

İki Merkezli EFG İntegrallerinin Guseinov Açılım Yöntemi İle Hesaplanması

Erhan AKIN¹, Ülfet ATAV¹, Ayhan ÖZMEN¹, Hüseyin YÜKSEL¹

Özet: Bu çalışmada iki atomlu moleküllerde, molekülün herhangi bir çekirdeğinde molekül elektronları tarafından oluşturulan elektrik alan gradyentini hesaplamada karşılaşılan iki merkezli elektrik alan gradyenti integrallerinin hesabı için Guseinov'un Slater-tipli atom orbitallerini bir merkezden başka bir merkeze taşıma yöntemi kullanılarak seri açılımlı analitik ifadeler elde edildi. Bu analitik ifadelerden integral değerleri bilgisayarla hesaplandı. Sonuçların literatürde bulunan değerlerle uyum içinde olduğu görüldü.

Anahtar Kelimeler: Guseinov Açılım Yöntemi, Elektrik Alan Gradyenti

The Evaluation of Two Center EFG Integrals by Using Guseinov Expansion Method

Abstract: In this study, analytical expressions for the two center electric field gradient integrals which arise in the calculation of the electric field gradient created by the molecular electrons on one the any atomic nuclei of diatomic molecules have been obtained by Guseinov's method for series expansion of an STO about a displaced center. The analytical expressions for electric field gradient integrals have been evaluated on a computer and the results have been found in good agreement with the literature.

Key Words: Guseinov Expansion Method, Electric Field Gradient

Giriş

Aşırı ince yapı etkileri, elektronik enerji düzeylerini yaran ve enerji düzeylerini yarmadan hafifçe kaymalarına neden olanlar olmak üzere iki sınıfa ayrılabilir. Enerji düzeylerinin kaymaları izotop etkileri sonucunda ortaya çıkar. Enerji düzeylerinin yarılmasına neden olan ikinci tip aşırı ince yapı etkileri ise elektronların çekirdekte oluşturdukları elektromanyetik alanla çekirdeğin elektromanyetik çok kutup momentlerinin etkileşmesi sonucunda ortaya çıkar. Bu etkileşmelerden biri de çekirdeğin küresel yük dağılımından ayrılması sonucu ortaya çıkan elektrik kvadrupol momenti ile atom veya molekül elektronlarının bu çekirdek üzerinde oluşturduğu elektrik alan gradyenti (efg) arasındaki etkileşmedir. Bu etkileşmeye karşılık gelen operatör;

¹ Selçuk Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 42049 KONYA

$$\hat{H} = \frac{eQ}{2I(2I-1)} [q_{xx}\hat{I}_x^2 + q_{yy}\hat{I}_y^2 + q_{zz}\hat{I}_z^2] \quad (1)$$

ile verilir [1]. Burada e , elektron yükü; Q , çekirdeğin kuadrupol momenti; q_{xx}, q_{yy}, q_{zz} elektrik alan gradyenti tensörünün indirgenemez bileşenleri; I , çekirdeğin spin kuantum sayısı; $\hat{I}_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z$ ise çekirdeğin spin açısal momentum operatörünün bileşenleridir.

Çekirdek etrafındaki elektronların oluşturduğu elektrik alanı ekstenel simetriye sahip olduğunda $q_{xx} = q_{yy} = -\frac{1}{2}q_{zz}$ olur. Bu durumda çekirdek etkileşme enerjisi;

$$E_{M_I} = \frac{eQq_{zz}}{4I(2I-1)} [3M_I^2 - I(I+1)] \quad (2)$$

olur. Burada eQq_{zz} çarpımı çekirdek kuadrupol çiftlenim sabiti (NQCC); M_I ise çekirdeğin spin magnetik kuantum sayısıdır. (2) eşitliğinden görüldüğü gibi, elektrik alan gradyenti ve çekirdeğin spini bilindiğinde çekirdek kuadrupol etkileşmesi için deneysel sonuçlar kullanılarak çekirdeğin kuadrupol momenti hesaplanabilir. Bu nedenle elektrik alan gradyentinin hesaplanması, çekirdek kuadrupol momentinin hesaplanmasında büyük önem taşır.

Bir molekülün a çekirdeği üzerinde molekülün herhangi bir elektronunun oluşturduğu elektrik alan gradyentine karşılık gelen operatör atomik birimlerde;

$$\hat{q}_a^{ij} = \frac{3(X_{ia} - X_{ie})(X_{ja} - X_{je}) - \delta_{ij}r_{ae}^2}{r_{ae}^5} \quad (3)$$

ile verilir [2]. Burada r_{ae} , a çekirdeği ile elektron arasındaki uzaklık olup elektron veya çekirdeğin koordinat bileşenlerini belirleyen i ve j indisleri $-1 \leq i \leq 1$ ve $-1 \leq j \leq 1$ şeklinde değerler alır. Buna göre $X_{1a} = X_a$, $X_{-1a} = Y_a$, $X_{0a} = Z_a$, $X_{1e} = x_e$, $X_{-1e} = y_e$, $X_{0e} = z_e$, sırasıyla a çekirdeğinin ve elektronun kartezyen koordinatlarıdır. a çekirdeğinin, koordinat sisteminin orijinine yerleştiği düşünülürse $X_a = Y_a = Z_a = 0$ olur. Bu durumda a çekirdeğinde merkezlenen \hat{q}_a^{zz} operatörü;

$$\hat{q}_a^{zz} = \frac{3z_e^2 - r_{ae}^2}{r_{ae}^5} \quad (4)$$

şeklini alır ve bu operatör reel küresel harmonikler cinsinden;

$$\hat{q}_a^{zz} = 2\sqrt{\frac{4\pi}{5}} \frac{S_{20}(\theta, \varphi)}{r_{ae}^3} \quad (5)$$

yazılabilir.

Bir Çekirdekte Merkezlenmiş Slater-tipli Atom Orbitallerinin Guseinov Yöntemi İle Başka Bir Çekirdeğe Taşınması

Reel Slater-tipli atom orbitalleri (STO's);

$$\chi_{n\ell m}(\zeta, \vec{r}) = \frac{(2\zeta)^{n+1/2}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\zeta r} S_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (6)$$

biçiminde tanımlanır [3]. Burada $n\ell m$, kuantum sayılarını; ζ , perdeleme sabitini; $S_{\ell m}(\theta, \varphi)$ ise reel küresel harmonikleri göstermektedir.

Guseinov yöntemine [4,5] göre, b çekirdeğinde merkezlenmiş bir Slater-tipli atom orbitali;

$$\chi_{n_b \ell_b m_b}(\zeta_b, \vec{r}_b) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\nu=0}^{\mu-1} \sum_{\sigma=-\nu}^{\nu} V_{\mu\nu\sigma, n_b \ell_b m_b}^N(\zeta_b, \zeta_b; \vec{R}_{ab}) \chi_{\mu\nu\sigma}(\zeta_b, \vec{r}_a) \quad (7)$$

şeklinde a merkezinde merkezlenmiş Slater-tipli atom orbitalleri cinsinden seriye açılabilir. Burada N değeri, μ baş kuantum sayısının serinin yakınsamasına karşılık gelen son değeridir. V katsayılarına ise taşıma katsayıları denir ve açık ifadesi;

$$V_{n\ell m, n'\ell' m'}^N(\zeta, \zeta'; \vec{R}_{ab}) = \sum_{\mu=\ell'+1}^N \Omega_{n\mu}^{\ell} (N) S_{\mu\ell m, n'\ell' m'}(\zeta, \zeta'; \vec{R}_{ab}) \quad (8)$$

şeklinindedir. Burada $S_{\mu\ell m, n'\ell' m'}(\zeta, \zeta'; \vec{R}_{ab})$ ler overlap integralleridir [6]. Ω katsayıları ise;

$$\Omega_{nk}^{\ell} (N) = \sum_{n'=\max(n,k)}^N \omega_{n'n}^{\ell} \omega_{n'k}^{\ell} \quad (9)$$

şeklinde tanımlanır. Bu ifadedeki ω katsayıları [7], üstel dalga fonksiyonunun açılım katsayıları olup $F_m(n)$ ile gösterilen binom katsayıları cinsinden;

$$\omega_{n'n}^{\ell} = (-1)^{n+\ell+1} [F_{n+\ell+1}(n'+\ell+1) F_{n-\ell-1}(n'-\ell-1) F_{n-\ell-1}(2n)]^{1/2} \quad (10)$$

şeklinde tanımlanır. Guseinov yöntemi kullanılarak yapılacak çok merkezli integrallerin hesaplanmasında ω katsayılarını hesaplamak için;

$$\omega_{n'n}^{\ell} = \frac{\sqrt{(n'-\ell-1)(n'+\ell+1)}}{n'-n} \omega_{n'-1n}^{\ell} \quad (11a)$$

$$\omega_{n'n}^{\ell} = -\frac{(n'-n+1)}{(n+\ell+1)(n-\ell-1)} \sqrt{2n(2n-1)} \omega_{n'n-1}^{\ell} \quad (11b)$$

$$\omega_{n'n}^{\ell} = -\frac{(n-\ell)}{(n+\ell+1)} \sqrt{\frac{n'+\ell+1}{n-\ell}} \omega_{n'n}^{\ell-1} \quad (11c)$$

ile verilen tekrarlama bağıntılarını kullanmak önemli derecede kolaylık sağlar [8].

STO ları İçeren Tek Merkezli EFG İntegrallerinin Analitik Olarak Hesaplanması

STO ları içeren tek merkezli efg integralleri;

$$\bar{q}_{aaa} = \int_{\tau} \chi_{n_a \ell_a m_a}(\zeta_a, \vec{r}_a) \hat{q}_a^{ZZ} \chi_{n'_a \ell'_a m'_a}(\zeta'_a, \vec{r}_a) d\tau \quad (12)$$

biçiminde tanımlanır.

Aynı merkezli iki STO nun çarpımı;

$$\begin{aligned} \chi_{n\ell m}(\zeta, \vec{r}) \chi_{n'\ell' m'}(\zeta', \vec{r}) &= \sqrt{\frac{(2n)!(2n')!}{(2n)!(2n')!}} \frac{z^{3/2}}{2^{n+n'-1/2}} (1+t)^{n+1/2} (1-t)^{n'+1/2} \\ &\times \sum_{\ell'=\ell-1}^{\ell+\ell'} (2) \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \sqrt{\frac{2\ell'+1}{4\pi}} C^{\ell' |m'|}(\ell m, \ell' m') A_{mm'}^{m'} \chi_{n'\ell' m'}(z, \vec{r}) \end{aligned} \quad (13)$$

şeklinde ayrı ayrı STO ların toplamı olarak ifade edilebilir [8]. Bu ifade ile (5) eşitliğinde verilen efg operatörü, (12) eşitliğinde yerine yazılarak STO ları içeren tek merkezli elektrik alan gradyentinin beklenen değeri için;

$$\bar{q}_{aaa} = 2z^3 \frac{(n+n'-3)!}{\sqrt{(2n)!(2n')!}} (1+t)^{n+1/2} (1-t)^{n'+1/2} C^{20}(\ell m, \ell' m') A_{mm'}^0 \quad (14)$$

analitik ifadesi bulunur. Burada $z = \zeta_a + \zeta'_a$ ve $t = (\zeta_a - \zeta'_a) / (\zeta_a + \zeta'_a)$ şeklinde tanımlanmıştır.

STO ları İçeren İki Merkezli EFG İntegrallerinin Analitik Olarak Hesaplanması

STO ları içeren iki merkezli efg integralleri;

$$\bar{q}_{baa} = \int_{\tau} \chi_{n_b \ell_b m_b}(\zeta_b, \vec{r}_b) \hat{q}_a^{ZZ} \chi_{n_a \ell_a m_a}(\zeta_a, \vec{r}_a) d\tau \quad (15)$$

$$\bar{q}_{aab} = \int_{\tau} \chi_{n_a \ell_a m_a}(\zeta_a, \bar{r}_a) \hat{q}_a^{ZZ} \chi_{n_b \ell_b m_b}(\zeta_b, \bar{r}_b) d\tau \quad (16)$$

ve

$$\bar{q}_{bab} = \int_{\tau} \chi_{n_b \ell_b m_b}(\zeta_b, \bar{r}_b) \hat{q}_a^{ZZ} \chi_{n'_b \ell'_b m'_b}(\zeta'_b, \bar{r}'_b) d\tau \quad (17)$$

şeklinde olabilir. EFG operatörünün hermitik olması nedeniyle (15) ve (16) integralleri özdeşdir. Bu durumda (16) ve (17) ile verilen iki tip iki merkezli efg integrali vardır.

\bar{q}_{aab} İntegralinin Analitik Olarak Hesaplanması

(16) ifadesi ile tanımlanan integralde $\chi_{n_b \ell_b m_b}(\zeta_b, \bar{r}_b)$ Slater-tipli atom orbitali, (7) eşitliği ile verilen Guseinov'un taşıma yöntemi kullanılarak a çekirdeğine taşınabilir. Bu durumda (16) ifadesi;

$$\bar{q}_{aab} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\nu=0}^{\mu-1} \sum_{\sigma=-\nu}^{\nu} V_{\mu\nu\sigma, n_b \ell_b m_b}^N(\zeta_b, \zeta_b; \bar{R}_{ab}) \int_{\tau} \chi_{n_a \ell_a m_a}(\zeta_a, \bar{r}_a) \hat{q}_a^{ZZ} \chi_{\mu\nu\sigma}(\zeta_b, \bar{r}_a) d\tau \quad (18)$$

şeklini alır. Bu ifadede görülen integraller artık tek merkezli efg integralleri olup tek merkezli efg integralinin (14) eşitliği ile verilen analitik çözümü kullanılırsa;

$$\bar{q}_{aab} = 2z^3 \frac{(1+t)^{n_a+1/2}}{\sqrt{(2n_a)!}} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\nu=s}^{\ell_a+2} {}^{(2)}V_{\mu\nu m_a, n_b \ell_b m_b}^N(\zeta_b, \zeta_b; \bar{R}_{ab}) \times C^{20}(\ell_a m_a, \nu m_a) F(\mu, n_a, t) \quad (19)$$

elde edilir ($z = \zeta_a + \zeta_b$, $t = (\zeta_a - \zeta_b)/(\zeta_a + \zeta_b)$). Burada $s = \max(\ell_a - 2, m_a)$ olup;

$$F(\mu, n_a, t) = \frac{(1-t)^{\mu+1/2} (n_a + \mu - 3)!}{\sqrt{(2\mu)!}} \quad (20)$$

olarak tanımlanmıştır. \bar{q}_{aab} integrallerinin bilgisayar ile hesaplanmalarında $F(\mu, n_a, t)$ fonksiyonunun;

$$F(\mu, n_a, t) = \frac{(1-t)(n + \mu - 3)}{\sqrt{(2\mu)(2\mu - 1)}} F(\mu - 1, n_a, t) \quad (21)$$

tekrarlama bağıntısının kullanılması önemli derecede kolaylık sağlar [8].

\bar{q}_{bab} İntegralinin Analitik Olarak Hesaplanması

(17) ifadesi ile tanımlanan integralde (13) ifadesi kullanılırsa;

$$\bar{q}_{bab} = \sqrt{\frac{(2n'')!}{(2n_b)!(2n'_b)!}} \frac{z^{3/2}}{2^{n_b+n'_b+1/2}} (1+t)^{n_b+1/2} (1-t)^{n'_b+1/2} \times \sum_{\ell''=\ell_b-\ell'_b}^{\ell_b+\ell'_b} {}^{(2)}C^{\ell'' | m''} \sqrt{\frac{2\ell''+1}{5}} C^{\ell'' | m''}(\ell_b m_b, \ell'_b m'_b) A_{m'' m''}^{m''} \int_{\tau} \hat{q}_a^{ZZ} \chi_{n'' \ell'' m''}(z, \bar{r}_b) d\tau \quad (22)$$

elde edilir. Burada $n'' = n_b + n'_b - 1$, $z = \zeta_b + \zeta'_b$ ve $t = (\zeta_b - \zeta'_b)/(\zeta_b + \zeta'_b)$ olarak tanımlanmıştır. Bu ifadede görülen Slater-tipli atom orbitali, (7) ifadesi ile verilen Guseinov'un taşıma yöntemi kullanılarak a çekirdeğine taşınabilir. Bu işlem yapıldıktan sonra (14) eşitliği ile verilen tek merkezli efg integralinin analitik çözümü kullanılırsa \bar{q}_{bab} integralinin analitik çözümü;

$$\bar{q}_{bab} = 2 \sqrt{\frac{(2n'')!}{(2n_b)!(2n'_b)!}} \frac{z^3}{2^{n_b+n'_b-2}} (1+t)^{n_b+1/2} (1-t)^{n'_b+1/2}$$

$$\times \sum_{\ell''=\ell_b-\ell'_b}^{\ell_b+\ell'_b} (2) \sum_{m'=-\ell''}^{\ell''} \sqrt{\frac{2\ell''+1}{5}} C^{\ell''|m'} (\ell_b m_b, \ell'_b m'_b) A_{mm'}^{m''} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mu=3}^N V_{\mu 20, n' \ell'' m''}^N (z, z; \bar{R}_{ab}) F(\mu) \quad (23)$$

olarak elde edilir. Burada;

$$F(\mu) = \frac{2^\mu (\mu - 2)!}{\sqrt{(2\mu)!}} \quad (24)$$

şeklinde tanımlanmış olup \bar{q}_{bab} integrallerinin bilgisayar ile hesaplamalarında;

$$F(\mu) = \frac{2(\mu - 2)}{\sqrt{(2\mu)(2\mu - 1)}} F(\mu - 1) \quad (25)$$

tekrarlama bağıntısının kullanılması önemli derecede kolaylık sağlar [8].

Bilgisayar Hesaplamaları

İki merkezli elektrik alan gradyenti integrallerinde kullanılacak STO lar;

$$\chi_{200}(0.7075, \bar{r}_b) \quad (26)$$

$$\chi_{320}(7, \bar{r}_a) \quad (27)$$

şeklinde seçilirse ($R_{ab} = 3.015 a.b.$), (19) eşitliği ile verilen analitik çözüm;

$$\bar{q}_{aab} = 275.648 \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\nu=0}^4 (2) V_{\mu \nu 0, 200}^N (0.7075, 0.7075; \bar{R}_{ab}) C^{20} (20, \nu 0) F(\mu, 3, 0.816) \quad (28)$$

ve (23) eşitliği ile verilen analitik çözüm;

$$\bar{q}_{bab} = 0.354 \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mu=3}^N V_{\mu 20, 30 \ell 0}^N (1.415, 1.415; \bar{R}_{ab}) F(\mu) \quad (29)$$

şeklini alır.

Tablo 1. Guseinov yöntemi kullanılarak hesaplanan iki merkezli \bar{q}_{aab} integral değerleri.

N	Sonuç	N	Sonuç	N	Sonuç	N	Sonuç
1	4.385	21	1.212	41	1.217	61	1.213
2	-0.599	22	1.220	42	1.216	62	1.213
3	1.197	23	1.225	43	1.215	63	1.213
4	1.494	24	1.226	44	1.213	64	1.213
5	1.338	25	1.224	45	1.211	65	1.212
6	1.170	26	1.220	46	1.209	66	1.212
7	1.106	27	1.214	47	1.207	67	1.211
8	1.126	28	1.209	48	1.205	68	1.210
9	1.181	29	1.204	49	1.204	69	1.209
10	1.232	30	1.200	50	1.204	70	1.208
11	1.258	31	1.198	51	1.203	71	1.207
12	1.260	32	1.198	52	1.204	72	1.207
13	1.244	33	1.199	53	1.204	73	1.206
14	1.221	34	1.202	54	1.205	74	1.206
15	1.200	35	1.205	55	1.207	75	1.206
16	1.186	36	1.208	56	1.208	76	1.206
17	1.180	37	1.211	57	1.209	77	1.206
18	1.183	38	1.214	58	1.211	78	1.207
19	1.191	39	1.215	59	1.212	79	1.207
20	1.201	40	1.216	60	1.212	80	1.208

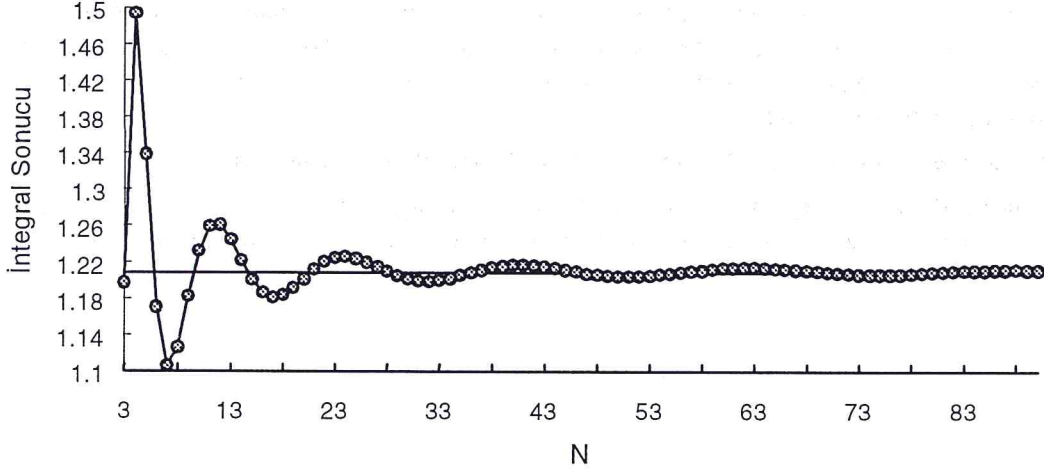
(28) ve (29) ile verilen analitik çözümlerin bilgisayar hesaplamaları sonucunda elde edilen sayısal değerleri, sırası ile Tablo 1 ve Tablo 2 de verilmiştir. Bu tablolardaki değerler kullanılarak integral sonucunun N değerine göre grafikleri ise sırası ile Şekil 1 ve Şekil 2 de verilmiştir.

Tablo 2. Guseinov yöntemi kullanılarak hesaplanan iki merkezli \bar{q}_{bab} integral değerleri.

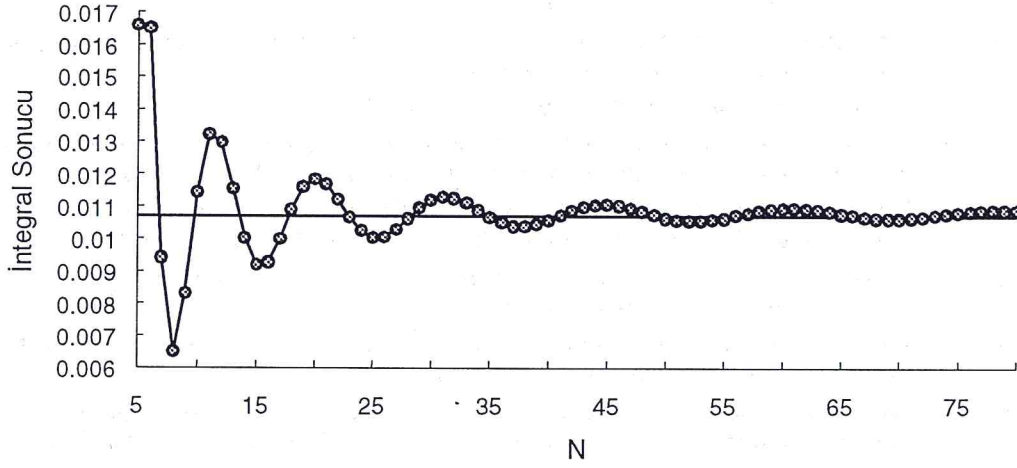
N	Sonuç	N	Sonuç	N	Sonuç	N	Sonuç
1	-	21	0.0116	41	0.0107	61	0.0109
2	-	22	0.0112	42	0.0108	62	0.0109
3	0.0236	23	0.0106	43	0.0109	63	0.0108
4	-0.0050	24	0.0102	44	0.0110	64	0.0108
5	0.0165	25	0.0100	45	0.0110	65	0.0107
6	0.0165	26	0.0100	46	0.0110	66	0.0107
7	0.0094	27	0.0103	47	0.0109	67	0.0106
8	0.0065	28	0.0106	48	0.0108	68	0.0106
9	0.0083	29	0.0109	49	0.0107	69	0.0106
10	0.0114	30	0.0111	50	0.0106	70	0.0106
11	0.0132	31	0.0112	51	0.0105	71	0.0106
12	0.0129	32	0.0112	52	0.0105	72	0.0106
13	0.0115	33	0.0111	53	0.0105	73	0.0107
14	0.0100	34	0.0108	54	0.0105	74	0.0107
15	0.0092	35	0.0106	55	0.0106	75	0.0107
16	0.0092	36	0.0105	56	0.0107	76	0.0108
17	0.0100	37	0.0104	57	0.0107	77	0.0108
18	0.0109	38	0.0103	58	0.0108	78	0.0108
19	0.0115	39	0.0104	59	0.0109	79	0.0108
20	0.0118	40	0.0105	60	0.0109	80	0.0108

Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada LiD molekülü için Pietrovito ve arkadaşları [9] tarafından Fourier Dönüşüm Yöntemi kullanılarak hesaplanan \bar{q}_{aab} ve \bar{q}_{bab} iki merkezli efg integralleri, Guseinov'un Taşıma Yöntemi ile FORTRAN 77 programlama dili kullanılarak WAX-4000 bilgisayar sisteminde yeniden hesaplanmıştır. Guseinov Yöntemine göre elde edilen analitik çözümlerin sonsuz sayıda terim içermesi nedeniyle istenilen bir hassasiyet için serinin kaç teriminin dikkate alınacağı kestirilemez. Bu nedenle sözü edilen integrallerin seri çözümlerinin yakınsamasını görebilmek için serinin üst limiti olan N sayısının ardışık değerleri için tüm çözümler hesaplanarak \bar{q}_{aab} integrali için Tablo 1 ve \bar{q}_{bab} integrali için Tablo 2 oluşturulmuştur. Ayrıca Tablo 1 ve Tablo 2 deki değerler kullanılarak \bar{q}_{aab} ve \bar{q}_{bab} integrallerinin sonuçlarının N ye göre değişimlerini görebilmek için Şekil 1 ve Şekil 2 de verilen grafikler çizilmiştir.



Şekil 1. Guseinov yöntemi kullanılarak hesaplanan iki merkezli \bar{q}_{aab} integral sonucunun N değerine göre değişimi.



Şekil 2. Guseinov yöntemi kullanılarak hesaplanan iki merkezli \bar{q}_{bab} integral sonucunun N değerine göre değişimi.

Şekil 1 de verilen grafikte \bar{q}_{aab} integralinin N değerine göre sonuçlarının 1.21 a.b. etrafında; Şekil 2 de verilen \bar{q}_{bab} integralinin N değerine göre sonuçlarının ise 0.0108 a.b. etrafında sönümlü osilasyon yaptığı görülmektedir. Bu durumda N nin çok büyük değerleri için \bar{q}_{aab} integralinin sonucu, 1.21 a.b. ; \bar{q}_{bab} integralinin sonucu ise 0.0108 a.b. dir.

Bu \bar{q}_{aab} ve \bar{q}_{bab} integrallerinin sonuçları, Pietrovito ve ark. tarafından Fourier Dönüşüm Yöntemi kullanılarak sırası ile, 1.209 a.b. ve 0.0107 a.b. olarak elde edilmiştir. Bu sonuçlardan görüldüğü gibi Guseinov Yöntemi kullanılarak elde edilen iki merkezli efg integrallerinin sonuçları, Pietrovito ve arkadaşlarının [9] elde ettiği sonuçlarla uyum içerisindedir.

Fourier Dönüşüm Yöntemi Kullanılarak STO ları içeren iki merkezli efg integrallerinin çözümünde farklı kuantum sayıları içeren her integral için ayrı bir analitik ifade elde edilir [9]. Bu analitik ifadeler aynı zamanda çok sayıda yardımcı fonksiyonlar içerdiği için bir molekülün herhangi bir çekirdeğinde elektronlar tarafından oluşturulan efg nin Fourier Yöntemi ile hesaplanması oldukça karmaşıktır.

Böyle hesaplamalar için Guseinov yöntemi kullanıldığında yalnızca üç tane (\bar{q}_{aaa} , \bar{q}_{aab} ve \bar{q}_{bab}) analitik ifade ile karşılaşılır. Bu analitik ifadelerin bilgisayar ile hesaplanması için yalnızca STO ların kuantum sayıları, perdeleme sabitleri ile çekirdekler arası uzaklığın bilinmesi yeterlidir.

Kaynaklar

- 1- Scrocco, E., **Quantum mechanical interpretation of nuclear quadrupole coupling data.** Advan.Chem.Phys., 5, 319-352 (1963).
- 2- Guseinov, I.I., **Analytical evaluation of three- and four-center electron repulsion integrals for slater-type orbitals.** J.Chem.Phys., 69 , 4990-4994 (1978).
- 3- Slater, J.C., **Atomic shilding constants.** Phys.Rev. 36 , 57-64 (1930).
- 4- Guseinov, I.I., **Expansion of slater-type orbitals about a new origin and analytical evaluation of multicenter electron repulsion integrals,** Phys.rev.A , 22 , 369-371 (1980).
- 5- Guseinov, I.I., **Expansion of slater-type orbitals about a displaced center and the evaluation of multicenter electron repulsion integrals.** Phys.Rev.A , 31 , 2851-2853 (1985).
- 6- Guseinov, I.I., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H., **Computation of overlap integrals over slater-type orbitals using auxiliary functions,** Int.J.of.Quant.Chem., 67 , 199-204 (1998).
- 7- Guseinov, I.I., **On the evaluation of multielectron molecular integrals over slater-type orbitals using binomial coefficients,** J.Mol.Struct., 335 , 17-20 (1995).
- 8- Akın, E., **Bazı iki atomlu moleküllerde elektronların çekirdek üzerinde yarattığı elektrik alan gradyentinin hesaplanması,** Doktora Tezi, Selçuk Üniv. Fen Bilimleri Enst., Konya (1998).
- 9- Pietrovito, A.J., Hameka, H.F., Zeroka, D., **Calculation of the deuterium electric field gradient in LiD,** J.Chem.Phys., 81 , 1960-1965 (1984).