

Gaunt Katsayılarının Binom Katsayıları Kullanılarak Hesaplanması

Erhan AKIN

Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Kampüs, 42250, Konya, Türkiye
e-mail: eakin@selcuk.edu.tr

Öz: Bu çalışmada Gaunt katsayıları için binom katsayıları cinsinden bir analitik ifade elde edilmiştir. Bu analitik ifade kompleks küresel harmoniklerin çiftlenim bağıntısı kullanılarak test edilmiştir. Çok büyük kuantum sayıları dışında sonuçların kararlı olduğu görülmüştür.

Anahtar kelimeler: Gaunt katsayıları, küresel harmonikler

Calculation of Gaunt Coefficients by using Binomial Coefficients

Abstract: In this study an analytical expression in terms of binomial coefficients for Gaunt coefficients have been obtained. This analytical expression have been tested by using the coupling relation of complex spherical harmonics. It have been seen that results are stable except large quantum numbers.

Keywords: Gaunt coefficients, spherical harmonics

1. Giriş

Hartree-Fock-Roothaan denkleminin (Roothaan, 1951) çözümünden elde edilen ve Slater determinantı adı verilen dalga fonksiyonu kullanılarak kuantum mekaniğinin beklenen değer postülası

yardımıyla bir atomik ya da moleküler sistemin herhangi bir parametresinin hesaplanmasında ortaya çıkan integrallerin çözümünde Gaunt katsayıları adı verilen katsayılar gereklidir. Gaunt katsayıları

$$\langle \ell_1 m_1 | \ell_2 m_2 | \ell_3 m_3 \rangle = \int_{\Omega} Y_{\ell_1 m_1}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell_2 m_2}(\theta, \varphi) Y_{\ell_3 m_3}(\theta, \varphi) d\Omega \quad (1)$$

şeklinde üç küresel harmoniğin çarpımının katı açılar üzerinden integral değerine eşittir (Condon ve Odabasi, 1980). Burada $m_3 = m_1 - m_2$ dışındaki kombinasyonlar için Gaunt katsayıları sıfırdır. Gaunt katsayıları $C^k(lm, l'm')$ ile gösterilen Condon-Shortley katsayılarına (Condon ve Odabasi, 1980)

$$C^k(lm, l'm') = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} \langle l m | l' m' | k m - m' \rangle \quad (2)$$

şeklinde bağlıdır.

Bu katsayılar Coulomb ve exchange integrallerinde aynı merkezli iki Slater-tipi atom orbitalinin çarpımının ayrı ayrı Slater-tipi atom orbitallerinin lineer toplamı şeklinde ifade edilmesinde gerekli olduğu

gibi hem bu integrallerin çok merkezlilerinde hem de diğer çok merkezli moleküler integrallerin nonlined-up koordinat sisteminde hesaplanmasında gerekli olan dönme katsayılarının (Guseinov, 1995) hesaplanmasında gereklidir. Bu nedenle Gaunt katsayılarının duyarlı bir şekilde hesaplanması atomik ve moleküler elektronik yapı hesaplamalarında çok önemlidir. Söz konusu yapı hesaplamalarında katsayı, sabit ve yardımcı fonksiyonların çoğu binom katsayıları ile ifade edilerek faktöriyel hesabından kurtulmaktadır. Bu nedenle Gaunt katsayılarının da binom katsayıları cinsinden hesaplanması atomik ve moleküler yapı hesaplamalarında hız ve duyarlılık kazandırır. Halihazırda literatürde binom

katsayıları cinsinden Gaunt katsayıları ile ilgili yalnızca bir analitik ifade bulunmaktadır (Guseinov ve ark., 1995) ve burada örnek bazı hesaplamalar yapılmıştır. Ancak söz konusu çalışmada hesaplanan katsayıların Condon-Shortley katsayıları olduğuna dikkat edilmelidir. Bu çalışmada ise doğrudan Denk.(1) deki integralin değeri olan Gaunt katsayıları için binom katsayıları cinsinden bir ifade elde edilerek bazı örnek hesaplamalar yapılacaktır.

2. Materyal ve Metot

Condon-Shortley fazında $[Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{\ell -m}(\theta, \varphi)]$ kompleks küresel harmonikler binom katsayıları cinsinden

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = i^{m+|m|} \frac{\sin^\lambda(\theta)}{2^\ell} \left[\frac{(2\ell+1) F_\lambda(\ell+\lambda)}{4\pi F_\lambda(\ell)} \right]^{\frac{1}{2}} e^{im\varphi} \sum_{i=s}^{\ell} (-1)^{\ell-i} F_i(\ell) F_{\ell+\lambda}(2i) x^{2i-(\ell+\lambda)} \quad (3)$$

biçimindedir (Akın, 2016). Burada $\lambda = |m|$ dir ve F ler binom katsayılarıdır $(F_m(n) = \frac{n!}{m!(n-m)!})$

$$A(\ell, \lambda) = \frac{1}{2^\ell} \left[\frac{(2\ell+1) F_\lambda(\ell+\lambda)}{4\pi F_\lambda(\ell)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

$\lambda = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3$, $\ell = \ell_1 + \ell_2 + \ell_3$ ve $m = m_1 + m_2 + m_3$ tanımları kullanılarak bu küresel harmonikler Denk.(1) de yerine yazılırsa

$$\langle \ell_1 m_1 | \ell_2 m_2 | \ell_3 m_3 \rangle = i^{(\lambda+m)} A(\ell_1, \lambda_1) A(\ell_2, \lambda_2) A(\ell_3, \lambda_3) e^{i(\lambda_2+\lambda_3-\lambda_1)\varphi} \quad (5)$$

$$\times \sum_i (-1)^i F_i(\ell_1) F_{\ell_1+\lambda_1}(2i) \sum_j (-1)^j F_j(\ell_2) F_{\ell_2+\lambda_2}(2j) \sum_k (-1)^k F_k(\ell_3) F_{\ell_3+\lambda_3}(2k)$$

$$\times \sum_{n=0}^{(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)/2} (-1)^n F_n\left(\frac{\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3}{2}\right) \int_{\theta} (\cos \theta)^{2(i+j+k+n)-\ell-\lambda} \sin \theta d\theta \int_{\varphi} e^{i(\lambda_2+\lambda_3-\lambda_1)\varphi} d\varphi \quad (6)$$

olur. Buradaki φ üzerinden integral ancak $\lambda_2 + \lambda_3 - \lambda_1 = 0$ ise sıfırdan farklıdır.

Böylece Denk.(6) daki integraller hesaplanırsa Gaunt katsayılarının binom katsayıları cinsinden analitik ifadesi

$$\langle \ell_1 m_1 | \ell_2 m_2 | \ell_3 m_3 \rangle = 2\pi (-1)^{(m_1+m_2+m_3+\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)/2} A(\ell_1, \lambda_1) A(\ell_2, \lambda_2) A(\ell_3, \lambda_3)$$

$$\times \sum_i (-1)^i F_i(\ell_1) F_{\ell_1+\lambda_1}(2i) \sum_j (-1)^j F_j(\ell_2) F_{\ell_2+\lambda_2}(2j) \sum_k (-1)^k F_k(\ell_3) F_{\ell_3+\lambda_3}(2k)$$

$$\times \sum_{n=0}^{(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)/2} (-1)^n F_n\left(\frac{\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3}{2}\right) \frac{1}{(2i+2j+2k+2n)-(\ell+\lambda)+1} \delta_{m_3, m_1-m_2} \quad (7)$$

olarak elde edilir.

3. Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada Denk.(7) kullanılarak Gaunt katsayılarının değerlerini hesaplamak için Fortran 77 programlama dilinde bir bilgisayar programı yapılmıştır. Bu bilgisayar programında aynı binom katsayılarını tekrar tekrar hesaplamak için öncelikle bir subroutine yardımı ile

binom katsayıları iki boyutlu bir dizi içinde depolanmıştır. Binom katsayılarının hesaplanması için ise $F_m(n) = F_{m-1}(n-1) + F_m(n-1)$ şeklindeki tekrarlama bağıntısı kullanılmıştır. Bu şekilde istenilen Gaunt katsayıları hesaplanarak sonuçlar Çizelge 1'de verilmiştir. Sonuçların duyarlılığını test etmek için ise,

$$Y_{\ell_1 m_1}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell_2 m_2}(\theta, \varphi) = \sum_{\ell_3=\ell_{\min}}^{\ell_{\max}} \langle \ell_1 m_1 | \ell_2 m_2 | \ell_3 m_3 \rangle Y_{\ell_3 m_3}(\theta, \varphi) \quad (8)$$

şeklindeki küresel harmoniklerin çiftlenim bağıntısından yararlanılmıştır. Bu bağıntıdaki Condon-Shortley fazındaki

kompleks küresel harmoniklerin hesaplanması için ise Weniger ve Steinborn'un algoritmalarından (Weniger ve

Steinborn, 1982) yararlanılmıştır. Test sonuçları Çizelge 2’de verilmiştir. Bu sonuçlardan görüldüğü gibi bu çalışmadaki

binom katsayıları cinsinden analitik ifade kullanılarak Gaunt katsayıları başarılı bir şekilde hesaplanabilmektedir.

Kaynaklar

- Akın E (2016). Kompleks küresel harmoniklerin binom katsayıları cinsinden ifadesi, *S.Ü. Fen Fakültesi Fen Dergisi*, (Yayına kabul edildi).
- Condon EU, Odabasi H (1980). Atomic structure, *CUP Archive*.
- Guseinov II (1995). On the evaluation of multielectron molecular integrals over Slater-type orbitals using binomial coefficients, *Journal of Molecular Structure* 336(1), 17–20.
- Guseinov II, Özmen A, Atav Ü, Yüksel H (1995). Computation of Clebsch-Gordan and Gaunt coefficients using binomial coefficients, *Journal of Computational Physics* 122(2), 343–347.
- Roothaan CCJ (1951). New developments in molecular orbital theory, *Reviews of modern physics* 23(2), 69.
- Weniger EJ, Steinborn EO (1982). Programs for the coupling of spherical harmonics, *Computer Physics Communications* 25(2), 149–157.

Çizelge 1. Seçilen keyfi kuantum sayı takımları için Gaunt katsayıları

$\ell_1 m_1$	$\ell_2 m_2$	ℓ	$\langle \ell_1 m_1 \ell_2 m_2 \ell_3 m_3 \rangle$
1 0	1 0	0	0.282094791774
		2	0.252313252202
2 0	2 0	0	0.282094791774
		2	0.180223751573
		4	0.241795535806
3 1	2 0	1	-0.202300659403
		3	-0.126156626101
		5	-0.227318461243
5 3	7 1	2	4.388960072666E-02
		4	-0.161478307022
		6	-2.566391081182E-02
		8	9.440207959252E-02
		10	0.136633372704
		12	-0.107582555223
6 3	6 3	0	0.282094791774
		2	5.734392095500E-02
		4	-8.146052810583E-02
		6	-0.123094880833
		8	-3.109910756471E-02
		10	0.148778601382
6 5	6 5	12	-5.513550109782E-02
		0	0.282094791774
		2	-0.126156626101
		4	-9.956286768490E-02
		6	0.157446940601
		8	-9.002373242417E-02
		10	2.557947883418E-02
		12	-3.007390968972E-03

Çizelge 2. Bazı kuantum sayı takımları için Denk.(8) de gerekli küresel harmonik ve Gaunt katsayıları
 $Y_{8_6}(30,0) = 6.028539241355E - 02$, $Y_{6_4}(30,0) = 0.161666509731$

$\ell_1 m_1$	$\ell_2 m_2$	ℓ	$Y_{\ell_{m_1-m_2}}(30,0)$	$\langle \ell_1 m_1 \ell_2 m_2 \ell_3 m_3 \rangle$
		2	9.656855050580E-02	0.268491763682
		4	0.355430976265	0.133504701276
		6	0.493631852572	-6.189596585313E-02
8 6	6 4	8	0.293569401406	-0.117265592156
		10	-0.141584679979	0.124790110789
		12	-0.445259110916	-4.786925833180E-02
		14	-0.336186239839	6.841098828761E-03

Denk.(8)'in Sol tarafı = 9.746128979245E-03

Denk.(8)'in Sol tarafı = 9.746128979245E-03