

**GRAMM-SCHMIDT YÖNTEMİ KULLANILARAK
SLATER TİPİ ATOM ORBİTALLERİNİN
ORTANORMALLEŞTİRİLMESİ**

**Elif SOMUNCU
Y.Lisans Tezi
Fizik Anabilim Dalı**

Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

**2010
Her Hakkı Saklıdır**

**T.C.
GAZİOSMANPAŞA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**

Y.LİSANS TEZİ

**GRAMM-SCHMIDT YÖNTEMİ KULLANILARAK SLATER TİPİ ATOM
ORBİTALLERİNİN ORTANORMALLEŞTİRİLMESİ**

Elif SOMUNCU

**TOKAT
2010**

Her hakkı saklıdır

Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU danışmanlığında, Elif SOMUNCU tarafından hazırlanan bu çalışma 16/08/2010 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği/oy çokluğu ile Fizik Anabilim Dalı'nda Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Prof. Dr. Muzaffer CAN

İmza :

Üye: Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

İmza :

Üye: Yrd. Doç. Dr.İbrahim YİĞİTOĞLU

İmza :

Yukarıdaki sonucu onaylarım


Prof. Dr. Metin YILDIRIM
Enstitü Müdürü
21.08.2010

TEZ BEYANI

Tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu tezin yazılmasında bilimsel ahlak kurallarına uyulduğunu, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunulduğunu, tezin içerdiği yenilik ve sonuçların başka bir yerden alınmadığını, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, tezin herhangi bir kısmının bu üniversite veya başka bir üniversitedeki başka bir tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

Elif SOMUNCU

ÖZET

Y.Lisans Tezi

**GRAMM-SCHMIDT YÖNTEMİ KULLANILARAK
SLATER TİPİ ATOM ORBİTALLERİNİN
ORTANORMALLEŞTİRİLMESİ**

Elif SOMUNCU

**Gaziosmanpaşa Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı**

Danışman: Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

Moleküler orbital teoride birçok yaklaşık yöntem geliştirilmiştir. Bu teorik yöntemlerden en çok kullanılanı Hatree-Fock-Roothaan özuyumlu alan yaklaşımıdır. Bu yaklaşımdaki hesaplamalar için uygun atomik orbitaller seçilmelidir. Yaygın olarak kullanılan iki çeşit atomik orbital vardır: Slater tipi orbitaller ve Gaussian tipi orbitaller. Bu çalışmada Slater tipi orbitaller incelenmiştir. Bilindiği gibi Slater tipi orbitaller, elektronik yapı hesaplamalarında bazı zorluklar ortaya çıkaran baş kuantum sayılarına göre ortagonal değildir. Gramm-Schmidt Dikleştirme yöntemi kullanılarak bilinen Slater tipi orbitallerden den büyük baş kuantum sayıları için ortagonal ve ortanormal Slater tipi orbitaller oluşturulmuştur.

2010, 62 Sayfa

Anahtar Kelimeler: Slater Tipi Orbitaller, Gramm-Schmidt Dikleştirme Yöntemi, Hatree-Fock-Roothaan Teorisi

ABSTRACT

Ms Thesis

ORTHONORMALIZING OF SLATER TYPE ATOM ORBITALS BY USING GRAMM-SCHMIDT PROCEDURE

Elif SOMUNCU

**Gaziosmanpaşa University Graduate School of
Natural and Applied Science Department of Physics
Science**

Supervisor: Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

In the molecular orbital theory have been developed a lot of approximate methods. The most frequently used theoretical method is Hartree-Fock-Roothaan Self Consistent Field approach. In this approach for calculations should be chosen appropriate atomic orbitals. There are two varieties of atomic orbitals used as widespread: Slater type orbitals and Gaussian type orbitals. In this work, Slater type orbitals have been observed. It is well known that the Slater type orbitals are not orthogonal with respect to the principal quantum numbers which creates some difficulties in electronic structure calculations. By the use of Gram-Schmidt orthogonalizing procedure, from the conventional Slater type orbitals, we have derived orthogonalized and orthonormalized Slater type orbitals for the high principal quantum numbers.

2010, 62 Pages

Key Words: Slater Type Orbitals, Gram-Schmidt Orthogonalizing Method, Hartree-Fock-Roothaan Theory.

TEŐEKKÖR

Y.Lisans alıŐmalarım süresince bana her türlü kolaylıđı sađlayan, karŐılaŐtıđım zorluklarda bana yol gösteren ve bu alıŐmanın oluŐmasında bilgi ve deneyimlerini benden esirgemeyen danıŐman hocam sayın Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOđLU'na en içten teŐekkÖrlerimi sunarım.

Her zaman bilgilerinden yararlandıđım deđerli hocam sayın Prof. Dr. İskender ASKEROđLU'na ve Do. Dr. Uđur KÖLEMEN'ne teŐekkÖrlerimi sunarım. Tez alıŐmamın her aŐamasında bana yardımlarını esirgemeyen deđerli hocalarım ve arkadaşlarım, ArŐ. Gör. Erhan ESER'e, ArŐ. Gör. Songöl FİAT'a, Ebru OPUROđLUN'a ve Aysun KARACA 'ya teŐekkÖr ederim.

Hayatım boyunca maddi ve manevi olarak hep yanımda olan canım aileme ok teŐekkÖr ederim.

Elif SOMUNCU

Mayıs 2010

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ	v
ÇİZELGELER DİZİNİ	vi
1. GİRİŞ	1
2. GENEL BİLGİLER	6
2.1 Çok Elektronlu Sistemlerde Shrödinger Denklemi.....	6
2.2 Moleküler Orbital Yaklaşımı.....	9
2.3 Determinant Dalga Fonksiyonu ve Antisimetrik Özellikleri.....	15
2.4 Moleküler Orbital Teoride Atomik Orbitaller.....	18
3. MATERYAL VE YÖNTEM	20
3.1 Atomik Orbitaller.....	20
3.2 Gaussian Tipi Orbitaller.....	22
3.3 Slater Tipi Orbitaller.....	24
3.4 Gramm-Schmidt Dikleştirme Yöntemi.....	27
4. BULGULAR	29
4.1 Slater Tipi Atom Orbitallerinin Ortogonal Duruma Getirilmesi.....	29
4.2 Baş Kuantum Sayısı 1'den 7'ye Kadar Olan Slater Tipi Orbitallerin Ortanormal Duruma Getirilmesi.....	32
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	48
KAYNAKLAR	49
ÖZGEÇMİŞ	

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil	<u>Sayfa</u>
Şekil 2.1 μ . elektronun incelenen elektrona uzaklığı.....	10
Şekil 2.2 μ .elektronun çekirdeğe uzaklığı.....	11
Şekil 3.1 Gaussian ve Slater tipi orbitallerin grafik gösterimi	25
Şekil 3.2 STO-nG nin gösterimi.....	26

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge	<u>Sayfa</u>
Çizelge 4.1. Eşitlik 4.1 kullanılarak STO'ların ortagonalleştirilmesi.....	34
Çizelge 4.2. Eşitlik 4.7 kullanılarak STO'ların ortanormalleştirilmesi.....	41

1. GİRİŞ

Moleküler yapı teorisinin amacı, atomik çekirdeklerin ve elektronların birbirleriyle olan etkileşimlerini ve hareketlerini incelemektir. Temelde bu gibi teoriler moleküllerin yapısının ve kimyasal özelliklerinin nicel tanımını doğru bir şekilde yapmayı amaçlar. Günümüzde bu teoriler Schrödinger denklemini baz alan kuantum teorisine bağlı yaklaşımlar kullanılarak sağlanmaktadır. Ancak Schrödinger denkleminin çok elektronlu sistemler için çözümü zordur. Bu zorluğu aradan kaldırmak için değişik yaklaşık yöntemlere başvurulmalıdır.

Moleküler kuantum mekaniğinde kullanılan temel yaklaşık yöntemler; değerlik bağ teorisi ve moleküler orbital teorisidir (Mulliken, 1967).

Değerlik bağ teorisi, moleküllerdeki kovalent bağlanmayı kuantum mekaniği ile açıklayarak, atomlar arasında bağ oluşturan elektron çiftleri kavramına matematiksel yorum getirir. Bu teoriye göre; iki atomun orbitalleri örtüşürse bir kovalent bağ meydana gelir.

Değerlik bağ teorisi; ilk olarak hidrojen molekülü üzerine yapılan çalışmalarıyla London ve Heitler tarafından ileri sürülmüştür (London ve Heitler, 1927). Daha sonra bu teori Pauling tarafından geliştirilmiştir (Pauling, 1935).

Moleküler orbital teori; ilk olarak iki atomlu moleküllerin band spektroskopisi çalışmaları ile başlamıştır. Moleküler orbital (MO) teori, atomik orbitallerin birbiri ile etkileşimlerini ve bunun sonucu olarak moleküler orbitallerin oluşumu üzerine özellikle kovalent bağları açıklamada oldukça başarılı olan bir teoridir. Kuantum fiziğinden yararlanarak orbitallerin hangi durumlarda bağ oluşturacaklarını veya oluşturmayacaklarını açıklamaya çalışır. Bu teori günümüzde moleküler yapıların teorik olarak incelenmesinde yaygın olarak kullanılmaktadır.

Molekül orbital teori pek çok açıdan molekülün yapısını ve farklı moleküller özelliklerini tanımlamak için kullanılmıştır. Asıl çalışmalar Hund, Mulliken, Lennard-Jones ve Slater tarafından yapılmıştır. Bu noktada moleküller orbital teori çalışmalarında karşılaşılan problemler ve teoriler dikkate alınmıştır.

Moleküler orbital teoriye göre molekülde incelenen elektronun çekirdeklerin veya geriye kalan elektronların ortalama alanında hareket ettiği düşünülür. Buradan alınan bir elektronlu dalga fonksiyonuna moleküler orbital denir. Moleküler orbital teori sadece bir elektronlu moleküler için moleküllerin elektronik yapı tanımını sağlamakla kalmaz, aynı zamanda çok elektronlu moleküller için iyi bir yaklaşık yöntem sağlar.

Çok elektronlu sistemlerde, MO teorisinin uygulanabilmesi için, sistemin moleküler orbitallerinin belirlenmesi gerekir. Kuantum mekaniğinin başlarından itibaren MO teorisi devamlı gelişerek kimyanın birçok alanının aydınlatılmasında ve moleküllerin elektronik yapılarının incelenmesinde çok faydalı bir teori haline gelmiştir.

Çoğu sistemlerde moleküllerin özelliklerinin hesaplanması, moleküler orbital teoride matematiksel problemlere indirgenebilir (Roothan, 1951). Burada en önemli husus sistemin etkin etkileşme enerji matrisinin köşegenleştirilmesi ve hesaplanmasıdır. Bu hesaplamaları yapabilmek için günümüze kadar birçok bilgisayar programı geliştirilmiştir.

Atom ve moleküllerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin incelenmesinde moleküler orbital teori, gerekli olan tam bir dalga fonksiyonunun hesabı için geliştirilen teorik yöntemlerde ab initio ve yarı deneysel tekniklerde kullanılmaktadır.

Ab initio kuantum mekaniksel yöntemlere dayanır ve bu yöntemler ile elektronik yapı ve buna bağlı özellikler hesaplanabilir. Hesaplama süresi çok fazladır. Hesaplama süresini azaltmada bazı yaklaşımlar yapılabilir. Fakat böyle bir yol moleküler yapıyla ilgili bilgilerde çok az da olsa sapmaya neden olabilir.

Ab initio hesaplamalarında çok merkezli integrallerin hesaplanması oldukça zordur. Ancak son yıllarda bilgisayar teknolojisindeki gelişmeler sayesinde, ab-initio tam teorik yaklaşım içerisindeki matematiksel problemleri aşabilecek bilgisayar programları yapılmıştır (Jones, 1984).

Moleküler orbital teorisinin matematiksel yapısı içindeki yaklaşımlar, hesaplamalarda birçok sadeleştirmeleri yapan yöntemlere dayanmaktadır. Moleküllere ait deneysel veriler fiziksel nicelikleri incelemek için parametre olarak kullanılmaktadır. Bu yüzden bu tip yöntemlere yarı deneysel yöntem denir. Yarı deneysel yöntemler büyük düzlemsel moleküllere başarı ile uygulanır.

Moleküler orbital teorisinin pek çok uygulamaları, sistem için moleküler orbitallerin mutlaka doğru olmasını gerektirmez. Pek çok fiziksel ve kimyasal problemlerde moleküler orbitallerin bilimsel şekli olan deneysel veya yarı deneysel yöntemler gerekli bilgiyi tamamlamak için yeterlidir. Bu amaca hizmet etmek için moleküler orbital teori yaklaşımı iyi bir gelişme olarak dikkate alınabilir.

MO teori içerisinde birçok yaklaşık yöntem geliştirilmiştir. Bu yaklaşık yöntemler kuantum mekaniksel sistemlerin kararlı enerji değerlerinin bulunmasını amaçlamaktadır. Birinci yaklaşım, temel deneysel düşünceden gelen enerji etkileşimine göre matris elemanları için uygun değerlerin seçildiği yaklaşımdır. Bu uygulama Hückel karakteristiğidir ve genelleştirilmiş Hückel yöntemleri olarak adlandırılır (Hückel, 1931; Hoffman, 1963; Pople, 1964; Santry, 1965). Bu metot Roald Hoffmann tarafından geliştirilmiş olup, kuantum kimyasına dayalı yarı deneysel bir yöntemdir (Hoffmann, 1963).

Geliştirilen ikinci yaklaşım ise tam olarak matematiksel formüllere dayanmakta olup matris elemanlarında ortaya çıkan atomik ve moleküler integrallerin hesaplandığı teorik yöntemlerdir. Bu teorik yaklaşımlardan en çok kullanılanları, varyasyon yöntemine dayanan Hartree-Fock-Roothaan (HFR) öz uyumlu alan teorisidir. HFR yaklaşımına alternatif olarak geliştirilen toplam yük yoğunluğu ile toplam enerji arasındaki ilişkiyi esas alan DFT' dir.

HFR yaklaşımına alternatif olarak geliştirilen DFT, 1964 yılında Hohenberg ve Kohn tarafından ileri sürülmüştür. Bu teoriye göre elektron sisteminin taban durum elektronik enerjisi, elektron yoğunluğunun (ρ) bir fonksiyoneli olarak yazılır. Yani DFT' nin temel dayanak noktası; elektronik sistemin enerjisini elektron yoğunluğuna bağlı olarak ifade etmesidir (Stewart, 1983; Jensen, 1999; Gill, 1996).

HFR yaklaşımı, çok elektronlu sistemlerde Schrödinger denkleminin çözümü için en çok kullanılan yaklaşık yöntemdir. HFR yaklaşıklığının temeli, atom ve moleküllerin elektronik dalga fonksiyonlarının belirlenmesine dayanır. Atom ve moleküldeki her bir elektron tarafından işgal edilen her yörünge bir dalga fonksiyonu ile temsil edilir. HFR teorisinde, molekülün bir elektronlu dalga fonksiyonu olan moleküler orbitaller, atom orbitallerinin lineer toplamı şeklinde alınır. Atom ve molekülün tam dalga fonksiyonu ise, elemanları moleküler spin orbitali olan determinant şeklinde seçilir.

Bazı fiziksel denklemleri çözmek için önemli olan fiziksel problemlere uygun olan baz fonksiyonlarını seçmektir. Atomlara ait hesaplamalara dayanan, kompleks moleküller için özellikle baz fonksiyonları ile analitik çözüm aranmaktadır.

Kullanışlı bir baz fonksiyonu iki şartı sağlamalıdır. İlk olarak orjinde zirve durumunda olmalı (Kato, 1957), ikinci olarak ise sonsuzda üstel azalmalıdır (Agmon, 1982). Bazı çalışmalarda Slater tipi orbitaller (STO) kullanılmaktadır.

Boys'un önerdiği Gaussian tipi orbitaller (GTO) bu şartı sağlamaz. Ancak GTO'lar moleküler integrallerin büyük kuantum sayılı çözümlerinde kolaylık sağlarlar (Boys, 1950).

Slater tipi orbitallerin moleküler problemlere uygulanabilirliği, Hamilton matris elemanları için ortaya çıkan ifadelerin çok büyük hesaplama zorluğu ile engellenir.

Boys, GTO tanımlayarak daha kolay kontrol edilebilir bir formül vermiştir (Boys, 1950) ve etkin bir algoritma geliştirmiştir. Orjinde ve sonsuzda GTO ları daha kolay davranışları için matris elemanlarının daha basit ifadeleri elde edilmiştir (Mamedov, 2004).

Atomlar için tek merkezli integrallerde Slater baz fonksiyonları rahatlıkla hesaplanır. Moleküller için, çok merkezli integrallerde, hem integrallerin analitik ifadesi hem de hesaplama zamanına göre, Gaussian baz fonksiyonları çok yaygın olarak tercih edilen fonksiyonlardır.

Molekülerin enerji hesaplamalarında ve özelliklerinin incelenmesinde hidrojene benzeyen dalga fonksiyonlarına ihtiyaç duyulmaktadır. Moleküler orbitali genelde atom orbitalleri olarak adlandırdığımız baz fonksiyonlarının lineer toplamı şeklinde yazabiliriz. Buna MO=LCAO (Atomik Orbitallerin lineer kombinasyonu) yaklaşımı denir.

Moleküler enerjinin, momentum geçişlerinin, bağ kuvvetlerinin ve diğer çok elektronlu atom ve molekülerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin incelenmesinde STO lar kullanılmaktadır. Burada atom orbitalleri moleküler orbitallerin baz setleri olarak adlandırılmaktadır. Slater tipi orbitaller temel olarak hidrojen benzeri orbitallerdir. Bu yeni orbitaller LCAO-MO da (moleküler orbitaldeki atomik orbitallerin lineer kombinasyonu) kullanılmaktadır (Jee, 1985).

Çok elektronlu sistemlerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin incelenmesi için kullanılan STO tam dalga fonksiyonunu temsil edebilmesi için ortogonal ve ortanormal olmalıdır. STO 'lar ortanormaldir. Fakat ortogonal değildir. Bu eksiklik, Gramm - Schmidt dikleştirme yöntemi ile giderilmektedir (Jee, 1985). Bu yöntem ile lineer bağımsız fonksiyonlar ortogonal bir kümeye dönüştürülebilir ve normlanarak ortanormal bir baz küme oluşturulabilir. Böylece çok elektronlu sistemlerin çözümü için gerekli olan dalga fonksiyonları elde edilebilir.

Bu çalışmada STO 'lar Gramm-Schmidt dikleştirme yöntemi kullanılarak ortogonal duruma getirilmiştir. Daha sonra elde edilen ortogonal STO 'lar normalizasyon formülü ile normlanmıştır.

2. GENEL BİLGİLER

2.1 Çok Elektronlu Sistemler İçin Schrödinger Denklemi

Klasik mekaniğe göre bir sistemin parçacıklarının etkileşim enerjisi, kinetik enerji T ve potansiyel enerji V toplamıdır.

$$T + V = E \quad (2.1)$$

Schrödinger, parçacığın dalga özelliğini tanımlamanın uygun yolunun klasik kinetik enerji T ve klasik potansiyel enerji V fonksiyonlarının lineer operatörleri ile yer değiştirmesi gerektiğini ileri sürmüştür ve aşağıdaki şekilde bir dalga denklemi oluşturmuştur.

$$\{T + V\} \psi = E\psi \quad (2.2)$$

ψ 'nin dalga fonksiyonu olarak adlandırıldığı (2.2) denkleminin çözümü, V potansiyel enerji operatörü tarafından belirli kuvvet alanında hareket eden çok parçacıklı sistemin uzaysal hareketini tanımlar.

Hidrojen atomu gibi bir elektronlu sistemlerdeki esas problem, çekirdeğin Coulomb kuvveti alanındaki elektron hareketini incelemektir. Bu durumda klasik potansiyel enerji fonksiyonu ve kuantum mekaniksel potansiyel enerji operatörü oluşturulur. Bu operatör Ze yüklü çekirdeğin alanında hareket eden bir elektron için tanımlanır.

$$V = -Ze^2 r^{-1} \quad (2.3)$$

Burada r , çekirdek ile elektron arasındaki mesafedir ve e , elektronik yük birimidir. Atomik çekirdeğin merkezindeki koordinat sistemi ile sadece elektronun kinetik enerjisi dikkate alınır. Schrödinger, formülde tek bir parçacıklı sistemler için klasik kinetik enerji ifadesine gereksinim duymuştur.

$$T = \frac{p^2}{2m} \quad (2.4)$$

P, momentum ve m, parçacığın kütlesidir. (2.4) lineer diferansiyel operatör ile yer değiştirirse

$$T = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 \quad (2.5)$$

elde edilir. Burada h, Planck sabiti, m, parçacığın kütlesi ve ∇^2 , kartezyen koordinatlardır.

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.6)$$

Böylece hidrojen atomu için Schrödinger denklemini

$$\left\{ -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \right\} \psi(1) = E\psi(1) \quad (2.7)$$

şeklinde alırız.

Bu bir elektronlu sistemde $\psi(1)$ dalga fonksiyonu sadece tek elektronun koordinatlarını içerir. Parantez içindeki (1) keyfi olarak alınan bir elektronun tüm koordinatlarına bağlı fonksiyonu gösterir. Bu gibi fonksiyonlar orbital olarak adlandırılmaktadır. İncelenen sistemde (2.7) denklemindeki lineer operatör, hamilton operatörü olarak adlandırılmaktadır ve H ile gösterilmektedir. Böylece hidrojen atomu için Schrödinger denklemi aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$H(1)\Psi(1) = \varepsilon\Psi(1) \quad (2.8)$$

Burada ε , bir elektronun enerjisidir.

Çekirdek ve elektronların etkileşim kümesinde meydana gelen çok parçacıklı sistemler için Schrödinger denklemi benzer şekilde formüle edilmektedir. Başlangıçta sistem için tüm hamiltonyenin tanımına gerek duyulur. Hamiltonyen, farklı coulomb etkileşimlerini içeren potansiyel enerji terimlerinin tüm elektronlar ve çekirdek için kinetik enerji operatörlerinin toplamıdır. Bu elektron-elektron ve çekirdek-çekirdek çiftleşmesi itici özelliğe sahiptir. Eğer N sayıda çekirdek ve n sayıda elektron olursa, çok parçacıklı hamiltonyen operatörü

$$H^{toplama} (1, 2, \dots, N; 1, 2, \dots, n) = \frac{\hbar^2}{8\pi^2} \sum_A^N M_A^{-1} \nabla_A^2 + \sum_{A < B} e^2 Z_A Z_B r_{AB}^{-1} \quad (2.9)$$

$$- \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \sum_p^n \nabla_p^2 - \sum_A \sum_p e^2 Z_A r_{Ap}^{-1} + \sum_{p < q} e^2 r_{pq}^{-1}$$

şeklinde alınır. M_A çekirdek kütlesi, m elektronik kütle ve $Z_A e$, A çekirdeği üzerindeki yük, r_{ij} , i ve j arasındaki mesafedir. A ve B indisleri atom çekirdeği üzerindeki toplamları, P ve q indisleri ise elektronlar üzerindeki toplamları ifade eder.

Tüm sistemler için Schrödinger denklemi

$$H^{el} = - \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m^2} \sum_p \nabla_p^2 - \sum_A \sum_p e^2 Z_A r_{Ap}^{-1} + \sum_{p < q} e^2 r_{pq}^{-1} \quad (2.10)$$

$$H^{toplama} (1, 2, \dots, N; 1, 2, \dots, n) \Psi (1, 2, \dots, N; 1, 2, \dots, n) = E \Psi (1, 2, \dots, N; 1, 2, \dots, n) \quad (2.11)$$

şeklinde alınır. Ψ , moleküldeki tüm parçacıklar için tam bir dalga fonksiyonudur. E, sistemin toplam enerjisidir.

Herhangi moleküler sistem için tam Schrödinger denklemi sadece belirli durumlarda kabul edilen sınırsız sayıda çözümlere sahip olacaktır. Sistem bağ durumunda veya sabit olursa, fiziksel olarak temsil edilen Ψ dalga fonksiyonu tek değerli, sürekli ve sonsuzlukta sıfır olmak zorundadır. Sonlu titreşim dizisi için dalga denklemi, sürekli

dalga çözümlerine uygun kesikli bir küme oluşturur. Ayrıca Schrödinger denklemlerinin uygun çözümü sadece enerjinin belirli değerlerinde oluşturulur. Kesikli enerji E_1, E_2, \dots ve dalga fonksiyonu Ψ_1, Ψ_2, \dots şeklinde gösterilir.

$$H^{toplamlam}\Psi_i = E_i\Psi_i \quad (2.12)$$

Çok elektronlu sistemlerde Schrödinger denklemi (2.12) şeklinde alınır. Adi diferansiyel denklemler için bu tip gösterimlerde E_i , $H^{toplamlam}$ operatörünün özdeğeri olarak adlandırılmaktadır. Ψ_i dalga fonksiyonu, özfonksiyona karşılık gelmektedir.

2.2 Moleküler Orbital Yaklaşımı

Fiziksel sistemler için, Schrödinger denkleminin çözülerek dalga fonksiyonlarının belirlenmesi ve bu dalga fonksiyonlarının elektronik yapısının incelenmesi kuantum mekaniğinin en önemli problemlerinden biridir. Schrödinger denklemi hidrojen ve hidrojene benzer atomlar için çözülebilir fakat çok elektronlu sistemler için çözülememektedir.

Bu problemin üstesinden gelebilmek için değişik yaklaşık yöntemler önerilmiştir. Bu yöntemlerden biri merkezci alan yaklaşımıdır.

Merkezcil alan yaklaşımı aşağıdaki adımlarla açıklanabilir.

1-İncelenen elektronun çekirdeğin ve geriye kalan elektronların oluşturduğu ortalama alanda hareket ettiği düşünülür.

2- Elektronun spin etkileşimi göz önüne alınır. Elektronun spin dalga fonksiyonunun $\Psi_{m_s}(\sigma)$ olduğunu düşünürsek aşağıdaki eşitlikleri yazabiliriz.

$$S^2\Psi_{m_s}(\sigma) = s(s+1)\hbar^2\Psi_{m_s}(\sigma) \quad (2.13)$$

$$S_z\Psi_{m_s}(\sigma) = m_s\hbar\Psi_{m_s}(\sigma) \quad (2.14)$$

3- Bu yaklaşım için Pauli ilkesi geçerlidir.

Hidrojen atomunun H operatörü

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \quad (2.15)$$

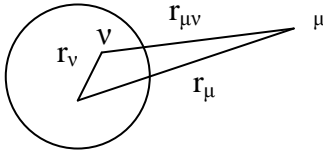
şeklinde alınır. (1.15) denklemini dikkate alarak N elektronlu hamiltonyen operatörünü

$$\hat{H} = \sum_{\mu}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 - \frac{Ze^2}{r_{\mu}} \right) + \sum_{\mu < \nu}^N \frac{e^2}{r_{\mu\nu}} \quad (2.16)$$

şeklinde yazarız. Bu denklemde ilk terim N elektronlu atomda elektronların kinetik enerjileri toplamıdır. İkinci terim elektronlarla çekirdek arasındaki etkileşimin potansiyel enerjileri toplamıdır. Üçüncü terim ise elektronlar arası coulomb etkileşim enerjileri toplamıdır.

Hamilton operatöründeki elektronlar arası coulomb etkileşim potansiyelini azaltmak için iki durum dikkate alınır.

1- İncelenen elektronun çekirdekte çok uzakta olduğunu düşünürsek, $r_{\mu\nu} = r_{\mu}$ olur.



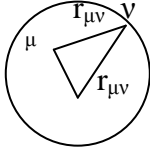
Şekil 2.1. μ . elektronun incelenen elektrona uzaklığı

$$\sum_{\mu < \nu}^N \frac{e^2}{r_{\mu\nu}} = \sum_{\mu < \nu}^N \frac{e^2}{r_{\mu}} = F(r, N) \quad (2.17)$$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r_{\mu}} + \frac{(N-1)e^2}{r_{\mu}} = -\frac{(Z-(N-1))e^2}{r_{\mu}} \quad (2.18)$$

Buradan da anlaşılacağı gibi incelenen elektron Z yükünün oluşturduğu bir alanda değil $Z - (N-1)$ yüklü bir sistemin alanında hareket ediyormuş gibi düşünülür. Yani çekirdeğin oluşturduğu alan geriye kalan $(N-1)$ tane elektronların oluşturduğu alan tarafından azaltılır.

2-İncelenen elektronun diğer elektronlara göre çekirdeğe çok yakın olduğunu düşünelim. Bu durumda μ . elektrona göre geriye kalan elektronlar a yarıçaplı kürenin üzerinde toplanmış gibi görünür.



Şekil 2.2. μ . elektronun çekirdeğe uzaklığı

İncelenen elektronla geriye kalan elektronlar arasındaki etkileşim potansiyelini

$$\frac{ee'}{a} = \frac{e(N-1)e}{a} \quad (2.19)$$

şeklinde alırız. Bu durumda elektronun hareket ettiği merkezci alan potansiyelini

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r_\mu} + \frac{(N-1)e^2}{a} = -\frac{Ze^2}{r_\mu} + \text{sabit} \quad (2.20)$$

şeklinde yazarız. Buradan görülür ki elektronun bulunduğu yere göre merkezci alan potansiyeli iki şekilde olur.

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{(Z-(N-1))e^2}{r_\mu} & r_\mu \gg r_\nu \\ -\frac{Ze^2}{r_\mu} + \text{sabit} & r_\mu \ll r_\nu \end{cases} \quad (2.21)$$

Hamilton operatörüne oluşturduğumuz V potansiyelini ilave edip çıkardığımızda hamiltonyen operatörü

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\mu^2 - \frac{Ze^2}{r_\mu} \right) + \sum_{\mu < \nu}^N \frac{e^2}{r_{\mu\nu}} \quad (2.22)$$

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\mu^2 + V(r_\mu) \right) + \sum_{\mu=1}^N \left(-\frac{Z^2}{r_\mu} \nabla_\mu^2 - V(r_\mu) \right) + \sum_{\mu < \nu}^N \frac{e^2}{r_{\mu\nu}} \quad (2.23)$$

şeklinde alınır. Bu operatöre pertürbasyon yaklaşımını uygulayabiliriz. Burada $W \ll H_0$ olduğuna göre ilk yaklaşımda dikkate almayabiliriz.

Bu durumda schrödinger denklemini aşağıdaki şekilde alınır.

$$H_0 \psi_0 = E_0 \psi_0 \quad (2.24)$$

$$\sum_{\mu=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\mu^2 + V(r_\mu) \right) \psi_0 = E_0 \psi_0 \quad (2.25)$$

Bu denklemden elektronların koordinatları birbirinden farklı olduğundan

$$\psi_0 = u_1(r_1) \cdot u_2(r_2) \cdot \dots \cdot u_N(r_N) \quad (2.26)$$

$$E_0 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \dots + \varepsilon_n = \sum_{\mu=1}^N \varepsilon_\mu \quad (2.27)$$

olur.

Bu denklemleri Shrödinger denkleminde yerine yazdığımızda aşağıdaki gibi alınır.

$$\sum_{\mu=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 + V(r_{\mu}) \right) u_1(r_1) u_2(r_2) \dots u_N(r_N) = \sum_{\mu=1}^N \varepsilon_{\mu} u_1(r_1) u_2(r_2) \dots u_N(r_N) \quad (2.28)$$

Bu denklemi her elektron için ayrı ayrı yazacak olursak (1.28) denklemi

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 + V(r_1) \right) u_1(r_1) = \varepsilon_1 u_1(r_1) \quad (2.29a)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + V(r_2) \right) u_2(r_2) = \varepsilon_2 u_2(r_2) \quad (2.29b)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_N^2 + V(r_N) \right) u_N(r_N) = \varepsilon_N u_N(r_N) \quad (2.29c)$$

şeklinde alınır.

Bu durumda $V(r)$ alanında hareket eden μ . elektronun Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi alınır.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 + V(r_{\mu}) \right) u_{\mu}(r_{\mu}) = \varepsilon_{\mu} u_{\mu}(r_{\mu}) \quad (2.30)$$

Buradan da görülür ki N elektronlu problem bir elektronlu probleme indirgenmiş olur. Bir elektronlu Schrödinger denklemlerini çözerek $u_1(r_1), u_2(r_2), \dots, u_N(r_N)$ dalga fonksiyonlarını belirleyebilirsek, sıfırıncı yaklaşımda N elektronlu dalga fonksiyonunu oluşturabiliriz.

Bilindiği gibi bu yaklaşımda bir elektronlu Schrödinger denklemini belirledik. Merkezil alanda hareket eden elektronun enerjisi, açısal momentumu ve z bileşeni

korunur. Yani bu büyüklükleri temsil eden operatörler Hamilton operatörü ile sıra değiştiriyordur.

$$\hat{H}L^2 = L^2\hat{H} \quad \hat{H}L_z = L_z\hat{H} \quad (2.31a) \text{ ve } (2.31b)$$

$$L^2u_\mu(r_\mu) = \hbar^2\ell(\ell+1)u_\mu(r_\mu) \quad L_zu_\mu(r_\mu) = \hbar mu_\mu(r_\mu) \quad (2.32a) \text{ ve } (2.32b)$$

Schrödinger denkleminde $V(r)$ potansiyeli açısal kısımdan bağımsız olduğundan bu denklemlerin çözümü $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ küresel harmonikleri verir. Radyal kısmının çözümünün ise $R_{nl}(r)$ olduğunu düşünürsek, Schrödinger denkleminin çözümünü aşağıdaki şekilde yazabiliriz.

$$U_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.33)$$

Elektronun spin etkileşimini göz önüne alırsak

$$U_{nlmm_s}(r, \theta, \varphi, \sigma) = U_{nlm}(r, \theta, \varphi, \sigma)U_{m_s}(\sigma) \quad (2.34)$$

şeklinde yazılır. Bu dalga fonksiyonuna spin atom orbitali denir. Spin atom orbitali ortanormal bir fonksiyondur. Bu fonksiyon aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$\sum_{\sigma=-1/2}^{1/2} \int U_{nlmm_s}^*(r, \theta, \varphi, \sigma)U_{n'l'm'_s}(r, \theta, \varphi, \sigma)dV = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{m_s m'_s} \quad (2.35)$$

$$\sum_{\sigma=-1/2}^{1/2} U_{m_s}(\sigma)U_{m'_s}(\sigma) \int U_{nlmm_s}^*(r, \theta, \varphi, \sigma)U_{n'l'm'_s}(r, \theta, \varphi, \sigma)dV = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{m_s m'_s} \quad (2.36)$$

Böylece N elektronlu atomda elektronlar arası etkileşim potansiyelinin bir bölümünü $V(r)$ potansiyeline vererek N elektronlu atom problemini bir elektronlu atom problemine indirgemiş oluruz. Bir elektronlu dalga fonksiyonunu kullanarak N

elektronlu sisteme dönmemiz gerekir. Bunun için elektronların dalga fonksiyonlarının özellikleri incelenmelidir.

2.3 Determinant Dalga Fonksiyonu ve Antisimetrik Özellikleri

N elektronlu sistemin Hamilton operatörünü

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 - \frac{Ze^2}{r_{\mu}} \right) + \sum_{\mu < \nu} \frac{e^2}{r_{\mu\nu}} + W(s_1, s_2, \dots, s_N, l_1, l_2, \dots, l_N) \quad (2.37)$$

şeklinde yazarız. Burada W, rölativistik terim olup elektronların spin -orbital ve spin-spin etkileşimlerini içerir. Bu terim çok küçük olduğundan ilk yaklaşımda dikkate alınmaz. Ama

v^2/c^2 1'e yaklaşırsa, bu etkileşimi dikkate almamız gerekir. Buna relativistik etki denir. Şimdi relativistik olmayan durumu (W=0) inceleyelim.

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 - \frac{Ze^2}{r_{\mu}} \right) + \sum_{\mu < \nu} \frac{e^2}{r_{\mu\nu}} \quad (2.38)$$

Buradan görüldüğü gibi Hamilton operatöründe iki toplamın yerini değiştirsek Hamilton operatöründe bir değişiklik olmaz. Yani N elektronlu atomda iki elektronun yeri değişirse sistemin durumunda bir değişiklik olmaz.

\hat{H} 'de iki elektronun yer değiştirme işlemini yapan bir operatör tanımlanır. Bu operatöre yer değiştirme operatörü denir ve $\hat{P}_{\mu\nu}$ ile gösterilir.

$$\hat{P}_{\mu\nu} \Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) = \Psi(1, 2, \dots, \nu, \mu, \dots, N) \quad (2.39)$$

Bu operatör kuantum mekaniksel olduğundan aşağıdaki özdeğer denklemini sağlaması gerekir.

$$\hat{P}_{\mu\nu} \Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) = \lambda \Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) \quad (2.40)$$

Burada $\lambda = \pm 1$ değerlerini alır.

$$\hat{P}_{\mu\nu} \Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) = \Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) \quad \lambda = 1 \quad (2.41a)$$

$$\hat{P}_{\mu\nu} \Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) = -\Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) \quad \lambda = -1 \quad (2.41b)$$

elde edilir.

Bilindiği gibi dalga fonksiyonunun kendisi bir anlam içermez. Olasılık yoğunluğunun bir anlamı vardır. N elektronlu atomun dalga fonksiyonunu elektronların yerini değiştirmeden önceki ve yerini değiştirdikten sonraki olasılık yoğunluklarına bakalım.

$$\left| \hat{P}_{\mu\nu} \Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) \right|^2 = \left| \Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) \right|^2 \quad (2.42a)$$

$$\left| \hat{P}_{\mu\nu} \Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) \right|^2 = \left| -\Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) \right|^2 \quad (2.42b)$$

Buradan görülür ki N elektronlu sistemin durumu elektronların yer değiştirmesine göre ayırt edilemez. Buna elektronların ayırtedilmezlik ilkesi denir.

Dalga fonksiyonunun antisimetrik veya simetrik özelliği belirlenemedi. Bunu belirlemek için N elektronlu atomun dalga fonksiyonunun

$$\Psi(1, 2, \dots, \mu, \nu, \dots, N) \quad (2.43)$$

olduğunu düşünelim. N elektronlu atomda elektronların yer değiştirmesi N! tane farklı durum olur. Simetrik ve antisimetrik dalga fonksiyonları

$$\Psi_A(1, 2, \dots, N) = \sum_p^{N!} \varepsilon_p \Psi(P(1, 2, \dots, N)) \quad (2.44)$$

$$\Psi_S(1, 2, \dots, N) = \sum_p^{N!} \Psi(P(1, 2, \dots, N)) \quad (2.45)$$

şeklinde alınır. ε_p , 1 olduğunda çift sayıda yer değiştirmeler, -1 olduğunda tek sayıda yer değiştirmeler anlamına gelir. Bir önceki konuda Schrödinger denkleminin çözümünden dalga fonksiyonu belirlenmişti. N elektronlu sistemin simetrik ve antisimetrik dalga fonksiyonlarını

$$\Psi_A(1, 2, \dots, N) = \sum_p^{N!} \varepsilon_p P(u_1(r_1).u_2(r_2).....u_N(r_N)) \quad (2.46)$$

$$\Psi_S(1, 2, \dots, N) = \sum_p^{N!} P(u_1(r_1).u_2(r_2).....u_N(r_N)) \quad (2.47)$$

şeklinde alırız. Buradan yola çıkılarak determinant dalga fonksiyonu oluşturulur ve aşağıdaki şekilde yazılır.

$$\Psi_A(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{pmatrix} U_{n_1}(1) & U_{n_1}(2) & \dots & U_{n_1}(N) \\ U_{n_2}(1) & U_{n_2}(2) & \dots & U_{n_2}(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ U_{n_\mu}(1) & U_{n_\mu}(2) & \dots & U_{n_\mu}(N) \\ U_{n_N}(1) & U_{n_N}(2) & \dots & U_{n_N}(N) \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

Bu determinant dalga fonksiyonuna Slater determinanı denir.

Bilindiği gibi determinantın iki satır veya iki sütunu aynı olursa sıfır olur. Dalga fonksiyonunun sıfır olması fiziksel sistemin o durumunun mümkün olmaması anlamına gelir.

Buradan Pauli ilkesinin geçerli olduğu görülür. Pauli N elektronlu sistemin dalga fonksiyonunun antisimetrik olduğunu ileri sürmüştür. Antisimetrik özellik elektronlar

için uygundur. Çünkü moleküler orbital teorideki Pauli dışarlama ilkesine önderlik eder. Pauli dışarlama ilkesine göre herhangi iki elektron yeni spin orbitalinde bulunamaz (Pauli, 1925). Yani bir orbitalde aynı spine sahip iki elektron bulunamaz. Elektronun antisimetrik olması iki elektronunun tüm koordinatları (uzay ve spin koordinatları) yer değiştirdiğinde dalga fonksiyonunun işaretinin değişmemesi anlamına gelir. Antisimetrik özellik elektronların ayırtedilmezlik ilkesinede uygundur.

2.4 Moleküler Orbital Teoride Atomik Orbitaller

Moleküler orbital teori, elektronik yapı hesaplamalarında kullanılmaktadır. Moleküler orbital yaklaşımı içerisinde birçok yaklaşık yöntem geliştirilmiştir. Bu yaklaşık yöntemler deneysel incelemelerden ortaya çıkan etkileşme enerjisine göre, matris elemanları için uygun değerlerin seçildiği ve tam olarak matematiksel formüllere dayanan matris elemanlarında ortaya çıkan atomik ve moleküler integrallerin hesaplandığı teorik yöntemlerdir.

Bu teorik yöntemlerden en çok kullanılanı HFR özuyumlu alan yaklaşımıdır. HFR yaklaşımı atom ve moleküllerin elektron dalga fonksiyonlarının belirlenmesine dayanmaktadır. Bu yaklaşımda atom ve moleküldeki her bir elektron tarafından doldurulan her yörünge ayrı bir dalga fonksiyonu ile temsil edilmektedir. Bundan dolayı moleküller orbitaller HFR yönteminde atomik orbitallerin lineer toplamı şeklinde yazılır (Roothaan, 1960).

$$U_i = \sum_p \chi_p^* C_{p_i} \quad (2.49)$$

Burada C_{p_i} lineer toplam katsayısıdır.

Fock ve Slater elektronların yer değiştirmesine bağlı olan antisimetrik dalga fonksiyonunu oluşturarak Hatree yöntemi ile problemlerin üstesinden gelineceğini önermiştir. Bu yaklaşımda yapılan hesaplamaların hassaslığı uygun atomik orbitallerin

seçimine bağlıdır. Bunun için atomik orbitaller fiziksel olarak anlamlı olmalı ve uygulama olanağı için hesaplamalarda kolaylık sağlamalıdır (STO, GTO).

Slater orbitalleri moleküler orbital hesaplamalarda atomik orbitallerin radyal kısmının oluşumlarında analitik olarak popüler olduysa da sadece bu orbitallerin kullanıldığı anlamına gelmez. Alternatif olarak Gaussian fonksiyonu da düşünülebilir (Boys, 1950).

Gaussian fonksiyonu, radyal fonksiyon içinde slater fonksiyonuna benzer. Fakat katsayının exponansiyel azalması r yerine r^2 'ye bağlıdır. Gaussian radyal fonksiyonu slater fonksiyona göre daha hızlı düşer ve sivrilikten ziyade düz şekildedir. Bu tanımlamalara rağmen Gaussian fonksiyonu kullanılarak moleküler hesaplamaları içeren integralleri hesaplamak daha kolaydır. Bu sebepten dolayı çok moleküllü moleküler orbitallerin hesaplanması için oldukça sık kullanılmaktadır.

3. METERYAL ve YÖNTEM

3.1 Atomik Orbitaler

Atomik orbital, incelenen atomun çekirdeği etrafındaki elektronun hareketini tanımlayan bir elektronlu fonksiyondur. Atomik orbitaller çok elektronlu atom ve moleküllerin dalga fonksiyonlarını incelemek için kullanılmaktadır.

Moleküler orbital yaklaşımı konusunda N elektronlu atomun Hamiltonyen operatöründeki elektronlar arasındaki etkileşim potansiyelinin bir kısmını bir elektronlu bölüme vererek N elektronlu problem bir elektronlu probleme indirgedik ve bir elektronlu dalga fonksiyonu

$$U_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.1)$$

şeklinde aldık. Atomda elektronların hareket ettiği alan, küresel simetrik özelliğe sahiptir ve bir-elektronu Schrödinger denkleminin açısal kısmı $V(r)$ potansiyelinden bağımsızdır. Bu yüzden tüm atomlar için açısal Schrödinger denkleminin çözümü $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ kompleks küresel harmonikaları verir (Weniger ve Steinborn, 1982).

Schrödinger denkleminin radyal kısmını incelediğimizde, çok elektronlu Schrödinger denkleminin radyal kısmı çözülememektedir. Bu denklem aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}(E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2})R = 0 \quad (3.2)$$

Bu problemi ortadan kaldırmak için merkezci alan yaklaşımı kullanılmaktadır. (3.2) denklemdaki $V(r)$ potansiyeli

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + F(r, N) \quad (3.3)$$

şeklinde alınır. Burada $F(r, N)$ elektronlar arası etkileşim potansiyelinden gelen katkıdır.

Hidrojen atomu için $V(r) = -Z \frac{e^2}{r}$ olarak (3.2) denkleminin çözümü Laguerre polinomları şeklinde alınır. Diğer atomlar için bu denklemin çözümü mümkün değildir.

Çok atomlu sistemler için potansiyeli (3.3) şeklinde almak denklemin çözümünü zorlaştırır. Bu yüzden radyal dalga fonksiyonunu belirlemek için değişik yaklaşık yöntemler önerilmiştir.

Hartree-Fock (HF) yaklaşımında incelenen elektronun diğer elektronların ortalama alanında hareket ettiği düşünülür. Bu yaklaşıma göre radyal dalga fonksiyonu için alınan sonuçlar analitik olmayıp sayısal olduğundan atomlarda elektronların sayısı arttıkça bu sayısal değerleri belirlemek zorlaşır.

Slater yöntemine göre atomda geriye kalan elektronlar çekirdeğin alanını γ kadar zayıflatır. Bu durumda incelenen elektronun yükü $(Z - \gamma)$ kadar olan çekirdeğin alanında hareket ediyor gibi düşünülür. Burada γ perdeleme sabitidir.

Slater atom ve moleküllerin fiziksel özellikleri için tüm teorik ve deneysel sonuçları değerlendirerek radyal dalga fonksiyonu için aşağıdaki analitik formülü vermiştir (Slater 1930).

$$R_n(\zeta, r) = A_n(\zeta) r^{n-1} e^{-\zeta r} \quad (3.4)$$

Burada ζ orbitale ait üstel fonksiyon sabitidir. $A_n(\zeta)$ normalizasyon katsayısı ve n baş kuantum sayısıdır. n ve ζ 'ya bağlı olarak normalizasyon katsayısı aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$A_n(\zeta) = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} \quad (3.5)$$

(3.5) denklemini (3.4) denkleminde yerine koyarsak

$$R_n(\zeta, r) = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\zeta r} \quad (3.6)$$

elde ederiz. (3.6) denklemini (3.1) denkleminde yerine koyduğumuzda Slater dalga fonksiyonunu

$$\chi_{nlm}(\zeta, r, \theta, \varphi) = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\zeta r} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.7)$$

elde ederiz. Bu denkleme Slater atom orbitali denir. Burada $U_{nlm}(\zeta, r, \theta, \varphi) = \chi_{nlm}(\zeta, r, \theta, \varphi)$ dir.

Burada uygulanan yaklaşımların yetersiz olduğu noktalar vardır. Atomların incelenmesinde Hatree-Fock yaklaşımı Slater yaklaşımından daha iyi sonuçlar verir. Slater yaklaşımı ise moleküllerin incelenmesinde iyi sonuçlar verir.

Genelde moleküllerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin matematiksel ifadelerinde ortaya çıkan moleküller integraller Üstel Tip Orbitaller (ETO) kullanılarak hesaplanır. Bu orbitaller Gaussian tipi orbitaller ve Slater tipi orbitallerdir (Mamedov, 2004).

3.2 Gaussian Tipi Orbitaller (GTO)

Gaussian tipi orbital, moleküller orbitalleri oluşturan lineer kombinasyonlarda kullanılan bir atomik orbitaldir. GTO'ler, Boy tarafından önerilmiştir.

GTO'ler, çok atomlu moleküllerin ab initio hesaplamalarında yaygın olarak kullanılmaktadır ve (3.8) formülü ile ifade edilir.

$$g_{nlm}(\xi r) = A_{nlm} e^{-\xi r^2} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.8)$$

Bu fonksiyonların sağladığı en büyük avantaj, çok merkezli moleküler integrallerin hesaplanmasında matematiksel açıdan kolaylık sağlamasıdır. İki GTO'nun çarpımı başka bir GTO'ya eşittir. Böylece çok merkezli moleküler integraller daha basit ifadelerle indirgenmiş olur.

Fakat bu dalga fonksiyonları atomların elektronik dağılımları için iki esas zorluğu aşamamaktadır ve gerçek atomik orbital dalga fonksiyonlarına tam olarak benzememektedir. Çekirdeğe yakın ve çekirdekten uzak mesafelerde deneysel sonuçlarla uyum sağlamamaktadır.

Gaussian fonksiyonunun şekli tam exponansiyel değildir. Bu orbitaller orjinde daha düzgündür ve r 'ye bağlı olarak hızlı bir şekilde azalır.

Gaussian fonksiyonları kullanılarak varyasyon metodu ile hidrojen atomunun enerjisi hesaplandığında gerçek değerinden uzak sonuçlar elde edilmiştir. Gaussian fonksiyonu sayısı artırılarak bu eksiklik giderilebilir. Ama bu durumda çok sayıda baz fonksiyonunun yakınsaması gerektiğinden kullanmak zordur. Bunun için uzun süre geçmesi gerekir.

Yukarıda bahsettiğimiz gibi GTO'larla matematiksel açıdan çalışmak kolaydır ama hesaplamalarda çok uzun süre gerekmektedir ve bilgisayar hesaplamasına ihtiyaç duyulmaktadır. STO'lar kullanılarak çok merkezli moleküler integralleri matematiksel açıdan çözümü zordur. Bu da GTO'ların yaygın olarak kullanılmasını sağlamaktadır (Richard ve Cooper, 1983). Son zamanlarda bilgisayar teknolojisindeki gelişmelerden dolayı STO ya ilgi artmıştır (Jones 1981; 1986; Banett, 2000;2002; Wenger ve Steinborn, 1983).

3.3 Slater Tipi Orbitaler

Moleküler hesaplamalarda en çok kullanılan orbital tipi, STO'lardır. Hidrojen ve hidrojene benzer atomlar için Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen dalga fonksiyonlarından ve deneysel sonuçlardan yola çıkılarak ileri sürülmüştür.

Atomik orbitaler konusunda belirttiğimiz gibi merkezci alan yaklaşımı kullanılarak aldığımız bir-elektronlu Schrödinger denkleminin radyal kısmının yaklaşık olarak çözümü Slater' in oluşturduğu fonksiyon olarak belirlenmiştir. Buradan görülür ki çok elektronlu atom ve moleküllerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin incelenmesi için Slater tarafından verilen STO kullanılması gerekir.

Slater tipi orbitaler, aşağıdaki şekilde alınır (Slater, 1930).

$$\chi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} \cdot r^{n-1} \cdot e^{-\zeta r} \cdot S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.9)$$

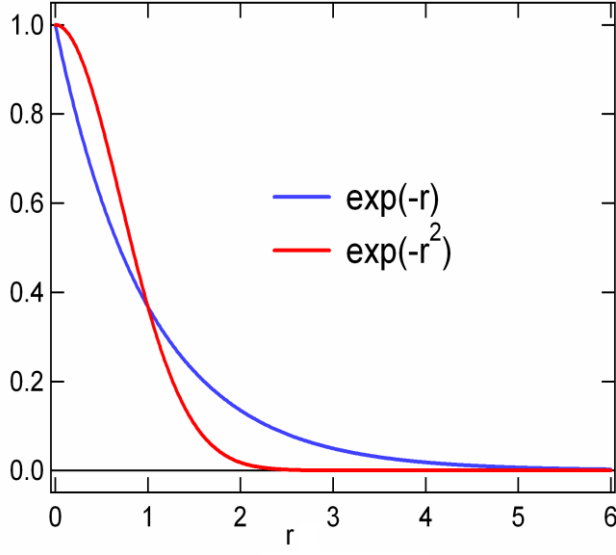
Burada (n,l,m) kuantum sayıları, (r, θ, φ) uzayda herhangi bir p noktasının küresel koordinatlarını ifade etmektedir. ζ , Slater katsayısıdır. $S_{lm}(\theta, \varphi)$ reel küresel harmoniklerdir.

Kompleks küresel harmoniklerin lineer toplamından oluşan $S_{lm}(\theta, \varphi)$ reel küresel harmonikler, aşağıdaki gibi belirlenir.

$$S_{l|m|}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_{l|m|}(\theta, \varphi) + Y_{l-|m|}(\theta, \varphi)] \quad (3.10a)$$

$$S_{l-|m|}(\theta, \varphi) = \frac{1}{i\sqrt{2}} [Y_{l|m|}(\theta, \varphi) - Y_{l-|m|}(\theta, \varphi)] \quad (3.10b)$$

$$S_{l0}(\theta, \varphi) = Y_{l0}(\theta, \varphi) \quad (3.10c)$$



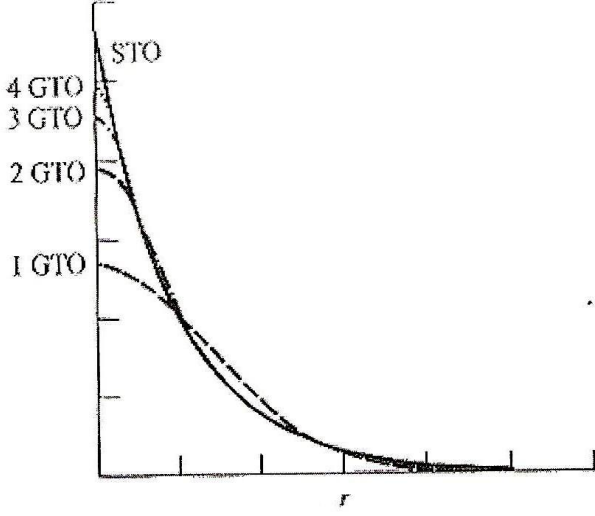
Şekil 3.1. Gaussian ve Slater tipi orbitallerin grafik gösterimi.

Şekil 3.1 de görüldüğü gibi genelde STO lar orjinde daha sivridir. STO daha yavaş bir şekilde r ' ye bağlı olarak azalır.

İncelenen bir STO önceden bilinen farklı exponensiyeye sahip birkaç GTO 'ların lineer kombinasyonu olarak temsil edilir (Mamedov, 2004)

$$\chi_{STO} = \sum_{i=1}^N c_i \chi_{GTO}(\zeta_i) \quad (3.11)$$

Bu tip STO 'lar literatürde STO-nG olarak bilinir (Leach, 2001).



Şekil 3.2. STO-nG nin gösterimi.

Şekil 3.2 de görüldüğü gibi GTO'lar ne kadar fazla olursa gerçek STO'lara yaklaşmış oluruz.

Özuyumlu alan yaklaşımı HF yöntemindeki hesaplamalarda STO'lar yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu yaklaşımda STO'lar, fiziksel özelliklerin incelenmesinde önemli bir temel oluşturmaktadır.

STO ve GTO'ları karşılaştırdığımızda, GTO'lar hesaplama açısından STO'lara göre daha uygundur. STO'lar kullanılarak matematiksel açıdan çözümü zor olan çok merkezli integrallerle karşılaşılmaktadır.

Bilgisayar teknolojisindeki gelişmelerle birlikte bu zorluklar büyük oranda ortadan kaldırıldığı için son zamanlarda STO'lar daha çok kullanılmaktadır.

Bilindiği gibi hidrojen atomu dalga fonksiyonunun $(n-1-1)$ tane sıfır noktaları vardır. STO'ların sıfır noktaları yoktur. Bu nedenle atomların incelenmesinde Slater yaklaşımı uygun sonuçlar veremeyebilir.

Bir diğer yetersizliği ise STO'ları ortanormal olup ortagonal olmamasıdır. Bu yetersizlik Gramm-Schmidt dikleştirme yöntemi kullanılarak giderilmektedir.

3.4 Gramm-Schmidt Dikleştirme Yöntemi

Gramm-Schmidt dikleştirme yöntemi, iç çarpım uzayındaki vektör kümelerini ortagonelleştirmek için özellikle lineer cebir ve sayısal analizlerde kullanılan bir yöntemdir. N boyutlu bir vektör uzayında lineer bağımsız (v_1, v_2, \dots, v_N) gibi N tane vektör alalım. Bu vektörlerden yola çıkarak, ortanormal bir baz vektörleri kümesi elde edebiliriz. Bu metoda Gramm-Schmidt dikleştirme yöntemi denir.

Şimdi izdüşüm operatörünü tanımlayalım.

$$proj_u(v) = \frac{\langle v, u \rangle}{\langle u, u \rangle} u \quad (3.12)$$

Burada $\langle v, u \rangle$, u ve v vektörlerinin iç çarpımlarını gösterir.

Gramm-Schmidt yöntemi aşağıdaki adımları izler.

$$u_1 = v_1 \quad (3.13a)$$

$$u_2 = v_2 - \frac{\langle v_2, u_1 \rangle}{\langle u_1, u_1 \rangle} u_1 \quad (3.13b)$$

$$u_N = v_N - \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\langle v_N, u_j \rangle}{\langle u_j, u_j \rangle} u_j \quad (3.13c)$$

Burada u_1, \dots, u_N serisi ortagonal bir küme oluşturur. u_1, \dots, u_N serilerinin hesaplanması Gramm-Schmidt ortagonalizasyon yöntemi olarak bilinmektedir

Elde edilen u_1, \dots, u_N ortogonal küme aşağıdaki normalizasyon formüllerinde yerine konularak

$$e_1 = \frac{u_1}{\|u_1\|} \quad (3.14a)$$

$$e_2 = \frac{u_2}{\|u_2\|} \quad (3.14b)$$

$$e_N = \frac{u_N}{\|u_N\|} \quad (3.14c)$$

e_1, \dots, e_N normalize edilmiş bir ortanormal küme oluşturur. e_1, \dots, e_N serilerinin hesaplanması Gram-Schmidt ortanormalizasyon olarak bilinmektedir.

Ortogonalizasyon şartının sağlanması için iki farklı baz fonksiyonlarının iç çarpımı sıfır olmalıdır. Ortanormalizasyon şartı için ise iki aynı baz fonksiyonlarının iç çarpımları bir olmalıdır.

4. BULGULAR

4.1 Slater Tipi Atom Orbitallerinin Ortogonal Duruma Getirilmesi

Slater tipi atom orbitallerinin ortogonalleştirilmesi için Gramm-Schmidt dikleştirme yöntemi kullanılmaktadır. Bu yöntem aşağıdaki formül ile ifade edilmektedir.

$$\chi_j = n_j - \frac{(\chi_i | n_j)}{(\chi_i | \chi_i)} \chi_i \quad (j = i + 1) \quad (4.1)$$

Burada $(\chi_i | \chi_i)$, tüm uzay üzere ortogonal vektör kümesinin elemanları arasında örtme integraline eşit olan χ_i vektörünün nokta çarpımıdır. n_j , Slater tipi atom orbitalidir. Bu orbitali aşağıdaki şekilde gösterebiliriz.

$$n_j = ((2\zeta)^{2n+1} / (2n)!)^{1/2} r^{n-1} e^{-\zeta r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4.2)$$

$Y_{lm}(\theta, \phi)$, küresel harmoniklerdir. Kompleks ve reel küresel harmonikler olarak iki kısımda incelenir.

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = P_{l|m}(\cos \theta) \Phi_m(\phi) \quad (4.3)$$

Burada $P_{l|m}$, bağıl Legendre fonksiyonlarıdır (Gradshteyn, 1980; Abramowitz, 1972).

Kompleks küresel harmonikler için

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (4.4)$$

reel küresel harmonikler için ise

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi(1+\delta_{m0})}} \quad (4.5)$$

şeklinde alınır (Mamedov ve Çopuroğlu, 2009).

(4.1) denklemini aşağıdaki gibi yazarak STO 'ları ortagonalleştirebiliriz.

$$\chi_1 = n_1 \quad (4.6a)$$

$$\chi_2 = n_2 - \frac{(\chi_1 | n_2)}{(\chi_1 | \chi_1)} \chi_1 \quad (4.6b)$$

$$\chi_3 = n_3 - \frac{(\chi_2 | n_3)}{(\chi_2 | \chi_2)} \chi_2 - \frac{(\chi_1 | n_3)}{(\chi_1 | \chi_1)} \chi_1 \quad (4.6c)$$

$$\chi_r = n_r - \frac{(\chi_{r-1} | n_r)}{(\chi_{r-1} | \chi_{r-1})} \chi_{r-1} - \dots - \frac{(\chi_1 | n_r)}{(\chi_1 | \chi_1)} \chi_1 \quad (4.6d)$$

Burada χ_r , ortagonelleştirilmiş STO dur. Ortagonelleştirilmiş STO $\chi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ ile gösterilir (Jee, 1985).

Bu çalışmada baş kuantum sayısı 1'den 7'ye kadar olan STO'lar ortagonal duruma getirilmiştir.

Şimdi birkaç Slater tipi orbitallerin ortagonelleştirilmesine örnek verelim.

$$n = 1 \quad l = 0 \quad m = 0$$

$$\chi_{100} = n_{100}$$

$$n_{100} = \left(\frac{2^3 \zeta^3}{(2)!} \right)^{1/2} r^{1-1} e^{-\zeta r} Y_{00}(\theta, \phi)$$

$$n_{100} = \left(\frac{2^3 \zeta^3}{2} \right)^{1/2} r^{1-1} e^{-\zeta r} \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

$$n_{100} = \left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r} \quad \chi_{100} = \left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r}$$

$$n = 2 \quad l = 0 \quad m = 0$$

$$n_{200}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2^5 \zeta^5}{(4)!} \right)^{1/2} r^{2-1} e^{-\zeta r} \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

$$n_{200}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^5}{12\pi} \right)^{1/2} r e^{-\zeta r}$$

$$\chi_{200}(r, \theta, \phi) = n_2 - \frac{(\chi_1 | n_2)}{(\chi_1 | \chi_1)} \chi_1$$

$$(\chi_{100} | n_{200}) = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} 2 \left(\frac{\zeta^5}{12\pi} \right)^{1/2} r e^{-\zeta r} \left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = 3 \left(\frac{\zeta^3}{12\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r}$$

$$(\chi_{100} | \chi_{100}) = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = 1$$

$$\chi_{200}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^5}{12\pi} \right)^{1/2} r e^{-\zeta r} - 3 \left(\frac{\zeta^3}{12\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r}$$

$$\chi_{200}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^3}{12\pi} \right)^{1/2} (2\zeta r - 3) e^{-\zeta r}$$

4.2 Baş Kuantum Sayısı 1'den 7'ye Kadar Olan Slater Tipi Orbitalerin Ortanormal Duruma Getirilmesi

Ortogonal duruma getirilen Slater tipi orbitaller normalizasyon formülü kullanılarak ortanormal duruma getirilmektedir. Bu formül aşağıdaki şekilde alınır.

$$\phi_{nlm} = \frac{\chi_{nlm}}{(\chi_{nlm} | \chi_{nlm})^{1/2}} \quad (4.7)$$

Burada ϕ_{nlm} , ortanormalleştirilmiş Slater tipi orbitalleri temsil etmektedir (Jee, 1985).

Bu çalışmada baş kuantum sayısı 1'den 7'ye kadar olan STO'lar ortogonal duruma getirildikten sonra normalizasyon formülü ile ortanormal hale getirilmiştir.

Şimdi ortagonelleşmiş Slater tipi orbitallerin birkaçını ortanormal hale dönüştürelim.

$$n=1 \quad l=0 \quad m=0$$

$$\chi_{100} = \left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r}$$

$$(\chi_{100} | \chi_{100}) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r} \left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = 1$$

$$\phi_{100} = \frac{\chi_{100}}{(\chi_{100} | \chi_{100})^{1/2}} = \frac{\left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r}}{1} = \left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r}$$

$$\phi_{100} = \left(\frac{\zeta^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\zeta r}$$

$$n=2 \quad l=0 \quad m=0$$

$$\chi_{200} = \left(\frac{\zeta^3}{12\pi} \right)^{1/2} (2\zeta r - 3)e^{-\zeta r}$$

$$(\chi_{200} | \chi_{200}) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(\frac{\zeta^3}{12\pi} \right)^{1/2} (2\zeta r - 3)e^{-\zeta r} \left(\frac{\zeta^3}{12\pi} \right)^{1/2} (2\zeta r - 3)e^{-\zeta r} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = 1/4$$

$$\phi_{200} = 2 \left(\frac{\zeta^3}{12\pi} \right)^{1/2} (2\zeta r - 3)e^{-\zeta r}$$

Çizelge 4.1. Eşitlik 4.1 kullanılarak STO'ların ortogonalleştirilmesi

n	l	m	$\chi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
1	0	0	$\chi_{100}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\zeta r}$
2	0	0	$\chi_{200}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^3}{12\pi}\right)^{1/2} (2\zeta r - 3)e^{-\zeta r}$
2	1	0	$\chi_{210}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{\pi}\right)^{1/2} r \cos \theta e^{-\zeta r}$
2	1	1	$\chi_{211}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{\pi}\right)^{1/2} r \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
2	1	-1	$\chi_{21-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{\pi}\right)^{1/2} r \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
3	0	0	$\chi_{300}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^3}{90\pi}\right)^{1/2} (\zeta^2 r^2 - 4\zeta r + 3)e^{-\zeta r}$
3	1	0	$\chi_{310}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{30\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta r - 5) \cos \theta e^{-\zeta r}$
3	1	1	$\chi_{311}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{30\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta r - 5) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
3	1	-1	$\chi_{31-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{30\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta r - 5) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
3	2	0	$\chi_{320}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{3} \left(\frac{\zeta^7}{8\pi}\right)^{1/2} r^2 (3 \cos^2 \theta - 1) e^{-\zeta r}$
3	2	1	$\chi_{321}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2\zeta^7}{3\pi}\right)^{1/2} r^2 \cos \theta \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
3	2	-1	$\chi_{32-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2\zeta^7}{3\pi}\right)^{1/2} r^2 \cos \theta \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
3	2	2	$\chi_{322}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{6\pi}\right)^{1/2} r^2 \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.1'in devamı

n	l	m	$\chi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
3	2	-2	$\chi_{32-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2\zeta^7}{3\pi}\right)^{1/2} r^2 \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
4	0	0	$\chi_{400}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{\zeta^3}{35\pi}\right)^{1/2} (2\zeta^3 r^3 - 15\zeta^2 r^2 + 30\zeta r - 15) e^{-\zeta r}$
4	1	0	$\chi_{410}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^5}{105\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta^2 r^2 - 12\zeta r + 15) \cos \theta e^{-\zeta r}$
4	1	1	$\chi_{411}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^5}{105\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta^2 r^2 - 12\zeta r + 15) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
4	1	-1	$\chi_{41-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^5}{105\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta^2 r^2 - 12\zeta r + 15) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
4	2	0	$\chi_{420}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{3} \left(\frac{\zeta^7}{448\pi}\right)^{1/2} r^2(2\zeta r - 7)(3\cos^2 \theta - 1) e^{-\zeta r}$
4	2	1	$\chi_{421}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{84\pi}\right)^{1/2} r^2(2\zeta r - 7) \cos \theta \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
4	2	-1	$\chi_{42-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{84\pi}\right)^{1/2} r^2(2\zeta r - 7) \cos \theta \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
4	2	2	$\chi_{422}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{336\pi}\right)^{1/2} r^2(2\zeta r - 7) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
4	2	-2	$\chi_{42-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{336\pi}\right)^{1/2} r^2(2\zeta r - 7) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
4	3	0	$\chi_{430}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{\zeta^9}{5\pi}\right)^{1/2} r^3(5\cos^3 \theta - 3\cos \theta) e^{-\zeta r}$
4	3	1	$\chi_{431}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{30\pi}\right)^{1/2} r^3(5\cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
4	3	-1	$\chi_{43-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{30\pi}\right)^{1/2} r^3(5\cos^2 \theta - 1) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.1'in devamı

n	l	m	$\chi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
4	3	2	$\chi_{432}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{12\pi}\right)^{1/2} r^3 \cos \theta \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
4	3	-2	$\chi_{43-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{3\pi}\right)^{1/2} r^3 \cos \theta \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
4	3	3	$\chi_{433}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{72\pi}\right)^{1/2} r^3 \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
4	3	-3	$\chi_{43-3}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{72\pi}\right)^{1/2} r^3 \sin^3 \theta (3 \cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
5	0	0	$\chi_{500}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^3}{28350\pi}\right)^{1/2} (2\zeta^4 r^4 - 24\zeta^3 r^3 + 90\zeta^2 r^2 - 120\zeta r + 45) e^{-\zeta r}$
5	1	0	$\chi_{510}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{30} \left(\frac{\zeta^5}{42\pi}\right)^{1/2} r(4\zeta^3 r^3 - 42\zeta^2 r^2 + 126\zeta r - 105) e^{-\zeta r}$
5	1	1	$\chi_{511}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{30} \left(\frac{\zeta^5}{42\pi}\right)^{1/2} r(4\zeta^3 r^3 - 42\zeta^2 r^2 + 126\zeta r - 105) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	1	-1	$\chi_{51-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{30} \left(\frac{\zeta^5}{42\pi}\right)^{1/2} r(4\zeta^3 r^3 - 42\zeta^2 r^2 + 126\zeta r - 105) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	2	0	$\chi_{520}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{5670\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) e^{-\zeta r}$
5	2	1	$\chi_{521}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^7}{1890\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) \sin \theta \cos \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	2	-1	$\chi_{52-1}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^7}{1890\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) \sin \theta \cos \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	2	2	$\chi_{522}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{1890\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
5	2	-2	$\chi_{52-2}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^7}{1890\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.1'in devamı

n	l	m	$\chi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
5	3	0	$\chi_{530}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{4050\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) e^{-\zeta r}$
5	3	1	$\chi_{531}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{2700\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	3	-1	$\chi_{53-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{2700\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	3	2	$\chi_{532}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{270\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) \cos \theta \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
5	3	-2	$\chi_{53-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{270\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) \cos \theta \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	3	3	$\chi_{533}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{1620\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	3	-3	$\chi_{53-3}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{1620\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	4	0	$\chi_{540}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{50400\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (3 - 30 \cos^2 \theta + 35 \cos^4 \theta) e^{-\zeta r}$
5	4	1	$\chi_{541}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{1260\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (7 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	4	-1	$\chi_{54-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{1260\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (7 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	4	2	$\chi_{542}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{2520\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (7 \cos^2 \theta - 1) (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin^2 \theta e^{-\zeta r}$
5	4	-2	$\chi_{54-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{2520\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (7 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	4	3	$\chi_{543}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{180\pi} \right)^{1/2} r^4 \cos \theta \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.1'in devamı

n	l	m	$\chi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
5	4	-3	$\chi_{54-3}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{180\pi}\right)^{1/2} r^4 \cos \theta \sin^3 \theta (3 \cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	4	4	$\chi_{544}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{1440\pi}\right)^{1/2} r^4 \sin^4 \theta (\sin^4 \phi - 6 \cos^2 \phi \sin^2 \phi + \cos^4 \phi) e^{-\zeta r}$
5	4	-4	$\chi_{54-4}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{90\pi}\right)^{1/2} r^4 \sin^4 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	0	0	$\chi_{600}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{3} \left(\frac{2\zeta^3}{231\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{\zeta^5 r^5}{15} - \frac{7\zeta^4 r^4}{6} + 7\zeta^3 r^3 - \frac{35\zeta^2 r^2}{2} - 20\zeta r - \frac{21}{4}\right) e^{-\zeta r}$
6	1	0	$\chi_{610}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{45} \left(\frac{2\zeta^5}{77\pi}\right)^{1/2} r(\zeta^4 r^4 - 16\zeta^3 r^3 + 84\zeta^2 r^2 - 168\zeta r + 105) \cos \theta e^{-\zeta r}$
6	1	1	$\chi_{611}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{45} \left(\frac{2\zeta^5}{77\pi}\right)^{1/2} r(\zeta^4 r^4 - 16\zeta^3 r^3 + 84\zeta^2 r^2 - 168\zeta r + 105) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	1	-1	$\chi_{61-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{45} \left(\frac{2\zeta^5}{77\pi}\right)^{1/2} r(\zeta^4 r^4 - 16\zeta^3 r^3 + 84\zeta^2 r^2 - 168\zeta r + 105) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	2	0	$\chi_{620}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{18} \left(\frac{\zeta^7}{385\pi}\right)^{1/2} (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126)(3 \cos^2 \theta - 1) e^{-\zeta r}$
6	2	1	$\chi_{621}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{62370\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126) \sin \theta \cos \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	2	-1	$\chi_{62-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{62370\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126) \sin \theta \cos \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	2	2	$\chi_{622}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{249480\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
6	2	-2	$\chi_{62-2}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^7}{249480\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.1'in devamı

n	l	m	$\chi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
6	3	0	$\chi_{630}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{133650\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) e^{-\zeta r}$
6	3	1	$\chi_{631}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{89100\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	3	-1	$\chi_{63-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{89100\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	3	2	$\chi_{632}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{8910\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) \sin^2 \theta \cos \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
6	3	-2	$\chi_{63-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{8910\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) \sin^2 \theta \cos \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	3	3	$\chi_{633}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{53460\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	3	-3	$\chi_{63-3}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{53460\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	4	0	$\chi_{640}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^{11}}{1663200\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) (3 - 30 \cos^2 \theta + 35 \cos^4 \theta) e^{-\zeta r}$
6	4	1	$\chi_{641}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{11}}{1155\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \cos \theta \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	4	-1	$\chi_{64-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{11}}{1155\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \cos \theta \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	4	2	$\chi_{642}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{11}}{2310\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) (7 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
6	4	-2	$\chi_{64-2}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{11}}{2310\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) (7 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	4	3	$\chi_{643}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^{11}}{5940\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \sin^3 \theta \cos \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.1'in devamı

n	l	m	$\chi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
6	4	-3	$\chi_{64-3}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^{11}}{5940\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \sin^3 \theta \cos \theta (3 \cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	4	4	$\chi_{644}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^{11}}{47520\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \sin^4 \theta (\sin^4 \phi - 6 \cos^2 \phi \sin^2 \phi + \cos^4 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	4	-4	$\chi_{64-4}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^{11}}{2970\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \sin^4 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	5	0	$\chi_{650}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{180} \left(\frac{\zeta^{13}}{42\pi} \right)^{1/2} r^5 (63 \cos^5 \theta - 70 \cos^3 \theta + 15 \cos \theta) e^{-\zeta r}$
6	5	1	$\chi_{651}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{36} \left(\frac{\zeta^{13}}{70\pi} \right)^{1/2} r^5 \sin \theta (21 \cos^4 \theta - 14 \cos^2 \theta + 1) \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	5	-1	$\chi_{65-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{36} \left(\frac{\zeta^{13}}{70\pi} \right)^{1/2} r^5 \sin \theta (21 \cos^4 \theta - 14 \cos^2 \theta + 1) \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	5	2	$\chi_{652}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{18} \left(\frac{\zeta^{13}}{10\pi} \right)^{1/2} r^5 \cos \theta (3 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
6	5	-2	$\chi_{65-2}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{9} \left(\frac{\zeta^{13}}{10\pi} \right)^{1/2} r^5 \cos \theta (3 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	5	3	$\chi_{653}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{13}}{77760\pi} \right)^{1/2} r^5 (9 \cos^2 \theta - 1) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	5	-3	$\chi_{65-3}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{13}}{77760\pi} \right)^{1/2} r^5 (9 \cos^2 \theta - 1) \sin^3 \theta (3 \cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	5	4	$\chi_{654}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{13}}{30\pi} \right)^{1/2} r^5 \cos \theta \sin^4 \theta (\sin^4 \phi - 6 \sin^2 \phi \cos^2 \phi + \cos^4 \phi) e^{-\zeta r}$
6	5	-4	$\chi_{65-4}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{13}}{30\pi} \right)^{1/2} r^5 \cos \theta \sin^4 \theta (\sin^2 \phi - \cos^2 \phi) \cos \phi \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	5	5	$\chi_{655}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{13}}{43200\pi} \right)^{1/2} r^5 \sin^4 \theta \cos(5\phi) e^{-\zeta r}$
6	5	-5	$\chi_{65-5}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{13}}{43200\pi} \right)^{1/2} r^5 \sin^4 \theta \sin(5\phi) e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.2. Eşitlik 4.7 kullanılarak STO'ların ortanormalleştirilmesi

n	l	m	$\phi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
1	0	0	$\phi_{100}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\zeta r}$
2	0	0	$\phi_{200}(r, \theta, \phi) = 2\left(\frac{\zeta^3}{12\pi}\right)^{1/2} (2\zeta r - 3)e^{-\zeta r}$
2	1	0	$\phi_{210}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{\pi}\right)^{1/2} r \cos \theta e^{-\zeta r}$
2	1	1	$\phi_{211}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{\pi}\right)^{1/2} r \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
2	1	-1	$\phi_{21-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{\pi}\right)^{1/2} r \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
3	0	0	$\phi_{300}(r, \theta, \phi) = 2\left(\frac{\zeta^3}{\pi}\right)^{1/2} (\zeta^2 r^2 - 4\zeta r + 3)e^{-\zeta r}$
3	1	0	$\phi_{310}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{5\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta r - 5) \cos \theta e^{-\zeta r}$
3	1	1	$\phi_{311}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta r - 5) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
3	1	-1	$\phi_{31-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{5\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta r - 5) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
3	2	0	$\phi_{320}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{3}\left(\frac{\zeta^7}{8\pi}\right)^{1/2} r^2 (3 \cos^2 \theta - 1) e^{-\zeta r}$
3	2	1	$\phi_{321}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2\zeta^7}{3\pi}\right)^{1/2} r^2 \cos \theta \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
3	2	-1	$\phi_{32-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2\zeta^7}{3\pi}\right)^{1/2} r^2 \cos \theta \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
3	2	2	$\phi_{322}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{6\pi}\right)^{1/2} r^2 \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.2 'nin devamı

n	l	m	$\phi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
3	2	-2	$\phi_{32-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2\zeta^7}{3\pi}\right)^{1/2} r^2 \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
4	0	0	$\phi_{400}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{3} \left(\frac{2\zeta^3}{5\pi}\right)^{1/2} (2\zeta^3 r^3 - 15\zeta^2 r^2 + 30\zeta r - 15) e^{-\zeta r}$
4	1	0	$\phi_{410}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{15\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta^2 r^2 - 12\zeta r + 15) \cos \theta e^{-\zeta r}$
4	1	1	$\phi_{411}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{15\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta^2 r^2 - 12\zeta r + 15) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
4	1	-1	$\phi_{41-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^5}{15\pi}\right)^{1/2} r(2\zeta^2 r^2 - 12\zeta r + 15) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
4	2	0	$\phi_{420}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{3} \left(\frac{\zeta^7}{14\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta r - 7)(3 \cos^2 \theta - 1) e^{-\zeta r}$
4	2	1	$\phi_{421}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2\zeta^7}{21\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta r - 7) \cos \theta \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
4	2	-1	$\phi_{42-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2\zeta^7}{21\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta r - 7) \cos \theta \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
4	2	2	$\phi_{422}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{42\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta r - 7) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
4	2	-2	$\phi_{42-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{2\zeta^7}{21\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta r - 7) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
4	3	0	$\phi_{430}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{\zeta^9}{5\pi}\right)^{1/2} r^3 (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) e^{-\zeta r}$
4	3	1	$\phi_{431}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{30\pi}\right)^{1/2} r^3 (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
4	3	-1	$\phi_{43-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{30\pi}\right)^{1/2} r^3 (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.2 'nin devamı

n	l	m	$\phi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
4	3	2	$\phi_{432}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{12\pi}\right)^{1/2} r^3 \cos \theta \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
4	3	-2	$\phi_{43-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{3\pi}\right)^{1/2} r^3 \cos \theta \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
4	3	3	$\phi_{433}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{72\pi}\right)^{1/2} r^3 \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
4	3	-3	$\phi_{43-3}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{72\pi}\right)^{1/2} r^3 \sin^3 \theta (3 \cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
5	0	0	$\phi_{500}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{3} \left(\frac{\zeta^3}{15\pi}\right)^{1/2} (2\zeta^4 r^4 - 24\zeta^3 r^3 + 90\zeta^2 r^2 - 120\zeta r + 45) e^{-\zeta r}$
5	1	0	$\phi_{510}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{15} \left(\frac{5\zeta^5}{7\pi}\right)^{1/2} r(4\zeta^3 r^3 - 42\zeta^2 r^2 + 126\zeta r - 105) e^{-\zeta r}$
5	1	1	$\phi_{511}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{15} \left(\frac{5\zeta^5}{7\pi}\right)^{1/2} r(4\zeta^3 r^3 - 42\zeta^2 r^2 + 126\zeta r - 105) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	1	-1	$\phi_{51-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{15} \left(\frac{5\zeta^5}{7\pi}\right)^{1/2} r(4\zeta^3 r^3 - 42\zeta^2 r^2 + 126\zeta r - 105) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	2	0	$\phi_{520}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{3} \left(\frac{\zeta^7}{14\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) (3 \cos^2 \theta - 1) e^{-\zeta r}$
5	2	1	$\phi_{521}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^7}{42\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) \sin \theta \cos \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	2	-1	$\phi_{52-1}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^7}{42\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) \sin \theta \cos \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	2	2	$\phi_{522}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^7}{42\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
5	2	-2	$\phi_{52-2}(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{\zeta^7}{42\pi}\right)^{1/2} r^2 (\zeta^2 r^2 - 8\zeta r + 14) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.2 'nin devamı

n	l	m	$\phi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
5	3	0	$\phi_{530}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{405\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) e^{-\zeta r}$
5	3	1	$\phi_{531}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{270\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	3	-1	$\phi_{53-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{270\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	3	2	$\phi_{532}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{27\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) \cos \theta \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
5	3	-2	$\phi_{53-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^9}{27\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) \cos \theta \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	3	3	$\phi_{533}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{162\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	3	-3	$\phi_{53-3}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^9}{162\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta r - 9) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	4	0	$\phi_{540}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{50400\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (3 - 30 \cos^2 \theta + 35 \cos^4 \theta) e^{-\zeta r}$
5	4	1	$\phi_{541}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{1260\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (7 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
5	4	-1	$\phi_{54-1}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{1260\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (7 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	4	2	$\phi_{542}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{2520\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (7 \cos^2 \theta - 1) (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin^2 \theta e^{-\zeta r}$
5	4	-2	$\phi_{54-2}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{2520\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 9) (7 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	4	3	$\phi_{543}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{180\pi} \right)^{1/2} r^4 \cos \theta \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.2 'nin devamı

n	l	m	$\phi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
5	4	-3	$\phi_{54-3}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{180\pi}\right)^{1/2} r^4 \cos \theta \sin^3 \theta (3 \cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
5	4	4	$\phi_{544}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{1440\pi}\right)^{1/2} r^4 \sin^4 \theta (\sin^4 \phi - 6 \cos^2 \phi \sin^2 \phi + \cos^4 \phi) e^{-\zeta r}$
5	4	-4	$\phi_{54-4}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{11}}{90\pi}\right)^{1/2} r^4 \sin^4 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	0	0	$\phi_{600}(r, \theta, \phi) = \frac{4}{3} \left(\frac{3\zeta^3}{22507\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{\zeta^5 r^5}{15} - \frac{7\zeta^4 r^4}{6} + 7\zeta^3 r^3 - \frac{35\zeta^2 r^2}{2} - 20\zeta r - \frac{21}{4}\right) e^{-\zeta r}$
6	1	0	$\phi_{610}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{15} \left(\frac{10\zeta^5}{7\pi}\right)^{1/2} r(\zeta^4 r^4 - 16\zeta^3 r^3 + 84\zeta^2 r^2 - 168\zeta r + 105) \cos \theta e^{-\zeta r}$
6	1	1	$\phi_{611}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{15} \left(\frac{10\zeta^5}{7\pi}\right)^{1/2} r(\zeta^4 r^4 - 16\zeta^3 r^3 + 84\zeta^2 r^2 - 168\zeta r + 105) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	1	-1	$\phi_{61-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{15} \left(\frac{10\zeta^5}{7\pi}\right)^{1/2} r(\zeta^4 r^4 - 16\zeta^3 r^3 + 84\zeta^2 r^2 - 168\zeta r + 105) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	2	0	$\phi_{620}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{9} \left(\frac{\zeta^7}{7\pi}\right)^{1/2} (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126)(3 \cos^2 \theta - 1) e^{-\zeta r}$
6	2	1	$\phi_{621}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{9} \left(\frac{2\zeta^7}{7\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126) \sin \theta \cos \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	2	-1	$\phi_{62-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{9} \left(\frac{2\zeta^7}{7\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126) \sin \theta \cos \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	2	2	$\phi_{622}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{9} \left(\frac{\zeta^7}{14\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
6	2	-2	$\phi_{62-2}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{9} \left(\frac{\zeta^7}{14\pi}\right)^{1/2} r^2 (2\zeta^3 r^3 - 27\zeta^2 r^2 + 108\zeta r - 126) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.2 'nin devamı

n	l	m	$\phi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
6	3	0	$\phi_{630}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{45} \left(\frac{\zeta^9}{\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) e^{-\zeta r}$
6	3	1	$\phi_{631}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{15} \left(\frac{\zeta^9}{6\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	3	-1	$\phi_{63-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{15} \left(\frac{\zeta^9}{6\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	3	2	$\phi_{632}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{\zeta^9}{15\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) \sin^2 \theta \cos \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
6	3	-2	$\phi_{63-2}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{3} \left(\frac{\zeta^9}{8910\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) \sin^2 \theta \cos \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	3	3	$\phi_{633}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{18} \left(\frac{\zeta^9}{10\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	3	-3	$\chi_{63-3}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{18} \left(\frac{\zeta^9}{10\pi} \right)^{1/2} r^3 (2\zeta^2 r^2 - 20\zeta r + 45) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	4	0	$\phi_{640}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^{11}}{1663200\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) (3 - 30 \cos^2 \theta - 35 \cos^4 \theta) e^{-\zeta r}$
6	4	1	$\phi_{641}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{3\zeta^{11}}{1155\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \cos \theta \sin \theta \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	4	-1	$\phi_{64-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{3\zeta^{11}}{1155\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \cos \theta \sin \theta \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	4	2	$\phi_{642}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{3\zeta^{11}}{2310\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) (7 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
6	4	-2	$\phi_{64-2}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{\zeta^{11}}{2310\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) (7 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	4	3	$\phi_{643}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{\zeta^{11}}{55\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \sin^3 \theta \cos \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$

Çizelge 4.2 'nin devamı

n	l	m	$\phi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
6	4	-3	$\phi_{64-3}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{6} \left(\frac{\zeta^{11}}{55\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \sin^3 \theta \cos \theta (3 \cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	4	4	$\phi_{64-4}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{11}}{110\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \sin^4 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	4	-4	$\phi_{64-4}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{11}}{110\pi} \right)^{1/2} r^4 (2\zeta r - 11) \sin^4 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	5	0	$\phi_{650}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{180} \left(\frac{\zeta^{13}}{42\pi} \right)^{1/2} r^5 (63 \cos^5 \theta - 70 \cos^3 \theta + 15 \cos \theta) e^{-\zeta r}$
6	5	1	$\phi_{651}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{36} \left(\frac{\zeta^{13}}{70\pi} \right)^{1/2} r^5 \sin \theta (21 \cos^4 \theta - 14 \cos^2 \theta + 1) \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	5	-1	$\phi_{65-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{36} \left(\frac{\zeta^{13}}{70\pi} \right)^{1/2} r^5 \sin \theta (21 \cos^4 \theta - 14 \cos^2 \theta + 1) \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	5	2	$\phi_{652}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{18} \left(\frac{\zeta^{13}}{10\pi} \right)^{1/2} r^5 \cos \theta (3 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) e^{-\zeta r}$
6	5	-2	$\phi_{65-2}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{9} \left(\frac{\zeta^{13}}{10\pi} \right)^{1/2} r^5 \cos \theta (3 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	5	3	$\phi_{653}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{13}}{77760\pi} \right)^{1/2} r^5 (9 \cos^2 \theta - 1) \sin^3 \theta (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	5	-3	$\phi_{65-3}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{13}}{77760\pi} \right)^{1/2} r^5 (9 \cos^2 \theta - 1) \sin^3 \theta (3 \cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin \phi e^{-\zeta r}$
6	5	4	$\phi_{654}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{13}}{30\pi} \right)^{1/2} r^5 \cos \theta \sin^4 \theta (\sin^4 \phi - 6 \sin^2 \phi \cos^2 \phi + \cos^4 \phi) e^{-\zeta r}$
6	5	-4	$\phi_{65-4}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{12} \left(\frac{\zeta^{13}}{30\pi} \right)^{1/2} r^5 \cos \theta \sin^4 \theta (\sin^2 \phi - \cos^2 \phi) \cos \phi \cos \phi e^{-\zeta r}$
6	5	5	$\phi_{655}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{13}}{43200\pi} \right)^{1/2} r^5 \sin^4 \theta \cos(5\phi) e^{-\zeta r}$
6	5	-5	$\phi_{65-5}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\zeta^{13}}{43200\pi} \right)^{1/2} r^5 \sin^4 \theta \sin(5\phi) e^{-\zeta r}$

5.TARTIŞMA VE SONUÇ

Çok elektronlu sistemler için Schrödinger denkleminin çözümü mümkün olmadığından değişik yaklaşık yöntemler kullanılır. Bu yöntemlerden biriside HFR yaklaşımıdır. HFR denkleminin çözümünde baz fonksiyonu seçimi çok önemlidir. Genelde Slater tipi ve Gaussian tipi baz fonksiyonları kullanılır.

Bilindiği gibi kullanılan baz fonksiyonları ortanormal olup, ortagonal değildir. Bu çalışmada Gram-Schmidt Dikleştirme yöntemi kullanılarak Slater tipi atom orbitali (n,l,m) kuantum sayılarının aldığı değerlere göre ortagonal hale getirilmiştir. Oluşturduğumuz baz fonksiyonları kullanılarak, HFR denkleminin çok elektronlu sistemlerin fiziksel özellikleri için çözümünde alınan sonuçlar çok önemlidir.

KAYNAKLAR

- Abramowitz, M., Stegun I.A., 1972, Handbook Of Mathematical Functions, 3rd Edn. Dover Publications, New York.
- Agmon, S., 1982 Lectures On Exponential Decay Of Solutions Of Second-Order Elliptic Equations: Bound On Eigenfunctions Of N-Body Schrödinger Operator. Princeton University Press, Princeton, Nj.
- Barnett, M.P., 2000, Two-Center Nonexchange Integrals Over Slater Orbitals, J.Chem. Phys., 113, 9419-9428.
- Barnett, M.P., 2000, Symbolic Calculations Of Auxiliary Function For Molecular Integrals Over Slater Orbitals, Int.J.Quantum Chem., 76, 764-472.
- Barnett, M.P., 2002, Digital Erosion In The Evaluation Of Molecular Integrals., Theor. Chem. Acc. 107, 241
- Bingel, W.A., 1963. The behaviour of the first-order density matrix at the coulomb singularities of the schrödinger equation. Naturforsch, Z., A 18, 1249
- Boys, S.F., 1950. Electronic wave functions. I. A general method of calculation for the stationary states of any molecular system. Prog. R.. Soc. A 200, 542.
- Gill, P.M.W., 1996, Dft, Hf And Consistent Field., Enc. Of Comp. Chemistry., John Wiley & Sons Ltd., New York , 65-87.
- Gradshteyn, I.S., Ryzhik, I.M., *Tables Of Integrals, Sums, Series And Products*, 4th Edn. (Academic Press, New York, 1980).
- Hoffman, R., 1963; An Extended Hückel Theory. I. Hydrocarbons. J. Chem. Phys., 39:1397.
- Hückel, E.: Z. 1931; Physk, 70:204, A. Streitwieser: "Molecular Orbital Theory For Organic Chemists," John Wiley & Sons, Inc., New York, 1959.
- Jee, Jong-Gi, 1985. Ortho-Normalized Slater Type Orbitals. Bulletin Of Korean Chemical Society, Vol. 6, No. 5,
- Jensen, F., 1999, Introduction To Computational Chemistry., John Wiley & Sons Ltd., Amsterdam, 181-196.
- Jones, H.W., 1981, Computer-Generated Formulas For Two Center Coulomb Integrals Over Slater-Type Orbitals. Int.J.Quantum Chem.20, 1217.
- Jones, H.W., 1984, Computer Generated Formula For Three-Center Nuclear Attraction Integrals For Stos. Phys. Rev.A, 30, 1.

- Jones, H.W., 1986, Exact Formulas For Multipole Moments Using Slater-Type Molecular Orbitals. *Phys. Rev.A*, 33, 2081; 1987, Exact Formulas And Their Evaluation For Slater-Type Orbital Overlap Integrals With Large Quantum Numbers
- Kato, D.L., 1957 On The Eigenfunctions Of Many-Particle Systems In Quantum Mechanics. *Commun. Pure Appl. Math.*, 10, 151-158.
- Leach, A.R., 2001, *Molecular Modelling Principles And Applications*, Prentice Hall, New York.
- London, F., Heitler, W., 1927, Wechselwirkung Neutraler Atome Und Homöopolare Bindung Nach Der Quantenmechanik *Z. Physik*, 44, 455-472.
- Mamedov, B.A., 2004, On The Evaluation Of Boys Functions Using Downward Recursion Relation, *Journal Of Mathematical Chemistry* 36, 3.;
- Mamedov, B.A., 2004, Evaluation Of Two-Center Overlap Integrals In Molecular Coordinate System Over Slater Type Orbitals., *Chinese Journal Of Phys.* 42, 2.
- Mamedov, B.A., Çopuroğlu, E., 2009, Calculations Of Two-Center Nuclear Attraction Over Slater Type Orbital In Molecular Coordinate System Using Löwdin-A Function And Guseinov One -Center Charge Density Expansion Formule. *Match Commun. Math. Comput. Chem.*, 61, 553-560.
- R. S. Milliken, 1967. For A Historical Account, The Reader Is Referred To Slater, J. C.: "Quantum Theory Of Molecules And Crystals," Vol. 1, Mc-Graw-Hill Book Company, New York, (1963), And The Nobel Prize Adres By R.S. Mulliken, Reprinted In *Science*, 157:13.
- Pauli, W.:Z., 1925. Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. *Z. Phys.* 31, 765
- Pauling, L., Wilson, E.B., 1935, *Introduction To Quantum Mechanics*, Mac-Graw Hill Pres, New York.
- Richard, W.G., Cooper, D.L., 1983, *Ab Initio Molecular Orbital Calculation For Chemists*, Clarendon Pres, Oxford.
- Roothaan, C. C.J., 1951 :New Developments In Molecular Orbital Theory. *Rev. Mod. Phys.* , 23: 69; Hall, G., 1951. Mo Calculations For Atom Systems. *Proc. R. Soc. (London)*, A205, 541

- Roothan, C.C.J., 1960, Self-Consistent Field Theory For Open Shell Of Electronic System *Rev.Mod.Phys.*32: 179-185.
- Slater, J.C., 1930, Atomic Shielding Constants, *Phys.Rev.*, 36,57-64.
- Stewart, J., 1983, In *Quantum Chemistry Program Exchange Catalog.*, India Universty, Blumington, 14: 455–488.
- Weniger, E. J, Steinborn, E.O., 1982. Programs For The Coupling Of Spherical Harmonics. *Computer Physics Communications.* 25, 149–157.
- Weniger, E.J., Steinborn, E.O., 1983, Numerical Properties For The Convolution Theorems Of B Function, *Phys. Rev. A.*, 28, 2026-2040.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı : Elif SOMUNCU
Doğum Tarihi ve Yeri: 19.06.1984 / Tokat
Yabancı Dili : İngilizce
Telefon : 05386268445
e-mail : elf_smnc@hotmail.com

Eğitim

Derece	Fakülte/Program	Üniversite	Yıl
Lisans	Fen Edebiyat Fakültesi/ Fizik	Gaziosmanpaşa Üniversitesi	2006
Y. Lisans	Fen Bilimleri Enstitüsü/ Fizik	Gaziosmanpaşa Üniversitesi	2010