FEN FAKÜLTESİ FEN DERGİSİ

Nisan (2017) 43 (1), 11-14

Araştırma Makalesi

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

Geliş (Recieved) :14/01/2016
Kabul (Accepted) :22/03/2016

Kompleks Küresel Harmoniklerin Binom Katsayıları Cinsinden Analitik İfadesi

Erhan AKIN

Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, KONYA
e-mail: eakin@selcuk.edu.tr

Öz: Bu çalışmada Condon-Shortley faz düzenindeki kompleks küresel harmonikler için binom katsayıları cinsinden bir analitik ifade elde edilmiştir. Bu analitik ifadedeki sonlu toplam minumum sayıda terim içerdiği için bu analitik ifadenin atomik ve moleküler yapı hesaplamalarında kullanılması oldukça elverişlidir.

Anahtar kelimeler: Kompleks küresel harmonikler, Legendre polinomları

The Analytical Formula of Complex Spherical Harmonics in terms of Binomial Coefficients

Abstract: In this study, an analytical formula in terms of binomial coefficients have been obtained for complex spherical harmonics in Condon-Shortley phases convention. The use of this analytical expression in the calculations of atomic and molecular structure is quite usefull since the finite sum in this analytical expression consists of minimum number of elements.

Keywords: Complex spherical harmonics, Legendre Polynomials

1. Giriş

Bir atomik yada moleküler sistemin fiziksel özelliklerini belirleyebilmek için sistemi anlatan dalga fonksiyonunun bilinmesi gerekir. Bu dalga fonksiyonu ise sistem için Schrödinger dalga denkleminin çözümünden elde edilir. Çok elektronlu sistemlerde sistemin hamiltonieni, elektronlar arası elektriksel ve manyetik etkileşmeler nedeniyle oldukça karmaşıktır. Bu nedenle böyle sistemlerde Schrödinger denklemini çözmek hemen hemen imkansızdır. Bu zorlukları aşmak için bazı yaklaşımlar yapmak gerekir. Bu yaklaşımların çoğunun ana fikri ise sistemi hidrojen atomuna benzetmeye dayanır. Çünkü hidrojen atomunda elektriksel potansiyel küresel simetriktir. Küresel simetriye sahip sistemler için ise Schrödinger denklemi, dalga fonksiyonu,

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi) \qquad (1)$$

biçiminde yalnızca r,θ *ve* φ ye bağlı ayrı ayrı fonksiyonların çarpımı şeklinde ele alınarak kolaylıkla çözülebilir (Karaoğlu, 2008). Buradaki açıya bağlı fonksiyonların çarpımı, kompleks küresel harmonikler olarak adlandırılır ve $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ ile gösterilirler. Yani

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (2)$$

şeklindedir. Elektriksel potansiyeli küresel simetriye sahip olan bir kuantum sistemi için Schrödinger denklemi çözüldüğünde $\Theta(\theta)$ *ve* $\Phi(\varphi)$ elde edilerek Denk.(2) de yerine yazılırsa küresel harmoniklerin analitik ifadesi Condon-Shortley fazında $[Y^*_{\ell m}(\theta,\varphi) = (-1)^m Y_{\ell -m}(\theta,\varphi)]$,

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = i^{m+|m|}\left[\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_{\ell|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi} \quad (3)$$

olarak elde edilir (Weniger ve Steinborn, 1982). Burada $P_{\ell|m|}(\cos\theta)$ lar ilgili Legendre fonksiyonlarıdır ve bazı özellikleri aşağıda verilmiştir (Arfken ve ark., 2011):

$$P_{\ell\lambda}(\pm1) = (\pm1)^{\ell}\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}}\delta_{\ell 0} \quad (4)$$

$$P_{\ell\lambda}(x) = (-1)^{\ell-\lambda}P_{\ell\lambda}(-x) \quad (5)$$

$$\frac{2}{2\ell+1}\sum\frac{2}{1+\delta_{\lambda 0}}P^2_{\ell\lambda} = 1. \quad (6)$$

Literatürde ilgili Legendre fonksiyonları için binom katsayıları cinsinden iki analitik ifade bulunmaktadır. Bu ifadeler aşağıda verilmiştir (Guseinov, 1995):

$$P_{\ell\lambda}(x) = \frac{(1-x^2)^{\lambda/2}}{2^{\ell}}\left[\frac{2\ell+1}{2F_{\lambda}(\ell)F_{\lambda}(\ell+\lambda)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\times\sum_k(-1)^k F_k(\lambda+k)F_{\ell-k}(2\ell-2k)F_{\ell-\lambda-2k}(\ell-k)x^{\ell-\lambda-2k} \quad (7)$$

burada $x=\cos\theta$, $\lambda=|m|$ ve $0\le k\le \frac{1}{2}\left\{\ell-\lambda-\frac{1}{2}(1-(-1)^{\ell-\lambda}\right\}$ olup $F_m(n)$ ler ise iyi bilinen binom katsayılarıdır.

$$P_{\ell\lambda}(\cos\theta) = \left[\frac{2\ell+1}{2}\frac{F_{\ell}(2\ell)}{F_{\ell+\lambda}(\ell+\lambda)}\right]^{\frac{1}{2}}\sum_{k=0}^{\ell-\lambda}(-1)^{\ell-k}F_k(\ell)F_{\lambda+k}(\ell)(\cos\tfrac{\theta}{2})^{\lambda+2k}(\sin\tfrac{\theta}{2})^{2\ell-\lambda-2k}. \quad (8)$$

2. Materyal ve Metot

Kompleks küresel harmoniklerin analitik ifadesinin elde edilmesi, içerdiği ilgili Legendre fonksiyonlarının analitik ifadesinin elde edilmesine dayanır. İlgili Legendre fonksiyonları

$$P_{\ell\lambda}(x) = (1-x^2)^{\frac{\lambda}{2}}\frac{d^{\lambda}}{dx^{\lambda}}P_{\ell}(x) \quad (9)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $x=\cos\theta$ olup $\lambda = 0,1,2,...,\ell$ dir. $P_{\ell}(x)$ ler ise Legendre fonksiyonlarıdır ve

$$P_{\ell}(x) = \frac{1}{2^{\ell}\ell!}\frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}}(x^2-1)^{\ell} \quad (10)$$

dir. Buna göre Denk.(10), Denk.(9) da yerine yazılırsa ilgili Legendre fonksiyonları için

$$P_{\ell\lambda}(x) = \frac{(1-x^2)^{\frac{\lambda}{2}}}{2^{\ell}\,\ell!}\frac{d^{\ell+\lambda}}{dx^{\ell+\lambda}}(x^2-1)^{\ell} \tag{11}$$

elde edilir. Burada türev içindeki terime binom açılımı uygulanırsa

$$(x^2-1)^{\ell} = \sum_{i=0}^{\ell}(-1)^{\ell-i}F_i(l)x^{2i} \tag{12}$$

bulunur. Burada $F_i(l)$ ler de binom katsayılarıdır ve

$$F_m(n) = \frac{n!}{m!(n-m)!} \tag{13}$$

biçiminde tanımlanır. Atomik ve moleküler sistemlerin bilgisayarla yapı hesaplamalarında binom katsayıları iki boyutlu bir dizi içine depolanır. Bu depolama işleminin yapılmasında ise binom katsayılarının

$$F_m(n) = F_{m-1}(n-1) + F_m(n-1) \tag{14}$$

şeklindeki tekrarlama bağıntısını kullanmak oldukça elverişlidir. Denk.(12), Denk.(11) da yerine yazılırsa

$$P_{\ell\lambda}(x) = \frac{(1-x^2)^{\frac{\lambda}{2}}}{2^{\ell}\,\ell!}\sum_{i=0}^{\ell}(-1)^{\ell-i}F_i(\ell)\frac{d^{\ell+\lambda}}{dx^{\ell+\lambda}}(x^{2i}) \tag{15}$$

elde edilir. Buradaki türev işlemi sonrasında

$$P_{\ell\lambda}(x) = \frac{(1-x^2)^{\frac{\lambda}{2}}}{2^{\ell}\,\ell!}\sum_{i=s}^{\ell}(-1)^{\ell-i}(\ell+\lambda)!\,F_i(\ell)F_{\ell+\lambda}(2i)x^{2i-(\ell+\lambda)} \tag{16}$$

olarak elde edilir. Denk.(16), Denk.(3) de yerine yazılarak düzenleme yapılırsa kompleks küresel harmoniklerin Condon-Shortley fazında binom katsayıları cinsinden ifadesi,

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = i^{m+|m|}\frac{\sin^{\lambda}(\theta)}{2^{\ell}}\left[\frac{(2\ell+1)F_{\lambda}(\ell+\lambda)}{4\pi F_{\lambda}(\ell)}\right]^{\frac{1}{2}}e^{im\varphi}\sum_{i=s}^{\ell}(-1)^{\ell-i}F_i(\ell)F_{\ell+\lambda}(2i)x^{2i-(\ell+\lambda)} \tag{17}$$

olarak elde edilir. Burada $\lambda = |m|$ olup

$$s = \begin{cases} \dfrac{\ell+\lambda}{2} & \ell+\lambda \;\; \textit{çift ise} \\[2ex] \dfrac{\ell+\lambda+1}{2} & \ell+\lambda \;\; \textit{tek ise} \end{cases} \tag{18}$$

şeklinde tanımlanmıştır.

3. Sonuçlar ve Tartışma

Kompleks küresel harmonikler ve kompleks küresel harmoniklerin basit toplamlarından elde edilen gerçek küresel harmonikler atomik ve moleküler elektronik yapı hesaplamalarının hemen hemen en önemli elemanlarından biridir. Küresel harmonikler için hem doğrudan (Guseinov, 1995; Arfken, 2011) hem de tekrarlama formunda (Weniger, 1982; Akin, 2003; Arfken, 2011) çok sayıda analitik ifade bulunmaktadır. Bilindiği gibi atomik ve moleküler hesaplamalarda karşılaşılan integrallerin çoğunun çözümünde gama ya da incomplete gama fonksiyonları dolayısıyla da faktöriyellerle karşılaşılır. Çok büyük sayıların faktöriyellerinin de çok büyük olması sözü edilen hesaplamalarda vakit ve duyarlılık kaybına neden olur. Bu nedenle atomik ve moleküler hesaplama yapan araştırıcıların çoğu faktöriyelli analitik ifadeler yerine binom katsayılı ifadeler ile çalışmayı tercih ederler. Bu nedenle atomik ve moleküler yapı hesaplamalarında sıkça karşılaşılan Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayıları (Guseinov ve ark., 1995), dönme katsayıları (Guseinov ve ark., 1997) gibi katsayıların hepsinin binom katsayıları cinsinden ifadeleri bulunmaktadır. Buna göre kompleks küresel harmoniklerin de binom katsayıları ile ifade edilmesi oldukça önemlidir. Guseinov'un çalışmasında (Guseinov, 1995) verilen küresel harmonik bağıntıları binom katsayıları cinsinden verilmiştir. Bizim çalışmamızda elde edilen küresel harmoniklerin analitik ifgadesi de yalnızca binom katsayıları cinsinden ifade edildiği için Guseinov'un çalışmasında verilen küresel harmonik bağıntılarına bu bakımdan eşdeğerdir. Bununla birlikte Guseinov'un çalışmasındaki her iki küresel harmonik bağıntısı da toplam içinde beş adet terim içerirken bizim çalışmamızdaki küresel harmonik ifadesi toplam içinde dört terim içermektedir. Bu bakımdan da bu çalışmada önerilen küresel harmoniklerin analitik ifadesinin kullanılması atomik ve moleküler yapı hesaplamalarında zaman tasarrufu bakımından oldukça elverişlidir.

Kaynaklar

Akin E (2003). Küresel Harmoniklerin Tekrarlama Bağıntıları ile Hesaplanması. *Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi* 21(1): 1-6.

Arfken GB, Weber HJ, Harris FE (2011). Mathematical methods for physicists. *Academic Press*.

Guseinov II (1995). On the evaluation of multielectron molecular ıntegrals over slater-type orbitals using binomial coefficients. *Theochem-Journal of Molecular Structure* 336(1): 17-20.

Guseinov II, Özmen A, Atav U, Yüksel H (1995). Computation of clebsch-gordan and gaunt coefficients using binomial coefficients. *Journal of Computational Physics* 122(2): 343-347.

Guseinov II, Atav U, Özmen A, Yüksel H, Aliyeva TH (1997). Calculation of rotation coefficients for overlap integrals over arbitrary atomic orbitals. *Turkish Journal of Physics* 21(10): 1087-1092.

Karaoğlu B (2008). Kuantum mekaniğine giriş. *Seçkin Yayıncılık*.

Weniger EJ, Steinborn EO (1982). Programs for the coupling of spherical harmonics. *Computer Physics Communications* 25(2): 149–157.