

**SLATER TİP ORBİTALLER
KULLANILARAK ELEKTRİK
ÇOK-KUTUP MOMENT
İNTEGRALLERİNİN HESAPLANMASI**

NİLGÜN İNCEREİS

FİZİK YÜKSEK LİSANS

FİZİK ANABİLİM DALI

T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**SLATER TİP ORBİTALLER KULLANILARAK ELEKTRİK ÇOK-KUTUP
MOMENT İNTEGRALLERİNİN HESAPLANMASI**

NİLGÜN İNCEREİS

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

AKADEMİK DANIŞMAN

DOÇ. DR. EMİN ÖZTEKİN

SAMSUN-2011

T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Bu çalışma jürimiz tarafından 30/12/11 tarihinde yapılan sınav ile Fizik Anabilim Dalı'nda YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Prof. Dr. İsmet ŞENEL

Üye: Doç. Dr. Emin ÖZTEKİN

Üye: Doç. Dr. Metin AYDIN

ONAY:

Yukarıdaki imzaların adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

...../...../.....

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Prof. Dr. Ümit SERDAR

SLATER TİP ORBİTALLER KULLANILARAK ELEKTRİK ÇOK-KUTUP MOMENT İNTEGRALLERİNİN HESAPLANMASI

ÖZ

Bu çalışmada, Slater tip orbitaller (STO'lar) kullanılarak, tek-elektron ve a ve b olarak adlandırılan iki-merkez elektrik çok-kutup moment integraller hesaplanmaktadır. Bundan dolayı, düzenli katı harmonikler ve işlemci için master formüller kullanılarak iki-merkez elektrik çok-kutup moment integrallerinde içeren o -merkez çok-kutup moment işlemciler ve a -merkez STO'lar b -merkezine taşınmaktadır. Sonra, integralin radyal ve açısal kısımları ayrı ayrı ve analitik olarak hesaplanmıştır. Böylece, iki-merkez elektrik çok-kutup moment integraller tek-merkeze indirgenmiş olur. Daha sonra, eliptik koordinat sistemi kullanılarak iki-merkez elektrik çok-kutup moment integraller Zeta fonksiyonu veya A_k ve B_k yardımcı fonksiyonları cinsinden ifade edilmiştir. Sonuç olarak, Mathematica 7 programlama dilinde A_k ve B_k yardımcı fonksiyonları hesaplayan bilgisayar programı yapılarak tek-elektron ve iki-merkez elektrik çok-kutup moment integraller sayısal olarak hesaplanmıştır.

Anahtar Kelimeler: Slater tip orbitaller, çok-kutup momentler, Z fonksiyonları, A_k yardımcı fonksiyonu, B_k yardımcı fonksiyonu.

CALCULATION OF ELECTRIC MULTIPOLE MOMENT INTEGRALS BY USING SLATER TYPE ORBITALS

ABSTRACT

In this work, electric multipole moment integrals which has one-electron and two-center, which is termed as a and b terms, calculated by using Slater type orbitals (STOs). Therefore, o -center multipole moment operators and a -center STOs involved in the two-center electric multipole moment integrals was translated to b -center using tesseral harmonics and master formulas as operator. Then, the radial and angular part of the integral was analytically and separately calculated. So, two-center electric multipole moment integrals have been reduced to the one-center. After more, two-center electric multipole moment integrals are expressed in terms of Zeta functions or A_k and B_k auxiliary functions by using ellipsoidal coordinate system. Consequently, one-electron and two-center electric multipole moment integrals numerically calculated using computing program which calculated A_k and B_k auxiliary functions in Mathematica 7 programming language.

Keywords: Slater-type orbitals, the multipole moments, Z functions, A_k auxiliary function, B_k auxiliary function.

TEŞEKKÜRLER

Tez çalışmam boyunca beni fikirleri ile yönlendiren, çalışmalarım ile ilgili bilgisayar programlarını yazarken bilgi ve tecrübelerini benimle paylaşan, ileride yapacağım akademik çalışmalar için de bende bir bakış açısı oluşmasını sağlayan çok değerli danışman hocam sayın Doç. Dr. Emin ÖZTEKİN'e en içten teşekkürlerimi sunarım.

Tez çalışmamda takıldığım noktalarda bilgilerinden faydalandığım değerli hocalarım Doç. Dr. Telhat ÖZDOĞAN'a, Yrd. Doç. Dr. Selda ÖZCAN AKDEMİR'e ve Öğr. Gör. Dr. Niyazi YÜKÇÜ'ye çok teşekkür ederim.

Çalışmalarım esnasında bilgi ve moral desteklerini eksik etmeyen saygıdeğer hocalarım Prof. Dr. İsmet ŞENEL, Prof. Dr. Metin YAVUZ ve Doç. Dr. Şamil IŞIK beylere de teşekkür eder, saygılarımı sunarım.

Dostluğu ve iyi niyetiyle tez çalışmam süresince beni hiç yalnız bırakmadığı için sevgili arkadaşım Selda ÖZAY'a teşekkür ederim.

Tez çalışmam süresince manevi desteklerini benden esirgemeyen Ondokuz Mayıs Üniversitesi'nin fizik bölümündeki hocalarıma, yüksek lisans ve doktora programındaki öğrenci arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Beni bugünlere getiren, hayatım boyunca hiçbir zaman maddi ve manevi desteğini benden esirgemeyen canım AİLEM'e sonsuz teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
1. GİRİŞ	1
2. GENEL BİLGİLER	5
2.1. Çok Kutuplu Alanlar	5
2.1.1. Elektrik Çift-Kutup	5
2.1.2. Potansiyelin Çok-Kutup Açılımı	10
2.1.3. Çift-Kutup Potansiyel	13
2.1.4. Dört-Kutup Potansiyel ve Dört-Kutup Moment	14
2.1.5. Elektrik Çok Kutuplular	22
2.2. Kuantum Mekaniğinde Elektrik Çok-Kutup Moment İntegralleri	23
3. MATERYAL ve YÖNTEM	25
3.1. Kartezyen Koordinatlar ve Düzenli Katı Harmonikler	25
3.2. Çok-Kutup Moment İşlemcisi	33
3.3. Koordinat Sistemleri ve Dönme Matrisi	38
3.4. Merkezlerin Taşınması	41
4. BULGULAR ve TARTIŞMA	44
4.1. Düzenli Katı Harmoniklerin Taşınması İçin Master Formüller	44
4.2. İşlemcinin Taşınması İçin Master Formüller	50
4.3. Bir- ve İki- Merkezli İntegrallerin Analitik Hesaplanması	55
4.3.1. Bir- Merkezli İntegraller	55
4.3.2. İki- Merkezli İntegraller	56
5. SONUÇ ve ÖNERİLER	68
6. KAYNAKLAR	70
7. EK-1: Düzenli Katı Harmoniklerin Küresel Koordinatlarda Bulunması.....	74

8. EK-2: Dört-kutup, Sekiz-kutup ve Onaltı-kutup Moment İşlemcilerinin Hesaplanması	77
9. EK-3: Yardımcı Fonksiyonlar.....	79
10. ÖZGEÇMİŞ	84

SİMGE ve KISALTMALAR LİSTESİ

STO: Slater tip orbital

CGS: Gauss birim sistemi

FFTM: Hızlı Fourier dönüşüm metodu

$\chi_{n,l,m}$: Slater tip orbital sembolü

$Y_l^m(\theta, \phi)$: Küresel harmonikler

$P_l^m(x)$: Bağlı Legendre fonksiyonları

$P_l(x)$: Legendre fonksiyonları

l_m : Düzenli katı harmonikler

$A_k(p)$: A_k yardımcı fonksiyonları

$B_k(pt)$: B_k yardımcı fonksiyonları

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Elektrik çift-kutup	6
Şekil 2.2. Eşpotansiyel yüzey ve elektrik alan çizgileri	9
Şekil 2.3. q_α yükünün bir P noktasındaki potansiyeli	10
Şekil 2.4. x_3 ' eksenı boyunca yüklerin dağılımı	18
Şekil 2.5. $\theta = 54.7^\circ$ için dört-kutup potansiyelinin pozitif ve negatif bölgeleri	20
Şekil 2.6. Dört-kutup karesel yük dağılımı	21
Şekil 2.7. $\theta = \pi / 2$ için dört-kutup potansiyelinin pozitif ve negatif bölgeleri	21
Şekil 2.8. Elektrik tek-, çift-, dört- ve sekiz-kutup	22
Şekil 3.1. Küresel koordinatlardan eliptik koordinatlara geçiş için çizilen koordinat sistemi ve koordinatların döndürülmesindeki durumlar	39
Şekil 3.2. A ve B merkezlerinin koordinatları	42
Şekil 4.1. $n < 17$ için $A_n(1, \alpha)$ 'nın grafiği	58
Şekil 4.2. $n > 17$ için $A_n(1, \alpha)$ 'nın grafiği	59
Şekil 4.3. $n=35, n=50, n=55, n=60, n=70$ için $A_n(1, \alpha)$ 'nın grafiği	60
Şekil 4.4. n 'nin çift ve 17' den büyük değerleri için $B_n(\alpha)$ 'nın grafiği	60
Şekil 4.5. n 'nin tek ve 17' den büyük değerleri için $B_n(\alpha)$ 'nın grafiği	61
Şekil 4.6. n 'nin çift ve 17' den küçük değerleri için $B_n(\alpha)$ 'nın grafiği	62
Şekil 4.7. n 'nin tek ve 17' den küçük değerleri için $B_n(\alpha)$ 'nın grafiği	63

ÇİZELGELER LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. $l = 2$ için küresel harmonikler	28
Çizelge 3.2. Çağırma formülüne karşılık gelen düzenli katı harmonikler ...	31
Çizelge 4.1. Taşıma yapıldıktan sonra düzenli katı harmonikler	45
Çizelge 4.2. Taşıma yapıldıktan sonra işlemciler	50
Çizelge 4.3. Bir-merkezli integrallerin açılara bağlı kısmı	56
Çizelge 4.4. $n > 17$ için $A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integraller	64
Çizelge 4.5. $n > 17$ için $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integraller	66

1. GİRİŞ

Maddeleri daha yakından tanıyabilmek için onları oluşturan atom ve moleküllerin özelliklerini incelemek gerekir. İncelemek istediğimiz maddenin elektrik, manyetik veya optik özellikleri ve madde içinde oluşan reaksiyonlar, bu maddeyi meydana getiren moleküllerin özelliklerine bağlıdır. Bu nedenle moleküllerin yapısını belirtmek, yapı ile özellik arasındaki ilgileri bulmak büyük önem taşır.

Moleküllerin yapı ve özellikleri bilindiğinde, onun kimyasal reaksiyon yeteneği ve meydana getirdiği maddenin özellikleri hakkında birtakım bilgiler elde edilmektedir. Ayrıca istediğimiz özelliklerde bir madde elde etmek için bu maddeyi oluşturan molekülün yapısının önceden bilinmesi önemli bir yer tutmaktadır. Böylece, herhangi bir deney yapmadan ve herhangi bir teorik araştırmaya girmeden sadece moleküllerin bazı özelliklerini bilerek bu moleküllerden oluşan maddenin özelliği hakkında birtakım bilgiler elde edilmektedir.

Molekülün yapısı kimyasal yapısının bilinmesiyle anlamlı olur. Bu yapıyı bilmeden molekülün kendi yapısından ve özelliklerinden söz etmek mümkün değildir. Molekülü oluşturan atomlar arasındaki kimyasal bağlar, molekülün kimyasal yapısının temelini oluşturmaktadır. Kuantum mekaniğinin inceleme alanına giren elektronlar vasıtasıyla da bu bağlar oluşmaktadır.

Atom ve moleküllerin elektronik yapılarının belirlenmesi, atomlar ve moleküller arasındaki etkileşimlerin anlaşılmasında çok önemlidir. Bu nedenle, bu yapıların doğru ve incelikli bir şekilde belirlenmesi ile ilgili çalışmalar uzun yıllardan beri sürmektedir.

Elektriksel olarak bir yük sistemi, elektrik çok-kutup momentlerin bir setiyle ilgilidir. Belli bir bölgede toplanmış yüklerin dağılımının dışında bir noktadaki elektrik alanın potansiyeli yüklerin çok-kutup momentlerine bağlıdır. Bu, bir dış alanla sistemin etkileşim enerjisidir. Çok-kutup momentler, moleküller arasındaki kuvvetlerin varlığını kanıtlamaktadır. Aynı zamanda tamamlanmamış gazların, sıvıların veya katıların özelliklerinin anlaşılması için araştırmalara da yardım etmektedir. Moleküllerdeki çift-kutup ve dört-kutup momentlerin ölçümleri yapısal açıdan çok önemlidir. Örneğin, $1,84 \times 10^{-18}$ e.s.u. (1,84 D) olan H_2O 'nun çift-kutup moment değeri molekülün yük

dağılımı hakkında bilgi vermektedir. Böyle polar kovalent bağa sahip moleküllerin yük dağılımındaki farklılık çift-kutup moment ile verilir. CO_2 'nin dört-kutup momentini de bize bu moleküldeki C-O bağları hakkında çok şey söylemektedir (Buckingham, 1959).

Atomlar ve moleküller arasında oluşan belirli kuvvetler öncelikle bu atomların veya moleküllerin elektriksel olarak birbirleriyle etkileşimlerinden kaynaklandığı sonucuna varılabilir. Moleküller uzaklaştığında ve moleküller arasındaki mesafe molekülün boyutları için karşılaştırıldığında etkileşim enerjisi sabit elektrik momentler tarafından belirlenmektedir. Bu moleküllerin etkileşimleri de elektrostatik enerji içermektedir. Böyle sabit momentler, bir ek etkileşime neden olan yakın moleküllerin elektronik yapılarını bozan bir alan üretmektedir (Buckingham, 1967).

Moleküler sistemde, sistemin enerjisinin belirlenmesi kadar molekülün sahip olduğu yük dağılımının belirlenmesi de birtakım özelliklerin bilinmesi açısından önemlidir. Moleküllerin yük dağılımı ise elektrik çok-kutup momentler cinsinden ifade edilmektedir (Buckingham, 1967). Elektrik çok-kutup moment integralleri ise Slater tipi orbitaller (STO) kullanarak analitik olarak değerlendirilmesiyle ilgili çalışmalar (Guseinov ve Sadichov, 1977; Beck ve Hohlneicher, 1999) geçmişten günümüze kadar hala devam etmektedir. Son zamanlarda yapılan elektrik çok-kutup momentlerinin belirlenmesiyle ilgili çalışmaların çoğu teoriktir. Elektrik çok-kutup moment integralleri için yapılmış olan teorik çalışmaların (Zheng ve Zerner, 1993; Guseinov, 1998; Guseinov ve ark., 1999 (a); Yükçü ve ark., 2011; Yükçü, 2009) çoğunda elektrik çok-kutup moment işlemcisinin veya STO'ların taşınma bağıntıları kullanılmıştır. Aynı zamanda manyetik çok-kutup moment integralleri için de STO'ların taşınma bağıntılarının kullanıldığı çalışmalar bulunmaktadır (Guseinov, 1998; Guseinov ve ark., 1999 (b); Yükçü, 2009).

Kaynaklara baktığımızda çok-kutuplar ile ilgili değişik çalışmalar yapılmıştır. Örneğin, elektromanyetik alandaki küresel bir parçacığın tork ve kuvvetinin hesaplanması üzerinde çalışmalar yapılarak alanın türev ifadeleri bakımından matematiksel ifadeleri elde edilmiştir (Washizu, 2004). Tasi ve arkadaşları (Tasi ve ark., 1997) da kalıcı elektrik çift-kutup momentlerin analizini yapmışlardır. Kalıcı elektrik çift-kutup moment de, moleküllerin kutuplaşma ve yapısı üzerinde temel bilgiler sağlamaktadır. Ayrıca başka bir çalışmada elektrik çift-kutup momentlerin parçacık

hakkında daha detaylı bilgi verdiği ifade edilmektedir (Stoylov ve ark., 2009). Başka bir kaynakta (Ong ve ark., 2003) ise çok-kutuplar üzerindeki hızlı Fourier dönüşüm metodu (FFTM) ile üç boyutlularda potansiyel alanların hızlı hesaplanması için hızlı çalışan algoritma yapmışlardır. Ayrıca, çekirdek ile elektronlar arasındaki elektromanyetik etkileşmelerden yalnızca elektrik etkileşmeler dikkate alınarak aşırı ince yapı sabitinin değeri elektrik çok-kutup momentler cinsinden hesaplanmıştır (Gül, 2006).

Elektrik çok-kutup momentler ile ilgili hem deneysel hem de teorik çalışmalar vardır. Doğrudan ölçümler genellikle çift-kutup (Halkier ve ark., 1999) ve dört-kutup (Harrison ve Lawson, 2005; Maynau ve ark., 2002; Rabinowitz ve Rein, 1972; Maroulis ve Thakkar, 1987) momentlerle sınırlanırken, moleküler elektronik yapı teoride 10. dereceyi aşkın elektrik momentler üzerinde teorik araştırmalar (Sundholm ve Pyykko, 1985; Bounds ve Wilson, 1985; Özdoğan, 2006; Zheng ve Zerner, 1993) yapılmıştır. Deneysel sınırlamalar yüzünden daha yüksek momentlerin çalışmaları ölçüm sonuçlarını doğrulamada hedef alınamamaktadır. Yüksek dereceden momentler, moleküler dinamikte, yüksek derece kutuplanabilirlerin hesaplanmasında (Dacre, 1984; Maroulis, 2003; Maroulis, 2011 (a); Maroulis, 2011 (b)), moleküler optik ve manyetik özelliklerde, London serilerinin terimlerindeki moleküller arası etkileşimlerde ve öz uyumlu alan teorisinin kuantum mekaniksel çözümlerinde kullanılmaktadır (Zheng ve Zerner, 1993).

Bir moleküler orbital tanımlaması sıklıkla moleküler çift-kutup momentlerle verilebilir. Moleküler çift-kutup momentler, dört-kutup momentlerden daha güvenlidir. Dört-kutup momentlerden daha yüksek derece momentler için seçilen baz seti çok önemlidir. Yüksek derece momentler, moleküler bölgenin dışındaki elektronik dağılımlar için çok duyarlıdır. Yalnızca büyük baz setleri tarafından tanımlanması daha iyi olabilir. Baz setinin etkileri, yüksek derece momentler üzerindeki ilişkiden daha önemli olduğuna inanılmaktadır (Zheng ve Zerner, 1993).

Biz bu çalışmada, STO'ları kullanarak elektrik çok-kutup moment integallerini bulmaya çalıştık. Bunun için öncelikle, kartezyen koordinatları kullanarak normalize olmuş düzenli katı harmonikleri Mathematica 7 programlama dilini kullanarak g orbitallerine kadar hesapladık. Sonra, kaynaklarda ifade edilen çok-kutup moment tanımlamalarından birini (Buckingham, 1959) kullanarak çeşitli momentlerin tensör operatörlerini tek-kutup, çift-kutup, dört-kutup, sekiz-kutup ve onaltı-kutup için master

formül ifadelerini yazdık. Daha sonra, farklı koordinatlara sahip iki ayrı merkezin birbirine nasıl bağlı olduğunu ve A-merkezini B-merkezine nasıl taşıyacağımızı, bunu Şekil (3.2)'de ifade ederek, açıkladık. Aynı zamanda, kaynaklarda düzenli katı harmonikler ve işlemcinin taşınması için master formüller (Zheng ve Zerner, 1993) ifade edilmiştir. Bu master formüllerini kullanarak hem STO hem işlemci için hesapladığımız master ifadeleri çizelge halinde gösterdik. Sonra STO'ları kullanılarak A ve B biçiminde iki-merkez ve tek-elektron olan elektrik çok-kutup moment integrallerinin hesaplanması için O-merkezindeki işlemciyi ve A-merkezindeki STO'yu, düzenli katı harmonikler ve işlemci için master formülleri kullanarak B-merkezine taşıdık. Böylece iki-merkez elektrik çok-kutup moment integralleri tek-merkeze indirgenmiş oldu. Daha sonra iki-merkez elektrik çok-kutup moment integrallerinin eliptik koordinat sisteminde ifade edilmesiyle Z fonksiyonları cinsinden veya A ve B yardımcı fonksiyonları cinsinden ifade edilebilmesi nedeniyle Mathematica 7 programlama dilinde A ve B yardımcı fonksiyonları bulan programı yaparak iki-merkez ve tek-elektron olan elektrik çok-kutup moment integralleri sayısal olarak hesaplanmaktadır.

2. GENEL BİLGİLER

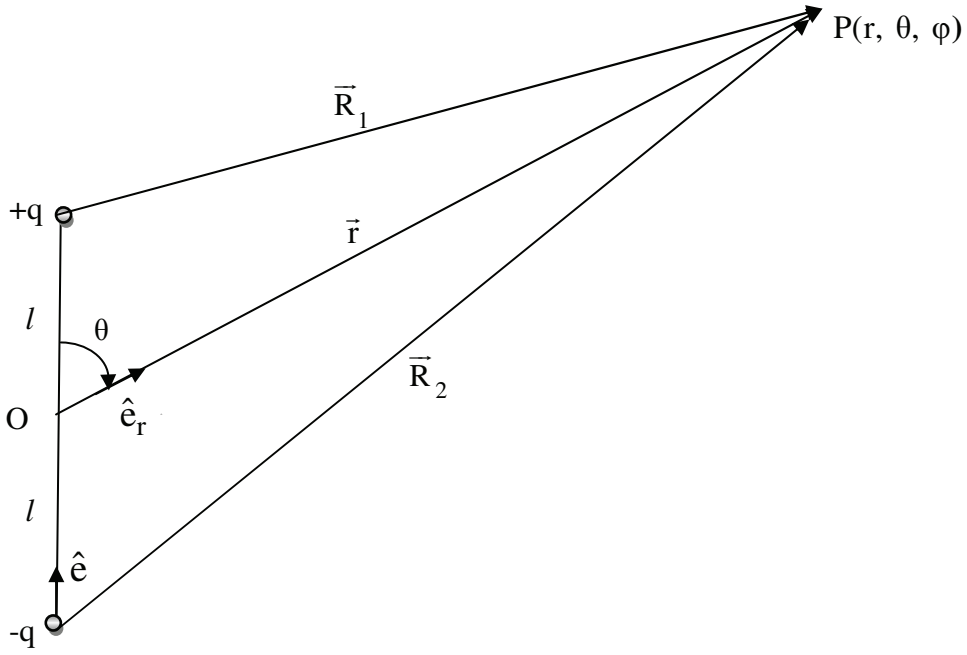
2.1. Çok Kutuplu Alanlar

Molekülden oluşan bir sistem düşündüğümüzde, moleküllerin sahip oldukları yük dağılımlarının belirlenmesi en az sistemin enerjisinin belirlenmesi kadar önemlidir (Orbay, 2000). Bu nedenle moleküllerin yük dağılımlarını incelemek, moleküller hakkında bize ayrıntılı bilgiler sunar. Bu moleküllerin yük dağılımları da elektrik çok-kutup momentler cinsinden ifade edilir (Buckingham, 1967).

Bu bölümde, kararlı-durum koşulları altındaki elektromanyetik etkilerden söz edilecektir. İlk olarak, durgun yüklerin bir koleksiyonu düşünülecek ve kuvvet serilerinin açılımı kullanılarak durgun yüklerin kendilerinden belirli bir mesafede oluşturduğu skaler potansiyel hesaplanması gösterilecektir. Böyle bir açılım içindeki çeşitli terimlerin, sistemin çok-kutup momentleriyle özdeşleşmiş olabileceğinden bahsedilecektir. Bu terimler, sistemdeki çok-kutup momentlerden tek-kutup, çift-kutup ve dört-kutup açısından ayrıntılı olarak ele alınacaktır. Eğer yükler hareketli ise, akımlar oluşacak ve manyetik etkiler meydana gelecektir (Marion ve Heald, 1980). Bu bölümdeki eşitlikler için Gauss birim sistemi kullanılmıştır. Yani, $k = 1/4\pi\epsilon_0 = 1$ olarak alınmıştır.

2.1.1. Elektrik Çift-Kutup

İlk olarak, yüklerin statik bir sistemine temel bir örnek düşünelim. Sistem, eşit büyüklükteki iki yükten oluşur (Şekil 2.1). Bu yükler zıt işaretlidir ve her biri başlangıç noktasından l kadar mesafededir. Başlangıç noktası ise bu yükleri birbirine bağlayan eksen üzerindedir. Böyle bir sistem, elektrik çift-kutup için en basit örnektir (Marion ve Heald, 1980).



Şekil 2.1. Elektrik çift-kutup.

Elektrik alan süperpozisyon prensibine uyar. Bu nedenle bir yük sisteminin elektrik potansiyeli süperpozisyon prensibi ile bulunur. Süperpozisyon prensibine göre; bir yük kümesinin elektrik alanı her bir yükün oluşturduğu elektrik alanların vektörel toplamıdır. Bir dizi yükün meydana getirdiği elektrik potansiyeli de her bir yükün oluşturduğu potansiyellerin skaler toplamıdır.

Süperpozisyon prensibine göre $R_\alpha = |\vec{R}_\alpha|$ olduğunda $P(r, \theta, \varphi)$ noktasındaki potansiyel,

$$\Phi(r, \theta, \varphi) = q \left(\frac{1}{|\vec{R}_1|} - \frac{1}{|\vec{R}_2|} \right) \quad (2.1)$$

olarak verilir. Potansiyel ifadesi, θ açısına ve $\vec{r}$ 'nin $|\vec{r}| = r$ büyüklüğüne bağlı olarak yazılabilir. Çünkü yük dağılımı eksensel simetriktr. Potansiyel φ azimut açısından bağımsız olmalıdır. Potansiyelin φ 'den bağımsız olduğunu göstermek için, öncelikle r ve θ 'nın fonksiyonu olarak R_1 ve R_2 yazılır. Kosinüs teoremi kullanılarak, denklem (2.2) yazılır (Marion ve Heald, 1980).

$$\begin{aligned}
R_1^2 &= r^2 + l^2 - 2rl \cos\theta \\
&= r^2 \left[1 + \left(\frac{l}{r}\right)^2 - 2\left(\frac{l}{r}\right) \cos\theta \right] \quad r > l \text{ için}
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Böylece,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{R_1} &= \frac{1}{r} \left[1 + \left(\frac{l}{r}\right)^2 - 2\left(\frac{l}{r}\right) \cos\theta \right]^{-1/2} \\
&= \frac{1}{r} \left[1 + \left(\frac{l}{r}\right) \cos\theta + \frac{1}{2} \left(\frac{l}{r}\right)^2 (3\cos^2\theta - 1) + \frac{1}{2} \left(\frac{l}{r}\right)^3 (5\cos^3\theta - 3\cos\theta) + \dots \right]
\end{aligned} \tag{2.3}$$

olur. Eğer çift-kutup alanın etki ettiği P noktasının çift-kutup merkezinden uzaklığı, yüklerin çift-kutup merkezine olan l uzaklığından çok büyük seçilirse ($l \ll r$) yaklaşık olarak aşağıdaki gibi olur:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{R_1} &= \frac{1}{r} + \frac{l}{r^2} \cos\theta + \frac{1}{2} \frac{l^2}{r^3} (3\cos^2\theta - 1) \\
\frac{1}{R_2} &= \frac{1}{r} - \frac{l}{r^2} \cos\theta + \frac{1}{2} \frac{l^2}{r^3} (3\cos^2\theta - 1)
\end{aligned} \tag{2.4}$$

dir. $\frac{1}{R_2}$ 'deki $-$ işareti $\cos(\pi - \theta) = -\cos\theta$ açılımından ortaya çıkar. Böylece potansiyel yaklaşık olarak,

$$\Phi(r, \theta) = 2q l \frac{\cos\theta}{r^2} \tag{2.5}$$

yazılır. Bir çift-kutup potansiyeli bundan dolayı $1/r^2$ kadar azalırken bir yükün potansiyeli $1/r$ kadar azalır. Buna göre; çift-kutup potansiyeli, tek bir yükün potansiyelinden daha çabuk azalmalıdır. Çünkü P noktası daha uzağa konulur ve böylece çift-kutup yük dağılımı yüksüz basit küçük bir birim yük olarak görünür. $2l$ mesafede ve q kadar eşit yüklerin çiftine elektrik çift-kutup moment denir ve

$$\vec{p} \equiv 2ql\hat{e} \tag{2.6}$$

biçiminde ifade edilir. Çift-kutup moment, Şekil 2.1’de görüldüğü gibi negatif yükten pozitif yüke doğru tanımlanan yönde bir vektördür (Marion ve Heald, 1980).

Eğer $\hat{e}_r$; P noktası doğrultusundaki bir birim vektörse, çift-kutup potansiyeli,

$$\Phi = \frac{\vec{p} \cdot \hat{e}_r}{r^2} \quad (2.7)$$

kadar olmalıdır (Marion ve Heald, 1980).

Çift-kutup için elektrik alan vektörü $\vec{E}$, Φ ’nin gradientinin negatifi olarak,

$$\vec{E} = -\text{grad } \Phi \quad (2.8)$$

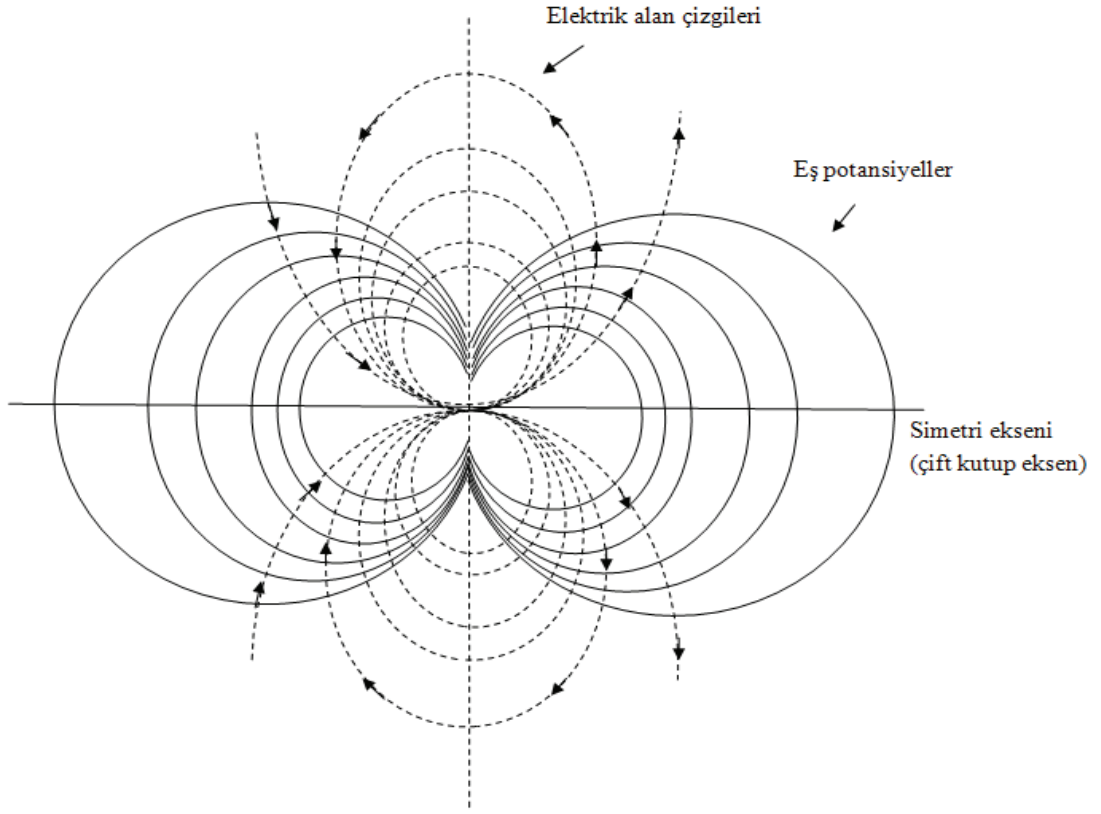
şeklinde verilir (Marion ve Heald, 1980).

$\vec{E}$ ’nin küresel bileşenleri, denklem (2.5)’i kullanarak daha kolay bir şekilde hesaplanabilir. Aynı zamanda $p = 2ql$ olarak alındığında $\vec{E}$ ’nin küresel bileşenleri,

$$\begin{aligned} E_r &= -\frac{\partial \Phi}{\partial r} = 2p \frac{\cos \theta}{r^3} \\ E_\theta &= -\frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = p \frac{\sin \theta}{r^3} \\ E_\varphi &= -\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

şeklinde yazılabilir (Marion ve Heald, 1980).

Bazı elektrik alan çizgileri ve eşpotansiyel çizgiler Şekil 2.2’de gösterilmektedir.



Şekil 2.2. Eşpotansiyel yüzey ve elektrik alan çizgileri.

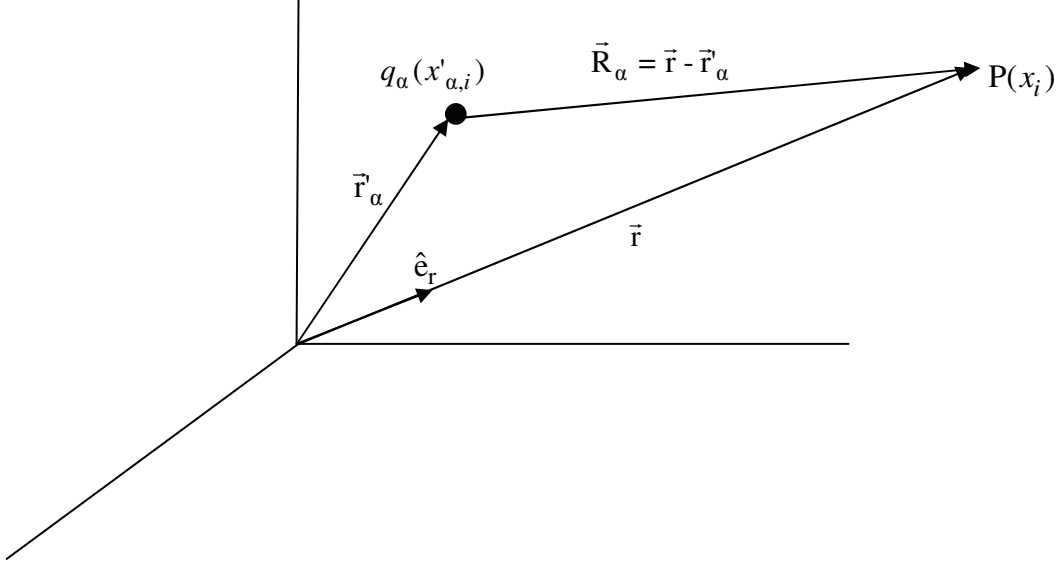
Şekil 2.2'deki eğrilerin her ikisi de kutupsal ekseninde simetriktir. Böylece eşpotansiyel yüzeyler, simetrik eksenlerde Şekil 2.2'deki eğrilerin dönmesiyle elde edilebilir. Ayrıca, Şekil 2.2'ye göre çift-kutup moment yönünün soldan sağa yatay olduğu söylenilebilir. Burada, sonlu büyüklükte olan çift-kutup düşünülür. Fakat limit durumunda sıfır olan bir çift-kutup noktası tanımlanır ve yükün büyüklüğü sonsuza yaklaşır. Böylece p çift-kutup momenti,

$$p \equiv \lim_{\substack{l \rightarrow 0 \\ q \rightarrow \infty}} 2ql \quad (2.10)$$

şeklindedir (Marion ve Heald, 1980).

2.1.2. Potansiyelin Çok-Kutup Açılımı

Keyfi yerleştirilmiş q_α yükünün başlangıç noktası etrafındaki statik bir koleksiyonuna sahip olduğu yerdeki genel yerleşimini düşünelim. $(x'_{\alpha,1}, x'_{\alpha,2}, x'_{\alpha,3})$ noktasındaki α . yükünün uzaklık vektörü $\vec{r}' = \vec{r}'(x'_{\alpha,i})$ olsun. q_α yükünden $\vec{R}_\alpha = \vec{r} - \vec{r}'_\alpha$ ve başlangıç noktasından $\vec{r}$ olarak $P = P(x_i)$ noktasına yönelen vektörler, sırasıyla Şekil 2.3'te gösterilmiştir. P noktasındaki alan sabit alınırsa, böylece $\vec{R}_\alpha$ vektörü, q_α yükünün $x'_{\alpha,i}$ koordinatının bir fonksiyonu olarak yazılır (Marion ve Heald, 1980).



Şekil 2.3. q_α yükünün bir P noktasındaki potansiyeli.

q_α yükünün P noktası alanındaki potansiyeli,

$$\Phi_\alpha = \frac{q_\alpha}{R_\alpha} \quad (2.11)$$

olur. Burada,

$$R_\alpha = |\vec{r} - \vec{r}'_\alpha| = \sqrt{\sum_i (x_i - x'_{\alpha,i})^2} \quad (2.12)$$

$\vec{r}$ konumunda sabit bir alan için, başlangıç noktası $\vec{r}'_\alpha = 0$ civarında $\frac{1}{R_\alpha}$ 'nın açılımı yapılır. $r'_\alpha = (x'_{\alpha,1}, x'_{\alpha,2}, x'_{\alpha,3})$ koordinatı için üç boyutlu Maclaurin açılımı,

$$f(r'_\alpha) = f(0) + \sum_i x'_{\alpha,i} \left[\frac{\partial f(r'_\alpha)}{\partial x'_{\alpha,i}} \right]_{r'_\alpha=0} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} x'_{\alpha,i} x'_{\alpha,j} \left[\frac{\partial^2 f(r'_\alpha)}{\partial x'_{\alpha,i} \partial x'_{\alpha,j}} \right]_{r'_\alpha=0} + \dots \quad (2.13)$$

şeklinde (Arfken ve Weber, 2001). Bundan dolayı,

$$f(r'_\alpha) = \frac{q_\alpha}{R_\alpha(r'_\alpha)} \quad (2.14)$$

olarak alındığında, q_α yükünden kaynaklanan potansiyel için ifade,

$$\begin{aligned} \Phi_\alpha = & \frac{q_\alpha}{r} + q_\alpha \sum_i x'_{\alpha,i} \left[\frac{\partial}{\partial x'_{\alpha,i}} \left(\frac{1}{R_\alpha} \right) \right]_{R_\alpha=r} \\ & + \frac{1}{2} q_\alpha \sum_{i,j} x'_{\alpha,i} x'_{\alpha,j} \left[\frac{\partial^2}{\partial x'_{\alpha,i} \partial x'_{\alpha,j}} \left(\frac{1}{R_\alpha} \right) \right]_{R_\alpha=r} + \dots \end{aligned} \quad (2.15)$$

olur.

Şimdi, denklem (2.12)'den uzaysal türevler,

$$\frac{\partial}{\partial x'_{\alpha,i}} f(R_\alpha) = - \frac{\partial}{\partial x_i} f(R_\alpha) \quad (2.16)$$

olarak değişir. Böylece, ($r = \sqrt{\sum_i x_i^2}$ ile),

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial x'_{\alpha,i}} \left(\frac{1}{R_\alpha} \right) \right]_{R_\alpha=r} &= - \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{R_\alpha} \right) \right]_{R_\alpha=r} \\ &= - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{r} \right) \end{aligned} \quad (2.17)$$

olur. Bu nedenle; potansiyel,

$$\Phi_{\alpha} = \frac{q_{\alpha}}{r} - q_{\alpha} \sum_i x'_{\alpha,i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{r} \right) + \frac{1}{2} q_{\alpha} \sum_{i,j} x'_{\alpha,i} x'_{\alpha,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{1}{r} \right) + \dots \quad (2.18)$$

olarak yazılabilir.

Yüklerin toplamından kaynaklanan potansiyel,

$$\Phi = \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha} = \Phi^{(1)} + \Phi^{(2)} + \Phi^{(4)} + \dots + \Phi^{(2^l)} + \dots \quad (2.19)$$

olarak yazılabilir. Burada aşağıdaki tanımlamalar kullanılmıştır.

$$\Phi^{(1)} \equiv \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{r} = \frac{q}{r} \quad (2.20a)$$

$$\Phi^{(2)} \equiv - \sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_i x'_{\alpha,i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{r} \right) \quad (2.20b)$$

$$\Phi^{(4)} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_{i,j} x'_{\alpha,i} x'_{\alpha,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{1}{r} \right) \quad (2.20c)$$

.

.

.

$$\Phi^{(2^l)} \equiv \frac{(-1)^l}{l!} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_{i,j,\dots,l} x'_{\alpha,i} x'_{\alpha,j} \dots x'_{\alpha,l} \frac{\partial^l}{\partial x_i \partial x_j \dots \partial x_l} \left(\frac{1}{r} \right) \quad (2.20d)$$

dir.

Eğer toplam yük $q = \sum_{\alpha} q_{\alpha}$ başlangıç noktasında yerleştirildiyse ilk terim $\Phi^{(1)}$

potansiyelidir. Bu tek-kutup potansiyel olarak adlandırılır. Tek-kutup momentin, toplam yükü q 'dur. $\Phi^{(2)}$ terimi çift-kutup potansiyel olarak adlandırılır ve önceki bölümdeki çift-kutup potansiyele denk olduğunu görebiliriz. $\Phi^{(4)}$ terimi, dört-kutup potansiyel ve

genelde, $\Phi^{(2)}$ terimi 2^l . çok-kutup potansiyeli olarak isimlendirilir (Marion ve Heald, 1980).

2.1.3. Çift-Kutup Potansiyel

İlk olarak, denklem (2.20b) ile verilen $\Phi^{(2)}$ terimine dikkatimizi yönlendirelim.

$$\begin{aligned}\Phi^{(2)} &= -\sum_{\alpha} q_{\alpha} \sum_i x'_{\alpha,i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{r} \right) \\ &= -\sum_{\alpha} q_{\alpha} \vec{r}'_{\alpha} \cdot \text{grad} \left(\frac{1}{r} \right)\end{aligned}\quad (2.21)$$

Daha önceden denklem (2.6) ile ifade edilen çift kutup momenti ile denklem (2.21)'deki ifadedeki α üzerinden $q_{\alpha} \vec{r}'_{\alpha}$ 'nın toplamı benzerdir ve sistemin çift-kutup momenti

$$\vec{p} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \vec{r}'_{\alpha} \quad (2.22)$$

olur. Böylece,

$$\begin{aligned}\Phi^{(2)} &= -\vec{p} \cdot \text{grad} \left(\frac{1}{r} \right) \\ &= -\vec{p} \cdot \left(-\frac{\vec{r}}{r^3} \right) \\ &= \frac{\vec{p} \cdot \hat{e}_r}{r^2}\end{aligned}\quad (2.23)$$

yazılır. Bu ifade, denklem (2.7)'de verilen ifadeyle aynıdır. x_i noktasındaki i . parçacığın koordinatlarına göre yukarıdaki ifadeye gradient işlemcisi uygulanır. Bundan dolayı, potansiyel için genel ifadedeki ikinci terim, Bölüm 2.1.1'de hesap edilen basit çift-kutup için yaklaşık potansiyele tam olarak karşılık gelir. Burada, tek-kutup terimi basit çift-kutup için sıfırdır (Marion ve Heald, 1980).

$\vec{E}^{(2)}$ elektrik çift-kutup alan vektörü, $\Phi^{(2)}$ 'nin gradienti alınarak hesaplanabilir.

$$\begin{aligned}
\vec{E}^{(2)} &= -\text{grad}\Phi^{(2)} \\
&= -\text{grad}\left(\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{r^3}\right)
\end{aligned} \tag{2.24}$$

İki skaler fonksiyonun çarpımının gradientini açarsak ($\vec{p}\cdot\vec{r}$ ve $\frac{1}{r^3}$),

$$\vec{E}^{(2)} = -\frac{1}{r^3}\text{grad}(\vec{p}\cdot\vec{r}) - (\vec{p}\cdot\vec{r})\text{grad}\left(\frac{1}{r^3}\right) \tag{2.25}$$

buluruz. Şimdi

$$\text{grad}(\vec{p}\cdot\vec{r}) = \sum_i p_i \vec{e}_i = \vec{p} \tag{2.26}$$

ve

$$\text{grad}\left(\frac{1}{r^3}\right) = -\frac{3\vec{r}}{r^5} \tag{2.27}$$

dir. Bundan dolayı,

$$\begin{aligned}
\vec{E}^{(2)} &= -\frac{\vec{p}}{r^3} + (\vec{p}\cdot\vec{r})\frac{3\vec{r}}{r^5} \\
&= \frac{1}{r^5} \left[3(\vec{p}\cdot\vec{r})\vec{r} - \vec{p}r^2 \right]
\end{aligned} \tag{2.28}$$

dir.

Çift-kutup potansiyel $1/r^2$ ile orantılı olarak değişir. Elektrik çift-kutup alan ise $1/r^3$ ile orantılı olarak değişir.

2.1.4. Dört-Kutup Potansiyel ve Dört-Kutup Moment

Potansiyel için genel ifadedeki üçüncü terim, statik yüklerin katkısıyla

$$\Phi^{(4)} = \frac{1}{2} \sum_a q_a \sum_{i,j} x'_{a,i} x'_{a,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{1}{r} \right) \tag{2.29}$$

şeklinde verilir. Bu ifade, dört-kutup potansiyellerinin hesaplanmasında doğrudan kullanılabilmesine karşın, özellikle katı-cisim dinamiğindeki tensörlerin taşınması çalışmalarında oldukça kullanışlıdır. Bu durumu, aşağıdaki işlemleri yaparak daha iyi anlayabiliriz (Marion ve Heald, 1980).

$r = 0$ noktası hariç, Laplacian eşitliğinin $\frac{1}{r}$ için çözümü

$$\sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \left(\frac{1}{r} \right) = 0 \quad r > 0 \quad (2.30)$$

olur. Bu ifade,

$$\sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{1}{r} \right) \delta_{ij} = 0 \quad r > 0 \quad (2.30a)$$

olarak tekrar yazılabilir. Bu ifade sıfıra eşit olduğundan, herhangi bir sabit kez bu nicelik, $\Phi^{(4)}$ değerine eklenebilir. Eğer, $r'^2_\alpha = |r'_\alpha|^2$ olduğu yerde bu sabiti

$-\frac{1}{6} \sum_\alpha q_\alpha r'^2_\alpha$ olarak seçersek, ifade

$$\Phi^{(4)} \equiv \frac{1}{6} \sum_\alpha q_\alpha \sum_{i,j} \left(3x'_{\alpha,i} x'_{\alpha,j} - r'^2_\alpha \delta_{ij} \right) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{1}{r} \right) \quad (2.31)$$

biçiminde olur. Böylece (2.31) denklemini yeniden

$$\Phi^{(4)} \equiv \frac{1}{6} \sum_{i,j} Q_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{1}{r} \right) = \frac{1}{6} \sum_{i,j} Q_{ij} \left(\frac{3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}}{r^5} \right) \quad (2.31a)$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki

$$Q_{ij} \equiv \sum_\alpha q_\alpha \left(3x'_{\alpha,i} x'_{\alpha,j} - r'^2_\alpha \delta_{ij} \right) \quad (2.32)$$

ifadesi 9 niceliğe sahip 3x3 'lük bir diziden oluşan bir tensördür. Bu dört-kutup tensör olarak adlandırılır. Bu tensör

$$\{\mathbf{Q}\} = \begin{Bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} \end{Bmatrix} \quad (2.33)$$

şeklindedir. Bu tensör simetriktir. Yani, $Q_{ij} = Q_{ji}$ dir. Böylece $\{\mathbf{Q}\}$ en fazla 6 bağımsız eleman içerebilir. Aslında, bağımsız elemanların sayısını 5'e düşüren Q_{ij} arasında ek bir ilişki vardır. Bunu sırasıyla gösterirsek,

$$Q_{kk} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \left(3x'_{\alpha,k}{}^2 - r'_{\alpha}{}^2 \delta_{kk} \right) \quad (2.34)$$

yazabiliriz. k üzerinden toplam alınmasıyla

$$\sum_k Q_{kk} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \left[3 \left(\sum_k x'_{\alpha,k}{}^2 \right) - r'_{\alpha}{}^2 \left(\sum_k \delta_{kk} \right) \right] \quad (2.35)$$

olur. Fakat,

$$\sum_k x'_{\alpha,k}{}^2 = |r'_{\alpha}|^2 = r'_{\alpha}{}^2 \quad \text{ve} \quad \sum_k \delta_{kk} = 3 \quad (2.36)$$

olmaktadır. Bu nedenle, denklem (2.35)

$$\sum_k Q_{kk} = 0 \quad (2.37)$$

şekline indirgenir. Böylece, $\{\mathbf{Q}\}$ 'nin ($\{\mathbf{Q}\}$ 'nin izi olarak söylenir) köşegen elemanlarının toplamı sıfır olur ve Q_{ij} 'nin en fazla beş elemanı bağımsız olur.

Dört-kutup tensörü esas eksene göre seçildiğinde köşegen dışındaki tüm elemanlar sıfır olur. İzin sıfır olmasıyla bağımsız elemanların sayısı 2'ye düşer. Çoğu durumda yük dağılımı simetri eksenine göre belirlenir. Eğer x'_3 ekseni simetri eksenini olarak seçilirse, $Q_{11} = Q_{22}$ olur. Bundan dolayı, $\{\mathbf{Q}\}$ 'nin yalnızca bir tane bağımsız elemanı olur. Denklem (2.37) gereğince,

$$Q_{33} = -(Q_{11} + Q_{22}) = -2Q_{11} = -2Q_{22} \quad (2.38)$$

olur. Q_{33} elemanı, genellikle Q olarak alınır ve simetrik bir yük dağılımının dört-kutup momenti olarak adlandırılır. Buna rağmen, elbette dört-kutup moment tam anlamıyla bir tensördür, yalnızca belli durumdaki Q_{33} 'ün bağımsız elemanlarıdır.

Aşağıdaki şekilde, $\{Q\}$ 'nun bağımsız elemanlarının sayısındaki azalmayı özetleyebiliriz.

Q_{ij} : 9 eleman

- ↓ $\{Q\}$ en fazla 6 bağımsız eleman için simetriktir.
- ↓ $\{Q\}$ 'nun izi en fazla 5 bağımsız eleman için sıfır olur.
- ↓ $\{Q\}$ en fazla 2 bağımsız eleman için esas eksen olur.
- ↓ 1 bağımsız eleman için, simetrik yük dağılımı = Q olmaktadır.

Denklem (2.31a) tarafından tanımlanan dört-kutup tensör, yukarıdaki özellikleri sağlar. Dört-kutup potansiyel hesaplamaları için kullanılan bu tensör, genellikle denklem (2.29)'un direk uygulamasından daha uygundur.

Eğer x'_3 -ekseni, yük dağılımının simetrik ekseniyse ve $\vec{r}'$ vektörü tarafından tanımlanan noktadaki yük yoğunluğu $\rho(\vec{r}')$ ise yük yoğunluk dağılımının V hacmi üzerinden integrali

$$Q = \int_V \rho(\vec{r}') (3x'^2_3 - r'^2) dx'_1 dx'_2 dx'_3 \quad (2.39)$$

olur. Burada, yük dağılımı tamamen pozitifdir (atom çekirdeği için) ve yük dağılımı eğer x'_3 -ekseni boyunca olursa (eğer dağılım oval ise), $Q > 0$ olur. Fakat pozitif yük dağılımı az olduğunda, $Q < 0$ olur.

Örnek:

Çift-kutup momentlerinin daha iyi anlaşılması için Şekil 2.4'teki yük dağılımını dikkate alalım. Bu dağılım, aralarında $2l$ mesafe olan $p = 2q\delta$ momentlerine

sahip iki ayrı çift-kutup moment olarak (aralarında 2δ mesafe olan $p = 2ql$ momentlerine sahip iki çift-kutup gibi) dikkate alınır. Yüklere sırasıyla,

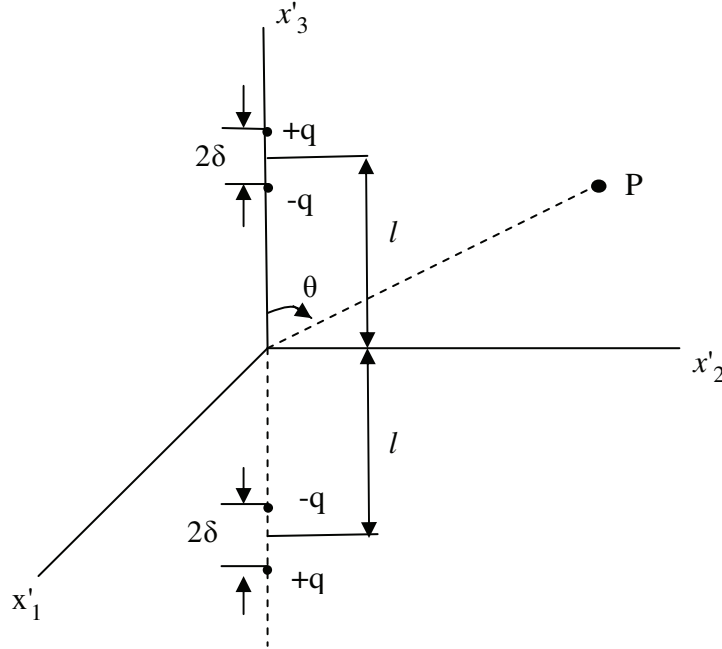
$$x'_3 = l + \delta \text{ da } +q$$

$$l - \delta \text{ da } -q$$

$$-l + \delta \text{ da } -q$$

$$-l - \delta \text{ da } +q$$

konumlarına sahip olsunlar.



Şekil 2.4. x'_3 eksenine boyunca yüklerin dağılımı.

Dikkat edilirse, tek-kutup ve çift-kutup momentlerin her ikisinin benzer şekilde sıfır oldukları görülür. Böylece dört-kutup terimi, potansiyele en düşük seviyede katkıda bulunur. Çünkü, yük dağılımı, x'_3 eksenine boyunca simetriktir. Bu yüzden yalnızca dört-kutup tensör elemanı olan Q_{33} ele alınır;

$$\begin{aligned}
Q = Q_{33} &= 2 \sum_{\alpha} q_{\alpha} x_{\alpha,3}^2 \\
&= 2(q(l+\delta)^2 - q(l-\delta)^2 - q(-l+\delta)^2 + q(-l-\delta)^2) \\
&= 16ql\delta = 8pl
\end{aligned} \tag{2.40}$$

şeklinde olur. Ayrıca,

$$Q_{11} = Q_{22} = -\frac{1}{2}Q_{33} = -4pl \tag{2.41}$$

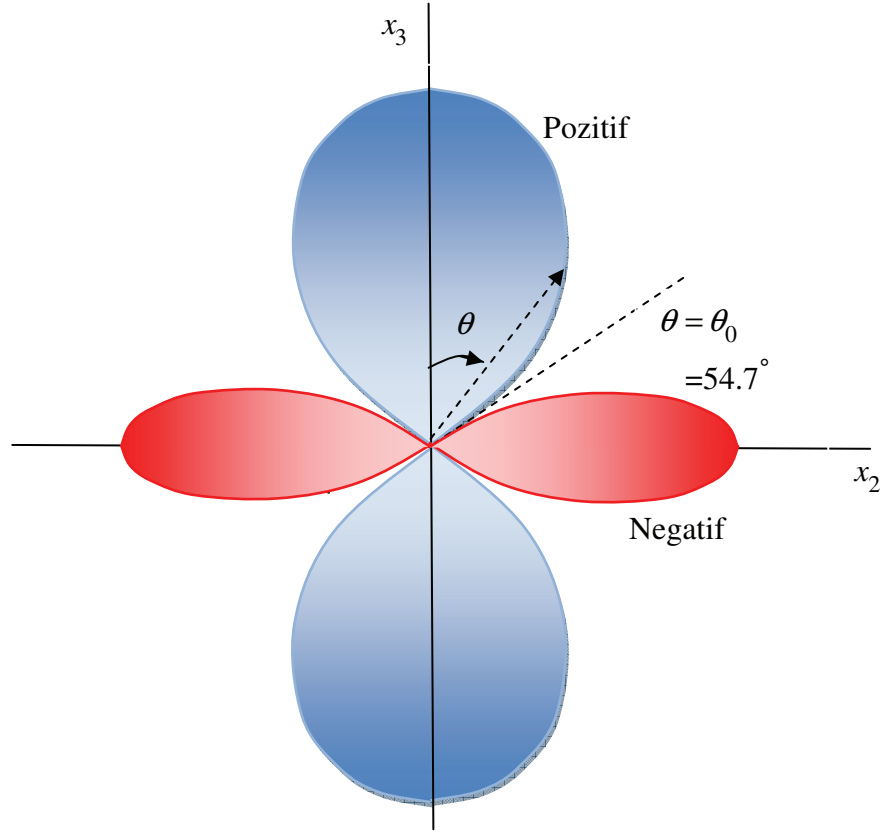
dir. Eğer, denklem (2.31a) kullanılırsa,

$$\begin{aligned}
\Phi^{(4)} &= \frac{1}{6} \sum_{i,j} Q_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{1}{r} \right) \\
&= \frac{1}{6} \sum_k Q_{kk} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \left(\frac{1}{r} \right) \\
&= 2pl \frac{1}{r^5} (-x_1^2 - x_2^2 + 2x_3^2) \\
&= 2pl \frac{(3x_3^2 - r^2)}{r^5}
\end{aligned} \tag{2.42}$$

biçiminde olur. $x_3 = r \cos \theta$ için, denklem (2.42) yeniden

$$\Phi^{(4)} = pl \frac{(3\cos^2\theta - 1)}{r^5} \tag{2.43}$$

olarak yazılabilir. θ kutupsal açısının bir fonksiyonu olarak bu potansiyel Şekil 2.5’de gösterilmektedir. Dikkat edilirse şekilde, potansiyelin negatif ve pozitif bölgeleri vardır. İki negatif yükün, x_2 eksenine iki pozitif yükten daha yakın olduğu görülür. Bundan dolayı, $\theta = 90^\circ$ ‘ye yakın kısımlarda potansiyel üzerinde negatif yüklerin etkisi daha fazladır ve bu bölgede potansiyel negatif olur. Potansiyel, $\theta = \cos^{-1}(1/\sqrt{3}) \cong 54.7^\circ$ değerinde sıfır olur.

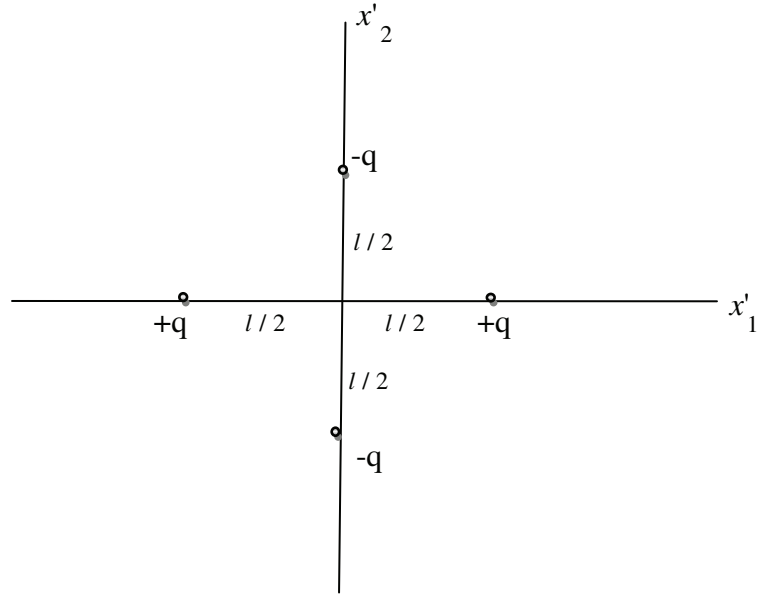


Şekil 2.5. $\theta = 54.7^\circ$ için dört-kutup potansiyelinin pozitif ve negatif bölgeleri.

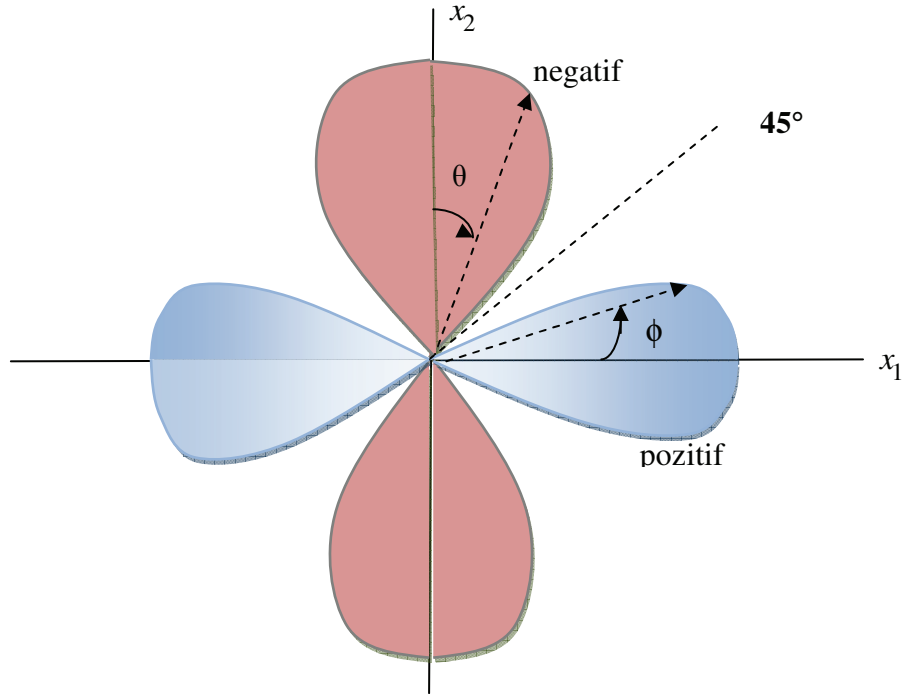
Eğer yük dağılımı bir kare dizi ise (Şekil 2.6'daki gibi), o zaman potansiyel φ azimut açısından bağımsız olamaz. Bu durumda dört-kutup potansiyel,

$$\Phi^{(4)} = \frac{3}{4}ql^2 \frac{\sin^2\theta \cos 2\varphi}{r^3} \quad (2.44)$$

olur. Burada pozitif x_1 -ekseni boyunca $\varphi = 0$ dır. $x_2 - x_3$ düzlemindeki ($\theta = \pi/2$) potansiyel Şekil 2.7'de gösterilmiştir. Yine buradaki potansiyelin hem pozitif hem negatif kısımlarının olduğu görülmektedir.



Şekil 2.6. Dört-kutup karesel yük dağılımı.

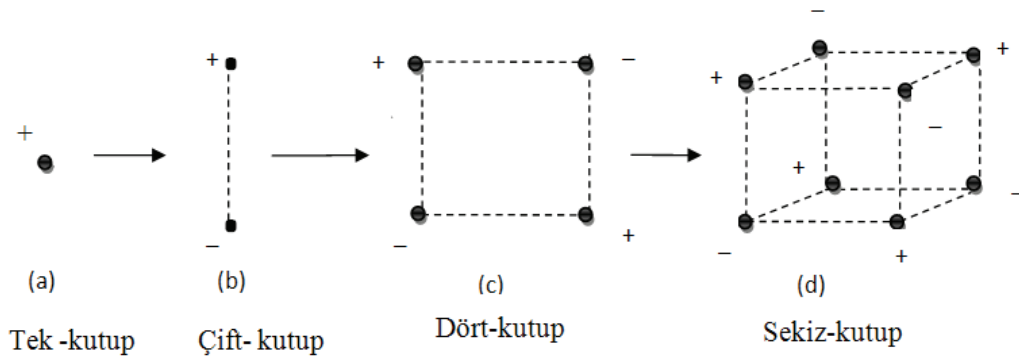


Şekil 2.7. $\theta = \pi / 2$ için dört-kutup potansiyelinin pozitif ve negatif bölgeleri

2.1.5. Elektrik Çok Kutuplular

Keyfi bir yük dağılımının potansiyeli, çok-kutup açılımı cinsinden her zaman ifade edilebilir. Genellikle, daha yüksek seviyedeki terimlerde $1/r$ ifadesindeki gibi mesafenin azalmasıyla artma olmasına rağmen, bir açılımın tüm terimleri mevcut olacaktır. Bundan dolayı, r 'nin boyutları yük dağılımının boyutlarıyla karşılaştırılırsa, r değerleri için açılım daha hızlı yakınsayacaktır. Ayrıca, yük dağılımının belirli bir geometrisinden dolayı, bazı çok-kutup terimleri sıfır olabilir. Böylece, eğer eşit büyüklükte negatif ve pozitif yükler varsa, tek-kutup terim sıfır olur ve eğer dağılım, ters yönlü eşdeğer çift-kutuplardan oluşuyorsa ek olarak çift-kutup terim sıfır olur (Şekil 2.4 ve Şekil 2.6). Böyle durumlarda, çoğunlukla en düşük-seviyedeki terim sıfırdan farklıysa ideal çok-kutup olarak adlandırılır. Böylece Şekil 2.1 bir ideal çift-kutubu, Şekil 2.6 ise bir ideal dört-kutubu gösterir. Ancak, unutulmamalıdır ki, bu gibi durumlarda çift-kutup veya dört-kutup terim yalnızca bir açılımdaki temel durumları temsil etmektedir. Genelde, daha yüksek seviyelerdeki terimler sistemi temsil eder.

Belirli bir düzende verilen bir ideal çok-kutupun en basit örneği, ters işaretlere sahip olan alt seviyedeki iki çok-kutupların küçük yer değiştirmeye oluşturulabilir. Böylece, ideal bir çift-kutup, $+q$ ve $-q$ yükleri bir l mesafesiyle ayrılarak oluşturulur. Bir ideal dört-kutup ise bir l mesafesiyle ayrılan $\vec{p}$ ve $-\vec{p}$ çift-kutup momentlerine sahip iki çift-kutuptan oluşur. Şekil 2.8'de çok-kutupların sistemleri gösterilmiştir.



Şekil 2.8. Elektrik tek-, çift-, dört- ve sekiz- kutup.

Çok-kutup moment hesaplamaları, genellikle seçilen başlangıç noktasına bağlıdır. Örneğin tek bir yükün potansiyeli q/R 'dir. R , yük ile etki alanı noktası arasındaki uzaklıktır. Eğer, çok-kutup açılımındaki yükler başlangıç noktasında toplanırsa, o zaman açılımındaki hiçbir terim sıfır olmayacaktır (denklem (2.18) ve Şekil 2.3'de gösterilmiştir). Diğer taraftan, eğer toplam yük dağılımı sıfırsa çift-kutup moment seçilen başlangıç noktasından bağımsız olacaktır. Genel olarak, dört-kutup ve daha yüksek seviyedeki momentler seçilen eksenin yönüne bağlıdır. Ama bu temel eksenler her zaman köşegenleştirilmiş bir simetrik tensör olarak bulunabilir.

2.2. Kuantum Mekaniğinde Elektrik Çok-Kutup Moment İntegralleri

Klasik mekanikte zaman, durum, hız, kütle, doğrusal momentum, açısal momentum, enerji v.b. gibi değişkenlere “dinamik değişkenler” denir. Ayrıca kuantum mekaniğinde klasik mekanikte görülmeyen spin açısal momentum ve özdeş taneciklerin yer değiştirmesiyle ilgili simetri özellikleri gibi bazı dinamik değişkenler de vardır. Sistemin bir özelliği olarak deneyle gözlenebilen dinamik değişkenlere “gözlenebilir” denir (Pamuk, 1979).

Klasik mekanikte her gözlenebilire kuantum mekaniğinde bir işlemci karşılık gelir. Bu işlemciler matris mekaniği kullanılarak birer matris biçiminde yazılabilir. Bir sistem iyi davranışlı Ψ dalga fonksiyonu ile belirlenebiliyorsa, o zaman $\hat{M}$ işlemcisine karşılık gelen gözlenebilirin ortalama değeri veya bu işlemcinin beklenen değeri,

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= \int \Psi^* \hat{M} \Psi d^3r \\ &= \langle \Psi | \hat{M} | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (2.45)$$

olarak ifade edilir. Burada $\hat{M}$, bu gözlenebilire karşılık gelen işlemcidir.

Denklem (2.45)'te dalga fonksiyonu yerine STO'lar alınırsa, elektrik çok-kutup moment integralleri

$$M_{nlm, \nu\sigma, n'l'm'}(\alpha, \beta; \vec{R}_{0b}, \vec{R}_{ab}) = \int \chi_{nlm}^*(\alpha, \vec{r}_a) \hat{M}_{\nu\sigma}(\vec{r}_0) \chi_{n'l'm'}(\beta, \vec{r}_b) d^3r \quad (2.46)$$

biçiminde ifade edilir. Buradaki $\hat{M}_{v\sigma}(\vec{r}_0)$ tek elektron işlemcisidir. Küresel koordinatlarda, 2^v çok-kutup elektrik moment işlemcisinin σ bileşeni

$$\hat{M}_{v\sigma}(\vec{r}_0) = \left(\frac{4\pi}{2v+1}\right)^{1/2} r_0^v Y_{v\sigma}(\theta_0, \varphi) \quad (2.47)$$

olarak verilmektedir (Beiser, 1967). Bu ifadede, $\hat{M}_{v\sigma}$ vektörel bir işlemciyi, $Y_{v\sigma}(\theta_0, \varphi)$ küresel harmonikleri, v kutubu ve σ ise x, y, z gibi bir bileşeni temsil etmektedir. Ayrıca $\vec{r}_0$, elektronun seçilen başlangıç noktasına olan uzaklığını temsil eden vektör, $\vec{R}_{0b} = \vec{r}_0 - \vec{r}_b$ ve $\vec{R}_{ab} = \vec{r}_a - \vec{r}_b$ olmaktadır.

Kuantum mekaniğinde elektrik çok kutup moment integralleri denklem (2.46) ile verilir ve bu integral tek-elektron iki-merkezli bir integraldir. Burada, $\chi_{n/m}^*(\alpha, \vec{r}_a)$ ve $\chi_{n'/m'}(\beta, \vec{r}_b)$, sırasıyla, a ve b merkezlerinde yerleştirilmiş STO'ları; α ve β perdeleme sabitlerini göstermektedir.

3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1. Kartezyen Koordinatlar ve Düzenli Katı Harmonikler

Reel ve kompleks küresel harmonikler için STO,

$$\chi_{n,l,m} = \left[\frac{(2\zeta)^{2n+1}}{(2n)!} \right]^{1/2} r^{n-1} e^{-\zeta r} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3.1)$$

olarak verilir (Slater, 1930). Denklem (3.1)'deki $Y_l^m(\theta, \phi)$ normalize olmuş küresel harmonikler, karakök katsayısı ise radyal bileşen için normalizasyon sabitidir. Burada ζ , Slater kuralları ile belirlenen perdeleme sabitidir.

Negatif olmayan m değerleri için küresel harmonikler,

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad m \geq 0 \quad (3.2)$$

biçiminde verilirken, negatif m değerleri için

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m Y_l^{-m*}(\theta, \phi) \quad m < 0 \quad (3.3)$$

biçiminde verilmektedir (Bransden ve Joachain, 1989). Denklem (3.2)'deki $P_l^m(\cos \theta)$ bağlı Legendre fonksiyonlarıdır.

Bağlı Legendre fonksiyonları için Rodrigues formülü

$$P_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x) \quad (3.4)$$

biçiminde ifade edilir. Buradaki $P_l(x)$ Legendre fonksiyonlarıdır ve

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l \quad (3.5)$$

şeklinde (Özbek ve Durukanoğlu, 2010).

Kuantum mekaniğinde önemli rol oynayan küresel harmonikler, orbital açısal momentum işlemcisinin özfonksiyonlarıdır. Ayrıca, küresel harmonikler orbital açısal momentumu l olan ve l 'ye karşılık gelen m değerleriyle küresel simetrik alanda hareket eden parçacıkların açısal dağılımlarını tanımlamaktadır (Vashalovich ve ark., 1988).

$x = \cos \theta$ dönüşümü kullanılarak normalize olmuş bağlı Legendre fonksiyonları

$$P_l^{|m|}(x) = \frac{1}{2^l l!} \left[\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!} \right]^{1/2} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l \quad (3.6)$$

şeklinde ifade edilir (Gradshteyn ve Ryzhik, 2000).

Normalize olmuş bağlı Legendre fonksiyonları

$$P_l^m(x) = (-1)^{l-m} P_l^m(-x) \quad (3.7)$$

olur ve burada $(-1)^{l-m}$ bu fonksiyonların paritesidir. Aynı zamanda normalize olmuş Legendre fonksiyonları,

$$\frac{2}{2l+1} \sum_{m=0}^l \frac{2}{l+\delta_{m,0}} |P_l^m(x)|^2 = 1 \quad (3.8)$$

normalizasyon şartını sağlamaktadır (Guseinov ve ark., 1997). Bağlı Legendre polinomları için diklik bağıntısı,

$$\int_0^\pi P_p^m(\cos \theta) P_q^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2q+1} \frac{(q+m)!}{(q-m)!} \delta_{pq} \quad (3.9)$$

biçimindedir. Küresel harmonikler için diklik bağıntısı ise,

$$\int_{\Omega} \left[Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) \right]^* Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{l_1, l_2} \delta_{m_1, m_2} \quad (3.10)$$

ile tanımlanır (Arfken ve Weber, 2001).

Denklem (3.1) yeniden,

$$\chi_{n,l,m} = \left[\frac{(2\zeta)^{2n+1}}{(2n)!} \right]^{1/2} r^{n-l-1} e^{-\zeta r} \left[r^l Y_l^m(\theta, \phi) \right] \quad (3.11)$$

biçiminde yazılabilir. Denklem (3.11)'deki ikinci parantezdeki nicelikler düzenli katı harmonikler olarak adlandırılır ve

$$l_m = \left[r^l Y_l^m(\theta, \phi) \right] \quad (3.12)$$

olarak ifade edilir. Burada $l=0, 1, 2, 3, \dots$ 'e karşılık gelen durumların spektroskopik gösterimi için $s, p, d, f, \dots$ harfleri kullanılır. Normalize olmuş gerçek küresel harmoniklerin toplanmasından ya da farklarından orbitaller elde edilir. l ve m değerlerine göre hesaplanan $Y_l^m \pm Y_l^{-m}$ değeri gerçek bileşenleri karşılayarak düzenli katı harmonikler oluşturulur (Zheng ve Zerner, 1993).

Düzenli katı harmonikler, i, j ve k tamsayılar olmak üzere, x, y ve z 'nin kuvvetlerinin bir ürünü olarak

$$(i, j, k) = x^i y^j z^k \quad (3.13)$$

şeklinde ifadeler içeren kartezyen koordinatlarda tanımlanır. Burada i, j ve k sırasıyla kartezyen koordinatlardaki x, y ve z 'lerin sayısını göstermektedir. Bu gösterim kullanılarak normalize olmuş düzenli katı harmonikler yazılabilmektedir (Zheng ve Zerner, 1993).

Biz bu çalışmada düzenli katı harmonikleri g orbitallerine kadar hesapladık ve kaynaktaki (Zheng ve Zerner, 1993) sonuçlarla uyumlu olduğunu gördük. Örneğin $l=2$ için $m= -2, -1, 0, 1, 2$ değerlerini alacağından (3.2) ve (3.3) denklemlerini kullanarak öncelikle oluşabilecek küresel harmonikleri elde ettik. (3.4) ve (3.5) denklemlerini kullanarak ve $x = \cos \theta$ dönüşümünden faydalananarak bağlı Legendre fonksiyonları hesaplanmaktadır. Küresel harmoniklerin küresel koordinatlardaki değerleri temel kitaplarda bulunmaktadır. Bu ifadelere göre; küresel harmonikler Çizelge (3.1)'de verilmektedir.

Çizelge 3.1. $l=2$ için küresel harmonikler

l	m	$Y_l^m(\theta, \phi)$
2	0	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$
	1	$-\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta e^{i\phi}$
	-1	$\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta e^{-i\phi}$
	2	$-\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta e^{2i\phi}$
	-2	$\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta e^{-2i\phi}$

$l=2$ ve $m=2$ durumunda küresel harmoniklerin toplanması veya farklarından iki düzenli katı harmonik elde ederiz. Denklem (3.12)'yi kullanarak $l_2 + l_{-2}$ ve $l_2 - l_{-2}$ durumlarının hangi düzenli katı harmoniği gösterdiğini bulabiliriz.

$l=2$ için $l_2 + l_{-2}$ durumu ile $l_2 - l_{-2}$ durumununun spektroskopik gösterimi d' dir. Fakat bu iki durumdan farklı sonuçlar elde edilir ve bu da bize yük dağılımlarının farklı olduğunu göstermektedir. Bu nedenle bu iki durum aynı l değerinde olduğundan aynı spektroskopik gösterime sahip olsa da yüklerin bulunma olasılığının farklı olduğu durumları ifade etmek için orbital gösterimini yüklerin dağılımını kullanarak alt indisle ifade ederek yazarız. Örneğin $l_2 + l_{-2}$ durumunu ele alalım. Burada normalize olmuş küresel harmonikleri alırız.

$$l_2 + l_{-2} = r^2 \frac{1}{\sqrt{2}} \left[Y_2^2(\theta, \phi) + Y_2^{-2}(\theta, \phi) \right]$$

$$\begin{aligned}
d &= r^2 \left(\frac{15}{64\pi} \right)^{1/2} \sin^2 \theta (e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}) \\
&= 2r^2 \left(\frac{15}{64\pi} \right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos(2\phi)
\end{aligned}$$

şeklindedir. Burada küresel koordinatları kartezyen koordinatlara çevirirsek aşağıdaki ifadeyi elde ederiz.

$$l_2 + l_{-2} = d = 2 \left(\frac{15}{64\pi} \right)^{1/2} (x^2 - y^2)$$

(a, b, c)=(x'in sayısı, y'nin sayısı, z'nin sayısı) biçimindedir (Zheng ve Zerner, 1993). kartezyen koordinatlar için ifade edilen gösterim biçimini kullanarak düzenli katı harmoniği

$$d_{x^2-y^2} = \left(\frac{15}{16\pi} \right)^{1/2} [(2, 0, 0) - (0, 2, 0)]$$

biçiminde elde ederiz. Bu şekilde diğer düzenli katı harmonikler de elde edilir. Bu işlemleri kolaylaştırmak için Ek-1'de Mathematica 7 programlama dilinden faydalanarak (3.2), (3.3), (3.6) ve (3.12) denklemlerini kullanarak düzenli katı harmonikleri küresel koordinatlarda bulan program verilmiştir. Bu programı kullandıktan sonra küresel koordinatları kartezyen koordinatlara çevirip Zheng ve Zerner'in (Zheng ve Zerner, 1993) kartezyen koordinatlar için ifade ettiği gösterimi kullanarak aşağıdaki düzenli katı harmonikler elde edilmektedir.

s harmonik:

$$s = \sqrt{1/(4\pi)}(0, 0, 0)$$

p harmonikler:

$$p_x = \sqrt{3/(4\pi)}(1, 0, 0)$$

$$p_y = \sqrt{3/(4\pi)}(0, 1, 0)$$

$$p_z = \sqrt{3/(4\pi)}(0, 0, 1)$$

d harmonikler:

$$d_{z^2} = \sqrt{5/(16\pi)}[2(0,0,2) - (2,0,0) - (0,2,0)]$$

$$d_{x^2-y^2} = \sqrt{15/(16\pi)}[(2,0,0) - (0,2,0)]$$

$$d_{xy} = \sqrt{15/(4\pi)}(1,1,0)$$

$$d_{xz} = \sqrt{15/(4\pi)}(1,0,1)$$

$$d_{yz} = \sqrt{15/(4\pi)}(0,1,1)$$

f harmonikler:

$$f_{z^3} = \sqrt{63/(16\pi)}\left[\frac{2}{3}(0,0,3) - (2,0,1) - (0,2,1)\right]$$

$$f_{xz^2} = \sqrt{21/(32\pi)}[4(1,0,2) - (3,0,0) - (1,2,0)]$$

$$f_{yz^2} = \sqrt{21/(32\pi)}[4(0,1,2) - (2,1,0) - (0,3,0)]$$

$$f_{z(x^2-y^2)} = \sqrt{105/(16\pi)}[(2,0,1) - (0,2,1)]$$

$$f_{xyz} = \sqrt{105/(4\pi)}(1,1,1)$$

$$f_{x^3-3xy^2} = \sqrt{35/(32\pi)}[(3,0,0) - 3(1,2,0)]$$

$$f_{3x^2y-y^3} = \sqrt{35/(32\pi)}[3(2,1,0) - (0,3,0)]$$

g harmonikler:

$$g_{z^4} = (9/(16\sqrt{\pi}))\left[(4,0,0) + 2(2,2,0) + (0,4,0) - 8(2,0,2) - 8(0,2,2) + \frac{8}{3}(0,0,4)\right]$$

$$g_{xz^3} = \frac{9}{8}\sqrt{10/\pi}\left[\frac{4}{3}(1,0,3) - (3,0,1) - (1,2,1)\right]$$

$$g_{yz^3} = \frac{9}{8} \sqrt{10/\pi} \left[\frac{4}{3} (0,1,3) - (2,1,1) - (0,3,1) \right]$$

$$g_{z^2(x^2-y^2)} = \frac{3}{8} \sqrt{5/\pi} [-(4,0,0) + (0,4,0) + 6(2,0,2) - 6(0,2,2)]$$

$$g_{xyz^2} = \frac{3}{4} \sqrt{5/\pi} [6(1,1,2) - (3,1,0) - (1,3,0)]$$

$$g_{z(x^3-3xy^2)} = \frac{3}{8} \sqrt{70/\pi} [(3,0,1) - 3(1,2,1)]$$

$$g_{z(3x^2y-y^3)} = \frac{3}{8} \sqrt{70/\pi} [3(2,1,1) - (0,3,1)]$$

$$g_{x^2y^2} = \frac{3}{16} \sqrt{35/\pi} [(4,0,0) - 6(2,2,0) + (0,4,0)]$$

$$g_{xy(x^2-y^2)} = \frac{3}{4} \sqrt{35/\pi} [(3,1,0) - (1,3,0)]$$

Yukarıdaki düzenli katı harmonikler için çağırma formülünü,

$$f_l^m = l(l+1) + m + 1$$

olarak aldık. Çağırma formülündeki l ve m değerlerine göre hangi düzenli katı harmoniği karşılayacağı aşağıdaki Çizelge 3.2’de gösterilmiştir.

Çizelge 3.2. Çağırma formülüne karşılık gelen düzenli katı harmonikler

l	m	$f_l^m = l(l+1) + m + 1$	Düzenli Katı Harmonikler
0	0	1	s
1	-1	2	p_x

1	0	3	p_z
1	1	4	p_y
2	-2	5	d_{xy}
2	-1	6	d_{xz}
2	0	7	d_{z^2}
2	1	8	d_{yz}
2	2	9	$d_{x^2-y^2}$
3	-3	10	$f_{x^3-3xy^2}$
3	-2	11	f_{xyz}
3	-1	12	f_{xz^2}
3	0	13	f_{z^3}
3	1	14	f_{yz^2}
3	2	15	$f_{z(x^2-y^2)}$
3	3	16	$f_{3x^2y-y^3}$

4	-4	17	$g_{xy(x^2-y^2)}$
4	-3	18	$g_{z(x^3-3xy^2)}$
4	-2	19	g_{xyz^2}
4	-1	20	g_{xz^3}
4	0	21	g_{z^4}
4	1	22	g_{yz^3}
4	2	23	$g_{z^2(x^2-y^2)}$
4	3	24	$g_{z(3x^2y-y^3)}$
4	4	25	$g_{x^2y^2}$

3.2. Çok-Kutup Moment İşlemcisi

Çok-kutup moment işlemcileri denklem (2.47) ile daha önceden verilmişti. Çok-kutup moment işlemcileri için alternatif bir tanımlama da aşağıdaki gibi tensörlerle ifade edilmektedir (Buckingham, 1959; Buckingham, 1967; Özdoğan, 2000). Aşağıdaki tanımlamalarda kullanılan α, β, γ ve η alt indisleri 1, 2 veya 3 değerlerini alır. Bu durumda $x_1 = x$, $x_2 = y$ ve $x_3 = z$ 'ye karşılık gelmektedir. Bu alt indisler kartezyen koordinat sistemindeki çok-kutup moment işlemcisinin farklı bileşenlerini göstermektedir. Tensörün indislerinin sayısı ise tensörün rankını verir.

Tek-kutup

$$q=1 \quad (3.14)$$

Cift-kutup

$$\mu_\alpha = x_\alpha \quad (3.15)$$

Dört-kutup

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(3x_\alpha x_\beta - r^2 \delta_{\alpha\beta}) \quad (3.16)$$

Sekiz-kutup

$$\Omega_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{2}(5x_\alpha x_\beta x_\gamma - x_\alpha r^2 \delta_{\beta\gamma} - x_\beta r^2 \delta_{\gamma\alpha} - x_\gamma r^2 \delta_{\alpha\beta}) \quad (3.17)$$

Onaltı-kutup

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta\gamma\eta} = \frac{1}{8} [& 35x_\alpha x_\beta x_\gamma x_\eta - 5r^2 (x_\alpha x_\beta \delta_{\gamma\eta} + x_\beta x_\gamma \delta_{\alpha\eta} \\ & + x_\gamma x_\eta \delta_{\alpha\beta} + x_\eta x_\alpha \delta_{\beta\gamma} + x_\alpha x_\gamma \delta_{\beta\eta} + x_\beta x_\eta \delta_{\alpha\gamma}) \\ & + r^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\eta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\eta} + \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\gamma})] \end{aligned} \quad (3.18)$$

Üç boyutlu uzayda, l ranklı kartezyen elektrik çok-kutup moment tensörünün 3^l tane bileşeni vardır. İndislerinin yer değişimine göre simetrik olan kartezyen elektrik çok-kutup moment tensörlerinin 3^l tane bileşeninden $(l+1)(l+2)/2$ tanesi farklıdır. Örneğin, dört-kutup moment işlemcisinin 6 tane farklı bileşeni vardır. Bunlardan Q_{xx} bileşenini,

$$Q_{xx} = \frac{1}{2}(3xx - r^2 \delta_{xx})$$

olarak yazabiliriz. Burada,

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad (3.19)$$

dir. Kronecker Delta sembolü de,

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (3.20)$$

olarak tanımlanır (Bransden ve Joachain, 1989). Böylece Q_{xx} bileşeni,

$$Q_{xx} = \frac{1}{2}(2x^2 - y^2 - z^2)$$

olur. Daha sonra, kartezyen koordinatlarda bulunan dört-kutup moment işlemcisinin Q_{xx} bileşenini kaynaktaki (Zheng ve Zerner, 1993) $x^i y^j z^k = (i, j, k)$ gösterimden faydalanarak,

$$Q_{xx} = \frac{1}{2}[2(2, 0, 0) - (0, 2, 0) - (0, 0, 2)]$$

olarak yazabiliriz.

Ek-2’de dört-kutup, sekiz-kutup ve onaltı-kutup moment işlemcilerini hesaplayan Mathematica 7 programı verilmiştir. Bu programda (3.16), (3.17) ve (3.18) denklemlerindeki tanımlar ile (3.19) ve (3.20) denklemleri kullanılmıştır. Böylece çeşitli momentlerin tensör işlemcilerini bu programı kullanarak kaynaktaki (Zheng ve Zerner, 1993) sonuçlarla uyumlu bir şekilde aşağıdaki gibi elde ederiz.

Çift-kutup

$$\mu_x = (1, 0, 0)$$

$$\mu_y = (0, 1, 0)$$

$$\mu_z = (0, 0, 1)$$

Dört-kutup

$$Q_{xx} = \frac{1}{2}[2(2, 0, 0) - (0, 2, 0) - (0, 0, 2)]$$

$$Q_{yy} = \frac{1}{2}[2(0, 2, 0) - (2, 0, 0) - (0, 0, 2)]$$

$$Q_{zz} = \frac{1}{2}[2(0, 0, 2) - (2, 0, 0) - (0, 2, 0)]$$

$$Q_{xy} = \frac{3}{2}(1, 1, 0)$$

$$Q_{xz} = \frac{3}{2}(1, 0, 1)$$

$$Q_{yz} = \frac{3}{2}(0, 1, 1)$$

Sekiz-kutup

$$\Omega_{xxx} = \frac{1}{2}[2(3, 0, 0) - 3(1, 2, 0) - 3(1, 0, 2)]$$

$$\Omega_{yyy} = \frac{1}{2}[2(0, 3, 0) - 3(2, 1, 0) - 3(0, 1, 2)]$$

$$\Omega_{zzz} = \frac{1}{2}[2(0, 0, 3) - 3(2, 0, 1) - 3(0, 2, 1)]$$

$$\Omega_{xxy} = \frac{1}{2}[4(2, 1, 0) - (0, 3, 0) - (0, 1, 2)]$$

$$\Omega_{xxz} = \frac{1}{2}[4(2, 0, 1) - (0, 2, 1) - (0, 0, 3)]$$

$$\Omega_{xyy} = \frac{1}{2}[4(1, 2, 0) - (3, 0, 0) - (1, 0, 2)]$$

$$\Omega_{xyz} = \frac{5}{2}(1, 1, 1)$$

$$\Omega_{xzz} = \frac{1}{2}[4(1, 0, 2) - (3, 0, 0) - (1, 2, 0)]$$

$$\Omega_{yyz} = \frac{1}{2}[4(0, 2, 1) - (2, 0, 1) - (0, 0, 3)]$$

$$\Omega_{yzz} = \frac{1}{2}[4(0, 1, 2) - (2, 1, 0) - (0, 3, 0)]$$

Onaltı-kutup

$$\Gamma_{xxx} = (4, 0, 0) - 3[(2, 2, 0) + (2, 0, 2)] + \frac{3}{8}[(0, 0, 4) + (0, 4, 0)] + \frac{3}{4}(0, 2, 2)$$

$$\Gamma_{xxy} = \frac{5}{2}(3, 1, 0) - \frac{15}{8}[(1, 3, 0) + (1, 1, 2)]$$

$$\Gamma_{xxz} = \frac{5}{2}(3, 0, 1) - \frac{15}{8}[(1, 2, 1) + (1, 0, 3)]$$

$$\Gamma_{xyy} = \frac{3}{8}[9(2, 2, 0) - (2, 0, 2) - (0, 2, 2)] - \frac{1}{2}[(4, 0, 0) + (0, 4, 0)] + \frac{1}{8}(0, 0, 4)$$

$$\Gamma_{xyz} = \frac{30}{8}(2, 1, 1) - \frac{5}{8}[(0, 1, 3) + (0, 3, 1)]$$

$$\Gamma_{xzz} = \frac{3}{8}[9(2, 0, 2) - (2, 2, 0) - (0, 2, 2)] - \frac{1}{2}[(0, 0, 4) + (4, 0, 0)] + \frac{1}{8}(0, 4, 0)$$

$$\Gamma_{yyy} = \frac{5}{2}(1, 3, 0) - \frac{15}{8}[(1, 1, 2) + (3, 1, 0)]$$

$$\Gamma_{yyz} = \frac{15}{4}(1, 2, 1) - \frac{5}{8}[(1, 0, 3) + (3, 0, 1)]$$

$$\Gamma_{yzz} = \frac{15}{4}(1, 1, 2) - \frac{5}{8}[(1, 3, 0) + (3, 1, 0)]$$

$$\Gamma_{zzz} = \frac{5}{2}(1, 0, 3) - \frac{15}{8}[(1, 2, 1) + (3, 0, 1)]$$

$$\Gamma_{yyy} = (0, 4, 0) + \frac{3}{8}[(0, 0, 4) + (4, 0, 0)] - 3[(0, 2, 2) + (2, 2, 0)] + \frac{3}{4}(2, 0, 2)$$

$$\Gamma_{yyyz} = \frac{5}{2}(0,3,1) - \frac{15}{8}[(0,1,3) + (2,1,1)]$$

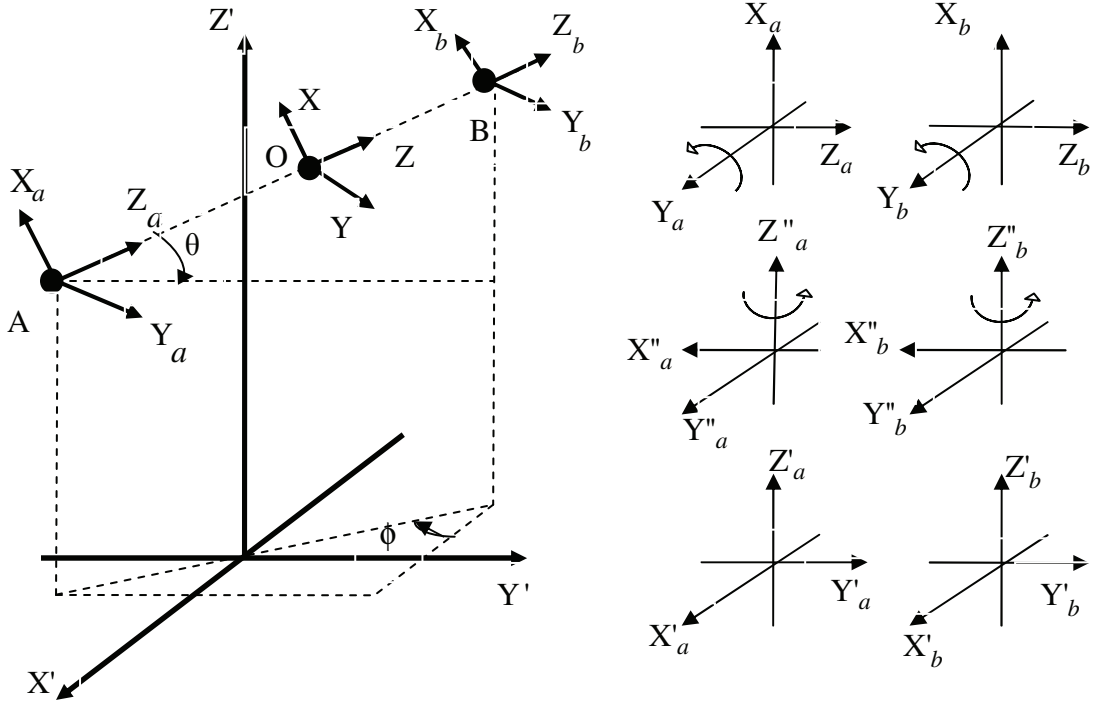
$$\Gamma_{yyzz} = \frac{3}{8}[9(0,2,2) - (2,0,2) - (2,2,0)] - \frac{1}{2}[(0,0,4) + (0,4,0)] + \frac{1}{8}(4,0,0)$$

$$\Gamma_{yzzz} = \frac{5}{2}(0,1,3) - \frac{15}{8}[(0,3,1) + (2,1,1)]$$

$$\Gamma_{zzzz} = (0,0,4) + \frac{3}{4}(2,2,0) + \frac{3}{8}[(0,4,0) + (4,0,0)] - 3[(2,0,2) + (0,2,2)]$$

3.3. Koordinat Sistemleri ve Dönme Matrisi

STO baz fonksiyonları, Şekil 3.1’de A, B ve O olarak belirtilen atomların çekirdeklerindeki merkezlerde bulunur. Çok-kutup moment işlemcisinin merkezi O olarak belirtilir. Şekil 3.1’de a , b ve o alt indislerine sahip vektör bileşenler ise A, B ve O merkezlerinin kartezyen koordinatlardaki bileşenleridir. A ve B merkezlerini iki ayrı STO’lar ile, O merkezini de çok-kutup moment işlemsi ile ifade edersek karşımıza iki-merkez integraller çıkmaktadır. Böyle sistemler, sınırları belli bir sistem üzerinden değerlendirilir. Şekil 3.1’de görüldüğü gibi belli bir Z eksenini, Z_a ve Z_b eksenlerine sahip iki merkezi tanımlayan A ve B merkezleri arasındadır. Burada, (X_a, Y_a, Z_a) kartezyen koordinat sisteminin merkezinde A, (X_b, Y_b, Z_b) merkezinde ise B atomunun çekirdeği bulunmaktadır. Elektronun A çekirdeğine olan uzaklığı r_a , B çekirdeğine olan uzaklığı ise r_b dir. A ile B çekirdekleri arasındaki uzaklık ise R dir. Bu sistemde X , X_a , X_b ve Y , Y_a , Y_b eksenleri de paralel eksenlerdir. Şekil 3.1’de eksenleri X , Y , Z olan koordinat sistemi, A ve B merkezleri arasında merkezleşmiş genel koordinat sistemidir. Z_a ve Z_b eksenleri ise ya aynı ekseni göstermekte ya da aynı yön doğrultusundadır (Zheng ve Zerner, 1993).



Şekil 3.1. Küresel koordinatlardan eliptik koordinatlara geçiş için çizilen koordinat sistemi ve koordinatların döndürülmesindeki durumlar.

(X, Y, Z) koordinat sistemine sahip kartezyen koordinat sisteminin başlangıç noktası, iki ayrı baz fonksiyonları merkezleri olan A ve B merkezlerinin ortasıdır. Belli bir bölgede yer alan böyle bir sistem, oval küresel veya A ve B üzerinde odaklanan eliptik koordinat sistemiyle tanımlanır. Eliptik koordinat sistemi kullanılarak a ve b merkezleri için aşağıdaki bağıntılar yazılabilir (Steinborn ve Ruedenberg, 1972; Zheng ve Zerner, 1993).

$$\begin{aligned}
r_a &= \frac{R}{2}(\xi + \eta) \\
r_b &= \frac{R}{2}(\xi - \eta) \\
x_a &= x_b = \frac{R}{2}\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\cos\phi \\
y_a &= y_b = \frac{R}{2}\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\sin\phi \\
z_a &= \frac{R}{2}(1 + \xi\eta) \\
z_b &= \frac{R}{2}(1 - \xi\eta) \\
d^3r &= \frac{R^3}{8}(\xi^2 - \eta^2)d\xi d\eta d\phi
\end{aligned} \tag{3.21}$$

Çok-kutup moment integralleri, gerekli olan dönüşümler yapıldıktan sonra belirli bir bölgedeki eliptik koordinat sisteminde veya moleküler yapı olarak tanımlanan (X', Y', Z') koordinatlarına sahip moleküler tabanlı koordinat sisteminde değerlendirilir. Bu dönüşümler için gerekli olan döndürme doğrudan kosinüse bağlıdır.

$$\begin{aligned}
\cos\theta &= \Delta z' / R \\
\cos\phi &= \Delta y' / \sqrt{\Delta x'^2 + \Delta y'^2}
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Dönme matrisi, farklı koordinatlara sahip durumların birbiriyle ilişkisini gösterir. Koordinat eksenlerinden birini sabit tutup diğer ikisini belli bir açıda döndürerek oluşacak koordinat sistemi ile döndürülmeden önceki koordinat sisteminin durumu arasındaki ilişkiyi dönme matrisi açıklar. Dönme matrisi $R(\theta, \phi)$ olarak gösterilir. Şekil 3.1'de koordinatların döndürüldüğündeki durumlar görülmektedir.

$R(\theta, \phi)$ dönme matrisi 2 adımda elde edilir:

i) z eksenini sabit tutup y eksenini döndürme: $R_1(\theta)$

$$\begin{pmatrix} X'' \\ Y'' \\ Z'' \end{pmatrix} = R_1(\theta) \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} \tag{3.23}$$

ii) x'' ve y'' eksenlerini sabit tutup z'' eksenini döndürme: $R_2(\phi)$

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \\ Z' \end{pmatrix} = R_2(\phi) \begin{pmatrix} X'' \\ Y'' \\ Z'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X'' \\ Y'' \\ Z'' \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Denklem (3.23) ve denklem (3.24) kullanılarak dönme matrisinin son şekli aşağıdaki gibi elde edilir.

$$R(\theta, \phi) = R_2(\phi)R_1(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi & -\sin\phi & \sin\theta\cos\phi \\ \cos\theta\sin\phi & \cos\phi & \sin\theta\sin\phi \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

3.4. Merkezlerin Taşınması

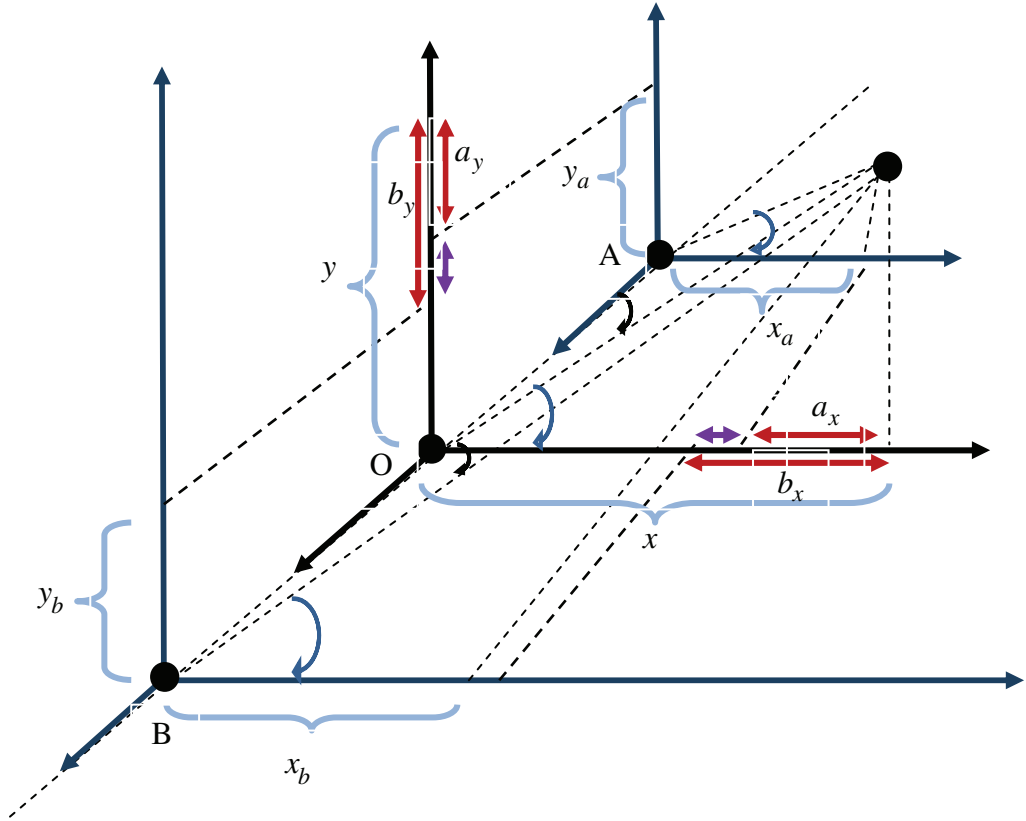
Çok-merkezli integrallerin hesaplanmasında “İntegrali moleküler sistemdeki hangi atomun merkezine göre almamız gerekir?” sorusunu düşündüğümüzde yapacağımız işlemleri kolaylaştırmak için sistemdeki tüm merkezlerin tek bir merkeze göre ifadeleri yazılmalıdır. Bunun için seçtiğimiz bir merkezin dışında kalan tüm merkezleri seçtiğimiz merkez cinsinden ifadelerini yazmalıyız. Çünkü integrali tek bir merkeze göre almak çok merkeze göre almaktan daha kolay olur. Bunun için Şekil 3.2’ye baktığımızda $[x, y, z]$ koordinatlarına sahip genel bir laboratuvar koordinat sistemi ve $A(a_x, a_y, a_z)$ ’da merkezli olan $[x_a, y_a, z_a]$ koordinatlarına sahip belirli bir merkez düşünülürse bu merkezin koordinatları,

$$\begin{aligned} x_a &= x - a_x \\ y_a &= y - a_y \\ z_a &= z - a_z \end{aligned} \quad (3.26)$$

olur (Zheng ve Zerner, 1993).

$B(b_x, b_y, b_z)$ 'de merkezli olan $[x_b, y_b, z_b]$ koordinatlarına sahip başka bir merkezi, $A(a_x, a_y, a_z)$ 'da merkezli olan $[x_a, y_a, z_a]$ koordinatlarındaki merkeze taşımak için, Şekil 3.2'yi kullanarak aşağıdaki gibi verilen ifadelerle yazabiliriz.

$$\begin{aligned} x_a &= x_b + (b_x - a_x) = x_b + \overline{ba_x} \\ y_a &= y_b + (b_y - a_y) = y_b + \overline{ba_y} \\ z_a &= z_b + (b_z - a_z) = z_b + \overline{ba_z} \end{aligned} \quad (3.27)$$



Şekil 3.2. A ve B merkezinin koordinatları.

Bu çalışmada A merkezini B merkezine taşırken daha önceki bölümlerde ifade edilen keyfi bir kartezyen tanımlaması kullanılmaktadır. Aşağıdaki denklem (3.28)'de A merkezinin B merkezine dönüşümünü görmekteyiz (Zheng ve Zerner, 1993).

$$\begin{aligned}
x_a^i y_a^j z_a^k &= \sum_{r=0}^i \binom{i}{r} \overline{ba_x}^{i-r} x_b^r \sum_{s=0}^j \binom{j}{s} \overline{ba_y}^{j-s} y_b^s \sum_{t=0}^k \binom{k}{t} \overline{ba_z}^{k-t} z_b^t \\
&= \sum_{(r,s,t)=(0,0,0)}^{(i,j,k)} C_{r,s,t}(\overline{ba_x}, \overline{ba_y}, \overline{ba_z}) x_b^r y_b^s z_b^t
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Denklem (3.28)'deki $C_{r,s,t}(\overline{ba_x}, \overline{ba_y}, \overline{ba_z})$ bir sabittir. Bu sabiti

$$C_{r,s,t}(\overline{ba_x}, \overline{ba_y}, \overline{ba_z}) = \sum_{r=0}^i \binom{i}{r} \overline{ba_x}^{i-r} \sum_{s=0}^j \binom{j}{s} \overline{ba_y}^{j-s} \sum_{t=0}^k \binom{k}{t} \overline{ba_z}^{k-t} \tag{3.29}$$

şeklinde ifade edebiliriz.

Yukarıdaki denklem (3.28)'deki taşımalar aşağıdaki denklem (3.30)'da ifade edilen bir çok kutup moment integralini sağlamaktadır (Zheng ve Zerner, 1993).

$$\begin{aligned}
\langle M_{l,m,n} \rangle &= \left\langle r_a^{n_a-l_a-l} x_a^i y_a^j z_a^k e^{-\zeta_a r_a} \left| x_o^l y_o^m z_o^n \right| r_b^{n_b-l_b-l} x_b^e y_b^f z_b^g e^{-\zeta_b r_b} \right\rangle \\
&= \sum_{(r,s,t)=(0,0,0)}^{(i,j,k)} C_{r,s,t}(\overline{ba_x}, \overline{ba_y}, \overline{ba_z}) \sum_{(u,v,w)=(0,0,0)}^{(l,m,n)} C_{u,v,w}(\overline{bo_x}, \overline{bo_y}, \overline{bo_z}) \\
&\quad \cdot \left\langle r_a^{n_a-l_a-l} e^{-\zeta_a r_a} \left| r_b^{n_b-l_b-l} x_b^{e+r+u} y_b^{f+s+v} z_b^{g+t+w} e^{-\zeta_b r_b} \right| \right\rangle
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Denklem (3.30)'da normalizasyon katsayısı sabit olduğu için dikkate alınmayarak o -merkezinde bulunan $M_{l,m,n}$ işlemcisinin beklenen değeri ifade edilmiştir.

Burada a -merkezinde bir STO, b -merkezinde başka bir STO bulunmaktadır. Böylece a , b ve o merkezlerine sahip iki-merkez integralin çözülmesi için denklem (3.28)'in kullanılmasıyla a ve o merkezleri b merkezine taşınarak çok kutup moment integrali daha kolay hesaplanabilecek şekile dönüştürülür. Denklem (3.30)'daki $C_{r,s,t}(\overline{ba_x}, \overline{ba_y}, \overline{ba_z})$ ve $C_{u,v,w}(\overline{bo_x}, \overline{bo_y}, \overline{bo_z})$ değerleri taşımalar yapıldıktan sonra gelen sabit ifadelerdir. Bu sabit ifadeler, r , s ve t ye bağlı üç toplam ile u , v ve w 'ye bağlı üç toplamı içermektedir.

4. BULGULAR ve TARTIŞMA

4.1. Düzenli Katı Harmoniklerin Taşınması İçin Master Formüller

Herhangi bir düzenli katı harmoniği başka bir merkeze taşımak için kullandığımız master formül

$$l_m^A = \sum_{\mu} g_{\mu}^a(\overline{ba}_x, \overline{ba}_y, \overline{ba}_z)(i, j, k)_{\mu}^B \quad (4.1)$$

biçimindedir (Zheng ve Zerner, 1993). Burada $g_{\mu}^a(\overline{ba}_x, \overline{ba}_y, \overline{ba}_z)$ sabit bir değerdir.

Denklem (4.1)'de $\mu=(0,0,0)$ 'dan başlayarak l_m^A 'nin içindeki (x 'in sayısı, y 'nin sayısı, z 'nin sayısı) sınırına kadar toplam alınmaktadır. A merkezinde bulunan düzenli katı harmonikleri B merkezine denklem (4.1)'i kullanarak taşıyabiliriz. Örneğin daha önceki bölümlerde elde ettiğimiz $d_{x^2-y^2}$ 'nin a -merkezinde olduğunu düşünürsek,

$$d_{x_a^2-y_a^2} = \sqrt{(15/16\pi)}[x_a^2 y_a^0 z_a^0 - x_a^0 y_a^2 z_a^0]$$

olur. Denklem (4.1)'den faydalanarak

$$x_a^2 y_a^0 z_a^0 = \overline{ba}_x^2(0,0,0) + 2\overline{ba}_x(1,0,0) + (2,0,0)$$

ile

$$x_a^0 y_a^2 z_a^0 = \overline{ba}_y^2(0,0,0) + 2\overline{ba}_y(0,1,0) + (0,2,0)$$

ifadelerini elde ederiz ve bunları kullanarak,

$$d_{x_a^2-y_a^2} = \sqrt{(15/16\pi)}[(\overline{ba}_x^2 - \overline{ba}_y^2)(0,0,0) + 2\overline{ba}_x(1,0,0) - 2\overline{ba}_y(0,1,0) + (2,0,0) - (0,2,0)]$$

olur. Böylece a -merkezindeki düzenli katı harmoniği b -merkezine taşımış oluruz.

Çizelge 4.1'de a -merkezinden b -merkezine taşıdığımız düzenli katı harmonikleri g orbitallerine kadar elde ettik ve kaynaktaki (Zheng ve Zerner, 1993) sonuçlarla uyumludur.

Çizelge 4.1. Taşıma yapıldıktan sonra düzenli katı harmonikler.

Spektroskopik Gösterim	Düzenli Katı Harmonikler
s	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
p_x	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}[\overline{ba}_x(0,0,0)+(1,0,0)]$
p_y	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}[\overline{ba}_y(0,0,0)+(0,1,0)]$
p_z	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}[\overline{ba}_z(0,0,0)+(0,0,1)]$
d_{z^2}	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}[(2\overline{ba}_z^2-\overline{ba}_x^2-\overline{ba}_y^2)(0,0,0)-2\overline{ba}_x(1,0,0)$ $-2\overline{ba}_y(0,1,0)+4\overline{ba}_z(0,0,1)-(2,0,0)$ $-(0,2,0)+2(0,0,2)]$
$d_{x^2-y^2}$	$\sqrt{\frac{15}{16\pi}}[(\overline{ba}_x^2-\overline{ba}_y^2)(0,0,0)-2\overline{ba}_y(0,1,0)$ $+2\overline{ba}_x(1,0,0)+(2,0,0)-(0,2,0)]$
d_{xy}	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}[\overline{ba}_x\overline{ba}_y(0,0,0)+\overline{ba}_y(1,0,0)+\overline{ba}_x(0,1,0)+(1,1,0)]$
d_{xz}	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}[\overline{ba}_x\overline{ba}_z(0,0,0)+\overline{ba}_z(1,0,0)+\overline{ba}_x(0,0,1)+(1,0,1)]$
d_{yz}	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}[\overline{ba}_y\overline{ba}_z(0,0,0)+\overline{ba}_z(0,1,0)+\overline{ba}_y(0,0,1)+(0,1,1)]$

f_{z^3}	$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{7}{16\pi}}[(\overline{ba_z^3} - 3\overline{ba_x^2}\overline{ba_z} - 3\overline{ba_y^2}\overline{ba_z})(0,0,0) \\ & - 6\overline{ba_x}\overline{ba_z}(1,0,0) - 6\overline{ba_y}\overline{ba_z}(0,1,0) \\ & + (6\overline{ba_z^2} - 3\overline{ba_x^2} - 3\overline{ba_y^2})(0,0,1) - 3\overline{ba_z}(2,0,0) \\ & - 6\overline{ba_x}(1,0,1) - 3\overline{ba_z}(0,2,0) - 6\overline{ba_y}(0,1,1) \\ & + 6\overline{ba_z}(0,0,2) - 3(2,0,1) - 3(0,2,1) + 2(0,0,3)] \end{aligned}$
f_{xz^2}	$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{21}{32\pi}}[(4\overline{ba_x}\overline{ba_z^2} - \overline{ba_x^3} - \overline{ba_x}\overline{ba_y^2})(0,0,0) \\ & + (4\overline{ba_z^2} - 3\overline{ba_x^2} - \overline{ba_y^2})(1,0,0) - 2\overline{ba_x}\overline{ba_y}(0,1,0) \\ & + 8\overline{ba_x}\overline{ba_z}(0,0,1) - 3\overline{ba_x}(2,0,0) - 2\overline{ba_y}(1,1,0) \\ & - \overline{ba_x}(0,2,0) + 8\overline{ba_z}(1,0,1) + 4\overline{ba_x}(0,0,2) \\ & - (3,0,0) - (1,2,0) + 4(1,0,2)] \end{aligned}$
f_{yz^2}	$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{21}{32\pi}}[(4\overline{ba_y}\overline{ba_z^2} - \overline{ba_x^2}\overline{ba_y} - \overline{ba_y^3})(0,0,0) \\ & - 2\overline{ba_x}\overline{ba_y}(1,0,0) + 8\overline{ba_y}\overline{ba_z}(0,0,1) \\ & + (4\overline{ba_z^2} - \overline{ba_x^2} - 3\overline{ba_y^2})(0,1,0) - \overline{ba_y}(2,0,0) \\ & - 2\overline{ba_x}(1,1,0) - 3\overline{ba_y}(0,2,0) + 8\overline{ba_z}(0,1,1) \\ & + 4\overline{ba_y}(0,0,2) - (2,1,0) - (0,3,0) + 4(0,1,2)] \end{aligned}$
$f_{z(x^2-y^2)}$	$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{105}{16\pi}}[\overline{ba_z}(\overline{ba_x^2} - \overline{ba_y^2})(0,0,0) + 2\overline{ba_x}\overline{ba_z}(1,0,0) \\ & - 2\overline{ba_y}\overline{ba_z}(0,1,0) + (\overline{ba_x^2} - \overline{ba_y^2})(0,0,1) + \overline{ba_z}(2,0,0) \\ & + 2\overline{ba_x}(1,0,1) - \overline{ba_x}(0,2,0) - 2\overline{ba_y}(0,1,1) \\ & + (2,0,1) - (0,2,1)] \end{aligned}$
f_{xyz}	$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{105}{4\pi}}[\overline{ba_x}\overline{ba_y}\overline{ba_z}(0,0,0) + \overline{ba_y}\overline{ba_z}(1,0,0) \\ & + \overline{ba_x}\overline{ba_z}(0,1,0) + \overline{ba_x}\overline{ba_y}(0,0,1) + \overline{ba_z}(1,1,0) \\ & + \overline{ba_y}(1,0,1) + \overline{ba_x}(0,1,1) + (1,1,1)] \end{aligned}$

$f_{x^3-3xy^2}$	$\sqrt{\frac{35}{32\pi}}[(\overline{ba_x^3}-\overline{ba_x}\overline{ba_y^2})(0,0,0)+3(\overline{ba_x^2}-\overline{ba_y^2})(1,0,0)$ $-6\overline{ba_x}\overline{ba_y}(0,1,0)+3\overline{ba_x}(2,0,0)-6\overline{ba_y}(1,1,0)$ $-3\overline{ba_x}(0,2,0)+(3,0,0)-3(1,2,0)]$
$f_{3x^2y-y^3}$	$\sqrt{\frac{35}{32\pi}}[(3\overline{ba_x^2}\overline{ba_y}-\overline{ba_y^3})(0,0,0)+6\overline{ba_x}\overline{ba_y}(1,0,0)$ $+3(\overline{ba_x^2}-\overline{ba_y^2})(0,1,0)+3\overline{ba_y}(2,0,0)+6\overline{ba_x}(1,1,0)$ $-3\overline{ba_y}(0,2,0)+3(2,1,0)-(0,3,0)]$
g_{z^4}	$(\frac{3}{16\sqrt{\pi}})\{(3\overline{ba_x^4}+6\overline{ba_x^2}\overline{ba_y^2}+3\overline{ba_y^4}-24\overline{ba_y^2}\overline{ba_z^2}$ $+8\overline{ba_z^4}-24\overline{ba_x^2}\overline{ba_z^2})(0,0,0)+(12\overline{ba_x^3}+12\overline{ba_x}\overline{ba_y^2}$ $-48\overline{ba_x}\overline{ba_z^2})(1,0,0)+12(\overline{ba_x^2}\overline{ba_y}+\overline{ba_y^3}$ $-4\overline{ba_y}\overline{ba_z^2})(0,1,0)+16(2\overline{ba_z^3}-3\overline{ba_x^2}\overline{ba_z}$ $-3\overline{ba_y^2}\overline{ba_z})(0,0,1)+6(3\overline{ba_x^2}+\overline{ba_y^2}-4\overline{ba_z^2})(2,0,0)$ $+24\overline{ba_x}\overline{ba_y}(1,1,0)-96\overline{ba_x}\overline{ba_z}(1,0,1)$ $+6(\overline{ba_x^2}+3\overline{ba_y^2}-4\overline{ba_z^2})(0,2,0)-96\overline{ba_y}\overline{ba_z}(0,1,1)$ $-24(\overline{ba_x^2}+\overline{ba_y^2}-2\overline{ba_z^2})(0,0,2)$ $+12\overline{ba_x}[(3,0,0)+(1,2,0)-4(1,0,2)]$ $+12\overline{ba_y}[(2,1,0)+(0,3,0)-4(0,1,2)]$ $-16\overline{ba_z}[3(2,0,1)+3(0,2,1)-2(0,0,3)]$ $+3(4,0,0)+6(2,2,0)-24(2,0,2)+3(0,4,0)$ $-24(0,2,2)+8(0,0,4)\}$
g_{xz^3}	$\frac{3}{8}\sqrt{\frac{10}{\pi}}\{(4\overline{ba_x}\overline{ba_z^3}-3\overline{ba_x^3}\overline{ba_z}-3\overline{ba_x}\overline{ba_y^2}\overline{ba_z})(0,0,0)$ $+(4\overline{ba_z^3}-9\overline{ba_x^2}\overline{ba_z}-3\overline{ba_y^2}\overline{ba_z})(1,0,0)$ $-6\overline{ba_x}\overline{ba_y}\overline{ba_z}(0,1,0)+3(4\overline{ba_x}\overline{ba_z^2}-\overline{ba_x^3}-\overline{ba_x}\overline{ba_y^2})(0,0,1)$ $+3(4\overline{ba_z^2}-3\overline{ba_x^2}-\overline{ba_y^2})(1,0,1)-3\overline{ba_x}\overline{ba_z}[3(2,0,0)$ $+(0,2,0)-4(0,0,2)]-6\overline{ba_y}\overline{ba_z}(1,1,0)-6\overline{ba_x}\overline{ba_y}(0,1,1)$ $+3\overline{ba_z}[4(1,0,2)-(3,0,0)-(1,2,0)]+\overline{ba_x}[4(0,0,3)$ $-3(0,2,1)-9(2,0,1)]-6\overline{ba_y}(1,1,1)-3(3,0,1)$ $-3(1,2,1)+4(1,0,3)\}$

g_{yz^3}	$\begin{aligned} & \frac{3}{8}\sqrt{\frac{10}{\pi}}\{(4\overline{ba}_y\overline{ba}_z^3-3\overline{ba}_y^3\overline{ba}_z-3\overline{ba}_x^2\overline{ba}_y\overline{ba}_z)(0,0,0) \\ & +(4\overline{ba}_z^3-9\overline{ba}_y^2\overline{ba}_z-3\overline{ba}_x^2\overline{ba}_z)(0,1,0) \\ & -6\overline{ba}_x\overline{ba}_y\overline{ba}_z(1,0,0)+3(4\overline{ba}_y\overline{ba}_z^2-\overline{ba}_y^3-\overline{ba}_x^2\overline{ba}_y)(0,0,1) \\ & +3(4\overline{ba}_z^2-3\overline{ba}_y^2-\overline{ba}_x^2)(0,1,1)-3\overline{ba}_y\overline{ba}_z[(2,0,0)+3(0,2,0) \\ & -4(0,0,2)]-6\overline{ba}_x\overline{ba}_z(1,1,0)-6\overline{ba}_x\overline{ba}_y(1,0,1) \\ & +3\overline{ba}_z[4(0,1,2)-(0,3,0)-(2,1,0)]+\overline{ba}_y[4(0,0,3) \\ & -3(2,0,1)-9(0,2,1)]-6\overline{ba}_x(1,1,1)-3(0,3,1) \\ & -3(2,1,1)+4(0,1,3)\} \end{aligned}$
$g_{z^2(x^2-y^2)}$	$\begin{aligned} & \frac{3}{8}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\{(\overline{ba}_y^4-\overline{ba}_x^4+6\overline{ba}_x^2\overline{ba}_z^2-6\overline{ba}_y^2\overline{ba}_z^2)(0,0,0) \\ & +4(3\overline{ba}_x\overline{ba}_z^2-\overline{ba}_x^3)(1,0,0)-4(3\overline{ba}_y\overline{ba}_z^2-\overline{ba}_y^3)(0,1,0) \\ & +12(\overline{ba}_x^2\overline{ba}_z-\overline{ba}_y^2\overline{ba}_z)(0,0,1)-6(\overline{ba}_x^2-\overline{ba}_z^2)(2,0,0) \\ & +24\overline{ba}_x\overline{ba}_z(1,0,1)+6(\overline{ba}_y^2-\overline{ba}_z^2)(0,2,0) \\ & -24\overline{ba}_y\overline{ba}_z(0,1,1)+6(\overline{ba}_x^2-\overline{ba}_y^2)(0,0,2) \\ & +4\overline{ba}_x[3(1,0,2)-(3,0,0)]+12\overline{ba}_z[(2,0,1) \\ & -(0,2,1)]+4\overline{ba}_y[(0,3,0)-3(0,1,2)]-(4,0,0)+6(2,0,2) \\ & +(0,4,0)-6(0,2,2)\} \end{aligned}$
g_{xyz^2}	$\begin{aligned} & \frac{3}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\{(\overline{ba}_x\overline{ba}_y\overline{ba}_z^2-\overline{ba}_x^3\overline{ba}_y-\overline{ba}_x\overline{ba}_y^3)(0,0,0) \\ & +(6\overline{ba}_y\overline{ba}_z^2-3\overline{ba}_x^2\overline{ba}_y-\overline{ba}_y^3)(1,0,0) \\ & +(6\overline{ba}_x\overline{ba}_z^2-\overline{ba}_x^3-3\overline{ba}_x\overline{ba}_y^2)(0,1,0) \\ & +12\overline{ba}_x\overline{ba}_y\overline{ba}_z(0,0,1)+3(2\overline{ba}_z^2-\overline{ba}_x^2-\overline{ba}_y^2)(1,1,0) \\ & -3\overline{ba}_x\overline{ba}_y[(2,0,0)+(0,2,0)-2(0,0,2)]+6(\overline{ba}_y^2-\overline{ba}_z^2)(0,2,0) \\ & +12\overline{ba}_y\overline{ba}_z(1,0,1)+12\overline{ba}_x\overline{ba}_z(0,1,1) \\ & -\overline{ba}_y[(3,0,0)+3(1,2,0)-6(1,0,2)] \\ & -\overline{ba}_x[3(2,1,0)+(0,3,0)-6(0,1,2)] \\ & +12\overline{ba}_z(1,1,1)-(3,1,0)-(1,3,0)+6(1,1,2)\} \end{aligned}$

$g_{z(x^3-3xy^2)}$	$\begin{aligned} & \frac{3}{8}\sqrt{\frac{70}{\pi}}\{(\overline{ba_x^3}\overline{ba_z}-3\overline{ba_x}\overline{ba_y^2}\overline{ba_z})(0,0,0) \\ & +3(\overline{ba_x^2}\overline{ba_z}-\overline{ba_y^2}\overline{ba_z})(1,0,0) \\ & -6\overline{ba_x}\overline{ba_y}\overline{ba_z}(0,1,0)+(\overline{ba_x^3}-3\overline{ba_x}\overline{ba_y^2})(0,0,1) \\ & -6\overline{ba_y}\overline{ba_z}(1,1,0)+3\overline{ba_x}\overline{ba_z}[(2,0,0)-(0,2,0)] \\ & +3(\overline{ba_x^2}-\overline{ba_y^2})(1,0,1)-6\overline{ba_x}\overline{ba_y}(0,1,1) \\ & +\overline{ba_z}[(3,0,0)-3(1,2,0)]+3\overline{ba_x}[(2,0,1)-(0,2,1)] \\ & -6\overline{ba_y}(1,1,1)+(3,0,1)-3(1,2,1)\} \end{aligned}$
$g_{z(3x^2y-y^3)}$	$\begin{aligned} & \frac{3}{8}\sqrt{\frac{70}{\pi}}\{(3\overline{ba_x^2}\overline{ba_y}\overline{ba_z}-\overline{ba_y^3}\overline{ba_z})(0,0,0) \\ & +3(\overline{ba_x^2}\overline{ba_z}-\overline{ba_y^2}\overline{ba_z})(0,1,0) \\ & +6\overline{ba_x}\overline{ba_y}\overline{ba_z}(1,0,0)+(3\overline{ba_x^2}\overline{ba_y}-\overline{ba_y^3})(0,0,1) \\ & +6\overline{ba_x}\overline{ba_z}(1,1,0)+3\overline{ba_y}\overline{ba_z}[(2,0,0)-(0,2,0)] \\ & +3(\overline{ba_x^2}-\overline{ba_y^2})(0,1,1)+6\overline{ba_x}\overline{ba_y}(1,0,1) \\ & +\overline{ba_z}[3(2,1,0)-(0,3,0)]+3\overline{ba_y}[(2,0,1)-(0,2,1)] \\ & +6\overline{ba_x}(1,1,1)-(0,3,1)+3(2,1,1)\} \end{aligned}$
$g_{x^2y^2}$	$\begin{aligned} & \frac{3}{16}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\{(\overline{ba_x^4}-6\overline{ba_x^2}\overline{ba_y^2}+\overline{ba_y^4})(0,0,0) \\ & +4(\overline{ba_x^3}-3\overline{ba_x}\overline{ba_y^2})(1,0,0)+4(\overline{ba_y^3}-3\overline{ba_x^2}\overline{ba_y})(0,1,0) \\ & +6(\overline{ba_x^2}-\overline{ba_y^2})[(2,0,0)-(0,2,0)]-24\overline{ba_x}\overline{ba_y}(1,1,0) \\ & +4\overline{ba_x}[(3,0,0)-3(1,2,0)]+4\overline{ba_y}[(0,3,0)-3(2,1,0)] \\ & +(4,0,0)-6(2,2,0)+(0,4,0)\} \end{aligned}$
$g_{xy(x^2-y^2)}$	$\begin{aligned} & \frac{3}{4}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\{(\overline{ba_x^3}\overline{ba_y}-\overline{ba_x}\overline{ba_y^3})(0,0,0) \\ & +(3\overline{ba_x^2}\overline{ba_y}-\overline{ba_y^3})(1,0,0)+(\overline{ba_x^3}-3\overline{ba_x}\overline{ba_y^2})(0,1,0) \\ & +3\overline{ba_x}\overline{ba_y}[(2,0,0)-(0,2,0)]+3(\overline{ba_x^2}-\overline{ba_y^2})(1,1,0) \\ & +\overline{ba_y}[(3,0,0)-3(1,2,0)]+\overline{ba_x}[3(2,1,0)-(0,3,0)] \\ & +(3,1,0)-(1,3,0)\} \end{aligned}$

4.2. İşlemcinin Taşınması İçin Master Formüller

Bir işlemciyi başka bir merkeze taşımak için kullandığımız master formül, $f_v^O(\overline{bo}_x, \overline{bo}_y, \overline{bo}_z)$ sabit bir değer olmak üzere,

$$(n, l, m)^O = \sum_v f_v^O(\overline{bo}_x, \overline{bo}_y, \overline{bo}_z)(i, j, k)_v^B \quad (4.2)$$

biçimindedir (Zheng ve Zerner, 1993). Denklem (4.2)'yi kullanarak aşağıdaki Çizelge 4.2'de ifade ettiğimiz işlemcileri hesapladık ve kaynaktaki (Zheng ve Zerner, 1993) sonuçlarla uyumludur. Örneğin O merkezindeki (1,0,0) işlemcisini denklem (4.2)'yi kullanarak B merkezine taşıyalım. Böylece,

$$\begin{aligned} (1, 0, 0) &= \sum_{i=0}^1 \overline{bo}_{x_b}^{1-i} x_b^i \sum_{j=0}^0 \overline{bo}_{y_b}^{0-j} y_b^j \sum_{k=0}^0 \overline{bo}_{z_b}^{0-k} z_b^k \\ &= \overline{bo}_{x_b} x_b^0 y_b^0 z_b^0 + x_b^1 y_b^0 z_b^0 \\ &= \overline{bo}_{x_b} (0, 0, 0) + (1, 0, 0) \end{aligned}$$

buluruz.

Çizelge 4.2. Taşıma yapıldıktan sonra işlemciler.

İşlemci	Taşıma yapıldıktan sonra işlemciler
(1,0,0)	$\overline{bo}_x(0,0,0) + (1,0,0)$
(0,1,0)	$\overline{bo}_y(0,0,0) + (0,1,0)$
(0,0,1)	$\overline{bo}_z(0,0,0) + (0,0,1)$
(2,0,0)	$\overline{bo}_x^2(0,0,0) + 2\overline{bo}_x(1,0,0) + (2,0,0)$
(1,1,0)	$\overline{bo}_x \overline{bo}_y(0,0,0) + \overline{bo}_y(1,0,0) + \overline{bo}_x(0,1,0) + (1,1,0)$

(1,0,1)	$\overline{bo}_x \overline{bo}_z(0,0,0) + \overline{bo}_z(1,0,0) + \overline{bo}_x(0,0,1) + (1,0,1)$
(0,2,0)	$\overline{bo}_y^2(0,0,0) + 2\overline{bo}_y(0,1,0) + (0,2,0)$
(0,1,1)	$\overline{bo}_y \overline{bo}_z(0,0,0) + \overline{bo}_z(0,1,0) + \overline{bo}_y(0,0,1) + (0,1,1)$
(0,0,2)	$\overline{bo}_z^2(0,0,0) + 2\overline{bo}_z(0,0,1) + (0,0,2)$
(3,0,0)	$\overline{bo}_x^3(0,0,0) + 3\overline{bo}_x^2(1,0,0) + 3\overline{bo}_x(2,0,0) + (3,0,0)$
(1,2,0)	$\overline{bo}_x \overline{bo}_y^2(0,0,0) + \overline{bo}_y^2(1,0,0) + 2\overline{bo}_x \overline{bo}_y(0,1,0) + 2\overline{bo}_y(1,1,0) + \overline{bo}_x(0,2,0) + (1,2,0)$
(1,0,2)	$\overline{bo}_x \overline{bo}_z^2(0,0,0) + \overline{bo}_z^2(1,0,0) + 2\overline{bo}_x \overline{bo}_z(0,0,1) + 2\overline{bo}_z(1,0,1) + \overline{bo}_x(0,0,2) + (1,0,2)$
(2,1,0)	$\overline{bo}_x^2 \overline{bo}_y(0,0,0) + 2\overline{bo}_x \overline{bo}_y(1,0,0) + \overline{bo}_x^2(0,1,0) + 2\overline{bo}_x(1,1,0) + \overline{bo}_y(2,0,0) + (2,1,0)$
(2,0,1)	$\overline{bo}_x^2 \overline{bo}_z(0,0,0) + 2\overline{bo}_x \overline{bo}_z(1,0,0) + \overline{bo}_x^2(0,0,1) + 2\overline{bo}_x(1,0,1) + \overline{bo}_z(2,0,0) + (2,0,1)$
(1,1,1)	$\overline{bo}_x \overline{bo}_y \overline{bo}_z(0,0,0) + \overline{bo}_y \overline{bo}_z(1,0,0) + \overline{bo}_x \overline{bo}_z(0,1,0) + \overline{bo}_x \overline{bo}_y(0,0,1) + \overline{bo}_z(1,1,0) + \overline{bo}_y(1,0,1) + \overline{bo}_x(0,1,1) + (1,1,1)$
(0,3,0)	$\overline{bo}_y^3(0,0,0) + 3\overline{bo}_y^2(0,1,0) + 3\overline{bo}_y(0,2,0) + (0,3,0)$

(0,1,2)	$\overline{bo}_y \overline{bo}_z^2(0,0,0) + \overline{bo}_z^2(0,1,0) + 2\overline{bo}_y \overline{bo}_z(0,0,1) \\ + 2\overline{bo}_z(0,1,1) + \overline{bo}_y(0,0,2) + (0,1,2)$
(0,2,1)	$\overline{bo}_y^2 \overline{bo}_z(0,0,0) + 2\overline{bo}_y \overline{bo}_z(0,1,0) + \overline{bo}_y^2(0,0,1) \\ + 2\overline{bo}_y(0,1,1) + \overline{bo}_z(0,2,0) + (0,2,1)$
(0,0,3)	$\overline{bo}_z^3(0,0,0) + 3\overline{bo}_z^2(0,0,1) + 3\overline{bo}_z(0,0,2) + (0,0,3)$
(4,0,0)	$\overline{bo}_x^4(0,0,0) + 4\overline{bo}_x^3(1,0,0) + 6\overline{bo}_x^2(2,0,0) \\ + 4\overline{bo}_x(3,0,0) + (4,0,0)$
(3,1,0)	$\overline{bo}_x^3 \overline{bo}_y(0,0,0) + 3\overline{bo}_x^2 \overline{bo}_y(1,0,0) \\ + \overline{bo}_x^3(0,1,0) + 3\overline{bo}_x \overline{bo}_y(2,0,0) + 3\overline{bo}_x^2(1,1,0) \\ + \overline{bo}_y(3,0,0) + 3\overline{bo}_x(2,1,0) + (3,1,0)$
(3,0,1)	$\overline{bo}_x^3 \overline{bo}_z(0,0,0) + 3\overline{bo}_x^2 \overline{bo}_z(1,0,0) \\ + \overline{bo}_x^3(0,0,1) + 3\overline{bo}_x^2(1,0,1) + 3\overline{bo}_x \overline{bo}_z(2,0,0) \\ + \overline{bo}_z(3,0,0) + 3\overline{bo}_x(2,0,1) + (3,0,1)$
(2,2,0)	$\overline{bo}_x^2 \overline{bo}_y^2(0,0,0) + 2\overline{bo}_x \overline{bo}_y^2(1,0,0) \\ + 2\overline{bo}_x^2 \overline{bo}_y(0,1,0) + \overline{bo}_y^2(2,0,0) + 4\overline{bo}_x \overline{bo}_y(1,1,0) \\ + \overline{bo}_x^2(0,2,0) + 2\overline{bo}_x(1,2,0) + 2\overline{bo}_y(2,1,0) + (2,2,0)$
(2,1,1)	$\overline{bo}_x^2 \overline{bo}_y \overline{bo}_z(0,0,0) + 2\overline{bo}_x \overline{bo}_y \overline{bo}_z(1,0,0) \\ + \overline{bo}_x^2 \overline{bo}_z(0,1,0) + \overline{bo}_x^2 \overline{bo}_y(0,0,1) + \overline{bo}_y \overline{bo}_z(2,0,0) \\ + 2\overline{bo}_x \overline{bo}_z(1,1,0) + 2\overline{bo}_x \overline{bo}_y(1,0,1) + \overline{bo}_x^2(0,1,1) \\ + \overline{bo}_z(2,1,0) + \overline{bo}_y(2,0,1) + 2\overline{bo}_x(1,1,1) + (2,1,1)$

(2,0,2)	$\begin{aligned} &\overline{bo_x}^2\overline{bo_z}^2(0,0,0)+2\overline{bo_x}\overline{bo_z}^2(1,0,0)+2\overline{bo_x}^2\overline{bo_z}(0,0,1) \\ &+4\overline{bo_x}\overline{bo_z}(1,0,1)+\overline{bo_z}^2(2,0,0)+\overline{bo_x}^2(0,0,2) \\ &+2\overline{bo_x}(1,0,2)+2\overline{bo_z}(2,0,1)+(2,0,2) \end{aligned}$
(1,3,0)	$\begin{aligned} &\overline{bo_x}\overline{bo_y}^3(0,0,0)+3\overline{bo_x}\overline{bo_y}^2(0,1,0)+\overline{bo_y}^3(1,0,0) \\ &+3\overline{bo_x}\overline{bo_y}(0,2,0)+3\overline{bo_y}^2(1,1,0) \\ &+\overline{bo_x}(0,3,0)+3\overline{bo_y}(1,2,0)+(1,3,0) \end{aligned}$
(1,2,1)	$\begin{aligned} &\overline{bo_x}\overline{bo_y}^2\overline{bo_z}(0,0,0)+2\overline{bo_x}\overline{bo_y}\overline{bo_z}(0,1,0) \\ &+\overline{bo_y}^2\overline{bo_z}(1,0,0)+\overline{bo_x}\overline{bo_y}^2(0,0,1)+\overline{bo_x}\overline{bo_z}(0,2,0) \\ &+2\overline{bo_y}\overline{bo_z}(1,1,0)+2\overline{bo_x}\overline{bo_y}(0,1,1)+\overline{bo_y}^2(1,0,1) \\ &+\overline{bo_z}(1,2,0)+\overline{bo_x}(0,2,1)+2\overline{bo_y}(1,1,1)+(1,2,1) \end{aligned}$
(1,1,2)	$\begin{aligned} &\overline{bo_x}\overline{bo_y}\overline{bo_z}^2(0,0,0)+\overline{bo_y}\overline{bo_z}^2(1,0,0) \\ &+\overline{bo_x}\overline{bo_z}^2(0,1,0)+2\overline{bo_x}\overline{bo_y}\overline{bo_z}(0,0,1) \\ &+\overline{bo_z}^2(1,1,0)+2\overline{bo_y}\overline{bo_z}(1,0,1)+2\overline{bo_x}\overline{bo_z}(0,1,1) \\ &+\overline{bo_x}\overline{bo_y}(0,0,2)+\overline{bo_y}(1,0,2)+2\overline{bo_z}(1,1,1)+ \\ &+\overline{bo_x}(0,1,2)+(1,1,2) \end{aligned}$
(1,0,3)	$\begin{aligned} &\overline{bo_x}\overline{bo_z}^3(0,0,0)+\overline{bo_z}^3(1,0,0)+3\overline{bo_x}\overline{bo_z}^2(0,0,1) \\ &+3\overline{bo_z}^2(1,0,1)+3\overline{bo_x}\overline{bo_z}(0,0,2) \\ &+3\overline{bo_z}(1,0,2)+\overline{bo_x}(0,0,3)+(1,0,3) \end{aligned}$
(0,4,0)	$\begin{aligned} &\overline{bo_y}^4(0,0,0)+4\overline{bo_y}^3(0,1,0)+6\overline{bo_y}^2(0,2,0) \\ &+4\overline{bo_y}(0,3,0)+(0,4,0) \end{aligned}$
(0,3,1)	$\begin{aligned} &\overline{bo_y}^3\overline{bo_z}(0,0,0)+3\overline{bo_y}^2\overline{bo_z}(0,1,0)+\overline{bo_y}^3(0,0,1) \\ &+3\overline{bo_y}^2(0,1,1)+3\overline{bo_x}\overline{bo_z}(0,2,0)+\overline{bo_z}(0,3,0) \\ &+3\overline{bo_y}(0,2,1)+(0,3,1) \end{aligned}$

(0,2,2)	$\overline{bo}_y^2 \overline{bo}_z^2 (0,0,0) + 2\overline{bo}_y \overline{bo}_z^2 (0,1,0) + 2\overline{bo}_y^2 \overline{bo}_z (0,0,1)$ $+ 4\overline{bo}_y \overline{bo}_z (0,1,1) + \overline{bo}_z^2 (0,2,0) + \overline{bo}_y^2 (0,0,2)$ $+ 2\overline{bo}_y (0,1,2) + 2\overline{bo}_z (0,2,1) + (0,2,2)$
(0,1,3)	$\overline{bo}_y \overline{bo}_z^3 (0,0,0) + \overline{bo}_z^3 (0,1,0) + 3\overline{bo}_y \overline{bo}_z^2 (0,0,1)$ $+ 3\overline{bo}_z^2 (0,1,1) + 3\overline{bo}_y \overline{bo}_z (0,0,2) + 3\overline{bo}_z (0,1,2)$ $+ \overline{bo}_y (0,0,3) + (0,1,3)$
(0,0,4)	$\overline{bo}_z^4 (0,0,0) + 4\overline{bo}_z^3 (0,0,1) + 6\overline{bo}_z^2 (0,0,2)$ $+ 4\overline{bo}_z (0,0,3) + (0,0,4)$

a merkezindeki STO'nun içindeki düzenli katı harmoniği ve o merkezindeki işlemciyi b merkezine taşıma yaparak denklem (3.30)'da görünen altı katlı toplamı denklem (4.3)'de görünen iki katlı toplama indirgeyerek çok-kutup moment integralini denklem (4.3)'deki gibi sadece B merkezinde ifade etmiş oluruz.

$$\begin{aligned}
\langle M_{l,m,n} \rangle &= \left\langle r_a^{n_a - l_a - 1} x_a^i y_a^j z_a^k e^{-\zeta_a r_a} \middle| x_o^l y_o^m z_o^n \middle| r_b^{n_b - l_b - 1} x_b^e y_b^f z_b^g e^{-\zeta_b r_b} \right\rangle \\
&= \left\langle r_a^{n_a - l_a - 1} \left(\sum_{\mu} g_{\mu}^a (\overline{ba}_x, \overline{ba}_y, \overline{ba}_z) x_b^{t_{x,\mu}^a} y_b^{t_{y,\mu}^a} z_b^{t_{z,\mu}^a} \right) e^{-\zeta_a r_a} \right. \\
&\quad \left. \left| \left(\sum_v f_v^o (\overline{bo}_x, \overline{bo}_y, \overline{bo}_z) x_b^{t_{x,v}^o} y_b^{t_{y,v}^o} z_b^{t_{z,v}^o} \right) \right| r_b^{n_b - l_b - 1} x_b^e y_b^f z_b^g e^{-\zeta_b r_b} \right\rangle \\
&= \sum_{\mu,v} g_{\mu}^a (\overline{ba}_x, \overline{ba}_y, \overline{ba}_z) f_v^o (\overline{bo}_x, \overline{bo}_y, \overline{bo}_z) \\
&\quad \left\langle r_a^{n_a - l_a - 1} e^{-\zeta_a r_a} \middle| r_b^{n_b - l_b - 1} x_b^{e+t_{x,\mu}^a+t_{x,v}^o} y_b^{f+t_{y,\mu}^a+t_{y,v}^o} z_b^{g+t_{z,\mu}^a+t_{z,v}^o} e^{-\zeta_b r_b} \right\rangle \quad (4.3)
\end{aligned}$$

Denklem (4.3)'deki $g_{\mu}^a (\overline{ba}_x, \overline{ba}_y, \overline{ba}_z)$ ve $f_v^o (\overline{bo}_x, \overline{bo}_y, \overline{bo}_z)$ sabit katsayılarıdır.

4.3. Bir- ve İki-Merkezli İntegrallerin Analitik Hesaplanması

4.3.1. Bir-Merkezli İntegraller

Denklem (4.3)'teki ifadenin iki-merkezli olduğunu görmekteyiz. Bu merkezlerden birini diğerine taşıdığımızda ifademiz bir merkeze sahip olmaktadır. Burada $r_a = r_b = r_o$ alınmıştır. Denklem (4.3)'te gerekli taşımalar yapıldıktan sonra, normalizasyon katsayısı dışında, tüm bir-merkezli integraller,

$$I_I = \left\langle r_b^{n_a+n_b-l_a-l_b-2} \left| x_b^i y_b^j z_b^k e^{-(\zeta_a+\zeta_b)r_b} \right. \right\rangle$$

$$= \int_0^\infty r_b^{n_a+n_b-l_a-l_b+i+j+k} e^{-(\zeta_a+\zeta_b)r_b} dr_b \int_0^\pi \sin^{i+j+1}\theta \cos^k\theta d\theta \int_0^{2\pi} \sin^j\phi \cos^i\phi d\phi \quad (4.4)$$

biçiminde olmaktadır (Zheng ve Zerner, 1993).

Denklem (4.4)'teki integrallerin çözümü için bazı dönüşümler yapılır. Bu dönüşümleri yaptıktan sonra bir merkez integraller için açılara bağlı oluşabilecek durumların hepsini Çizelge 4.3'te gösterdik. Bu çizelgeye bakarak bize gerekli olan bir-merkezli integrallerin açılara bağlı kısmını kolayca hesaplayabiliriz.

Denklem (4.4)'teki integralin radyal kısmı ise gamma fonksiyonları biçimindedir. Radyal kısımdaki integral $\int_0^\infty r^n e^{-\alpha r} dr = n! / \alpha^{n+1}$ bağıntısı kullanılarak kolayca hesaplanmaktadır (Arfken ve Weber, 2001).

Çizelge 4.3. Bir-merkezli integrallerin açılara bağlı kısmı.

m	n	$\int_0^{\pi, 2\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi$
çift	çift	$\int_0^{\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi = \frac{(m-1)!!(n-1)!!}{(m+n)!!} \pi$
		$\int_0^{2\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi = \frac{(m-1)!!(n-1)!!}{(m+n)!!} 2\pi$
çift	tek	$\int_0^{\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi = \frac{(m-1)!!n!!}{(m+n)!!} \frac{2^n (\frac{n-1}{2})! (\frac{n-1}{2})!}{n!}$
		$\int_0^{2\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi = 0$
tek	çift	$\int_0^{\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi = \frac{(m-1)!!(n-1)!!}{(m+n)!!} \pi$
		$\int_0^{2\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi = \frac{(m-1)!!(n-1)!!}{(m+n)!!} 2\pi$
tek	tek	$\int_0^{\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi = \frac{(m-1)!!n!!}{(m+n)!!} \frac{2^n (\frac{n-1}{2})! (\frac{n-1}{2})!}{n!}$
		$\int_0^{2\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi = 0$

4.3.2. İki- Merkezli İntegraller

Daha önceki bölümlerde gerekli taşımalar yapıldıktan sonra (4.3)'teki iki-merkez integralin çözümü için (3.21)'de ifade edilen eliptik koordinat sistemini ele alırız. Böylece iki-merkez integraller,

$$I_2 = \left\langle r_a^{n_a-l_a-l} e^{-\zeta_a r_a} \left| r_b^{n_b-l_b-l} x_a^i y_a^j z_a^k e^{-\zeta_b r_b} \right. \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta \int_0^{2\pi} d\phi (R/2)^{n_a+n_b-l_a-l_b+i+j+k+1} (\xi+\eta)^{n_a+1} (\xi-\eta)^{n_b+1} \\
&\quad \left[(\xi^2-1)(1-\eta^2) \right]^{(i+j)/2} (1-\xi\eta)^k e^{-\rho\xi-\tau\eta} \cos^i \phi \sin^j \phi \\
&= \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta (R/2)^{n_a+n_b-l_a-l_b+i+j+k+1} (\xi+\eta)^{n_a+1} (\xi-\eta)^{n_b+1} \\
&\quad \left[(\xi^2-1)(1-\eta^2) \right]^{(i+j)/2} (1-\xi\eta)^k e^{-\rho\xi-\tau\eta} F(i, j)
\end{aligned} \tag{4.5}$$

olur. Burada ρ ve τ ifadeleri,

$$\begin{aligned}
\rho &= (R/2)(\zeta_a + \zeta_b) \\
\tau &= (\zeta_a - \zeta_b) / (\zeta_a + \zeta_b)
\end{aligned} \tag{4.6}$$

ile verilir (Zheng ve Zerner, 1993). $F(i, j)$ de,

$$F(m, n) = \int_0^{2\pi} \cos^m \phi \sin^n \phi d\phi = \frac{(m-1)!!(n-1)!!}{(m+n)!!} (2\pi) \tag{4.7}$$

olarak bir-merkezli integrallerde bulduğumuz değerlerden biridir.

Denklem (4.5)'teki sabitler dışında kalan ifade “Z fonksiyonları” olarak adlandırılır ve

$$Z_{\alpha, \beta, \gamma, \delta}(\rho, \tau) = \int_1^\infty (\xi^2-1)^\gamma d\xi \int_{-1}^1 (1-\eta^2)^\gamma (\xi+\eta)^\alpha (\xi-\eta)^\beta (1-\xi\eta)^\delta e^{-\rho\xi-\tau\eta} d\eta \tag{4.8}$$

biçiminde ifade edilir (Zheng ve Zerner, 1993). Z fonksiyonlarını $A_{\alpha+\beta+2\gamma-2k-i-j-m}(\rho)$ ve $B_{i+j+2l+m}(\rho\tau)$ yardımcı fonksiyonlar cinsinden aşağıdaki gibi

$$\begin{aligned}
Z_{\alpha, \beta, \gamma, \delta}(\rho, \tau) &= \sum_{i, j, k, l, m} \binom{\alpha}{i} \binom{\beta}{j} \binom{\gamma}{k} \binom{\gamma}{l} \binom{\delta}{m} (-1)^{j+k+l+m} \\
&\quad A_{\alpha+\beta+2\gamma-2k-i-j-m}(\rho) B_{i+j+2l+m}(\rho\tau)
\end{aligned} \tag{4.9}$$

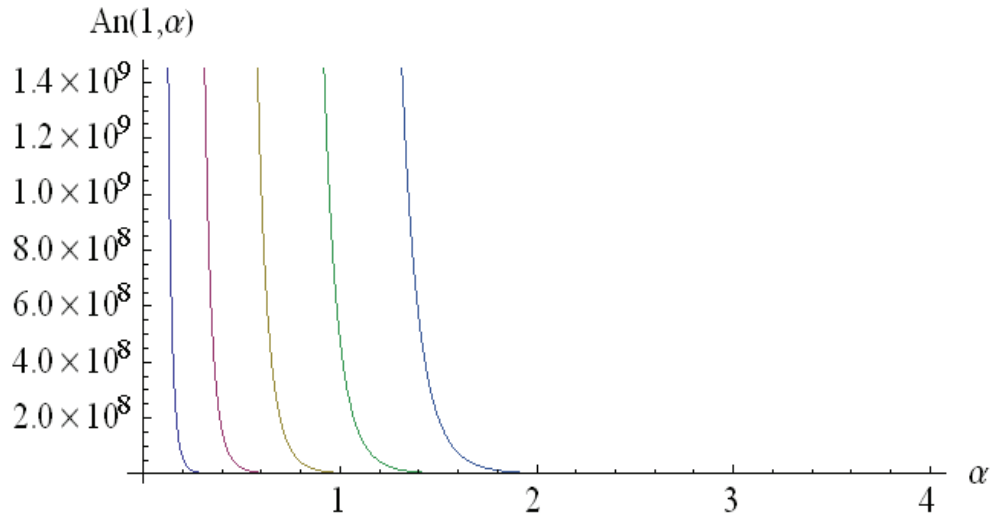
yazarız. Yardımcı fonksiyonlar ile ilgili bilgi Ek-3'te verilmiştir. Ek-3'te Mathematica 7 programlama dilinde $A_{\alpha+\beta+2\gamma-2k-i-j-m}(\rho)$ ve $B_{i+j+2l+m}(\rho\tau)$ yardımcı fonksiyonları hesaplayan programlar verilmiştir. Aynı zamanda Ek-3'te Mathematica 7 programlama dilinde farklı α değerlerine karşılık gelen $A_{\alpha+\beta+2\gamma-2k-i-j-m}(\rho)$ ve $B_{i+j+2l+m}(\rho\tau)$ yardımcı moleküler integrallerin grafiklerini çizen program verilmektedir. Bu programda çizdirilen grafikler aşağıdaki şekillerde gösterilmektedir.

İki- merkez integraller böylece hem Z fonksiyonları hem de F fonksiyonları cinsinden

$$I_2 = \left\langle r_a^{n_a-l_a-1} e^{-\zeta_a r_a} \left| r_b^{n_b-l_b-1} x_a^i y_a^j z_a^k e^{-\zeta_b r_b} \right. \right\rangle$$

$$= Z_{n_a-l_a, n_b-l_b, (i+j)/2, k}(\rho, \tau) F(i, j)$$

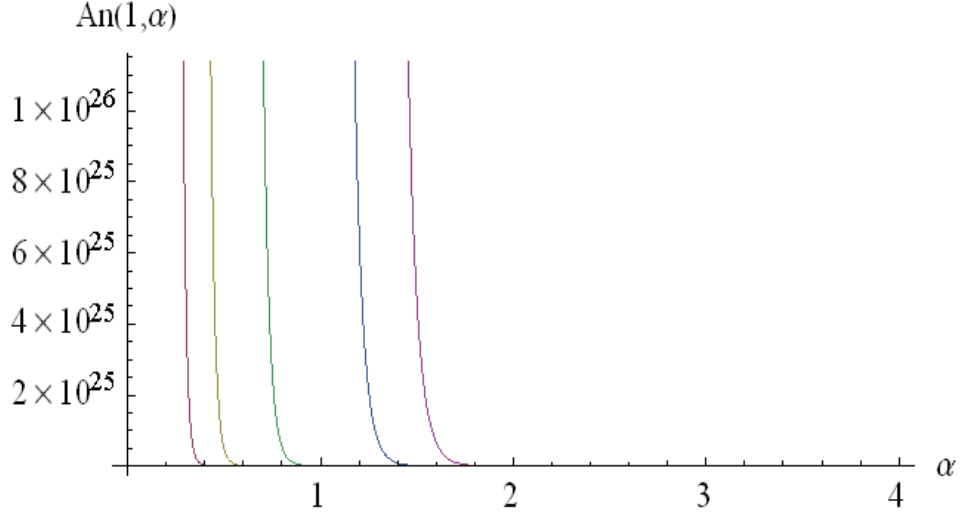
yazılır.



Şekil 4.1. $n < 17$ için $A_n(1, \alpha)$ 'nin grafiği

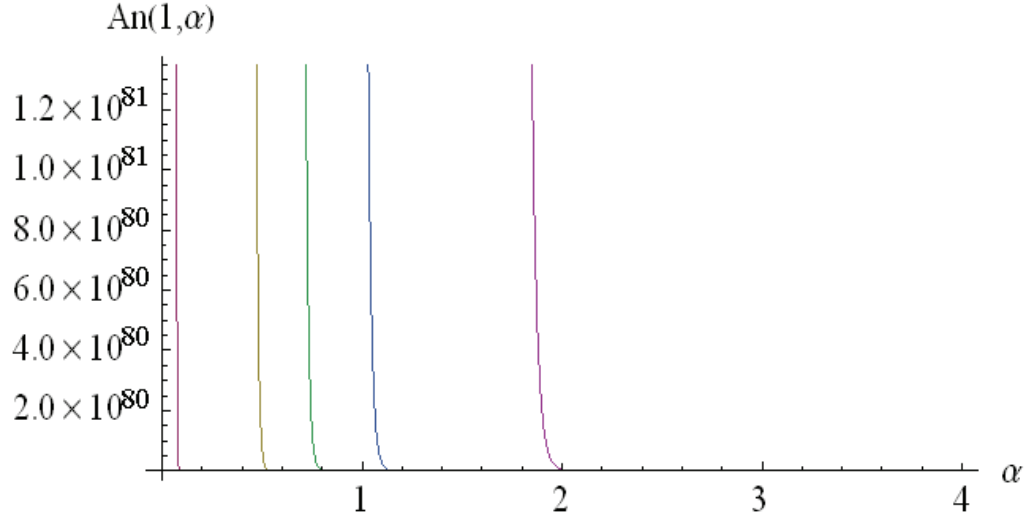
Şekil 4.1'de $n < 17$ için farklı n ve α değerleri ele alınarak $A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integrallerinin α değerine karşılık gelen grafiğini Mathematica 7 programlama dilini kullanarak çizdirdik. Bu grafiğe baktığımızda α değeri arttıkça

$A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integral değeri azalmaktadır. $n < 17$ durumunda n 'nin değeri azaldıkça α 'daki değişim oranı daha küçüktür. Kaynaklara (Kara, 1998) baktığımızda $A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integral için çizilen grafik, Şekil 4.1'de elde ettiğimiz grafikte uyum içerisinde.



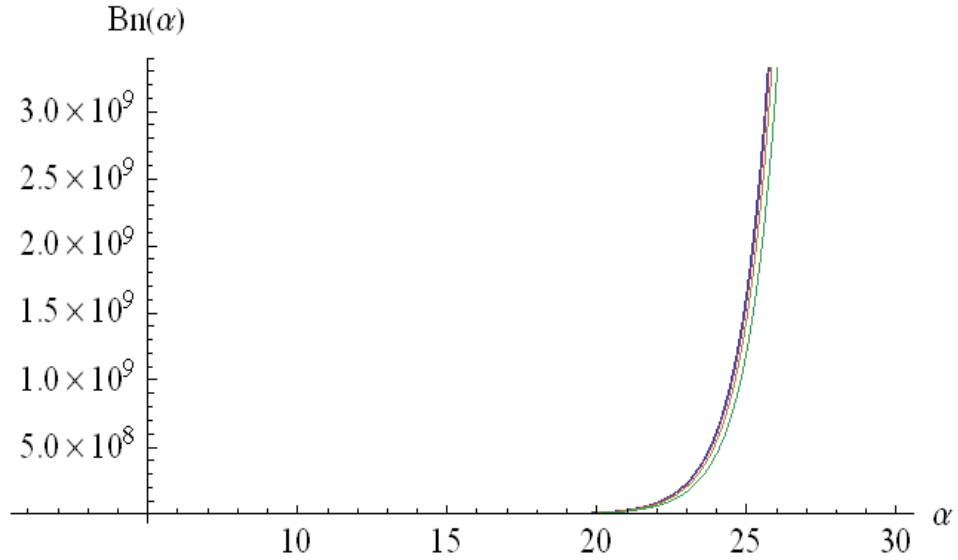
Şekil 4.2. $n > 17$ için $A_n(1, \alpha)$ 'nin grafiği

$n > 17$ olduğu durumda farklı n ve α değerlerindeki $A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integrallerinin α değerine karşılık gelen grafiği Şekil 4.2'de görülmektedir. Bu grafiğe baktığımızda herhangi bir n değerinde α 'nın alabileceği en küçük değer, $A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integral için en büyük değeri verir. Kaynaklara (Kara, 1998) baktığımızda $A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integral için çizilen grafik ile Şekil 4.2'de elde ettiğimiz grafik uyum içerisinde. $A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integral için n 'nin tek ya da çift olması önemli değildir.



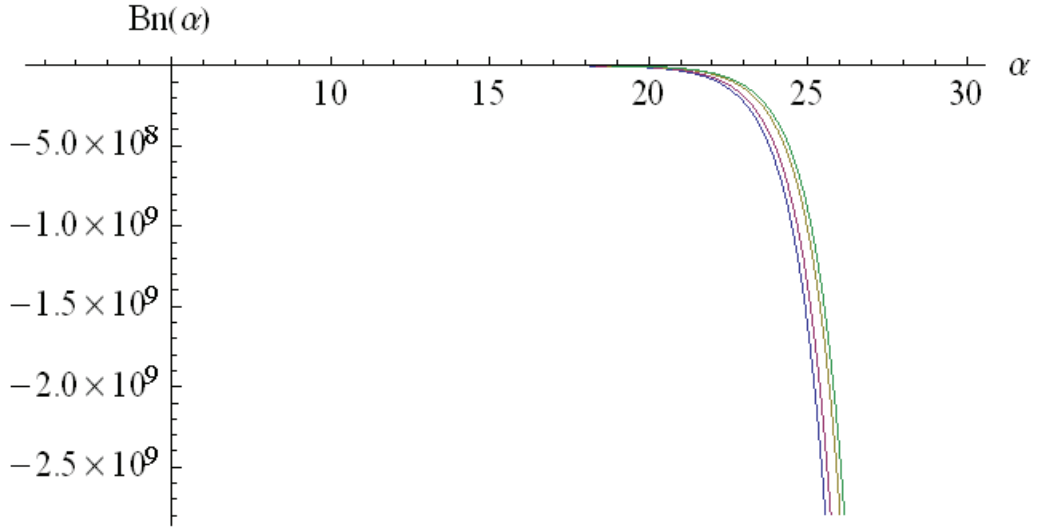
Şekil 4.3. $n=35, n=50, n=55, n=60, n=70$ için $A_n(1, \alpha)$ 'nin grafiği

Şekil 4.1, Şekil 4.2 ve Şekil 4.3'e baktığımızda herhangi iki durum için $A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integral değerleri aynı ise bu durumların n ve α değerleri kesinlikle farklıdır.



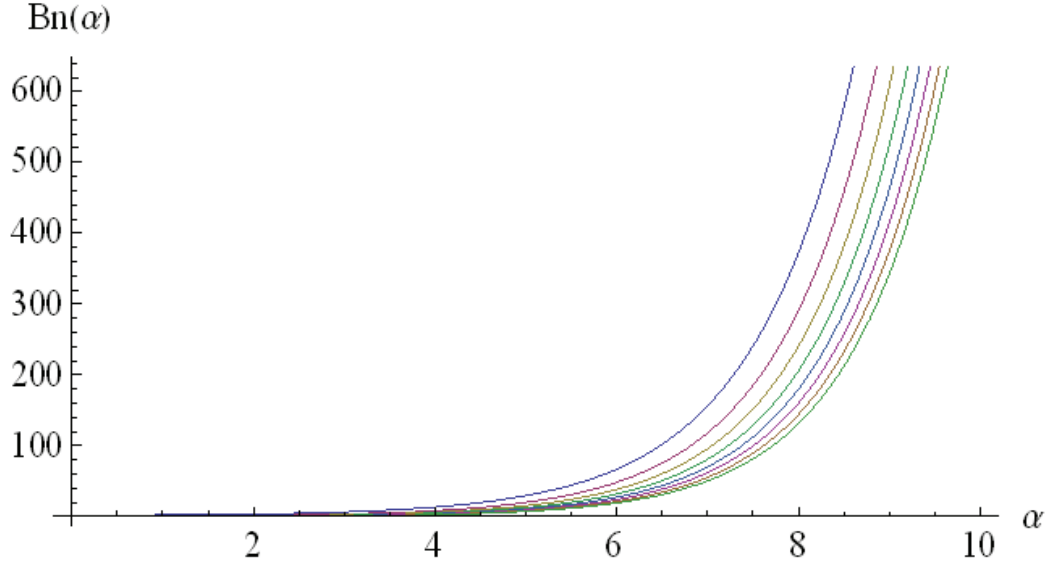
Şekil 4.4. n 'nin çift ve 17'den büyük değerleri için $B_n(\alpha)$ 'nin grafiği

n 'nin tek ya da çift olması $A_n(1, \alpha)$ yardımcı moleküler integrallerde farklılık yaratmazken $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integraller için farklılığı ortaya çıkarır. Şekil 4.4'te n 'nin çift ve 17'den büyük olması durumu gösterilmektedir. Bu grafiğe baktığımızda α değeri arttıkça $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integral değeri pozitifdir ve artmaktadır. $n > 17$ durumunda n 'nin değeri azaldıkça α 'daki değişim oranı daha küçüktür. Kaynaklara (Kara, 1998) baktığımızda $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integral için çizilen grafik ile Şekil 4.4'te elde ettiğimiz grafik uyum içerisindedir.



Şekil 4.5. n 'nin tek ve 17'den büyük değerleri için $B_n(\alpha)$ 'nın grafiği

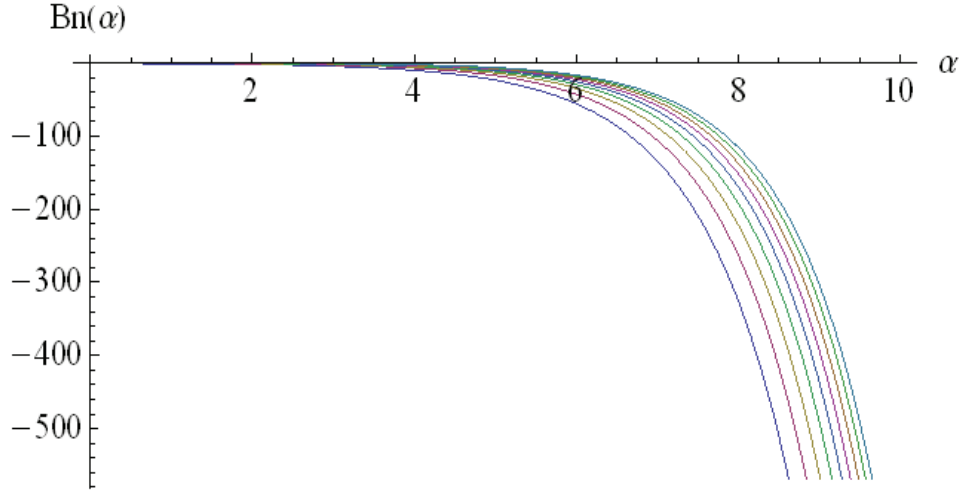
n 'nin tek ve 17'den büyük değerleri aldığı durumda ise, $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integral değerinin negatif değerler aldığı Şekil 4.5'te görülmektedir. Bu grafiğe baktığımızda α değeri arttıkça $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integral değeri azalmaktadır. Kaynaklara (Kara, 1998) baktığımızda $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integral için çizilen grafik ile Şekil 4.5'te elde ettiğimiz grafik uyum içerisindedir.



Şekil 4.6. n 'nin çift ve 17'den küçük değerleri için $B_n(\alpha)$ 'nin grafiği

Mathematica 7 programlama dilinin kullanılmasıyla çok kısa sürede programlar yardımıyla çizdirilen grafikler daha iyi sonuç vermektedir. Kaynaklarda (Kara, 1998) $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integraller için çizilen grafik, Şekil 4.6'da elde ettiğimiz grafikte uyum içerisinde.

n 'nin çift ve 17'den küçük değerleri için Şekil 4.6'daki grafik, farklı n ve α değerlerindeki $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integrallerinin α değerine göre durumunu göstermektedir. Burada, α arttıkça $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integral değeri hem artarak artmaktadır hem de pozitif değerler almaktadır.



Şekil 4.7. n 'nin tek ve 17'den küçük değerleri için $B_n(\alpha)$ 'nın grafiği

Şekil 4.7'de n 'nin tek ve 17'den küçük değerleri için farklı n ve α değerlerine karşı gelen $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integrallerinin α değerine karşılık gelen grafiği yine Mathematica 7 programlama dilini kullanarak çizdirdik. Bu grafiğe baktığımızda α değeri arttıkça $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integral değeri azalmaktadır ve negatiftir. Kaynaklara (Kara, 1998) baktığımızda $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integral için çizilen grafik ile Şekil 4.7'de elde ettiğimiz grafik uyum içerisindedir.

Aşağıdaki Çizelge 4.4 ve Çizelge 4.5'te $n > 17$ için $A_n(1, \alpha)$ ve $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integrallerin değerleri verilmektedir. Burada hesaplanan yardımcı moleküler integraller Mathematica 7 programlama dili kullanılarak Ek-3'te verilen programlar yardımıyla hesaplanmaktadır. Bu hesaplama sonucunda elde ettiğimiz değerler ile kaynaktaki (Kara, 1998) sonuçlar karşılaştırıldığında birbiriyle uyum içerisindedir.

Çizelge 4.4. $n > 17$ için $A_n(1, \alpha)$ Yardımcı Moleküler İntegraller

n	α	Bu çalışmada	Kaynak (Kara, 1998)
18	0.1	6.40237×10^{34}	6.40237370572800E+0034
	1.9	3.23610×10^{10}	3.23610498278710E+0010
	2.8	2.04333×10^7	2.04332959234244E+0007
	3.7	1.02449×10^5	1.02449125640500+0005
	4.6	1.63660×10^3	1.63659807764112E+0003
	5.2	1.59322×10^2	1.59322248710314E+0002
	6.7	1.29088×10^0	1.29088438909983E+0000
	7.9	5.63874×10^{-2}	5.63874276051763E-0002
	8.2	2.77653×10^{-2}	2.77652923358477E-0002
	11.5	4.38092×10^{-5}	4.38092139689438E-0005
	13.9	1.09025×10^{-6}	1.09024851781146E-0006
	17.2	1.36526×10^{-8}	1.36526172346481E-0008
	19.6	7.45388×10^{-10}	7.45388340201848E-0010
	21.4	9.20670×10^{-11}	9.20670027619442E-0011
	23.5	8.56297×10^{-12}	8.56297171114381E-0012
	26.8	2.25391×10^{-13}	2.25390946604644E-0013
	28.6	3.20671×10^{-14}	3.20671026549233E-0014
	29.2	1.68090×10^{-14}	1.68090296921971E-0014

	30.1	6.40053×10^{-15}	6.40052643510014E-0015
19	7.0	1.52445×10^0	1.52445474617075E+0000
19	24.7	2.49436×10^{-12}	2.49436014982635E-0012
20	13.3	5.91120×10^{-6}	5.91120282275021E-0006
20	29.2	1.95085×10^{-14}	1.95084813696612E-0014
21	0.7	1.30673×10^{23}	1.30673351892220E+0023
21	17.2	2.85852×10^{-8}	2.85851590157477E-0008
22	4.6	6.41707×10^5	6.41706536947621E+0005
22	16.9	5.86046×10^{-8}	5.86046087023726E-0008
23	9.1	2.48593×10^{-1}	2.48592703251723E-0001
23	30.1	9.40388×10^{-15}	9.40388096647520E-0015
24	2.2	1.70663×10^{15}	1.70662714705865E+0015
25	28.0	1.20051×10^{-13}	1.20050750488933E-0013
25	1.3	1.69090×10^{22}	1.69090231551075E+0022
26	19.9	3.18389×10^{-9}	3.18389333252295E-0009
26	29.8	1.76943×10^{-14}	1.76943017199233E-0014
27	21.4	5.50731×10^{-10}	5.50730698753986E-0010
27	5.2	9.74741×10^7	9.74740854669615E+0007
28	0.1	3.04888×10^{58}	3.04888344611714E+0058
28	11.2	1.13977×10^{-1}	1.13976502920031E-0001

Çizelge 4.5. $n>17$ için $B_n(\alpha)$ Yardımcı Moleküler İntegraller

n	α	Bu çalışmada	Kaynak (Kara,1998)
18	0.1	1.05740×10^{-1}	1.05739710800898E-0001
	2.8	7.62378×10^{-1}	7.62377620634772E-0001
	6.1	1.79334×10^1	1.79334166341940E+0001
	9.7	5.75251×10^2	5.75250955072259E+0002
	15.1	1.07336×10^5	1.07336329338265E+0005
	20.8	2.74908×10^7	2.74908036177983E+0007
	27.4	1.73274×10^{10}	1.73274462821069E+0010
	30.1	2.43592×10^{11}	2.43592429322098E+0011
19	1.9	-3.14680×10^{-1}	-2.98242500536055E-0001
	10.3	-9.92282×10^2	-9.92282441076476E+0002
	16.6	-4.47926×10^5	-4.47926243042275E+0005
	22.0	-8.64340×10^7	-8.64339714666933E+0007
	27.1	-1.26390×10^{10}	-1.26390360391023E+0010
	29.8	-1.77835×10^{11}	-1.77834758500263E+0011
20	7.9	9.42083×10^1	9.42082409418105E+0001

21	12.7	-9.54503×10^3	-9.54503222625260E+0003
22	25.9	3.66145×10^9	3.66144676283345E+0009
23	1.3	-1.57293×10^{-1}	-1.33339444869591E-0001
24	0.1	8.03707×10^{-2}	8.03706578163131E-0002
25	30.1	-2.12559×10^{11}	-2.12559009059577E+0011
26	16.3	2.79435×10^5	2.79435381632993E+0005
28	3.4	9.29047×10^{-1}	9.29047496408778E-0001
29	15.7	-1.45131×10^5	-1.45131218312531E+0005
30	0.1	6.48194×10^{-2}	-
31	17.1	-5.47552×10^5	-
37	28.6	-3.98246×10^{10}	-
48	0.4	0.43994×10^{-1}	-
65	30.1	-1.23297×10^{11}	-

5. SONUÇ ve ÖNERİLER

Biz bu çalışmada, STO'ları kullanarak elektrik çok-kutup moment integrallerini hesapladık. Bunun için öncelikle, kartezyen gösterimini kullanarak normalize olmuş düzenli katı harmonikleri Mathematica 7 programlama dilini kullanarak g orbitallerine kadar hesapladık. Sonra kaynaklarda ifade edilen çok-kutup moment tanımlamalarından birini (Buckingham,1959) kullanarak çeşitli momentlerin tensör işlemcilerinin tek-kutup, çift-kutup, dört-kutup, sekiz-kutup ve onaltı-kutup için tüm bileşenlerini hesaplayan program için yine Mathematica 7 programlama dilinden faydalandık. Daha sonra, farklı koordinatlara sahip iki ayrı merkezin birbirine nasıl bağlı olduğuna ve A merkezini B merkezine nasıl taşıyacağımızı bunu Şekil 3.2'de ifade ederek açıkladık. Aynı zamanda kaynaklarda STO ve işlemcinin taşınması için master formüller (Zheng ve Zerner, 1993) ifade edilmiştir. Bu master formülleri kullanarak hem STO hem işlemci için hesapladığımız ifadeleri çizelge halinde gösterdik.

Mathematica 7 programlama dilinde hazırladığımız program yardımıyla kısa sürede düzenli katı harmonikleri küresel koordinatlarda elde ettik. Kaynakta (Zheng ve Zerner, 1993) düzenli katı harmonikler kartezyen koordinatlarda bulunduğundan karşılaştırma yapmak için küresel koordinatlarda elde ettiğimiz düzenli katı harmonikleri kartezyen koordinatlara çevirip Zheng ve Zerner'in kullandıkları kartezyen gösterimini kullanarak kaynaktaki (Zheng ve Zerner, 1993) düzenli katı harmoniklerle bizim elde ettiğimiz düzenli katı harmonikler arasında fark olmadığını gördük. Küresel koordinatlardaki düzenli katı harmonikleri kartezyen koordinatlara dönüştürmek Mathematica 7 programlama dilinde oluşturmak güçtür. Bu nedenle küresel koordinatlarda elde ettiğimiz düzenli katı harmonikleri elde hesaplama yaparak kartezyen koordinatlara çevirdik. Sonra kartezyen koordinatlarda elde ettiğimiz sonuçları başka bir programa veri olarak girdik. Dosya açma ve yazma şeklinde programları ve çağırma formülünden faydalanarak hangi düzenli katı harmoniğin hangi bileşenin hangi katsayısının ne olacağını elde etmemizi sağlayan Mathematica 7 programlama dilini kullanarak programını yaptık.

Bu çalışmada, STO'ları ele alarak a ve b biçiminde iki-merkez ve tek-elektron olan elektrik çok-kutup moment integrallerinin hesaplanması için neler yapılması gerektiğini açıkladık ve bu tür integrallerin çözülmesinde seçilen baz fonksiyonu kadar seçilen koordinat sistemi de önemlidir. Çünkü seçtiğimiz koordinat sistemine göre

integralin içindeki ifadelerin görünüm olarak değişmesi işlemleri kolaylaştıracak bazı fonksiyonların kullanılabilmesini sağlamaktadır.

Elektrik çok-kutup moment integrallerinin STO'lar kullanılarak eliptik koordinatlarda hesaplanması $A_n(1, \alpha)$ ve $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integrallerin hassas olarak hesaplanmasına bağlıdır. Bu nedenle, α ve n 'nin farklı değerleri için $A_n(1, \alpha)$ ve $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integrallerinin ifadeleri dikkate alınarak Mathematica 7 programlama dilinde programlar yaptık. Bu programlarla elde edilen sonuçlar kaynaktaki (Kara,1998) sonuçlarla uyumludur ve bunları çizelgeler halinde gösterdik. $A_n(1, \alpha)$ ve $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integrallerinin farklı α değerlerine karşılık gelen durumlarını gösteren grafikleri Mathematica 7 programlama dilini kullanılarak çizdirdik ve mevcut kaynaktaki (Kara, 1998) grafiklerle karşılaştırıldığında uyum içerisinde olduğunu gördük.

$A_n(1, \alpha)$ ve $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integraller Mathematica 7 programlama dilinde yapılan programlar sonucunda elde edilen değerler kullanılarak elektrik çok-kutup moment integralleri daha hassas olarak hesaplanabilir.

6. KAYNAKLAR

- Arfken, G. B., Weber, H. J., 2001.** Mathematical Methods for Physicists, Fifth Edt., Academic Press, London.
- Beck, M. E., Hohlneicher, G., 1999.** Electric and Magnetic Multipole Integrals in STO Basis Sets: An Analytical Approach. Theor. Chem. Acc., 101, 297-308.
- Beiser, A., 1967.** Concept of Modern Physics, John Wiley & Sons Inc., New York.
- Bounds, D. G., Wilson, S., 1985.** Molecular Multipole Moment Calculations Using Universal Systematic Sequences of Even-Tempered Basis Sets. Mol. Phys., 54, 445-453.
- Bransden, B. H., Joachain, C. J., 1989.** Introduction to Quantum Mechanics, Longman Scientific & Technical, New York.
- Buckingham, A. D., 1959.** Molecular Quadrupole Moments. Quart. Rev. Chem. Soc., 13, 183-214.
- Buckingham, A. D., 1967.** Permanent and Induced Molecular Moments and Long-range Intermolecular Forces. Adv. Chem. Phys., 12, 107-142.
- Dacre, P. D., 1984.** The Interaction of A Water Molecule with an Ion at Adistance. J. Chem. Phys., 80, 5677-5683.
- Gradshteyn, I. S., Ryzhik, I. M., 2000.** Table of Integrals, Series, and Products, Academic Press, New York.
- Guseinov, I. I., Sadichov, F. S., 1977.** Analytical Evaluation of Electric Multipole Moment Integrals for Slater-Type Orbitals. J. Phys. B: Atom. Mol. Phys., 10, L261-L264.
- Guseinov, I. I., Atav, Ü., Özmen, A., Yüksel, H., Aliyeva, T. H., 1997.** Calculation of Rotation Coefficients for Overlap Integrals over Arbitrary Atomic Orbitals. Tr. J. Phys., 21, 1087-1092.

Guseinov, I. I., 1998. Analytical Evaluation of Molecular Electric and Magnetic Multipole Moment Integrals Over Slater-Type Orbitals. *Int. J. Quant. Chem.*, 68, 145-150.

Guseinov, I. I., Rzaeva, A. M., Mamedov, B. A., Orbay, M., Özdoğan, T., Öner, F., 1999 (a). Computation of Molecular Integrals Over Slater Type Orbitals. II. Calculation of Electric Multipole Moment Integrals Using Translation Formulas. *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 465, 7-9.

Guseinov, I. I., Mamedov, B. A., Özdoğan, T., Orbay, M., 1999 (b). Calculation of Magnetic Multipole Moment Integrals Using Translation Formulas for Slater-type Orbitals. *Pramana-J. Phys.*, 53, 727-731.

Gül, Z. S., 2006. Aşırı İnce Yapı Sabitinin Çok-Kutup Momentler Cinsinden Hesaplanması. Yüksek Lisans Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun.

Halkier, A., Klopper, W., Helgaker, T., Jorgensen, P., 1999. Basis-Set Convergence of The Molecular Electric Dipole Moment. *J. Chem. Phys.*, 111, 4424-4430.

Harrison, J.F., Lawson, D.B., 2005. Quadrupole Moments of the Alkali Dimers, Li_2 , Na_2 , and K_2 . *Int. J. Quant. Chem.*, 102, 1087-1091.

Kara, M., 1998. Moleküler Kuantum Mekaniğinde A_k ve B_k Yardımcı Moleküler İntegrallerinin Hesaplanması, Yüksek Lisans Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun.

Marion, J. B., Heald, M. A., 1980. Classical Electromagnetic Radiation, Second Edt., Academic Press, Orlando, Florida.

Maroulis, G., Thakkar, A. J., 1987. Quadrupole and Hexadecapole Moments for Molecular Nitrogen. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 20, L551-L554.

Maroulis, G., 2003. Electric Multipole Moment, Dipole and Quadrupole (Hyper) Polarizability Derivatives for $\text{HF} (X^1\Sigma^+)$. *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 633, 177-197.

Maroulis, G., 2011 (a). Charge Distribution, Electric Multipole Moments, Static Polarizability and Hyperpolarizability of Silene. *Chem. Phys. Lett.*, 505, 5-10.

Maroulis, G., 2011 (b). Electric Multipole Moments, Polarizability, and Hyperpolarizability of Xenon Dihydride (HXeH). *Theor. Chem. Acc.*, 129, 437-445.

Maynau, D., Junquera-Hernandez, J. M., Sanchez-Marin, J., 2002. Molecular Electric Quadrupole Moments Calculated with Matrix Dressed SDCl. *Chem. Phys. Lett.*, 359, 343-348.

Mulliken, R. S., Rieke, C. A., Orloff, D., Orloff, H., 1949. Formulas and Numerical Tables for Overlap Integrals. *J. Chem. Phys.*, 17, 1248-1267.

Ong, E. T., Lim, K. M., Lee, K. H., Lee, H. P., 2003. A Fast Algorithm for Three-Dimensional Potential Fields Calculation: Fast Fourier Transform on Multipoles. *J. Comput. Phys.*, 192, 244-261.

Orbay, M., 2000. Elektrik Multipol Momentlerin Teorisi ve Bazı İki Atomlu Moleküllere Uygulanması, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun.

Özbek, H., Durukanoğlu F. S., 2010. Kuantum Mekaniğine Giriş, Nobel Yayın Dağıtım Tic. Ltd. Şti., Ankara.

Özdoğan, T., 2000. Elektrik Multipol Moment Tensörlerinin Birleşik Teorisi ve Çok Atomlu Moleküllere Uygulanması. Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun.

Özdoğan, T., 2006. Unified Treatment for Arbitrary-Rank Cartesian Electric and Magnetic Multipole Moment Operators. *J. Math. Chem.*, 42, 201-214.

Pamuk, H. Ö., 1979. Kuantum Kimyasına Giriş, Temel İlkeler ve Atomların Yapısı, Karadeniz Gazetecilik ve Matbaacılık A. Ş., Trabzon.

Rabinowitz, J. R., Rein, R., 1972. Calculation of Molecular Quadrupole Moments and A Demonstration of The Importance of Overlap Densities in The Theory of Polyatomic Molecules. *Int. J. Quant. Chem.*, 6, 669-680.

Slater, J. C., 1930. Atomic Shielding Constants. *Physical Review*, 36, 57-64.

Steinborn, E. O., Ruedenberg, K., 1972. Molecular One-Electron Integrals Over Slater-Type Atomic Orbitals and Irregular Solid Spherical Harmonics. *Int. J. Quant. Chem.*, 6, 413-438.

Stoylov, S. P., Gyurova, A. Y., Bunin, V., Angersbach, A., Georgieva, R. N., Danova, S. T., 2009. Electric Dipole Moments of Escherichia Coli HB 101. *Bioelectrochemistry*, 75, 50-54.

Sundholm, D., Pyykko, P., 1985. Two-Dimensional, Fully Numerical Molecular Calculations X. Hartree-Fock Results for He_2 , Li_2 , Be_2 , HF , OH^- , N_2 , CO , BF , NO^+ ve CN^- . *Mol. Phys.*, 56, 1411-1418.

Tasi, G., Mizukami, F., Palinko, I., 1997. Analysis of Permanent Electric Dipole Moments of Aliphatic Hydrocarbon Molecules. *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 401, 21-27.

Vashalovich, D. A., Moskalev, A. N., Khersonski, V. K., 1988. Quantum Theory of Angular Momentum. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, New Jersey, Hong Kong.

Washizu, M., 2004. Equivalent Multipole-Moment Theory for Dielectrophoresis and Electrorotation in Electromagnetic Field. *Journal of Electrostatics*, 62, 15-33.

Yükçü, N., 2009. Slater Tip Orbitaller Kullanılarak Elektrik ve Manyetik Moment İntegrallerinin Çözümlemesi., Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun.

Yükçü, N., Şenlik, İ., Öztekin, E., 2011. Calculation of Electric Multipole Moment Integrals with The Different Screening Parameters via The Fourier Transform Method. *Int. J. Quant. Chem.*, DOI 10.1002/qua.23033.

Zheng, X., Zerner, M. C., 1993. Electric Multipole Moment Integrals Evaluated over Slater-type Orbitals. *Int. J. Quant. Chem.: Quantum Chemistry Symposium*, 27, 431-450.

7. EK-1: Düzenli Katı Harmoniklerin Küresel Koordinatlarda Bulunması

Program-1'deki “*noalf*” değişkeni denklem (3.6)'daki normalize olmuş bağlı Legendre fonksiyonunu temsil etmektedir. Bu programdaki “*kh[i]*” değişkeni küresel harmonikleri ifade ederken; “*cag1*”, “*cag2*” ve “*cag3*” ise sırasıyla $m>0$, $m<0$ ve $m=0$ değerlerine karşılık gelen çağırma ifadelerini, “*i*” olarak ifade edilen çağırma formülüne göre m yerine m , $-m$ ve 0 değerleri yazılarak oluşturulmaktadır. Çağırma formülünün aldığı değerleri Çizelge 3.2'de verdik ve bu çizelgede hangi l ve m değerlerinde hangi düzenli katı harmonikleri elde edeceğimizi gösterdik. Burada şöyle bir ayrıntı vardır: Eğer m değeri pozitifse $Y_l^m + Y_l^{-m}$, eğer m değeri negatifse $Y_l^m - Y_l^{-m}$ biçiminde alınarak düzenli katı harmonikler hesaplanmaktadır. “*kure1*” ve “*kure2*” ile adlandırılan değişkenler de sırasıyla küresel harmoniklerin toplanması ve farkları durumlarını temsil eder. “*kure11*” ifadesi, “*kure1*”deki ϕ değerini limit komutuyla $-\phi$ 'ye dönüşümünü sağlayarak “*kure1*”in eşleneğini göstermektedir. “*kure1abs*” ise küresel harmoniklerin toplanmasıyla elde edilen düzenli katı harmonikleri vermektedir. “*kure22*” ifadesi, “*kure2*”deki ϕ değerini limit komutuyla $-\phi$ 'ye dönüşümünü sağlayarak “*kure2*”in eşleneğini göstermektedir. “*kure2abs*” ise küresel harmoniklerin farklarından elde edilen düzenli katı harmonikleri vermektedir. Kısacası Program-1, küresel koordinatlarda düzenli katı harmoniklerin bulunmasını sağlamaktadır.

Program-2'de, düzenli katı harmoniklerin kartezyen koordinatlardaki ifadelerindeki katsayıları ve x , y , z 'nin kuvvetlerini gösteren kısımları veri olarak girdik. Bu verileri FileNameJoin komutuyla belirtilen adrese Mathematica dosyası olarak yazdırdık. Program-3'te ise kayıtlı olan bu dosyadan verilen l ve m değerlerine göre düzenli katı harmoniklerin kartezyen koordinatlardaki ifadelerini okuyarak (normalizasyon katsayısı, katsayı, x 'in üssü, y 'nin üssü, z 'nin üssü, ...) biçiminde print komutuyla ekrana yazdırılmaktadır. Ayrıca dosya açma ve yazma şeklinde oluşturulan programlarda kullanılan çağırma formülünden faydalanarak hangi düzenli katı harmoniğin hangi bileşenin hangi katsayısının ne olacağını print komutuyla ekrana yazdırarak istenen bileşen kolayca görülebilmektedir.

Program-1

```

For[l=0,l<5,l++,
  For[m=-1,m<l+1,m++,
    noalf=(1/((2^l)*l!))*(((2*l+1)*(1-
Abs[m]))/(2*(1+Abs[m]))^(1/2))*((1-
x^2)^(Abs[m]/2))*D[((x^2)-1)^l,{x,l+Abs[m]}}];
    x=Cos[θ];
    i=l*(l+1)+m+1;
    If[m<0,kh[i]=((-1)^m)*((-
1)^Abs[m])*(1/(2*Pi))^(1/2))*noalf*(e^(-i*Abs[m]*φ)),
    kh[i]=((-1)^m)*(1/(2*Pi))^(1/2))*noalf*(e^(i*m*φ))]]];
For[l=0,l<5,l=l+1,
  cag3=l*(l+1)+1;
  kure3=kh[cag3];
  Print["sayı=",cag3,"          l=",l,"          m=",0,"          dkh
=",FullSimplify[kure3]];
  For[m=1,m<=l,m=m+1,
    cag1=l*(l+1)+m+1;
    cag2=l*(l+1)-m+1;
    kure1=(kh[cag1]+kh[cag2]);
    kure11=Limit[kure1,φ→-φ];
    kure1abs=Sqrt[kure1*kure11/2];
    Print["sayı=",cag1,"    l=",l,"    m=",m,"    ile","    l=",l,"
m=", -m,"    dkh(toplam)=",FullSimplify[kure1abs]];
    kure2=(kh[cag1]-kh[cag2]);
    kure22=Limit[kure2,φ→-φ];
    kure2abs=Sqrt[kure2*kure22/2];
    Print["sayı=",cag2,"          l=",l,"          m=",m,"          ile","
l=",l,"          m=", -m,"    dkh(fark)=",FullSimplify[kure2abs]]];

```

Program-2

```

Array[orb,25];
fname=FileNameJoin[{"C:\\Documents and
Settings\\Administrator\\Desktop/dkh.nb"}];
OpenWrite[fname];
orb[1]={ (1/(4*Pi))^(1/2),1,0,0,0};
orb[2]={ ((3/(4*Pi))^(1/2)),1,1,0,0};
orb[3]={ ((3/(4*Pi))^(1/2)),1,0,0,1};
orb[4]={ ((3/(4*Pi))^(1/2)),1,0,1,0};
orb[5]={ ((15/(4*Pi))^(1/2)),1,1,1,0};
orb[6]={ ((15/(4*Pi))^(1/2)),1,1,0,1};
orb[7]={ ((5/(16*Pi))^(1/2)),2,0,0,2,-1,2,0,0,-1,0,2,0};
orb[8]={ ((15/(4*Pi))^(1/2)),1,0,1,1};
orb[9]={ ((15/(16*Pi))^(1/2)),1,2,0,0,-1,0,2,0};
orb[10]={ ((35/(32*Pi))^(1/2)),1,3,0,0,-3,1,2,0};

```

```

orb[11]={((105/(4*Pi))^(1/2)),1,1,1,1};
orb[12]={((21/(32*Pi))^(1/2)),4,1,0,2,-1,3,0,0,-1,1,2,0};
orb[13]={((63/(16*Pi))^(1/2)),(2/3),0,0,3,-1,2,0,1,-
1,0,2,1};
orb[14]={((21/(32*Pi))^(1/2)),4,0,1,2,-1,2,1,0,-1,0,3,0};
orb[15]={((105/(16*Pi))^(1/2)),1,2,0,1,-1,0,2,1};
orb[16]={((35/(32*Pi))^(1/2)),3,2,1,0,-1,0,3,0};
orb[17]={ (3/4)*((35/(Pi))^(1/2)),1,3,1,0,-1,1,3,0};
orb[18]={ (3/8)*((70/(Pi))^(1/2)),1,3,0,1,-3,1,2,1};
orb[19]={ (3/4)*((5/(Pi))^(1/2)),6,1,1,2,-1,3,1,0,-1,1,3,0};
orb[20]={ (9/8)*((10/(Pi))^(1/2)),(4/3),1,0,3,-1,3,0,1,-
1,1,2,1};
orb[21]={ (9/16)*((1/(Pi))^(1/2)),(8/3),0,0,4,-8,2,0,2,-
8,0,2,2,1,4,0,0,2,2,2,0,1,0,4,0};
orb[22]={ (9/8)*((10/(Pi))^(1/2)),(4/3),0,1,3,-1,2,1,1,-
1,0,3,1};
orb[23]={ (3/8)*((5/(Pi))^(1/2)),-1,4,0,0,1,0,4,0,6,2,0,2,-
6,0,2,2};
orb[24]={ (3/8)*((70/(Pi))^(1/2)),3,2,1,1,-1,0,3,1};
orb[25]={ (3/16)*((35/(Pi))^(1/2)),1,4,0,0,1,0,4,0,-
6,2,2,0};
For[l=0,l<5,l++,
  For[m=-1,m<=1,m++,
    i=l*(l+1)+m+1;
    s=orb[i];
    Print["l=",l,"  m=",m,"    dkh= ",s];
    Write[fname,orb[i]]];
Close[fname]

```

Program-3

```

dosya=OpenRead["C:\Documents and
Settings\Administrator\Desktop/dkh.nb"];
orb=ReadList[dosya, Expression];
l=2;
m=-1;
i=l*(l+1)+m+1;
s=orb[[i]];
Print[orb[[i]]];
Print[s[[4]]];
Close[dosya]

```

8. EK-2: Dört-kutup, Sekiz-kutup ve Onaltı-kutup Moment İşlemcilerinin Hesaplanması

Aşağıdaki program denklem (3.16), (3.17) ve (3.18)'deki ifadeler kullanılarak dört-kutup, sekiz-kutup ve onaltı-kutup için moment işlemcilerininin kartezyen koordinatlardaki bileşenlerini bulmaktadır. Burada “*quad*” dört-kutup, “*ocpole*” sekiz-kutup ve “*hexapole*” onaltı-kutup momentlerin tensör işlemcilerini temsil eden değişkenlerdir.

Program-4

```

rkare=x^2+y^2+z^2;
For [ i=1 , i≤3 , i=i+1 ,
    If[i==1,ii=x,If[i==2,ii=y,ii=z]] ;
    For [ j=i , j≤3 , j=j+1 ,
        If[j==1,jj=x,If[j==2,jj=y,jj=z]] ;
        If[i==j,delta1=1,delta1=0] ;
        quadi,j=(3*ii*jj-rkare*delta1)/2;
    Print["Quadrupole",ii,jj," = ",FullSimplify[quadi,j]] ]
;

For [ i=1 , i≤3 , i=i+1 ,
    If[i==1,ii=x,If[i==2,ii=y,ii=z]] ;
    For [ j=i , j≤3 , j=j+1 ,
        If[j==1,jj=x,If[j==2,jj=y,jj=z]] ;
        If[i==j,delta1=1,delta1=0] ;
        cat2=5*ii*jj ;
        For [ k=j , k≤3 , k=k+1 ,
            If[k==1,kk=x,
                If[k==2,kk=y,kk=z]] ;
                If[i==k,delta2=1,delta2=0] ;
        If[k==j,delta3=1,delta3=0] ;
        octoi,j,k=(cat2*kk-ii*rkare*delta3-jj*rkare*delta2-
        kk*rkare*delta1)/2 ;
        ocpolek=FullSimplify[octoi,j,k];
        Print["Octopole ",ii,jj,kk," = ",ocpolek]]] ;

For [ i=1 , i≤3 , i=i+1 ,
    If[i==1,ii=x,If[i==2,ii=y,ii=z]] ;
    For [ j=i , j≤3 , j=j+1 ,
        If[j==1,jj=x,If[j==2,jj=y,jj=z]] ;
        If[i==j,delta1=1,delta1=0] ;
        For [ k=j , k≤3 , k=k+1 ,
            If[k==1,kk=x,
```



```

        If[k==2, kk=y, kk=z]] ;
        If[i==k, delta2=1, delta2=0] ;
If[k==j, delta3=1, delta3=0] ;
    For [ l=k , l<3 , l=l+1 ,
        If[l==1, ll=x,
            If[l==2, ll=y, ll=z]] ;
            If[i==l, delta4=1, delta4=0] ;
                If[l==j, delta5=1, delta5=0] ;
                    If[l==k, delta6=1, delta6=0] ;
                        cat1=35*ii*jj*kk*ll;
        cat2=5*rkare*(ii*jj*delta6+jj*kk*delta4+kk*ll*delta1+i
i*ll*delta3+ii*kk*delta5+jj*ll*delta2);

cat3=(rkare^2)*(delta4*delta6+delta2*delta5+delta4*delta3);
hexapolek,1=FullSimplify[(cat1-cat2+cat3)/8];
Print["Hexadecopole", ii, jj, kk, ll, " = ", hexapolek,1]]]]

```

9. EK-3: Yardımcı Fonksiyonlar

Eliptik koordinatlar kullanılarak, moleküler integrallerin hesaplanmasında, integral sonuçları yardımcı fonksiyonlar (auxiliary function) cinsinden ifade edilir. Bunlar A_k ve B_k yardımcı fonksiyonlardır. Bu yardımcı fonksiyonlar

$$A_k(p) = \int_1^{\infty} \xi^k e^{-p\xi} d\xi$$

$$B_k(pt) = \int_{-1}^1 \eta^k e^{-pt\eta} d\eta$$

ile tanımlanır (Mulliken ve ark., 1949).

$A_\nu(\sigma, \alpha)$ integralinin genel şekli,

$$A_\nu(\sigma, \alpha) = \int_{\sigma}^{\infty} x^\nu e^{-\alpha x} dx \quad (\text{Re } \alpha > 0)$$

olarak verilmektedir (Kara, 1998). $A_\nu(\sigma, \alpha)$ integraline n katlı kısmi integrasyon yöntemi uygulandığında

$$A_n(\sigma, \alpha) = \frac{e^{-\sigma\alpha}}{\alpha} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{(n-k)!} \frac{\sigma^{n-k}}{\alpha^k}$$

ifadesi elde edilir.

A_k yardımcı fonksiyonlarını bulan Program-5'te $\sigma = 1$ özel değeri için

$$A_n(1, \alpha) = \frac{n! e^{-\alpha}}{\alpha^{n+1}} \sum_{k=0}^n \frac{\alpha^k}{k!}$$

kullanılmaktadır. Bu program için, $\sigma \geq 0$ ve $\nu = n$ alındığında, $A_n(1, \alpha)$ için tekrarlama bağıntısı olan

$$A_{\nu+1}(1, \alpha) - A_\nu(1, \alpha) = \left[(\nu+1) A_\nu(1, \alpha) - \nu A_{\nu-1}(1, \alpha) \right] / \alpha$$

ifadeler kullanılmıştır. Program-5 ve Program-6'daki “aux” değişkeni $A_n(1, \alpha)$ yardımcı fonksiyonu temsil etmektedir.

Kaynakta (Kara, 1998) , $\alpha = 0$ alındığında:

$$B_n(0) = \begin{cases} 2/(n+1) & n, \text{ çift} \\ 0 & n, \text{ tek} \end{cases}$$

verilmektedir. Bu durumlar, Program-7 ve Program-8'de kullanılmaktadır. Diğer durumlar ise,

$$B_n(\alpha) = \begin{cases} 2 \sum_{k=0(2)\infty} \frac{\alpha^k}{k!(k+n+1)}, & (0.01 \leq \alpha < 8), \quad n \text{ çift ise,} \\ -2 \sum_{k=1(2)\infty} \frac{\alpha^k}{k!(k+n+1)}, & (0.01 \leq \alpha < 8), \quad n \text{ tek ise,} \end{cases}$$

olarak verilmektedir. Program-7 ve Program-8'de kritik değerler ele alınarak if komutuyla karşılaştırmalar yapılmıştır.

n'nin çift değerleri için,

$$B_n(\alpha) = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2k}}{(2k)!(2k+n+1)}$$

ve tek değerleri için,

$$B_n(\alpha) = -2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2k+1}}{(2k+1)!(2k+n+2)}$$

alınmaktadır.

$A_n(1, \alpha)$ yardımcı fonksiyonlarını bulan program Program-5'te, $B_n(\alpha)$ yardımcı fonksiyonlarını bulan program Program-7'de verilmektedir. $n < 17$ ve $n > 17$ için $A_n(1, \alpha)$ 'nin grafikleri Program-6 yardımıyla çizilebilmektedir. n'nin çift ve tek değerleri için ise $B_n(\alpha)$ yardımcı moleküler integralinin grafiğini çizdiren program Program-8'de verilmektedir.

Program-5

```

n1=28;
x=8.8;
a0=1/x;
a1=(1+x)/(x^2);
For[r=2,r≤n1,r=r+1,
  a=a1+(r*a1-(r-1)*a0)/x;
  a0=a1;
  a1=a];
top=0;
For[r=0,r≤n1,r=r+1,
  terim=(x^r)/r!;
  top=top+terim];
aux=((n1)!*Exp[-x]/(x^(n1+1)))*top;
Print["a=",N[aux,25]]

```

Program-6

```

f[n1_,y0_]:=Module[{x=y0},
  a0=1/x;
  a1=(1+x)/(x^2);
  For[r=2,r≤n1,r=r+1,
    a=a1+(r*a1-(r-1)*a0)/x;
    a0=a1;
    a1=a];
  top=0;
  For[r=0,r≤n1,r=r+1,
    terim=(x^r)/r!;
    top=top+terim];
  aux=((n1)!*Exp[-x]/(x^(n1+1)))*top;
  x=aux];
Plot[{f[6,y0],f[8,y0],f[10,y0],f[12,y0],f[14,y0]},{y0,0,4},
  AspectRatio→0.5,TextStyle→{FontFamily→"Times",FontSize→12},
  AxesLabel→{"α","An(1,α)"}]
Plot[{Size=12,f[18,y0],f[20,y0],f[23,y0],f[27,y0],f[29,y0]},{y0,0,4},
  AspectRatio→0.5,TextStyle→{FontFamily→"Times",FontSize→12},
  AxesLabel→{"α","An(1,α)"}]
Plot[{Size=12,f[35,y0],f[50,y0],f[55,y0],f[60,y0],f[70,y0]},{y0,0,4},
  AspectRatio→0.5,TextStyle→{FontFamily→"Times",FontSize→12},
  AxesLabel→{"α","An(1,α)"}]

```

Program-7

```

f[n_,y0_]:=Module[{x=y0},
  epsilon=100;
  top=0;
  fark=0;
  k=0;
  If[(n/2)==IntegerPart[n/2],
    If[x==0.,top=2/(n+1),
      If[Or[n<8,x<8.],
        While[epsilon==100,
          top=top+(2*(x^k))/((k!)*(k+n+1));
          eps=top-fark;
          If[eps<=10^(-20),epsilon=101];
          fark=top;
          k=k+2],
        While[epsilon==100,
          top=top+2*((x^(2*k))/((2*k)!*(2*k+n+1)));
          eps=top-fark;
          If[eps<=10^(-20),epsilon=101];
          fark=top;
          k=k+1]]];
  If[(n/2)≠IntegerPart[n/2],
    If[x==0.,top=0,
      If[Or[n<8,x<8.],
        While[epsilon==100,
          top=top-2*(x^k)/((k!)*(k+n+1));
          eps=top-fark;
          If[Abs[eps]<=10^(-20),epsilon=101];
          fark=top;
          k=k+2],
        While[epsilon==100,
          top=top-2*((x^(2*k+1))/((2*k+1)!*(2*k+n+2)));
          eps=top-fark;
          If[Abs[eps]<=10^(-20),epsilon=101];
          fark=top;
          k=k+1]]];
  x=top];
Print["b=",N[f[23,10.6]]]

```

Program-8

```

f[n_,y0_]:=Module[{x=y0},
  epsilon=100;
  top=0;
  fark=0;
  k=0;

```

```

If[ (n/2)==IntegerPart[n/2] ,
  If[x==0. , top=2/(n+1) ,
    If[Or[n<8,x<8.] ,
      While[epsilon==100,
        top=top+(2*(x^k))/((k!)*(k+n+1)) ;
        eps=top-fark;
        If[eps≤10^(-20) , epsilon=101] ;
        fark=top;
        k=k+2] ,
      While[epsilon==100,
        top=top+2*((x^(2*k))/((2*k)!*(2*k+n+1))) ;
        eps=top-fark;
        If[eps≤10^(-20) , epsilon=101] ;
        fark=top;
        k=k+1]]]] ;
If[ (n/2)≠IntegerPart[n/2] ,
  If[x==0. , top=0 ,
    If[Or[n<8,x<8.] ,
      While[epsilon==100,
        top=top-2*(x^k)/((k!)*(k+n+1)) ;
        eps=top-fark;
        If[Abs[eps]≤10^(-20) , epsilon=101] ;
        fark=top;
        k=k+2] ,
      While[epsilon==100,
        top=top-2*((x^(2*k+1))/((2*k+1)!*(2*k+n+2))) ;
        eps=top-fark;
        If[Abs[eps]≤10^(-20) , epsilon=101] ;
        fark=top;
        k=k+1]]]] ;
x=top] ;
Plot[{f[18,y0],f[20,y0],f[24,y0],f[34,y0]},{y0,1,30},Aspect
Ratio→0.5,TextStyle→{FontFamily→"Times",FontSize→12},AxesL
abel→{"α","Bn(α)"}]
Plot[{f[19,y0],f[27,y0],f[45,y0],f[55,y0]},{y0,1,30},Aspect
Ratio→0.5,TextStyle→{FontFamily→"Times",FontSize→12},AxesL
abel→{"α","Bn(α)"}]
Plot[{f[0,y0],f[2,y0],f[4,y0],f[6,y0],f[8,y0],f[10,y0],f[12
,y0],f[14,y0]},{y0,0,10},AspectRatio→0.5,TextStyle→{FontFa
mily→"Times",FontSize→12},AxesLabel→{"α","Bn(α)"}]
Plot[{f[1,y0],f[3,y0],f[5,y0],f[7,y0],f[9,y0],f[11,y0],f[13
,y0],f[15,y0],f[17,y0]},{y0,0,10},AspectRatio→0.5,TextStyl
e→{FontFamily→"Times",FontSize→12},AxesLabel→{"α","Bn(α)"}
]

```

10. ÖZGEÇMİŞ

1985 yılında Bartın’da doğdu. İlk ve orta öğrenimini Bartın’da tamamladı. 2004 yılında Ondokuz Mayıs Üniversitesi Orta Öğretim Fizik Öğretmeliği Bölümüne girdi. Aynı bölümden 2009 yılında mezun oldu ve aynı yıl Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalında yüksek lisansa başladı ve halen devam etmektedir. Aynı zamanda 2009 yılında Ondokuz Mayıs Üniversitesi Bilgisayar ve Öğretim Teknolojileri Eğitimi Bölümüne girdi ve şuan 4. sınıfı okumaktadır.