



T.C.

RİZE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ATOMLARIN COMPTON PROFİLLERİNİN
HARTREE-FOCK-ROOTHAAN METODU
İLE HESAPLANMASI

Burçin YARDAK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

RİZE-2011

T.C.
RİZE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ATOMLARIN COMPTON PROFİLLERİNİN
HARTREE-FOCK-ROOTHAAN METODU
İLE HESAPLANMASI

Burçin YARDAK

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Telhat ÖZDOĞAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

RİZE-2011


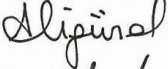

T.C.
RİZE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

ATOMLARIN COMPTON PROFİLLERİNİN
HARTREE-FOCK-ROOTHAAN METODU
İLE HESAPLANMASI

Burçin YARDAK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 11.07.2011
Tezin Sözlü Savunma Tarihi : 01.08.2011

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Telhat ÖZDOĞAN 
Jüri Üyesi : Doç. Dr. Ali GÜROL 
Jüri Üyesi : Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN 

Enstitü Müdürü : Doç. Dr. Fatih YILMAZ



RİZE-2011

ÖNSÖZ

Lisans eğitimim sırasında hakkında kısa bir çalışma yaptığım Compton profil üzerine detaylı bir araştırma yaptığım için çok mutluyum.

Lisans ve yüksek lisans dönemindeki karşılaştığım tüm zorluklarda bana yardımcı olan, tecrübelerini ve engin bilgilerini benden esirgemeyen, umutsuzluğa düştüğüm anlarda bana cesaret veren saygıdeğer hocam Doç. Dr. Telhat ÖZDOĞAN'a teşekkür ederim.

Bugüne kadar benden maddi ve manevi desteğini esirgemeyen annem Zeynep YARDAK'a, babam Selim YARDAK'a ve meslektaşım Rahim DEMİRDELEN'e desteklerinden dolayı teşekkür ederim.

Burçin YARDAK

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
ÖNSÖZ.....	II
İÇİNDEKİLER.....	III
ÖZET.....	V
SUMMARY.....	VI
SEMBOLLER ve KISALTMALAR DİZİNİ.....	VIII
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	IX
TABLolar DİZİNİ.....	X
1. GENEL BİLGİLER.....	1
1.1. Giriş.....	1
1.2. Gama ve X-Işınlarının Madde ile Etkileşmesi.....	2
1.2.1. Fotoelektrik Olay.....	3
1.2.2. Çift Oluşumu.....	4
1.2.3. Koherent Saçılma.....	5
1.2.3.1. Thomson Saçılması.....	6
1.2.3.2. Nükleer Thomson Saçılması.....	6
1.2.3.3. Nükleer Rezonans Saçılması.....	6
1.2.3.4. Rayleigh Saçılması.....	7
1.2.3.5. Delbrück Saçılması.....	7
1.2.4. İnkohherent Saçılma.....	7
1.2.4.1. Compton Saçılması.....	8
1.2.4.2. Nükleer Saçılma.....	10
1.2.4.3. Raman Saçılması.....	10
1.3. Tesir Kesiti.....	10
1.3.1. Koherent Saçılma Diferansiyel Tesir Kesiti.....	11
1.3.2. İnkohherent Saçılma Diferansiyel Tesir Kesiti.....	11
1.4. Compton Saçılmasının Teorisi.....	12
1.4.1. İnkohherent X-Işının Saçılması.....	12
1.4.2. Rölativistik Olmayan Double Diferansiyel Saçılma Tesir Kesiti.....	13
1.4.3. Dinamik Saçılma Faktörü.....	15
1.4.4. İmpuls Yaklaşımı.....	16

1.4.5.	Compton Saçılması.....	18
1.5.	Çok Elektronlu Atomlar ve Hartree-Fock-Roothaan Metodu.....	19
1.6.	Baz Fonksiyonları.....	20
1.6.1.	Slater Tipli Orbitaller.....	20
1.6.2.	Gaussian Tipli Orbitaller.....	21
1.7.	Tezin Amacı.....	22
2.	YAPILAN ÇALIŞMALAR.....	23
2.1.	Giriş.....	23
2.2.	Momentum Uzayı Dalga Fonksiyonu.....	23
2.3.	Tek Elektron Compton Profil Hesaplamaları.....	24
2.4.	Atomik Compton Profillerin HFR Metodu ile Hesaplanması.....	25
2.4.1.	MBS Kullanılarak Atomik Compton Profillerin HFR Metodu ile Hesaplanması.....	26
2.4.2.	GBS Kullanılarak Atomik Compton Profillerin HFR Metodu ile Hesaplanması.....	27
2.5.	Atomik Compton Profillerinin Hesaplanmasında Ortaya Çıkan Yardımcı Moleküler İntegraller.....	28
2.5.1.	$K_{ln}(\alpha, q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali.....	29
2.5.2.	$B_{mn}^l(\alpha, \beta; q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali.....	30
2.5.3.	$b_{mn}(\alpha, q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali.....	31
3.	BULGULAR.....	34
4.	SONUÇ ve TARTIŞMA.....	62
	KAYNAKLAR.....	63
	EKLER.....	66
	ÖZGEÇMİŞ.....	75

ÖZET

Çok elektronlu atomların taban durumlarının Compton profilleri Hartree-Fock-Roothaan (HFR) metodu ile hesaplanmıştır. HFR dalga fonksiyonları olarak Slater tipli orbitallerin (STO) minimal baz seti (MBS) ve genişletilmiş baz seti (GBS) kullanılmıştır. Atomik Compton profilleri için HFR metodu ile elde edilen ifadeler; lineer kombinasyon katsayıları c_{pi} ve $K_m(\alpha, q)$, $B_{mm}^l(\alpha, \beta: q)$ ve $b_{mm}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrallerini içermektedir. Atomların Compton profillerinin doğru hesaplanması, bu yardımcı moleküler integrallerin hassas hesaplanmasına ve en uygun dalga fonksiyonunun seçimine sıkı bir şekilde bağlıdır.

Taban durum dalga fonksiyonları olarak Clementi'nin dalga fonksiyonları kullanılmıştır. Ortaya çıkan yardımcı moleküler integraller ise analitik ve tekrarlama bağıntıları elde edilerek çok hassas bir şekilde hesaplanmıştır.

Çok elektronlu atomların Compton profilleri için HFR metodu ile elde edilen ifadelerin ve bu ifadelerin içerdiği yardımcı moleküler integrallerin Maple 13 sembolik programlama dilinde programları yapılmıştır. Her bir atomun dalga fonksiyonu için bir dosya oluşturulmuştur. Compton profil hesaplamalarında söz konusu atomun dalga fonksiyonları bu dosyadan okunarak hesaplamaları yapılmıştır.

Atomların Compton profilleri için elde edilen ifadelerden oluşturulan bilgisayar programı kullanılarak, $2 \leq Z \leq 54$ aralığındaki atomların taban durumlarının Compton profil değerleri $0 \leq q \leq 100$ aralığı için hesaplanmış ve literatür sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Sonuç olarak; atomların taban durumlarının Compton profilleri için elde edilen sonuçların literatür ile uyumlu olduğu görülmektedir. Ayrıca, MBS kullanılarak elde edilen atomik Compton profillerinin literatür ile uyumunun GBS kullanılarak elde edilen değerden daha az olduğu ve bu uyumların Z ve q değerlerinin artmasıyla azaldığı sonucuna varılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Slater tipli orbital, Hartree-Fock-Roothaan metodu, Compton profil.

SUMMARY

Calculation of Compton Profiles of the Atoms with Hartree-Fock-Roothaan Method

Compton profiles of the ground states of multi-electron atoms have been calculated by Hartree-Fock-Roothaan (HFR) method. Minimal basis sets (MBS) and extended basis sets (EBS) of Slater type orbitals (STOs) have been used as HFR wave functions. The obtained expressions for atomic Compton profiles by HFR method includes linear combination coefficients c_{pi} and the auxiliary molecular integrals $K_m(\alpha, q)$, $B_{mm}^l(\alpha, \beta : q)$ and $b_{mm}(\alpha, q)$. The correct calculation of atomic Compton profiles depend strictly on accurate calculation of these auxiliary molecular integrals and choice of the most flexible wave functions.

Clementi's wave functions are used as ground state wave functions. Appearing auxiliary molecular integrals are calculated very accurately by handling analytic and recurrence relations.

Computer programs in Maple 13 symbolic programming language have been constructed for the of the expressions obtained for the Compton profiles of multi-electron atoms by HFR method and including auxiliary molecular integrals. A separate file has been constructed for the wave functions of each atoms. Compton profile calculations have been done by reading wave functions of the atom from related file.

Using computer program constructed from the expressions obtained for atomic Compton profiles, Compton profiles of the ground states of the atoms $2 \leq Z \leq 54$ for $0 \leq q \leq 100$ have been calculated and compared with the results in literature. As a result; it is seen that the obtained results for Compton profiles of the ground states of atoms agree with the literature results. In addition, it is concluded that the agreement with the literature for the use of MBS as wave functions is less than the use of EBS as wave functions and also these agreements decrease by increasing values of Z and q values.

Key Words: Slater-type orbital, Hartree-Fock-Roothaan method, Compton profile.

SEMBOLLER ve KISALTMALAR DİZİNİ

Z	: Atom Numarası
λ	: Dalga Boyu
ν	: Frekans
E	: Enerji
c	: Işık Hızı (3×10^8 m/s)
I	: Işık Şiddeti
h	: Planck Sabiti (6.62×10^{-34} J.s)
K	: Kinetik Enerji
m_0	: Elektronun durgun kütlesi
e^-	: Elektron
e^+	: Pozitron
$d\Omega$: Katı açısı
$j_l(x)$: Küresel Bessel fonksiyonu
$S_{lm}(\theta, \varphi)$: Küresel harmonik
η_j	: Doluluk oranı
Ψ	: Sistemin dalga fonksiyonu
$j_l(pr)$: Küresel Bessel fonksiyonu
$J(q, Z)$: Compton Profil
q	: Elektron momentumu
DDSTK	: Double Diferansiyel Saçılma Tesir Kesiti
HF	: Hartree-Fock
HFR	: Hartree-Fock-Roothaan
LCAO	: Atomik Orbitalerin Lineer Kombinasyonu

STO : Slater Tipli Orbital
GTO : Gaussian Tipli Orbital
PTO : Polinom Tipli Orbital
BTO : Bessel Tipli Orbital
MBS : Minimal Baz Seti
GBS : Geniřletilmiř Baz Seti

ŞEKİLLER DİZİNİ

	<u>Sayfa No</u>
Şekil 1. Fotoelektrik olay	3
Şekil 2. Çift oluşumu	5
Şekil 3. Rayleigh saçılması.....	7
Şekil 4. Fotonla elektronun esnek çarpışması	8
Şekil 5. İnkohherent X-Işını saçılması	13
Şekil 6. Rezonans X-Işını saçılması	15

TABLolar DİZİNİ

Sayfa No

Tablo 1. He atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	35
Tablo 2. Li atomunun taban durumu için ($^2S_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	35
Tablo 3. Be atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	36
Tablo 4. B atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	36
Tablo 5. C atomunun taban durumu için (3P_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	37
Tablo 6. N atomunun taban durumu için ($^4S_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	37
Tablo 7. O atomunun taban durumu için (3P_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	38
Tablo 8. F atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	38
Tablo 9. Ne atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	39
Tablo 10. Na atomunun taban durumu için ($^2S_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	39
Tablo 11. Mg atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	40
Tablo 12. Al atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	40
Tablo 13. Si atomunun taban durumu için (3P_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	41
Tablo 14. P atomunun taban durumu için ($^4S_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	41

Tablo 15. S atomunun taban durumu için (3P_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	42
Tablo 16. Cl atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	42
Tablo 17. Ar atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	43
Tablo 18. K atomunun taban durumu için ($^2S_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	43
Tablo 19. Ca atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	44
Tablo 20. Sc atomunun taban durumu için ($^2D_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	44
Tablo 21. Ti atomunun taban durumu için (3F_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	45
Tablo 22. V atomunun taban durumu için ($^4F_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	45
Tablo 23. Cr atomunun taban durumu için (7S_3) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	46
Tablo 24. Mn atomunun taban durumu için ($^6S_{\frac{5}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	46
Tablo 25. Fe atomunun taban durumu için (5D_4) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	47
Tablo 26. Co atomunun taban durumu için ($^4F_{\frac{9}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	47
Tablo 27. Ni atomunun taban durumu için (3F_4) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	48
Tablo 28. Cu atomunun taban durumu için ($^2S_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	48
Tablo 29. Zn atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	49

Tablo 30. Ga atomunun taban durumu için $\left({}^2P_{\frac{1}{2}} \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	49
Tablo 31. Ge atomunun taban durumu için $\left({}^3P_0 \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	50
Tablo 32. As atomunun taban durumu için $\left({}^4S_{\frac{3}{2}} \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	50
Tablo 33. Se atomunun taban durumu için $\left({}^3P_2 \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	51
Tablo 34. Br atomunun taban durumu için $\left({}^2P_{\frac{3}{2}} \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	51
Tablo 35. Kr atomunun taban durumu için $\left({}^1S_0 \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	52
Tablo 36. Rb atomunun taban durumu için $\left({}^2S_{\frac{3}{2}} \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	52
Tablo 37. Sr atomunun taban durumu için $\left({}^1S_0 \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	53
Tablo 38. Y atomunun taban durumu için $\left({}^2D_{\frac{3}{2}} \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	53
Tablo 39. Zr atomunun taban durumu için $\left({}^3F_2 \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	54
Tablo 40. Nb atomunun taban durumu için $\left({}^6D_{\frac{1}{2}} \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	54
Tablo 41. Mo atomunun taban durumu için $\left({}^7S_3 \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	55
Tablo 42. Tc atomunun taban durumu için $\left({}^6S_{\frac{5}{2}} \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	55
Tablo 43. Ru atomunun taban durumu için $\left({}^5F_5 \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	56
Tablo 44. Rh atomunun taban durumu için $\left({}^4F_{\frac{9}{2}} \right)$ hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	56

Tablo 45. Pd atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	57
Tablo 46. Ag atomunun taban durumu için ($^2S_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	57
Tablo 47. Cd atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	58
Tablo 48. In atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	58
Tablo 49. Sn atomunun taban durumu için (3P_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	59
Tablo 50. Sb atomunun taban durumu için ($^4S_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	59
Tablo 51. Te atomunun taban durumu için (3P_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	60
Tablo 52. I atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	60
Tablo 53. Xe atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton Profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması	61
Tablo 54. $1 \leq n \leq 6$ için $f_{nl}(\alpha, p)$ fonksiyonlarının sembolik ifadeleri	66
Tablo 55. $1 \leq n \leq 6$ için $K_{ln}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integralin sembolik ifadeleri.....	68
Tablo 56. $1 \leq n \leq 4$ için $b_{nm}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integralin sembolik ifadeleri.....	70
Tablo 57. $1 \leq l \leq 3$ için $B_{ml}^l(\alpha, \beta: q)$ yardımcı moleküler integralin sembolik ifadeleri...	72

1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

Bir madde hakkında bilgi sahibi olmak için ya da atomun yapısını belirlemek için bu madde üzerine ışık gönderip bu madde ile etkileşmesini sağlamak gerekir. Bu etkileşme ise genellikle spektroskopi yöntemlerinden biri olan X-Işını spektroskopisidir. Bu spektroskopinin çalışması, genellikle X-Işınlarının soğurulması, yayımlanması, kırınımı ya da saçılması esasına dayanmaktadır. Atomun yapısını belirlemek için atoma bir ışın gönderildiğinde, atom ve ışın arasında bir çarpışma meydana gelebilir. Bu çarpışmanın neticesinde parçacığın veya gelen radyasyonun doğrultusunda veya enerjisinde meydana gelen değişme sürecine saçılma denir. Elektromanyetik radyasyonun madde ile etkileşmesinde meydana gelen saçılma, saçılan ışının enerjisine ve faz ilişkisine göre koherent ve inkoherent saçılma olarak iki gruba ayrılır [1].

Gelen fotonun enerjisi ile saçılan fotonun enerjisi aynı olan saçılmaya koherent saçılma denir. İnkoherent saçılma ise, bir fotonun genellikle başlangıçta durgun olan serbest elektronlardan veya bağlanma enerjisi, foton enerjisine kıyasla küçük olan elektronlardan enerji kaybetmesi olarak bilinir. Bu işlemde, gelen foton serbest bir elektronla etkileşerek daha düşük bir enerji ile saçılır ve geri kalan fotonların enerjileri nispeten büyük olduğunda, fotonların atomun bağlı elektronları tarafından saçılmaları da İnkoherent veya Compton saçılması olarak isimlendirilir [1].

İnkoherent saçılmanın tarihi gelişimi, 1895 yılında Röntgen tarafından X-Işınlarının ve 1900'lü yıllarda Villard tarafından Radyumdan yayınlanan gama radyasyonunun keşfedilmesiyle başlamıştır. O zamanlar X-Işınlarının yansımaları, kırılması veya polarizasyonu bilinmediği için bu konular Röntgen'e bir muamma gibi geliyordu. Röntgen X ve gama ışınlarının diğer elektromanyetik radyasyonlardan farklı olduğunu düşünüyordu. Bununla birlikte Thomson, X ve gama ışınlarını gerilmiş bir ip boyunca bir pulsun mekanik yayılmasına benzer esasa dayanan elektromanyetik puls teorisi ile birleştirmiş ve bunları maddedeki elektronlar tarafından saçılmış olabilecek pulslar gibi göstermiştir. Barkla'nın saçılma tesir kesitinin elektron yoğunluğu ile orantılı olduğunu, daha da önemlisi, yaptığı tekli ve çoklu saçılma deneylerinde X-Işınlarının polarize olduğunu göstermesi Thomson teorisine önemli bir destek olmuştur. 1920 yılında Gray'ın hem gama ışınları hem de X-ışınları ile yaptığı deneylerinde saçıcılardaki farklı

elektronlardan saçılan fotonların düşük enerji bölgelerindeki saçılmaların dalga boyundaki değişimleri belirlemiştir. İnkoherent saçılma tesir kesiti, elektronları serbest ve durgun kabul eden Klein-Nishina tarafından teorik olarak incelenmiştir. Bu olaylar 1929'da Klein-Nishina'nın saçılma tesir kesitinin açı ile değişimini keşfetmesi ve birkaç yıl sonra da diğer özelliklerin Compton tarafından tam olarak açıklanmasına kadar anlaşılammıştır. Ancak araştırmacılar daha sonraki yıllarda, özellikle düşük enerjilerde teori ile deneysel neticelerin uyum içinde olmadıklarını tespit etmişlerdir. Böylece inkoherent saçılmaya bağlı elektronların katkılarını araştırmak için bazı araştırmacılar K tabakasından inkoherent saçılma diferansiyel tesir kesiti çalışırken, bazıları da hedeften inkoherent saçılan fotonları tespit etmek suretiyle diferansiyel tesir kesiti çalışmışlardır. Çalışmalarda genel prensip, düşük atom numaralı elementler referans alınarak pik alanlarının mukayesesine dayanmaktadır [2].

İnkoherent saçılma ile ilgili hesaplamalar; reaktör kaplama, endüstriyel radyografi, medikal fizik, radyobiyojoloji, radyoterapi, taşıma, enerji depolama, görüntüleme, astronomi, madde analizinde, kalitatif ve kantitatif analiz gibi pek çok alanda kullanılmaktadır. Ayrıca X-Işınlarının elektronlardan inkoherent saçılması, dalga fonksiyonlarının belirlenmesinde de kullanılmaktadır [3]. Geçen yıllar boyunca Compton saçılması daha geniş ve farklı bilim dallarında uygulama bulunduğundan önemi gittikçe artmaktadır.

1.2. Gama ve X-Işınlarının Madde ile Etkileşmesi

Gama ışınları, elektromanyetik spektrumdaki en kısa dalga boylu $10^{-14} - 10^{-10}m$ ve en fazla enerjili elektromanyetik radyasyonlardır. Gama ışınları elektrik alandan ve manyetik alandan etkilenmeyen, yüksek girme gücüne sahip elektromanyetik dalgalardır. Bir çekirdeğin herhangi bir nedenle örneğin bir α (alfa) veya β (beta) parçacığı yayınlarken bozunması ya da dışarıdan bir parçacık veya fotonla bombardıman edilmesi genellikle çekirdeği uyarılmış bir duruma getirir. Çekirdek daha düşük enerjili bir duruma geçerken aradaki enerji farkına çok yakın bir enerji paketini bir gama ışını olarak yayınlatabilir [4].

Gelen gama ışını fotonu ile ikincil parçacıkların yönü arasındaki açısal ilişki de enerji hakkında önemli bilgiler sağlar. Bu ışınların madde ile etkileşmelerini, etkileşme alanına göre aşağıdaki gibi gruplandırılır [5]:

- ✓ Atomun elektronuyla etkileşme,
- ✓ Çekirdekle etkileşme,

- ✓ Çekirdek ve elektron etrafındaki elektrik alanla etkileşme,
- ✓ Çekirdek çevresindeki mezon alanı ile etkileşme

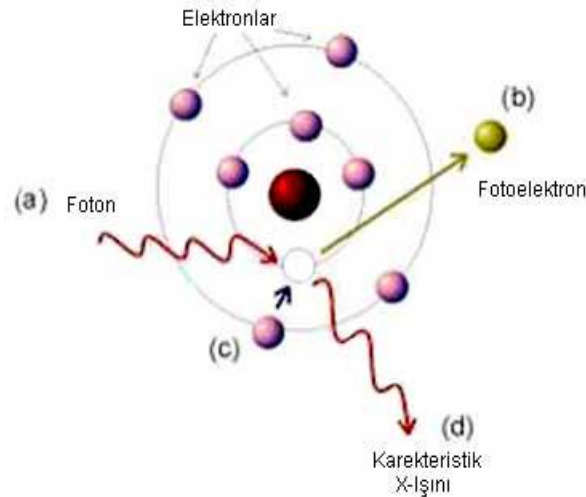
Bir nükleer bozunmada yayımlanan ve bir MeV'in küçük bir kesrinden birkaç MeV'e kadar bir aralıkta enerjiye sahip olan gama ışınları, bu aralıkta madde ile etkileşmesi sonucunda ya tam bir soğurulma ya da saçılma olur ve enerji kaybettikleri aşağıdaki üç temel olay meydana gelir ve bu olaylar;

- ✓ Fotoelektrik olay,
- ✓ Çift oluşumu,
- ✓ Saçılma (Koherent saçılma ve İnkohherent saçılma)

bu üç olay birbirinden bağımsızdır [6].

1.2.1. Fotoelektrik Olay

Işığın tanecikli yapıda olduğunu gösteren olaylardan biride fotoelektrik olaydır. Bu olay ilk defa 1887 yılında H. Hertz tarafından gözlenmiştir. 1905 yılında ise Einstein tarafından formüle edilmiştir. Genellikle düşük enerjilerde (yaklaşık 0,01 MeV-0,5 MeV'e kadar) fotoelektrik olay baskındır. Işığa duyarlı bir yüzeyin bir fotonla bombardıman edilmesi sonucu o yüzeyden elektronun sökülmesi ve tüm enerjisini elektrona vererek bu elektronu atomun bağlı yörüngesinden ayırıp serbest hale getirmesi olayına fotoelektrik olay, sökülen elektrona ise fotoelektron denir.



Şekil 1. Fotoelektrik olay

Bu olay sırasında gelen fotonun enerjisinin bir kısmı elektronu bağı olduğu atomdan koparabilmek için harcanır, geri kalan kısmı ise koparılan elektrona kinetik enerji olarak aktarılır:

$$h\nu = E_{bağlanma} + E_{kinetik} \quad (1)$$

Burada $E_{kinetik}$ elektronun kazandığı kinetik enerji, $h\nu$ gelen fotonun enerjisi ve $E_{bağlanma}$ ise elektronun bağlanma enerjisidir. Serbest haldeki bir elektronda enerji ve momentumun ikisi birden korunumlu olmayacağından, böyle bir elektronun foton soğurması mümkün değildir. Fakat bağı elektronlarda durum böyle değildir. Atom geri tepme ve böylece momentumun korunması sağlanır. Atomun kütlesi çok büyük olduğundan geri tepme enerjisi çok küçüktür ve bu yüzden de kinetik enerji ifadesi ihmal edilmiştir [5].

Düşük atom numaralı (Z) elementlerin bağlanma enerjileri de düşük olduğundan fotoelektrik etki bahsedilen fotonlar için güçsüz kalır. Z arttıkça bağlanma enerjisi de artar ve böylece fotoelektrik etki de artar.

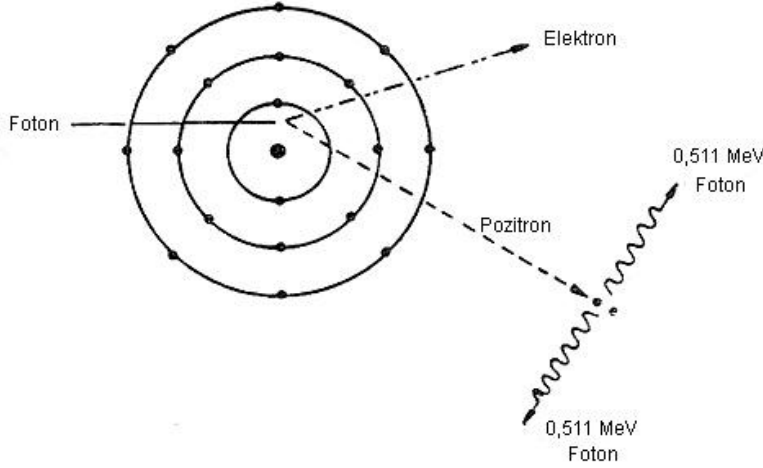
Fotoelektrik olayı atomun çevresinde tüm yörüngelerde meydana gelebilir. Foton enerjisinin yüksek olduğu durumlarda bu olayın iç yörüngelerde olma olasılığı artmaktadır. Buna göre fotoelektrik olayı, düşük enerjilerde dış, yüksek enerjilerde ise iç yörüngelerde meydana gelmektedir. Foton enerjisi herhangi bir yörüngenin bağ enerjisine eşit olduğu durumda etkileşme o yörüngede yoğunluk kazanmaktadır [7].

1.2.2. Çift Oluşumu

Rölativistik enerjinin bir şekilden bir başka şekle dönüşmesi olaylarından biride çift oluşumdur. Gelen fotonun enerjisi 1,022 MeV'lik bir enerjiden daha büyük olursa çift oluşumu meydana gelir. Çekirdeğin etkin alanına giren yüklü bir parçacık veya foton, bir elektron ve bir pozitrona dönüşmesi olayına çift oluşumu denir. Elektronun ve pozitronun kütleleri birbirine eşit, yükleri ise zıt işaretlidir. Çift oluşumu bir çekirdek etrafında veya yüklü bir parçacık etrafında meydana gelebilir. Bu olay çekirdek etrafında oluştuğundan hiçbir korunum ilkesi bozulmuş olmaz. Sonuçta; bu olay meydana gelirken yük, çizgisel momentum ve toplam enerji korunur [8].

$$\gamma \text{ fotonu} \rightarrow e^- + e^+ \quad (2)$$

Çift oluşumu ilk defa 1928 yılında Dirac tarafından teorik olarak belirlenmiştir. 1932 yılında ise Anderson tarafından deneysel olarak gözlenmiştir. Bu deneylerde yeterli enerjiye sahip fotonlar kurşun levhadan geçirilmeye zorlanmışlardır. Çıkan ışınların doğrultusuna dik bir manyetik alan içinde bulunan bir sis odasından geçirildiğinde bu fotondan elektron ve pozitron şeklinde iki yeni parçacığın oluştuğu gözlenmiştir [9].



Şekil 2. Çift oluşumu

1.2.3. Koherent Saçılma

Gelen foton ile saçılan foton arasında, enerji farkı olmadan meydana gelen saçılmaya koherent saçılma denir. Bu olayda gelen fotonla saçılan fotonun dalga boyları aynıdır. Gelen foton ile saçılan foton arasında bir faz ilişkisi olup, bu ilişkiden dolayı saçılan dalgalar arasında girişim meydana gelebilir. Böylece atom tarafından saçılan radyasyonun toplam şiddeti her bir elektron tarafından saçılan radyasyonun genliklerinin toplamı ile bulunur. Çoğu zamanda Thomson, Delbrück, Rayleigh ve Nükleer Rezonans saçılmaları koherent saçılma olarak da bilinir. Bir atomdan saçılma için genlikler, bu dört tip saçılmadan olan katkıların toplamı gibi yazılabilir [10].

$$A = A^R + A^D + A^T + A^N \quad (3)$$

Burada, A^R Rayleigh saçılmasının genliğini, A^D Delbrück saçılmasının genliğini, A^T Thomson saçılmasının genliğini, A^N Nükleer Rezonans saçılmasının genliğini temsil etmektedir. Koherent saçılma çoğu kez elastik veya Rayleigh saçılması olarak da adlandırılır [3].

Koherent saçılma (bağlı elektrondan rezonans saçılma), fotonların atoma sıkı bağlı elektronlar tarafından saçılmasıdır. Bu olay; gelen bir foton, bağlı bir elektron üzerine düştüğünde elektronun atomdan sökülecek kadar enerji alamadığı hallerde meydana gelir. Bu yüzden, bu saçılma düşük enerjilerde ve büyük atom numaralı (Z) ağır elementlerde meydana gelmektedir [11]. Koherent saçılma; Thomson Saçılması, Rayleigh saçılması, Delbruck saçılması, nükleer rezonans saçılma ve Nükleer Thomson saçılması olmak üzere beş gruba ayrılır [3].

1.2.3.1. Thomson Saçılması

Serbest elektronlar tarafından X-Işınlının saçılması Thomson tarafından açıklanmıştır. Saçılma olayını klasik elektromanyetik teoriye göre açıklayan Thomson'a göre bir foton serbest bir elektronun üzerine geldiğinde elektron ile etkileşir. Fotonun elektrik alan bileşeni sebebiyle elektronu ortalama bir konum etrafında titreştirmektedir. Bu hareket sonucu elektronun titreşim ivmesine sebep olan kuvvetler meydana gelir. Klasik elektromanyetik teoriye göre; ivmeli harekette bulunan yüklü parçacıklar elektromanyetik dalga yayınlarlar. Kazanılan ivme sonucu yayınlanan elektromanyetik dalga, gelen dalga ile aynı faz ve aynı frekanstadır [12].

1.2.3.2. Nükleer Thomson Saçılması

Bu saçılma; gelen foton ile çekirdek arasında meydana gelir. Klasik elektromanyetik teoriye göre; çekirdek, gelen dalga tarafından uyarılır. Foton ile çekirdek burada çarpışırlar. Çekirdeğin kütlesi gelen fotona göre çok büyük olduğundan bu çarpışma etkisi çok küçüktür. Gelen fotonun dalga boyunun nükleer yarıçaptan çok büyük olması durumunda maksimum etki gözlenir [3].

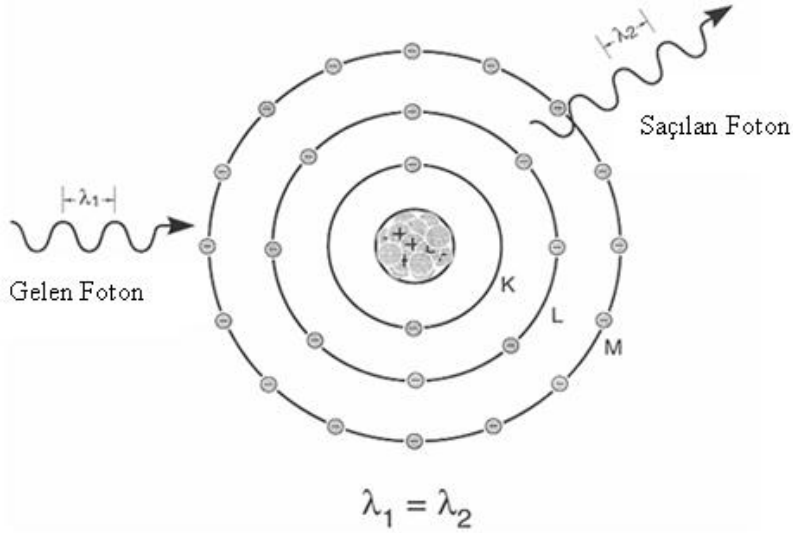
1.2.3.3. Nükleer Rezonans Saçılması

Atomun çekirdeği ile fotonun etkileşmesi sonucu meydana gelen saçılmaya nükleer rezonans saçılması denir. Bu olayda, çekirdek iki nükleer enerji seviyesi arasındaki farka eşit enerjiye sahip olan bir fotonun soğrulması ile uyarılır. Daha sonra bunu çekirdeğin uyarılmış durumdan kurtulması (deeksitasyonu) takip eder [3].

1.2.3.4. Rayleigh Saçılması

Bu saçılma, gelen bir foton bağlı bir elektron üzerine düştüğünde elektronun atomdan sökülecek kadar enerji alamadığı hallerde meydana gelir. Bu yüzden, düşük foton enerjilerinde ve yüksek atom numaralı ağır elementlerde daha çok meydana gelmektedir [6].

Rayleigh saçılması, elektronun etkileşmeden sonra eski haline döndüğü saçılma olarak da tanımlanabilir. Bu saçılmada, gelen fotonun enerjisi, yaklaşık olarak, 0.1-0.5 MeV arasındadır. Büyük enerjili fotonların hafif elementlerden saçılmasında Rayleigh saçılması, Compton saçılması yanında ihmal edilebilir [13].



Şekil 3. Rayleigh saçılması

1.2.3.5. Delbrück Saçılması

Bu saçılma, elastik nükleer potansiyel saçılma olarak da bilinir. Delbruck saçılması, çekirdeğin oluşturduğu Coulomb alanında fotonun bir elektron-pozitron çifti oluşturmasıdır. Atomun tamamen geri tepkimesiyle bu çiftin yok olması, gelen fotonun enerjisi ve faz değeri aynı olan yeni bir foton oluşturur. Bu olayın etkisi oldukça küçük olduğundan dolayı deney sonuçlarında saçılan foton net olarak gözlenemez [3].

1.2.4. İnkohherent Saçılma

İnkohherent saçılmada gelen foton ile saçılan foton arasında enerji farkı vardır. Saçılma sırasında gelen fotonun enerjisinin bir kısmı atomun zayıf bağlı elektronlarına veya serbest elektronlarına aktarılır. Bu enerji kaybı nedeniyle saçılan fotonların dalga

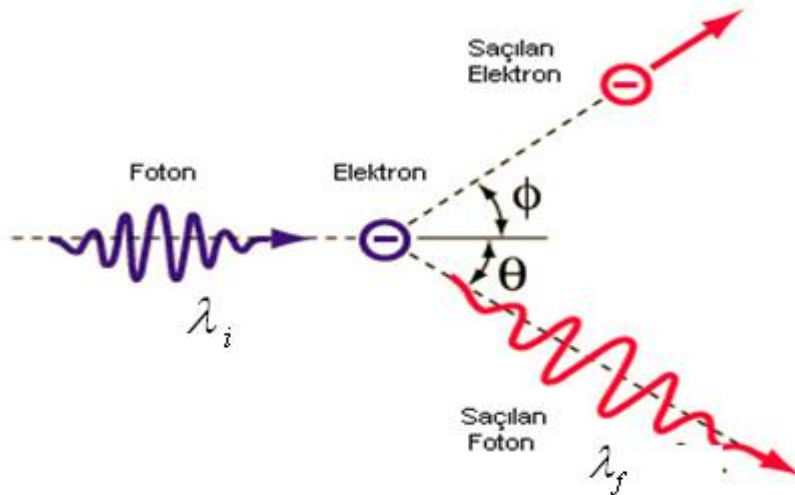
boyları gelen elektronun dalga boyundan daha uzun olur. İnkohherent saçılmada; gelen ve saçılan fotonların fazları arasında sabit bir ilişki yoktur. Bu durumda atom tarafından saçılan radyasyonun toplam radyasyonun şiddeti, atomun her bir elektronunun saçılma şiddeti toplanarak bulunur. En çok gözlemlenen inkohherent saçılma şekli Compton saçılmasıdır. Bu nedenle inkohherent saçılma çoğu kez Compton saçılması olarak da bilinir.

Işığın kuantum teorisini ve dolayısıyla tanecikli yapısını açıklayan önemli olaylardan biri olan Compton saçılması serbest ve bağlı elektronlar tarafından yüksek enerjili bir fotonun enerji kaybederek saçılmasıdır. İnkohherent saçılma; Compton saçılması, Nükleer saçılma ve Raman saçılması olmak üzere üç gruba ayrılır .

1.2.4.1. Compton Saçılması

Işığın tanecikli yapıda olduğu gösteren olaylardan biri de Compton saçılmasıdır. Bu olay, gama fotonunun atomun dış yörüngesindeki zayıf bağlı bir elektrona çarparak enerjisinin bir kısmını o elektrona vermesi ve geliş doğrultusu ile θ açısı yaparak saçılması ile oluşur.

Şekil 4’de görüldüğü gibi rölativistik enerjisi E_0 ve momentumu P_0 olan bir foton, durgun kütle enerjisi m_0c^2 olan durgun bir elektron üzerine gönderilmiştir. Gelen foton, duran elektronla θ açısı yaparak saçılırken elektron da çarpışmadan sonra, K kinetik enerjisi ve P momentumu ile ϕ açısı yaparak geri tepmektedir. Bu olayda gelen foton, saçılan foton ve geri tepen elektron aynı düzlemedir.



Şekil 4. Fotonla elektronun esnek çarpışması

Enerjinin ve momentum korunumundan gelen ve saçılan fotonların dalga boyları arasındaki fark,

$$\Delta\lambda = \lambda_f - \lambda_i = \lambda_c (1 - \cos \theta) \quad (4)$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifade Compton ifadesi olarak bilinir. Burada,

$$\lambda_c = \frac{h}{mc} = 2,426.10^{-12}m \quad (5)$$

Compton dalga boyu olarak adlandırılır. λ_c 'nin değeri ise deneysel değeri ile çok iyi uyuşmaktadır.

Saçılan ışınımın gelen ışınım ile aynı λ_i dalga boyuna sahip değişmemiş bileşenin bulunması, sıkı bağlı elektronlar nedeniyle tüm atomun geri tepmesiyle açıklanabilir. O halde denklem (5)'de kullanılan kütle, tüm atomun M kütlesidir ve $M \gg m$ olduğu için $\Delta\lambda$ Compton kayması iptal edilebilir. Aynı nedenden ötürü görünür bölgedeki ışık için Compton kayması yoktur. Çünkü bu halde foton enerjisi en gevşek bağlı elektronların bağlanma enerjilerinden bile büyük değildir. Bunun aksine, çok enerjik γ -ışınları için yalnız kaymış çizgileri gözlenir. Çünkü foton enerjileri, en sıkı bağlı elektronların bağlanma enerjileri ile kıyaslandığında bile büyüktür.

Compton kuramında öngörülen geri tepme elektronları 1923 yılında W. Bothe ve C.T.R. Wilson tarafından gözlenmiştir. W. Bothe ve H. Geiger, saçılan foton ve geri tepen elektronun aynı anda göründüklerini göstermiştir. Son olarak 1927 yılında A.A. Bless, fırlatılan elektronun enerjisini ölçmüştür ve Compton kuramına göre öngörülenle uyduğunu bulmuştur [14].

Compton saçılması sadece θ açısına bağlı olarak değişmektedir. Bazı işlemler sonucu saçılan fotonun enerjisi için,

$$E_1 = \frac{E_0}{1 + \frac{E_0}{m_0 c^2} (1 - \cos \theta)} \quad (6)$$

ifadesi geri tepen elektronun kinetik enerjisi için ise,

$$K = \frac{\frac{E_0 h}{m_0 c^2} (1 - \cos \theta)}{1 + \frac{h}{m_0 c^2} (1 - \cos \theta)} \quad (7)$$

ifadesi bulunur [6].

1.2.4.2. Nükleer Saçılma

İnkoherent saçılma olarak bilinen nükleer saçılma, atomun çekirdeği ile fotonun etkileşmesi sonucu meydana gelmektedir. Bu saçılmanın inkoherent saçılmaya katkısı oldukça küçüktür [1, 3, 5].

1.2.4.3. Raman Saçılması

Fotonun moleküller tarafından soğurulmasına Raman saçılması denir. $h\nu$ enerjili bir foton soğurulur ve atom bir a durumundan bir n durumuna uyarılır. Atom $h\nu'$ enerjili bir foton yayınlar ve uyarılmış n durumundan son b durumuna döner. Atomun son durumu başlangıç durumundan farklı ise saçılma inkoherenttir ve bu olay Raman saçılması olarak bilinir. Böylece saçılmalarda saçılan foton gelen fotondan daha az enerjili olabileceği gibi, eğer uyarılmış molekül başlangıçta uyarılmış titreşim veya dönme enerji seviyesinde ise daha fazla enerjiye de sahip olan bir foton yayımlanır [1, 3, 5].

1.3. Tesir Kesiti

Herhangi bir olayın meydana gelme ihtimalinin bir ölçüsüne tesir kesiti denir. I şiddetinde bir ışın demeti, t kalınlığında bir A yüzeyine gelsin. Maddenin birim hacmindeki atom sayısı n ve atomik tesir kesiti σ ise, ışına maruz kalan madde alanı $An\sigma t$ olur. Bu ifade $n\sigma t$ etkin alan kesri adını alır. Etkin alan kesri f ile gösterilir ve levhadan geçen demetin şiddetindeki değişimin kesrini temsil eder. Gelen ışın demetindeki N parçacıktan N_s tanesi etkileşime giriyorsa, tesir kesitinin klasik ifadesi;

$$\sigma = \frac{N_s}{nNt} \quad (8)$$

olarak yazılır [15]. Etkileşen ışın demeti, saçılma meydana geldikten sonra tesir kesiti farklı açılar için farklı değerler alır. Bunun için açığa bağlı başka bir tesir kesiti tanımlanır. Bu yeni tesir kesitine diferansiyel tesir kesiti denir ve birim katı açı başına düşen tesir

kesiti olarak tanımlanır. Bir etkileşimde gelme açısı doğrultusundaki $d\Omega$ katı açısı içinde saçılan ışın sayısının, gelen ışın sayısına oranının ölçüsüdür. Diferansiyel saçılma tesir kesiti, gelen ışının birim katı açı başına saçılma ihtimali olarak da tanımlanır [15]. Diferansiyel saçılma tesir kesiti koherent saçılma diferansiyel tesir kesiti ve inkoherent saçılma diferansiyel tesir kesiti olarak ikiye ayrılır.

1.3.1. Koherent Saçılma Diferansiyel Tesir Kesiti

Koherent saçılma diferansiyel tesir kesiti;

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} &= \frac{d\sigma_T(\varphi)}{d\Omega} [F(x, Z)]^2 \\ &= \frac{1}{2} r_e^2 (1 + \cos^2 \theta) [F(x, Z)]^2\end{aligned}\quad (9)$$

olarak yazılır [16]. Koherent saçılma diferansiyel tesir kesiti iki faktörden oluşur. İlk faktör elektron başına Thomson saçılma diferansiyel tesir kesiti olup;

$$\frac{d\sigma_T(\theta)}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2 \theta) \quad (10)$$

ifadesiyle verilir ve ikinci faktör ise atomik form faktörünün karesidir. Hubbell ve arkadaşları bu değerleri makalelerinde [16] tablolar halinde sunmuştur.

1.3.2. İnkoherent Saçılma Diferansiyel Tesir Kesiti

Saçılma olayı meydana geldiğinde saçılan fotonlar çoğu kez anizotropik dağılım gösterirler ve aynı zamanda farklı açılarda farklı enerjilere sahip olurlar. Geliş istikametiyle θ açısı yaparak $d\Omega$ katı açısı içinde saniyede saçılan fotonların sayısının bilinmesi önemlidir. Bunun hesabının yapılabilmesi için açıya bağımlı diferansiyel tesir kesiti tanımlanır. Diferansiyel tesir kesiti, birim katı açı başına düşen tesir kesiti ($d\sigma/d\Omega$) olarak tarif edilmekte ve inkoherent saçılma diferansiyel tesir kesiti,

$$\frac{d\sigma_{inc}(\theta)}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{KN}(\theta)}{d\Omega} S(x, Z) \quad (11)$$

ifadesi ile verilmektedir.

Denklem (11)'deki $\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega}$ Klein-Nishina diferansiyel tesir kesiti olup,

$$\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_0^2 \left[1 + k(1 - \cos \theta)^2 \right]^{-2} \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{k^2 (1 - \cos \theta)^2}{1 + k(1 - \cos \theta)} \right] \quad (12)$$

denklemini ile verilir. Burada k elektronun durgun kütle enerjisi ve r_e klasik elektron yarıçapıdır. Denklem (11)'deki $S(x, Z)$ ise inkoherent saçılma fonksiyonu olup, $x = \sin(\theta/2)/\lambda$ ifadesiyle verilir [1].

1.4.Compton Saçılmasının Teorisi

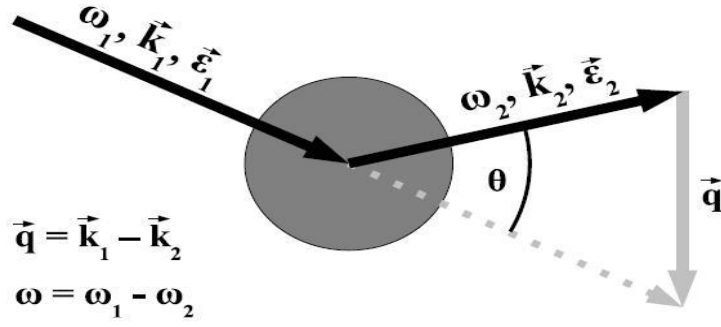
1.4.1. İnkohherent X-Işını Saçılması

İnkohherent X-Işını saçılma deneyinin geometrisi Şekil 5.'de gösterilmiştir. Enerjisi $\hbar\omega_1$, dalga vektörü \vec{k}_1 ve polarizasyon vektörü $\vec{\epsilon}_1$ olan bir foton verilen sistemle etkileşir ve θ açısı ile saçılır. Saçılan fotonun enerjisi $\hbar\omega_2$, dalga vektörü \vec{k}_2 ve polarizasyon vektörü de $\vec{\epsilon}_2$ olur. Sisteme transfer edilen enerji $\hbar\omega = \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2$ 'dir. Sisteme transfer edilen momentum $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$ olur. \vec{q} 'nin büyüklüğü ise;

$$|\vec{q}| = \sqrt{\omega_1^2 - 2\omega_1\omega_2 \cos \theta + \omega_2^2} \quad (13)$$

şeklinde verilir. Transfer edilen enerji ($\hbar\omega_1$) başlangıç enerjisine göre küçük ise (13) denklemini aşağıdaki denkleme indirgenir:

$$|\vec{q}| \cong 2k_1 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (14)$$



Şekil 5. İnkohherent X-ışını saçılması

İnkohherent X-ışını saçılma deneyinin amacı double diferansiyel tesir kesitini $d^2\sigma/d\Omega d\omega_2$ ölçmektir. Gelen fotonun enerjisi ($\hbar\omega_1$) ve saçılma açısı (θ) deney boyunca sabit tutulur ve bu şekilde $d^2\sigma/d\Omega d\omega_2$ \vec{q} ve ω ' nın bir fonksiyonu olarak ölçülür. Double diferansiyel saçılma tesir kesiti hesaplamalarında atomik kütle birimleri kullanılacaktır. ($\hbar = c = 1$)

1.4.2. Rölativistik Olmayan Double Diferansiyel Saçılma Tesir Kesiti

Double diferansiyel tesir kesitinin (DDTK) rölativistik olmayan limitte türetilmesi için kullanılacak etkileşim hamiltonyeni

$$H_{em} = \sum_j \frac{e^2}{2m} \vec{A}(\vec{r}_j)^2 - \sum_j \frac{e}{m} \vec{P}_j \vec{A}(\vec{r}_j) = H_{em}^{(1)} + H_{em}^{(2)} \quad (15)$$

Burada \vec{P}_j , j elektronun momentum operatörüdür ve $\vec{A}(\vec{r}_j)$ ise \vec{r}_j noktasındaki elektromanyetik alanın vektör potansiyel operatörüdür. Denklem (15)'de elektronun birim yükü ve m ise durgun kütesini gösterir. İkinci kuantizasyona göre vektör potansiyel operatörü $\vec{A}(\vec{r}_j)$ foton oluşturma a_λ^+ ve yok etme a_λ operatörleri cinsinden ifade edilebilir:

$$\vec{A}(\vec{r}_j) = \sum_{j,k} \sqrt{\frac{2\pi\omega_k}{V_0}} \left[\vec{\epsilon}(\lambda, \vec{k}) a(\lambda, \vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}_j} + \vec{\epsilon}^*(\lambda, \vec{k}) a^+(\lambda, \vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \right] \quad (16)$$

Denklem (15)'de $\vec{A}(\vec{r}_j)^2$ terimi bir fotonun her bir oluşturma ve yok etmesini temsil eder ve dolayısıyla da koherent ve inkoherent saçılma olaylarını da temsil eder. Birinci dereceden pertürbasyon teorisinde $\vec{P}_j \vec{A}(\vec{r}_j)$ terimi fotonun oluşturulmasını veya yok edilmesini ifade eder ve bu yüzden DDSTK katkısı yoktur. DDSTK (15) ve (16) denklemlerinden faydalanarak hesaplarırken $H_{em}^{(1)}$ terimi baskın terimdir. $H_{em}^{(2)}$ ise ikinci dereceden pertürbasyon teorisinden faydalanılarak hesaplanır [17]:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = r_0^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} \sum_{b,s} \left\langle s \left| \sum_j e^{i\vec{q}\vec{r}_j} \right| b \right\rangle (\vec{\varepsilon}_1 - \vec{\varepsilon}_2) \quad [a]$$

$$- \frac{1}{m} \sum_n \frac{\langle s | \vec{\varepsilon}_2 \sum_j \vec{P}_j e^{i\vec{k}_2 \vec{r}_j} | n \rangle \langle n | \vec{\varepsilon}_1 \sum_j \vec{P}_j e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_j} | b \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_b - \omega_1 + \frac{1}{2} i\Gamma_n} \quad [b]$$

$$+ \frac{\langle s | \vec{\varepsilon}_1 \sum_j \vec{P}_j e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_j} | n \rangle \langle n | \vec{\varepsilon}_2 \sum_j \vec{P}_j e^{-i\vec{k}_2 \vec{r}_j} | b \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_b - \omega_2} \Bigg|^2 \times \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_b - \omega) \quad [c] \quad (17)$$

Bu ifade Kramers-Heisenberg denklemi olarak bilinir.

Burada;

m : elektronun kütlesi

r_0 : elektronun klasik yarıçapı

$|b\rangle$: başlangıç durumu

$|s\rangle$: son durum

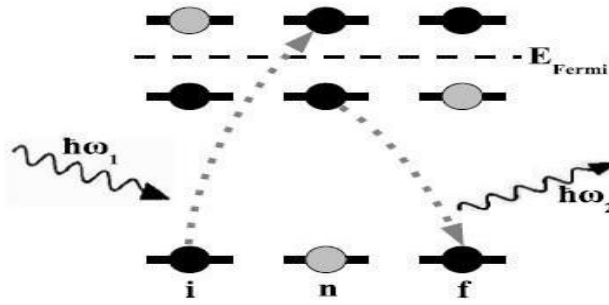
$|n\rangle$: ara durum

Burada $\varepsilon_b, \varepsilon_s, \varepsilon_n$ sırasıyla başlangıç, ara ve son durumdaki elektronların enerjilerini gösterir.

Denklem (17)'deki toplamlar başlangıç ve son durumlar, bütün ara seviyeler ve sistemin bütün j elektronları üzerinden alınır. Denklem (17)'deki [a] satırıdır. Fotonun verilen sistem üzerindeki saçılmasını temsil eder. Burada başlangıç $|b\rangle$ durumundan son $|s\rangle$ durumuna direk geçiş söz konusudur. Denklem (17)'ye bakıldığında, [a] satırı dikkate alındığında tesir kesiti başlangıç ve son seviyeler ile sisteme transfer edilen enerji ve momentumun bir fonksiyonu olur. Denklem (17)'de [c] satırında çarpım durumunda

bulunan Dirac-Delta fonksiyonu ise enerjinin korunumunu temsil eder. Denklem (24)'de görüldüğü üzere [b] ve [c] satırları [a] satırına göre $1/m$ çarpanı ile çarpılmıştır. Gelen fotonun enerjisi elektron sisteminin bağlanma enerjisinden büyük ise [b] ve [c] satırlarının katkısı ve tesir kesitine etkin bir katkı yapar.

Denklem (17)'deki ω_1 test edilen sistemin bağlanma enerjisine yakın ise [b] satırı rezonans davranışı gösterir. Burada foton absorblanır ve sistem bir ara seviyeye $|n\rangle$ uyarılmış olur. Bir foton yayınlanması ile de son duruma ulaşılmış olur.



Şekil 6. Rezonans X-Işını saçılması

Rezonans, inkoherent X-Işını saçılması Şekil 6.'da verilmiştir. Compton saçılması deneylerinde gelen fotonların enerjileri sistemin bağlanma enerjilerinden çok büyüktür ve bu yüzden (17) denklemindeki [a] satırı çok etkin rol oynar. Diğer rezonans ([b] ve [c]) satırları ihmal edilir ve sonuç olarak tesir kesiti

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = r_0^2 (\vec{\epsilon}_1 \vec{\epsilon}_2)^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} \sum_{b,s} \left| \left\langle s \left| \sum_j e^{i\vec{q}\vec{r}_j} \right| b \right\rangle \right|^2 \delta(\epsilon_s - \epsilon_b - \omega) \quad (18)$$

şeklinde yazılabilir.

1.4.3. Dinamik Saçılma Faktörü

Rölativistik olmayan DDSTK aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Th} S(\vec{q}, \omega) \quad (19)$$

Burada $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th}$ elektronlar üzerinden koherent olarak saçılan fotonların Thomson tesir kesitidir ve

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} = r_0^2 (\vec{\varepsilon}_1 \vec{\varepsilon}_2)^2 \left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right) \quad (20)$$

ile verilir. Denklem (19)'da $S(\vec{q}, \omega)$ ise dinamik saçılma faktörüdür ve

$$S(\vec{q}, \omega) = \sum_{b,s} \left| \langle s | \sum_j e^{i\vec{q}\vec{r}_j} | b \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_s - \varepsilon_b - \omega) \quad (21)$$

ile verilir. Dinamik saçılma faktörü dış pertürbasyona karşı elektronik sistemin dinamik tepkisi olarak düşünülebilir. Fonon uyarılmaları ihmal edilirse rezonans olmayan inkoherent X-Işını saçılması olayı aşağıdaki şekillerde incelenebilir:

1. *Değerlik elektron uyarılmaları:*

Plazmonlar ve parçacık çukur çifti uyarılmaları; enerji transferi plazmon frekansına yakın olduğunda ve $\vec{q}\vec{r}_s \cong 1$ olduğunda gözlenebilir [18]. Bu uyarılmalar saçılma deneylerinde çok küçük bir katkıya sahiptirler.

2. *Rezonans olmayan X-Işını raman saçılması:*

Transfer edilen enerji sistemin bağlanma enerjisine yakın olduğunda DDSTK absorpsiyon spektroskopisindeki sonuçlara benzer sonuçlar verir. Ayrıca $\vec{q}\vec{r}_s > 1$ olduğunda çok kutup geçişleri mümkün olur.

3. *Compton saçılması:*

Compton bölgesinde enerji transferi elektronların bağlanma enerjisine göre büyüktür. $\omega \gg \omega_b$ ve $\vec{q}\vec{r}_s \cong 1$ dir. Bu iki şart sağlanırsa DDSTK impuls yaklaşımında incelenebilir.

1.4.4. İmpuls Yaklaşımı

İmpuls yaklaşımında; saçılmaların o kadar hızlı olduğu kabul edilir ki elektron sistemi kendisini yeniden düzenlemeye zaman bulamaz ve etkileşim sabit bir potansiyel altında olur. Bunun sonucu olarak ta transfer edilen enerji $\omega \gg \omega_b$ ve momentum $\vec{q}\vec{r}_s \cong 1$ o

kadar büyüktür ki uyarılmış elektron serbest elektron gibi düşünülebilir. Denklem (18)'de ki Dirac-Delta fonksiyonunun fourier dönüşümü alınırsa ifadeler daha basitleşir.

$$\{\delta(x)\}^{FT} = \frac{1}{2\pi} \int e^{-ixt} dt \quad (22)$$

tanımından hareketle

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Th} \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\omega t} dt \sum_{b,s} \left\langle b \left| \sum_{j'} e^{i\vec{q}\vec{r}_{j'}} \right| s \right\rangle \left\langle s \left| e^{i\varepsilon_s t} \sum_j e^{i\vec{q}\vec{r}_j} e^{-i\varepsilon_b t} \right| b \right\rangle \quad (23)$$

ε_b ve ε_s ve elektron sisteminin hamilton operatörünün özdeğerleri olduğu için (23) denklemi;

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Th} \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\omega t} dt \left\langle b \left| \sum_{j'} e^{i\vec{q}\vec{r}_{j'}} e^{iHt} \sum_j e^{i\vec{q}\vec{r}_j} e^{iHt} \right| b \right\rangle \quad (24)$$

şeklinde yazılabilir. Hamiltonyenin kinematik terimi ve sabit potansiyel terimi olduğu dikkate alınırsa;

$$e^{iHt} \cong e^{iH_0 t} e^{iVt} e^{-\frac{i}{2}[H_0, V]^2} \quad (25)$$

yazılabilir. Compton bölgesinde;

$$\frac{1}{2} \langle [H_0, V] \rangle \approx \varepsilon_b^2 \square \omega^2, \quad (26)$$

şeklinde olur ve

$$e^{-\frac{i}{2}[H_0, V]^2} \cong 1 \quad (27)$$

şeklindedir ($t \gg \frac{1}{\omega}$ için). Bu yüzden (24) denkleminde

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Th} \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\omega t} dt \left\langle i \left| \sum_{j'} e^{-i\vec{q}\vec{r}_{j'}} e^{iH_0 t} \sum_j e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} e^{iH_0 t} \right| i \right\rangle \quad (28)$$

V potansiyeli elektronun konumu ile komüte ettiği için \vec{r}_j 'ye bağlı çarpanlar daha basit bir hal alır. Bu durumda problem bir elektronlu atom problemine indirgenmiş olur ve bu yüzden j ve j' bağlı toplam ifadeleride kalkmış olur. Gerekli matematiksel işlemler yapılırsa;

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Th} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int |\varphi_i(\vec{p})|^2 \delta \left[\frac{q^2}{2m} + \frac{\vec{p}\vec{q}}{m} - \omega \right] d^3p \quad (29)$$

Burada $\frac{q^2}{2m}$ durgun haldeki elektronun rölativistik olmayan Compton kaymasını, $\frac{\vec{p}\vec{q}}{m}$ sonlu \vec{p} momentumuna sahip bir elektronun başlangıç durumundaki Doppler kaymasını gösterir. Momentum uzayında yoğunluk fonksiyonu;

$$\rho(\vec{p}) = \varphi(\vec{p})\varphi(\vec{p}) = |\varphi(\vec{p})|^2 \quad (30)$$

şeklindedir. Denklem (29)'da yerine yazıldığında denklemin düzenlenmiş hali ise;

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Th} \frac{1}{(2\pi)^s} \int \rho(\vec{p}) \delta \left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\vec{p}\vec{q}}{m} - \omega \right) d^3p \quad (31)$$

şeklinde olur. Denklem (31) kullanılarak;

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Th} \frac{m}{q} \iint \rho(p_x, p_y, p_z) dp_x dp_y \quad (32)$$

elde edilir. Burada

$$p_z = \frac{m}{q} \omega - \frac{q}{2} \approx m \frac{\omega_1 - \omega_2 - \frac{\omega_1 \omega_2}{m} (1 - \cos \theta)}{\sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2 - 2\omega_1 \omega_2 \cos \theta}} \quad (33)$$

ifade edilir.

1.4.5. Compton Saçılması

Denklem (32)'deki integral doğrusal compton saçılması olarak tanımlanır. Bu durumda DDSTK;

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_2} = \frac{r_0^2}{2} \frac{\omega_2}{\omega_1} \frac{m}{q} J(P_z) \quad (34)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $J(P_z)$ ise;

$$J(P_z) = \iint \rho(P_x, P_y, P_z) dP_x dP_y \quad (35)$$

şeklinde tanımlanır. Bu denklem momentum yoğunluğunun saçılma vektörüne dik düzlem üzerindeki iz düşümüdür. Verilen sistemin tipik elektron toplanma enerjisi kor elektronlarının Compton saçılma katkısını ifade eder. Compton saçılması değerlik elektron katkısı (değerlik compton saçılması) ve kor elektron katkısı (kor compton saçılması) olmak üzere iki katkılı toplamı şeklinde yazılabilir. Kor elektronları reel uzayda atomlara çok sıkı bağlı olduğu için momentum uzayında azdır. Buna karşın değerlik elektronlarının $P_z \cong 0$ civarında konsantrasyonu oldukça fazladır.

Compton saçılmasının önemli bir özelliği vardır:

$$\int J(P_z) dP_z = N \quad (36)$$

şeklindedir [18].

1.5. Çok Elektronlu Atomlar ve Hartree-Fock Metodu

Harmonik osilatör ve tek elektronlu atom veya moleküller gibi basit kuantum mekaniksel sistemler için Schrödinger denklemi tam olarak çözülebilmektedir. Ancak, iki ve daha fazla elektronlu atomik veya moleküler sistemler için Schrödinger denklemi tam olarak çözülememekte ve bu yüzden de bazı yaklaşık yöntemler kullanılmaktadır. Bu yaklaşık yöntemlerden olan Hartree-Fock metodu, diğer metotlara da temel oluşturması açısından oldukça önemlidir [19].

Hartree-Fock metodu dalga fonksiyonu olarak çekirdeğin üzerine merkezleşmiş tek parçacık orbitallerini içeren Slater determinantını kullanır. N -elektronlu bir sistem için Slater determinantı aşağıdaki gibi verilir.

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \phi_1(\vec{r}_1)s(\mu_1) & \cdots & \phi_1(\vec{r}_N)s(\mu_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(\vec{r}_1)s(\mu_N) & \cdots & \phi_N(\vec{r}_N)s(\mu_N) \end{bmatrix} \quad (37)$$

Burada $s(\mu_i)$ her bir orbitalin spin fonksiyonudur ve $\phi_i(\vec{r}_j)$ ise radyal ve açısal dalga fonksiyonunda meydana gelen uzay dalga fonksiyonudur [19]. Roothaan'ın 1951 ve 1960

yıllarındaki iki önemli çalışmalarının sonucu olarak moleküler dalga fonksiyonları atomik dalga fonksiyonlarının lineer toplamı şeklinde ifade edilir [20, 21]:

$$\phi_p(\vec{r}) = \sum_i c_{pi} \chi_i(\alpha_i, \vec{r}) ; p \equiv (n_p, l_p, m_p) ; i \equiv (n_i, l_i, m_i) \quad (38)$$

Burada $c_{pi}, \alpha_i, m_i, l_i$ Hartree-Fock metodundan bulunacak olan varyasyonel parametreleridir. $\phi_i(\alpha, \vec{r})$ fonksiyonunun her biri tek elektronlu dalga fonksiyonu, atomik orbital veya baz fonksiyonu olarak isimlendirilir.

$$\chi_i(\alpha_i, \vec{r}) = \frac{P_i(\alpha, r)}{r} S_{lm}(\hat{r}) \quad (39)$$

$S_{lm}(\hat{r})$ küresel harmoniktir [22]. $P_i(\alpha, r)$ moleküler sistemi en iyi şekilde ifade eden bir polinomdur.

1.6. Baz Fonksiyonları

Literatürde baz fonksiyonu veya atomik orbital olarak Slater tipli orbitaller (STO), Gaussian tipli orbitaller (GTO), Bessel tipli orbitaller (BTO), Polinom tipli orbitaller (PTO), Sturmianlar,... vb fonksiyonlar kullanılmaktadır. Bu baz fonksiyonlarından en yaygın olarak kullanılanları; Slater tipli orbital ve Gaussian tipli orbitallerdir [23, 24]. Aşağıda bu baz fonksiyonları hakkında genel bilgiler verilmiştir.

1.6.1. Slater Tipli Orbitaller

Moleküler hesaplamalarda en çok kullanılan orbital tipi Slater tipli orbital (STO)'lerdir. STO'ler [25, 26], 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 [27] ve çok uzak bölgelerde sıfıra yavaş bir şekilde gittiğinden dolayı [28] elektron yoğunluğunu oldukça iyi bir şekilde verir. Hidrojen ve Hidrojene benzer atomlar için Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen dalga fonksiyonlarından ve deneysel sonuçlardan yola çıkılarak ileri sürülmüştür [25].

Slater yönetiminde atomun herhangi bir elektronun, $Z - \gamma$ yüklü bir çekirdeğin oluşturduğu merkezci alanda hareket ettiği varsayılır. Burada Z çekirdeğin yükü, γ ise çekirdek yükünün diğer elektronlar tarafından perdelenmesini gösteren bir sabittir. Bu

fonksiyonlar çekirdeğe yakın ve çekirdekten uzak bölgelerdeki sınır şartlarında deneysel sonuçlarla uyum sağlamaktadır [25].

En genel şekilde STO'ler küresel koordinat sisteminde

$$\chi_{nlm}(\xi, r, \theta, \varphi) = N_n(\xi) r^{n-1} e^{-\xi r} S_{lm}(\theta, \varphi) \quad (40)$$

şeklinde tanımlanır [25]. Burada n, l, m kuantum sayıları, (r, θ, φ) uzayda herhangi bir noktanın küresel koordinat sistemindeki koordinatlarıdır. N normalizasyon sabitidir ve

$$N_n(\xi) = \left(\frac{(2\xi)^{2n+1}}{(2n)!} \right)^{1/2} \quad (41)$$

biçiminde tanımlanır. $S_{lm}(\theta, \varphi)$ reel küresel harmoniklerdir [22], ξ varyasyonel bir parametredir. Bu çalışmada; reel küresel harmonikler kullanılacaktır.

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 hesaplarında fazla tercih edilmemektedir.

1.6.2. Gaussian Tipli Orbitaler

STO'ler kullanıldığında ortaya çıkan çok-merkezli moleküler integrallerin hesaplamalarındaki güçlükleri aşmak için Gaussian tipli orbitalerin elektronik yapı hesaplamalarında kullanılabileceği fikri S.F. Boys tarafından önerilmiştir. Boys'un önerdiği GTO'ler küresel koordinat sisteminde aşağıdaki gibi ifade edilir [29, 30]:

$$G_{nlm}(\xi, \vec{r}) = N_n(\xi) r^{n-1} e^{-\xi r^2} S_{lm}(\theta, \phi), \quad (42)$$

Burada; $S_{lm}(\theta, \varphi)$ reel küresel harmonik [31], ξ varyasyonel bir parametre, $N_n(\alpha)$ ise normalizasyon sabitidir ve

$$N_n(\xi) = \left(\frac{2(2\xi)^{n+1/2}}{\Gamma(n+1/2)} \right)^{1/2}. \quad (43)$$

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 [27] ve Boys integrali de çoğunlukla nümerik metotlarla hesaplanır [29]. GTO'ler kullanıldığında ortaya çıkan moleküler integrallerin kolay olmasına rağmen çekirdekte ve çekirdekten uzakta elektron yoğunluğunu iyi bir şekilde ifade edemez.

1.7. Tezin Amacı

Atomik Compton profilleri literatürde genellikle yarı deneysel yöntemler, fit metodları veya HFR metodu ile hesaplanmaktadır. HFR metodunda baz fonksiyonu olarak Gaussian tipli orbitallerin kullanımı oldukça yaygındır. Slater tipli orbitallerin kullanılması ile ortaya çıkan integrallerin zorluğu, bu tip çalışmalarda araştırmacıların ilgisini Gaussian tipli baz orbitallere çekmiştir.

Bu çalışmada; Slater tipli orbitalleri baz fonksiyonu olarak kullanarak HFR metodu ile atomik Compton profillerinin ifadeleri minimal ve genişletilmiş baz seti durumları için ayrı ayrı elde edildi. Elde edilen ifadelerin, yüksek duyarlıklılı hesaplamak için, Maple sembolik programlama dilinde programları yapıldı. Bilgisayar programından elde edilen sonuçların literatür ile karşılaştırması ve genel bir değerlendirme yapıldı.

2. YAPILAN ÇALIŞMALAR

2.1. Giriş

Atom ve moleküllerle ilgili kuantum kimyasal hesaplamaların çoğu konum uzayında yapılmaktadır. Coulson ve Duncanson 1940'lı yıllarda atom ve moleküllerin bazı özelliklerinin momentum uzayı kullanılarak daha doğru hesaplanabileceğini gösterdiler. Bunun için de momentum uzayı dalga fonksiyonlarını kullandılar [32, 33]. Coulson ve Duncanson'un hesaplamalarının önemli bir bölümü Compton profil hesaplamalarına dayanmaktaydı.

Bu bölümde; atomik Compton profil hesaplamaları için Coulson ve Duncanson'un ifadeleri irdelenecek ve HFR metodu ile atomik Compton profillerinin hesaplamaları yapılacaktır.

2.2. Momentum Uzayı Dalga Fonksiyonu

Hartree-Fock-Roothaan (HFR) metodundaki moleküler dalga fonksiyonu için verilen (37) ifadesinin momentum uzayındaki karşılığı için, konum uzayındaki verilen $U_{nlm}(\alpha, \vec{r})$ tek elektronlu dalga fonksiyonlarının momentum uzayındaki karşılıklarının bulunması gerekir. Tek elektronlu dalga fonksiyonu için Slater tipli orbital (STO) kullanıldığından dolayı STO momentum uzayındaki karşılığının bulunması gerekir. Bunun için Fourier dönüşümü;

$$U_{nlm}(\alpha, \vec{p}) = (2p)^{\frac{3}{2}} \int \chi_{nlm}(\alpha, \vec{r}) e^{-i\vec{p}\vec{r}} d^3r \quad (44)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $U_{nlm}(\alpha, \vec{p})$ momentum uzayı dalga fonksiyonu ve $\chi_{nlm}(\alpha, \vec{r})$ ise konum uzayı dalga fonksiyonudur (STO) ve denklem (38)'de ifade edilmiştir. Konum uzayındaki deneme dalga fonksiyonlarının momentum uzayındaki ifadelerini elde etmek için $e^{\pm i\vec{p}\vec{r}}$ düzlem dalga açılımı [22]:

$$e^{\pm i\vec{p}\vec{r}} = 4\pi \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} (\pm i)^{l'} j_{l'}(pr) Y_{l'm'}(\theta_r, \varphi_r) Y_{l'm'}(\theta_p, \varphi_p) \quad (45)$$

denklem (44)'de kullanılırsa ve küresel harmoniklerin ortogonallığı de dikkate alınarak

$$U_{nlm}(\alpha, \vec{p}) = (-i)^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} f_{nl}(\alpha, p) Y_{lm}(\theta_p, \varphi_p) \quad (46)$$

ifadesi bulunur. Burada $f_{nl}(\alpha, p)$ ifadesi;

$$f_{nl}(\alpha, p) = N_n(\alpha) \int_0^\infty r^{n+1} e^{-\alpha r} j_l(pr) dr \quad (47)$$

şeklindedir. Burada $j_l(pr)$ fonksiyonu küresel Bessel fonksiyonudur [22]. Bu ifadede integral alınırsa $f_{nl}(\alpha, p)$ ifadesinin düzenlenmiş hali [34]

$$f_{nl}(\alpha, p) = \frac{1}{(\alpha^2 + p^2)^{n+1}} \sum_{s=0}^{E(\frac{n+l}{2})} A_{nl}^s(\alpha) p^{l+2s} \quad (48)$$

şeklinde olur. Burada $A_{nl}^s(\alpha)$ ise;

$$A_{nl}^s(\alpha) = (-1)^s 2^{n+l} \sqrt{2\alpha} \frac{F_{2l+2s+1}(n+l+1) F_s(l+s)}{\sqrt{F_l(2l) F_{n-l}(2n) F_{n-l}(n+l)}} \alpha^{2n-2s-l} \quad (49)$$

şeklinde ifade edilir. Bu kısımda elde edilen $f_{nl}(\alpha, p)$ fonksiyonu Tablo 54.'de sembolik olarak verilmiştir.

2.3. Tek Elektron Compton Profil Hesaplamaları

Bir elektronlu atomlarda Compton profil aşağıdaki gibi verilir [26]:

$$J(q) = \frac{1}{2} \int_q^\infty p^{-1} I(p) dp \quad (50)$$

Burada q

$$q = - \frac{E_1(\omega_1 - \omega_2) - \hbar \omega_1 \omega_2 (1 - \cos \theta)}{c [\omega_1^2 + \omega_2^2 - 2\omega_1 \omega_2 \cos \theta]^{1/2}} \quad (51)$$

şeklinde verilir ve elektron momentumudur. Bu denklemde ω_1, ω_2 sırasıyla elektron ve fotonun frekansları, θ saçılma açısıdır [35] ve $I(p)$ ise momentum yoğunluğudur ve

$$I(p) = \int_{\Omega_p} \phi^*(\vec{p}) \phi(\vec{p}) d\Omega_p \quad (52)$$

ile tanımlanır. Burada $\phi(\vec{p})$ momentum uzayında tek elektron dalga fonksiyonu ve $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ ise momentum uzayı üzerindeki katı açıdır.

Z-elektronlu bir atomun Compton profili, her bir elektronun Compton profilinin toplamından oluşur:

$$J(q, Z) = \sum_{i=1}^Z J_{ii}(q) \quad (53)$$

Elektronların ayırt edilmez-özdeş parçacıklar olduğu ve her orbitalde iki elektron bulunabileceği dikkate alınır, (53) ifadesi aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

$$J(q) = 2 \sum_{j=1}^N \eta_j J_{jj}(q) \quad (54)$$

Burada

$$J_{jj}(q) = \frac{1}{2} \int_q^\infty p^{-1} I_{jj}(p) dp \quad (55)$$

$$I_{jj}(p) = \int_{\Omega} \phi_j^*(\vec{p}) \phi_j(\vec{p}) d\Omega$$

ile tanımlanır ve $\phi_j(\vec{p})$ j. nci moleküler orbitali temsil eder.

2.4. Atomik Compton Profillerin HFR Metodu ile Hesaplanması

Z elektronlu bir atomun Compton profil değeri her bir elektronun Compton profillerinin toplamlarından oluştuğu bilinmektedir. Compton profili hesaplamak için her bir moleküler orbitalin Compton profil katkısını bulmak gerekir. Bu katkılar bulunurken Slater tipi orbitali (STO) bazında Hartree-Fock-Roothaan (HFR) metodu ile minimal baz seti (MBS) ve genişletilmiş baz seti (GBS) kullanılmıştır. Farklı iki baz seti kullanıldığından bu baz setlerinin Compton profil katkıları da farklı olacaktır dolayısıyla bu Compton profiller ayrı bölümler de yer alacaklardır. MBS ve GBS kullanılarak Compton profil için analitik ifadeler elde edilmiştir. MBS için oluşturulan analitik ifadeler Bölüm 2.4.1'de, GBS için oluşturulan analitik ifadeler ise Bölüm 2.4.2'de verilecektir.

2.4.1. MBS Kullanılarak Atomik Compton Profillerin HFR Metodu ile Hesaplanması

N orbital barındıran atomun Compton profili

$$J(q) = 2 \sum_{j=1}^N \eta_j J_{jj}(\alpha, \alpha; q) = 2 \sum_{j=1}^N \eta_j J_{n_j, l_j, m_j, n_j, l_j, m_j}(\alpha_j, \alpha_j; q) \quad (56)$$

şeklinde yazılabilir. Burada N moleküler orbital sayısı, η_j doluluk oranı ve $J_{jj}(\alpha, \alpha; q)$ ise j . nci moleküler orbitalinin Compton profil katkısıdır ve

$$J_{n_l m, n_l m}(\alpha, \alpha; q) \equiv J_{n_l m}(\alpha, q) = \frac{1}{2} \int_q^\infty \phi_{n_l m}^*(\alpha, \vec{p}) \phi_{n_l m}(\alpha, \vec{p}) p dp \quad (57)$$

ile tanımlanır. $J_{n_l m}(\alpha, q)$ fonksiyonunun hesaplanması için (46) denklemi ile verilen $\phi_{n_l m}(\alpha, \vec{p})$ momentum uzayı atomik orbital ifadesi yerine yazılırsa

$$J_{n_l m}(\alpha, q) \equiv J_{n_l}(\alpha, q) = \frac{1}{2} \frac{2}{\pi} \int_q^\infty |f_{n_l}(\alpha, q)|^2 p dp \quad (58)$$

şeklinde olur. $f_{n_l}(\alpha, p)$ ifadesi için denklem (48) yerine yazılarak integral alınır, orbitallerin Compton profil katkıları

$$J_{n_l m}(\alpha, q) \equiv J_{n_l}(\alpha, q) = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{E(\frac{n-l}{2})} A_{n_l}^s(\alpha) \sum_{s'=1}^{E(\frac{n-l}{2})} A_{n_l}^{s'}(\alpha) K_{2(l+s+s')+1, 2n+2}(\alpha, q) \quad (59)$$

şeklinde bulunur. Burada $K_{2(l+s+s')+1, 2n+2}(\alpha, q)$ fonksiyonu ise

$$K_{2(l+s+s')+1, 2n+2}(\alpha, q) = \int_q^\infty \frac{p^{2(l+s+s')+1}}{(p^2 + \alpha^2)^{2n+2}} dp \quad (60)$$

ile verilir. HFR metodu ile atomik Compton profil hesaplamalarında ortaya çıkan $K_{n_l}(\alpha, q)$ fonksiyonları için l her zaman tek değerler alır. Bu fonksiyon Bölüm 2.5.1.'de çözülmüş ve tartışılmıştır.

2.4.2. GBS Kullanılarak Atomik Compton Profillerin HFR Metodu ile Hesaplanması

GBS için LCAO dalga fonksiyonları kullanılır. (55) ifadesinde j . nci moleküler orbital olan $\phi_j(\vec{p})$ için LCAO yönteminden yararlanılarak

$$\phi_j(\vec{p}) = \sum_{k=1}^M c_{jk} \chi_k(\alpha_k, \vec{p}) \quad (61)$$

ifadesi yazılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa,

$$\begin{aligned} J(q) &= 2 \sum_{j=1}^N \eta_j \sum_{k=1}^M c_{jk} \sum_{s=1}^M c_{js} J_{ks}(\alpha_k, \alpha_s; q) \\ &= 2 \sum_{j=1}^N \eta_j \sum_{k=1}^M c_{jk} \sum_{s=1}^M c_{js} J_{n_k l_j m_j, n_s l_s m_s}(\alpha_k, \alpha_s; q) \end{aligned} \quad (62)$$

elde edilir. Burada $J_{nlm, n'lm}(\alpha, \beta; q)$ fonksiyonu ise

$$J_{nlm, n'lm}(\alpha, \beta; q) = \frac{1}{2} \int \chi_{nlm}^*(\alpha, \vec{p}) \chi_{n'lm}(\beta, \vec{p}) p dp \quad (63)$$

ile verilir. Bu ifadede $\chi_{nlm}(\alpha, \vec{p})$ fonksiyonları (STO'lerin Fourier dönüşümü) için (46) ile verilen tanımları ve $\int_{\Omega} S_{lm}^*(\Omega) S_{l'm'}(\Omega) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$ ile verilen küresel harmoniklerin ortogonalitesi de dikkate alınarsa

$$J_{nlm, n'lm}(\alpha, \beta; q) = \frac{1}{2} \int_q^{\infty} f_{nl}(\alpha, p) f_{n'l}(\beta, p) p dp \quad (64)$$

ifadesi elde edilir. Bu ifadede $f_{nl}(\alpha, p)$ fonksiyonlarının (49) ifadesi ile verilen tanımı kullanılarak

$$J_{nlm, n'lm}(\alpha, \beta; q) \equiv J_{nl, n'l}(\alpha, \beta; q) = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{E(\frac{n-l}{2})} A_{nl}^s(\alpha) \sum_{s'=1}^{E(\frac{n'-l}{2})} A_{n'l}^{s'}(\beta) B_{m'm'}^{2l+1}(\alpha, \beta; q) \quad (65)$$

ifadesi bulunur. Burada $B_{m'm'}^{2l+1}(\alpha, \beta; q)$ ifadesi

$$B_{nn'}^{2l+1}(\alpha, \beta; q) = \int_q^{\infty} \frac{p^{2l+1}}{(p^2 + \alpha^2)^n (p^2 + \beta^2)^n} dp \quad (66)$$

ile tanımlanan bir yardımcı moleküler integraldir. Bu yardımcı moleküler integralin çıkarılışı Bölüm 2.5.2.'de verilmiştir.

2.5. Atomik Compton Profillerinin Hesaplanmasında Ortaya Çıkan Yardımcı Moleküler İntegraller

Atomik Compton profilleri HFR metodu ile hesaplarırken $K_{ln}(\alpha, q)$ ve $B_{nn'}^{2l+1}(\alpha, \beta; q)$ gibi fonksiyonlar ortaya çıkmıştır. Bu fonksiyonların çözümleri ise bu kısımda yer almaktadır.

2.5.1. $K_{ln}(\alpha, q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$K_{ln}(\alpha, q)$ integrali aşağıdaki gibi verilir:

$$K_{ln}(\alpha, q) = \int_q^{\infty} \frac{p^l}{(p^2 + \alpha^2)^n} dp \quad (67)$$

Bu yardımcı moleküler integral l 'nin sadece tek durumları için hesaplamalarda ortaya çıkar. Bu yüzden $K_{ln}(\alpha, q)$ integraline bakılırsa:

$$K_{2m+1,n}(\alpha, q) = \int_q^{\infty} \frac{p^{2m} p}{(p^2 + \alpha^2)^n} dp \quad (68)$$

Burada p^{2m} ifadesi için

$$p^{2m} = (-1)^m \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{d^m}{d\gamma^m} e^{-\gamma p^2} \quad (69)$$

yazılabilir. (69) ifadesi (68) ifadesinde yerine yazılırsa

$$K_{2m+1,n}(\alpha, q) = (-1)^m \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{d^m}{d\gamma^m} \int_q^{\infty} \frac{e^{-\gamma p^2} p}{(p^2 + \alpha^2)^n} dp \quad (70)$$

şeklinde olur. Denklemin sağ tarafındaki integral için $p^2 + \alpha^2 = u$ değişken dönüşümü yapılırsa $K_{2m+1,n}(\alpha, q)$ ifadesi ;

$$K_{2m+1,n}(\alpha, q) = \frac{(-1)^m}{2} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{d^m}{d\gamma^m} e^{\gamma\alpha^2} \int_{q^2+\alpha^2}^{\infty} \frac{e^{-\gamma u}}{u^n} du \quad (71)$$

şeklinde olur. Denklem (71)'deki türev ifadesine Leibnitz kuralı [22]

$$\frac{d^n}{dx^n} [A(x)B(x)] = \sum_{s=0}^n F_s(n) \frac{d^{n-s}}{dx^{n-s}} A(x) \frac{d^s}{dx^s} B(x) \quad (72)$$

uygulanırsa $K_{2m+1,n}(\alpha, q)$ ifadesi aşağıdaki gibi elde edilir:

$$K_{2m+1,n}(\alpha, q) = \frac{(-1)^m}{2} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \sum_{i=0}^m F_i(m) \left(\frac{d^{m-i}}{d\gamma^{m-i}} e^{\gamma\alpha^2} \right) \left(\frac{d^i}{d\gamma^i} \int_{\beta}^{\infty} \frac{e^{-\gamma u}}{u^n} du \right) \quad (73)$$

Bu denklemdeki ilk türev ifadesi ise;

$$\frac{d^{m-i}}{d\gamma^{m-i}} e^{\gamma\alpha^2} = \alpha^{2(m-i)} e^{\gamma\alpha^2} \quad (74)$$

şeklinde sadeleşmiş olur. Denklem (73)'deki ikinci türev ifadesi aşağıdaki gibi

$$\frac{d^i}{d\gamma^i} \int_{\beta}^{\infty} \frac{e^{-\gamma u}}{u^n} du = \int_{\beta}^{\infty} \frac{(-1)^i e^{-\gamma u}}{u^{n-i}} du \quad (75)$$

ifade edilebilir. Denklem (73)'un limit değeri alındığında;

$$K_{2m+1,n}(\alpha, q) = \frac{(-1)^m}{2} \sum_{i=0}^m (-1)^i F_i(m) \alpha^{2(m-i)} \int_{\beta}^{\infty} \frac{du}{u^{n-i}} \quad (76)$$

şekline dönüşür. Denklem (76)'da ifadenin sağ tarafındaki integral değeri hesaplandığında;

$$\int_{\beta}^{\infty} \frac{du}{u^n} = \int_{\beta}^{\infty} u^{-n} du = \frac{1}{(n-1)(q^2 + \alpha^2)^{n-1}} \quad (77)$$

değerine karşılık gelir. (77) denklemi, (76) denkleminde yerine yazılıp $2m+1=l$ şeklinde değişken değiştirme yapıldığında $K_l(\alpha, q)$ ifadesi;

$$K_l(\alpha, q) = \frac{(-1)^s}{2} \sum_{i=0}^s F_i(s) \frac{\alpha^{l-2i-1}}{(n-i-1)(q^2 + \alpha^2)^{n-i-1}} \quad (78)$$

şeklinde olur. Çalışmanın bu kısmında elde edilen $K_l(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali için sembolik sonuçlar Tablo 55.'de verilmiştir.

2.5.2. $B_{mn}^l(\alpha, \beta; q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

Denklem (66)'de $B_{mn}^{2l+1}(\alpha, \beta; q)$ ifadesinde $2l+1=l, n=m, n'=n$ dönüşümü yapıldığında $B_{mn}^l(\alpha, \beta; q)$ integrali

$$B_{mn}^l(\alpha, \beta; q) = \int_q^\infty \frac{p^l}{(p^2 + \alpha^2)^m (p^2 + \beta^2)^m} dp \quad (79)$$

şeklinde olur. Denklemde $p^l = p^{l-1} p$ şeklinde yazıldığında integral;

$$B_{mn}^l(\alpha, \beta; q) = \int_q^\infty \frac{p^{l-1}}{(p^2 + \alpha^2)^m (p^2 + \beta^2)^m} p dp \quad (80)$$

şeklinde olur. Bu denklemde $p^2 + \alpha^2 = x$ şeklinde değişken değiştirme yapıldığında $B_{mn}^l(\alpha, \beta; q)$ ifadesi

$$B_{mn}^l(\alpha, \beta; q) = \frac{1}{2} \int_q^\infty \frac{(x - \alpha^2)^{\frac{l-1}{2}}}{x^m (x + \gamma)^n} dx \quad (81)$$

gibi olur. Denklem (81)'de binom açılımı uygulandığında;

$$B_{mn}^l(\alpha, \beta; q) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\frac{l-1}{2}} F_k \left(\frac{l-1}{2} \right) (-1)^k \alpha^{2k} \int_{q^2 + \alpha^2}^\infty \frac{x^{\frac{l-1}{2} - k}}{x^m (x + \gamma)^n} dx \quad (82)$$

şeklinde olur. Bu ifade düzenlenirse

$$B_{mn}^l(\alpha, \beta; q) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\frac{l-1}{2}} F_k \left(\frac{l-1}{2} \right) (-1)^k \alpha^{2k} b_{m-(l-1/2)+k, n}(\gamma, q^2 + \alpha^2) \quad (83)$$

şeklinde olur. Burada ortaya çıkan $b_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali aşağıda tartışılmıştır. Çalışmanın bu kısmında elde edilen $B_{mn}^l(\alpha, \beta; q)$ yardımcı moleküler integrali için sembolik sonuçlar Tablo 57.'de verilmiştir.

2.5.3. $b_{mn}(\alpha, q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

$b_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$b_{mn}(\alpha, q) = \int_q^{\infty} \frac{dx}{x^m (x + \alpha)^n} \quad (84)$$

Bu integral $(x + \alpha)$ ile çarpılır ve $(x + \alpha)$ ile bölünürse $b_{mn}(\alpha, q)$ ifadesi;

$$b_{mn}(\alpha, q) = \int_q^{\infty} \frac{dx}{x^{m-1} (x + \alpha)^{n+1}} + \alpha \int_q^{\infty} \frac{dx}{x^m (x + \alpha)^{n+1}} \quad (85)$$

gibi olur. Yukarıdaki ifadede integrallerin çözümleri için;

$$b_{mn}(\alpha, q) = b_{m-1, n+1}(\alpha, q) + \alpha b_{m, n+1}(\alpha, q) \quad (86)$$

tekrarlama bağıntısı elde edilmiş olur. Denklem (86)'daki tekrarlama bağıntısı için ise $b_{m1}(\alpha, q)$ ve $b_{1n}(\alpha, q)$ başlangıç fonksiyonlarına ihtiyaç vardır. $b_{m1}(\alpha, q)$ başlangıç fonksiyonu

$$b_{m1}(\alpha, q) = \int_q^{\infty} \frac{dx}{x^m (x + \alpha)} \quad (87)$$

ile verilir. Bu denklemde integralin içerisindeki polinom için,

$$\frac{1}{x^m (x + \alpha)} = (-1)^m \frac{1}{\alpha^m (x + \alpha)} + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{k+\frac{1}{2}(1+(-1)^m)}}{\alpha^{m-k} x^{k+1}} \quad (88)$$

ifadesi yazılabilir. Bu ifade denklem (87)'de yerine yazılırsa;

$$b_{m1}(\alpha, q) = \frac{(-1)^m}{\alpha^m} \int_q^\infty \frac{dx}{x + \alpha} + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{k+\frac{1}{2}(1+(-1)^m)}}{\alpha^{m-k}} \int_q^\infty \frac{dx}{x^{k+1}} \quad (89)$$

bulunur. Bu denklemde ki integraller hesaplanırsa $b_{m1}(\alpha, q)$ ifadesi;

$$b_{m1}(\alpha, q) = \frac{(-1)^{m+1}}{\alpha^m} \{\ln(q + \alpha) - \ln(q)\} + \sum_{k=1}^{m-1} \frac{(-1)^{k+\frac{1}{2}(1+(-1)^m)}}{\alpha^{m-k} k q^k} \quad (90)$$

şeklinde yazılır.

$b_{1n}(\alpha, q)$ integrali ise

$$b_{1n}(\alpha, q) = \int_q^\infty \frac{dx}{x(x + \alpha)^n} \quad (91)$$

ile tanımlanır. İntegralin içindeki polinom bazı matematiksel işlemler yapılarak aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{1}{x(x + \alpha)^n} = \frac{1}{x\alpha^n} - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{F_{k+1}(n)x^k}{\alpha^{k+1}(x + \alpha)^n} \quad (92)$$

Bu ifade denklem (91)'de yerine yazılırsa;

$$b_{1n}(\alpha, q) = \frac{1}{\alpha^n} \int_q^\infty \frac{dx}{x} - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{F_{k+1}(n)}{\alpha^{k+1}} \int_q^\infty \frac{x^k}{(x + \alpha)^n} dx \quad (93)$$

şeklinde olur. Bu ifadede 2. integrali çözmek için toplamın üst sınırı toplamdan ayrılarak yazılırsa bu ifade aşağıdaki gibi olur.

$$b_{1n}(\alpha, q) = \frac{1}{\alpha^n} \int_q^\infty \frac{dx}{x} - \frac{1}{\alpha^n} \int_q^\infty \frac{x^{n-1}}{(x + \alpha)^n} dx - \sum_{k=0}^{n-2} \frac{F_{k+1}(n)}{\alpha^{k+1}} \int_q^\infty \frac{x^k}{(x + \alpha)^n} dx \quad (94)$$

Yukarıdaki denklemde integralleri çözmek için integraller ayrı ayrı yazılırsa;

$$b_{1n}(\alpha, q) = I_1 - I_2 - I_3 \quad (95)$$

şeklinde olur. Bu denklemde I_1, I_2, I_3 ifadeleri aşağıda verilmiştir.

$$I_1 = \frac{1}{\alpha^n} \int_q^\infty \frac{dx}{x}, \quad (96)$$

$$I_2 = \frac{1}{\alpha^n} \int_q^\infty \frac{x^{n-1}}{(x+\alpha)^n} dx, \quad (97)$$

$$I_3 = \sum_{k=0}^{n-2} \frac{F_{k+1}(n)}{\alpha^{k+1}} \int_q^\infty \frac{x^k}{(x+\alpha)^n} dx \quad (98)$$

Denklem (96)'daki I_1 integrali için çözüm;

$$I_1 = \frac{1}{\alpha^n} \int_q^\infty \frac{dx}{x} = \frac{1}{\alpha^n} \{ \ln(\infty) - \ln(q) \} \quad (99)$$

şeklinde olur. Denklem (97)'deki I_2 integrali için $x+\alpha = y$ şeklinde değişken değiştirme yapılırsa I_2 için

$$I_2 = \frac{1}{\alpha^n} \{ \ln(\infty) - \ln(q+\alpha) \} + \frac{1}{\alpha^n} \sum_{s=1}^{n-1} (-1)^s F_s(n-1) \alpha^s \frac{1}{s(q+\alpha)^s} \quad (100)$$

ifadesi elde edilir. Denklem (99)'daki I_3 ifadesinde integrali çözmek için $x+\alpha = y$ şeklinde değişken değiştirme yapılarak integral alınırsa I_3 ifadesi;

$$I_3 = \sum_{k=0}^{n-2} \frac{F_{k+1}(n)}{\alpha^{k+1}} \sum_{s=0}^k (-1)^s F_s(k) \frac{\alpha^s}{(n-k+s-1)} \frac{1}{(q+\alpha)^{n-k+s-1}} \quad (101)$$

şeklinde ifade edilir. Bulunan I_1, I_2, I_3 ifadede denklem (95)'de yerine yazılırsa $b_{1n}(\alpha, q)$ ifadesi;

$$b_{1n}(\alpha, q) = \frac{1}{\alpha^n} \{ \ln(\alpha+q) - \ln(q) \} - \frac{1}{\alpha^n} \sum_{s=1}^{n-1} (-1)^s \frac{F_s(n-1) \alpha^s}{s(q+\alpha)^s} \\ - \sum_{k=0}^{n-2} \frac{F_{k+1}(n)}{\alpha^{k+1}} \sum_{s=0}^k (-1)^s \frac{F_s(k) \alpha^s}{(n-k+s-1)(q+\alpha)^{n-k+s-1}} \quad (102)$$

elde edilir. Bu bölümde elde edilen $b_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integrali için sembolik sonuçlar Tablo 56.'da verilmiştir.

3. BULGULAR

Atomların Compton profillerinin MBS ve GBS kullanılarak HFR metodu ile hesaplanması için 2. nci bölümde elde edilen ifadelerin ve bu ifadelerin içerdiği yardımcı moleküler integrallerin Maple 13 sembolik programlama dilinde programları yapılmıştır [36]. Her bir atom için HFR dalga fonksiyonlarını içeren bir dosya oluşturulmuştur. Atomların HFR dalga fonksiyonları Clementi'nin dalga fonksiyonlarından alınmıştır [37]. Hesaplama sırasındaki atomla ilgili bilgileri bu dosyadan okuyarak atom numarası $2 \leq Z \leq 54$ aralığındaki atomların Compton profil değerleri hesaplanmıştır. Hesaplama sonuçları aşağıda literatür ile karşılaştırmalı olarak tablolar halinde verilmiştir.

Tablo 1. He atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS (Denk. 56)	GBS (Denk. 62)	Ref.[38]	Ref.[39]
0.0	1.006016431E+00	1.070303921E+00	1.07E+00	1.0700E+00
0.2	9.647866466E-01	1.017092044E+00	1.02E+00	...
0.4	8.538531156E-01	8.782623044E-01	8.78E-01	...
0.6	7.038891986E-01	7.004988240E-01	7.00E-01	...
0.8	5.476041649E-01	5.270995209E-01	5.27E-01	...
1.0	4.078298102E-01	3.819851021E-01	3.82E-01	3.820E-01
1.2	2.947188294E-01	2.711746489E-01	2.71E-01	...
1.4	2.090583601E-01	1.909418545E-01	1.91E-01	...
1.6	1.469063378E-01	1.344706887E-01	1.34E-01	...
1.8	1.029715854E-01	9.521337140E-02	9.52E-02	...
2.0	7.235056628E-02	6.798904699E-02	6.8E-02	...
5.0	1.075726369E-03	1.397237492E-03	1.4E-03	1.397E-03
10.0	2.135426195E-05	3.294514741E-05	3.3E-05	3.294E-05
20.0	3.553409340E-07	5.782140159E-07	5.8E-07	...
40.0	5.641453645E-09	9.311966101E-09	9.3E-09	...
60.0	4.967410682E-10	8.221891347E-10	8.6E-10	...
100.0	2.321115754E-11	3.847291976E-11	7.8E-11	...

Tablo 2. Li atomunun taban durumu için ($^2S_{1/2}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	2.665875253E+00	2.577377857E+00	2.59E+00
0.2	1.791104124E+00	1.776939293E+00	1.78E+00
0.4	8.616524450E-01	8.835537192E-01	8.84E-01
0.6	5.803971248E-01	5.982577134E-01	5.98E-01
0.8	4.925080325E-01	5.077588461E-01	5.08E-01
1.0	4.287033770E-01	4.393605812E-01	4.39E-01
1.2	3.668131505E-01	3.716221691E-01	3.72E-01
1.4	3.080564333E-01	3.079294120E-01	3.08E-01
1.6	2.548046761E-01	2.514870386E-01	2.51E-01
1.8	2.082940204E-01	2.034139718E-01	2.03E-01
2.0	1.687920091E-01	1.635300103E-01	1.64E-01
5.0	7.145592516E-03	7.536352451E-03	7.53E-03
10.0	1.941322086E-04	2.418175087E-04	2.4E-04
20.0	3.544890743E-06	4.801521249E-06	4.8E-06
40.0	5.766448997E-08	8.015090200E-08	7.9E-08
60.0	5.100642557E-09	7.125511293E-09	7.1E-09
100.0	2.388948163E-10	3.346062716E-10	3.6E-10

Tablo 3. Be atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[3]	Ref.[38]
0.0	3.183591703E+00	3.159105862E+00	3.1595E+00	3.16E+00
0.2	2.571848681E+00	2.518512646E+00	2.5186E+00	2.52E+00
0.4	1.483270409E+00	1.428738419E+00	1.4286E+00	1.43E+00
0.6	7.835974790E-01	7.655144142E-01	7.655E-01	7.66E-01
0.8	4.966243077E-01	5.026400847E-01	5.027E-01	5.03E-01
1.0	3.931371434E-01	4.085998231E-01	4.086E-01	4.09E-01
1.2	3.445636376E-01	3.630277644E-01	3.630E-01	3.63E-01
1.4	3.086308001E-01	3.269754084E-01	3.270E-01	3.27E-01
1.6	2.753296808E-01	2.917378752E-01	2.917E-01	2.92E-01
1.8	2.433574865E-01	2.569606718E-01	2.570E-01	2.57E-01
2.0	2.131615518E-01	2.238092528E-01	2.238E-01	2.24E-01
5.0	2.010744252E-02	2.063955125E-02	2.06E-02	2.06E-02
10.0	7.875320215E-04	9.058232360E-04	9.06E-04	9.1E-04
20.0	1.630914454E-05	2.058827553E-05	...	2.1E-05
40.0	2.746138119E-07	3.586947569E-07	...	3.6E-07
60.0	2.444994706E-08	3.215974991E-08	...	3.2E-08
100.0	1.149003431E-09	1.516864580E-09	...	1.5E-09

Tablo 4. B atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	2.944526358E+00	2.989788762E+00	2.99E+00
0.2	2.690981318E+00	2.690981318E+00	2.69E+00
0.4	2.042411741E+00	1.999914912E+00	2.00E+00
0.6	1.384209333E+00	1.312954707E+00	1.31E+00
0.8	9.001336771E-01	8.431832033E-01	8.43E-01
1.0	6.069954074E-01	5.784860874E-01	5.78E-01
1.2	4.443495372E-01	4.387453461E-01	4.39E-01
1.4	3.536366198E-01	3.617406845E-01	3.62E-01
1.6	2.986468798E-01	3.134938164E-01	3.14E-01
1.8	2.608107033E-01	2.780839344E-01	2.78E-01
2.0	2.314363566E-01	2.486810493E-01	2.49E-01
5.0	3.702650391E-02	3.830390779E-02	3.83E-02
10.0	2.104945869E-03	2.310848457E-03	2.3E-03
20.0	5.075599625E-05	6.091143778E-05	6.1E-05
40.0	8.933316107E-07	1.115615229E-06	1.1E-06
60.0	8.021765013E-08	1.010462233E-07	1.0E-07
100.0	3.786397830E-09	4.791504100E-09	4.83E-09

Tablo 5. C atomunun taban durumu için (3P_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	2.783992850E+00	2.877325914E+00	2.89E+00
0.2	2.641107831E+00	2.713590736E+00	2.73E+00
0.4	2.267907321E+00	2.280279904E+00	2.29E+00
0.6	1.792179721E+00	1.737857961E+00	1.74E+00
0.8	1.336735958E+00	1.249564431E+00	1.24E+00
1.0	9.698503553E-01	8.878806790E-01	8.81E-01
1.2	7.050822069E-01	6.474112510E-01	6.41E-01
1.4	5.258792185E-01	4.946267428E-01	4.90E-01
1.6	4.078139507E-01	3.973628859E-01	3.94E-01
1.8	3.296977565E-01	3.330513218E-01	3.31E-01
2.0	2.764580668E-01	2.878324421E-01	2.86E-01
5.0	5.375253649E-02	5.686305738E-02	5.69E-02
10.0	4.324455136E-03	4.643374544E-03	4.6E-03
20.0	1.236351287E-04	1.434635751E-04	1.4E-04
40.0	2.294964908E-06	2.782043882E-06	2.8E-06
60.0	2.083420823E-07	2.550168919E-07	2.5E-07
100.0	9.882795179E-09	1.216948583E-08	1.2E-08

Tablo 6. N atomunun taban durumu için (${}^4S_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	2.670557866E+00	2.798776238E+00	2.83E+00
0.2	2.585826591E+00	2.699254290E+00	2.73E+00
0.4	2.351994096E+00	2.416632540E+00	2.44E+00
0.6	2.021277486E+00	2.013646005E+00	2.02E+00
0.8	1.656643066E+00	1.586068820E+00	1.58E+00
1.0	1.310798172E+00	1.209687429E+00	1.20E+00
1.2	1.015202365E+00	9.153139818E-01	9.02E-01
1.4	7.804928550E-01	7.004637228E-01	6.88E-01
1.6	6.032579247E-01	5.488447771E-01	5.38E-01
1.8	4.734976337E-01	4.426584098E-01	4.35E-01
2.0	3.798614217E-01	3.674197422E-01	3.61E-01
5.0	6.826598620E-02	7.416680809E-02	7.42E-02
10.0	7.431377078E-03	7.921457924E-03	7.9E-03
20.0	2.546352370E-04	2.886331139E-04	2.9E-04
40.0	5.025299508E-06	5.964194389E-06	6.0E-06
60.0	4.616352976E-07	5.542893693E-07	5.5E-07
100.0	2.204965535E-08	2.664641101E-08	2.7E-08

Tablo 7. O atomunun taban durumu için (3P_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	2.600675719E+00	2.776423681E+00	2.78E+00
0.2	2.546896341E+00	2.711852535E+00	2.72E+00
0.4	2.392971337E+00	2.515343504E+00	2.52E+00
0.6	2.159900891E+00	2.205591951E+00	2.21E+00
0.8	1.878137717E+00	1.839427538E+00	1.84E+00
1.0	1.580742037E+00	1.480179304E+00	1.48E+00
1.2	1.296129431E+00	1.168305143E+00	1.16E+00
1.4	1.043403352E+00	9.178809102E-01	9.14E-01
1.6	8.315209371E-01	7.260527112E-01	7.23E-01
1.8	6.613427323E-01	5.827268562E-01	5.80E-01
2.0	5.287481882E-01	4.765458227E-01	4.75E-01
5.0	8.068472303E-02	9.025275342E-02	9.03E-02
10.0	1.124744789E-02	1.203034776E-02	1.2E-02
20.0	4.640033516E-04	5.173479515E-04	5.2E-04
40.0	9.806243281E-06	1.145769776E-05	1.1E-05
60.0	9.136351245E-07	1.081866754E-06	1.1E-06
100.0	4.396435687E-08	5.246115324E-08	5.2E-08

Tablo 8. F atomunun taban durumu için (${}^2P_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	2.543066627E+00	2.751623947E+00	2.75E+00
0.2	2.506719175E+00	2.707351889E+00	2.71E+00
0.4	2.400518705E+00	2.567306525E+00	2.57E+00
0.6	2.233171482E+00	2.331494027E+00	2.33E+00
0.8	2.019121907E+00	2.029543883E+00	2.03E+00
1.0	1.776998213E+00	1.707304232E+00	1.71E+00
1.2	1.526526244E+00	1.403425576E+00	1.40E+00
1.4	1.285072204E+00	1.139576624E+00	1.14E+00
1.6	1.065215160E+00	9.225281737E-01	9.22E-01
1.8	8.739944691E-01	7.499173780E-01	7.50E-01
2.0	7.135761789E-01	6.152436085E-01	6.15E-01
5.0	9.307271310E-02	1.064218964E-01	1.06E-01
10.0	1.550935119E-02	1.674932913E-02	1.7E-02
20.0	7.692654147E-04	8.486628675E-04	8.5E-04
40.0	1.751688108E-05	2.020359516E-05	2.0E-05
60.0	1.658095333E-06	1.939390007E-06	1.9E-06
100.0	8.046091031E-08	9.489213459E-08	9.4E-08

Tablo 9. Ne atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]	Ref.[40]
0.0	2.495264412E+00	2.727863126E+00	2.73E+00	2.7278E+00
0.2	2.469515407E+00	2.696120969E+00	2.70E+00	...
0.4	2.393334161E+00	2.593641590E+00	2.59E+00	...
0.6	2.270278763E+00	2.413365884E+00	2.41E+00	...
0.8	2.107066020E+00	2.168211876E+00	2.17E+00	...
1.0	1.913691694E+00	1.888611415E+00	1.89E+00	1.8886E+00
1.2	1.702488865E+00	1.606875332E+00	1.61E+00	...
1.4	1.486342406E+00	1.346250429E+00	1.35E+00	...
1.6	1.276769613E+00	1.118751103E+00	1.12E+00	...
1.8	1.082543294E+00	9.277082589E-01	9.27E-01	...
2.0	9.091545322E-01	7.712308412E-01	7.71E-01	...
5.0	1.082714217E-01	1.245247453E-01	1.24E-01	1.245E-01
10.0	1.997034387E-02	2.188166684E-02	2.2E-02	2.188E-02
20.0	1.183621544E-03	1.297627219E-03	1.3E-03	1.298E-03
40.0	2.918915864E-05	3.329653267E-05	3.3E-05	...
60.0	2.811727811E-06	3.251771330E-06	3.3E-06	...
100.0	1.377244803E-07	1.606049983E-07	1.6E-07	...

Tablo 10. Na atomunun taban durumu için ($^2S_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]	Ref.[41]
0.0	4.192810606E+00	4.357507147E+00	4.36E+00	4.3557E+00
0.2	3.323124558E+00	3.398915473E+00	3.40E+00	...
0.4	2.330927923E+00	2.429710175E+00	2.43E+00	...
0.6	2.020803405E+00	2.137974872E+00	2.14E+00	...
0.8	1.895161730E+00	1.983272650E+00	1.98E+00	...
1.0	1.762988362E+00	1.808219984E+00	1.81E+00	1.8061E+00
1.2	1.614124635E+00	1.612101052E+00	1.61E+00	...
1.4	1.457234903E+00	1.411782438E+00	1.41E+00	...
1.6	1.299197360E+00	1.220681345E+00	1.22E+00	...
1.8	1.145517006E+00	1.047031998E+00	1.05E+00	...
2.0	1.000549634E+00	8.946322040E-01	8.95E-01	...
5.0	1.327675369E-01	1.461418420E-01	1.46E-01	1.461E-01
10.0	2.454341725E-02	2.746967828E-02	2.7E-02	2.747E-02
20.0	1.710639623E-03	1.882205131E-03	1.9E-03	1.882E-03
40.0	4.582432566E-05	5.223272440E-05	5.2E-05	...
60.0	4.498127544E-06	5.201900943E-06	5.2E-06	...
100.0	2.225813867E-07	2.597754812E-07	2.6E-07	...

Tablo 11. Mg atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	4.989035612E+00	5.146207037E+00	5.16E+00
0.2	4.147008538E+00	4.148008556E+00	4.15E+00
0.4	2.753309840E+00	2.705496902E+00	2.71E+00
0.6	1.993802397E+00	2.044826038E+00	2.05E+00
0.8	1.737913950E+00	1.825506976E+00	1.83E+00
1.0	1.622698457E+00	1.698020641E+00	1.70E+00
1.2	1.515637103E+00	1.564404631E+00	1.56E+00
1.4	1.398976341E+00	1.416836254E+00	1.42E+00
1.6	1.277283544E+00	1.264705355E+00	1.26E+00
1.8	1.155459806E+00	1.117009372E+00	1.12E+00
2.0	1.036902575E+00	9.796108261E-01	9.80E-01
5.0	1.637300936E-01	1.709678864E-01	1.71E-01
10.0	2.922008917E-02	3.337026967E-02	3.3E-02
20.0	2.354327483E-03	2.609612285E-03	2.6E-03
40.0	6.869155894E-05	7.842304102E-05	7.8E-05
60.0	6.880656392E-06	7.968009933E-06	8.0E-06
100.0	3.442591138E-07	4.023944083E-07	4.0E-07

Tablo 12. Al atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]	Ref.[42]
0.0	4.843562522E+00	5.133837076E+00	5.15E+00	5.1488E+00
0.2	4.373022824E+00	4.568819090E+00	4.57E+00	...
0.4	3.361604164E+00	3.333192400E+00	3.32E+00	...
0.6	2.459417769E+00	2.337401268E+00	2.34E+00	...
0.8	1.909442705E+00	1.841782554E+00	1.84E+00	...
1.0	1.620637538E+00	1.621628171E+00	1.62E+00	1.6225E+00
1.2	1.455792285E+00	1.490950068E+00	1.49E+00	...
1.4	1.336774557E+00	1.376831388E+00	1.38E+00	...
1.6	1.232588640E+00	1.261133792E+00	1.26E+00	...
1.8	1.133556625E+00	1.143626504E+00	1.14E+00	...
2.0	1.037569121E+00	1.028123511E+00	1.03E+00	...
5.0	2.034129471E-01	1.990615884E-01	1.99E-01	1.989E-01
10.0	3.430856895E-02	3.947595364E-02	3.9E-02	3.949E-02
20.0	3.113109270E-03	3.477498869E-03	3.5E-03	3.477E-03
40.0	9.903973558E-05	1.132903095E-04	1.1E-04	...
60.0	1.013587468E-05	1.176047893E-05	1.2E-05	...
100.0	5.131808167E-07	6.013053099E-07	6.0E-07	...

Tablo 13. Si atomunun taban durumu için (3P_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	4.896734565E+00	5.105785218E+00	5.13E+00
0.2	4.601675185E+00	4.744797844E+00	4.76E+00
0.4	3.840244210E+00	3.802253248E+00	3.80E+00
0.6	2.934832854E+00	2.777790824E+00	2.77E+00
0.8	2.194439032E+00	2.068930626E+00	2.06E+00
1.0	1.721573043E+00	1.679837249E+00	1.67E+00
1.2	1.454691639E+00	1.472000031E+00	1.47E+00
1.4	1.299514019E+00	1.341338862E+00	1.34E+00
1.6	1.192801282E+00	1.237083496E+00	1.24E+00
1.8	1.104295162E+00	1.139895622E+00	1.14E+00
2.0	1.022441925E+00	1.044601656E+00	1.04E+00
5.0	2.389611216E-01	2.298531261E-01	2.30E-01
10.0	3.954513276E-02	4.586176017E-02	4.6E-02
20.0	3.978414873E-03	4.483062887E-03	4.5E-03
40.0	1.381959686E-04	1.583442006E-04	1.6E-04
60.0	1.446885244E-05	1.680585301E-05	1.7E-05
100.0	7.419500936E-07	8.703682173E-07	8.7E-07

Tablo 14. P atomunun taban durumu için (${}^4S_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	4.897130087E+00	5.067733950E+00	5.11E+00
0.2	4.697833521E+00	4.821616970E+00	4.86E+00
0.4	4.134975892E+00	4.116687561E+00	4.13E+00
0.6	3.352534637E+00	3.197130622E+00	3.18E+00
0.8	2.576592679E+00	2.400495247E+00	2.38E+00
1.0	1.972990628E+00	1.863729108E+00	1.85E+00
1.2	1.575618056E+00	1.542911336E+00	1.53E+00
1.4	1.334723400E+00	1.351607203E+00	1.35E+00
1.6	1.186303749E+00	1.225438480E+00	1.22E+00
1.8	1.084424464E+00	1.128319721E+00	1.13E+00
2.0	1.003740817E+00	1.043067509E+00	1.04E+00
5.0	2.743671313E-01	2.626047826E-01	2.63E-01
10.0	4.536580772E-02	5.255682555E-02	5.3E-02
20.0	4.942378614E-03	5.619537827E-03	5.6E-03
40.0	1.873638631E-04	2.151336631E-04	2.2E-04
60.0	2.008976008E-05	2.335364414E-05	2.3E-05
100.0	1.044209866E-06	1.225177976E-06	1.2E-06

Tablo 15. S atomunun taban durumu için (3P_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	4.89866907E+00	5.078272565E+00	5.10E+00
0.2	4.75737920E+00	4.901839703E+00	4.92E+00
0.4	4.33486669E+00	4.353023461E+00	4.36E+00
0.6	3.68436349E+00	3.539846096E+00	3.53E+00
0.8	2.94821918E+00	2.726597986E+00	2.72E+00
1.0	2.28557887E+00	2.097553017E+00	2.09E+00
1.2	1.78380439E+00	1.677799623E+00	1.68E+00
1.4	1.44589138E+00	1.413816869E+00	1.41E+00
1.6	1.23083197E+00	1.245293886E+00	1.24E+00
1.8	1.09240307E+00	1.129215811E+00	1.13E+00
2.0	9.963181261E-01	1.039975934E+00	1.04E+00
5.0	3.064823023E-01	2.958238833E-01	2.96E-01
10.0	5.182745703E-02	5.968040755E-02	6.0E-02
20.0	5.994459859E-03	6.876304558E-03	6.9E-03
40.0	2.477054576E-04	2.850991838E-04	2.9E-04
60.0	2.722677002E-05	3.171524927E-05	3.2E-05
100.0	1.435529772E-06	1.688385228E-06	1.7E-06

Tablo 16. Cl atomunun taban durumu için (${}^2P_{3/2}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	4.886953068E+00	5.070101592E+00	5.08E+00
0.2	4.782585135E+00	4.939801954E+00	4.95E+00
0.4	4.460424772E+00	4.513936644E+00	4.51E+00
0.6	3.931640177E+00	3.822810402E+00	3.81E+00
0.8	3.275670748E+00	3.047818708E+00	3.04E+00
1.0	2.616155289E+00	2.373246904E+00	2.37E+00
1.2	2.054442430E+00	1.873183986E+00	1.88E+00
1.4	1.632231062E+00	1.533296199E+00	1.54E+00
1.6	1.340388040E+00	1.308831953E+00	1.31E+00
1.8	1.146562159E+00	1.157835633E+00	1.16E+00
2.0	1.016874521E+00	1.050367872E+00	1.05E+00
5.0	3.342830922E-01	3.284673689E-01	3.29E-01
10.0	5.899696876E-02	6.726939161E-02	6.7E-02
20.0	7.125464140E-03	8.250074371E-03	8.2E-03
40.0	3.202926600E-04	3.694603446E-04	3.7E-04
60.0	3.612031338E-05	4.212404593E-05	4.2E-05
100.0	1.933248271E-06	2.277035877E-06	2.3E-06

Tablo 17. Ar atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]	Ref.[41]
0.0	4.868840404E+00	5.053956900E+00	5.06E+00	5.0638E+00
0.2	4.789348994E+00	4.954662313E+00	4.96E+00	...
0.4	4.539410073E+00	4.621254599E+00	4.62E+00	...
0.6	4.111683248E+00	4.044973155E+00	4.04E+00	...
0.8	3.545354683E+00	3.338429612E+00	3.33E+00	...
1.0	2.926529746E+00	2.659628561E+00	2.66E+00	2.6599E+00
1.2	2.347682543E+00	2.106796800E+00	2.11E+00	...
1.4	1.868997980E+00	1.700115572E+00	1.70E+00	...
1.6	1.508083011E+00	1.416228968E+00	1.42E+00	...
1.8	1.252238450E+00	1.220841310E+00	1.22E+00	...
2.0	1.076154105E+00	1.084090914E+00	1.08E+00	...
5.0	3.573793450E-01	3.591736281E-01	3.59E-01	3.593E-01
10.0	6.685898648E-02	7.544808388E-02	7.5E-02	7.542E-02
20.0	8.328218550E-03	9.726143857E-03	9.7E-03	9.727E-03
40.0	4.061301255E-04	4.696090990E-04	4.7E-04	...
60.0	4.702682835E-05	5.491963689E-05	5.5E-05	...
100.0	2.556877441E-06	3.016112866E-06	3.0E-06	...

Tablo 18. K atomu taban durumu için ($^2S_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	6.735353627E+00	6.884600757E+00	6.90E+00
0.2	5.441194146E+00	5.399332959E+00	5.40E+00
0.4	4.247385727E+00	4.263163667E+00	4.26E+00
0.6	3.842368295E+00	3.820620002E+00	3.82E+00
0.8	3.432771720E+00	3.323349533E+00	3.32E+00
1.0	2.954169655E+00	2.781230317E+00	2.78E+00
1.2	2.472670148E+00	2.280605118E+00	2.28E+00
1.4	2.036340989E+00	1.866930769E+00	1.87E+00
1.6	1.672567074E+00	1.549088929E+00	1.55E+00
1.8	1.388346061E+00	1.315089752E+00	1.32E+00
2.0	1.176020919E+00	1.145687328E+00	1.15E+00
5.0	3.759321042E-01	3.862662151E-01	3.86E-01
10.0	7.537793987E-02	8.415400228E-02	8.4E-02
20.0	9.595574123E-03	1.131085355E-02	1.1E-02
40.0	5.058037533E-04	5.872743346E-04	5.9E-04
60.0	6.017132003E-05	7.042085041E-05	7.0E-05
100.0	3.325505194E-06	3.927387318E-06	3.9E-06

Tablo 19. Ca atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	7.733817612E+00	7.874469746E+00	7.87E+00
0.2	6.289395575E+00	6.092891447E+00	6.10E+00
0.4	4.367706622E+00	4.234334008E+00	4.23E+00
0.6	3.625959665E+00	3.621435451E+00	3.62E+00
0.8	3.289312641E+00	3.251942916E+00	3.25E+00
1.0	2.923027474E+00	2.830289990E+00	2.83E+00
1.2	2.524851909E+00	2.395473626E+00	2.40E+00
1.4	2.140806007E+00	2.002148992E+00	2.00E+00
1.6	1.798575579E+00	1.675418383E+00	1.68E+00
1.8	1.511277122E+00	1.418494066E+00	1.42E+00
2.0	1.281093634E+00	1.223019343E+00	1.22E+00
5.0	3.904044483E-01	4.095387545E-01	4.10E-01
10.0	8.436529072E-02	9.337287665E-02	9.3E-02
20.0	1.092625222E-02	1.299363174E-02	1.3E-02
40.0	6.202542390E-04	7.230047569E-04	7.2E-04
60.0	7.584927481E-05	8.899672100E-05	8.9E-05
100.0	4.263927677E-06	5.047896714E-06	5.0E-06

Tablo 20. Sc atomunun taban durumu için ($^2D_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	7.520887473E+00	7.661289274E+00	7.67E+00
0.2	6.261499069E+00	6.140326832E+00	6.14E+00
0.4	4.464152324E+00	4.366078819E+00	4.37E+00
0.6	3.703685035E+00	3.725441924E+00	3.73E+00
0.8	3.398946896E+00	3.382397549E+00	3.38E+00
1.0	3.089857261E+00	3.002222822E+00	3.00E+00
1.2	2.734277021E+00	2.591763034E+00	2.59E+00
1.4	2.369467416E+00	2.200114398E+00	2.20E+00
1.6	2.024104595E+00	1.857684036E+00	1.86E+00
1.8	1.716341790E+00	1.575180760E+00	1.58E+00
2.0	1.455421307E+00	1.350767395E+00	1.35E+00
5.0	4.024682189E-01	4.289871873E-01	4.29E-01
10.0	9.368853590E-02	1.027231712E-01	1.0E-01
20.0	1.231864703E-02	1.474368175E-02	1.5E-02
40.0	7.498549975E-04	8.769162980E-04	8.8E-04
60.0	9.116574532E-05	1.108437440E-04	1.1E-04
100.0	5.395325946E-06	6.398028553E-06	6.4E-06

Tablo 21. Ti atomunun taban durumu için (3F_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	7.346526612E+00	7.519814138E+00	7.51E+00
0.2	6.212505998E+00	6.136129115E+00	6.14E+00
0.4	4.513262243E+00	4.443457578E+00	4.46E+00
0.6	3.743763550E+00	3.793892894E+00	3.80E+00
0.8	3.461004948E+00	3.478848100E+00	3.48E+00
1.0	3.202165840E+00	3.144162831E+00	3.15E+00
1.2	2.894736096E+00	2.768271344E+00	2.77E+00
1.4	2.564725755E+00	2.391733837E+00	2.39E+00
1.6	2.236823543E+00	2.046276802E+00	2.04E+00
1.8	1.928926311E+00	1.747788855E+00	1.74E+00
2.0	1.653410199E+00	1.500352646E+00	1.50E+00
5.0	4.140888177E-01	4.472549497E-01	4.47E-01
10.0	1.031656881E-01	1.122752310E-01	1.1E-01
20.0	1.377315291E-02	1.656610248E-02	1.7E-02
40.0	8.949982277E-04	1.050104412E-03	1.1E-03
60.0	1.157836277E-04	1.362798162E-04	1.4E-04
100.0	6.746120344E-06	8.004482895E-06	8.0E-06

Tablo 22. V atomunun taban durumu için (${}^4F_{3/2}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	7.195834313E+00	7.387480244E+00	7.38E+00
0.2	6.160496200E+00	6.126522425E+00	6.14E+00
0.4	4.546394205E+00	4.507542127E+00	4.53E+00
0.6	3.770688967E+00	3.847959639E+00	3.86E+00
0.8	3.500623069E+00	3.554026539E+00	3.56E+00
1.0	3.281526482E+00	3.258959389E+00	3.26E+00
1.2	3.017190487E+00	2.917510895E+00	2.92E+00
1.4	2.723601204E+00	2.561442828E+00	2.56E+00
1.6	2.421074228E+00	2.221799334E+00	2.22E+00
1.8	2.125170714E+00	1.917224560E+00	1.91E+00
2.0	1.848408828E+00	1.655596679E+00	1.65E+00
5.0	4.270948791E-01	4.657077576E-01	4.65E-01
10.0	1.126454204E-01	1.220179693E-01	1.2E-01
20.0	1.529153663E-02	1.845550870E-02	1.8E-02
40.0	1.055816843E-03	1.242786348E-03	1.2E-03
60.0	1.405388837E-04	1.656540550E-04	1.7E-04
100.0	8.343245227E-06	9.909391990E-06	9.9E-06

Tablo 23. Cr atomunun taban durumu için (7S_3) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	5.630731093E+00	6.126458770E+00	6.25E+00
0.2	5.144020144E+00	5.450278921E+00	5.49E+00
0.4	4.345169378E+00	4.581802957E+00	4.58E+00
0.6	3.904672547E+00	4.174230440E+00	4.18E+00
0.8	3.700596073E+00	3.890448068E+00	3.89E+00
1.0	3.512481908E+00	3.560684280E+00	3.56E+00
1.2	3.283842708E+00	3.188400950E+00	3.18E+00
1.4	3.021444873E+00	2.808781719E+00	2.80E+00
1.6	2.738882462E+00	2.448767644E+00	2.44E+00
1.8	2.449304752E+00	2.123766940E+00	2.11E+00
2.0	2.165309620E+00	1.840499741E+00	1.83E+00
5.0	4.486897609E-01	4.856669029E-01	4.85E-01
10.0	1.219871328E-01	1.316090847E-01	1.3E-01
20.0	1.687691261E-02	2.039816677E-02	2.0E-02
40.0	1.232855834E-03	1.453829232E-03	1.5E-03
60.0	1.688886423E-04	1.991085848E-04	2.0E-04
100.0	1.022158978E-05	1.213522785E-05	1.2E-05

Tablo 24. Mn atomunun taban durumu için (${}^6S_{\frac{5}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	6.935771393E+00	7.171105552E+00	7.16E+00
0.2	6.054416677E+00	6.092628007E+00	6.11E+00
0.4	4.587949542E+00	4.596670405E+00	4.63E+00
0.6	3.804329560E+00	3.926686526E+00	3.95E+00
0.8	3.540592946E+00	3.657044223E+00	3.67E+00
1.0	3.376123927E+00	3.425368606E+00	3.43E+00
1.2	3.180250448E+00	3.150175114E+00	3.15E+00
1.4	2.952100706E+00	2.843604569E+00	2.84E+00
1.6	2.705177618E+00	2.531172559E+00	2.52E+00
1.8	2.449773297E+00	2.232938065E+00	2.22E+00
2.0	2.195087482E+00	1.961126854E+00	1.95E+00
5.0	4.651760278E-01	5.082542715E-01	5.07E-01
10.0	1.311231481E-01	1.417414791E-01	1.4E-01
20.0	1.853183885E-02	2.243787791E-02	2.2E-02
40.0	1.424352657E-03	1.687666602E-03	1.7E-03
60.0	2.007600512E-04	2.373042747E-04	2.4E-04
100.0	1.239104855E-05	1.472995650E-05	1.5E-05

Tablo 25. Fe atomunun taban durumu için (5D_4) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	6.821124957E+00	7.070875776E+00	7.06E+00
0.2	6.005448842E+00	6.081216966E+00	6.09E+00
0.4	4.607968776E+00	4.653511686E+00	4.67E+00
0.6	3.822332508E+00	3.975101496E+00	3.99E+00
0.8	3.554972579E+00	3.704844663E+00	3.71E+00
1.0	3.408483409E+00	3.492160799E+00	3.50E+00
1.2	3.239036565E+00	3.241902295E+00	3.24E+00
1.4	3.037880095E+00	2.957326212E+00	2.96E+00
1.6	2.816001474E+00	2.660232717E+00	2.66E+00
1.8	2.581810424E+00	2.369790291E+00	2.37E+00
2.0	2.342724120E+00	2.098884329E+00	2.09E+00
5.0	4.916461021E-01	5.333677997E-01	5.33E-01
10.0	1.399413261E-01	1.517379763E-01	1.5E-01
20.0	2.026116098E-02	2.452478181E-02	2.5E-02
40.0	1.631723708E-03	1.939591704E-03	1.9E-03
60.0	2.366387760E-04	2.801078622E-04	2.8E-04
100.0	1.490196558E-05	1.773651969E-05	1.8E-05

Tablo 26. Co atomunun taban durumu için (${}^4F_{\frac{9}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	6.720849716E+00	6.985126379E+00	6.98E+00
0.2	5.961223513E+00	6.063041996E+00	6.07E+00
0.4	4.625545352E+00	4.696209934E+00	4.71E+00
0.6	3.838899643E+00	4.014828395E+00	4.02E+00
0.8	3.564795202E+00	3.743158412E+00	3.75E+00
1.0	3.430421224E+00	3.546538643E+00	3.55E+00
1.2	3.282101505E+00	3.319379417E+00	3.32E+00
1.4	3.103925446E+00	3.056815678E+00	3.06E+00
1.6	2.904751746E+00	2.776831823E+00	2.78E+00
1.8	2.691528574E+00	2.497170148E+00	2.50E+00
2.0	2.469990226E+00	2.230720439E+00	2.23E+00
5.0	5.258328331E-01	5.621473795E-01	5.62E-01
10.0	1.484243613E-01	1.617602883E-01	1.6E-01
20.0	2.206644178E-02	2.666548420E-02	2.7E-02
40.0	1.854171751E-03	2.211714817E-03	2.2E-03
60.0	2.766242155E-04	3.279411874E-04	3.3E-04
100.0	1.778051184E-05	2.117448337E-05	2.1E-05

Tablo 27. Ni atomunun taban durumu için (3F_4) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	6.620017701E+00	6.905860679E+00	6.90E+00
0.2	5.909236633E+00	6.043367411E+00	6.05E+00
0.4	4.630914960E+00	4.732663807E+00	4.74E+00
0.6	3.847089066E+00	4.050077147E+00	4.05E+00
0.8	3.567684271E+00	3.776208317E+00	3.78E+00
1.0	3.444229399E+00	3.592949222E+00	3.59E+00
1.2	3.315523840E+00	3.386522370E+00	3.39E+00
1.4	3.158864619E+00	3.144647354E+00	3.15E+00
1.6	2.981116285E+00	2.881655588E+00	2.88E+00
1.8	2.788179932E+00	2.613835166E+00	2.61E+00
2.0	2.584496970E+00	2.353844241E+00	2.35E+00
5.0	5.679822518E-01	5.948732615E-01	5.95E-01
10.0	1.565986862E-01	1.717910378E-01	1.7E-01
20.0	2.394911670E-02	2.887927813E-02	2.9E-02
40.0	2.091212807E-03	2.502745819E-03	2.5E-03
60.0	3.208594054E-04	3.809813739E-04	3.8E-04
100.0	2.105782432E-05	2.508609156E-05	2.5E-05

Tablo 28. Cu atomunun taban durumu için (${}^2S_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]	Ref.[42]
0.0	5.246820328E+00	5.943828819E+00	5.93E+00	5.248E+00
0.2	4.908366710E+00	5.362838226E+00	5.37E+00	5.160E+00
0.4	4.280989116E+00	4.592001346E+00	4.60E+00	4.925E+00
0.6	3.865812508E+00	4.238277403E+00	4.24E+00	4.578E+00
0.8	3.687232428E+00	4.053167848E+00	4.05E+00	4.200E+00
1.0	3.583033645E+00	3.861953377E+00	3.86E+00	3.886E+00
1.2	3.469564507E+00	3.626341256E+00	3.62E+00	3.605E+00
1.4	3.332151511E+00	3.356870604E+00	3.36E+00	3.308E+00
1.6	3.173611329E+00	3.072694470E+00	3.07E+00	3.005E+00
1.8	2.997480799E+00	2.789405697E+00	2.79E+00	2.697E+00
2.0	2.807119733E+00	2.517505704E+00	2.52E+00	2.424E+00
5.0	6.374678414E-01	6.316606704E-01	6.32E-01	6.4E-01
10.0	1.647400471E-01	1.816795402E-01	1.8E-01	...
20.0	2.590970745E-02	3.111260752E-02	3.1E-02	...
40.0	2.342444450E-03	2.810383763E-03	2.8E-03	...
60.0	3.694923581E-04	4.391348297E-04	4.4E-04	...
100.0	2.476756483E-05	2.950560932E-05	2.9E-05	...

Tablo 29. Zn atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[35]	Ref.[38]
0.0	6.448176441E+00	6.761456865E+00	5.571E+00	6.76E+00
0.2	5.818784474E+00	6.005411841E+00	5.443E+00	6.01E+00
0.4	4.641271910E+00	4.789076203E+00	5.042E+00	4.79E+00
0.6	3.864815447E+00	4.105932475E+00	4.522E+00	4.11E+00
0.8	3.570524996E+00	3.827166944E+00	4.004E+00	3.83E+00
1.0	3.458212402E+00	3.663355106E+00	3.678E+00	3.66E+00
1.2	3.357867315E+00	3.492048292E+00	3.504E+00	3.49E+00
1.4	3.234691492E+00	3.288683533E+00	3.317E+00	3.29E+00
1.6	3.091902725E+00	3.060005270E+00	3.084E+00	3.06E+00
1.8	2.934148187E+00	2.818721335E+00	2.776E+00	2.82E+00
2.0	2.764126299E+00	2.576306517E+00	2.493E+00	2.58E+00
5.0	6.799777033E-01	6.724016845E-01	6.903E-01	6.72E-01
10.0	1.722081981E-01	1.920893884E-01	...	1.9E-01
20.0	2.794538205E-02	3.348376252E-02	...	3.3E-02
40.0	2.607329253E-03	3.140706863E-03	...	3.1E-03
60.0	4.226268699E-04	5.034099102E-04	...	5.0E-04
100.0	2.894204874E-05	3.451337675E-05	...	3.4E-05

Tablo 30. Ga atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	6.536008712E+00	6.937235452E+00	6.93E+00
0.2	6.132816720E+00	6.424181002E+00	6.42E+00
0.4	5.197102450E+00	5.268990486E+00	5.26E+00
0.6	4.271134318E+00	4.296997026E+00	4.29E+00
0.8	3.672481222E+00	3.781735078E+00	3.77E+00
1.0	3.370995299E+00	3.533546868E+00	3.52E+00
1.2	3.212703154E+00	3.369516415E+00	3.35E+00
1.4	3.092035793E+00	3.209038324E+00	3.18E+00
1.6	2.968871047E+00	3.030460414E+00	3.00E+00
1.8	2.834615535E+00	2.834593550E+00	2.80E+00
2.0	2.689767093E+00	2.628642848E+00	2.59E+00
5.0	7.474612823E-01	7.175117773E-01	7.15E-01
10.0	1.805766870E-01	2.029112623E-01	2.0E-01
20.0	3.004651536E-02	3.592232034E-02	3.6E-02
40.0	2.884836374E-03	3.490198745E-03	3.5E-03
60.0	4.802782798E-04	5.736242838E-04	5.7E-04
100.0	3.360926247E-05	4.010436485E-05	4.0E-05

Tablo 31. Ge atomunun taban durumu için (3P_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	6.681805647E+00	7.006101976E+00	7.03E+00
0.2	6.395764229E+00	6.644653463E+00	6.66E+00
0.4	5.632422512E+00	5.678496593E+00	5.66E+00
0.6	4.685814617E+00	4.621000516E+00	4.60E+00
0.8	3.894549500E+00	3.892629535E+00	3.87E+00
1.0	3.398262351E+00	3.493065648E+00	3.48E+00
1.2	3.131921838E+00	3.268560524E+00	3.25E+00
1.4	2.977878522E+00	3.105313846E+00	3.08E+00
1.6	2.858204298E+00	2.950609479E+00	2.93E+00
1.8	2.740167597E+00	2.787195094E+00	2.76E+00
2.0	2.614897505E+00	2.613357391E+00	2.58E+00
5.0	8.130425160E-01	7.624073252E-01	7.59E-01
10.0	1.893515381E-01	2.138859674E-01	2.1E-01
20.0	3.221766360E-02	3.845440796E-02	3.8E-02
40.0	3.174757620E-03	3.857002892E-03	3.9E-03
60.0	5.425465464E-04	6.496595583E-04	6.5E-04
100.0	3.880403738E-05	4.636685882E-05	4.7E-05

Tablo 32. As atomunun taban durumu için (${}^4S_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	6.803910924E+00	7.054808154E+00	7.10E+00
0.2	6.589603420E+00	6.780450587E+00	6.82E+00
0.4	5.965782837E+00	5.981531486E+00	5.99E+00
0.6	5.075270165E+00	4.958381805E+00	4.93E+00
0.8	4.194354813E+00	4.105588495E+00	4.07E+00
1.0	3.536983671E+00	3.554531996E+00	3.53E+00
1.2	3.135891729E+00	3.232198684E+00	3.21E+00
1.4	2.909592365E+00	3.029828261E+00	3.01E+00
1.6	2.767118150E+00	2.874036134E+00	2.85E+00
1.8	2.652233647E+00	2.728602793E+00	2.71E+00
2.0	2.540367202E+00	2.579852511E+00	2.55E+00
5.0	8.735576066E-01	8.097018533E-01	8.04E-01
10.0	1.987161633E-01	2.250729564E-01	2.3E-01
20.0	3.445850905E-02	4.108688927E-02	4.1E-02
40.0	3.476908343E-03	4.241663597E-03	4.2E-03
60.0	6.095389239E-04	7.317923851E-04	7.3E-04
100.0	4.456436722E-05	5.331762394E-05	5.3E-05

Tablo 33. Se atomunun taban durumu için (3P_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	6.868673661E+00	7.151113682E+00	7.16E+00
0.2	6.701348856E+00	6.932159826E+00	6.94E+00
0.4	6.194188732E+00	6.246678856E+00	6.24E+00
0.6	5.408355439E+00	5.262626953E+00	5.25E+00
0.8	4.533041644E+00	4.337935708E+00	4.32E+00
1.0	3.779049099E+00	3.672024771E+00	3.66E+00
1.2	3.247288357E+00	3.253478195E+00	3.24E+00
1.4	2.917730706E+00	2.994349430E+00	2.98E+00
1.6	2.718281886E+00	2.816688053E+00	2.80E+00
1.8	2.583089446E+00	2.672376726E+00	2.65E+00
2.0	2.471793399E+00	2.537121595E+00	2.51E+00
5.0	9.278118708E-01	8.570259279E-01	8.48E-01
10.0	2.087620918E-01	2.368561648E-01	2.4E-01
20.0	3.676523299E-02	4.376278783E-02	4.4E-02
40.0	3.790620695E-03	4.642807628E-03	4.6E-03
60.0	6.812212790E-04	8.198654560E-04	8.2E-04
100.0	5.091743249E-05	6.102287443E-05	6.1E-05

Tablo 34. Br atomunun taban durumu için (${}^2P_{3/2}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	6.933797840E+00	7.199417630E+00	7.20E+00
0.2	6.799914639E+00	7.025508730E+00	7.03E+00
0.4	6.380661233E+00	6.447159322E+00	6.44E+00
0.6	5.689524017E+00	5.539067793E+00	5.53E+00
0.8	4.850299286E+00	4.592644062E+00	4.59E+00
1.0	4.048243607E+00	3.837496851E+00	3.84E+00
1.2	3.416399324E+00	3.322842394E+00	3.32E+00
1.4	2.985275603E+00	2.994072066E+00	2.99E+00
1.6	2.713450379E+00	2.778533714E+00	2.77E+00
1.8	2.539853208E+00	2.621228826E+00	2.61E+00
2.0	2.415396448E+00	2.488925816E+00	2.47E+00
5.0	9.755867406E-01	8.995166097E-01	8.92E-01
10.0	2.195835244E-01	2.481421406E-01	2.5E-01
20.0	3.913351055E-02	4.662345491E-02	4.7E-02
40.0	4.115922273E-03	5.062348787E-03	5.1E-03
60.0	7.577221906E-04	9.143712029E-04	9.1E-04
100.0	5.790700823E-05	6.949168599E-05	7.0E-05

Tablo 35. Kr atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38] (Rölativistik olmayan)	Ref.[38] (Rölativistik olan)
0.0	6.984136695E+00	7.236471235E+00	7.24E+00	7.19E+00
0.2	6.874638572E+00	7.094019515E+00	7.10E+00	7.05E+00
0.4	6.524505738E+00	6.604554124E+00	6.60E+00	6.57E+00
0.6	5.921733327E+00	5.784135981E+00	5.78E+00	5.77E+00
0.8	5.141077691E+00	4.854708252E+00	4.85E+00	4.85E+00
1.0	4.331923230E+00	4.045172629E+00	4.04E+00	4.04E+00
1.2	3.633690776E+00	3.447681682E+00	3.45E+00	3.44E+00
1.4	3.112420664E+00	3.044726306E+00	3.04E+00	3.03E+00
1.6	2.760511933E+00	2.779274885E+00	2.77E+00	2.76E+00
1.8	2.532694828E+00	2.596584449E+00	2.58E+00	2.58E+00
2.0	2.379830845E+00	2.457437851E+00	2.44E+00	2.44E+00
5.0	1.016619229E+00	9.475915873E-01	9.35E-01	9.33E-01
10.0	2.312049145E-01	2.599313015E-01	2.6E-01	2.6E-01
20.0	4.155815889E-02	4.954722468E-02	5.0E-02	5.1E-02
40.0	4.452095879E-03	5.498902999E-03	5.5E-03	6.0E-03
60.0	8.389385595E-04	1.015421884E-03	1.0E-03	1.2E-03
100.0	6.555633777E-05	7.877168947E-05	7.9E-05	1.1E-04

Tablo 36. Rb atomunun taban durumu için ($^2S_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	8.896813252E+00	9.160688892E+00	9.08E+00
0.2	7.493820960E+00	7.446455065E+00	7.41E+00
0.4	6.220027021E+00	6.234582789E+00	6.20E+00
0.6	5.698321215E+00	5.621521840E+00	5.60E+00
0.8	5.080598606E+00	4.892671586E+00	4.88E+00
1.0	4.398413257E+00	4.167887488E+00	4.16E+00
1.2	3.763515163E+00	3.565638501E+00	3.56E+00
1.4	3.239675193E+00	3.117256045E+00	3.11E+00
1.6	2.847176278E+00	2.802349891E+00	2.80E+00
1.8	2.571081094E+00	2.582844084E+00	2.58E+00
2.0	2.380072315E+00	2.422596627E+00	2.42E+00
5.0	1.051477927E+00	9.773843029E-01	9.75E-01
10.0	2.436272159E-01	2.720669727E-01	2.7E-01
20.0	4.403725646E-02	5.251315763E-02	5.4E-02
40.0	4.796855668E-03	5.952820029E-03	6.5E-03
60.0	9.241945820E-04	1.123370669E-03	1.3E-03
100.0	7.382807917E-05	8.887912428E-05	1.3E-04

Tablo 37. Sr atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	1.003324836E+01	1.024523212E+01	1.01E+01
0.2	8.336020866E+00	8.107340371E+00	8.07E+00
0.4	6.235208658E+00	6.109027612E+00	6.09E+00
0.6	5.477985657E+00	5.444761674E+00	5.42E+00
0.8	4.990408473E+00	4.876704868E+00	4.86E+00
1.0	4.413899371E+00	4.245452689E+00	4.24E+00
1.2	3.839525845E+00	3.664679173E+00	3.66E+00
1.4	3.336218906E+00	3.197167429E+00	3.20E+00
1.6	2.930872179E+00	2.849009977E+00	2.85E+00
1.8	2.624535103E+00	2.598660725E+00	2.59E+00
2.0	2.401409992E+00	2.417231358E+00	2.41E+00
5.0	1.080462764E+00	1.015656501E+00	1.01E+00
10.0	2.568015083E-01	2.843488808E-01	2.9E-01
20.0	4.656878548E-02	5.560147882E-02	5.7E-02
40.0	5.154030503E-03	6.423314574E-03	7.0E-03
60.0	1.014693347E-03	1.237400617E-03	1.5E-03
100.0	8.287909670E-05	9.996213023E-05	1.5E-04

Tablo 38. Y atomunun taban durumu için ($^2D_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.747140877E+00	1.002141599E+01	9.92E+00
0.2	8.180854066E+00	8.229538657E+00	8.20E+00
0.4	6.160022546E+00	6.320571658E+00	6.32E+00
0.6	5.417638387E+00	5.612888896E+00	5.58E+00
0.8	5.001533104E+00	5.060627496E+00	5.03E+00
1.0	4.503115982E+00	4.436743449E+00	4.42E+00
1.2	3.982789154E+00	3.837025384E+00	3.83E+00
1.4	3.503152554E+00	3.332162029E+00	3.33E+00
1.6	3.093136489E+00	2.940477872E+00	2.94E+00
1.8	2.762302232E+00	2.650168338E+00	2.64E+00
2.0	2.505513064E+00	2.437763359E+00	2.43E+00
5.0	1.115524464E+00	1.051867090E+00	1.05E+00
10.0	2.893781002E-01	2.969968798E-01	3.0E-01
20.0	4.946385789E-02	5.873667835E-02	6.0E-02
40.0	5.520751074E-03	6.907805598E-03	7.6E-03
60.0	1.109804710E-03	1.357625760E-03	1.6E-03
100.0	9.269104974E-05	1.119747142E-04	1.6E-04

Tablo 39. Zr atomunun taban durumu için (3F_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.697517607E+00	9.880946558E+00	9.76E+00
0.2	8.249582371E+00	8.267358998E+00	8.24E+00
0.4	6.301197093E+00	6.443244175E+00	6.46E+00
0.6	5.554492141E+00	5.737057020E+00	5.72E+00
0.8	5.179903425E+00	5.229501061E+00	5.20E+00
1.0	4.730816329E+00	4.638442729E+00	4.62E+00
1.2	4.238169312E+00	4.036696021E+00	4.02E+00
1.4	3.759103687E+00	3.503775058E+00	3.49E+00
1.6	3.324402390E+00	3.071392759E+00	3.06E+00
1.8	2.951395496E+00	2.738726786E+00	2.73E+00
2.0	2.645557721E+00	2.489513968E+00	2.48E+00
5.0	1.125088549E+00	1.084277224E+00	1.08E+00
10.0	2.940369316E-01	3.100221746E-01	3.1E-01
20.0	5.191856805E-02	6.195495815E-02	6.3E-02
40.0	5.897710406E-03	7.407444742E-03	8.1E-03
60.0	1.209492070E-03	1.484184566E-03	1.8E-03
100.0	1.032780082E-04	1.249729966E-04	1.8E-04

Tablo 40. Nb atomunun taban durumu için (${}^6D_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.603467788E+00	9.920404575E+00	8.56E+00
0.2	8.293885722E+00	8.431948612E+00	7.72E+00
0.4	6.436544003E+00	6.638829942E+00	6.71E+00
0.6	5.673399880E+00	5.910823370E+00	6.15E+00
0.8	5.329196061E+00	5.393549221E+00	5.59E+00
1.0	4.925195890E+00	4.791111223E+00	4.95E+00
1.2	4.457490560E+00	4.173021596E+00	4.30E+00
1.4	3.978957900E+00	3.619478320E+00	3.72E+00
1.6	3.523194605E+00	3.163175109E+00	3.24E+00
1.8	3.114213117E+00	2.805151260E+00	2.86E+00
2.0	2.766308449E+00	2.531815177E+00	2.57E+00
5.0	1.136636086E+00	1.110896654E+00	1.11E+00
10.0	3.061944080E-01	3.230964030E-01	3.2E-01
20.0	5.455119290E-02	6.522053140E-02	6.7E-02
40.0	6.285072268E-03	7.921006254E-03	8.7E-03
60.0	1.313683427E-03	1.616935368E-03	1.9E-03
100.0	1.146732366E-04	1.389871577E-04	2.1E-04

Tablo 41. Mo atomunun taban durumu için (7S_3) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	7.989812379E+00	8.405328916E+00	8.48E+00
0.2	7.384418902E+00	7.696410554E+00	7.70E+00
0.4	6.450261408E+00	6.764163723E+00	6.74E+00
0.6	5.963221283E+00	6.252555571E+00	6.22E+00
0.8	5.661456909E+00	5.764433804E+00	5.72E+00
1.0	5.297047816E+00	5.165989338E+00	5.12E+00
1.2	4.855443677E+00	4.529883532E+00	4.50E+00
1.4	4.373435786E+00	3.936153721E+00	3.91E+00
1.6	3.886632983E+00	3.425987377E+00	3.41E+00
1.8	3.427094600E+00	3.010057228E+00	2.99E+00
2.0	3.018893744E+00	2.682154402E+00	2.67E+00
5.0	1.146861440E+00	1.137127726E+00	1.14E+00
10.0	3.209174956E-01	3.372773384E-01	3.4E-01
20.0	5.727826049E-02	6.859844927E-02	7.0E-02
40.0	6.682688117E-03	8.449007210E-03	9.3E-03
60.0	1.422313944E-03	1.755877629E-03	2.1E-03
100.0	1.269042047E-04	1.540490962E-04	2.3E-04

Tablo 42. Tc atomunun taban durumu için (${}^6S_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.364886278E+00	9.569725981E+00	9.41E+00
0.2	8.296437720E+00	8.293037561E+00	8.26E+00
0.4	6.627051400E+00	6.653087797E+00	6.70E+00
0.6	5.830906640E+00	5.959211662E+00	5.97E+00
0.8	5.519404960E+00	5.568827986E+00	5.55E+00
1.0	5.199271859E+00	5.117272114E+00	5.09E+00
1.2	4.798578695E+00	4.590880308E+00	4.57E+00
1.4	4.355468056E+00	4.055266987E+00	4.03E+00
1.6	3.902050889E+00	3.562483457E+00	3.54E+00
1.8	3.464933334E+00	3.138627258E+00	3.12E+00
2.0	3.066512274E+00	2.790168317E+00	2.77E+00
5.0	1.154421092E+00	1.157814240E+00	1.16E+00
10.0	3.364529894E-01	3.515914852E-01	3.5E-01
20.0	6.002539547E-02	7.204187316E-02	7.4E-02
40.0	7.087239808E-03	8.995055265E-03	9.9E-03
60.0	1.535054819E-03	1.901602141E-03	2.3E-03
100.0	1.399908362E-04	1.702439875E-04	2.6E-04

Tablo 43. Ru atomunun taban durumu için (5F_5) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.271749053E+00	9.821338903E+00	8.34E+00
0.2	8.288935195E+00	8.472246394E+00	7.66E+00
0.4	6.697724548E+00	6.795470474E+00	6.78E+00
0.6	5.893113130E+00	6.114080252E+00	6.31E+00
0.8	5.589064860E+00	5.716041105E+00	5.91E+00
1.0	5.302609148E+00	5.244249959E+00	5.41E+00
1.2	4.935720246E+00	4.699135670E+00	4.84E+00
1.4	4.517505880E+00	4.150065677E+00	4.28E+00
1.6	4.077391460E+00	3.646920914E+00	3.75E+00
1.8	3.640429393E+00	3.212764542E+00	3.30E+00
2.0	3.229790809E+00	2.852582165E+00	2.92E+00
5.0	1.159758977E+00	1.172094057E+00	1.17E+00
10.0	3.522177897E-01	3.654908482E-01	3.7E-01
20.0	6.292759264E-02	7.550634050E-02	7.7E-02
40.0	7.508485394E-03	9.552663169E-03	1.0E-02
60.0	1.652570401E-03	2.053196471E-03	2.5E-03
100.0	1.539731950E-04	1.875308481E-04	2.8E-04

Tablo 44. Rh atomunun taban durumu için (${}^4F_{\frac{9}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.186627025E+00	9.813700621E+00	8.28E+00
0.2	8.269379871E+00	8.487099383E+00	7.64E+00
0.4	6.742756516E+00	6.815005622E+00	6.78E+00
0.6	5.934606886E+00	6.148687024E+00	6.34E+00
0.8	5.636663205E+00	5.785628988E+00	5.97E+00
1.0	5.380770488E+00	5.356455295E+00	5.52E+00
1.2	5.048906375E+00	4.845426772E+00	4.99E+00
1.4	4.661058266E+00	4.313402827E+00	4.45E+00
1.6	4.242806849E+00	3.810832505E+00	3.92E+00
1.8	3.816095996E+00	3.364878741E+00	3.46E+00
2.0	3.402974665E+00	2.985130550E+00	3.05E+00
5.0	1.163770763E+00	1.185909669E+00	1.19E+00
10.0	3.679640871E-01	3.802622841E-01	3.8E-01
20.0	6.584766396E-02	7.908386670E-02	8.1E-02
40.0	7.936796728E-03	1.012492815E-02	1.1E-02
60.0	1.774020776E-03	2.210704791E-03	2.7E-03
100.0	1.688556534E-04	2.059944694E-04	3.1E-04

Tablo 45. Pd atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.099826847E+00	7.032454975E+00	7.02E+00
0.2	8.244066354E+00	7.004993749E+00	7.00E+00
0.4	6.781848732E+00	6.912803148E+00	6.91E+00
0.6	5.972163295E+00	6.712877657E+00	6.69E+00
0.8	5.677059753E+00	6.357331584E+00	6.32E+00
1.0	5.447674891E+00	5.856416622E+00	5.82E+00
1.2	5.148319709E+00	5.275460020E+00	5.25E+00
1.4	4.790076584E+00	4.685524811E+00	4.68E+00
1.6	4.395262607E+00	4.133953865E+00	4.13E+00
1.8	3.982830486E+00	3.643552027E+00	3.64E+00
2.0	3.572925400E+00	3.221375281E+00	3.21E+00
5.0	1.167358688E+00	1.198415707E+00	1.20E+00
10.0	3.835358455E-01	3.966830700E-01	4.0E-01
20.0	6.883484639E-02	8.276695513E-02	8.4E-02
40.0	8.375528038E-03	1.070837518E-02	1.2E-02
60.0	1.899575744E-03	2.373776840E-03	2.9E-03
100.0	1.846651307E-04	2.255990836E-04	3.4E-04

Tablo 46. Ag atomunun taban durumu için ($^2S_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.017804361E+00	8.300770463E+00	8.18E+00
0.2	8.217111395E+00	7.646588423E+00	7.59E+00
0.4	6.815251509E+00	6.783401575E+00	6.79E+00
0.6	6.004750553E+00	6.381837635E+00	6.37E+00
0.8	5.708861655E+00	6.094616026E+00	6.07E+00
1.0	5.501188935E+00	5.723855562E+00	5.70E+00
1.2	5.231440724E+00	5.263306349E+00	5.24E+00
1.4	4.902062522E+00	4.758961422E+00	4.75E+00
1.6	4.532344141E+00	4.255834676E+00	4.24E+00
1.8	4.138274086E+00	3.784603215E+00	3.77E+00
2.0	3.737433271E+00	3.362096156E+00	3.35E+00
5.0	1.171217090E+00	1.209746803E+00	1.21E+00
10.0	3.987301104E-01	4.120388063E-01	4.1E-01
20.0	7.189105407E-02	8.650903126E-02	8.8E-02
40.0	8.824785263E-03	1.131162415E-02	1.2E-02
60.0	2.029157877E-03	2.543967603E-03	3.1E-03
100.0	2.014221742E-04	2.465051526E-04	3.8E-04

Tablo 47. Cd atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür	
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[35]	Ref.[38]
0.0	8.947205832E+00	9.216925311E+00	8.418E+00	9.04E+00
0.2	8.190228025E+00	8.272340928E+00	8.08E+00	8.20E+00
0.4	6.838831180E+00	6.872609095E+00	7.042E+00	6.88E+00
0.6	6.029954279E+00	6.172885253E+00	6.122E+00	6.18E+00
0.8	5.733342598E+00	5.856357576E+00	5.638E+00	5.84E+00
1.0	5.543845557E+00	5.564630087E+00	5.439E+00	5.54E+00
1.2	5.300671641E+00	5.200077568E+00	5.169E+00	5.18E+00
1.4	4.998769369E+00	4.775606130E+00	4.704E+00	4.76E+00
1.6	4.654645019E+00	4.326635125E+00	4.197E+00	4.31E+00
1.8	4.281505921E+00	3.885051106E+00	3.792E+00	3.87E+00
2.0	3.894116375E+00	3.473489180E+00	3.454E+00	3.46E+00
5.0	1.176374568E+00	1.223604308E+00	1.191E+00	1.22E+00
10.0	4.134497651E-01	4.252678496E-01	...	4.3E-01
20.0	7.502232037E-02	9.044939417E-02	...	9.2E-02
40.0	9.284763363E-03	1.193446034E-02	...	1.3E-02
60.0	2.162670577E-03	2.719986474E-03	...	3.3E-03
100.0	2.191411072E-04	2.687261973E-04	...	4.1E-04

Tablo 48. In atomunun taban durumu için ($^2P_{\frac{1}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	Ref.[38]
0.0	9.069714598E+00	9.421806770E+00	9.25E+00
0.2	8.552377534E+00	8.747956725E+00	8.63E+00
0.4	7.396190689E+00	7.308707764E+00	7.29E+00
0.6	6.334058629E+00	6.243075229E+00	6.25E+00
0.8	5.705504775E+00	5.724753283E+00	5.71E+00
1.0	5.380248052E+00	5.413469113E+00	5.38E+00
1.2	5.140621642E+00	5.107291954E+00	5.07E+00
1.4	4.882496478E+00	4.754692002E+00	4.72E+00
1.6	4.586701684E+00	4.365554567E+00	4.34E+00
1.8	4.260954539E+00	3.965270894E+00	3.94E+00
2.0	3.917633613E+00	3.577168008E+00	3.55E+00
5.0	1.187054114E+00	1.231390373E+00	1.23E+00
10.0	4.276869989E-01	4.429444420E-01	4.4E-01
20.0	7.824437094E-02	9.420488945E-02	9.6E-02
40.0	9.755698676E-03	1.257037949E-02	1.4E-02
60.0	2.300109930E-03	2.901667769E-03	3.5E-03
100.0	2.378524305E-04	2.920604234E-04	4.5E-04

Tablo 49. Sn atomunun taban durumu için (3P_0) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.256324017E+00	9.256324017E+00	9.40E+00
0.2	8.866822540E+00	9.020925742E+00	8.92E+00
0.4	7.858488804E+00	7.721863206E+00	7.68E+00
0.6	6.688364709E+00	6.473900442E+00	6.46E+00
0.8	5.803446865E+00	5.718279089E+00	5.70E+00
1.0	5.296527166E+00	5.300818754E+00	5.28E+00
1.2	5.003622624E+00	4.994393751E+00	4.97E+00
1.4	4.763505520E+00	4.686485547E+00	4.66E+00
1.6	4.506586568E+00	4.350057903E+00	4.32E+00
1.8	4.221495827E+00	3.994399537E+00	3.97E+00
2.0	3.916081161E+00	3.637773718E+00	3.62E+00
5.0	1.201385677E+00	1.242918568E+00	1.24E+00
10.0	4.412333346E-01	4.580145575E-01	4.6E-01
20.0	8.153713494E-02	9.821010769E-02	1.0E-01
40.0	1.023680193E-02	1.321726162E-02	1.4E-02
60.0	2.441075534E-03	3.090657115E-03	3.8E-03
100.0	2.575213535E-04	3.169225833E-04	4.9E-04

Tablo 50. Sb atomunun taban durumu için (${}^4S_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.395294262E+00	9.619538179E+00	9.51E+00
0.2	9.087695325E+00	9.208666325E+00	9.13E+00
0.4	8.221973630E+00	8.073763086E+00	8.03E+00
0.6	7.064797866E+00	6.769758733E+00	6.73E+00
0.8	6.024070194E+00	5.821340067E+00	5.79E+00
1.0	5.326973291E+00	5.261102153E+00	5.23E+00
1.2	4.922717275E+00	4.907030049E+00	4.88E+00
1.4	4.656935707E+00	4.613758498E+00	4.59E+00
1.6	4.419737779E+00	4.316718265E+00	4.29E+00
1.8	4.168378587E+00	4.002588559E+00	3.98E+00
2.0	3.897378975E+00	3.679545709E+00	3.66E+00
5.0	1.219637316E+00	1.255633662E+00	1.25E+00
10.0	4.540652799E-01	4.727836627E-01	4.7E-01
20.0	8.490669865E-02	1.022823619E-01	1.0E-01
40.0	1.072899406E-02	1.388384189E-02	1.5E-02
60.0	2.585747069E-03	3.284864373E-03	4.0E-03
100.0	2.781954545E-04	3.430167504E-04	5.3E-04

Tablo 51. Te atomunun taban durumu için (3P_2) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.520000984E+00	9.739838766E+00	9.60E+00
0.2	9.270169988E+00	9.403986843E+00	9.29E+00
0.4	8.523353250E+00	8.380618637E+00	8.32E+00
0.6	7.419732309E+00	7.051059790E+00	7.03E+00
0.8	6.295536266E+00	5.963969996E+00	5.95E+00
1.0	5.439105100E+00	5.271995074E+00	5.25E+00
1.2	4.903302848E+00	4.850251839E+00	4.82E+00
1.4	4.577296907E+00	4.547399070E+00	4.52E+00
1.6	4.335788101E+00	4.273277836E+00	4.25E+00
1.8	4.106681002E+00	3.993009560E+00	3.97E+00
2.0	3.865291929E+00	3.702223486E+00	3.68E+00
5.0	1.241848266E+00	1.270145065E+00	1.27E+00
10.0	4.660496455E-01	4.871968013E-01	4.9E-01
20.0	8.833258100E-02	1.062922969E-01	1.1E-01
40.0	1.123236566E-02	1.455921519E-02	1.6E-02
60.0	2.734054617E-03	3.484192537E-03	4.3E-03
100.0	2.998838904E-04	3.704675379E-04	5.8E-04

Tablo 52. I atomunun taban durumu için (${}^2P_{\frac{3}{2}}$) hesaplanan Compton profil değerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS(Denk. 56)	GBS(Denk. 62)	
0.0	9.626996911E+00	9.805363238E+00	9.67E+00
0.2	9.419217733E+00	9.526763914E+00	9.42E+00
0.4	8.771859000E+00	8.621124641E+00	8.57E+00
0.6	7.743820736E+00	7.324125249E+00	7.31E+00
0.8	6.593379804E+00	6.145526054E+00	6.15E+00
1.0	5.618936578E+00	5.327826128E+00	5.33E+00
1.2	4.950815994E+00	4.819112764E+00	4.81E+00
1.4	4.538546231E+00	4.483174939E+00	4.47E+00
1.6	4.266326298E+00	4.214728876E+00	4.20E+00
1.8	4.042931553E+00	3.959178169E+00	3.95E+00
2.0	3.823073712E+00	3.697912347E+00	3.69E+00
5.0	1.267081859E+00	1.293320961E+00	1.28E+00
10.0	4.775584664E-01	5.148639734E-01	5.0E-01
20.0	9.187707012E-02	1.117481843E-01	1.1E-01
40.0	1.174743396E-03	1.528692473E-02	1.7E-02
60.0	2.885934159E-03	3.714484061E-03	4.5E-03
100.0	3.225935742E-04	4.023564801E-04	6.2E-04

Tablo 53. Xe atomunun taban durumu için (1S_0) hesaplanan Compton profil deęerleri ve literatür ile karşılaştırılması

q	Bu Çalışma		Literatür Ref.[38]
	MBS (Denk. 56)	GBS (Denk. 62)	
0.0	9.713117994E+00	9.877590029E+00	9.74E+00
0.2	9.537118480E+00	9.644702358E+00	9.52E+00
0.4	8.973634886E+00	8.850312470E+00	8.77E+00
0.6	8.031151532E+00	7.617245872E+00	7.59E+00
0.8	6.896693659E+00	6.386718056E+00	6.38E+00
1.0	5.847537348E+00	5.456566206E+00	5.45E+00
1.2	5.061414747E+00	4.848764385E+00	4.84E+00
1.4	4.548964418E+00	4.457662277E+00	4.44E+00
1.6	4.222488193E+00	4.174616098E+00	4.16E+00
1.8	3.985765141E+00	3.929899919E+00	3.91E+00
2.0	3.776445082E+00	3.690636201E+00	3.68E+00
5.0	1.295265685E+00	1.303312824E+00	1.30E+00
10.0	4.882588036E-01	5.151681156E-01	5.1E-01
20.0	9.548004296E-02	1.149466648E-01	1.2E-01
40.0	1.227389716E-02	1.598441617E-02	1.8E-02
60.0	3.041338605E-03	3.902397089E-03	4.8E-03
100.0	3.463362322E-04	4.295748064E-04	6.7E-04

4. SONUÇ ve TARTIŞMA

Bu çalışmada; atomların taban durumlarının MBS ve GBS için HFR metodu kullanılarak Compton Profilleri için yeni analitik formüller elde edildi. Elde edilen formüllerin ve içerdiği yardımcı moleküler integrallerin Maple 13 sembolik programlama dilinde programları yapıldı. Bu program aracılığıyla $2 \leq Z \leq 54$ aralığındaki atomların taban durumları için $0 \leq q \leq 100$ aralığında Compton profil değerleri hesaplanmış, literatürde var olan deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılmış ve Bulgular bölümünde tablolar halinde verilmiştir. Bu tablolardan da görüleceği üzere, atomların taban durumları için MBS ve GBS kullanılarak elde edilen Compton profil değerleri literatür ile uyumludur.

Ayrıca q değeri ve atom numarası arttıkça elde edilen ifadelerin sonucunun literatürle uyumunun azaldığı Bulgular bölümündeki elde edilen tablolardan kolayca görülmektedir. Deneysel sonuçlarla daha iyi bir uyum elde etmek için relativistik katkıların ve bazı pertürbe terim katkılarının da dikkate alınması gerekmektedir.

Bu çalışmanın önemli taraflarından birisi; $q=0$ için elde edilen $J_{nl}(\alpha, q)$ ifadesinde, $J_{nl}(\alpha, 0)$ Compton profil değeri deneysel olarak hesaplanabilirse atomların bütün perdeleme sabitlerinin yarı deneysel bir yöntemle elde edilebiliyor olmasıdır.

Bu çalışmanın diğer bir önemli özelliği ise atomların Compton profil değerlerinden faydalanarak momentum değerlerinin ve enerjilerinin (kinetik enerji, tam enerji) elde edilebiliyor olmasıdır.

KAYNAKLAR

- [1] Wissmann, F., Compton Scattering, Springer-Verlag Press, Berlin, 2004.
- [2] Klein, O., Nishina, T., Uber Die Streuung Von Strahlung Durch Freie Elektronen Nach Neuen Relativistischen Quantendynamik Von Dirac., Z. Phys. A, 52 (1929) 853-869.
- [3] Arndt, U.W., Creagh, D.C., Deslattes, R.D., Hubbel, J.H., Kessler Jr. E.G., Lindroth, E. International Tables for Crystallography, Springer Press, England, 2006.
- [4] Tanyel, B., Nükleer Fizik, Ege Üniversitesi Fen Fakültesi, İzmir, 1994.
- [5] Şahin Y., Çekirdek Fiziginin Esasları. Çeviri, Atatürk Üniversitesi Yayınları, Erzurum, 1999.
- [6] Jenkins, R., An Introduction to X-Ray Spectrometry, Heyden and Son, New York, 1986.
- [7] Özden, N., Radyoaktivite ve Radyasyon, İTÜ Nükleer Enerji Enstitüsü Yayınları, İstanbul, 1977.
- [8] Siegbahn, K., Alpha-Beta and Gamma-Ray Spectrometry, North-Holland Publishing Company, Netherlands , 1974.
- [9] Çevik, U., Doğu Karadeniz Dip Tortularının X-Işını Floresans Yöntemiyle Belirlenmesi, Yüksek Lisans Tezi, K.T.Ü., Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon, 1994.
- [10] Semend, F., Schaupp, D., Czerwinski, H. Schumacher, M.. Large angle Rayleigh Scattering of Lineary Polarized, Hard Synchrotron X-Rays by Kr and Xe, Phys. Rev. A, 36 (1987) 5189-5199.
- [11] Çevik, U., Baltaş, H., Measurement of the Mass Attenuation Coefficients and Electron Densities for BiPbSrCaCuO Superconductor at Different Energies, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 256 (2007) 619-625.
- [12] Davydov, A.S., Quantum Mechanics, Pergamon Press, Oxford, 1976.
- [13] Van Grieken, R.E., Markowicz, A.A., Handbook of X-ray spectrometry, Marcell Dekker, New York, 1992.
- [14] Bransden, B.H., Joachain, C.J, Atom ve Molekül Fiziği, (Çev.: Köksal, F., Gümüş, H.), 2.Baskı, Bilim Yayıncılık., Ankara, 1999.
- [15] Storm, E., Israel, H.I., Photon Cross Sections from 1keV to 100MEV for Elements Z--1 to Z=100, At. Data & Nucl. Data Tab., A, 7 (1970) 565-681.

- [16] Hubbell, J.H., Veigle, W.J., Briggs, E.A., Brown, R.T., Cromer, D.T. and Howerton, R.J., Atomic form factors, incoherent scattering functions and photon scattering cross-sections. J. Phys. Chem. Data., 4 (1975) 471-538.
- [17] Kramers, H.A., Heisenberg, W., On the dispersal of radiation by atoms, Z. Phys. A: Hadrons and Nuclei, 31 (1925) 681-708.
- [18] Schülke, W., The One-Dimensional Fourier Transform of Compton Profiles, Phys. Stat. Sol. B, 82 (1977) 229-235.
- [19] Helgaker, T., Jorgensen, P., Olsen, J., Molecular Electronic-Structure Theory, Wiley, New York, 2000.
- [20] Roothaan, C.C.J., New Developments in Molecular Orbital Theory, Rev. Mod. Phys., 23 (1951) 69-89.
- [21] Roothaan, C.C.J., Correlated Orbitals for the Ground State of Heliumlike systems, Rev. Mod. Phys., 32 (1960) 194-205.
- [22] Gradshteyn, I.S. and Ryzhik, I.M., Tables of Integrals, Series and Products, Academic Press, New York, 1995.
- [23] Recent Advances in Computational Chemistry: Molecular Integrals Over Slater Orbitals (Eds. Ozdogan, T. and Ruiz, M.B.), Transworld Research Network, Kerala, India, 2008.
- [24] 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.
- [25] Slater, J.C., Atomic Shielding Constants, Phys. Rev., 36 (1930) 57-64.
- [26] Zener, C., Analytic Atomic Wave Functions, Phys. Rev., 36 (1930) 51-56.
- [27] Kato, T., On the Eigenfunctions of many-particle Systems in Quantum Mechanics, Commun. Pure Appl. Math., 10 (1957) 151-177.
- [28] 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.
- [29] Boys, S.F., Electronic Wave Function. II. A Calculation for the Ground state of Beryllium Atom, Proc. Roy. Soc., London, 200 (1950) 542-554.
- [30] Harris, F.E., Gaussian Wave Functions for Poly atomic Molecules, Rev. Mod. Phys., 35 (1963) 558-568.
- [31] Abramowitz, M., Stegun, I.A., Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1965.

- [32] Duncanson, W.E., Coulson, C.A., Theoretical Shape of the Compton Profile for Atoms from H to Ne, Proc. Phys. Soc., 57 (1945) 190-198.
- [33] Duncanson, W.E., Coulson, C.A., Electron Momenta in Atoms, Proc. Phys. Soc., 60 (1948) 175-257.
- [34] Geller M., Two-Center Integrals over Solid Spherical Harmonics, J. Chem.Phys., 39 (1963) 84-89.
- [35] Chang, C.N., Ngai, L.K. and Li, B.B., The experimental Compton profile of Cu, Zn, Cd, Ta, and Au, Chinese J. Physics, 27 (1989) 461-494.
- [36] Maple 13, Waterloo Maple, Inc., Waterloo, Ontario, Canada.
- [37] Clementi, E., Roetti, C., Roothaan-Hartree-Fock Atomic Wavefunctions, At. Data & Nucl. Data Tab., 14 (1974) 177-223.
- [38] Biggs, F., Mendelsohn, L.B. and Mann, J.B., Hartree-Fock Compton profiles for the elements, At. Data & Nucl. Data Tab., 16 (1975) 201-309.
- [39] Eisenberger, P., Platzman, P.M., Compton Scattering of X-Rays from Bound Electrons, Phys. Rev. A, 2 (1970) 415-423.
- [40] Eisenberger, P., Reed, W.A., Gamma-Ray Compton Profiles of Diamond, Silicon, and Germanium Phys. Rev. A, 5 (1972) 2085-2094.
- [41] Sharma, B.S., Tripathi, A.N., Study of Compton Profiles using Gaussian Expansions of Atomic Orbitals, J. Phys. B, Atom. Molec. Phys., 12 (1979) 3107-3117.
- [42] Bauer, G.E.W. & Schneider, J.R., Electron correlation effect in the momentum density of copper metal, Phys. Rev. B, 31 (1985) 681-692.

EKLER

Ek. 1. $f_{nl}(\alpha, p)$ Fonksiyonları

Tablo 54. $1 \leq n \leq 6$ için $f_{nl}(\alpha, p)$ fonksiyonlarının sembolik ifadeleri (Denklemler 48).

n	l	$f_{nl}(\alpha, p)$
1	0	$\frac{4\alpha^{\frac{5}{2}}}{(\alpha^2 + p^2)^2}$
2	0	$-\frac{4\sqrt{3}\alpha^{\frac{5}{2}}(-3\alpha^2 + p^2)}{3(\alpha^2 + p^2)^3}$
	1	$\frac{16\sqrt{3}\alpha^{\frac{7}{2}}p}{3(\alpha^2 + p^2)^3}$
3	0	$-\frac{16\sqrt{10}\alpha^{\frac{9}{2}}(-\alpha^2 + p^2)}{5(\alpha^2 + p^2)^4}$
	1	$-\frac{16\sqrt{10}\alpha^{\frac{7}{2}}(-5\alpha^2 + p^2)}{15(\alpha^2 + p^2)^4}$
	2	$-\frac{32\sqrt{10}\alpha^{\frac{9}{2}}p^2}{5(\alpha^2 + p^2)^4}$
4	0	$-\frac{16\sqrt{35}\alpha^{\frac{9}{2}}(5\alpha^4 - 10\alpha^2 p^2 + p^4)}{35(\alpha^2 + p^2)^5}$
	1	$-\frac{32\sqrt{35}\alpha^{\frac{11}{2}}p(-5\alpha^2 + 3p^2)}{35(\alpha^2 + p^2)^5}$
	2	$-\frac{32\sqrt{35}\alpha^{\frac{9}{2}}p^2(-7\alpha^2 + p^2)}{35(\alpha^2 + p^2)^5}$

Tablo 54.'ün devamı.

4	3	$\frac{256 \sqrt{35} \alpha^{\frac{11}{2}} p^3}{35 (\alpha^2 + p^2)^5}$
5	0	$\frac{32 \sqrt{14} \alpha^{\frac{13}{2}} (3\alpha^4 - 10\alpha^2 p^2 + 3p^4)}{21 (\alpha^2 + p^2)^6}$
	1	$\frac{32 \sqrt{14} \alpha^{\frac{11}{2}} p (35\alpha^4 - 42\alpha^2 p^2 + 3p^4)}{105 (\alpha^2 + p^2)^6}$
	2	$\frac{256 \sqrt{14} \alpha^{\frac{13}{2}} p^2 (-7\alpha^2 + 3p^2)}{105 (\alpha^2 + p^2)^6}$
	3	$\frac{256 \sqrt{14} \alpha^{\frac{11}{2}} p^3 (-9\alpha^2 + p^2)}{105 (\alpha^2 + p^2)^6}$
	4	$\frac{512 \sqrt{14} \alpha^{\frac{13}{2}} p^4}{21 (\alpha^2 + p^2)^6}$
6	0	$\frac{32 \sqrt{462} \alpha^{\frac{15}{2}} (-7\alpha^6 + 35\alpha^4 p^2 - 21\alpha^2 p^4 + p^6)}{231 (\alpha^2 + p^2)^7}$
	1	$\frac{256 \sqrt{462} \alpha^{\frac{15}{2}} p (7\alpha^4 - 14\alpha^2 p^2 + 3p^4)}{693 (\alpha^2 + p^2)^7}$
	2	$\frac{256 \sqrt{462} \alpha^{\frac{13}{2}} p^2 (21\alpha^4 - 18\alpha^2 p^2 + p^4)}{1155 (\alpha^2 + p^2)^7}$
	3	$\frac{512 \sqrt{462} \alpha^{\frac{15}{2}} p^2 (-3\alpha^2 + p^2)}{231 (\alpha^2 + p^2)^6}$
	4	$\frac{512 \sqrt{462} \alpha^{\frac{13}{2}} p^4 (-11\alpha^2 + p^2)}{693 (\alpha^2 + p^2)^7}$
	5	$\frac{2048 \sqrt{462} \alpha^{\frac{15}{2}} p^5}{231 (\alpha^2 + p^2)^7}$

Ek. 2. $K_n(\alpha, q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

Tablo 55. $1 \leq n \leq 6$ için $K_n(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integralinin sembolik ifadeleri

(Denklem 78). $X = \pi - 2 \arctan\left(\frac{q}{\alpha}\right)$

l	n	$K_n(\alpha, q)$
0	1	$\frac{1}{2\alpha} X$
	2	$\frac{1}{4\alpha^3} X - \frac{q}{2\alpha^2(\alpha^2 + q^2)}$
	3	$\frac{3}{16\alpha^5} X - \frac{q(5\alpha^2 + 3q^2)}{8\alpha^4(\alpha^2 + q^2)^2}$
	4	$\frac{5}{32\alpha^7} X - \frac{q(33\alpha^4 + 40\alpha^2 q^2 + 15q^4)}{32\alpha^6(\alpha^2 + q^2)^3}$
	5	$\frac{35}{256\alpha^9} X - \frac{q(279\alpha^6 + 511\alpha^4 q^2 + 385\alpha^2 q^4 + 105q^6)}{384\alpha^8(\alpha^2 + q^2)^4}$
	6	$\frac{63}{512\alpha^{11}} X - \frac{q(965\alpha^8 + 2370\alpha^6 q^2 + 2688\alpha^4 q^4 + 1470\alpha^2 q^6 + 315q^8)}{1280\alpha^{10}(\alpha^2 + q^2)^5}$
1	2	$\frac{1}{2(\alpha^2 + q^2)}$
	3	$\frac{1}{4(\alpha^2 + q^2)^2}$
	4	$\frac{1}{6(\alpha^2 + q^2)^3}$
	5	$\frac{1}{8(\alpha^2 + q^2)^4}$
	6	$\frac{1}{10(\alpha^2 + q^2)^5}$

Tablo 55.'in devamı.

2	3	$\frac{1}{16\alpha^3} X + \frac{q(\alpha^2 - q^2)}{8\alpha^2(\alpha^2 + q^2)^2}$
	4	$\frac{1}{32\alpha^5} X - \frac{q(3\alpha^4 - 8\alpha^2 q^2 - 3q^4)}{48\alpha^4(\alpha^2 + q^2)^3}$
	5	$\frac{5}{256\alpha^7} X + \frac{q(15\alpha^6 - 73\alpha^4 q^2 - 55\alpha^2 q^4 - 15q^6)}{384\alpha^6(\alpha^2 + q^2)^4}$
	6	$\frac{7}{512\alpha^9} X + \frac{q(105\alpha^8 - 790\alpha^6 q^2 - 896\alpha^4 q^4 - 490\alpha^2 q^6 - 105q^8)}{3840\alpha^8(\alpha^2 + q^2)^5}$
3	4	$\frac{\alpha^2 + 3q^2}{12(\alpha^2 + q^2)^3}$
	5	$\frac{\alpha^2 + 4q^2}{24(\alpha^2 + q^2)^4}$
	6	$\frac{\alpha^2 + 5q^2}{40(\alpha^2 + q^2)^5}$
4	5	$\frac{3}{256\alpha^5} X + \frac{q(3\alpha^6 + 11\alpha^4 q^2 - 11\alpha^2 q^4 - 3q^6)}{128\alpha^4(\alpha^2 + q^2)^4}$
	6	$\frac{3}{512\alpha^7} X + \frac{q(15\alpha^8 + 70\alpha^6 q^2 - 128\alpha^4 q^4 - 70\alpha^2 q^6 - 15q^8)}{1280\alpha^6(\alpha^2 + q^2)^5}$
5	6	$\frac{\alpha^4 + 5\alpha^2 q^2 + 10q^4}{60(\alpha^2 + q^2)^5}$
	7	$\frac{\alpha^4 + 6\alpha^2 q^2 + 15q^4}{120(\alpha^2 + q^2)^6}$
	8	$\frac{\alpha^4 + 7\alpha^2 q^2 + 21q^4}{210(\alpha^2 + q^2)^7}$
6	7	$\frac{5}{2048\alpha^7} X + \frac{q(15\alpha^{10} + 85\alpha^8 q^2 + 198\alpha^6 q^4 - 198\alpha^4 q^6 - 85\alpha^2 q^8 - 15q^{10})}{3072\alpha^6(\alpha^2 + q^2)^6}$
	8	$\frac{5}{4096\alpha^9} X + \frac{q(105\alpha^{12} + 700\alpha^{10} q^2 + 1981\alpha^8 q^4)}{43008\alpha^8(\alpha^2 + q^2)^7}$ $\frac{q(3072\alpha^6 q^6 + 1981\alpha^4 q^8 + 700\alpha^2 q^{10} + 105q^{12})}{43008\alpha^8(\alpha^2 + q^2)^7}$

Ek. 3. $b_{mn}(\alpha, q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

Tablo 56. $1 \leq n \leq 4$ için $b_{mn}(\alpha, q)$ yardımcı moleküler integralinin sembolik ifadeleri

(Denklem 86). $Y = \ln(\alpha + q) - \ln(q)$

m	n	$b_{mn}(\alpha, q)$
1	1	$\frac{1}{\alpha} Y$
	2	$\frac{1}{\alpha^2} Y - \frac{1}{\alpha(\alpha + q)}$
	3	$\frac{1}{\alpha^3} Y - \frac{3\alpha + 2q}{2\alpha^2(\alpha + q)^2}$
	4	$\frac{1}{\alpha^4} Y - \frac{11\alpha^2 + 15\alpha q + 6q^2}{6\alpha^3(\alpha + q)^3}$
2	1	$-\frac{1}{\alpha^2} Y + \frac{1}{\alpha q}$
	2	$-\frac{2}{\alpha^3} Y + \frac{\alpha^2 + 2q}{\alpha^2 q(\alpha + q)}$
	3	$-\frac{3}{\alpha^4} Y + \frac{2\alpha^2 + 9\alpha q + 6q^2}{2\alpha^3 q(\alpha + q)^2}$
	4	$-\frac{4}{\alpha^5} Y + \frac{3\alpha^3 + 22\alpha^2 q + 30\alpha q^2 + 12q^3}{3\alpha^4 q(\alpha + q)^3}$
3	1	$\frac{1}{\alpha^3} Y + \frac{\alpha - 2q}{2\alpha^2 q^2}$
	2	$\frac{3}{\alpha^4} Y + \frac{\alpha^2 - 3\alpha q - 6q^2}{2\alpha^3 q^2(\alpha + q)}$
	3	$\frac{6}{\alpha^5} Y + \frac{\alpha^3 - 4\alpha^2 q - 18\alpha q^2 - 12q^3}{2\alpha^4 q^2(\alpha + q)^2}$
	4	$\frac{10}{\alpha^6} Y + \frac{3\alpha^4 - 15\alpha^3 q - 110\alpha^2 q^2 - 150\alpha q^3 - 60q^4}{6\alpha^5 q^2(\alpha + q)^3}$

Tablo 56.'nin devamı.

4	1	$-\frac{1}{\alpha^4}Y + \frac{2\alpha^2 - 3\alpha q + 6q^2}{6\alpha^3 q^3}$
	2	$-\frac{4}{\alpha^5}Y + \frac{\alpha^3 - 2\alpha^2 q + 6\alpha q^2 + 12q^3}{3\alpha^4 q^3 (\alpha + q)}$
	3	$-\frac{10}{\alpha^6}Y + \frac{2\alpha^4 - 5\alpha^3 q + 20\alpha^2 q^2 + 90\alpha q^3 + 60q^4}{6\alpha^5 q^3 (\alpha + q)^2}$
	4	$-\frac{20}{\alpha^7}X + \frac{\alpha^5 - 3\alpha^4 q + 15\alpha^3 q^2 + 110\alpha^2 q^3 + 150\alpha q^4 + 60q^5}{3\alpha^6 q^3 (\alpha^2 + q^2)^3}$
5	1	$\frac{1}{\alpha^5}Y + \frac{3\alpha^3 - 4\alpha^2 q + 6\alpha q^2 - 12q^2}{12\alpha^4 q^4}$
	2	$\frac{5}{\alpha^6}Y + \frac{3\alpha^4 - 5\alpha^3 q + 10\alpha^2 q^2 - 30\alpha q^3 - 60q^4}{12\alpha^5 q^4 (\alpha + q)}$
	3	$\frac{15}{\alpha^7}Y + \frac{\alpha^5 - 2\alpha^4 q + 5\alpha^3 q^2 - 20\alpha^2 q^3 - 90\alpha q^4 - 60q^5}{4\alpha^6 q^4 (\alpha + q)^2}$
	4	$\frac{35}{\alpha^8}Y + \frac{3\alpha^6 - 7\alpha^5 q + 21\alpha^4 q^2 - 105\alpha^3 q^3 - 770\alpha^2 q^4 - 1050\alpha q^5 - 420q^6}{12\alpha^7 q^4 (\alpha + q)^3}$
	5	$\frac{70}{\alpha^9}Y + \frac{3\alpha^7 - 8\alpha^6 q + 28\alpha^5 q^2 - 168\alpha^4 q^3}{12\alpha^8 q^4 (\alpha + q)^4}$ $-\frac{1750\alpha^3 q^4 + 3640\alpha^2 q^5 + 2940\alpha q^6 + 840q^7}{12\alpha^8 q^4 (\alpha + q)^4}$

Ek. 4. $B_{mn}^l(\alpha, \beta : q)$ Yardımcı Moleküler İntegrali

Tablo 57. $1 \leq l \leq 3$ için $B_{mn}^l(\alpha, \beta : q)$ yardımcı moleküler integralinin sembolik ifadeleri

(Denklem 83). $A = \pi - 2 \arctan\left(\frac{q}{\beta}\right)$, $B = \pi - 2 \arctan\left(\frac{q}{\alpha}\right)$, $C = \ln\left(\frac{q^2 + \beta^2}{q^2 + \alpha^2}\right)$

l	m	n	$B_{mn}^l(\alpha, \beta : q)$
0	0	1	$\frac{1}{2\beta} A$
		2	$\frac{1}{4\beta^3} A - \frac{q}{2\beta^2(q^2 + \beta^2)}$
		3	$\frac{3}{16\beta^5} A - \frac{q(5\beta^2 + 3q^2)}{8\beta^4(q^2 + \beta^2)^2}$
0	1	0	$\frac{1}{2\alpha} B$
		1	$\frac{1}{2\beta(\alpha^2 - \beta^2)} A - \frac{1}{2\alpha(\alpha^2 - \beta^2)} B$
		2	$\frac{\alpha^2 - 3\beta^2}{4\beta^3(\alpha^2 - \beta^2)^2} A + \frac{1}{2\alpha(\alpha^2 - \beta^2)^2} B - \frac{q}{2\beta^2(\alpha^2 - \beta^2)(q^2 + \beta^2)}$
		3	$\frac{3\alpha^4 - 10\alpha^2\beta^2 + 15\beta^4}{16\beta^5(\alpha^2 - \beta^2)^3} A - \frac{1}{2\alpha(\alpha^2 - \beta^2)^3} B$ $-\frac{q(9\beta^6 + 7\beta^4q^2 - 14\beta^4\alpha^2 + 5\beta^2\alpha^4 - 10\beta^2\alpha^2q^2 + 3q^2\alpha^4)}{8\beta^4(\alpha^2 - \beta^2)^3(q^2 + \beta^2)^2}$
0	2	0	$\frac{1}{4\alpha^3} B - \frac{q}{2\alpha^2(q^2 + \alpha^2)}$
		1	$\frac{1}{2\beta(\alpha^2 - \beta^2)^2} A - \frac{3\alpha^2 - \beta^2}{4\alpha^3(\alpha^2 - \beta^2)^2} B - \frac{q}{2\alpha^2(\alpha^2 - \beta^2)(q^2 + \alpha^2)}$
		2	$\frac{\alpha^2 - 5\beta^2}{4\beta^3(\alpha^2 - \beta^2)^3} A + \frac{5\alpha^2 - \beta^2}{4\alpha^3(\alpha^2 - \beta^2)^3} B - \frac{q}{2(\alpha^2 - \beta^2)^2} \left\{ \frac{1}{\beta^2(q^2 + \beta^2)} + \frac{1}{\alpha^2(q^2 + \alpha^2)} \right\}$

Tablo 57.'nin devamı.

0	3	0	$\frac{3}{16\alpha^5}B - \frac{q}{8\alpha^4(q^2 + \alpha^2)}$
		1	$\frac{1}{2\beta(\alpha^2 - \beta^2)^3}A - \frac{15\alpha^4 - 10\alpha^2\beta^2 + 3\beta^4}{16\beta^5(\alpha^2 - \beta^2)^3}B$ $+ \frac{q(9\alpha^6 + 7\alpha^4q^2 - 14\alpha^4\beta^2 + 5\alpha^2\beta^4 - 10\alpha^2\beta^2q^2 + 3q^2\beta^4)}{8\alpha^4(\alpha^2 - \beta^2)^3(q^2 + \alpha^2)^2}$
1	1	1	$-\frac{1}{2(\alpha^2 - \beta^2)}C$
		2	$\frac{1}{2(\alpha^2 - \beta^2)^2}C + \frac{1}{2(q^2 + \beta^2)(\alpha^2 - \beta^2)}$
1	2	1	$-\frac{1}{2(\alpha^2 - \beta^2)^2}C + \frac{1}{2(q^2 + \alpha^2)(\alpha^2 - \beta^2)}$
		2	$\frac{1}{(\alpha^2 - \beta^2)^3}C + \frac{\alpha^2 + 2q^2 + \beta^2}{2(\alpha^2 - \beta^2)^2(q^2 + \alpha^2)(\alpha^2 - \beta^2)}$
1	3	1	$-\frac{1}{2(\alpha^2 - \beta^2)^3}C - \frac{3\alpha^2 - 2q^2 - \beta^2}{4(\alpha^2 - \beta^2)^2(q^2 + \alpha^2)^2}$
		2	$\frac{3}{2(\alpha^2 - \beta^2)^4}C + \frac{2\alpha^6 + 9\alpha^4q^2 - 6\alpha^2q^2\beta^2}{4(\alpha^2 - \beta^2)^4(q^2 + \alpha^2)^2(q^2 + \beta^2)}$ $+ \frac{3\alpha^4\beta^2 + 6\alpha^2q^4 - 6\alpha^2\beta^4 - 6\beta^2q^4 - 3\beta^4q^2 + \beta^6}{4(\alpha^2 - \beta^2)^4(q^2 + \alpha^2)^2(q^2 + \beta^2)}$
2	0	2	$\frac{1}{4\beta}A - \frac{q}{2(q^2 + \beta^2)}$
		3	$\frac{1}{16\beta^3}A - \frac{q(\beta^2 - \alpha^2)}{8\beta^2(q^2 + \beta^2)^2}$
2	1	1	$\frac{\alpha}{2(\alpha^2 - \beta^2)}B - \frac{\beta}{2(\alpha^2 - \beta^2)}A$

Tablo 57.'nin devamı.

2	1	2	$\frac{(\alpha^2 + \beta^2)}{4\beta(\alpha^2 - \beta^2)^2} A + \frac{\alpha}{2(\alpha^2 - \beta^2)^2} B - \frac{q}{2(\alpha^2 - \beta^2)(q^2 + \beta^2)}$
	2	0	$\frac{1}{4\alpha} B - \frac{q}{2(q^2 + \alpha^2)}$
	1		$\frac{(\alpha^2 + \beta^2)}{4\alpha(\alpha^2 - \beta^2)^2} B - \frac{\beta}{2(\alpha^2 - \beta^2)^2} A - \frac{q}{2(\alpha^2 - \beta^2)(q^2 + \alpha^2)}$
	2		$\frac{\alpha^2 + 3\beta^2}{4\beta(\alpha^2 - \beta^2)^3} A - \frac{3\alpha^2 + \beta^2}{4\alpha(\alpha^2 - \beta^2)^3} B - \frac{q(\alpha^2 + 2q^2 + \beta^2)}{2(\alpha^2 - \beta^2)^2(q^2 + \alpha^2)(q^2 + \beta^2)}$
2	3	0	$\frac{1}{16\alpha^3} B - \frac{q(\alpha^2 - q^2)}{8\alpha^2(q^2 + \alpha^2)^2}$
		1	$\frac{3\alpha^4 + 6\alpha^2\beta^2 - \beta^4}{16\alpha^3(\alpha^2 - \beta^2)^3} B - \frac{\beta}{2(\alpha^2 - \beta^2)^3} A$
			$-\frac{q(5\alpha^6 + 3\alpha^4q^2 - 6\alpha^4\beta^2 + \alpha^2\beta^4 - 2\alpha^2\beta^2q^2 - q^2\beta^4)}{8\alpha^2(\alpha^2 - \beta^2)^3(q^2 + \alpha^2)^2}$
3	2	1	$\frac{\beta^2}{2(\alpha^2 - \beta^2)^2} C + \frac{\alpha}{2(\alpha^2 - \beta^2)(q^2 + \alpha^2)}$
	2		$-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2(\alpha^2 - \beta^2)^3} C + \frac{\alpha^2q^2 - 2\alpha^2\beta^2 + q^2\beta^2}{2(\alpha^2 - \beta^2)(q^2 + \alpha^2)}$
	3	1	$\frac{\beta^2}{2(\alpha^2 - \beta^2)^3} C + \frac{\alpha^2 + 2q^2\beta^2 + \alpha^2\beta^2}{4(\alpha^2 - \beta^2)^2(q^2 + \alpha^2)^2}$
	2		$-\frac{\alpha^2}{2(\alpha^2 - \beta^2)^4} C - \frac{3\alpha^6q^2 + 5\alpha^6\beta^2 + 4\alpha^4\beta^2q^2 + 4\alpha^4\beta^4}{4(\alpha^2 - \beta^2)^4(q^2 + \alpha^2)^2(q^2 + \beta^2)}$
			$+ \frac{2\alpha^4q^4 + 5\alpha^2\beta^4q^2 - 2\alpha^2q^4\beta^2 + \alpha^2\beta^6 + 2q^2\beta^6 + 4q^4\beta^4}{4(\alpha^2 - \beta^2)^4(q^2 + \alpha^2)^2(q^2 + \beta^2)}$

ÖZGEÇMİŞ

1988 yılında Ankara'da doğdu. İlkokulu Ankara'da, ortaokulu ve liseyi İstanbul'da tamamladı. 2005 yılında Karadeniz Teknik Üniversitesi Rize Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde lisans eğitimine başladı. 2009 yılında lisans eğitimini başarı ile bitirdi. 2009 yılında Rize Üniversitesinde Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında yüksek lisans eğitimine başladı.

Burçin YARDAK