda; (1) denkleminde  $\Psi$  ile temsil edilen toplam dalga fonksiyonu için Slater determinantı kullanılır. Hartree-Fock (HF) metodunda  $N$  elektronlu bir sistemin toplam dalga fonksiyonu için Slater determinantı aşağıdaki gibi verilir [4-6]:



$$\Psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} U_1(\bar{x}_1) & U_2(\bar{x}_1) & \dots & \dots & U_N(\bar{x}_1) \\ U_1(\bar{x}_2) & U_2(\bar{x}_2) & \dots & \dots & U_N(\bar{x}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ U_1(\bar{x}_N) & U_2(\bar{x}_N) & \dots & \dots & U_N(\bar{x}_N) \end{vmatrix} \quad (6)$$

Burada;  $U_i(\bar{x}_i)$  fonksiyonları moleküler spin orbitalleri olarak isimlendirilir ve uzay koordinatlarındaki tek elektronlu dalga fonksiyonları ve spin koordinatlarındaki spin dalga fonksiyonunun çarpımı şeklinde ifade edilir:

$$U_i(\bar{x}_i) = \phi_i(\vec{r}_i) \omega(i) \quad (7)$$

Bu denklemde;  $\phi_i(\vec{r}_i)$  uzay koordinatlarındaki tek elektronlu dalga fonksiyonlarıdır,  $\omega(i)$  spin dalga fonksiyonudur ve aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\omega(i) = \begin{cases} \alpha(i) \\ \beta(i) \end{cases} \quad \text{ve} \quad \alpha(i) = \left| \frac{1}{2} \right\rangle, \quad \beta(i) = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (8)$$

(6) denklemde; iki satırın yer değiştirmesi, determinantın işaretini değiştirmesine sebep olur:

$$\Psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_m, \dots, \bar{x}_n, \dots, \bar{x}_N) = -\Psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n, \dots, \bar{x}_m, \dots, \bar{x}_N) \quad (9)$$

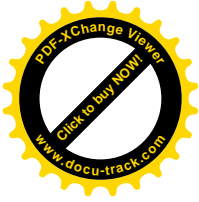
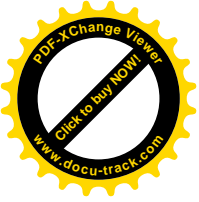
Bu yüzden; Slater determinantı Pauli antisimetriklik ilkesine uyar.

(6) denklemde; iki satırın aynı olması, determinantın sıfır olmasına sebep olur:

$$\Psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_m, \dots, \bar{x}_m, \dots, \bar{x}_N) = 0 \quad (10)$$

Bu yüzden; Slater determinantı Pauli dışarlama ilkesine uyar.

Atomların enerjilerini ve elektron dağılımlarını tam olarak belirleyebilmek için Schrödinger denklemini sayısal olarak çözümlenmenin bir yolunu bulmak gerekir. Schrödinger denklemini sayısal olarak çözümlenmenin bir yolu da varyasyon prensibine dayalı olan öz uyumlu alan (Self Consistent Field, SCF) metodudur. Bu metot atom ve moleküllerin elektronik yapısının belirlenmesi için kullanılan ana yöntemlerden biridir ve



elektron deęiş-tokuşunun (exchange) etkisini de kapsamak üzere Fock ve Slater tarafından geliştirilmiştir [4-6].

Bu yaklaşım dięer tüm elektronların ortalama potansiyellerinin hesaplanması için dalga fonksiyonlarının bilindięini varsayar. Bu sebeple hesaplamaya elektronların dalga fonksiyonlarının tahmini ile başlanır. Sonra incelenen elektron için Schrödinger denklemi çözümlür. Elde edilen dalga fonksiyonu herhangi bir elektron tarafından görülen potansiyelin hesaplanmasında kullanılır ve bu işlem bütün elektronlar için tekrar edilir [4-6].

LCAO yaklaşımına göre; Slater determinantındaki moleküler orbitaller (spin orbitalleri), atomik orbitallerin lineer toplamı şeklinde yazılabilir [7,8].

$$\phi_p(\vec{r}) = \sum_i c_{pi} \chi_i(\alpha_i, \vec{r}) \quad (11)$$

Burada;  $\phi_p$  moleküler orbital,  $\chi_i$  atomik orbital ve  $c_{pi}$  HFR denkleminin çözümünden bulunan varyasyonel parametredir (lineer kombinasyon katsayıları).

Hartree-Fock enerjisi ise

$$E_{var} = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi dV}{\int \psi^* \psi dV} \quad (12)$$

ile verilir. Bu enerji varyasyonel metotlar uygulanarak minimize edildiğinde aşağıdaki Fock denklemleri elde edilir.

$$\frac{\partial E}{\partial c_{pi}} = 0 \Rightarrow \sum_{p=1}^M (F_{pq} - \epsilon_i S_{pq}) c_{qi} = 0 \quad (13)$$

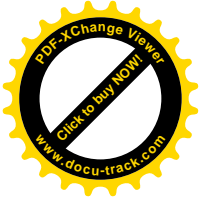
Yukarıdaki denklemden, her bir  $i$  deęeri için aşağıdaki HFR denklemi elde edilir:

$$(F_{pq} - \epsilon_i S_{pq}) C_{qi} = 0 \quad (14)$$

(13) denkleminde  $S_{pq}$  örtme integralidir ve aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$S_{pq} = \int \phi_p^* \phi_q dv \quad (15)$$





$F_{pq}$  ise Fock matrisini temsil eder ve

$$F_{pq} = \langle \phi_p | \hat{h} | \phi_q \rangle + \sum_{j=1}^{N/2} \langle \phi_p | (2\hat{J}_j - \hat{K}_j) | \phi_q \rangle, \quad (16)$$

olarak ifade edilir. Burada  $\hat{h}$  ; kinetik ve potansiyel enerji terimlerinden oluşan bir-elektronlu Hamiltonian işlemcisidir ve

$$\hat{h} = \hat{T} + \hat{V} \quad (17)$$

şeklinde ifade edilir. (16) denkleminde  $\hat{J}_j$  iki-elektronlu Coulomb işlemcisidir ve

$$\hat{J}_j = \int \phi_j^*(2) g(1,2) \phi_j(2) dV_2 \quad (18)$$

ile verilir ve  $\hat{K}_j$  ise iki-elektronlu değiş-tokuş işlemcisidir ve

$$\hat{K}_j = \int \phi_j^*(2) g(1,2) \hat{P}(1,2) \phi_j(2) dV_2. \quad (19)$$

şeklinde tanımlanır [4-6].

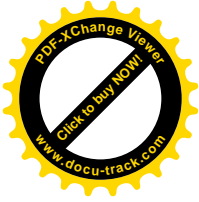
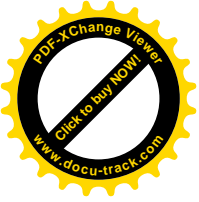
### 1.3. Literatürde Kullanılan Baz Fonksiyonları

Dalga fonksiyonu tabanlı elektronik yapı hesaplama yöntemlerinin doğruluğu seçilen baz fonksiyonların tipine bağlıdır [4-6]. Schödinger denkleminin iyi bir yaklaşık çözümü için kullanılan baz fonksiyonu iki önemli özelliği taşımalıdır. Bunlar; merkezde Kato'nun sınır şartı [9] ve sonsuzda sıfıra eksponansiyel bir şekilde yavaş gidiştir [10].

Bir baz fonksiyonunun aşağıdaki gibi verileceği genel bir kabuldür:

$$f_{nlm}(r, \theta, \varphi) = f_{nl}(r) S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (20)$$

Burada;  $f_{nl}(r)$  polinomu için farklı kabuller olmasına rağmen,  $S_{lm}(\theta, \varphi)$  ile verilen açılara bağlı kısmın küresel harmonikler olduğu kabul edilmektedir. Küresel harmonikler aşağıdaki gibi verilir [1,11]:



$$S_{lm}(\theta, \varphi) = \mathcal{P}_{lm}(\cos \theta) \Phi_m(\varphi) \quad (21)$$

Burada;  $\mathcal{P}_{lm}(\cos \theta)$  fonksiyonu normalize olmuş bağlı Legendre polinomudur ve

$$\mathcal{P}_{lm}(x) = \frac{1}{2^l l!} \left[ \frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l \quad (22)$$

ile tanımlanır [11]. Normalize olmuş bağlı Legendre fonksiyonlarının analitik ifadesi [12]

$$\mathcal{P}_{lm}(\cos \theta) = (-1)^{\frac{1}{2}(|m|-m)} \sum_{k=\frac{1}{2}(|m|-m)}^{E^-(\frac{l-m}{2})} C_{lm}^k (\cos \theta)^{l-(2k+m)} (\sin \theta)^{(2k+m)} \quad (23)$$

biçimindedir. Burada  $C_{lm}^k$  katsayısı

$$C_{lm}^k = \frac{(-1)^k}{2^{m+2k}} \left\{ \frac{2l+1}{2} F_{l-k}(l+k) F_{k+m}(l-k) F_{2k}(l-m) F_k(2k) \right\}^{1/2} \quad (24)$$

şeklinde ifade edilir. (21) denkleminde  $\Phi_m(\varphi)$  ise yüzey küresel harmoniği olarak tanımlanır ve

kompleks küresel harmonikler için

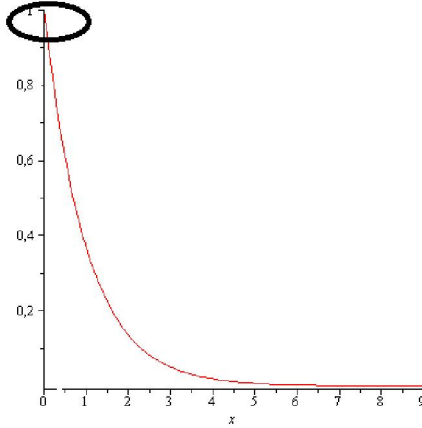
$$\Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (25)$$

reel küresel harmonikler için ise

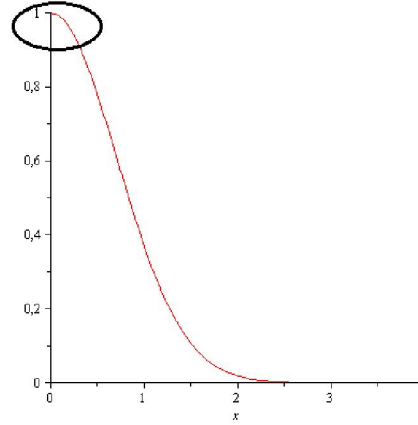
$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi(1+\delta_{m0})}} \begin{cases} \cos |m|\varphi; & m \geq 0 \text{ ise} \\ \sin |m|\varphi; & m < 0 \text{ ise} \end{cases} \quad (26)$$

ile verilir.

Şekil 1’de Kato’nun sınır şartı sağlandığı halde, Şekil 2’de Kato’nun sınır şartı sağlanmamaktadır. Ayrıca, Şekil 1’de dalga fonksiyonunun sonsuza gidişi yavaş olduğu halde Şekil 2’deki sonsuza gidiş oldukça hızlıdır. İyi huylu bir dalga fonksiyonu yukarıdaki bahsettiğimiz şartları sağlamalıdır (Şekil 1). Şekil 2 ile verilen dalga fonksiyonu elektronik yoğunluğu iyi temsil edemez.



Şekil 1.  $e^{-x}$ ’in grafiği



Şekil 2.  $e^{-x^2}$ ’nin grafiği

Literatürde yaygın olarak kullanılan baz fonksiyonları; Slater tipli orbital (STO) ve Gaussian tipli orbital (GTO)’lerdir. Bunların yanı sıra; Bessel tipli orbital (BTO), Laguerre tipli orbital (LTO), sturmianlar, düzlem dalga gibi baz fonksiyonları da mevcuttur.

### 1.3.1. Slater Tipli Orbital (STO)

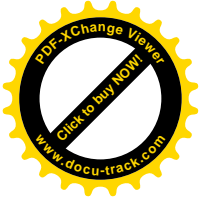
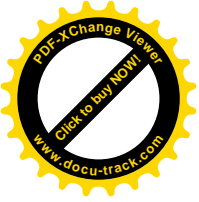
Slater tipli orbitaller [13,14], çekirdeğe çok yakın ve çekirdekten çok uzak değerlerde tam dalga fonksiyonlarının iki özelliğini de gösterme avantajına sahiptir. Yani, STO’ler çekirdeğe yakın yerlerde Kato sınır şartlarını [9] ve çok uzak bölgelerde sıfıra yavaş bir şekilde gittiğinden dolayı [10] elektron yoğunluğunu oldukça iyi bir şekilde verir.

En genel şekilde STO’ler küresel koordinat sisteminde

$$\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}) = N_n(\zeta) r^{n-1} e^{-\zeta r} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (27)$$

şeklinde tanımlanır. Burada:

$$N_n(\zeta) = \frac{(2\zeta)^{n+1/2}}{\sqrt{\Gamma(2n+1)}} \quad (28)$$



normalizasyon sabiti,  $S_{lm}(\theta, \varphi)$  reel küresel harmonik [11],  $\zeta$  varyasyonel bir parametre ve  $\Gamma(n)$  ise Gamma fonksiyonudur [15].

STO'ler elektron yoğunluğunu iyi bir şekilde vermesine rağmen çok-merkezli moleküler integrallerini (özellikle üç- ve dört-merkezli integraller) hesaplamak oldukça zordur. Bu yüzden, 1990'lı yıllara kadar STO'ler elektronik yapı hesaplamalarında fazla tercih edilmemekteydi. Uygulamalı matematik ve bilgisayar teknolojisindeki gelişmelerle beraber STO'lerin kullanımına son yıllarda artan bir ilgi vardır [16,17].

### 1.3.2. Gaussian Tipli Orbital (GTO)

STO'ler kullanıldığında ortaya çıkan çok-merkezli moleküler integrallerin hesaplamalarındaki güçlükleri aşmak için Gaussian tipli orbitallerin elektronik yapı hesaplamalarında kullanılabileceği fikri S.F. Boys tarafından önerilmiştir. Boys'un önerdiği GTO'ler küresel koordinat sisteminde aşağıdaki gibi ifade edilir [18,19]:

$$G_{nlm}(\zeta, \vec{r}) = N_n(\zeta) r^{n-1} e^{-\zeta r^2} S_{lm}(\theta, \varphi), \quad (29)$$

Burada;  $S_{lm}(\theta, \varphi)$  reel küresel harmonik [11],  $\zeta$  varyasyonel bir parametre,  $N_n(\alpha)$  ise normalizasyon sabitidir ve:

$$N_n(\zeta) = \sqrt{\frac{2(2\zeta)^{n+1/2}}{\Gamma(n+1/2)}}. \quad (30)$$

ile verilir.

İki farklı merkezdeki GTO'nun çarpımı başka bir merkezdeki tek bir GTO cinsinden ifade edilebilir olmasından dolayı GTO'lerin moleküler integralleri Boys integrali cinsinde ifade edilir [18] ve Boys integrali de çoğunlukla nümerik metotlarla hesaplanır [20,21]. GTO'ler kullanıldığında ortaya çıkan moleküler integrallerin kolay olmasına rağmen çekirdekte ve çekirdekten oldukça uzakta elektron yoğunluğunu iyi bir şekilde ifade edemez.

### 1.3.3. Bessel Tipli Orbitaller (BTO)

STO'ler elektron yoğunluğunu iyi temsil ettiği için ve fakat moleküler integralleri oldukça zor olduğu için STO'ler BTO'lerin lineer kombinasyonu şeklinde ifade etme fikri

Steinborn tarafından önerilmiştir [22]. Buna göre;  $\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r})$  fonksiyonu STO'ü ve  $B_{plm}(\zeta, \vec{r})$  fonksiyonu da BTO'ü temsil etmek üzere,

$$\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}) = \Omega_n(\zeta) \sum_{p=F(\frac{n-l}{2})}^{n-l} K_{nl}^p B_{plm}(\zeta, \vec{r}) \quad (31)$$

yazılabilir. Burada;

$$F\left(\frac{n}{2}\right) = \frac{n}{2} + \frac{1}{4} [1 - (-1)^n], \quad (32)$$

$$\Omega_n(\zeta) = \zeta^{1-n} N_n(\zeta) \quad (33)$$

ve

$$K_{nl}^p = \frac{(-1)^{n-l-p} (n-l)! (l+p)! 2^{l+p}}{(2p-n-l)! (2n-2l-2p)!} \quad (34)$$

ile verilir. (31) denklemindeki BTO, küresel koordinatlarda aşağıdaki gibi verilir [22,23]:

$$B_{nlm}(\zeta, \vec{r}) = N_{nl}(\zeta) r^l \hat{k}_{n-\frac{1}{2}}(\zeta r) S_{lm}(\theta, \varphi), \quad (35)$$

Burada;  $N_{nl}(\zeta)$  normalizasyon sabitidir ve

$$N_{nl}(\zeta) = \frac{\zeta^l}{2^{n+l} (n+l)!} \quad (36)$$

şeklinde verilir. (35) denkleminde  $\hat{k}_{n-\frac{1}{2}}$  indirgenmiş Bessel fonksiyonudur [15]:

$$\hat{k}_{n-\frac{1}{2}}(z) = z^{-1} e^{-z} \sum_{j=1}^n \frac{(2n-j-1)!}{(j-1)! (n-j)!} 2^{j-n} z^j. \quad (37)$$

şeklinde ifade edilir. BTO'lerin Fourier dönüşümleri çok basit bir matematiksel yapıya sahip olduğu için çok-merkezli moleküler integrallerin hesaplanması kolaydır.

#### 1.3.4. Laguerre Tipli Orbitaler

Hidrojen ve hidrojene benzer atomların dalga fonksiyonlarının Laguerre polinomlarını içermesi fikrinden hareketle, elektronik yapı hesaplamalarında Laguerre polinomlarını içeren bir baz fonksiyonu fikri Shull ve Löwdin tarafından ileri sürülmüştür. Küresel koordinatlarda Laguerre tipli orbitaler (LTO) aşağıdaki gibi verilir [24-26]:

$$\Lambda_{nlm}(\zeta, \bar{r}) = N_{nl}(\zeta) e^{-\zeta r} r^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+2}(2\zeta r), \quad (38)$$

ile verilir. Burada  $L_{n-l-1}^{2l+2}(2\zeta r)$  bağılı Laguerre polinomu [15] ve  $N_{nl}(\zeta)$  ise

$$N_{nl}(\zeta) = (2\zeta)^{(2l+3)/2} \left\{ \frac{(n-l-1)!}{(n+l+1)!} \right\}^{1/2}. \quad (39)$$

şeklinde tanımlanan normalizasyon sabitidir.

#### 1.4. Moleküler İntegrallerin Sınıflandırılması

Atomik veya moleküler sistemlerin HFR çözümlerinde, baz setinin genişliği (LCAO metodundaki atomik orbital sayısı)  $M$  olmak üzere; ortaya çıkan çok merkezli moleküler integral sayısı yaklaşık olarak  $M^4$  tanedir. Kimyasal hassaslık sınırı içerisinde atomik veya moleküler özellik hesabi için bu çok-merkezli moleküler integrallerin çok hassas bir şekilde hesaplanması gerekmektedir.  $N$ -elektronlu sistemin HFR denkleminin çözümünde ortaya çıkan moleküler integraller aşağıdaki tabloda verilmiştir [4-6,16,17].

Tablo 1. HFR de ortaya çıkan çok-merkezli moleküler integraller.

MOLEKÜLER İNTEGRALLER			
Bir-elektronlu Moleküler İntegraller		İki-elektronlu Moleküler İntegraller (Elektron Repulsion İntegralleri,ERI)	
Bir merkezli integral	Örtme integrali Nükleer çekim integrali Kinetik enerji integrali	Bir merkezli integral	Coulomb integrali
İki merkezli integral	Örtme integrali Nükleer çekim integrali Kinetik enerji integrali	İki merkezli integral	Coulomb integrali Değiş-Tokuş integrali Hibrit integrali
Üç merkezli integral	Nükleer çekim integrali	Üç merkezli integral	Hibrit integrali Değiş-Tokuş integrali
		Dört merkezli integral	

HFR denkleminde ortaya çıkan bir- ve iki-elektronlu moleküler integraller aşağıdaki gibidir [4-6,16,17]:

*Bir-elektronlu integraller:*

$$h_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}, \bar{R}_{BC}) = \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \bar{r}_{A1}) \hat{h}(r_{C1}) \chi_{n'l'm'}(\zeta', \bar{r}_{B1}) dV_1, \quad (40)$$

*İki-elektronlu integraller:*

$$\begin{aligned} g_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; \bar{R}_{AB}, \bar{R}_{BD}, \bar{R}_{CD}) = \\ = \iint \chi_{n_1 l_1 m_1}^*(\zeta_1, \bar{r}_{A1}) \chi_{n_1' l_1' m_1'}(\zeta_1', \bar{r}_{A1}) \hat{g}(r_{12}) \chi_{n_2 l_2 m_2}^*(\zeta_2, \bar{r}_{C2}) \chi_{n_2' l_2' m_2'}(\zeta_2', \bar{r}_{C2}) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (41)$$

şeklinde temsil edilirler. Bu denklemlerde:  $\hat{h}(r_{C1})$  bir-elektronlu işlemci ve  $\hat{g}(r_{12})$  ise iki-elektronlu işlemcidir. Bir- ve iki-elektronlu işlemciler aşağıda verilmiştir.

$$\hat{h}(r_{C1}) = \begin{cases} 1 & \text{örtme işlemcisi} \\ -\frac{1}{2} \nabla_{C1}^2 & \text{kinetik enerji işlemcisi} \\ \frac{1}{r_{C1}} & \text{nükleer çekim işlemcisi} \end{cases} \quad (42)$$

$$\hat{g}(r_{12}) = \frac{1}{r_{12}} \quad (43)$$

Bu işlemciler kullanarak bir- ve iki-elektronlu moleküler integralleri aşağıdaki bölümde detaylı bir şekilde incelenmiştir.

#### 1.4.1. Bir-elektronlu Moleküler İntegraller

Bir-elektronlu moleküler integrallerin en genel şekli (40) denkleminde verilmiştir. Bir-elektronlu integraller; bir-elektronlu  $\hat{h}(r_{C1})$  işlemcisine göre; örtme, kinetik enerji ve nükleer çekim integralleri olabilir [4-6,16,17].

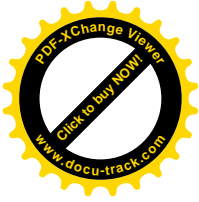
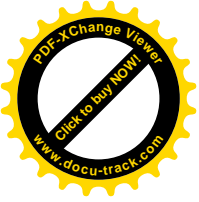
Şimdi bu integralleri ayrı ayrı inceleyelim:

##### 1.4.1.1. Örtme İntegrali $\hat{h}(r_{C1}) = 1$

*i. İki-merkezli örtme integrali*

$A \neq B$  için (40) denklemini iki-merkezli örtme integraline dönüştür:

$$h_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}, 0) \equiv S_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}) = \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \bar{r}_{A1}) \chi_{n'l'm'}(\zeta', \bar{r}_{B1}) dV_1. \quad (44)$$



ii. *Bir-merkezli örtme integrali*

$A \rightarrow B$  için (40) denklemi bir-merkezli örtme integraline dönüşür:

$$h_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; 0, 0) \equiv S_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; 0) = \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \bar{r}_{A1}) \chi_{n'l'm'}(\zeta', \bar{r}_{A1}) dV_1. \quad (45)$$

**1.4.1.2. Nükleer çekim integrali**  $\hat{h}(r_{C1}) = \frac{1}{r_{C1}}$

i. *Üç-merkezli nükleer çekim integrali*

$C \neq B \neq A$  için (40) denklemi üç-merkezli nükleer çekim integraline dönüşür:

$$h_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}, \bar{R}_{BC}) \equiv U_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}, \bar{R}_{BC}) = \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \bar{r}_{A1}) \frac{1}{r_{C1}} \chi_{n'l'm'}(\zeta', \bar{r}_{B1}) dV_1. \quad (46)$$

ii. *İki-merkezli nükleer çekim integrali*

$C \rightarrow A$  için (40) denklemi iki-merkezli nükleer çekim integraline dönüşür:

$$h_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}, 0) \equiv U_{nlm,n'l'm'}^{(A)}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}) = \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \bar{r}_{A1}) \frac{1}{r_{A1}} \chi_{n'l'm'}(\zeta', \bar{r}_{B1}) dV_1. \quad (47)$$

iii. *İki-merkezli nükleer çekim integrali*

$C \rightarrow B$  için (40) denklemi iki-merkezli nükleer çekim integraline dönüşür:

$$h_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}, 0) \equiv U_{nlm,n'l'm'}^{(B)}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}) = \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \bar{r}_{A1}) \frac{1}{r_{B1}} \chi_{n'l'm'}(\zeta', \bar{r}_{B1}) dV_1. \quad (48)$$

iv. *Bir-merkezli nükleer çekim integrali*

$C \rightarrow A \rightarrow B$  için (40) denklemi bir-merkezli nükleer çekim integraline dönüşür:

$$h_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; 0, 0) \equiv U_{nlm,n'l'm'}^{(B)}(\zeta, \zeta'; 0) = \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \bar{r}_{A1}) \frac{1}{r_{A1}} \chi_{n'l'm'}(\zeta', \bar{r}_{A1}) dV_1. \quad (49)$$

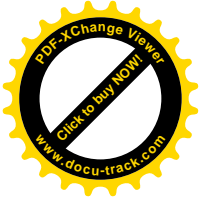
**1.4.1.3. Kinetik enerji integrali**  $\hat{h}(r_{C1}) = -\frac{1}{2} \nabla_{C1}^2$

i. *İki-merkezli kinetik enerji integrali*

$C \rightarrow B$  için (40) denklemi iki-merkezli kinetik enerji integraline dönüşür:

$$h_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}, 0) \equiv T_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \bar{R}_{AB}) = -\frac{1}{2} \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \bar{r}_{A1}) \nabla_{B1}^2 \chi_{n'l'm'}(\zeta', \bar{r}_{B1}) dV. \quad (50)$$





ii. *Bir-merkezli kinetik enerji integrali*

$A \rightarrow B$  ve  $C \rightarrow B$  için (40) denklemi bir-merkezli kinetik enerji integrali'ne dönüşür:

$$h_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; 0, 0) \equiv T_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; 0) = -\frac{1}{2} \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \bar{r}_{A1}) \nabla_{A1}^2 \chi_{n'l'm'}(\zeta', \bar{r}_{A1}) dV. \quad (51)$$

### 1.4.2. İki-elektronlu Moleküler İntegraller (Elektron Repulsion İntegralleri)

İki-elektronlu moleküler integraller veya Elektron Repulsion İntegralleri(ERI) atomik orbital çarpımlarına göre sınıflandırılmaktadır. Bu çarpımlar yük yoğunluğu olarak tanımlanmaktadır. Hamiltonian'deki iki-elektronlu terim  $\hat{g}(r_{12}) = r_{12}^{-1}$  Coulomb terimi olduğundan farklı iki-elektronlu integraller atomik orbitallerin farklı atomlarda merkezleşmesinden ortaya çıkmaktadır. Elde edilen en genel iki-elektronlu integral (41) denkleminde verilmiştir [4-6,16,17].

#### 1.4.2.1. Bir-merkezli Elektron Repulsion İntegrali

(41) genel denklemi ile verilen dört-merkezli ERI  $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D$  durumunda bir-merkezli ERI'ne dönüşür:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; 0, 0, 0) \\ = \iint \chi_{n_1 l_1 m_1}^*(\zeta_1, \bar{r}_{A1}) \chi_{n_1' l_1' m_1'}(\zeta_1', \bar{r}_{A1}) \frac{1}{r_{12}} \chi_{n_2 l_2 m_2}(\zeta_2, \bar{r}_{A2}) \chi_{n_2' l_2' m_2'}(\zeta_2', \bar{r}_{A2}) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (52)$$

Bir-merkezli ERI literatürde bir-merkezli Coulomb integrali olarak da adlandırılır.

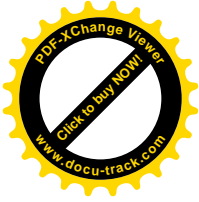
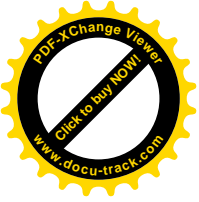
#### 1.4.2.2. İki-merkezli Elektron Repulsion İntegralleri

ERI'leri için verilen (41) genel ifadesi bazı özel durumlarda iki-merkezli ERI'ne dönüşür. Bu integraller literatürde Coulomb, hibrit ve değiş-tokuş integralleri olarak da bilinir.

i. *İki-merkezli Coulomb integrali*

(41) denkleminde  $A \rightarrow B \neq C \rightarrow D$  durumda; dört-merkezli ERI, iki-merkezli Coulomb integraline dönüşür:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; 0, \bar{R}_{AC}, 0) \\ = \iint \chi_{n_1 l_1 m_1}^*(\zeta_1, \bar{r}_{A1}) \chi_{n_1' l_1' m_1'}(\zeta_1', \bar{r}_{A1}) \frac{1}{r_{12}} \chi_{n_2 l_2 m_2}(\zeta_2, \bar{r}_{C2}) \chi_{n_2' l_2' m_2'}(\zeta_2', \bar{r}_{C2}) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (53)$$



ii. İki-merkezli Değiş-Tokuş integrali

$A \rightarrow C \neq B \rightarrow D$  durumunda (41) denklemi, iki-merkezli değiş-tokuş integraline dönüşür:

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; \bar{R}_{AB}, 0, 0) \\ &= \iint \chi_{n_1 l_1 m_1}^*(\zeta_1, \bar{r}_{A1}) \chi_{n_1' l_1' m_1'}(\zeta_1', \bar{r}_{B1}) \frac{1}{r_{12}} \chi_{n_2 l_2 m_2}^*(\zeta_2, \bar{r}_{A2}) \chi_{n_2' l_2' m_2'}(\zeta_2', \bar{r}_{B2}) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (54)$$

iii. İki-merkezli Hibrit intergali

$A \rightarrow B \rightarrow C \neq D$  durumunda (41) denklemi iki-merkezli Hibrit intergale dönüşür:

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; 0, \bar{R}_{AD}, 0) \\ &= \iint \chi_{n_1 l_1 m_1}^*(\zeta_1, \bar{r}_{A1}) \chi_{n_1' l_1' m_1'}(\zeta_1', \bar{r}_{A1}) \frac{1}{r_{12}} \chi_{n_2 l_2 m_2}^*(\zeta_2, \bar{r}_{A2}) \chi_{n_2' l_2' m_2'}(\zeta_2', \bar{r}_{D2}) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (55)$$

### 1.4.2.3. Üç-merkezli Elektron Repulsion İntegralleri

i. Üç-merkezli Değiş-Tokuş İntegrali

$A \rightarrow C \neq B \neq D$  durumunda (41) denklemi üç-merkezli değiş-tokuş integraline dönüşür:

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; \bar{R}_{AB}, \bar{R}_{AD}, 0) \\ &= \iint \chi_{n_1 l_1 m_1}^*(\zeta_1, \bar{r}_{A1}) \chi_{n_1' l_1' m_1'}(\zeta_1', \bar{r}_{B1}) \frac{1}{r_{12}} \chi_{n_2 l_2 m_2}^*(\zeta_2, \bar{r}_{A2}) \chi_{n_2' l_2' m_2'}(\zeta_2', \bar{r}_{D2}) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (56)$$

ii. Üç-merkezli Hibrit İntegrali

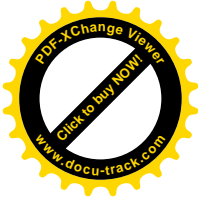
$A \rightarrow B \neq C \neq D$  durumunda (41) denklemi üç-merkezli Hibrit integraline dönüşür:

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; 0, \bar{R}_{AD}, \bar{R}_{CD}) \\ &= \iint \chi_{n_1 l_1 m_1}^*(\zeta_1, \bar{r}_{A1}) \chi_{n_1' l_1' m_1'}(\zeta_1', \bar{r}_{A1}) \frac{1}{r_{12}} \chi_{n_2 l_2 m_2}^*(\zeta_2, \bar{r}_{C2}) \chi_{n_2' l_2' m_2'}(\zeta_2', \bar{r}_{D2}) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (57)$$

### 1.4.2.4. Dört-merkezli Elektron Repulsion İntegrali

$A \neq B \neq C \neq D$  durumunda (41) genel denklemi dört-merkezli ERI'ne dönüşür:

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; \bar{R}_{AB}, \bar{R}_{BD}, \bar{R}_{CD}) \\ &= \iint \chi_{n_1 l_1 m_1}^*(\zeta_1, \bar{r}_{A1}) \chi_{n_1' l_1' m_1'}(\zeta_1', \bar{r}_{B1}) \frac{1}{r_{12}} \chi_{n_2 l_2 m_2}^*(\zeta_2, \bar{r}_{C2}) \chi_{n_2' l_2' m_2'}(\zeta_2', \bar{r}_{D2}) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (58)$$



## 1.5. Moleküler İntegralleri Hesaplama Yöntemleri

Moleküler integrallerin tarihsel çözüm sürecindeki çalışmaları iki temel yaklaşım altında toplamak mümkündür. Bunlar kısaca [17,27]

### 1.5.1. Tek Merkez Açılım Metodları

- 1.5.1.1. Zeta fonksiyon (Barnett-Coulson) Metodu,
- 1.5.1.2. Löwdin  $\alpha$ -fonksiyon Metodu,
- 1.5.1.3. STO'lerin Taşınması Metodu.

### 1.5.2. İntegral Dönüşüm Metodları

- 1.5.2.1. STO- $n$ GTO Açılımı Metodu,
- 1.5.2.2. Gaussian İntegral Dönüşüm Metodu,
- 1.5.2.3. Eliptik Koordinatlar Metodu,
- 1.5.2.4. Fourier Dönüşüm Metodu,
- 1.5.2.5. Bessel Fonksiyon Metodu.

şeklinde sınıflandırılabilir. Bu tür yaklaşıkların ortaya atılmasının sebebi, STO'lerin radyal kısmının integral altında çözümünde ortaya çıkan zorlukları aşmaktır.

### 1.5.1. Tek Merkez Açılım Metodları

Tek-merkez açılım metodu ile bütün çok-merkezli iki-elektronlu moleküler integraller veya elektron repulsion integralleri (ERI) bir-merkezli Coloumb integralleri cinsinden ifade edilir.

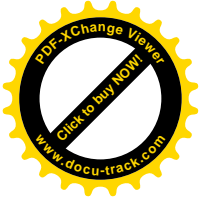
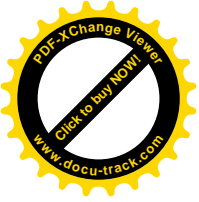
#### 1.5.1.1. Zeta Fonksiyon (Barnett-Coulson) Metodu

Moleküler integrallerin çözüm sürecindeki yöntemlerden bir tanesidir. Bu metodun temeli aşağıdaki iki temel formüle dayanır [28,29]:

$$r_b^n P_{nm}(\cos \theta_b) = \sum_{i=m}^n (-1)^{i+m} \frac{(n+m)!}{(i+m)!(n-i)!} R^{n-i} r_a^i P_{im}(\cos \theta_a) \quad (59)$$

$$r_b^{m-1} e^{-\beta r_b} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1)}{\sqrt{r_a R}} P_n(\cos \theta_a) \xi_{nm}(\beta, r_a, R) \quad (60)$$

Burada  $\xi_{nm}$  Zeta fonksiyonu olarak adlandırılır,  $D$  ve  $T$  yardımcı moleküler integrallerinin lineer kombinasyonu olarak ifade edilir. Benzer şekilde bu metot



kullanıldığında bütün çok-merkezli moleküler integraller  $D$  ve  $T$  yardımcı moleküler integraller cinsinden ifade edilir:

$$D_{mn}^l(\alpha, \beta, \gamma; R) = \int_R^\infty r^l e^{-\alpha r} I_{m+1/2}(\beta r) K_{n+1/2}(\gamma r) dr \quad (61)$$

$$T_{mn}^l(\alpha, \beta, \gamma; R) = \int_0^R r^l e^{-\alpha r} I_{m+1/2}(\beta r) I_{n+1/2}(\gamma r) dr \quad (62)$$

Burada;  $I_{n+1/2}(\beta r)$  silindirik Bessel fonksiyonu  $I_{m+1/2}(\beta r)$  ve  $K_{n+1/2}(\gamma r)$  ise birinci ve ikinci çeşit Bessel fonksiyonudur [15].

Literatürde tek-merkez açılım metodları altında sayılabilecek başka metotlar da vardır [29]. Ancak bu ve benzeri metotların temeli Zeta fonksiyon metoduna dayanmaktadır [17].

### 1.5.1.2. Löwdin $\alpha$ -fonksiyon Metodu

Moleküler integrallerin çözüm sürecindeki önemli yöntemlerden bir tanesi de Löwdin  $\alpha$ -fonksiyon metodudur. Bu metot STO'leri aşağıdaki gibi sonsuz seri şeklinde ifade etmektedir [30-32]:

$$\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}) = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}} (-1)^m}{\sqrt{(2n)!} \zeta^{n-1}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi (l-m)!}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sqrt{\frac{4\pi (\lambda-m)!}{(2\lambda+1)(\lambda+m)!}} \alpha_{\lambda}^{nlm}(\zeta a, ra) S_{\lambda m}(\theta, \varphi) \quad (63)$$

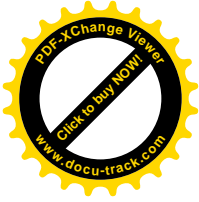
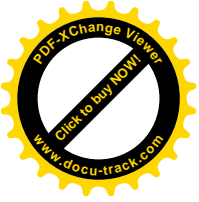
Burada;  $S_{\lambda m}(\theta, \varphi)$  küresel harmoniktir [11],  $\alpha_{\lambda}^{nlm}(\zeta a, ra)$  Löwdin- $\alpha$  fonksiyonu olmak üzere aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\alpha_{\lambda}^{nlm}(\zeta a, ra) = \frac{(2\lambda+1)(\lambda-m)}{2(\lambda+m)} \sum_{i=0}^{n+l+\lambda} \sum_{j=0}^{n+\lambda} C_{\lambda}^{nlm}(i, j) H_{ij}(\zeta a)^{i-l-\lambda-1} (\zeta r)^{j-\lambda-1} \quad (64)$$

ve  $H_{ij}$  sembolü ise

$$H_{ij} = \begin{cases} e^{-\zeta a} \left[ (-1)^j e^{\zeta r} - e^{-\zeta r} \right], & r < a \text{ ise} \\ e^{-\zeta r} \left[ (-1)^i e^{\zeta a} - e^{-\zeta a} \right], & r > a \text{ ise} \end{cases} \quad (65)$$

şeklinde verilir. Burada:  $r$  radyal uzaklık,  $a$  merkezler arası uzaklıktır ve



$$\vec{a} + \vec{R} = \vec{r} \quad (66)$$

ile verilir. (64) denkleminde  $C_{\lambda}^{nlm}(i, j)$  fonksiyonu aşağıdaki gibi verilir [31]:

$$C_{\lambda}^{nlm}(i, j) = \frac{(l - \frac{1}{2})!(\lambda - \frac{1}{2})!}{(l + m)!(\lambda - m)!} \sum_{K=0}^{\min\{[i/2], l+\lambda\}} \sum_{k=0}^{\min\{[j/2], l+\lambda-K\}} \frac{(n+l+2\lambda-2K-2k)!}{(i-2K)!(j-2k)!} b_{l+\lambda-K-k, k}(lm \setminus \lambda) \quad (67)$$

Burada;  $b_{Kk}(lm \setminus \lambda)$  fonksiyonu ise

$$b_{l+\lambda-K-k, k}(lm \setminus \lambda) = \frac{(l-m)!(l+m)!(\lambda-m)!(\lambda+m)!(l-K-\frac{1}{2})!(\lambda-k-\frac{1}{2})!}{(l+\lambda-K-k)!(l-\frac{1}{2})!K!(\lambda-\frac{1}{2})!k!} \times \sum_{s=0}^{l-m} \frac{(-l+K+k+s-\frac{1}{2})!}{(l-m-s)!(\lambda-l+s)!(-l+s-\frac{1}{2})!(l+m-s)!} \quad (68)$$

şeklinde verilir.

Bu yaklaşımda; üç- ve dört-merkezli integralleri iki-merkezli Coloumb ve iki-merkezli örtme integrallerine indirger. Aynı zamanda son yıllarda kullanılan Mathematica ve Maple sembolik programlama dillerinde [33] programlamaya uygun bir metottur. Diğer tek merkezli açılım yöntemlerine göre sonsuz serinin uyumu oldukça iyidir. Fakat eşit olmayan orbital üstellerinde serinin uyumu yavaştır ve buna bağlı olarak da hesaplama süresi oldukça uzundur [16].

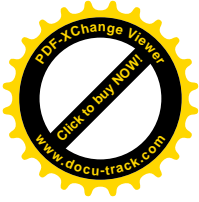
### 1.5.1.3. STO'lerin Taşınması Metodu

Bu metoda göre; uzayın herhangi bir  $a$  noktasında merkezleşmiş bir STO'ü uzayın başka bir noktası olan  $b$  noktasında merkezleşmiş STO'ler cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilir [34,35]:

$$\chi_{nlm}(\xi, \vec{r}_a) = \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{\mu=1}^Q \sum_{\nu=0}^{\mu-1} \sum_{\sigma=-\nu}^{\nu} V_{nlm, \mu\nu\sigma}^Q(\xi, \xi'; \vec{R}_{ab}) \chi_{\mu\nu\sigma}(\xi', \vec{r}_b) \quad (69)$$

Bu denklemde;  $V_{nlm, \mu\nu\sigma}^Q(\xi, \xi'; \vec{R}_{ab})$  fonksiyonu:

$$V_{nlm, \mu\nu\sigma}^Q(\xi, \xi'; \vec{R}_{ab}) = \sum_{n'=v+1}^Q \Omega_{\mu n'}^{\nu}(Q) S_{nlm, n' \nu \sigma}(\xi, \xi'; \vec{R}_{ab}) \quad (70)$$



ile gösterilir. Burada  $\Omega_{nk}^l(N)$  fonksiyonu:

$$\Omega_{nk}^l(N) = \sum_{n'=\max(n,k)}^N \omega_{n'n}^l \omega_{n'k}^l \quad (71)$$

ve  $\omega_{nn'}^l$  sembolü:

$$\omega_{nn'}^l = (-1)^{n+l+1} [F_{n+l+1}(n'+l+1)F_{n-l-1}(n'-l-1)F_{n-l-1}(2n)]^{1/2} \quad (72)$$

gibi tanımlanır. (72) eşitliğinde  $F_m(n)$  ifadesi:

$$F_m(n) = \frac{n!}{m!(n-m)!} \quad (73)$$

şeklinde ifade edilen binom katsayılarıdır [15].

Başta üç- ve dört-merkezli olmak üzere, çok-merkezli moleküler integrallerin çözümüne yöneliktir. Bu yaklaşım diğer tek merkezli açılım metotları gibi üç- ve dört-merkezli integralleri iki-merkezli Coloumb integrallerine dönüştürür. Fakat farklı orbital üstellerinde serinin uyumu yavaştır ve büyük moleküllerin hesabında, virgülden sonraki doğru anlamlı rakam sayısı yeterli değildir [17].

## 1.5.2. İntegral Dönüşüm Metodları

İntegral dönüşüm metodlarının en önemlisi Gaussian İntegral Dönüşüm yöntemi ve Fourier İntegral Dönüşüm yöntemleridir. Bu metodlar bağımsız bir şekilde ele alındığında, bu yöntemler matematiksel olarak eşittir [4-6,16,17].

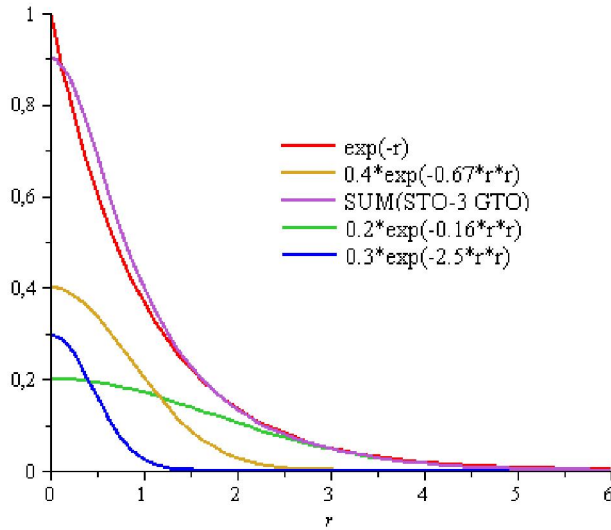
### 1.5.2.1. STO-nGTO Açılımı Metodu

Bu dönüşüm yöntemi, diğer integral dönüşüm yöntemleri arasında oldukça yaygın olarak kullanılmaktadır [36-40].

$$\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}) = \lim_{Q \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^Q C_{nlm}^i(\zeta) G_{n_i, l_i, m_i}(\zeta_i, \vec{r}) \quad (74)$$

Burada;  $C_{nlm}^i(\zeta)$  numerik yöntemleri ile bulunan açılım katsayıları,  $G_{n_i, l_i, m_i}(\zeta_i, \vec{r})$  ise (29) denklemi ile verilen GTO'dur.

Çok sayıda GTO'lerin lineer toplamını alarak yaklaşık olarak STO'lere dönüştürmek mümkündür. Literatürde bu da STO-*n*GTO şeklinde gösterilmektedir [36-40].



Şekil 3. STO-*n*GTO açılımı.

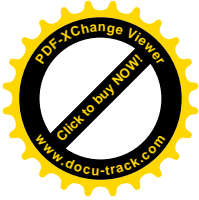
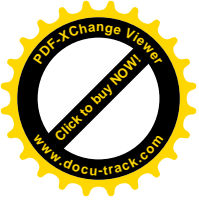
Bu yöntemde üç- ve dört-merkezli integraller, iki merkezli Coloumb integrallerine; üç- ve dört-merkezli nükleer çekim integralleri, iki-merkezli nükleer çekim integrallerine; iki-merkezli örtme integralleri, Boys integrallerine indirgenebilmektedir. Boys integralleri, bir- ve iki-merkezli moleküler integraller analitik değilse nümerik metodlarla hesaplanır [20,21,36,40].

### 1.5.2.2. Gaussian İntegral Dönüşüm Metodu

Dört-merkezli moleküler integrallerin çözümünde kullanılan ve I. Shavitt ile M. Karplus tarafından geliştirilmiş olan bir metottur [36,40-44]. STO'leri GTO'ler cinsinden ifade eden bir yöntemdir.

$$e^{-\zeta r} = \frac{\zeta}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} s^{-3/2} e^{-\frac{\zeta^2}{4s^2} - sr^2} ds \quad (75)$$

Burada; radyal kısmı böyle ifade ederek büyük bir avantaj sağlanır. Bu yöntem ile üç- ve dört-merkezli integraller, iki merkezli Coloumb integrallerine; üç- ve dört-merkezli nükleer çekim integralleri, iki merkezli nükleer çekim integrallerine; iki-merkezli örtme



integralleri, bir-merkezli temel integrale dönüşür. Bütün çok merkezli moleküler integraller Boys integrallerine cinsinden ifade edilir. Boys integralleri, bir- ve iki-merkezli moleküler integraller nümerik metodlarla hesaplanmaktadır [20,21].

### 1.5.2.3. Eliptik Koordinatlar Metodu

Eliptik koordinat metodu küresel koordinatları kutupsal koordinatlara dönüştürür. Bu methodda aşağıdaki koordinat dönüşümleri kullanılır [45-52]:

$$\begin{aligned}
 r_a &= \frac{R}{2}(\mu + \nu) & r_b &= \frac{R}{2}(\mu - \nu) & \varphi &= \varphi_a = \varphi_b \\
 \cos \theta_a &= \frac{(1 + \mu\nu)}{(\mu + \nu)} & \cos \theta_b &= \frac{(1 - \mu\nu)}{(\mu - \nu)} \\
 \sin \theta_a &= \frac{[(\mu^2 - 1)(1 - \nu^2)]^{1/2}}{(\mu + \nu)} & \sin \theta_b &= \frac{[(\mu^2 - 1)(1 - \nu^2)]^{1/2}}{(\mu - \nu)} \\
 dv &= \left(\frac{R}{2}\right)^3 (\mu^2 - \nu^2) d\mu d\nu d\varphi \\
 1 \leq \mu < \infty & & -1 \leq \nu < 1 & & 0 \leq \varphi < 2\pi
 \end{aligned} \tag{76}$$

Eliptik koordinat metodu ile moleküler integrallerin hassas hesabı, aşağıdaki yardımcı moleküler integrallerin doğru ve hassas bir şekilde hesaplanmasına bağlıdır. Bu integraller literatürde Mulliken integralleri olarak bilinir. Bu integraller literatürde sıkça çalışılmıştır [45-52].

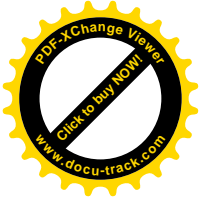
$$A_n(\zeta) = \int_1^{\infty} x^n e^{-\zeta x} dx \quad B_n(\zeta) = \int_{-1}^1 x^n e^{-\zeta x} dx \tag{77}$$

Eliptik koordinatlar metodunda; Mulliken integrallerinden farklı olarak aşağıdaki yardımcı moleküler integraller ile de karşılaşılır [46,51,52]:

$$E_n(\zeta) = \int_1^{\infty} x^{-n} e^{-\zeta x} dx \quad D_n(\zeta) = \int_0^1 x^{-n} e^{-\zeta x} dx \tag{78}$$

Bu dönüşüm yöntemi ile iki-merkezli moleküler integraller;  $A_n(\zeta)$ ,  $B_n(\zeta)$ ,  $E_n(\zeta)$  ve  $D_n(\zeta)$  yardımcı moleküler integralleri cinsinden ifade edilir. Tüm iki-merkezli,





bir- ve iki-elektronlu ve üç-merkezli nükleer çekim integralleri, diğer metodlardan daha hassas bir şekilde hesaplanır. Üç- ve dört-merkezli integrallerin hesabı hala tam olarak çözülemeyen bir problem olduğu bilinen bir gerçektir.

#### 1.5.2.4. Fourier Dönüşüm Metodu

Çok-elektronlu kuantum mekaniksel sistemlerin konum uzayında Schrödinger denkleminin çözümünde çözülmesi zor çok-merkezli moleküler integraller ile karşılaşılır. Ancak, momentum uzayında Schrödinger denkleminin çözümünde sadece tek-merkezli moleküler integraller ile karşılaşılır. Yani, momentum uzayında yapılacak olan kuantum kimyasal hesaplamalarda çok-merkez problemi aşılmış olur. Momentum uzayında kuantum kimyasal hesaplamalar yapabilmek için momentum uzayı dalga fonksiyonunun bulunması gerekmektedir. Momentum uzayı dalga fonksiyonlarını elde etmek için, konum uzayındaki herhangi bir fonksiyonun momentum uzayındaki karşılığını veren Fourier dönüşüm metodundan faydalanılabilir [53-58].

Fourier dönüşüm metoduna göre; konum uzayı dalga fonksiyonu  $\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r})$  ile momentum uzayı dalga fonksiyonu  $U_{nlm}(\zeta, \vec{p})$  arasında aşağıdaki denklem çifti yazılabilir:

$$\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{i\vec{p}\vec{r}} U_{nlm}(\zeta, \vec{p}) d^3 p \quad (79)$$

$$U_{nlm}(\zeta, \vec{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{-i\vec{p}\vec{r}} \chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}) d^3 r \quad (80)$$

Yukarıdaki denklemlerde  $e^{\pm i\vec{p}\vec{r}}$  düzlem dalgalarıdır ve küresel harmonikler ile küresel Bessel fonksiyonları cinsinden seri açılımı

$$e^{\pm i\vec{p}\vec{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (\pm i)^l j_l(pr) S_{lm}^*(\theta_r, \varphi_r) S_{lm}(\theta_p, \varphi_p) \quad (81)$$

şekindedir. Burada  $j_l(x)$  küresel Bessel fonksiyonu,  $S_{lm}(\theta, \varphi)$  ise reel küresel harmonikleri ifade eder [15]. Bu ifade (80) denklemde yerine konulursa

$$U_{nlm}(\zeta, \vec{p}) = (-i)^l f_{nl}(\zeta, p) S_{lm}(\theta_p, \varphi_p) \quad (82)$$

ifadesi edilir (Bu denklemler 2. bölümde daha açıklayıcı şekilde yapılacaktır). Burada  $f_{nl}(\zeta, p)$  momentum uzayı dalga fonksiyonunun radyal kısmıdır. Bu metotla moleküler integrallerin hesaplanması için

$$F_{nm}^{ll'}(\zeta, \zeta'; R) = \int_0^{\infty} \frac{p^{l'}}{(\zeta^2 + p^2)^n (\zeta'^2 + p^2)^m} j_l(pR) dp \quad (83)$$

yardımcı moleküler integralinin hesaplanması gerekir. Fourier dönüşüm yöntemi ile çok-merkezli moleküler integrallerin hesaplanmasında (83) denklemi ile verilen  $F_{nm}^{ll'}(\alpha, \beta; R)$  yardımcı moleküler integralinin hesaplanması gerekir. Bu metodun hassaslığı,  $F_{nm}^{ll'}(\alpha, \beta; R)$  yardımcı moleküler integrallerinin hassas bir şekilde hesaplamasına bağlıdır [17].

### 1.5.2.5. Bessel Fonksiyon Metodu

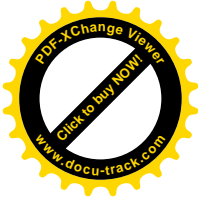
STO'lerin, BTO'lerin lineer toplamından oluştuğunu (31) denklemi ile ifade etmiştik. Bu ifade kullanılarak; STO'lerin bir- ve iki-elektronlu integralleri, BTO'lerin karşılığı olan bir- veya iki-elektronlu integrallerin lineer toplamından oluştuğu gösterilebilir [53,59,60]:

$$h_{n_l m_l, n'_l m'_l}^{(STO)}(\zeta, \zeta'; \vec{R}) = \sum_{p=F(\frac{n-l}{2})}^{n-l} \Omega_p(\zeta) K_{nl}^p \sum_{p'=F(\frac{n'-l'}{2})}^{n'-l'} \Omega_{p'}(\zeta') K_{n'l'}^{p'} h_{p_l m_l, p'_l m'_l}^{(BTO)}(\zeta, \zeta'; \vec{R}) \quad (84)$$

ve

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}^{(STO)}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; \vec{R}_{AB}, \vec{R}_{BD}, \vec{R}_{CD}) &= \sum_{p_1=F(\frac{n_1-l_1}{2})}^{n_1-l_1} \Omega_{p_1}(\zeta_1) K_{n_1 l_1}^{p_1} \\ &\times \sum_{p_1'=F(\frac{n_1'-l_1'}{2})}^{n_1'-l_1'} \Omega_{p_1'}(\zeta_1') K_{n_1' l_1'}^{p_1'} \sum_{p_2=F(\frac{n_2-l_2}{2})}^{n_2-l_2} \Omega_{p_2}(\zeta_2) K_{n_2 l_2}^{p_2} \sum_{p_2'=F(\frac{n_2'-l_2'}{2})}^{n_2'-l_2'} \Omega_{p_2'}(\zeta_2') K_{n_2' l_2'}^{p_2'} \cdot \quad (85) \\ &\times \mathcal{G}_{n_1 l_1 m_1, n_1' l_1' m_1'; n_2 l_2 m_2, n_2' l_2' m_2'}^{(BTO)}(\zeta_1, \zeta_1', \zeta_2, \zeta_2'; \vec{R}_{AB}, \vec{R}_{BD}, \vec{R}_{CD}) \end{aligned}$$

BTO'lerin iki-merkezli örtme integralleri yine BTO'ler cinsinden ifade edilir [53] Bu yöntemin en önemli avantajlarından birisi BTO'lerin Fourier dönüşümleri çok basit bir matematiksel yapıya sahiptir ve diğeri de iki farklı merkezli BTO'nun çarpımının başka bir merkezde bir BTO cinsinden ifade edilebilir olmasıdır. Bundan dolayı bütün moleküler integraller, iki-merkezli örtme ve Coulomb integrallerinin hesaplanmasına indirgenir. BTO'lerin üç- ve dört-merkezli moleküler integralleri, çözümü yapılabilen yardımcı moleküler integrallere indirgenir. Bu metodun hassaslığı, ortaya çıkan yardımcı moleküler integrallerin hassas bir şekilde hesaplanmasına bağlıdır. Fakat yardımcı moleküler integralleri hassas bir şekilde hesaplamak zordur, STO'lerin BTO'ler cinsinden seri



açılımından dolayı integral sayısı oldukça fazladır. BTO'ler cinsinden her bir integralin hassas hesabı bu metodun başarısını artırır [53-58].

### 1.6. Tezin Amacı

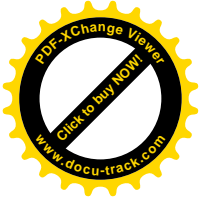
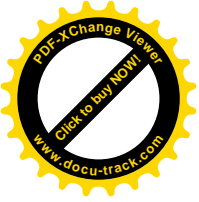
Bir-elektronlu integrallerden iki-merkezli kinetik enerji ve iki-merkezli nükleer-çekim integralleri iki-merkezli örtme integralleri cinsinden ifade edilir [61]. Bu yüzden; iki-merkezli integrallerin hassas hesaplanması oldukça önemlidir.

Bir-elektronlu integrallerin hesaplanmasında aşağıdaki durumlar için bazı hassaslık problemleri ortaya çıkar:

- i. Eşit veya hemen hemen eşit orbital üstellerinde durumu,*
- ii. Birbirinden çok farklı orbital üstellerinde ve çok uzak çekirdekler arası mesafe durumu,*
- iii. Birbirine hemen hemen eşit orbital üstellerinde çok uzak çekirdekler arası mesafe durumu.*

İki-merkezli örtme integralleri ile ilgili literatürde oldukça fazla çalışma mevcuttur. Bu çalışmaların çoğu ya yukarıda bahsedilen hassaslık problemlerinden etkilenir yada matematiksel yapı olarak çok karmaşık olup bilgisayarda programlamaya uygun değildir.

Bu çalışmanın amacı; STO'ler cinsinden iki-merkezli örtme integralleri için yukarıda bahsedilen hassaslık problemlerinden etkilenmeyecek veya en az etkilenecek şekilde bir analitik ifade elde etmektir. Elde edilecek analitik ifadenin Maple 13 sembolik programlama dilinde [33] programları yapılacaktır bu program kullanılarak, kuantum sayıları, orbital üstelleri ve çekirdekler arası mesafelerin çok geniş bir aralıktaki keyfi değerleri için elde edilecek sonuçlar literatürde var olan sonuçlarla karşılaştırılacaktır. Bu çalışmada, ayrıca,  $n, n' = 1, 2, 3$  için mümkün bütün iki-merkezli örtme intgerallerin sembolik sonuçları da, bu konuda çalışmalar yapacak olan kişilere kaynak olması amacıyla, tablolar halinde verilecektir.



## 2. YAPILAN ÇALIŞMALAR

### 2.1. Giriş

Bu bölümde, konum uzayı dalga fonksiyonu kullanıldığında ortaya çıkan çok-merkezli integral problemi tek-merkezli integral problemine indirgeyen Fourier dönüşüm Harmanlama teoremi kullanılarak iki-merkezli örtme integralleri analitik olarak hesaplanacaktır. Bu hesaplamaları yaparken Birinci bölümde bahsedilen hassaslık problemlerini aşmayı amaçlanır. Bunun için iki-merkezli örtme integralleri hesaplanırken ilk önce STO'lerin Fourier dönüşümünü inceleyelim.

### 2.2. Slater Tipli Orbitalerin Fourier Dönüşümü

STO'ler konum uzayında (27) denkleminde aşağıdaki gibi verilir [13]:

$$\chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}) = N_n(\zeta) r^{n-1} e^{-\zeta r} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (86)$$

Burada;  $S_{lm}(\theta, \varphi)$  reel küresel harmonikleri temsil eder [11] ve  $N_n(\zeta)$  ise (28) denklemi ile verilen normalizasyon sabitidir.

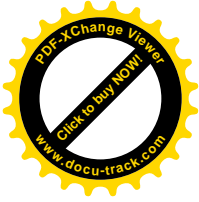
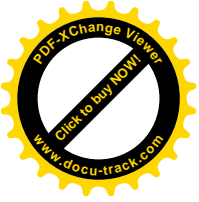
Fourier dönüşüm metoduna göre; konum uzayında verilen bir STO'nin momentum uzayındaki karşılığı

$$U_{nlm}(\zeta, \vec{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int \chi_{nlm}(\zeta, \vec{r}) e^{-i\vec{p}\vec{r}} d^3r \quad (87)$$

ifadesi ile verilir. Burada  $e^{\pm i\vec{p}\vec{r}}$  düzlem dalgasının küresel harmonikler cinsinden seri ifadesi (87) denkleminde yerine yazılırsa

$$U_{nlm}(\zeta, \vec{p}) = (2\pi)^{-3/2} N_n(\zeta) 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^{+L} (-i)^L S_{LM}(\theta_r, \varphi_r) \times \int_{r=0}^{\infty} r^{n+1} e^{-\zeta r} j_L(pr) dr \int_{\Omega} S_{lm}(\theta_r, \varphi_r) S_{LM}^*(\theta_p, \varphi_p) d\Omega \quad (88)$$

elde edilir. (88) denkleminde katı açı üzerinden olan integral için



$$\int_{\Omega} S_{lm}(\theta_r, \varphi_r) S_{LM}^*(\theta_p, \varphi_p) d\Omega = \delta_{lL} \delta_{mM} \quad (89)$$

ile verilen küresel harmoniklerin ortanormallığı ifadesi kullanılırsa

$$\begin{aligned} U_{nlm}(\zeta, \bar{p}) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} N_n(\zeta) (-i)^l D_{n+1,l}(\zeta, p) S_{lm}(\theta_r, \varphi_r) \\ &= (-i)^l f_{nl}(\zeta, p) S_{lm}(\theta_r, \varphi_r) \end{aligned} \quad (90)$$

bulunur.  $D_{nl}(\zeta, p)$  ve  $f_{nl}(\zeta, p)$  yardımcı fonksiyonları aşağıda incelenmiştir.

### 2.3. $D_{nl}(\zeta, p)$ ve $f_{nl}(\zeta, p)$ Yardımcı Fonksiyonları

$D_{nl}(\zeta, p)$  fonksiyonu aşağıdaki gibi ifade edilen bir integraldir:

$$D_{nl}(\zeta, p) = \int_{r=0}^{\infty} r^n e^{-\zeta r} j_L(pr) dr \quad (91)$$

$D_{nl}(\zeta, p)$  ve  $f_{nl}(\zeta, p)$  fonksiyonların analitik ifadeleri aşağıdaki gibi verilir [62]:

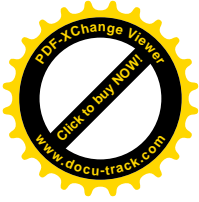
$$D_{nl}(\zeta, p) = \frac{1}{(p^2 + \zeta^2)^n} \sum_{s=0}^{E\left(\frac{n-l-1}{2}\right)} A_{nl}^s(\zeta) p^{l+2s} \quad (92)$$

$$f_{nl}(\zeta, p) = \frac{1}{(p^2 + \zeta^2)^n} \sum_{s=0}^{E\left(\frac{n-l}{2}\right)} B_{nl}^s(\zeta) p^{l+2s} \quad (93)$$

Burada  $A_{nl}^s(\zeta)$  ve  $B_{nl}^s(\zeta)$  sembolleri:

$$A_{nl}^s(\zeta) = (-1)^s 2^{2l+2s-n+1} (2\zeta)^{n-l-2s-1} (n-l-1)!! F_{2l+2s+1}(n+l) F_s(l+s) \quad (94)$$

$$B_{nl}^s(\zeta) = \frac{(-1)^s}{\sqrt{\pi}} 2^{n+l+1} \zeta^{2n-l-2s+\frac{1}{2}} \frac{F_{2l+2s+1}(n+l+1) F_s(l+s)}{\sqrt{F_l(2l) F_{n-l}(2l) F_{n-l}(n+l)}} \quad (95)$$



şeklinde ifade edilir. (92) denkleminde  $E(n/2)$  sembolü,  $n/2$ 'nin en küçük tam değerini ifade eder ve

$$E\left(\frac{n}{2}\right) = \frac{n}{2} - \frac{1}{4} [1 - (-1)^n] \quad (96)$$

şeklinde tanımlanır.

$D_{nl}(\zeta, p)$  fonksiyonuna alternatif bir formül bulmak için, (91) denkleminde  $j_l(x)$  küresel Bessel fonksiyonunun Ek 1'de (163) ile verilen ifadesi kullanılırsa

$$D_{nl}(\zeta, p) = \sum_{k=1}^l (-1)^{k-1} a_{lk} \sum_{s=0}^{l-k+1} (-1)^{\frac{1}{2}(s+\eta_s)} \frac{(l-k+1)!}{s!} p^{s-l-1} [\eta_s^- C_{n-l+s-1}(\zeta, p) + \eta_s^+ S_{n-l+s-1}(\zeta, p)] \quad (97)$$

Bu denklemde  $a_{lk}$  sembolü için Ek 1'de (161) denkleminde verilmiştir. (97) denklemindeki  $C_n(\zeta, p)$  ve  $S_n(\zeta, p)$  fonksiyonlarının integral şekli aşağıdaki gibi verilmiştir [15]:

$$C_n(\zeta, p) = \int_0^{\infty} x^n e^{-\zeta x} \cos(px) dx \quad (98)$$

$$S_n(\zeta, p) = \int_0^{\infty} x^n e^{-\zeta x} \sin(px) dx \quad (99)$$

Bu denklemlerin bazı özel durumları için literatürde bazı analitik ifadeler vardır [15]. (98) ve (99) denklemlerine bazı matematiksel işlemler uygulanırsa aşağıdaki analitik ifadeler kolayca bulunabilir:

$$C_n(\zeta, p) = \frac{n!}{(p^2 + \zeta^2)^{n+1}} \sum_{k=\frac{1}{2}[1-(-1)^n]}^{n+1} {}^{(2)}(-1)^{E(\frac{k}{2})} F_k(n+1) \zeta^{n-k+1} p^k, \quad (100)$$

$$S_n(\zeta, p) = \frac{n!}{(p^2 + \zeta^2)^{n+1}} \sum_{k=1}^{n+1} {}^{(2)}(-1)^{\frac{k-1}{2}} F_k(n+1) \zeta^{n-k+1} p^k. \quad (101)$$

ve bu ifadeler bilgisayarda programlamaya oldukça uygun ifadelerdir.

## 2.4. İki-merkezli Örtme İntegrali

$\vec{r}$  noktasında merkezleşmiş bir  $\chi_{nlm}^*(\zeta, \vec{r})$  ile  $\vec{r} - \vec{R}$  noktasında merkezleşmiş başka bir  $\chi_{n'l'm'}(\zeta', \vec{r} - \vec{R})$ 'in birbirini örtmesi ihtimali aşağıdaki gibi verilir:

$$S_{nlm, n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \vec{R}) = \int \chi_{nlm}^*(\zeta, \vec{r}) \chi_{n'l'm'}(\zeta', \vec{r} - \vec{R}) d^3 r. \quad (102)$$

Fourier dönüşüm harmanlama teoremine [11] göre; iki-merkezli örtme integrali aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$S_{nlm, n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \vec{R}) = \int U_{nlm}^*(\zeta, \vec{p}) U_{n'l'm'}(\zeta', \vec{p}) e^{-i\vec{p}\vec{R}} d^3 p \quad (103)$$

Burada  $U_{nlm}^*(\zeta, \vec{p})$  ve  $U_{n'l'm'}(\zeta', \vec{p})$  fonksiyonları, (90) denklemi ile verilen STO'lerin momentum uzayı dalga fonksiyonudur. (81) denkleminde verilen  $e^{-i\vec{p}\vec{r}}$  düzlem dalgasını (103) denkleminde yerine koyulursa aşağıdaki ifade elde edilir:

$$S_{nlm, n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \vec{R}) = 8N_n(\zeta) N_{n'}(\zeta') \sum_{L=0}^{\infty} (-1)^{\frac{1}{2}(l+3l'+3L)} D_{n+1, l; n'+1, l'}^{2, L}(\zeta, \zeta'; R) \sum_{M=-L}^L G_{lm, l'm'}^{LM} S_{LM}(\vec{R}) \quad (104)$$

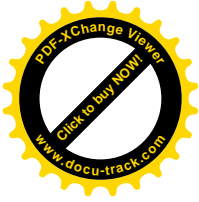
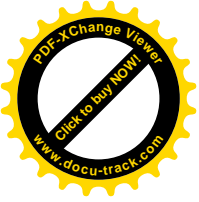
Burada;  $G_{lm, l'm'}^{LM}$  fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$G_{lm, l'm'}^{LM} = \int_{\Omega} S_{lm}^*(\theta, \varphi) S_{l'm'}(\theta, \varphi) S_{LM}(\theta, \varphi) d\Omega \quad (105)$$

Bu integralin analitik ifadesi Gaunt katsayıları cinsinden aşağıdaki gibi verilir [63]:

$$G_{lm, l'm'}^{LM} = \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} C^{L|M|}(lm, l'm') A_{mm'}^M \quad (106)$$

Bu denklemde verilen  $C^{L|M|}(lm, l'm')$  fonksiyonu Gaunt katsayıları ile ilişkilidir ve



$$C^{L|M|}(lm, l'm') = \sqrt{\frac{2}{2L+1}} \int_0^\pi \mathcal{P}_{lm}(\cos \theta) \mathcal{P}_{l'm'}(\cos \theta) \mathcal{P}_{LM}(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (107)$$

$$= \begin{cases} C^L(lm; l'm') & ; |M| = |m - m'| \text{ ise} \\ C^L(lm; l' - m') & ; |M| = |m + m'| \text{ ise} \end{cases}$$

şeklinde ifade edilir. Burada  $C^L(lm, l'm')$  Gaunt katsayısıdır [64]. Gaunt katsayıları

$$|l - l'| \leq L \leq (l + l'). \quad (108)$$

ile sınırlı  $L$ 'nin ikişer adımlarla artan değerlerinde tanımlıdır, diğer  $L$  değerlerinde Gaunt katsayıları sıfırdır. (106) denkleminde verilen  $A_{mm'}^M$  fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$A_{mm'}^M = \sqrt{2\pi} \int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_{m'}(\varphi) \Phi_M(\varphi) d\varphi \quad (109)$$

$A_{mm'}^M$  fonksiyonu analitik olarak

$$A_{mm'}^M = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ 2 - |\eta_{mm'}^{m-m'}| \right\}^{\frac{1}{2}} \delta_{M, \varepsilon_{mm}|m-m|} + \frac{1}{\sqrt{2}} \eta_{mm'}^{m+m'} \delta_{M, \varepsilon_{mm}|m+m|} \quad (110)$$

ile verilir [63]. Burada:

$$\varepsilon_{mm'} = \varepsilon_m \varepsilon_{m'}, \quad \varepsilon_m = \begin{cases} +1 & ; m \geq 0 \text{ ise} \\ -1 & ; m < 0 \text{ ise} \end{cases} \quad (111)$$

$$\eta_{mm'}^{m \pm m'} = \begin{cases} 0 & ; (m=0) \text{ veya } (m'=0) \text{ veya } (m \pm m' = 0) \text{ ise} \\ \varepsilon_m \varepsilon_{m'} \varepsilon_{m \pm m'} & ; \text{ diğer durumlarda} \end{cases} \quad (112)$$

şeklinde ifade edilir. (108) denklemindeki şartlar göz önüne alındığında ve (106) denklemini (104) denkleminde yerine koyulursa, iki-merkezli örtme integrali için aşağıdaki ifade elde edilir:



$$S_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \vec{R}) = \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} {}^{(2)}D_{n+1,l;n'+1,l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R) \sum_{M=-L}^L H_{nlm,n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta') S_{LM}(\theta, \varphi) \quad (113)$$

Burada;  $H_{nlm,n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta')$  fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$H_{nlm,n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta') = (-1)^{\frac{1}{2}(l+3l'+3L)} 4N_n(\zeta) N_{n'}(\zeta') \sqrt{(2L+1)/\pi} C^{L|M|}(lm, l'm') A_{mm'}^M \quad (114)$$

(113) denkleminde  $\sum^{(2)}$  sembolü Gaunt katsayıları ile ilişkili olan toplamın ikişer adımlarla yapıldığını gösterir ve denkleminde  $D_{n+1,l;n'+1,l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı integrali alt bölümde detayları ile birlikte verilir.

Kompleks küresel harmonikler kullanılarak elde edilen iki-merkezli örtme integralin analitik formülü yukarıdaki adımlar kullanılarak kolaylıkla elde edilir

$$S_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \vec{R}) = \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} {}^{(2)}H_{nlm,n'l'm'}^L(\zeta, \zeta') D_{n+1,l;n'+1,l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R) Y_{L,m-m'}(\theta, \varphi). \quad (115)$$

Burada  $H_{nlm,n'l'm'}^L(\zeta, \zeta')$  sembolünü aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$H_{nlm,n'l'm'}^L(\zeta, \zeta') = (-1)^{\frac{1}{2}(3L+3l'+l)} 4N_n(\zeta) N_{n'}(\zeta') \sqrt{(2L+1)/\pi} C^L(lm, l'm') \delta_{mm'}. \quad (116)$$

Bu denkleminde verilen  $\delta_{mm'}$  sembolü iyi bilinen kronecker delta fonksiyonudur [11]. (115) denklemindeki  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  fonksiyonu ise kompleks küresel harmonik olarak bilinir [11].

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \mathcal{P}_{lm}(\cos \theta) \Phi_m(\varphi) \quad (117)$$

$\Phi_m(\varphi)$  kompleks küresel harmonik fonksiyonu için ifade (25) denkleminde verilmiştir ve  $\mathcal{P}_{lm}(\cos \theta)$  fonksiyonun analitik ifadesi (23) denkleminde verilmiştir.

## 2.5. Yardımcı Moleküler İntegraller

Bu bölümde, iki-merkezli örtme integralini hesaplarırken karşımıza çıkan yardımcı moleküler integrallerin analitik hesabı daha detaylı bir şekilde incelenecektir.

### 2.5.1. $D_{n,l;n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$D_{n,l;n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integrali (104), (113) ve (115) denklemlerinde karşımıza çıkar ve bu denklemin integral şekli aşağıdaki gibidir:

$$D_{n,l;n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R) = \int_0^{\infty} p^2 D_{nl}(\zeta, p) D_{n'l'}(\zeta', p) j_L(pR) dp \quad (118)$$

(92) denklemindeki  $D_{nl}(\zeta, p)$  ve  $D_{n'l'}(\zeta', p)$  fonksiyonlarını (118) denkleminde kullanılırsa  $D_{n,l;n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integrali için aşağıdaki ifade elde edilir:

$$D_{n,l;n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R) = \sum_{s=0}^{E\left(\frac{n-l-1}{2}\right)} A_{nl}^s(\zeta) \sum_{s'=0}^{E\left(\frac{n'-l'-1}{2}\right)} A_{n'l'}^{s'}(\zeta') F_{nn'}^{l+l'+2s+2s'+2,L}(\zeta, \zeta'; R). \quad (119)$$

Burada;  $F_{nn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integrali 2.5.2'de detaylı bir şekilde açıklanacaktır.

### 2.5.2. $F_{nn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$F_{nn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integrali aşağıdaki gibi verilir:

$$F_{nn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R) = \int_0^{\infty} \frac{p^m}{(p^2 + \zeta^2)^n (p^2 + \zeta'^2)^{n'}} j_L(pR) dp \quad (120)$$

$F_{nn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integrali hesabı için,  $(p^2 + \zeta^2)^{-n} (p^2 + \zeta'^2)^{-n'}$  ifadesinin daha farklı bir yazımına ihtiyaç vardır. Bu ifade aşağıdaki gibi yazılabilir [12,71]:

$$(p^2 + \zeta^2)^{-n} (p^2 + \zeta'^2)^{-n'} = \sum_{i=0}^{n-1} \gamma_{nn'}^i(\zeta, \zeta') (p^2 + \zeta^2)^{-i-1} + \sum_{j=0}^{n'-1} \gamma_{n'n}^j(\zeta', \zeta) (p^2 + \zeta'^2)^{-j-1} \quad (121)$$

Burada  $\gamma_{nn'}^i$  sembolü aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\gamma_{nn'}^i(\zeta, \zeta') = (-1)^{n'} F_{n'-1}^{n'}(n+n'-i-2) (\zeta^2 - \zeta'^2)^{i-(n+n')+1} \quad (122)$$

(121) denklemindeki ifade kullanılarak  $F_{mn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integrali için aşağıdaki analitik formülü elde etmek oldukça basittir:

$$F_{mn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R) = \sum_{i=0}^{n-1} \gamma_{mn'}^i(\zeta, \zeta') E_{m,i+1}^L(\zeta, R) + \sum_{j=0}^{n'-1} \gamma_{n'n}^j(\zeta', \zeta) E_{m,j+1}^L(\zeta', R) \quad (123)$$

$\zeta = \zeta'$  özel durumu için, (123) denklemi aşağıdaki şekle indirgenir:

$$F_{mn'}^{mL}(\zeta, \zeta; R) = E_{m,n+n'}^L(\zeta, R) \quad (124)$$

$E_{mn}^L(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integrali (123) ve (124) denklemlerinde karşımıza çıkar. Bu yardımcı fonksiyonu alt bölümde detaylı olarak açıklayacaktır.

### 2.5.3. $E_{mn}^L(\zeta, R)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$E_{mn}^L(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integrali aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$E_{mn}^L(\zeta, R) = \int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + \zeta^2)^n} j_L(xR) dx \quad (125)$$

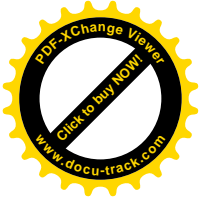
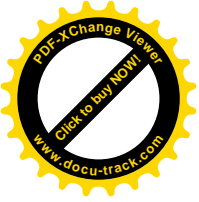
Burada  $j_L(xR)$  küresel Bessel fonksiyonudur [15]. Küresel Bessel fonksiyonu için Ek 1'de verilen (164) denklemini (125) denkleminde yerine koyulursa:

$$E_{mn}^L(\zeta, R) = \sum_{k=0}^{E(\frac{L}{2})} \frac{A_{lk}}{R^{2k+1}} \int_0^{\infty} \frac{x^{m-2k-1}}{(x^2 + \zeta^2)^n} \sin\left(x - \frac{L\pi}{2}\right) dx + \sum_{k'=0}^{E(\frac{L-1}{2})} \frac{B_{lk'}}{R^{2k'+2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{m-2k-1}}{(x^2 + \zeta^2)^n} \cos\left(x - \frac{L\pi}{2}\right) dx \quad (126)$$

Bu denklemde sinüs ve cosinüs ifadelerini trigonometrik ifadelerinden yararlanarak

$$\sin\left(x - \frac{L\pi}{2}\right) = (-1)^{F(\frac{L}{2})} \begin{cases} \cos x & L = \text{tek ise} \\ \sin x & L = \text{çift ise} \end{cases} \quad (127)$$

$$\cos\left(x - \frac{L\pi}{2}\right) = (-1)^{E(\frac{L}{2})} \begin{cases} \sin x & L = \text{tek ise} \\ \cos x & L = \text{çift ise} \end{cases} \quad (128)$$



yukarıdaki ifadeler elde edilir [15]. (127) ve (128) ifadeleri (126) denkleminde yerine yazılırsa

$$E_{mn}^l(\zeta, R) = \sum_{k=0}^{E(\frac{l}{2})} \frac{A_{lk}}{R^{2k+1}} (-1)^{F_n(\frac{l}{2})} G_{m-2k-1,n}(\zeta, R) + \sum_{k'=0}^{E(\frac{l-1}{2})} \frac{B_{lk'}}{R^{2k'+2}} (-1)^{E_n(\frac{l}{2})} G_{m-2k'-2,n}(\zeta, R) \quad (129)$$

elde edilir. (129) denklemindeki  $G_{mn}(\zeta, R)$  sembolü

$$G_{mn}(\zeta, R) = \begin{cases} J_{mn}(\zeta, R) & m = \text{çift ise} \\ I_{mn}(\zeta, R) & m = \text{tek ise} \end{cases} \quad (130)$$

ve  $F(\frac{n}{2})$  sembolü

$$F\left(\frac{n}{2}\right) = \frac{n}{2} + \frac{1}{4} [1 - (-1)^n] \quad (131)$$

şeklinde verilir. (130) denklemindeki  $J_{mn}(\zeta, R)$  ve  $I_{mn}(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integralleri 2.5.4’de detaylı olarak açıklanacaktır.

$E_{mn}^l(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integrali için diğer alternatif formüller elde etmek için: küresel Bessel fonksiyonu için Ek 1’ de (163) denklemini (125) denkleminde yerine yazılırsa

$$E_{mn}^l(\zeta, R) = \sum_{k=1}^l a_{lk} (-1)^{l-k} \sum_{s=0}^{l-k+1} (-1)^{F(\frac{s}{2})} \frac{(l-k+1)!}{s! R^{l-s+1}} [\eta_s^- J_{m-l+s-1,n}(\zeta, R) + \eta_s^+ I_{m-l+s-1,n}(\zeta, R)] \quad (132)$$

elde edilir. (132) denkleminde  $J_{mn}(\zeta, R)$  ve  $I_{mn}(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integralleri için detaylı bilgi 2.5.4’de verilmiştir.

Küresel Bessel fonksiyonu  $j_n(x)$ ’n Ek 1’de (158) denkleminde verilen ifadesi (125) denkleminde yerine yazılırsa,  $E_{mn}^l(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integrali tekrarlama bağıntısı elde edilir:

$$E_{mn}^{l+1}(\zeta, R) = \frac{2l+1}{R} E_{m-1,n}^l(\zeta, R) - E_{mn}^{l-1}(\zeta, R). \quad (133)$$

Bu denklem ile keyfi  $l, m$  ve  $n$  durumlarında  $E_{mn}^l(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integrali hesaplanması için bazı başlangıç değerlerinin bilinmesi gerekir. Bu başlangıç değerleri aşağıda verilmiştir:

$$E_{mn}^0(\zeta, R) = R^{-1} I_{m-1, n}(\zeta, R) \quad (134)$$

$$E_{mn}^1(\zeta, R) = R^{-2} I_{m-2, n}(\zeta, R) - R^{-1} J_{m-1, n}(\zeta, R) \quad (135)$$

Bu denklemdeki  $I_{mn}(\zeta, R)$  ve  $J_{mn}(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integralleri Bölüm 2.5.4'te analitik olarak hesaplanmıştır.

#### 2.5.4. $J_{mn}(\zeta, R)$ ve $I_{mn}(\zeta, R)$ Yardımcı Moleküler İntegralleri

(2.43) ve (2.45) denklemlerinde karşımıza çıkan  $J_{mn}(\zeta, R)$  ve  $I_{mn}(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integralleri aşağıda verilmiştir:

$$J_{mn}(\zeta, R) = \int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + \zeta^2)^n} \cos(Rx) dx \quad (136)$$

ve

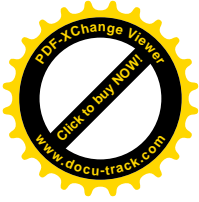
$$I_{mn}(\zeta, R) = \int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + \zeta^2)^n} \sin(Rx) dx \quad (137)$$

$J_{mn}(\zeta, R)$  ve  $I_{mn}(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integrallerin tanımlı olabilmesi için; bu fonksiyonların pay kısmında  $x$ 'in en yüksek mertebesi, payda kısmındaki  $x$ 'in en yüksek mertebesinden en az iki eksik olmalıdır.

Literatürde [11], bu tip yardımcı fonksiyonların bazı özel durumları için ifadeler mevcut olmasına rağmen genel durum için ifadeler mevcut değildir. Bu fonksiyonların genel durumları için analitik ifadeler Rezidü teoremi uygulanarak kolayca bulunabilir:

$$J_{mn}(\zeta, R) = \pi e^{-\zeta R} \sum_{k=0}^{n-1} F_{n-k-1}(2n-k-2) \sum_{s=0}^k \frac{(-1)^{\frac{m-s}{2}} F_s(m)}{2^{m-s} (k-s)!} (2\zeta)^{k-s+m-2n+1} R^{k-s}, \quad (138)$$

$$(m : \text{çift}, m \leq n+2)$$



$$I_{mn}(\zeta, R) = \pi e^{-\zeta R} \sum_{k=0}^{n-1} F_{n-k-1}(2n-k-2) \sum_{s=0}^{n-k-1} \frac{(-1)^{\frac{3m+1}{2}-s} F_s(m)}{2^{m-s} (k-s)!} (2\zeta)^{k-s+m-2n+1} R^{k-s}. \quad (139)$$

$$(m: \text{tek}, m \leq n+2)$$

Bazı durumlarda  $J_{0n}(\zeta, R)$ ,  $I_{-1,n}(\zeta, R)$  ve  $I_{-1,0}(\zeta, R)$  formüllere ihtiyaç duyulur. Bu yardımcı fonksiyonları için aşağıdaki ifadeler elde edilir:

$$J_{0n}(\zeta, R) = \frac{\pi e^{-\zeta R}}{(2\zeta)^{2n-1} (n-1)!} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(2n-k-2)!}{(n-k-1)! k!} (2\zeta R)^k, \quad (140)$$

$$I_{-1,n}(\zeta, R) = \frac{\pi}{2\zeta^{2n}} \left[ 1 - e^{-\zeta R} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{F_k(n+k-1)}{2^{n+k-1}} \sum_{s=0}^{n-k-1} \frac{(\zeta R)^{n-k-s-1}}{(n-k-s-1)!} \right], \quad (141)$$

$$I_{-1,0}(\zeta, R) = \frac{\pi}{2}. \quad (142)$$

Bu ifadeleri Rezidü teoremi ile elde etmek kolaydır.

$J_{mn}(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integralinin tekrarlama bağıntısını bulmak için (136) denklemini  $(x^2 + \zeta^2)$  ile çarpıp bölünürse:

$$J_{mn}(\zeta, R) = \int_0^{\infty} \frac{x^{m+2}}{(x^2 + \zeta^2)^{n+1}} \cos(Rx) dx + \zeta^2 \int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + \zeta^2)^{n+1}} \cos(Rx) dx \quad (143)$$

elde edilir. Böylece

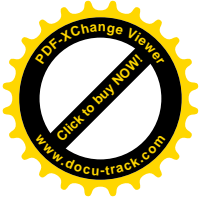
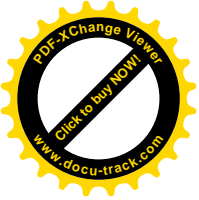
$$J_{mn}(\zeta, R) = J_{m+2,n+1}(\zeta, R) + \zeta^2 J_{m,n+1}(\zeta, R) \quad (144)$$

bulunur. (144) denkleminde  $m \rightarrow m-2$  ve  $n \rightarrow n-1$  yazılırsa

$$J_{mn}(\zeta, R) = J_{m-2,n-1}(\zeta, R) - \zeta^2 J_{m-2,n}(\zeta, R). \quad (145)$$

ile verilir. Bu denklemde sınır şartı (140) denklemine verilmiştir.

$I_{mn}(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integralinin tekrarlama bağıntısı için  $J_{mn}(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integraline benzer olarak aşağıdaki ifade bulunur:



$$I_{mm}(\zeta, R) = I_{m-2, n-1}(\zeta, R) - \zeta^2 I_{m-2, n}(\zeta, R). \quad (146)$$

Bu denklem için bazı sınır şartları (141) ve (142) denkleminde verilmiştir.

## 2.6. İki-merkezli Örtme İntegrallerinin İncelenmesi

İki-merkezli örtme integrali için elde ettiğimiz (113) denklemine bazı özel durumlarda incelenmesi hesaplamalarda bize kolaylık sağlar.

### 2.6.1. Lined-up Koordinat Sisteminde İki-merkezli Örtme İntegralleri

İki- merkezli örtme integrali için nonlined-up koordinat sisteminde (113) denklemi ile verilir. Bu denklem lined-up koordinat sistemine basit bir şekilde indirgenir.

$$S_{nlm, n'l'm'}(\zeta, \zeta'; R) = \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} (2) \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} H_{nlm, n'l'm'}^{L0}(\zeta, \zeta') D_{n+1, l, n'+1, l'}^{2, L}(\zeta, \zeta'; R) \quad (147)$$

Burada  $H_{nlm, n'l'm'}^{L0}(\zeta, \zeta')$  (114) denklemi ile verilir.

### 2.6.2. Eşit Orbital Üstellerinde İki-merkezli Örtme İntegralleri

İki- merkezli örtme integralin nonlined-up koordinat sistemindeki değeri (113) denklemi ile verilir. Bu denklemi eşit orbital üstelleri için incelendiğimizde elde edilen denklem bilgisayar programı hesabında analitik bir kolaylık sağlar.

$$S_{nlm, n'l'm'}(\zeta, \zeta; \vec{R}) = \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} (2) D_{n+1, l, n'+1, l'}^{2, L}(\zeta, \zeta; R) \sum_{M=-L}^L H_{nlm, n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta) S_{LM}(\theta, \varphi) \quad (148)$$

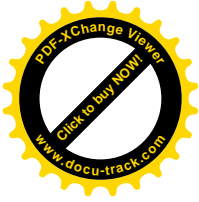
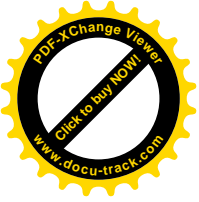
Burada  $D_{n, l, n', l'}^{2, L}(\zeta, \zeta; R)$  yardımcı moleküler integrali:

$$D_{n, l, n', l'}^{2, L}(\zeta, \zeta; R) = \sum_{s=0}^{E(\frac{n-l-1}{2})} A_{nl}^s(\zeta) \sum_{s'=0}^{E(\frac{n'-l'-1}{2})} A_{n'l'}^{s'}(\zeta) F_{nn'}^{l+l'+2s+2s'+2, L}(\zeta, \zeta; R) \quad (149)$$

ile verilir. Bu denklem de  $F_{nn'}^{l+l'+2s+2s'+2, L}(\zeta, \zeta; R)$  yardımcı moleküler integrali ise

$$F_{nn'}^{l+l'+2s+2s'+2, L}(\zeta, \zeta; R) = E_{l+l'+2s+2s'+2, n+n'}^L(\zeta, R) \quad (150)$$

şeklinde verilir.  $E_{m, n}^L(\zeta, R)$  yardımcı moleküler integrali (126), (129), (132) ve (133) denklemleri ile verilir. (149) denklemini (150) denklemine yerine yazılırsa



$$D_{n,l,n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R) = \sum_{s=0}^{E(\frac{n-l}{2})} A_{nl}^s(\zeta) \sum_{s'=0}^{E(\frac{n'-l'}{2})} A_{n'l'}^{s'}(\zeta) E_{l+l'+2s+2s'+2, n+n'}^L(\zeta, R) \quad (151)$$

ifadesi elde edilir.

### 2.6.3. İki-merkezli Örtme İntegrallerinin Bazı Simetri Özellikleri

İki-merkezli örtme integraleri için bazı simetri ve bazı özel değerleri aşağıda verilmiştir:

i. *Orbital üstellerinin yerdeğiřtirmesi durumu:*

$$S_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; \vec{R}) = S_{n'l'm',nlm}(\zeta', \zeta; \vec{R}) \quad (152)$$

ii.  $\theta = \pi$  ve  $\varphi = 0$  durumu:

$$S_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; R, \pi, 0) = (-1)^{l+l'} S_{nlm,n'l'm'}(\zeta, \zeta'; R) \quad (153)$$

iii.  $\theta = \pi$  ve  $\varphi = \frac{\pi}{2}$  durumu:

$$S_{nlm,n'l'm'}\left(\zeta, \zeta'; R, \pi, \frac{\pi}{2}\right) = 0 \quad (154)$$

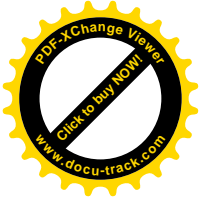
iv.  $\theta = \frac{\pi}{2}$  ve  $\varphi = 0$  durumu:

$$S_{nlm,n'l'm'}\left(\zeta, \zeta'; R, \frac{\pi}{2}, 0\right) = \sum_{L=|l-l'|}^{l+l'} {}^{(2)} \sum_{M=-L}^{+L} H_{nlm,n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta') D_{n+1,l;n'+1,l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R) \quad (155)$$

$$\times \left[ 1 + (-1)^{L-M} \right] \frac{(-1)^{(L-M)/2}}{\sqrt{\pi(1+\delta_{M0})} 2^{L+1}} \left[ \frac{2L+1}{2} F_{(L-M)/2}(L-M) F_{(L-M)/2}(L+M) \right]^{1/2}$$

Elektronik yapı hesaplaması yapılırken incelenecek molekül için yukarıdaki özel durumlar dikkate alındığında moleküler integraller daha sade olur.





### 3. BULGULAR

#### 3.1. Giriş

Bu bölümde; iki-merkezli örtme integralleri için elde edilen (113) denklemi nonlined-up ve lined-up koordinat sistemlerinde incelenmiştir. Her bir koordinat sistemi için orbital üstellerinin eşit ve farklı durumları ayrı ayrı ele alınmıştır. Bu durumlarda; iki-merkezli örtme integralleri için elde ettiğimiz sonuçlar mevcut literatür değerleri ile karşılaştırmalı olarak tablolar halinde verilmiştir.

#### 3.2. Nonlined-up Koordinat Sisteminde İki-merkezli Örtme İntegralleri

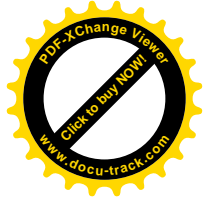
İki-merkezli örtme integralleri için elde edilen (113) denklemini nonlined-up koordinat sisteminde eşit orbital üstellerinde ve farklı orbital üstellerinde ayrı ayrı incelenmiştir. Tablo 2. ve Tablo 3.'de literatür ile karşılaştırması yapıp aşağıdaki gibi verilmiştir:

#### 3.3. Lined-up Koordinat Sisteminde İki-merkezli Örtme İntegralleri

İki-merkezli örtme integralleri için elde edilen (147) denklemini lined-up koordinat sisteminde eşit orbital üstellerinde ve farklı orbital üstellerinde ayrı ayrı incelenmiştir. (147) denkleminin literatür ile karşılaştırması Tablo 4. ve Tablo 5.'de aşağıdaki gibi verilmiştir.

#### 3.4. İki-merkezli Örtme İntegrallerinin Sembolik Değerleri

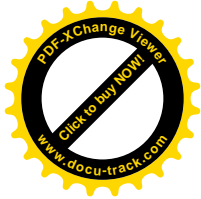
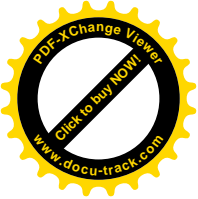
İki-merkezli örtme integralleri için elde edilen (113) denkleminin  $H_{nlm,n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta')$ ,  $D_{n,l;n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  ve  $S_{LM}(\theta, \varphi)$  fonksiyonları cinsinden sembolik değerleri Tablo 6.'da verilmiştir.



Tablo 2. Nonlined-up koordinat sisteminde eşit orbital üstelleri için iki-merkezli örtme integralleri ve literatür ile karşılaştırma

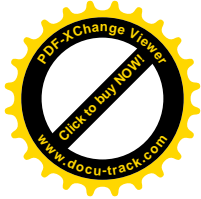
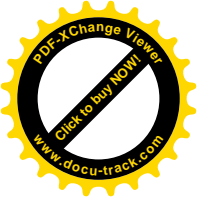
Nu	n	l	m	n'	l'	m'	$\zeta$	R	$\theta$	$\varphi$	Bu Çalışma-Denklem (148)	Literatür
1	1	0	0	1	0	0	3	8	135	60	0.819 204 196 108 564 E-08	
2	1	0	0	2	1	-1	5	7	60	75	-0.410 123 340 946 025E-11	
3	2	1	0	2	1	0	1	5	60	120	-0.432 351 599 107 984E-01	0.432 351 599 679 801E-01 <sup>a</sup>
4	2	1	1	3	2	-2	4.2	2.5	150	240	0.338 772 244 187 559E-02	
5	2	1	-1	2	0	0	7	10	45	120	-0.236 577 329 682 335E-24	
6	3	0	0	2	1	1	2.4	8.7	60	45	-0.177 249 242 202 590E-04	
7	3	1	0	3	2	-2	8.5	3	30	150	-0.106 955 482 213 348E-05	
8	3	2	1	3	2	-1	6	8	120	30	0.130 668 808 053 713E-13	
9	4	0	0	3	2	1	5	7	30	75	-0.161 942 626 004 865E-08	
10	4	3	2	4	2	0	10	6	135	60	0.799 125 296 243 405E-17	
11	4	3	-2	4	3	3	5	10	45	45	0.585 687 152 816 476E-13	-0.585 687 153 306 300E-13 <sup>a</sup>
12	5	1	1	4	2	2	2.8	0.1	135	30	-0.242 163 040 402 902E-01	
13	6	3	2	5	2	2	4.8	2.5	180	60	-0.889 717 464 593 064E-01	-0.889 717 464 593 021E-01 <sup>b</sup>
<b>14</b>	<b>7</b>	<b>4</b>	<b>3</b>	<b>2</b>	<b>1</b>	<b>1</b>	<b>6</b>	<b>4</b>	<b>270</b>	<b>90</b>	<b>0.000 000 000 000 000E+00</b>	
15	7	5	2	6	4	1	9	15	60	135	- 0.282 866 128 292 515E-41	
16	8	5	2	4	3	3	7	10	30	45	0.592 834 138 181 001E-18	
17	8	7	6	7	4	3	20	10	135	60	0.774 639 581 168 517E-02	
18	8	4	1	5	4	-2	5	2.8	120	30	-0.277 005 262 568 415E-01	
19	9	8	6	4	3	2	5	5	225	120	0.585 217 748 329 977E-03	
<b>20</b>	<b>15</b>	<b>8</b>	<b>4</b>	<b>12</b>	<b>8</b>	<b>6</b>	<b>5</b>	<b>1</b>	<b>67.5</b>	<b>22.5</b>	<b>0.907 696 631 707 071E-01</b>	<b>0.254 324 413 255 912E-04<sup>c</sup></b>
<b>21</b>	<b>20</b>	<b>8</b>	<b>2</b>	<b>10</b>	<b>8</b>	<b>1</b>	<b>5</b>	<b>5</b>	<b>60</b>	<b>45</b>	<b>0.499 552 765 391 511E-02</b>	<b>0.793 865 462 132 564E-05<sup>c</sup></b>

a.Ref. [65]; b. Ref. [66]; c. Ref. [12].



Tablo 3. Nonlined-up koordinat sisteminde farklı orbital üstelleri için iki-merkezli örtme integralleri ve literatür ile karşılaştırma

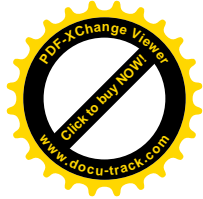
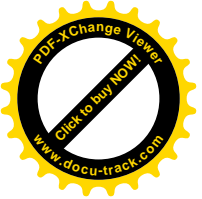
Nu	$n$	$l$	$m$	$n'$	$l'$	$m'$	$\zeta$	$\zeta'$	$R$	$\theta$	$\varphi$	Bu Çalışma-Denklem (113)	Literatür
1	1	0	0	1	0	0	5.8	4.2	0.5	30	135	0.450 897 002 422 257E+00	
2	2	0	0	2	0	0	2	4	5	30	60	0.214 404 132 575 179E-02	
3	2	1	0	2	1	0	3	1	12.5	60	120	0.201 912 763 169 784E-04	-0.201 912 763 028 473E-04 <sup>a</sup>
4	2	1	1	2	0	0	7.5	5	6	60	45	-0.462 084 402 132 088E-10	
5	3	2	0	3	2	0	7.5	2.5	5	60	120	-0.680 340 033 602 070E-04	-0.680 340 033 108 123E-04 <sup>b</sup>
6	3	2	-2	4	1	-1	8.2	2.8	10	120	45	-0.155 113 717 085 788E-09	
7	3	2	1	2	1	-1	6	2	4	30	60	0.109 274 543 457 121E-02	-0.109 274 543 461 435E-02 <sup>a</sup>
<b>8</b>	<b>3</b>	<b>2</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>1</b>	<b>-1</b>	<b>7</b>	<b>4</b>	<b>3</b>	<b>120</b>	<b>90</b>	<b>-0.000 000 000 000 0E+00</b>	<b>-0.850 274 361 752 408E-05<sup>h</sup></b>
9	3	2	2	5	4	3	8	2	5	45	135	-0.125 678 719 872 587E-02	
10	3	2	1	3	2	0	9.7	6.4	0.3	20	135	0.137 350 765 843 157E-01	-0.137 350 765 807 479E-01 <sup>h</sup>
11	4	3	3	4	2	2	10.8	6.1	1.2	120	360	0.233 631 800 354 459E-01	-0.233 631 800 354 459E-01 <sup>h</sup>
12	3	2	0	6	4	2	7	3	10	60	45	0.842 184 944 081 159E-08	
13	3	2	1	4	2	1	6	4	6	60	120	0.428 499 712 626 897E-06	0.428 499 712 589 9517E-06 <sup>d</sup>
15	4	3	-2	4	2	2	9	1	0.2	135	18	0.274 236 922 021 951E-06	0.274 236 921 980 629E-06 <sup>c</sup>
16	4	3	2	5	3	1	6	4	30	45	60	0.790 962 724 759 790E-43	
17	4	3	1	8	2	0	9	1	5	75	135	0.199 532 706 936 267E-04	
<b>18</b>	<b>4</b>	<b>3</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>3</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>2</b>	<b>20</b>	<b>30</b>	<b>60</b>	<b>0.139 582 818 809 146E-13</b>	<b>0.375 545 611 854 747E-01<sup>b</sup></b>
19	5	0	0	5	2	-2	9.5	0.5	10	135	120	-0.171 296 313 906 140E-02	
20	5	2	1	3	2	1	8.5	1.5	8	0	0	0.689 238 548 601 327E-04	-0.689 189 107 874 328E-04 <sup>d</sup>
21	5	4	2	5	4	0	17	3	10	45	210	-0.134 568 733 968 070E-10	-0.134 568 733 674 016E-10 <sup>a</sup>
22	5	3	1	6	4	3	5	5	15	60	120	-0.169 478 615 625 621E-21	
23	5	4	2	5	4	0	8.5	1.5	30	45	210	-0.227 511 176 683 287E-16	-0.227 511 176 683 283E-16 <sup>e</sup>
24	5	4	1	3	2	2	9	1	6	45	0	-0.280 668 210 890 022E-04	
25	5	4	3	4	3	2	5.5	4.5	5	150	225	0.211 550 298 505 245E-04	0.211 550 298 524 7438E-04 <sup>d</sup>
26	5	3	1	2	1	0	9.5	0.5	10	62.5	37.5	0.923 952 963 712 011E-05	
27	5	4	2	10	5	3	4.5	5.5	5	60	120	-0.100 631 042 896 157E-02	
28	5	3	-3	12	3	3	3	1	5	20	22.5	-0.727 184 863 851 718E-07	-0.727 184 864 174 319E-07 <sup>a</sup>
29	6	2	1	5	2	1	7.4	1.4	0.1	45	80	0.517 527 643 277 711E-01	0.517 325 355 481 882E-01 <sup>h</sup>
30	6	4	2	5	3	3	3.7	6.1	0.6	30	100	0.182 881 883 670 195E-01	-0.182 881 883 670 196E-01 <sup>h</sup>



Tablo 3.'ün devamı

31	6	4	0	5	3	2	8.5	1.5	5	30	90	-0.791 634 519 883 753E-03	
32	6	5	4	6	5	4	9	1	1	60	60	-0.313 559 813 948 906E-03	0.313 557 072 294 360E-03 <sup>d</sup>
33	7	0	0	7	3	1	4.5	5.5	15	150	45	-0.117 809 939 967 167E-16	
<b>34</b>	<b>7</b>	<b>4</b>	<b>1</b>	<b>5</b>	<b>3</b>	<b>1</b>	<b>8.5</b>	<b>1.5</b>	<b>40</b>	<b>45</b>	<b>210</b>	<b>0.646 179 948 324 138E-23</b>	<b>-0.200 183 868 910 395E-22<sup>e</sup></b>
35	7	3	3	8	4	2	9.5	0.5	10	60	60	-0.695 380 081 752 340E-06	
36	7	4	2	5	4	2	6	4	2.4	30	30	-0.875 236 532 970 927E-01	-0.875 236 533 673 173E-01 <sup>f</sup>
37	7	2	0	3	2	2	7	3	5	135	270	-0.460 220 383 973 940E-03	
38	7	4	3	7	5	3	6.25	3.75	2.4	45	0	-0.441 249 359 272 885E-01	-0.441 249 358 379 528E-01 <sup>d</sup>
39	8	3	2	1	0	0	9.5	0.5	0.5	135	60	0.979 885 559 885 764E-03	
40	8	3	2	5	4	2	6	4	5	60	135	-0.217 405 683 423 409E-03	
41	8	3	2	6	5	4	8	2	5	30	120	0.411 702 867 232 093E-05	
<b>42</b>	<b>8</b>	<b>7</b>	<b>-6</b>	<b>7</b>	<b>5</b>	<b>5</b>	<b>0.5</b>	<b>0.3</b>	<b>12</b>	<b>150</b>	<b>240</b>	<b>-0.115 791 967 786 329E+00</b>	<b>-0.444 987 258 245 886E-01<sup>b</sup></b>
43	9	0	0	2	1	-1	7.5	2.5	2.5	45	18	-0.490 739 800 223 237E-01	
44	9	3	1	7	4	0	6.5	3.5	10	45	150	0.212 856 280 570 926E-06	
45	10	0	0	10	0	0	8	2	10	18	135	0.628 826 069 825 560E-02	
46	10	3	2	10	4	2	7.5	2.5	10	180	0	-0.939 585 019 498 710E-04	-0.939 597 567 390 276E-04 <sup>d</sup>
47	10	4	1	3	2	0	6	4	20	45	120	-0.442 661 620 593 903E-28	
48	10	7	6	2	1	1	8	2	15	45	135	0.125 298 855 123 668E-12	
49	10	9	8	12	10	8	7	3	4	30	360	0.150 981 944 333 770E-02	0.150 981 944 685 389E-02 <sup>g</sup>
50	11	0	0	10	9	8	3.5	6.5	10	135	150	0.398 814 402 495 692E-07	
51	14	11	7	13	10	6	2	8	2.4	15	10	-0.459 467 887 894 180E-03	0.448 032 207 619 290E-04 <sup>c</sup>
52	20	15	10	10	9	8	8.5	1.5	10	135	120	-0.539 872 139 429 768E-12	
53	30	5	1	20	0	0	6.5	3.5	8	30	120	-0.248 382 514 327 029E+00	
54	35	10	7	5	4	2	7.5	2.5	55	60	135	0.182 565 757 281 500E-14	
55	50	0	0	45	10	10	7.5	2.5	5	60	90	-0.156 344 305 010 000E-05	
56	50	18	17	50	20	20	5.5	4.5	2	0	0	0.339 262 020 222 83E+00	

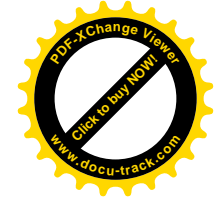
**a.** Ref.[74]; **b.** Ref.[71]; **c.** Ref.[67]; **d.** Ref.[68]; **e.** Ref.[69]; **f.** Ref.[72]; **g.** Ref.[70]; **h.** Ref.[66].



Tablo 4. Lined-up koordinat sisteminde eşit orbital üstelleri için iki-merkezli örtme integralleri ve literatür ile karşılaştırma

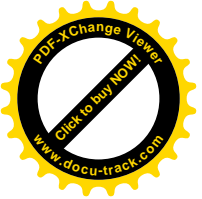
Nu	$n$	$l$	$n'$	$l'$	$\lambda$	$\zeta$	$R$	Bu Çalışma-Denklem(147)	Literatür
1	1	0	1	0	0	0.1	1	-0.998 337 284 566 342E+00	0.998 337 284 6E+00 <sup>a</sup>
2	2	0	2	0	0	7	3	0.422 257 625 109 558E-05	
3	2	1	1	0	0	8	10	0.159 861 703 597 276E-29	
4	2	1	2	1	1	4	5	0.147 235 073 762 861E-05	
5	3	2	3	2	-2	6	15	0.571 817 649 219 882E-33	
6	3	1	5	4	-1	8	20	0.149 178 954 690 860E-57	
7	4	0	4	0	0	5	10	0.921 310 591 628 422E-13	
8	4	2	5	2	-2	10	2	0.116 172 099 261 867E-03	
9	5	0	5	0	0	0.1	1.4	0.999 637 189 485 745E+00	0.999 637 189 410 385E+00 <sup>b</sup>
10	5	3	6	2	2	8	5	0.684 818 851 361 660E-09	
11	5	4	5	4	0	5	1	0.900 262 309 241 791E-02	0.900 262 309 241 791E-02 <sup>c</sup>
12	5	4	5	4	4	5	1	0.356 825 986 845 748E+00	0.356 825 986 845 748E+00 <sup>c</sup>
13	6	2	5	3	1	10	8	0.498 450 228 084 472E-22	
14	10	7	8	1	1	2.5	10	-0.152 138 456 890 819E-01	0.152 138 456 890 817E-01 <sup>c</sup>
15	10	9	2	1	0	5	20	0.164 019 613 449 862E-27	
16	21	10	9	8	6	9	5	0.538 980 685 338 143E-04	0.538 980 685 338 283E-04 <sup>c</sup>
17	30	10	14	10	8	7	5	0.135 074 709 593 243E-01	0.135 4 709 591 440E-01 <sup>c</sup>

**a.**Ref.[75]; **b.** Ref.[79]; **c.** Ref. [76].



Tablo 5. Lined-up koordinat sisteminde farklı orbital üstelleri için iki-merkezli örtme integralleri ve literatür ile karşılaştırma

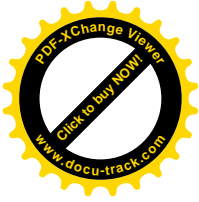
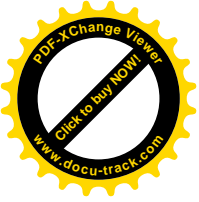
Nu	$n$	$l$	$n$	$l'$	$\lambda$	$\zeta$	$\zeta'$	$R$	Bu Çalışma-Denklem.(147)	Literatür
1	1	0	1	0	0	1.4	8.6	10	0.457 456 053 064 760E-06	
2	1	0	2	1	0	1.3	2.3	0.2	0.412 584 974 248 920E+00	0.412 584 974 249E+0 <sup>b</sup>
3	1	0	4	3	0	5	5	10	0.635 661 124 564 457E-15	
4	1	0	3	2	0	1.3	5.1	8.7	0.124 334 786 123 003E-04	0.124 334 786 123E-01 <sup>b</sup>
5	2	0	1	0	0	8.5	1.5	3	0.120 764 230 874 474E-01	
6	2	1	2	1	-1	6	4	5	0.838 344 285 006 804E-07	
7	2	1	2	1	0	0.6	2.3	2.5	0.176 576 741 874 784E-01	-0.176 576 741 874 820 587E-01 <sup>c</sup>
8	2	1	2	1	-1	2.4	4.1	2.5	-0.254 205 622 595 321E-01	0.254 205 622 595E-01 <sup>b</sup>
9	2	1	3	1	-1	7.5	2.5	5	-0.419 145 487 283 526E-04	
10	3	0	3	0	0	7	3	20	0.905 675 306 849 306E-22	
11	3	2	3	2	1	8	2	5	-0.442 877 669 882 56E-03	-0.442 877 669 882 61E-03 <sup>d</sup>
12	3	2	2	1	1	2	4.2	8.7	-0.314 775 830 496 340E-05	0.314 775 830 496E-05 <sup>b</sup>
13	3	2	3	2	2	5.8	4.5	8.7	0.793 431 054 947 724E-14	0.793 431 005 494 730E-14 <sup>e</sup>
14	4	0	4	0	0	1.2	0.6	12	0.164 485 311 674 520E+00	
15	4	0	4	1	0	0.5	0.4	1.4	0.123 035 357 276 298E+00	-0.123 035 086 894232E+00 <sup>c</sup>
16	4	2	4	3	1	7	3	16	-0.403 505 950 326 376E-16	0.403 505 950 326 383E-16 <sup>f</sup>
17	4	3	4	1	-1	4.8	5.2	14	-0.620 101 120 294 340E-21	
18	4	3	6	5	0	1.9	0.1	100	-0.534 413 558 059 942E-05	-0.534 413 558 059 944E-05 <sup>g</sup>
19	5	4	5	2	2	9.5	0.5	15	0.290 120 427 167 955E-06	
20	5	4	6	3	2	7	3	1.2	-0.276 907 023 118 459E-01	-0.276 907 022 118 569E-01 <sup>c</sup>



Tablo 5.'in devamı

21	5	3	7	5	3	9	1	5	0.135 988 156 410 248E-02	
22	6	3	8	5	2	1.4	0.6	40	-0.321 391 598 542 938E-04	-0.321 391 598 543 043E-04 <sup>g</sup>
23	6	4	5	3	2	6.5	3.5	10	0.949 485 058 754 897E-10	
24	7	3	4	3	2	8.5	1.5	30	0.176 861 050 692 233E-17	-0.176 861 050 692 265E-17 <sup>d</sup>
<b>25</b>	<b>7</b>	<b>4</b>	<b>7</b>	<b>4</b>	<b>4</b>	<b>4</b>	<b>3</b>	<b>1</b>	<b>0.653 459 239 169 404E+00</b>	<b>0.110 477 764 970 217 E+00<sup>d</sup></b>
26	7	5	6	4	3	9.5	0.5	5	-0.381 868 445 603 339E-06	
27	8	0	8	0	0	5	0.1	1	0.107 437 341 693 227E-01	0.107 437 3417E-01 <sup>a</sup>
28	8	3	5	4	2	6	4	5	0.103 631 620 689 278E-02	
29	10	7	8	1	1	2.5	2.5	10	-0.152 138 456 890 819E-01	0.152 138 456 890 817E-01 <sup>g</sup>
30	10	7	8	2	1	14.4	9.6	5	-0.184 189 026 173 198E-09	-0.184 189 014 015 193E-09 <sup>g</sup>
31	12	7	12	7	3	1.3	0.7	15	-0.229 354 175 182 346E-01	-0.229 354 178 100 624E-01 <sup>g</sup>
32	17	8	14	6	4	1.8	0.2	30	0.913 905 854 064 306E-06	0.914 905 848 808 478E-06 <sup>g</sup>
33	38	10	30	10	8	8.5	1.5	4	0.136 385 841 503 310E-05	0.136 385 965 917 645E-05 <sup>g</sup>
34	40	4	12	4	3	4.8	1.2	5	0.948 379 220 832 556E-01	0.948 359 636 822 715E-01 <sup>g</sup>
35	40	8	30	7	7	9.5	0.5	6	-0.470 039 545 615 360E-16	-0.470 039 545 616 601E-16 <sup>g</sup>
36	43	10	18	8	6	7.2	16.8	5	-0.115 825 653 267 175E-03	-0.115 825 616 305 187E-03 <sup>g</sup>

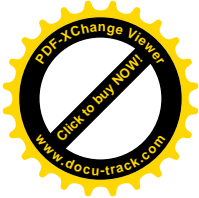
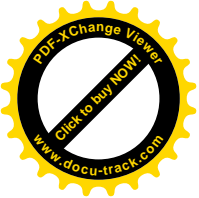
**a.** Ref.[75] ; **b.** Ref.[77]; **c.** Ref.[73] ; **d.** Ref.[78]; **e.** Ref.[71]; **f.** Ref.[69]; **g.** Ref. [76].



Tablo 6. İki-merkezli örtme integrallerinin sembolik değerleri ( $p \equiv (nlm)$ ,  $p' \equiv (n'l'm')$ )

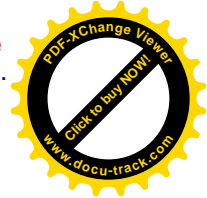
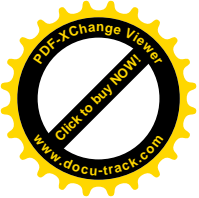
$p$	$p'$	Bu Çalışma-Denklem (113)
1s	1s	$H_{100,100}^{00} S_{00} D_{20,20}^{2,0}$
	2s	$H_{100,200}^{00} S_{00} D_{20,30}^{2,0}$
	$2p_{+1}$	$-H_{100,211}^{1,-1} S_{1,-1} D_{20,31}^{2,1}$
	$2p_0$	$-H_{100,210}^{1,0} S_{1,0} D_{20,31}^{2,1}$
	$2p_{-1}$	$-H_{100,21-1}^{1,-1} S_{1,-1} D_{20,31}^{2,1}$
	3s	$H_{100,300}^{00} S_{00} D_{20,40}^{2,0}$
	$3p_{+1}$	$-H_{100,311}^{1,1} S_{1,1} D_{20,41}^{2,1}$
	$3p_0$	$-H_{100,310}^{1,0} S_{1,0} D_{20,41}^{2,1}$
	$3p_{-1}$	$-H_{100,31-1}^{1,-1} S_{1,1} D_{20,41}^{2,1}$
	$3d_{+2}$	$H_{100,322}^{2,2} S_{2,2} D_{20,42}^{2,2}$
	$3d_{+1}$	$H_{100,321}^{2,1} S_{2,1} D_{20,42}^{2,2}$
	$3d_0$	$H_{100,320}^{2,0} S_{2,0} D_{20,42}^{2,2}$
	$3d_{-1}$	$H_{100,32-1}^{2,-1} S_{2,-1} D_{20,42}^{2,2}$
	$3d_{-2}$	$H_{100,32-2}^{2,-2} S_{2,-2} D_{20,42}^{2,2}$
2s	2s	$H_{200,200}^{00} S_{00} D_{30,30}^{2,0}$
	$2p_{+1}$	$-H_{200,211}^{1,1} S_{1,1} D_{30,31}^{2,1}$
	$2p_0$	$-H_{200,210}^{1,0} S_{1,0} D_{30,31}^{2,1}$
	$2p_{-1}$	$-H_{200,21-1}^{1,-1} S_{1,-1} D_{30,31}^{2,1}$
	3s	$H_{200,300}^{00} S_{00} D_{30,40}^{2,0}$
	$3p_{+1}$	$-H_{200,311}^{1,1} S_{1,1} D_{30,41}^{2,1}$
	$3p_0$	$-H_{200,310}^{1,0} S_{1,0} D_{30,41}^{2,1}$
	$3p_{-1}$	$-H_{200,31-1}^{1,-1} S_{1,-1} D_{30,41}^{2,1}$
	$3d_{+2}$	$H_{200,322}^{2,2} S_{2,2} D_{30,42}^{2,2}$
	$3d_{+1}$	$H_{200,321}^{2,1} S_{2,1} D_{30,42}^{2,2}$
$3d_0$	$H_{200,320}^{2,0} S_{2,0} D_{30,42}^{2,2}$	





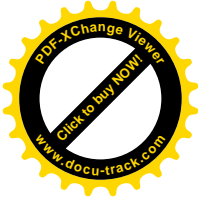
Tablo 6.'in devamı

$2s$	$3d_{-1}$	$H_{200,32-1}^{2,-1} S_{2,-1} D_{30,42}^{2,2}$
	$3d_{-2}$	$H_{200,32-2}^{2,-2} S_{2,-2} D_{30,42}^{2,2}$
$2p_{+1}$	$2p_{+1}$	$-H_{211,211}^{0,0} S_{0,0} D_{31,31}^{2,0} - (H_{211,211}^{2,0} S_{2,0} + H_{211,211}^{2,2} S_{2,2}) D_{31,31}^{2,2}$
	$2p_0$	$-H_{211,210}^{2,1} S_{2,1} D_{31,31}^{2,2}$
	$2p_{-1}$	$-H_{211,21-1}^{0,0} S_{0,0} D_{31,31}^{2,0} - H_{211,21-1}^{2,-2} S_{2,-2} D_{31,31}^{2,2}$
	$3s$	$H_{211,300}^{1,1} S_{1,1} D_{31,40}^{2,1}$
	$3p_{+1}$	$-H_{211,311}^{0,0} S_{0,0} D_{31,41}^{2,0} - (H_{211,311}^{2,0} S_{2,0} + H_{211,311}^{2,2} S_{2,2}) D_{31,41}^{2,2}$
$2p_{+1}$	$3p_0$	$-H_{211,310}^{2,1} S_{2,1} D_{31,41}^{2,2}$
	$3p_{-1}$	$-H_{211,31-1}^{0,0} S_{0,0} D_{31,41}^{2,0} - H_{211,31-1}^{2,-2} S_{2,-2} D_{31,41}^{2,2}$
	$3d_{+2}$	$H_{211,322}^{1,1} S_{1,1} D_{31,42}^{2,1} + (H_{211,322}^{3,1} S_{3,1} + H_{211,322}^{3,3} S_{3,3}) D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_{+1}$	$H_{211,321}^{1,0} S_{1,0} D_{31,42}^{2,1} + H_{211,321}^{3,2} S_{3,2} D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_0$	$H_{211,320}^{1,1} S_{1,1} D_{31,42}^{2,1} + (H_{211,320}^{3,-1} S_{3,-1} + H_{211,320}^{3,1} S_{3,1}) D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_{-1}$	$H_{211,32-1}^{1,0} S_{1,0} D_{31,42}^{2,1} + (H_{211,32-1}^{3,-2} S_{3,-2} + H_{211,32-1}^{3,2} S_{3,2}) D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_{-2}$	$(H_{211,32-2}^{1,-1} S_{1,-1} + H_{211,32-2}^{1,1} S_{1,1}) D_{31,42}^{2,1} + (H_{211,32-2}^{3,-3} S_{3,-3} + H_{211,32-2}^{3,-1} S_{3,-1}) D_{31,42}^{2,3}$
$2p_0$	$2p_0$	$-H_{210,210}^{0,0} S_{0,0} D_{31,31}^{2,0} - H_{210,210}^{2,0} S_{2,0} D_{31,31}^{2,2}$
	$2p_{-1}$	$-(H_{210,21-1}^{2,-1} S_{2,-1} + H_{210,21-1}^{2,1} S_{2,1}) D_{31,31}^{2,2}$
	$3s$	$H_{210,300}^{1,0} S_{1,0} D_{31,40}^{2,1}$
	$3p_{+1}$	$-H_{210,311}^{2,1} S_{2,1} D_{31,41}^{2,2}$
	$3p_0$	$-H_{210,310}^{0,0} S_{0,0} D_{31,41}^{2,0} - H_{210,310}^{2,0} S_{2,0} D_{31,41}^{2,2}$
	$3p_{-1}$	$-H_{210,31-1}^{2,-1} S_{2,-1} D_{31,41}^{2,2}$
	$3d_{+2}$	$H_{210,322}^{3,2} S_{3,2} D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_{+1}$	$H_{210,321}^{1,1} S_{1,1} D_{31,42}^{2,1} + H_{210,321}^{3,1} S_{3,1} D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_0$	$H_{210,320}^{1,0} S_{1,0} D_{31,42}^{2,1} + H_{210,320}^{3,0} S_{3,0} D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_{-1}$	$(H_{210,32-1}^{1,-1} S_{1,-1} + H_{210,32-1}^{1,1} S_{1,1}) D_{31,42}^{2,1} + H_{210,32-1}^{3,-1} S_{3,-1} D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_{-2}$	$H_{210,32-2}^{3,-2} S_{3,-2} D_{31,42}^{2,3}$
$2p_{-1}$	$2p_{-1}$	$-H_{21-1,21-1}^{0,0} S_{0,0} D_{31,31}^{2,0} - (H_{21-1,21-1}^{2,0} S_{2,0} + H_{21-1,21-1}^{2,2} S_{2,2}) D_{31,31}^{2,2}$



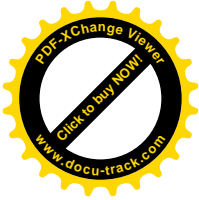
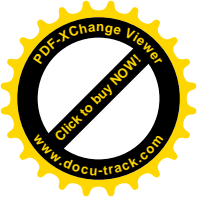
Tablo 6.' in devamı

$2p_{-1}$	$3s$	$H_{21-1,300}^{1,-1} S_{1,-1} D_{31,40}^{2,1}$
	$3p_{+1}$	$-H_{21-1,311}^{0,0} S_{0,0} D_{31,41}^{2,0} - H_{21-1,311}^{2,-2} S_{2,-2} D_{31,41}^{2,2}$
	$3p_0$	$-H_{21-1,310}^{2,-1} S_{2,-1} D_{31,41}^{2,2}$
	$3p_{-1}$	$-H_{21-1,31-1}^{0,0} S_{0,0} D_{31,41}^{2,0} - (H_{21-1,31-1}^{2,0} S_{2,0} + H_{21-1,31-1}^{2,2} S_{2,2}) D_{31,41}^{2,2}$
	$3d_{+2}$	$(H_{21-1,322}^{1,-1} S_{1,-1} + H_{21-1,322}^{1,1} S_{1,1}) D_{31,42}^{2,1} + H_{21-1,322}^{3,-1} S_{3,-1} D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_{+1}$	$H_{21-1,321}^{1,0} S_{1,0} D_{31,42}^{2,1} + H_{21-1,321}^{3,-2} S_{3,-2} D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_0$	$(H_{21-1,320}^{1,-1} S_{1,-1} + H_{21-1,320}^{1,1} S_{1,1}) D_{31,42}^{2,1} + H_{21-1,320}^{3,-1} S_{3,-1} D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_{-1}$	$H_{21-1,32-1}^{1,0} S_{1,0} D_{31,42}^{2,1} + (H_{21-1,32-1}^{3,0} S_{3,0} + H_{21-1,32-1}^{3,2} S_{3,2}) D_{31,42}^{2,3}$
	$3d_{-2}$	$H_{21-1,32-2}^{1,1} S_{1,1} D_{31,42}^{2,1} + (H_{21-1,32-2}^{3,-1} S_{3,-1} + H_{21-1,32-2}^{3,1} S_{3,1} + H_{21-1,32-2}^{3,3} S_{3,3}) D_{31,42}^{2,3}$
$3s$	$3s$	$H_{300,300}^{0,0} S_{0,0} D_{40,40}^{2,0}$
	$3p_{+1}$	$-H_{300,311}^{1,1} S_{1,1} D_{40,41}^{2,1}$
	$3p_0$	$-H_{300,310}^{1,0} S_{1,0} D_{40,41}^{2,1}$
	$3p_{-1}$	$-H_{300,31-1}^{1,-1} S_{1,-1} D_{40,41}^{2,1}$
	$3d_{+2}$	$H_{300,322}^{2,2} S_{2,2} D_{40,42}^{2,2}$
	$3d_{+1}$	$(H_{300,321}^{2,-1} S_{2,-1} + H_{300,321}^{2,1} S_{2,1}) D_{40,42}^{2,2}$
	$3d_0$	$H_{300,320}^{2,0} S_{2,0} D_{40,42}^{2,2}$
	$3d_{-1}$	$H_{300,32-1}^{2,-1} S_{2,-1} D_{40,42}^{2,2}$
	$3d_{-2}$	$H_{300,32-2}^{2,-2} S_{2,-2} D_{40,42}^{2,2}$
$3p_{+1}$	$3p_{+1}$	$-H_{311,311}^{0,0} S_{0,0} D_{41,41}^{2,0} - (H_{311,311}^{2,0} S_{2,0} + H_{311,311}^{2,2} S_{2,2}) D_{41,41}^{2,2}$
	$3p_0$	$-H_{311,310}^{2,1} S_{2,1} D_{41,41}^{2,2}$
	$3p_{-1}$	$-H_{311,31-1}^{0,0} S_{0,0} D_{41,41}^{2,0} - H_{311,31-1}^{2,-2} S_{2,-2} D_{41,41}^{2,2}$
	$3d_{+2}$	$H_{311,322}^{1,1} S_{1,1} D_{41,42}^{2,1} + (H_{311,322}^{3,1} S_{3,1} + H_{311,322}^{3,3} S_{3,3}) D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_{+1}$	$H_{311,321}^{1,0} S_{1,0} D_{41,42}^{2,1} + (H_{311,321}^{3,0} S_{3,0} + H_{311,321}^{3,2} S_{3,2}) D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_0$	$H_{311,320}^{1,1} S_{1,1} D_{41,42}^{2,1} + H_{311,320}^{3,1} S_{3,1} D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_{-1}$	$H_{311,32-1}^{1,0} S_{1,0} D_{41,42}^{2,1} + H_{311,32-1}^{3,-2} S_{3,-2} D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_{-2}$	$(H_{311,32-2}^{1,-1} S_{1,-1} + H_{311,32-2}^{1,1} S_{1,1}) D_{41,42}^{2,1} + (H_{311,32-2}^{3,-3} S_{3,-3} + H_{311,32-2}^{3,-1} S_{3,-1} + H_{311,32-2}^{3,3} S_{3,3}) D_{41,42}^{2,3}$



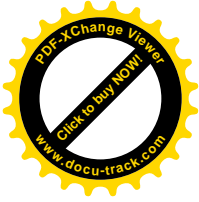
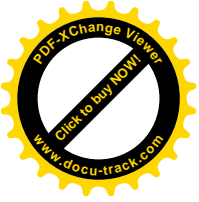
Tablo 6.' in devamı

$3p_0$	$3p_0$	$-H_{310,310}^{0,0}S_{0,0}D_{41,41}^{2,0} - H_{310,310}^{2,0}S_{2,0}D_{41,41}^{2,2}$
	$3p_{-1}$	$-H_{310,31-1}^{2,-1}S_{2,-1}D_{41,41}^{2,2}$
	$3d_{+2}$	$(H_{310,322}^{3,-2}S_{3,-2} + H_{310,322}^{3,2}S_{3,2})D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_{+1}$	$(H_{310,321}^{1,-1}S_{1,-1} + H_{310,321}^{1,1}S_{1,1})D_{41,42}^{2,1} + H_{310,321}^{3,1}S_{3,1}D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_0$	$H_{310,320}^{1,0}S_{1,0}D_{41,42}^{2,1} + H_{310,320}^{3,0}S_{3,0}D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_{-1}$	$H_{310,32-1}^{1,-1}S_{1,-1}D_{41,42}^{2,1} + H_{310,32-1}^{3,-1}S_{3,-1}D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_{-2}$	$(H_{310,32-2}^{3,-2}S_{3,-2} + H_{310,32-2}^{3,2}S_{3,2})D_{41,42}^{2,3}$
$3p_{-1}$	$3p_{-1}$	$-H_{31-1,31-1}^{0,0}S_{0,0}D_{41,41}^{2,0} - (H_{31-1,31-1}^{2,0}S_{2,0} + H_{31-1,31-1}^{2,2}S_{2,2})D_{41,41}^{2,2}$
	$3d_{+2}$	$H_{31-1,322}^{1,-1}S_{1,-1}D_{41,42}^{2,1} + (H_{31-1,322}^{3,-3}S_{3,-3} + H_{31-1,322}^{3,-1}S_{3,-1})D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_{+1}$	$H_{31-1,321}^{1,0}S_{1,0}D_{41,42}^{2,1} + H_{31-1,321}^{3,-2}S_{3,-2}D_{41,42}^{2,3}$
$3p_{-1}$	$3d_0$	$H_{31-1,320}^{1,-1}S_{1,-1}D_{41,42}^{2,1} + H_{31-1,320}^{3,-1}S_{3,-1}D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_{-1}$	$H_{31-1,32-1}^{1,0}S_{1,0}D_{41,42}^{2,1} + (H_{31-1,32-1}^{3,0}S_{3,0} + H_{31-1,32-1}^{3,2}S_{3,2})D_{41,42}^{2,3}$
	$3d_{-2}$	$(H_{31-1,32-2}^{1,-1}S_{1,-1} + H_{31-1,32-2}^{1,1}S_{1,1})D_{41,42}^{2,1} + (H_{31-1,32-2}^{3,-1}S_{3,-1} + H_{31-1,32-2}^{3,1}S_{3,1} + H_{31-1,32-2}^{3,3}S_{3,3})D_{41,42}^{2,3}$
$3d_{+2}$	$3d_{+2}$	$H_{322,322}^{0,0}S_{0,0}D_{42,42}^{2,0} + H_{322,322}^{2,0}S_{2,0}D_{42,42}^{2,2} + (H_{322,322}^{4,0}S_{4,0} + H_{322,322}^{4,4}S_{4,4})D_{42,42}^{2,4}$
	$3d_{+1}$	$H_{322,321}^{2,1}S_{2,1}D_{42,42}^{2,2} + (H_{322,321}^{4,1}S_{4,1} + H_{322,321}^{4,3}S_{4,3})D_{42,42}^{2,4}$
	$3d_0$	$H_{322,320}^{2,2}S_{2,2}D_{42,42}^{2,2} + (H_{322,320}^{4,-2}S_{4,-2} + H_{322,320}^{4,2}S_{4,2})D_{42,42}^{2,4}$
	$3d_{-1}$	$H_{322,32-1}^{2,-1}S_{2,-1}D_{42,42}^{2,2} + (H_{322,32-1}^{4,-3}S_{4,-3} + H_{322,32-1}^{4,-1}S_{4,-1})D_{42,42}^{2,4}$
	$3d_{-2}$	$H_{322,32-2}^{0,0}S_{0,0}D_{42,42}^{2,0} + H_{322,32-2}^{2,0}S_{2,0}D_{42,42}^{2,2} + H_{322,32-2}^{4,-4}S_{4,-4}D_{42,42}^{2,4}$
$3d_{+1}$	$3d_{+1}$	$H_{321,321}^{0,0}S_{0,0}D_{42,42}^{2,0} + H_{321,321}^{2,0}S_{2,0}D_{42,42}^{2,2} + (H_{321,321}^{4,0}S_{4,0} + H_{321,321}^{4,2}S_{4,2})D_{42,42}^{2,4}$
	$3d_0$	$(H_{321,320}^{2,-1}S_{2,-1} + H_{321,320}^{2,1}S_{2,1})D_{42,42}^{2,2} + H_{321,320}^{4,1}S_{4,1}D_{42,42}^{2,4}$



Tablo 6.' in devamı

$3d_{+1}$	$3d_{-1}$	$H_{321,32-1}^{0,0} S_{0,0} D_{42,42}^{2,0} + (H_{321,32-1}^{2,-2} S_{2,-2} + H_{321,32-1}^{2,0} S_{2,0} + H_{321,32-1}^{2,2} S_{2,2}) D_{42,42}^{2,2} + (H_{321,32-1}^{4,-2} S_{4,-2} + H_{321,32-1}^{4,2} S_{4,2}) D_{42,42}^{2,4}$
	$3d_{-2}$	$H_{321,32-2}^{2,-1} S_{2,-1} D_{42,42}^{2,2} + (H_{321,32-2}^{4,-3} S_{4,-3} + H_{321,32-2}^{4,-1} S_{4,-1} + H_{321,32-2}^{4,1} S_{4,1} + H_{321,32-2}^{4,3} S_{4,3}) D_{42,42}^{2,4}$
$3d_0$	$3d_0$	$H_{320,320}^{0,0} S_{0,0} D_{42,42}^{2,0} + H_{320,320}^{2,0} S_{2,0} D_{42,42}^{2,2} + H_{320,320}^{4,0} S_{4,0} D_{42,42}^{2,4}$
	$3d_{-1}$	$H_{320,32-1}^{2,-1} S_{2,-1} D_{42,42}^{2,2} + H_{320,32-1}^{4,-1} S_{4,-1} D_{42,42}^{2,4}$
	$3d_{-2}$	$H_{320,32-2}^{2,-2} S_{2,-2} D_{42,42}^{2,2} + H_{320,32-2}^{4,-2} S_{4,-2} D_{42,42}^{2,4}$
$3d_{-1}$	$3d_{-1}$	$H_{32-1,32-1}^{0,0} S_{0,0} D_{42,42}^{2,0} + (H_{32-1,32-1}^{2,0} S_{2,0} + H_{32-1,32-1}^{2,2} S_{2,2}) D_{42,42}^{2,2} + (H_{32-1,32-1}^{4,0} S_{4,0} + H_{32-1,32-1}^{4,2} S_{4,2}) D_{42,42}^{2,4}$
	$3d_{-2}$	$H_{32-1,32-2}^{2,1} S_{2,1} D_{42,42}^{2,2} + (H_{32-1,32-2}^{4,1} S_{4,1} + H_{32-1,32-2}^{4,3} S_{4,3}) D_{42,42}^{2,4}$
$3d_{-2}$	$3d_{-2}$	$H_{32-2,32-2}^{0,0} S_{0,0} D_{42,42}^{2,0} + H_{32-2,32-2}^{2,0} S_{2,0} D_{42,42}^{2,2} + (H_{32-2,32-2}^{4,0} S_{4,0} + H_{32-2,32-2}^{4,4} S_{4,4}) D_{42,42}^{2,4}$

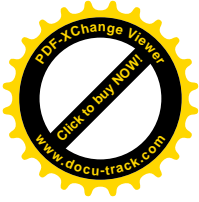


#### 4. TARTIŞMA

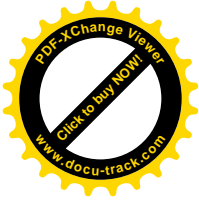
İki-merkezli örtme integralleri için elde edilen genel analitik ifadenin ve içerdiği fonksiyonların Maple 13 sembolik programlama dilinde programları yapılmıştır [33]. Algoritmamızın doğruluğunu ve verimini test etmek için, keyfi kuantum sayıları, orbital üstelleri, çekirdeklerarası mesafeler ve  $\theta$  ve  $\varphi$  açılarında kapsamlı bir inceleme yapılmıştır. Bunu için, nonlined-up ve lined-up koordinat sistemlerindeki iki-merkezli örtme integrallerinin literatür değerleri ile karşılaştırmaları yapılmıştır.

Nonlined-up koordinat sisteminde eşit ve farklı orbital üstelleri durumları için algoritmamızın bilgisayar sonuçları ve mevcut literatür değerleri, sırasıyla, Tablo 2. ve Tablo 3.'de karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Eşit orbital üstelleri durumu için vermiş olduğumuz Tablo 2.'den görüldüğü gibi; 20 ve 21 numarası ile verilen integraller hariç diğer integraller için literatür sonuçları ile en az 12 basamak uyum vardır. 20 ve 21 numaralı integraller için literatürde var olan değerlerin yanlış yazıldığı ilgili çalışmanın yazarları tarafından doğrulanmıştır. 14 numaralı integral ise iki-merkezli örtme integrali için 2. bölümde (154) ile verilen simetri özelliğini doğrulamaktadır. Farklı orbital üstelleri durumu için vermiş olduğumuz Tablo 2.'den görüldüğü gibi; 18, 34 ve 42 numarası ile verilen integraller hariç diğer integraller için literatür sonuçları ile en az 10 basamak uyum vardır. 18 ve 42 numaralı integraller için literatürde var olan değerlerin yanlış yazıldığı ilgili çalışmanın yazarları tarafından yeniden hesaplanarak doğrulanmıştır. 34 numaralı integral ile ilgili olarak Safouhi ile özel görüşmemizde sonucumuzun kendi sonucu ile birebir uyduğunu ve dolayısıyla bu literatür değerinin yanlış olduğunu düşünmekteyiz. 8 numaralı integral ise iki-merkezli örtme integrali için 2. bölümde (154) ile verilen simetri özelliğini doğrulamaktadır.

Lined-up koordinat sisteminde eşit ve farklı orbital üstelleri durumları için algoritmamızın bilgisayar sonuçları ve mevcut literatür değerleri, sırasıyla, Tablo 4. ve Tablo 5.'de karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Eşit orbital üstelleri durumu için vermiş olduğumuz Tablo 4.'den görüldüğü gibi; algoritmamızın bilgisayar sonuçları ile literatür sonuçları arasında en az 20 basamak uyum vardır. Farklı orbital üstelleri durumu için vermiş olduğumuz Tablo 5.'den görüldüğü gibi; 25 nolu integral hariç diğer durumlarda literatür sonuçları ile en az 15 basamak uyum vardır. 25 nolu integral ile ilgili olarak Safouhi ile yapılan özel görüşmede sonucumuzun doğru olduğu kanaatine varılmıştır.



İki-merkezli örtme integrali için elde ettiğimiz genel analitik ifadelerin atomik veya moleküler özellik hesaplanmalarında faydalı olabilmesi için  $1 \leq n, n' \leq 3$  durumlarında ortaya çıkan mümkün iki-merkezli örtme integrallerinin sembolik sonuçları Tablo 6.'da verilmiştir. İki-merkezli örtme integralleri için elde edilen sembolik sonuçların literatürdeki sembolik sonuçlar [45] ile uyumlu olduğu görülmüştür.



## 5. SONUÇ ve ÖNERİLER

Bu çalışmada, iki-merkezli örtme integrali için genel koordinat sisteminde analitik bir ifade verilmiştir. Bu ifade Gaunt katsayılarını,  $D_{nl,n'l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integralini ve küresel harmonikleri içerir. İki-merkezli örtme integrali için elde edilen bu ifade lined-up ve nonlined-up koordinat sisteminde de geçerlidir. İki-merkezli örtme integralinin daha hassas hesabı, bu  $D_{nl,n'l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integralinin hassas hesabına bağlıdır. Bu yüzden,  $D_{nl,n'l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı moleküler integralinin içerdiği yardımcı fonksiyonlar için analitik, tekrarlama ve alternatif formüller türetildi.

Sonuç olarak; STO'ler kullanılarak iki-merkezli örtme integralleri için elde edilen genel analitik ifadenin literatürdeki ifadelerden matematiksel yapı olarak daha sade, hızlı ve daha doğru çalıştığını düşünmekteyiz. Bu yüzden, iki-merkezli örtme integralleri için elde edilen ifadeler elektronik yapı hesaplamalarında kullanılabilir.

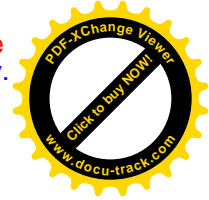
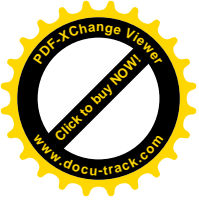
Bu çalışmada STO'lerin Fourier dönüşümü ve iki-merkezli örtme integralleri için elde edilen ifadeler kullanılarak

1. Üç-merkezli *nükleer çekim* integrali,
2. İki-, üç- ve dört-merkezli *Coulomb* integralleri,
3. İki-, üç- ve dört-merkezli *Hibrit* integralleri,
4. İki-, üç- ve dört-merkezli *değiş-tokuş (exchange)* integralleri

hesaplanabilir. Kimyasal uygulama olarak ise

1. Fotonlar ile atom ve moleküllerin saçılmasında ortaya çıkan atomik ve moleküler oto-korelasyon fonksiyonları,
2. Oto-korelasyon fonksiyonundan faydalanarak atom ve moleküllerin Compton profilleri,
3. Enerji seviyeleri arasındaki geçiş ihtimalleri ve hızları,
4. Atom ve moleküllerin elastik ve inelastik saçılma çarpanları

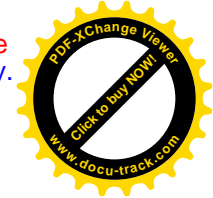
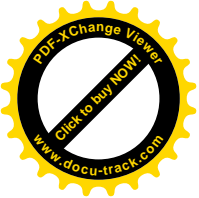
gibi pek çok fiziksel veya kimyasal özellik hesaplanabilir.



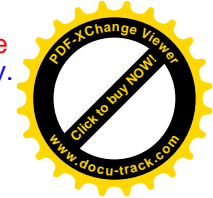
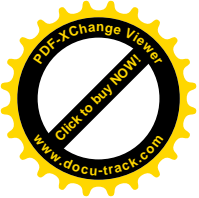
## KAYNAKLAR

- [1] Schiff, L.I., Quantum Mechanics, 3.ncü baskı, McGraw-Hill, New York, 1968.
- [2] Davydov, A.S., Quantum Mechanics, Pergamon Press, Oxford, 1976.
- [3] Atkins, P.W. and Friedman, R.S., Molecular Quantum Mechanics, 3.ncü baskı, Oxford Univ. Press, New York, 1997.
- [4] Helgaker, T., Jorgensen, P. and Olsen, J., Molecular Electronic-Structure Theory, Wiley, New York, 2000.
- [5] Hehre, W.J., Radom, L., Schleyer, P.R. and Pople, J.A., Ab Initio Molecular Orbital Theory, Wiley and Sons Press, 1986.
- [6] Diercksen, G.F. and Wilson, S., Methods in Computational Molecular Physics, Riedel, Dordrecht, Holland, 1983.
- [7] Roothaan, C.C.J., New Developments in Molecular Orbital Theory, Rev. Mod. Phys., 23 (1951) 69-89.
- [8] Roothaan, C.C.J., Correlated Orbitals for the Ground State of Heliumlike systems, Rev. Mod. Phys., 32 (1960) 194-205.
- [9] Kato, T., On the Eigenfunctions of many-particle Systems in Quantum Mechanics, Commun. Pure Appl. Math., 10 (1957) 151-177.
- [10] Agmon, S., Lectures on Exponential Decay of Solutions of Second-Order Elliptic Equations: Bounds of Eigenfunctions of N-Body Schrödinger Operators, Princeton Univ. Press, Princeton, 1982.
- [11] Abramowitz, M., Stegun, I.A., Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1965.
- [12] Ozdogan, T. and Orbay, Cartesian Expressions for Surface and Solid Spherical Harmonics using Binomial Coefficients and its Use in the Evaluation of multicenter Integrals. M., Czech. J. Phys., 52 (2002) 1297-1302.
- [13] Slater, J.C., Atomic Shielding Constants, Phys. Rev., 36 (1930) 57-64.
- [14] Zener, C., Analytic Atomic Wave Functions, Phys. Rev., 36 (1930) 51-56.
- [15] Gradshteyn, I.S. and Ryzhik, I.M., Tables of Integrals, Series and Products, Academic Press, New York, 1995.

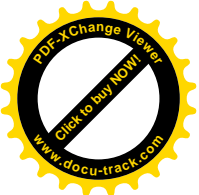




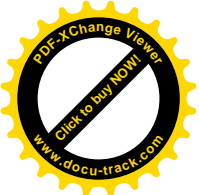
- [16] Recent Advances in Computational Chemistry: Molecular Integrals Over Slater Orbitals (Eds. Ozdogan ,T. and Ruiz ,M.B.), Transworld Research Network, Kerala, India, 2008.
- [17] Hoggan, P.E., Ruiz, M.B. and Ozdogan, T., in: Quantum Frontiers of Atoms and Molecules, (Ed. Putz, M.V.), Chapter 4, Nova Science Pub. Inc., Cairo, Egypt & New York, USA, 2010.
- [18] Boys, S.F., Electronic Wave Functions. II. A Calculation for the Ground state of Beryllium Atom, Proc. Roy. Soc., London, 200 (1950) 542-554.
- [19] Harris, F.E., Gaussian Wave Functions for Poly atomic Molecules, Rev. Mod. Phys., 35 (1963) 558-568.
- [20] Kara, M., Nalcaci, A. and Ozdogan, T., Efficient Calculation of Boys Integrals, Int. J. Phys. Sci., 5 (2010) 1939-1941.
- [21] Kara, M., Nalcaci, A. and Ozdogan, T., Analytical Evaluation of Boys Integral, Balkan Physics Union Conference 7 (BPU 7), Alexandroupolis, Greece, 2009, 191.
- [22] Steinborn, E.O. and Filter, E., Translations of fields represented by spherical-harmonic expansions for molecular calculations III. Translations of reduced Bessel functions, Slater-types-orbitals, and other functions Theor. Chim. Acta., 38 (1975) 273-281.
- [23] Ozdogan, T., Orbay, M. and Değirmenci, S., Evaluation of Two-center Overlap Integrals using Slater Type Orbitals in terms of Bessel Type Orbitals, J. Math. Chem., 37 (2005) 27-35.
- [24] Shull, H., Löwdin, P.O., Role of the Continuum in Superposition of Configurations, J. Chem. Phys., 101 (1955) 1362-1363.
- [25] Bromley, M.W.J., Mitroy, J., Configuration Interaction Calculation PsH Be, Phys. Rev. A, 65 (2001) 012505-012513.
- [26] Goldman, S.P., Generalized Laguerre Representation Application to Relativistic two Photon Decay Rates, Phys. Rev. A, 40 (1989) 1185-1193.
- [27] Recent Advances in Computational Chemistry: Molecular Integrals Over Slater Orbitals (Eds. Ozdogan, T. and Ruiz , M.B.), Chapter 4, Transworld Research Network, Kerala, India, 2008
- [28] Barnett, M.P. and Coulson, C.A., Evaluation of Integrals Occurring in the Theory of Molecular Structure, Part I: Basic Functions, Phil. Trans. A, 243 (1951) 221-233.
- [29] Harris, F.E., Michels, H.H., Multicenter Integrals in Quantum Mechanics. I. Expansion of Slater-Type Orbitals about a New Origin, J. Chem. Phys., 43 (1965) S165-S169.



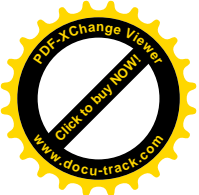
- [30] Lowdin, P.O., Quantum Theory of Cohesive Properties of Solids, Advan. Phys., 5 (1956) 1-171.
- [31] Sharma, R.R., Alpha-Function Technique for Two-Center Integrals, J. Math. Phys., 9 (1968) 505-509.
- [32] Jones, H.W., The Löwdin  $\alpha$  Function and its Application to the Multi-center Molecular Integral Problem over Slater-Type Orbitals, J. Mol. Struct. (Theochem), 199 (1989) 233-243.
- [33] Maple 13, Waterloo Maple, Inc., Waterloo, Ontario, Canada.
- [34] Smeyers, Y.G., About Evaluation of Many-center Molecular Integrals, Theor. Chim. Acta (Berl.), 4 (1966) 452-459.
- [35] Guseinov, I.I., Expansion of Slater Type Displaced Center and the Evaluation of Multicenter Electron- Repulsion Integrals Phys. Rev. A, 31 (1985) 2851-2853.
- [36] Shavitt, I., in: Methods in Computational Physics 2, (Eds. Adler, B., Frenbach, S., Rotenberg, M.), Academic Press, New York, 1963.
- [37] Boys, S.F., The Integral Formulae for the Variational Solution of the Molecular Many Electron Wave Equation in terms of Gaussian Function with Direct Electron Correlation Proc. R. Soc. A, 258 (1960) 402-411.
- [38] McWeeny, R., X-ray Scattering by Aggregates of Banded Atoms, Acta Crystallogr., 6 (1953) 631-637.
- [39] Kikuchi, R., Infrared Absorption Spectra of Complex Cobalt Salts, J. Chem. Phys., 22 (1954) 148-149.
- [40] Silver, D., Basis Sets of Gaussian and Slater-type Orbitals, Chem. Phys. Lett., 7 (1970) 511-516.
- [41] Shavitt, I. and Karplus, M., Multicenter Integrals in Molecular Quantum Mechanics, J. Chem. Phys., 36 (1962) 550-552.
- [42] Shavitt, I. and Karplus, Gaussian-Transform Method for Molecular Integrals. I. Formulation for Energy Integrals, M., J. Chem. Phys., 43 (1965) 398-415.
- [43] Stewart, R.F., Small Gaussian Expansions of Slater-Type Orbitals, J. Chem. Phys., 52 (1970) 431-439.
- [44] Davidson, E.R. and Feller, D., Basis Set Selection for Molecular Calculations, Chem. Rev., 86 (1986) 681-696.
- [45] Mulliken, R.S., Rieke, C.A., Orloff, D., Orloff, H.J., Formulas and Numerical Tables for Overlap Integrals, J. Chem. Phys., 17 (1949) 1248-1268.



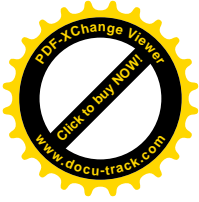
- [46] Kotani, M., Amemiya, A., Ishiguro, E. and Kimura, T., Table of Molecular Integrals, Maruzen Co., Ltd., Tokyo, 1955.
- [47] Corbato, F.J., On the Computation of Auxiliary Functions for Two-Center Integrals by Means of a High-Speed Computer, J. Chem. Phys. 24 (1956) 452-454.
- [48] Harris, F.E., Comment: "On the computation of molecular auxiliary functions A(n) and B-n", Pramana-J. Phys., 61 (2003) 779-780.
- [49] Harris, F.E., Efficient Evaluation of the Molecular Auxiliary Function B-n by Downward Recursion, Int. J. Quantum Chem., 100 (2004) 142-145.
- [50] Guseinov, I.I., Mamedov, B.A., Kara, M., Orbay, M., On the Computation of Molecular Auxiliary Functions A(n) and B(n), Pramana-J. Phys., 56 (2001) 691-696.
- [51] Jones, H.W., Weatherford, C.A., The Löwdin  $\alpha$  Function and its application to the multi-center Molecular Integral Problem over Slater-Type Orbitals, J. Mol. Struct. (Theochem), 199 (1989) 233-243.
- [52] Silver, D.M. and Rüdberg, K., Coulomb Integrals over Slater-Type Atomic Orbitals, J. Chem. Phys., 49 (1968) 4306-4312.
- [53] 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. Rev. A, 27 (1983) 670-679.
- [54] Silverstone, H.J., J. Expansion about an Arbitrary Point of Three-Dimensional Functions Involving Spherical Harmonics by the Fourier-Transform Convolution Theorem, Chem. Phys., 47 (1967) 537-541.
- [55] Kay, K.G. and Silverstone, H.J., Analytical Evaluation of Multicenter Integrals of  $r_{12}^{-1}$  with Slater-Type Atomic Orbitals. V. Four-Center Integrals by Fourier-Transform Method, J. Chem. Phys., 51 (1969) 4287-4309.
- [56] Harris, F.E., Rapid Evaluation of Coulomb Integrals, J. Chem. Phys., 51 (1969) 4770-4779.
- [57] Novosadov, B.K., Hydrogen Like Atomic Orbitals: Additional and Expansion Theorems, Int. J. Quantum Chem., 24 (1983) 1-18.
- [58] Niukkanen, A.W., Fourier-Transforms of Atomic Orbitals 2. Convolution Theorems, Int. J. Quantum Chem., 15 (1984) 957-964.
- [59] Steinborn, E.O., Extremely Compact Formulas for Molecular one-electron Integrals and Coulomb Integrals over Slater-Type Orbitals, Phys. Rev. A, 18 (1978) 1-18.
- [60] Homeier, H.H.H. and Steinborn, E.O., On the Evaluation of Overlap Integrals with Exponential Type Basis Functions, Int. J. Quantum Chem., 42 (1992) 761-778.



- [61] Roothaan, C.C.J., A Study of Two-center Integrals Useful in Calculations on Molecular Structure I, Rev. Mod. Phys., 19 (1951) 1445-1458.
- [62] Geller, M., Two-center integrals over solid spherical harmonics, J. Chem. Phys., 39 (1963) 84-89.
- [63] Guseinov, I.I., Analytical Evaluation of Two-center Coulomb, Hybrid and One-electron Integrals for Slater Type Orbitals, J. Phys. B, 3 (1970) 1399-1412.
- [64] Gaunt, J.A., The Tripletlets of Helium, Phil. Trans. Roy. Soc. (London), A228 (1959) 151-160.
- [65] Guseinov, I.I., Aydin, R., Mamedov, B.A., Computation of Multicenter Overlap Integrals with Slater Type Orbitals using Psi(alpha), J. Mol. Model, 9 (2003) 325-328.
- [66] Mamedov, B. A., Evaluation of Two-center Overlap Integrals in Molecular Coordinate Systems over Slater Type Orbitals, Chinese J. Phys., 42 (2004) 176-181.
- [67] Guseinov, I.I., Mamedov, B.A., Computation of Multicenter Overlap Integrals, J. Mol. Struct. (Theochem), 465 (1999) 1-6.
- [68] Guseinov, I.I., Mamedov, B.A., Oner, F., Huseyin, S., Computation of Multicenter Overlap Integrals over Slater Type Orbitals, J. Mol. Struct. (Theochem), (2001) 265-270.
- [69] Mamedov, B.A., Koç, H., Calculation of Two-center Overlap Integral in Molecular Coordinate System over Slater Type Orbital using Lowdin Alpha-radial and Guseinov Rotation-angular Functions, J. Math. Chem., 44 (2008) 365-372.
- [70] Guseinov, I.I., Mamedov, B.A., Calculation of Overlap Integrals over Slater Type Orbitals using Translational and Rotational Transformations of Spherical Harmonics, Theor. Chem. Acc., 105 (2000) 93-95.
- [71] Ozdogan, T., Evaluation of Two-center Overlap Integrals using Slater Type Orbitals using Fourier Transform Convolution Theorem, Collect. Czech. Chem. Commun., 69 (2004) 279-291.
- [72] Guseinov, I.I., Mamedov, B.A., Orbay, M., Ozdogan, T., Calculation of Overlap Integrals over Slater Type Orbitals using Basic Overlap Integrals, Commun. Theor. Phys., (Beijing, China), 33 (2000) 161-166.
- [73] Ozdogan, T., Fast and Stable Algorithm for the Evaluation of Two-center Overlap Integrals over Slater Type Orbitals with Integer and Noninteger Principal Quantum Numbers, Int. J. Quantum Chem., 100 (2004) 69-79.
- [74] Yavuz, M., Yukcu, N., Oztekin, E., Yilmaz, H., Dondur, S., On the Evaluation Overlap Integrals with The Same and Different Screening Parameters over Slater



- Type Orbitals via the Fourier-transform Method, Commun. Theor. Phys., 43 (2005) 151-158.
- [75] Romanowski, Z., Jalbout, A.F., Two-center Overlap Integrals, Three Dimensional Adaptive Integration, and Prolate Ellipsoidal Coordinates, J. Math. Chem., 46 (2009) 97-107.
- [76] Safouhi, H., Erratum and Answer to the comment by Harris on: Numerical Treatment of Two-center Overlap Integrals (J Mol Mod, 12,213-220, 2006), J. Mol. Model., 15 (2009) 1541-1543.
- [77] Magnasco, V., Rapallo, A., Casanova, N., New Translation Method for STOs and its Application to Calculation of Two-center Two-electron Integrals, Int. J. Quantum Chem., 73 (1999) 333-340.
- [78] Barnett, M.P., Digital Erasion in the Evaluation of Molecular Integrals, Theor. Chem. Acc., 107 (2002) 241-245.
- [79] Barnett, M.P., Molecular Integrals and Information Processing, Int. J. Quantum Chem., 95 (2003) 791-805.



## EKLER

### Ek 1. $j_l(x)$ Küresel Bessel Fonksiyonu

Küresel Bessel fonksiyonları

$$j_n(x) = (-1)^n x^n \left( \frac{d}{x dx} \right)^n j_0(x) \quad (156)$$

ile verilir [15]. Burada  $j_0(x)$  sıfırcı mertebeden küresel Bessel fonksiyonudur ve

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \quad (157)$$

şeklindedir. Küresel Bessel fonksiyonları aşağıdaki tekrarlı bağıntısını sağlarlar:

$$j_{n+1}(x) = (2n+1) \frac{j_n(x)}{x} - j_{n-1}(x) \quad (158)$$

Küresel Bessel fonksiyonları için verilen sıfırcı dereceden türevlerini kullanılarak  $n$ . dereceden küresel Bessel fonksiyonunu elde edilir.

$$j_n(x) = (-1)^n \sum_{k=1}^n a_{nk} \frac{j_0^{(n-k+1)}(x)}{x^{k-1}} \quad n \geq 1 \quad \text{için} \quad (159)$$

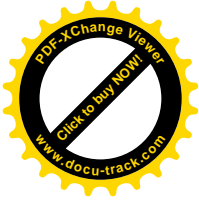
Burada  $a_{nk}$  sembolü:

$$a_{nk} = -(n-k-3)a_{n-1,k-1} + a_{n-1,k} \quad a_{n1} = 1 \quad n \geq k. \quad (160)$$

şeklinde verilir.  $j_0(x)$ 'ın  $n$ . dereceden türevlerini elde etmek için Leibnitz kuralı [15] kullanılırsa,

$$\frac{d^n}{dx^n} j_0(x) = \sum_{s=0}^n \frac{n!}{s!} \left[ (-1)^{n+\frac{1}{2}(s+\eta_s^-)} \eta_s^- \frac{\cos x}{x^{n-s+1}} + (-1)^{n+\frac{1}{2}(s+\eta_s^+)} \eta_s^+ \frac{\sin x}{x^{n-s+1}} \right] \quad (161)$$

elde edilir. Burada  $\eta_s^\pm$  sembolü



$$\eta_s^\pm = \frac{1}{2} [1 \pm (-1)^s]. \quad (162)$$

ile verilir. (161) denklemi (159) denkleminde yerine yazılırsa küresel Bessel fonksiyonu için

$$j_n(x) = \sum_{k=1}^n a_{nk} (-1)^{k-1} \sum_{s=0}^{n-k+1} (-1)^{F(\frac{s}{2})} \frac{(n-k+1)!}{s!} \left\{ \eta_s^- \frac{\cos(x)}{x^{n-s+1}} + \eta_s^+ \frac{\sin(x)}{x^{n-s+1}} \right\} \quad (163)$$

ifadesi elde edilir.

Küresel Bessel fonksiyonlarının sinüs ve cosinüs fonksiyonları içeren bir başka ifadesi ise aşağıda verilmiştir:

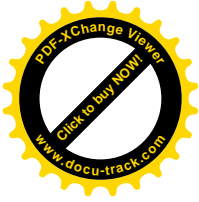
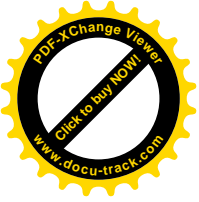
$$j_n(x) = \sum_{k=0}^{E(\frac{n}{2})} \frac{A_{nk} \sin(x - \frac{n\pi}{2})}{x^{2k+1}} + \sum_{k'=0}^{E(\frac{n-1}{2})} \frac{B_{nk'} \cos(x - \frac{n\pi}{2})}{x^{2k'+2}} \quad (164)$$

Burada  $A_{nk}$  ve  $B_{nk}$  sembolleri

$$A_{nk} = \frac{(-1)^k (2k)!}{2^{2k}} F_{2k}(n+2k) F_{2k}(n) \quad (165)$$

$$B_{nk} = \frac{(-1)^k (2k+1)!}{2^{2k+1}} F_{2k+1}(n+2k+1) F_{2k+1}(n) \quad (166)$$

ile verilirler.

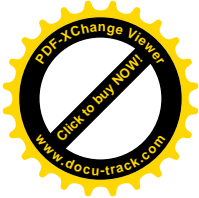
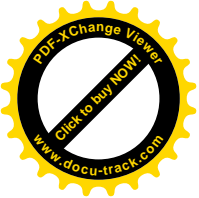


## Ek 2. $C_{lm}^k$ Katsayıları

Tablo 7.  $C_{lm}^k$  Katsayıları (Denklem 24).

$l$	$m$	$k$	$C_{lm}^k$	$l$	$m$	$k$	$C_{lm}^k$	$l$	$m$	$k$	$C_{lm}^k$	$l$	$m$	$k$	$C_{lm}^k$
0	0	0	1	4	-4	3	$\frac{\sqrt{70}}{16}$	5	-5	5	$\frac{3\sqrt{7}}{16}$	6	-6	6	$\frac{\sqrt{231}}{32}$
1	-1	1	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	-4	4		$\frac{3\sqrt{70}}{16}$	-4	4		$\frac{3\sqrt{70}}{16}$	-5	5		$\frac{3\sqrt{77}}{16}$
	0	0	1	-3	3		$\frac{\sqrt{35}}{4}$	-3	3		$\frac{\sqrt{35}}{2}$	-4	4		$\frac{15\sqrt{14}}{16}$
	1	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	-2	2		$\frac{3\sqrt{10}}{4}$		4		$\frac{\sqrt{35}}{16}$		5		$\frac{3\sqrt{14}}{32}$
2	-2	2	$\frac{\sqrt{6}}{4}$		3		$\frac{\sqrt{10}}{8}$	-2	2		$\frac{\sqrt{210}}{4}$	-3	3		$\frac{\sqrt{105}}{2}$
	-1	1	$\frac{\sqrt{6}}{2}$	-1	1		$\sqrt{5}$		3		$\frac{\sqrt{210}}{8}$		4		$\frac{3\sqrt{105}}{16}$
	0	0	1		2		$\frac{3\sqrt{5}}{4}$	-1	1		$\frac{\sqrt{30}}{2}$	-2	2		$\frac{\sqrt{105}}{2}$
		1	$\frac{1}{2}$	0	0		1		2		$\frac{3\sqrt{30}}{4}$		3		$\frac{\sqrt{105}}{2}$
	1	0	$\frac{\sqrt{6}}{2}$		1		3		3		$\frac{\sqrt{30}}{16}$		4		$\frac{\sqrt{105}}{32}$
	2	0	$\frac{\sqrt{6}}{4}$		2		$\frac{3}{8}$	0	0		1	-1	1		$\frac{\sqrt{42}}{2}$
3	-3	3	$\frac{\sqrt{5}}{4}$	1	0		$\sqrt{5}$		1		5		2		$\frac{5\sqrt{42}}{4}$
	-2	2	$\frac{\sqrt{30}}{4}$		1		$\frac{3\sqrt{5}}{4}$		2		$\frac{15}{8}$		3		$\frac{5\sqrt{42}}{16}$
	-1	1	$\sqrt{3}$	2	0		$\frac{3\sqrt{10}}{4}$	1	0		$\frac{\sqrt{30}}{2}$	0	0		1
		2	$\frac{\sqrt{3}}{4}$		1		$\frac{\sqrt{10}}{8}$		1		$\frac{3\sqrt{30}}{4}$		1		$\frac{15}{2}$
	0	0	1	3	0		$\frac{\sqrt{35}}{4}$		2		$\frac{\sqrt{30}}{16}$		2		$\frac{45}{8}$



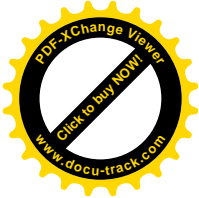
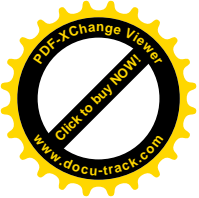


Tablo 7.'nin devamı

---

1	$\frac{3}{2}$	4	0	$\frac{\sqrt{70}}{16}$	2	0	$\frac{\sqrt{210}}{4}$	3	$\frac{5}{16}$	
1	0	$\sqrt{3}$			1	$\frac{\sqrt{210}}{8}$	1	0	$\frac{\sqrt{42}}{2}$	
1	$\frac{\sqrt{3}}{4}$				3	0	$\frac{\sqrt{35}}{2}$	1	$\frac{5\sqrt{42}}{4}$	
2	0	$\frac{\sqrt{30}}{4}$			1	$\frac{\sqrt{35}}{16}$	2	$\frac{5\sqrt{42}}{16}$		
3	0	$\frac{\sqrt{5}}{4}$			4	0	$\frac{3\sqrt{70}}{16}$	2	0	$\frac{\sqrt{105}}{2}$
					5	0	$\frac{3\sqrt{7}}{16}$	1	$\frac{\sqrt{105}}{2}$	
								2	$\frac{\sqrt{105}}{32}$	
								3	0	$\frac{\sqrt{105}}{2}$
								1	$\frac{3\sqrt{105}}{16}$	
								4	0	$\frac{15\sqrt{14}}{16}$
								1	$\frac{3\sqrt{14}}{32}$	
								5	0	$\frac{3\sqrt{77}}{16}$
								6	0	$\frac{\sqrt{231}}{32}$

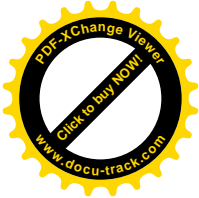
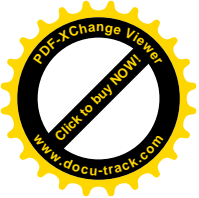
---



### Ek 3. $J_{mn}(\alpha, R)$ Fonksiyonun Sembolik Tablosu

Tablo 8.  $J_{mn}(\alpha, R)$  fonksiyonun sembolik deęerleri (Denklem 138).

$m$	$n$	$J_{mn}(\alpha, R)$	
0	1	$\frac{\pi}{2\alpha} e^{-P}$	
	2	$\frac{\pi}{4\alpha^3} (1 + P)e^{-P}$	
	3	$\frac{\pi}{16\alpha^5} (3 + 3P + P^2)e^{-P}$	
	4	$\frac{\pi}{96\alpha^7} (15 + 15P + 6P^2 + P^3)e^{-P}$	
	5	$\frac{\pi}{768\alpha^9} (105 + 105P + 45P^2 + 10P^3 + P^4)e^{-P}$	
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^{11}} (945 + 945P + 420P^2 + 105P^3 + 15P^4 + P^5)e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^{13}} (10395 + 10395P + 4725P^2 + 1260P^3 + 210P^4 + 21P^5 + P^6)e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{15}} (135135 + 135135P + 62370P^2 + 17325P^3 + 3154P^4 + 378P^5 + 28P^6 + P^7)e^{-P}$	
2	2	$\frac{\pi}{4\alpha} (1 - P)e^{-P}$	
	3	$\frac{\pi}{16\alpha^3} (1 + P - P^2)e^{-P}$	
	4	$\frac{\pi}{96\alpha^5} (3 + 3P - P^3)e^{-P}$	
	5	$\frac{\pi}{768\alpha^7} (15 + 15P + 3P^2 - 2P^3 - P^4)e^{-P}$	
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^9} (105 + 105P + 30P^2 - 5P^3 - 5P^4 - P^5)e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^{11}} (945 + 945P + 315P^2 - 30P^4 - 9P^5 - P^6)e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{13}} (10395 + 10395P + 3780P^2 + 315P^3 - 210P^4 - 84P^5 - 14P^6 - P^7)e^{-P}$	
	4	3	$\frac{\pi}{16\alpha} (3 - 5P + P^2)e^{-P}$
4		$\frac{\pi}{96\alpha^3} (3 + 3P - 6P^2 + P^3)e^{-P}$	
5		$\frac{\pi}{768\alpha^5} (9 + 9P - 3P^2 - 6P^3 + P^4)e^{-P}$	
6		$\frac{\pi}{7680\alpha^7} (45 + 45P - 15P^3 - 10P^4 + P^5)e^{-P}$	
7		$\frac{\pi}{92160\alpha^9} (315 + 315P + 45P^2 - 60P^3 - 30P^4 - 3P^5 + P^6)e^{-P}$	
8		$\frac{\pi}{1290240\alpha^{11}} (2835 + 2835P + 630P^2 - 315P^3 - 210P^4 - 42P^5 + P^7)e^{-P}$	
6		4	$\frac{\pi}{96\alpha} (15 - 33P + 12P^2 - P^3)e^{-P}$

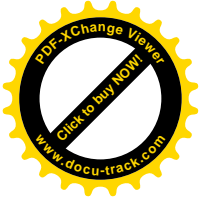
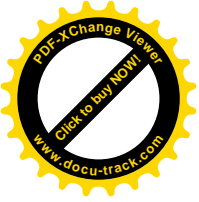


Tablo 8.'in devamı

---

6	5	$\frac{\pi}{768\alpha^3}(15 + 15P - 45P^2 + 14P^3 - P^4)e^{-P}$
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^5}(45 + 45P - 30P^2 - 45P^3 + 15P^4 - P^5)e^{-P}$
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^7}(225 + 225P - 45P^2 - 120P^3 - 30P^4 + 15P^5 - P^6)e^{-P}$
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^9}(1575 + 1575P - 525P^3 - 210P^4 + 14P^6 - P^7)e^{-P}$
8	5	$\frac{\pi}{768\alpha}(105 - 279P + 141P^2 - 22P^3 + P^4)e^{-P}$
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^3}(105 + 105P - 420P^2 + 185P^3 - 25P^4 + P^5)e^{-P}$
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^5}(315 + 315P - 315P^2 - 420P^3 + 210P^4 - 27P^5 + P^6)e^{-P}$
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^7}(1575 + 1575P - 630P^2 - 1155P^3 - 210P^4 + 210P^5 - 28P^6 + P^7)e^{-P}$
10	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^9}(945 - 2895P + 1830P^2 - 405P^3 + 35P^4 - P^5)e^{-P}$
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^3}(945 + 945P - 4725P^2 + 2640P^3 - 510P^4 + 39P^5 - P^6)e^{-P}$
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^7}(2835 + 2835P - 3780P^2 - 4725P^3 + 3150P^4 - 588P^5 + 42P^6 - P^7)e^{-P}$

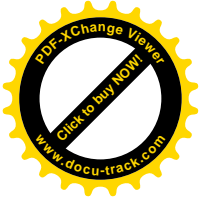
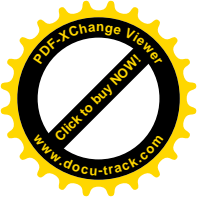
---



#### Ek 4. $I_{mn}(\alpha, R)$ Fonksiyonun Sembolik Tablosu

Tablo 9.  $I_{mn}(\alpha, R)$  fonksiyonunun sembolik deęerleri (Denklem 139).

$m$	$n$	$I_{mn}(\alpha, R)$	
1	1	$\frac{\pi}{2} e^{-P}$	
	2	$\frac{\pi}{4\alpha^2} P e^{-P}$	
	3	$\frac{\pi}{16\alpha^4} P(1 + P) e^{-P}$	
	4	$\frac{\pi}{96\alpha^6} P(3 + 3P + P^2) e^{-P}$	
	5	$\frac{\pi}{768\alpha^8} P(15 + 15P + 6P^2 + P^3) e^{-P}$	
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^{10}} (105 + 105P + 45P^2 + 10P^3 + P^4) e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^{12}} P(945 + 945P + 420P^2 + 105P^3 + 15P^4 + P^5) e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{14}} P(10395 + 10395P + 4725P^2 + 1260P^3 + 2105P^4 + 21P^5 + P^6) e^{-P}$	
3	2	$\frac{\pi}{4} (2 - P) e^{-P}$	
	3	$\frac{\pi}{16\alpha^2} P(3 - P) e^{-P}$	
	4	$\frac{\pi}{96\alpha^4} P(3 + 3P - P^2) e^{-P}$	
	5	$\frac{\pi}{768\alpha^6} (9 + 9P + 2P^2 - P^3) e^{-P}$	
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^8} P(45 + 45P + 15P^2 - P^4) e^{-P}$	
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^{10}} P(315 + 315P + 120P^2 + 15P^3 - 3P^4 - P^5) e^{-P}$	
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{12}} P(2835 + 2835P + 1155P^2 + 210P^3 - 7P^5 - P^6) e^{-P}$	
	5	3	$\frac{\pi}{16} (8 - 7P + P^2) e^{-P}$
4		$\frac{\pi}{96\alpha^2} P(15 - 9P + P^2) e^{-P}$	
5		$\frac{\pi}{768\alpha^4} P(15 + 15P - 10P^2 + P^3) e^{-P}$	
6		$\frac{\pi}{7680\alpha^6} P(45 + 45P + 5P^2 - 10P^3 + P^4) e^{-P}$	
7		$\frac{\pi}{92160\alpha^8} P(225 + 225P + 60P^2 - 15P^3 - 93P^4 + P^5) e^{-P}$	
8		$\frac{\pi}{1290240\alpha^{10}} P(1575 + 1575P + 525P^2 - 42P^4 - 7P^5 + P^6) e^{-P}$	
7		4	$\frac{\pi}{96} (48 - 57P + 15P^2 - P^3) e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^2} P(105 - 87P + 18P^2 - P^3) e^{-P}$

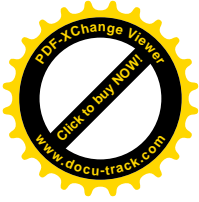


Tablo 9.'un devamı

---

7	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^4} P(105 + 105P - 105P^2 + 20P^3 - P^4)e^{-P}$
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^6} P(315 + 315P - 105P^3 + 21P^4 - P^5)e^{-P}$
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^8} P(1575 + 1575P + 315P^2 - 210P^3 - 84P^4 + 21P^5 - P^6)e^{-P}$
9	5	$\frac{\pi}{768} (384 - 561P + 270P^2 - 30P^3 + P^4)e^{-P}$
	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^2} P(945 - 945P + 285P^2 - 30P^3 + P^4)e^{-P}$
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^4} P(945 + 945P - 1260P^2 + 345P^3 - 33P^4 + P^5)e^{-P}$
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^6} P(2835 + 2835P - 315P^2 - 1260P^3 + 378P^4 - 35P^5 + P^6)e^{-P}$
11	6	$\frac{\pi}{7680} (3840 - 6555P + 3045P^2 - 545P^3 + 40P^4 - P^5)e^{-P}$
	7	$\frac{\pi}{92160\alpha^2} P(10395 - 12645P + 4680P^2 - 705P^3 + 45P^4 - P^5)e^{-P}$
	8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^4} P(10395 + 10395P - 17325P^2 + 6090P^3 - 840P^4 + 49P^5 - P^6)e^{-P}$

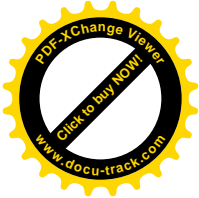
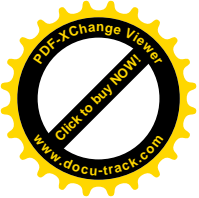
---



**Ek 5.  $E_{mn}^l(\alpha, R)$  Fonksiyonun Sembolik Tablosu**

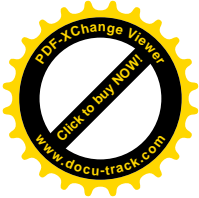
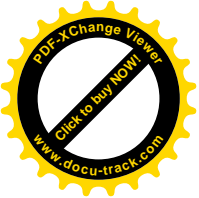
Tablo 10.  $E_{mn}^l(\alpha, R)$  fonksiyonunun sembolik değerleri (Denklem 129). ( $P = \alpha R$ )

$l$	$m$	$n$	$E_{mn}^l(\alpha, R)$
0	2	2	$\frac{\pi}{4\alpha} e^{-P}$
		3	$\frac{\pi}{16\alpha^3} (1 + P)e^{-P}$
		4	$\frac{\pi}{96\alpha^5} (3 + 3P + P^2)e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^7} (15 + 15P + 6P^2 + P^3)e^{-P}$
		6	$\frac{\pi}{7680\alpha^9} (105 + 105P + 45P^2 + 10P^3 + P^4)e^{-P}$
		7	$\frac{\pi}{92160\alpha^{11}} (945 + 945P + 420P^2 + 105P^3 + 15P^4 + P^5)e^{-P}$
		8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{13}} (10395 + 10395P + 4725P^2 + 1260P^3 + 210P^4 + 21P^5 + P^6)e^{-P}$
		4	2
3	$\frac{\pi}{16\alpha} (3 - P)e^{-P}$		
4	$\frac{\pi}{96\alpha^3} (3 + 3P - P^2)e^{-P}$		
5	$\frac{\pi}{768\alpha^5} (9 + 9P + 2P^2 - P^3)e^{-P}$		
6	$\frac{\pi}{7680\alpha^7} (45 + 45P + 15P^2 + P^4)e^{-P}$		
7	$\frac{\pi}{92160\alpha^9} (315 + 315P + 120P^2 + 15P^3 - 3P^4 - P^5)e^{-P}$		
8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{11}} (2835 + 2835P + 1155P^2 + 210P^3 - 7P^5 - P^6)e^{-P}$		
1	3		
		3	$\frac{\pi}{16\alpha^2} P e^{-P}$
		4	$\frac{\pi}{96\alpha^4} P(1 + P)e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^6} P(3 + 3P + P^2)e^{-P}$
		6	$\frac{\pi}{7680\alpha^8} P(15 + 15P + 6P^2 + P^3)e^{-P}$
		7	$\frac{\pi}{92160\alpha^{10}} P(105 + 105P + 45P^2 + 10P^3 + P^4)e^{-P}$
		8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{12}} P(945 + 945P + 420P^2 + 105P^3 + 15P^4 + P^5)e^{-P}$
		5	3



Tablo 10.'un devamı

1	4	4	$\frac{\pi}{96\alpha^2}P(5 - P)e^{-P}$
	5	5	$\frac{\pi}{768\alpha^4}P(5 + 5P - P^2)e^{-P}$
		6	$\frac{\pi}{7680\alpha^6}P(15 + 15P + 4P^2 + P^3)e^{-P}$
		7	$\frac{\pi}{92160\alpha^8}P(75 + 75P + 27P^2 + 2P^3 - P^4)e^{-P}$
		8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{10}}P(525 + 525P + 210P^2 + 35P^3 - P^4 - P^5)e^{-P}$
2	4	2	$\frac{\pi}{4R}(1 + P)e^{-P}$
		3	$\frac{\pi e^{-P}}{16\alpha}P$
		4	$\frac{\pi}{96\alpha^3}P^2e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^5}P^2(1 + P)e^{-P}$
		6	$\frac{\pi}{7680\alpha^7}P^2(3 + 3P + P^2)e^{-P}$
	6	3	$\frac{\pi}{16R}(4 + 4P - P^2)e^{-P}$
		4	$\frac{\pi}{96\alpha}P(6 - P)e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^3}P^2(7 - P)e^{-P}$
		6	$\frac{\pi}{7680\alpha^5}P^2(7 + 7P - P^2)e^{-P}$
		7	$\frac{\pi}{92160\alpha^7}P^2(21 + 21P + 6P^2 - P^3)e^{-P}$
		8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^9}P^2(105 + 105P + 39P^2 + 4P^3 - P^4)e^{-P}$
3	5	3	$\frac{\pi}{16}(1 + P)e^{-P}$
		4	$\frac{\pi}{96\alpha^2}P^2e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^4}P^3e^{-P}$
		6	$\frac{\pi}{7680\alpha^6}P^3(1 + P)e^{-P}$
		7	$\frac{\pi}{92160\alpha^8}P^3(3 + 3P + P^2)e^{-P}$
		8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^{10}}P^3(15 + 15P + 6P^2 + P^3)e^{-P}$
	7	4	$\frac{\pi}{96}P^2(6 + 6P - P^2)e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^2}P^2(8 - P)e^{-P}$
		6	$\frac{\pi}{7680\alpha^4}P^3(9 - P)e^{-P}$
		7	$\frac{\pi}{92160\alpha^6}P^3(9 + 9P - P^2)e^{-P}$
		8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^8}P^3(27 + 27P + 8P^2 - P^3)e^{-P}$
	6	3	$\frac{\pi}{16R}(3 + 3P + P^2)e^{-P}$



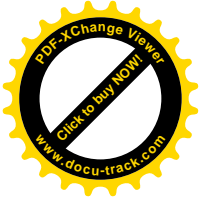
Tablo 10.'un devamı

---

4	6	4	$\frac{\pi}{96\alpha} P(6 + P)e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha^3} P^3 e^{-P}$
4	6	6	$\frac{\pi}{7680\alpha^5} P^4 e^{-P}$
		7	$\frac{\pi}{92160\alpha^7} P^4(1 + P)e^{-P}$
		8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^9} P^4(3 + 3P + P^2)e^{-P}$
8	4		$\frac{\pi}{96R} (18 + 18P + 5P^2 - P^3)e^{-P}$
		5	$\frac{\pi}{768\alpha} P(8 + 8P + P^2)e^{-P}$
		6	$\frac{\pi}{768\alpha^3} P^3(10 - P)e^{-P}$
		7	$\frac{\pi}{92160\alpha^5} P^4(11 - P)e^{-P}$
		8	$\frac{\pi}{1290240\alpha^7} P^4(11 + 11P - P^2)e^{-P}$

---





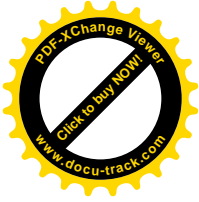
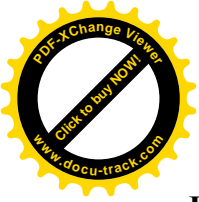
**Ek 6.  $A_{mm'}^M$  ve  $A_{nl}^s(\alpha)$  Fonksiyonları**

Tablo 11.  $A_{nl}^s(\alpha)$  fonksiyonunu sembolik değerleri (Denklem 94).

$s$	$n$	$l$	$A_{nl}^s(\alpha)$
0	1	0	1
	2	0	$2\alpha$
	2	1	2
	3	0	$6\alpha^2$
	3	1	$8\alpha$
	3	2	8
	4	0	$24\alpha^3$
	4	1	$40\alpha^2$
	4	2	$48\alpha$
	4	3	48
1	2	0	0
	3	0	-2
	3	1	0
	3	2	0
	4	0	$-24\alpha$
	4	1	-8
	4	2	0
	4	3	0
2	4	0	0

Tablo 12.  $A_{mm'}^M$  fonksiyonunu sembolik değerleri (Denklem 110).

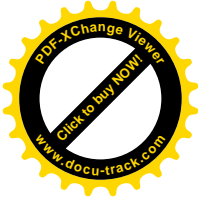
$M$	$m$	$m'$	$A_{mm'}^M$	
0	1	1	1	
	1	2	0	
	2	1	0	
	-1	1	0	
	1	-1	0	
	2	2	1	
	3	3	0	
	1	-1	1	0
		1	-1	0
		2	1	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
1		2	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	
2	1	-1	0	
	1	1	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	
	2	2	0	
	3	3	0	
	3	1	2	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
		2	1	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
3		3	0	
4		2	1	0
	1	2	0	
	2	2	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	
	3	3	0	



### Ek 7. $D_{nl}(\alpha, p)$ Fonksiyonun Sembolik Tablosu

Tablo 13.  $D_{nl}(\alpha, p)$  fonksiyonunun sembolik değerleri (Denklem 92).

$n$	$l$	$D_{nl}(\alpha, p)$
1	0	$\frac{1}{\alpha^2+p^2}$
2	0	$\frac{2\alpha}{(\alpha^2+p^2)^2}$
	1	$\frac{2p}{(\alpha^2+p^2)^2}$
3	0	$-\frac{2(-3\alpha^2+p^2)}{(\alpha^2+p^2)^3}$
	1	$\frac{8\alpha p}{(\alpha^2+p^2)^3}$
	2	$\frac{8p^2}{(\alpha^2+p^2)^3}$
4	0	$-\frac{24\alpha(-\alpha^2+p^2)}{(\alpha^2+p^2)^4}$
	1	$-\frac{8p(-5\alpha^2+p^2)}{(\alpha^2+p^2)^4}$
	2	$\frac{48\alpha p^2}{(\alpha^2+p^2)^4}$
	3	$\frac{48p^3}{(\alpha^2+p^2)^4}$
5	0	$\frac{24(5\alpha^4-10\alpha^2 p^2+p^4)}{(\alpha^2+p^2)^5}$
	1	$-\frac{48\alpha p(-5\alpha^2+3p^2)}{(\alpha^2+p^2)^5}$
	2	$-\frac{48p^2(-7\alpha^2+p^2)}{(\alpha^2+p^2)^5}$
	3	$\frac{384\alpha p^3}{(\alpha^2+p^2)^5}$
	4	$\frac{384p^4}{(\alpha^2+p^2)^5}$

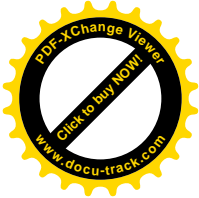
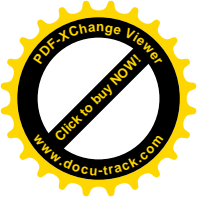


Tablo 13.'ün devamı

---

6	0	$\frac{240\alpha(3\alpha^4 - 10\alpha^2p^2 + 3p^4)}{(\alpha^2+p^2)^6}$
	1	$\frac{48p(35\alpha^4 - 42\alpha^2p^2 + 3p^4)}{(\alpha^2+p^2)^6}$
	2	$-\frac{384\alpha p^2(-7\alpha^2 + 3p^4)}{(\alpha^2+p^2)^6}$
	3	$-\frac{384p^3(-9\alpha^2 + p^2)}{(\alpha^2+p^2)^6}$
	4	$\frac{3840\alpha p^4}{(\alpha^2+p^2)^6}$
7	5	$\frac{3840p^5}{(\alpha^2+p^2)^6}$
	0	$-\frac{720(-7\alpha^6 + 35\alpha^4p^2 - 21\alpha^2p^4 + p^6)}{(\alpha^2+p^2)^7}$
	1	$\frac{1920\alpha p(7\alpha^4 - 14p + 3p^4)}{(\alpha^2+p^2)^7}$
	2	$\frac{1152p^2(21\alpha^4 - 18\alpha^2p^2 + p^4)}{(\alpha^2+p^2)^7}$
	3	$-\frac{11520\alpha p^3(-3\alpha^2 + p^2)}{(\alpha^2+p^2)^7}$
	4	$-\frac{3840p^4(-11\alpha^2 + p^2)}{(\alpha^2+p^2)^7}$
8	5	$\frac{46080\alpha p^5}{(\alpha^2+p^2)^7}$
	6	$\frac{46080p^6}{(\alpha^2+p^2)^7}$
	0	$-\frac{40320\alpha(-\alpha^6 + 7\alpha^4p^2 - 7\alpha^2p^4 + p^6)}{(\alpha^2+p^2)^8}$
	1	$-\frac{5760p(-21\alpha^6 + 63\alpha^4p^2 - 27\alpha^2p^4 + p^6)}{(\alpha^2+p^2)^8}$
	2	$-\frac{11520\alpha p^2(21\alpha^4 - 30\alpha^2p^2 + 5p^4)}{(\alpha^2+p^2)^8}$

---

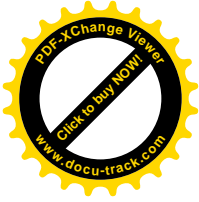
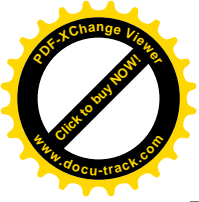


Tablo 13.' ün devamı

---

8	3	$\frac{11520p^3(33\alpha^4 - 22\alpha^2p^2 + p^4)}{(\alpha^2+p^2)^8}$
	4	$-\frac{46080ap^4(-11\alpha^2 + 3p^2)}{(\alpha^2+p^2)^8}$
	5	$-\frac{46080p^5(-13\alpha^2 + p^2)}{(\alpha^2+p^2)^8}$
	6	$\frac{645120ap^6}{(\alpha^2+p^2)^8}$
	7	$\frac{645120p^7}{(\alpha^2+p^2)^8}$
9	0	$-\frac{40320(9\alpha^8 - 84\alpha^6p^2 + 126\alpha^4p^4 - 36\alpha^2p^6 + p^8)}{(\alpha^2+p^2)^9}$
	1	$-\frac{80640ap(-15\alpha^6 + 63\alpha^4p^2 - 45\alpha^2p^4 + 5p^6)}{(\alpha^2+p^2)^9}$
	2	$-\frac{11520p^2(-231\alpha^6 + 495\alpha^4p^2 - 165\alpha^2p^4 + 5p^6)}{(\alpha^2+p^2)^9}$
	3	$\frac{46080ap^3(99\alpha^4 - 110\alpha^2p^2 + 15p^4)}{(\alpha^2+p^2)^9}$
	4	$\frac{46080p^4(143\alpha^4 - 78\alpha^2p^2 + 3p^4)}{(\alpha^2+p^2)^9}$
	5	$-\frac{645120ap^5(-13\alpha^2 + 3p^2)}{(\alpha^2+p^2)^9}$
	6	$-\frac{645120p^6(-15\alpha^2 + p^2)}{(\alpha^2+p^2)^9}$
	7	$\frac{10321920ap^7}{(\alpha^2+p^2)^9}$
	8	$\frac{10321920p^8}{(\alpha^2+p^2)^9}$
10	0	$\frac{725760\alpha(5\alpha^8 - 60\alpha^6p^2 + 126\alpha^4p^4 - 60\alpha^2p^6 + 5p^8)}{(\alpha^2+p^2)^{10}}$
	1	$\frac{80640p(165\alpha^8 - 924\alpha^6p^2 + 990\alpha^4p^4 - 220\alpha^2p^6 + 5p^8)}{(\alpha^2+p^2)^{10}}$

---

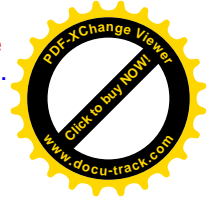
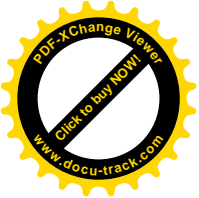


Tablo 13.' ün devamı

---

10	2	$-\frac{967680\alpha p^2(-33\alpha^6 + 99\alpha^4 p^2 - 55\alpha^2 p^4 + 5p^6)}{(\alpha^2 + p^2)^{10}}$
	3	$-\frac{138240p^3(-429\alpha^6 + 715\alpha^4 p^2 - 195\alpha^2 p^4 + 5p^6)}{(\alpha^2 + p^2)^{10}}$
	4	$\frac{645120\alpha p^4(143\alpha^4 - 130\alpha^2 p^2 + 15p^4)}{(\alpha^2 + p^2)^{10}}$
	5	$\frac{1935360p^5(65\alpha^4 - 30\alpha^2 p^2 + p^4)}{(\alpha^2 + p^2)^{10}}$
	6	$-\frac{30965760\alpha p^6(-5\alpha^2 + p^2)}{(\alpha^2 + p^2)^{10}}$
	7	$-\frac{10321920p^7(-17\alpha^2 + p^2)}{(\alpha^2 + p^2)^{10}}$
	8	$\frac{185794560\alpha p^8}{(\alpha^2 + p^2)^{10}}$
	9	$\frac{185794560p^9}{(\alpha^2 + p^2)^{10}}$

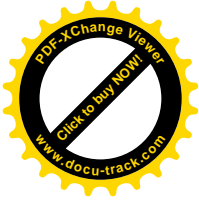
---



**Ek 8.**  $D_{n,l,n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  Fonksiyonun Sembolik Tablosu

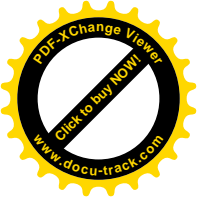
Tablo 14.  $D_{n,l,n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı fonksiyonun bazı sembolik değerleri (Denklem 119).

$L$	$n$	$l$	$n'$	$l'$	$D_{n,l,n',l'}^{2,L}(\zeta, \zeta'; R)$				
0	1	0	1	0	$A_{10}^0(\zeta) A_{10}^0(\zeta') F_{1,1}^{2,0}$				
					2	0	2	0	$A_{2,0}^0(\zeta) A_{2,0}^0(\zeta') F_{2,2}^{2,0}$
									3
	3	0	3	0	$A_{3,0}^0(\zeta) A_{3,0}^0(\zeta') F_{3,3}^{2,0} + 2A_{3,0}^0(\zeta) A_{3,0}^1(\zeta') F_{3,3}^{4,0} + A_{3,0}^1(\zeta) A_{3,0}^1(\zeta') F_{3,3}^{6,0}$				
					4	0	4	0	$A_{3,0}^0(\zeta) A_{4,0}^0(\zeta') F_{3,4}^{2,0} + A_{3,0}^0(\zeta) A_{4,0}^1(\zeta') F_{3,4}^{4,0} + A_{3,0}^1(\zeta) A_{4,0}^0(\zeta') F_{3,4}^{4,0} + A_{3,0}^1(\zeta) A_{4,0}^1(\zeta') F_{3,4}^{6,0}$
	4	0	4	0					$A_{4,0}^0(\zeta) A_{4,0}^0(\zeta') F_{4,4}^{2,0} + 2A_{4,0}^0(\zeta) A_{4,0}^1(\zeta') F_{4,4}^{4,0} + A_{4,0}^1(\zeta) A_{4,0}^1(\zeta') F_{4,4}^{6,0}$
					2	0	3	1	$A_{2,0}^0(\zeta) A_{3,1}^0(\zeta') F_{2,3}^{3,1}$
	3	0	3	1					$A_{3,0}^0(\zeta) A_{3,1}^0(\zeta') F_{3,3}^{3,1} + A_{3,0}^1(\zeta) A_{3,1}^0(\zeta') F_{3,3}^{5,1}$
					4	0	4	0	$A_{3,0}^0(\zeta) A_{4,0}^0(\zeta') F_{3,4}^{2,1} + A_{3,0}^0(\zeta) A_{4,0}^1(\zeta') F_{3,4}^{4,1} + A_{3,0}^1(\zeta) A_{4,0}^0(\zeta') F_{3,4}^{4,1} + A_{3,0}^1(\zeta) A_{4,0}^1(\zeta') F_{3,4}^{6,1}$
	4	1	4	1					$A_{3,0}^0(\zeta) A_{4,1}^0(\zeta') F_{3,4}^{3,1} + A_{3,0}^0(\zeta) A_{4,1}^1(\zeta') F_{3,4}^{5,1} + A_{3,0}^1(\zeta) A_{4,1}^0(\zeta') F_{3,4}^{5,1} + A_{3,0}^1(\zeta) A_{4,1}^1(\zeta') F_{3,4}^{7,1}$
1					4	4	0	$A_{3,1}^0(\zeta) A_{4,0}^0(\zeta') F_{3,4}^{3,1} + A_{3,1}^0(\zeta) A_{4,0}^1(\zeta') F_{3,4}^{5,1}$	
	4	1	4	1				$A_{3,1}^0(\zeta) A_{4,1}^0(\zeta') F_{3,4}^{4,1} + A_{3,1}^0(\zeta) A_{4,1}^1(\zeta') F_{3,4}^{6,1}$	



Tablo 14.'ün devamı

2	2	0	4	2	$A_{2,0}^0(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{2,4}^{4,2}$
	3	0	4	2	$A_{3,0}^0(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{3,4}^{4,2} + A_{3,0}^1(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{3,4}^{6,2}$
	3	1	3	1	$A_{3,1}^0(\zeta) A_{3,1}^0(\zeta') F_{3,3}^{4,2}$
2	3	1	4	1	$A_{3,1}^0(\zeta) A_{4,1}^0(\zeta') F_{3,4}^{4,2} + A_{3,1}^0(\zeta) A_{4,1}^1(\zeta') F_{3,4}^{6,2}$
	4	0	4	2	$A_{4,0}^0(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{4,4}^{4,2} + A_{4,0}^1(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{4,4}^{6,2}$
	4	1	4	1	$A_{4,1}^0(\zeta) A_{4,1}^0(\zeta') F_{4,4}^{4,2} + 2A_{4,1}^0(\zeta) A_{4,1}^1(\zeta') F_{4,4}^{6,2}$ $+ A_{4,1}^1(\zeta) A_{4,1}^1(\zeta') F_{4,4}^{8,2}$
	4	2	4	2	$A_{4,2}^0(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{4,4}^{6,2}$
3	3	1	4	2	$A_{3,1}^0(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{3,4}^{5,3}$
	4	1	4	2	$A_{4,1}^0(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{4,4}^{5,3} + A_{4,1}^1(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{4,4}^{7,3}$
4	4	2	4	2	$A_{4,2}^0(\zeta) A_{4,2}^0(\zeta') F_{4,4}^{6,4}$

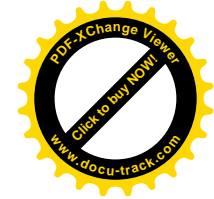
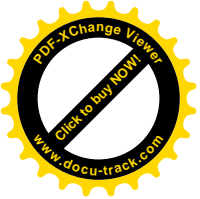


### Ek 9. $F_{nn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$ Fonksiyonun Sembolik Tablosu

Tablo 15.  $F_{nn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$  yardımcı fonksiyonun bazı sembolik değerleri (Denklem 123).

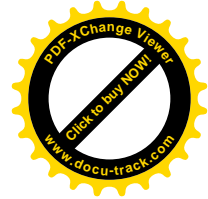
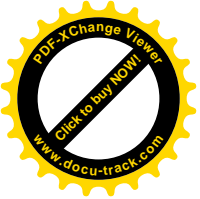
$m$	$L$	$n$	$n'$	$F_{nn'}^{mL}(\zeta, \zeta'; R)$
2	0	1	1	$\gamma_{11}^0(\zeta, \zeta')E_{2,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{11}^0(\zeta', \zeta)E_{2,1}^0(\zeta', R)$
2	0	2	2	$\gamma_{22}^0(\zeta, \zeta')E_{2,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{22}^1(\zeta, \zeta')E_{2,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{22}^0(\zeta', \zeta)E_{2,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{22}^1(\zeta', \zeta)E_{2,2}^0(\zeta', R)$
2	0	2	3	$\gamma_{23}^0(\zeta, \zeta')E_{2,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{23}^1(\zeta, \zeta')E_{2,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{32}^0(\zeta', \zeta)E_{2,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{32}^1(\zeta', \zeta)E_{2,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{32}^2(\zeta', \zeta)E_{2,3}^0(\zeta', R)$
2	0	3	3	$\gamma_{33}^0(\zeta, \zeta')E_{2,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{33}^1(\zeta, \zeta')E_{2,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{33}^2(\zeta, \zeta')E_{2,3}^0(\zeta, R) + \gamma_{33}^0(\zeta', \zeta)E_{2,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{33}^1(\zeta', \zeta)E_{2,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{33}^2(\zeta', \zeta)E_{2,3}^0(\zeta', R)$
2	0	3	4	$\gamma_{34}^0(\zeta, \zeta')E_{2,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta')E_{2,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta')E_{2,3}^0(\zeta, R) + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta)E_{2,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta)E_{2,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta)E_{2,3}^0(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta)E_{2,4}^0(\zeta', R)$
2	0	4	4	$\gamma_{44}^0(\zeta, \zeta')E_{2,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^1(\zeta, \zeta')E_{2,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^2(\zeta, \zeta')E_{2,3}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^3(\zeta, \zeta')E_{2,4}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^0(\zeta', \zeta)E_{2,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{44}^1(\zeta', \zeta)E_{2,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{44}^2(\zeta', \zeta)E_{2,3}^0(\zeta', R) + \gamma_{44}^3(\zeta', \zeta)E_{2,4}^0(\zeta', R)$
2	1	3	4	$\gamma_{34}^0(\zeta, \zeta')E_{2,1}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta')E_{2,2}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta')E_{2,3}^1(\zeta, R) + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta)E_{2,1}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta)E_{2,2}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta)E_{2,3}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta)E_{2,4}^1(\zeta', R)$
3	1	2	3	$\gamma_{23}^0(\zeta, \zeta')E_{3,1}^1(\zeta, R) + \gamma_{23}^1(\zeta, \zeta')E_{3,2}^1(\zeta, R) + \gamma_{32}^0(\zeta', \zeta)E_{3,1}^1(\zeta', R) + \gamma_{32}^1(\zeta', \zeta)E_{3,2}^1(\zeta', R) + \gamma_{32}^2(\zeta', \zeta)E_{3,3}^1(\zeta', R)$





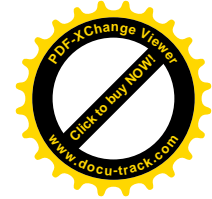
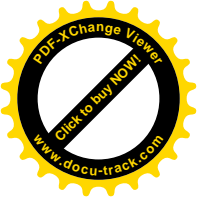
Tablo 15.'in devamı

3	1	3	3	$\begin{aligned} & \gamma_{33}^0(\zeta, \zeta') E_{3,1}^1(\zeta, R) + \gamma_{33}^1(\zeta, \zeta') E_{3,2}^1(\zeta, R) + \gamma_{33}^2(\zeta, \zeta') E_{3,3}^1(\zeta, R) \\ & + \gamma_{33}^0(\zeta', \zeta) E_{3,1}^1(\zeta', R) + \gamma_{33}^1(\zeta', \zeta) E_{3,2}^1(\zeta', R) + \gamma_{33}^2(\zeta', \zeta) E_{3,3}^1(\zeta', R) \end{aligned}$
3	1	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{3,1}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{3,2}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{3,3}^1(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{3,1}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{3,2}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{3,3}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{3,4}^1(\zeta', R) \end{aligned}$
4	0	2	3	$\gamma_{23}^0(\zeta, \zeta') E_{4,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{23}^1(\zeta, \zeta') E_{4,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{32}^0(\zeta', \zeta) E_{4,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{32}^1(\zeta', \zeta) E_{4,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{32}^2(\zeta', \zeta) E_{4,3}^0(\zeta', R)$
4	0	3	3	$\begin{aligned} & \gamma_{33}^0(\zeta, \zeta') E_{4,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{33}^1(\zeta, \zeta') E_{4,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{33}^2(\zeta, \zeta') E_{4,3}^0(\zeta, R) \\ & + \gamma_{33}^0(\zeta', \zeta) E_{4,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{33}^1(\zeta', \zeta) E_{4,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{33}^2(\zeta', \zeta) E_{4,3}^0(\zeta', R) \end{aligned}$
4	0	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{4,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{4,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{4,3}^0(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{4,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{4,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{4,3}^0(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{4,4}^0(\zeta', R) \end{aligned}$
4	0	4	4	$\begin{aligned} & \gamma_{44}^0(\zeta, \zeta') E_{4,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^1(\zeta, \zeta') E_{4,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^2(\zeta, \zeta') E_{4,3}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^3(\zeta, \zeta') E_{4,4}^0(\zeta, R) \\ & + \gamma_{44}^0(\zeta', \zeta) E_{4,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{44}^1(\zeta', \zeta) E_{4,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{44}^2(\zeta', \zeta) E_{4,3}^0(\zeta', R) + \gamma_{44}^3(\zeta', \zeta) E_{4,4}^0(\zeta', R) \end{aligned}$
4	1	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{4,1}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{4,2}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{4,3}^1(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{4,1}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{4,2}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{4,3}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{4,4}^1(\zeta', R) \end{aligned}$
4	2	2	4	$\begin{aligned} & \gamma_{24}^0(\zeta, \zeta') E_{4,1}^2(\zeta, R) + \gamma_{24}^1(\zeta, \zeta') E_{4,2}^2(\zeta, R) \\ & + \gamma_{42}^0(\zeta', \zeta) E_{4,1}^2(\zeta', R) + \gamma_{42}^1(\zeta', \zeta) E_{4,2}^2(\zeta', R) + \gamma_{42}^2(\zeta', \zeta) E_{4,3}^2(\zeta', R) + \gamma_{42}^3(\zeta', \zeta) E_{4,4}^2(\zeta', R) \end{aligned}$
4	2	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{4,1}^2(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{4,2}^2(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{4,3}^2(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{4,1}^2(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{4,2}^2(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{4,3}^2(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{4,4}^2(\zeta', R) \end{aligned}$



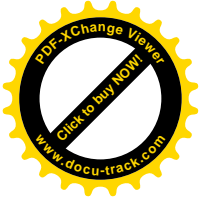
Tablo 15.'in devamı

4	2	3	3	$\begin{aligned} & \gamma_{33}^0(\zeta, \zeta') E_{4,1}^2(\zeta, R) + \gamma_{33}^1(\zeta, \zeta') E_{4,2}^2(\zeta, R) + \gamma_{33}^2(\zeta, \zeta') E_{4,3}^2(\zeta, R) \\ & + \gamma_{33}^0(\zeta', \zeta) E_{4,1}^2(\zeta', R) + \gamma_{33}^1(\zeta', \zeta) E_{4,2}^2(\zeta', R) + \gamma_{33}^2(\zeta', \zeta) E_{4,3}^2(\zeta', R) \end{aligned}$
4	2	4	4	$\begin{aligned} & \gamma_{44}^0(\zeta, \zeta') E_{4,1}^2(\zeta, R) + \gamma_{44}^1(\zeta, \zeta') E_{4,2}^2(\zeta, R) + \gamma_{44}^2(\zeta, \zeta') E_{4,3}^2(\zeta, R) + \gamma_{44}^3(\zeta, \zeta') E_{4,4}^2(\zeta, R) \\ & + \gamma_{44}^0(\zeta', \zeta) E_{4,1}^2(\zeta', R) + \gamma_{44}^1(\zeta', \zeta) E_{4,2}^2(\zeta', R) + \gamma_{44}^2(\zeta', \zeta) E_{4,3}^2(\zeta', R) + \gamma_{44}^3(\zeta', \zeta) E_{4,4}^2(\zeta', R) \end{aligned}$
5	1	3	3	$\begin{aligned} & \gamma_{33}^0(\zeta, \zeta') E_{5,1}^1(\zeta, R) + \gamma_{33}^1(\zeta, \zeta') E_{5,2}^1(\zeta, R) + \gamma_{33}^2(\zeta, \zeta') E_{5,3}^1(\zeta, R) \\ & + \gamma_{33}^0(\zeta', \zeta) E_{5,1}^1(\zeta', R) + \gamma_{33}^1(\zeta', \zeta) E_{5,2}^1(\zeta', R) + \gamma_{33}^2(\zeta', \zeta) E_{5,3}^1(\zeta', R) \end{aligned}$
5	1	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{5,1}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{5,2}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{5,3}^1(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{5,1}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{5,2}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{5,3}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{5,4}^1(\zeta', R) \end{aligned}$
5	3	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{5,1}^3(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{5,2}^3(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{5,3}^3(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{5,1}^3(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{5,2}^3(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{5,3}^3(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{5,4}^3(\zeta', R) \end{aligned}$
5	3	4	4	$\begin{aligned} & \gamma_{44}^0(\zeta, \zeta') E_{5,1}^3(\zeta, R) + \gamma_{44}^1(\zeta, \zeta') E_{5,2}^3(\zeta, R) + \gamma_{44}^2(\zeta, \zeta') E_{5,3}^3(\zeta, R) + \gamma_{44}^3(\zeta, \zeta') E_{5,4}^3(\zeta, R) \\ & + \gamma_{44}^0(\zeta', \zeta) E_{5,1}^3(\zeta', R) + \gamma_{44}^1(\zeta', \zeta) E_{5,2}^3(\zeta', R) + \gamma_{44}^2(\zeta', \zeta) E_{5,3}^3(\zeta', R) + \gamma_{44}^3(\zeta', \zeta) E_{5,4}^3(\zeta', R) \end{aligned}$
6	0	3	3	$\begin{aligned} & \gamma_{33}^0(\zeta, \zeta') E_{6,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{33}^1(\zeta, \zeta') E_{6,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{33}^2(\zeta, \zeta') E_{6,3}^0(\zeta, R) \\ & + \gamma_{33}^0(\zeta', \zeta) E_{6,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{33}^1(\zeta', \zeta) E_{6,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{33}^2(\zeta', \zeta) E_{6,3}^0(\zeta', R) \end{aligned}$
6	0	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{6,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{6,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{6,3}^0(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{6,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{6,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{6,3}^0(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{6,4}^0(\zeta', R) \end{aligned}$



Tablo 15.'in devamı

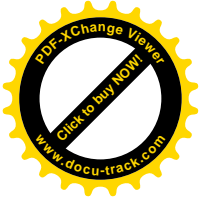
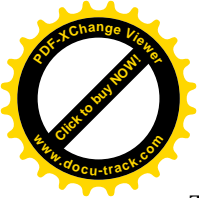
6	0	4	4	$\begin{aligned} & \gamma_{44}^0(\zeta, \zeta') E_{6,1}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^1(\zeta, \zeta') E_{6,2}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^2(\zeta, \zeta') E_{6,3}^0(\zeta, R) + \gamma_{44}^3(\zeta, \zeta') E_{6,4}^0(\zeta, R) \\ & + \gamma_{44}^0(\zeta', \zeta) E_{6,1}^0(\zeta', R) + \gamma_{44}^1(\zeta', \zeta) E_{6,2}^0(\zeta', R) + \gamma_{44}^2(\zeta', \zeta) E_{6,3}^0(\zeta', R) + \gamma_{44}^3(\zeta', \zeta) E_{6,4}^0(\zeta', R) \end{aligned}$
6	1	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{6,1}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{6,2}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{6,3}^1(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{6,1}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{6,2}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{6,3}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{6,4}^1(\zeta', R) \end{aligned}$
6	2	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{6,1}^2(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{6,2}^2(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{6,3}^2(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{6,1}^2(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{6,2}^2(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{6,3}^2(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{6,4}^2(\zeta', R) \end{aligned}$
6	2	4	4	$\begin{aligned} & \gamma_{44}^0(\zeta, \zeta') E_{6,1}^2(\zeta, R) + \gamma_{44}^1(\zeta, \zeta') E_{6,2}^2(\zeta, R) + \gamma_{44}^2(\zeta, \zeta') E_{6,3}^2(\zeta, R) + \gamma_{44}^3(\zeta, \zeta') E_{6,4}^2(\zeta, R) \\ & + \gamma_{44}^0(\zeta', \zeta) E_{6,1}^2(\zeta', R) + \gamma_{44}^1(\zeta', \zeta) E_{6,2}^2(\zeta', R) + \gamma_{44}^2(\zeta', \zeta) E_{6,3}^2(\zeta', R) + \gamma_{44}^3(\zeta', \zeta) E_{6,4}^2(\zeta', R) \end{aligned}$
6	4	4	4	$\begin{aligned} & \gamma_{44}^0(\zeta, \zeta') E_{6,1}^4(\zeta, R) + \gamma_{44}^1(\zeta, \zeta') E_{6,2}^4(\zeta, R) + \gamma_{44}^2(\zeta, \zeta') E_{6,3}^4(\zeta, R) + \gamma_{44}^3(\zeta, \zeta') E_{6,4}^4(\zeta, R) \\ & + \gamma_{44}^0(\zeta', \zeta) E_{6,1}^4(\zeta', R) + \gamma_{44}^1(\zeta', \zeta) E_{6,2}^4(\zeta', R) + \gamma_{44}^2(\zeta', \zeta) E_{6,3}^4(\zeta', R) + \gamma_{44}^3(\zeta', \zeta) E_{6,4}^4(\zeta', R) \end{aligned}$
7	1	3	4	$\begin{aligned} & \gamma_{34}^0(\zeta, \zeta') E_{7,1}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^1(\zeta, \zeta') E_{7,2}^1(\zeta, R) + \gamma_{34}^2(\zeta, \zeta') E_{7,3}^1(\zeta, R) \\ & + \gamma_{43}^0(\zeta', \zeta) E_{7,1}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^1(\zeta', \zeta) E_{7,2}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^2(\zeta', \zeta) E_{7,3}^1(\zeta', R) + \gamma_{43}^3(\zeta', \zeta) E_{7,4}^1(\zeta', R) \end{aligned}$
7	3	4	4	$\begin{aligned} & \gamma_{44}^0(\zeta, \zeta') E_{7,1}^3(\zeta, R) + \gamma_{44}^1(\zeta, \zeta') E_{7,2}^3(\zeta, R) + \gamma_{44}^2(\zeta, \zeta') E_{7,3}^3(\zeta, R) + \gamma_{44}^3(\zeta, \zeta') E_{7,4}^3(\zeta, R) \\ & + \gamma_{44}^0(\zeta', \zeta) E_{7,1}^3(\zeta', R) + \gamma_{44}^1(\zeta', \zeta) E_{7,2}^3(\zeta', R) + \gamma_{44}^2(\zeta', \zeta) E_{7,3}^3(\zeta', R) + \gamma_{44}^3(\zeta', \zeta) E_{7,4}^3(\zeta', R) \end{aligned}$
8	2	4	4	$\begin{aligned} & \gamma_{44}^0(\zeta, \zeta') E_{8,1}^2(\zeta, R) + \gamma_{44}^1(\zeta, \zeta') E_{8,2}^2(\zeta, R) + \gamma_{44}^2(\zeta, \zeta') E_{8,3}^2(\zeta, R) + \gamma_{44}^3(\zeta, \zeta') E_{8,4}^2(\zeta, R) \\ & + \gamma_{44}^0(\zeta', \zeta) E_{8,1}^2(\zeta', R) + \gamma_{44}^1(\zeta', \zeta) E_{8,2}^2(\zeta', R) + \gamma_{44}^2(\zeta', \zeta) E_{8,3}^2(\zeta', R) + \gamma_{44}^3(\zeta', \zeta) E_{8,4}^2(\zeta', R) \end{aligned}$



**Ek 10.  $H_{nlm,n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta')$  Fonksiyonun Sembolik Tablosu**

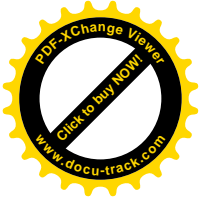
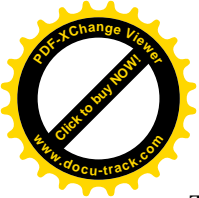
Tablo 16.  $H_{nlm,n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta')$  fonksiyonun bazı sembolik deęerleri (Denklem 114).

$L$	$M$	$n$	$l$	$m$	$n'$	$l'$	$m'$	$H_{nlm,n'l'm'}^{LM}(\zeta, \zeta')$
0	0	1	0	0	1	0	0	$16\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}} \zeta'^{\frac{3}{2}}$
		1	0	0	2	0	0	$\frac{16}{3}\sqrt{3/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}} \zeta'^{\frac{5}{2}}$
		1	0	0	3	0	0	$\frac{16}{15}\sqrt{10/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	0	0	2	0	0	$\frac{16}{3}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}} \zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	0	0	3	0	0	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	1	2	1	1	$\frac{16}{3}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}} \zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	1	1	3	1	1	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	0	2	1	0	$\frac{16}{3}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}} \zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	1	0	3	1	0	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	2	1	-1	$\frac{16}{3}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}} \zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	1	-1	3	1	-1	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	0	0	3	0	0	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	1	1	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	0	3	1	0	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	1	-1	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	2	3	2	2	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	1	3	2	1	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	0	3	2	0	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}} \zeta'^{\frac{7}{2}}$



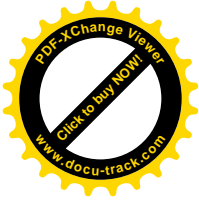
Tablo 16.'nın devamı

0	0	3	2	-1	3	2	-1	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-2	3	2	-2	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
1	1	1	0	0	2	1	1	$\frac{16}{3}\sqrt{3/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		1	0	0	3	1	1	$\frac{16}{15}\sqrt{10/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	0	0	2	1	1	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	0	0	3	1	1	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	1	3	0	0	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	0	0	3	1	1	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	2	2	$\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	2	0	$\frac{32}{225}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	0	3	2	1	$\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	2	-2	$\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
1	0	1	0	0	2	1	0	$-\frac{16}{3}\sqrt{3/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		1	0	0	3	1	0	$-\frac{16}{15}\sqrt{10/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	0	0	2	1	0	$-\frac{16}{3}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	1	1	3	2	1	$-\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	1	3	2	-1	$-\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	0	3	0	0	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	0	3	2	0	$-\frac{32}{45}\sqrt{6/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	2	-1	$-\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$



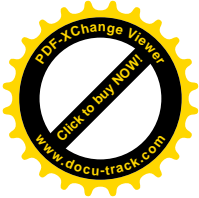
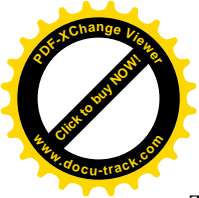
Tablo 16.' nin devamı

1	0	3	0	0	3	1	0	$-\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	2	1	$-\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	0	3	2	0	$-\frac{64}{225}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	2	1	$-\frac{64}{225}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	2	-1	$-\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
1	-1	1	0	0	2	1	-1	$\frac{16}{3}\sqrt{3/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		1	0	0	3	1	-1	$\frac{16}{15}\sqrt{10/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	0	0	2	1	-1	$\frac{16}{3}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	0	0	3	1	-1	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	1	3	2	-2	$\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	0	3	2	-1	$\frac{16}{15}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	0	0	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	2	2	$-\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	2	0	$\frac{16}{45}\sqrt{6/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	0	0	3	1	-1	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	2	-2	$\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	0	3	2	-1	$\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	2	2	$-\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
2	2	1	0	0	3	2	2	$\frac{16}{15}\sqrt{10/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	0	0	3	2	2	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$



Tablo 16.' nin devamı

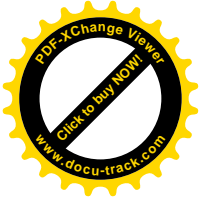
2	2	2	1	1	2	1	1	$\frac{16}{15}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	1	1	3	1	1	$\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	2	1	-1	$-\frac{16}{15}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	1	-1	3	1	-1	$-\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	0	0	3	2	2	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	1	1	$\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	1	-1	$-\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	2	3	2	0	$\frac{64}{315}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	1	3	2	1	$\frac{32}{315}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-1	3	2	-1	$-\frac{32}{315}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
2	1	1	0	0	3	2	1	$-\frac{16}{15}\sqrt{10/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	0	0	3	2	1	$-\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	1	3	1	0	$-\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	0	3	1	1	$\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	0	0	3	2	1	$-\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	1	0	$-\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	2	3	2	1	$-\frac{32}{315}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-1	3	2	-2	$\frac{32}{315}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
2	0	1	0	0	3	2	0	$\frac{16}{15}\sqrt{10/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	1	2	1	1	$\frac{16}{15}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$



Tablo 16.' nin devamı

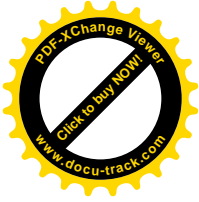
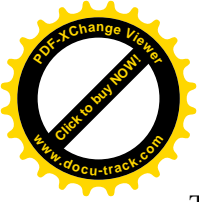
2	0	2	1	1	3	1	1	$\frac{16}{45}\sqrt{6/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	0	2	1	0	$-\frac{32}{15}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	1	0	3	1	0	$-\frac{32}{45}\sqrt{6/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	1	-1	$\frac{16}{45}\sqrt{6/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	0	0	3	2	0	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	1	1	$\frac{32}{225}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	0	3	1	0	$-\frac{64}{225}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	1	-1	$\frac{32}{225}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	2	3	2	2	$\frac{64}{315}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	1	3	2	1	$-\frac{32}{315}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	0	3	2	0	$-\frac{64}{315}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-1	3	2	-1	$-\frac{32}{315}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-2	3	2	-2	$\frac{64}{315}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
2	-1	1	0	0	3	2	-1	$-\frac{16}{15}\sqrt{10/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	0	0	3	2	-1	$-\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	0	3	1	-1	$\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	1	0	$-\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	0	0	3	2	-1	$-\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	2	3	2	-1	$\frac{32}{315}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	0	3	2	-1	$\frac{32}{315}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$





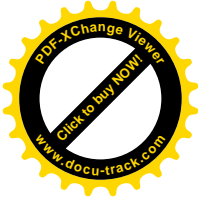
Tablo 16.' nin devamı

2	-2	1	0	0	3	2	-2	$\frac{16}{15}\sqrt{10/\pi} \zeta^{\frac{3}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	0	0	3	2	-2	$\frac{16}{45}\sqrt{30/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	1	2	1	-1	$\frac{16}{15}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		2	1	1	3	1	-1	$\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	1	1	$\frac{16}{15}\sqrt{2/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{5}{2}}$
		3	0	0	3	2	-2	$\frac{32}{45}\sqrt{1/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	1	-1	$\frac{32}{225}\sqrt{15/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	0	3	2	-2	$\frac{64}{315}\sqrt{5/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
3	3	2	1	1	3	2	2	$\frac{16}{105}\sqrt{105/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	2	-2	$-\frac{16}{105}\sqrt{105/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	2	-2	$-\frac{16}{105}\sqrt{14/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
3	2	2	1	1	3	2	1	$-\frac{16}{105}\sqrt{70/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	0	3	2	2	$\frac{16}{105}\sqrt{70/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	2	-1	$\frac{16}{105}\sqrt{70/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	0	3	2	-2	$\frac{32}{315}\sqrt{21/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	2	-1	$\frac{32}{315}\sqrt{21/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
3	1	2	1	1	3	2	2	$\frac{16}{105}\sqrt{7/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	1	3	2	0	$\frac{32}{105}\sqrt{21/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	0	3	2	1	$-\frac{64}{105}\sqrt{7/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	1	3	2	2	$\frac{16}{1575}\sqrt{210/\pi} \zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$



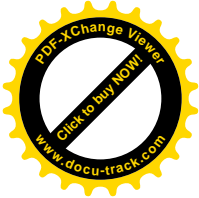
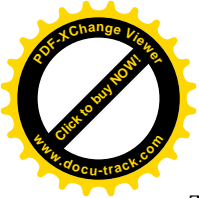
Tablo 16.' nin devamı

3	1	3	1	1	3	2	0	$\frac{32}{525}\sqrt{70/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	0	3	2	1	$-\frac{64}{1575}\sqrt{210/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	-1	3	2	-2	$\frac{16}{1575}\sqrt{210/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
3	0	2	1	0	3	2	0	$\frac{16}{35}\sqrt{14/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		2	1	-1	3	2	-1	$-\frac{16}{105}\sqrt{42/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	0	3	2	0	$\frac{32}{525}\sqrt{105/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	-1	3	2	-1	$-\frac{32}{525}\sqrt{35/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
3	-1	2	1	1	3	2	-2	$\frac{16}{105}\sqrt{7/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		2	1	0	3	2	-1	$-\frac{64}{105}\sqrt{7/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		2	1	-1	3	1	2	$-\frac{16}{105}\sqrt{7/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		2	1	-1	3	2	0	$\frac{32}{105}\sqrt{21/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	1	3	2	-2	$\frac{16}{1575}\sqrt{210/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	0	3	2	-1	$-\frac{64}{1575}\sqrt{210/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	-1	3	2	2	$-\frac{16}{1575}\sqrt{210/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	-1	3	2	0	$\frac{32}{525}\sqrt{70/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
3	-2	2	1	1	3	2	-1	$-\frac{16}{105}\sqrt{70/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		2	1	0	3	2	-2	$\frac{16}{105}\sqrt{70/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		2	1	-1	3	2	1	$-\frac{16}{105}\sqrt{70/\pi} \zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	1	3	2	-1	$-\frac{32}{315}\sqrt{21/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$
		3	1	0	3	2	-2	$\frac{32}{315}\sqrt{21/\pi} \zeta^{\frac{1}{2}}\zeta'^{\frac{1}{2}}$



Tablo 16.' nin devamı

3	-2	3	1	-1	3	2	1	$-\frac{32}{315}\sqrt{21/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
3	-3	2	1	1	3	2	-2	$\frac{16}{105}\sqrt{105/\pi}\zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		2	1	-1	3	2	2	$\frac{16}{105}\sqrt{105/\pi}\zeta^{\frac{5}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	1	-1	3	2	-2	$\frac{16}{105}\sqrt{14/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
4	4	3	2	2	3	2	2	$\frac{32}{315}\sqrt{35/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-2	3	2	-2	$-\frac{32}{315}\sqrt{35/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
4	3	3	2	2	3	2	1	$-\frac{16}{315}\sqrt{70/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-1	3	2	-2	$-\frac{16}{315}\sqrt{70/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
4	2	3	2	2	3	2	0	$\frac{32}{315}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	1	3	2	1	$-\frac{64}{315}\sqrt{5/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-1	3	2	-1	$\frac{64}{315}\sqrt{5/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
4	1	3	2	2	3	2	-1	$-\frac{16}{315}\sqrt{10/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	1	3	2	0	$\frac{32}{315}\sqrt{30/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-1	3	2	-2	$\frac{16}{315}\sqrt{10/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
4	0	3	2	0	3	2	0	$\frac{16}{315}\sqrt{10/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	1	3	2	1	$-\frac{128}{315}\sqrt{1/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	0	3	2	0	$\frac{64}{105}\sqrt{1/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-1	3	2	-1	$-\frac{128}{315}\sqrt{1/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	-2	3	2	-2	$\frac{32}{315}\sqrt{1/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
4	-1	3	2	2	3	2	-1	$\frac{16}{315}\sqrt{10/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$



Tablo 16.' nin devamı

---

4	-1	3	2	0	3	2	-1	$-\frac{32}{315}\sqrt{30/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
4	-2	3	2	1	3	2	-2	$\frac{16}{315}\sqrt{10/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
		3	2	0	3	2	-2	$\frac{32}{315}\sqrt{15/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
4	-3	3	2	2	3	2	-1	$-\frac{16}{315}\sqrt{70/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$
4	-4	3	2	2	3	2	-2	$\frac{32}{315}\sqrt{35/\pi}\zeta^{\frac{7}{2}}\zeta'^{\frac{7}{2}}$

---



## ÖZGEÇMİŞ

1986 yılında Trabzon'da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Trabzon'da tamamladı. 2004 yılında Karadeniz Teknik Üniversitesi Rize Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümüne kayıt yaptırdı. 2008 yılında üniversite eğitimini başarıyla tamamladı. 2009 yılında Rize Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik anabilim dalında tezli yüksek lisans programına kayıt yaptırdı.

Ayşe NALÇACI, halen aynı üniversitede öğrenimine devam etmektedir.