

**CLEBSCH-GORDAN, GAUNT KATSAYILARININ
ve WİGNER n-j SEMBOLLERİNİN (n = 3, 6)
BİNOMİAL KATSAYILAR KULLANILARAK
HIZLI VE HASSAS HESAPLANMASI**

Abdullah ÖZDEMİR
Y.Lisans Tezi
Fizik Anabilim Dalı

Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU
2009
Her hakkı saklıdır



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

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**CLEBSCH-GORDAN, GAUNT KATSAYILARININ ve WİGNER
n-j SEMBOLLERİNİN ($n = 3, 6$) BİNOMİAL KATSAYILAR
KULLANILARAK HIZLI VE HASSAS HESAPLANMASI**

Abdullah ÖZDEMİR

TOKAT
2009

Her hakkı saklıdır

Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU danışmanlığında, Abdullah ÖZDEMİR tarafından hazırlanan bu çalışma 03/09/2009 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği/oy çokluğu ile Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Doç. Dr. Muzaffer CAN

İmza :

Üye : Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

İmza :

Üye : Yrd. Doç. Dr. Salih SAYGI

İmza :

Yukarıdaki sonucu onaylarım

(imza)

.....

Enstitü Müdürü

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

TEZ BEYANI

Tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu tezin yazılmasında bilimsel ahlak kurallarına uyulduğunu, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunulduğunu, tezin içerdığı yenilik ve sonuçların başka bir yerden alınmadığını, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, tezin herhangi bir kısmının bu üniversite veya başka bir üniversitedeki başka bir tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

Abdullah ÖZDEMİR

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

CLEBSCH-GORDAN, GAUNT KATSAYILARININ ve WİGNER
n-j SEMBOLLERİNİN ($n = 3, 6$) BİNOMİAL KATSAYILAR
KULLANILARAK HIZLI VE HASSAS HESAPLANMASI

Abdullah ÖZDEMİR

Gaziosmanpaşa Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayılarının ve Wigner n-j sembollerinin $n = 3, 6$ tam ve hızlı hesabı için yeni, basit ve etkili binomial katsayıların kullanıldığı bir yöntem sunulmuştur. Hesaplamaların hızlı olması için binomial katsayılar bilgisayar hafızasına depolanmıştır. Binomial katsayıların kullanımı bilgisayarın işlemci zamanını oldukça düşürür. Sunulan sayısal sonuçlar, değişik ölçüm yöntemleriyle bulunan değerler ile tam bir uyum içindedir. Önerilen metod tam olarak geneldir ve herhangi bir kısıtlama yoktur.

2009, 55 sayfa

Anahtar kelimeler: 3-j, 6-j, Açısal momentum, Binomial, Clebsch-Gordan, Gaunt, spin, Wigner n-j sembolleri.

ABSTRACT

Ms Thesis

USE OF BINOMIAL COEFFICIENTS IN FAST AND ACCURATE CALCULATION OF CLEBSCH-GORDAN, GAUNT COEFFICIENTS AND WIGNER $n-j$ ($n = 3, 6$) SYMBOLS

Abdullah ÖZDEMİR

Gaziosmanpaşa University Graduate School of
Natural and Applied Science Department of Physics Science

Supervisor: Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU

Using binomial coefficients the new simple and efficient algorithms for the accurate and fast calculation of the Clebsch-Gordan and Gaunt coefficients, and Wigner $n-j$ symbols for $n=3,6$ are presented. For quick calculations, the binomial coefficients are stored in the memory of the computer. It is demonstrated that the use of binomial coefficients greatly reduces the CPU time. The numerical results presented are in complete agreement with those obtained in the alternative evaluation procedure. The method suggested is completely general and free of any restrictions.

2009, 55 page

Keywords: 3-j, 6-j, Angular momentum, Binomial, Clebsch-Gordan coefficients, Gaunt coefficients, spin, Wigner $n-j$ symbols.

ÖNSÖZ

Çalışmalarım süresince bana her türlü kolaylığı sağlayan, karşılaştığım zorluklarda bana yol gösteren ve bu çalışmamın oluşmasında bilgi ve deneyimlerini benden esirgemeyen muhterem hocam Prof. Dr. Bahtiyar MEHMETOĞLU'na en içten teşekkürlerimi sunarım. Katkılarından dolayı ve her zaman bilgilerinden yararlandığım arkadaşlarım, Arş. Gör. Erhan ESER ve Ebru ÇOPUROĞLU'na teşekkür ederim.

Abdullah ÖZDEMİR
Eylül, 2009

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	i
ABSTRACT	ii
ÖNSÖZ	iii
ŞEKİLLER DİZİNİ	v
ÇİZELGELER DİZİNİ	vi
1. GİRİŞ	1
2. GENEL BİLGİLER	2
2.1. Açısai Momentum ve Spin Kavramları	2
2.2. Açısai Momentumun Toplamı	5
2.3. 2x2 Matris Gösterimi: Pauli Matrisleri	8
2.4. Spinör Uzayı ve Operatörleri	11
2.5. Açısai Momentum Özdeğerleri ve Matris Elemanları	14
2.6. Basamak Operatörlerinin Matris Elemanları	15
3. MATERYAL ve YÖNTEM	18
3.1. İki Açısai Momentumun Toplamı	18
3.1.1. Toplama İçin Yarı Klasik Vektör Modeli	18
3.1.2. Üçgen ve İzdüşüm Seçim Kuralları	19
3.1.3. Clebsch-Gordan Katsayıları: Tanımlar ve Genel Özellikler	22
3.1.4. 3-j Katsayıları ve Özellikleri	31
3.2. 6-j Katsayıları	38
3.2.1. Üç Açısai Momentumun Toplamı	38
3.2.2. 6-j Katsayılarının Formülleri	43
3.2.3. 6-j Katsayılarının Özellikleri	45
3.3. Clebsch-Gordan, Gaunt, 3-j ve 6-j Katsayılarının Binomial Katsayıları Cinsinden İfadesi	46
4. BULGULAR	50
5. TARTIŞMA ve SONUÇ	53
KAYNAKLAR	55
ÖZGEÇMİŞ	56

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. L - S çiftlenim biçimi(solda) ve j - j çiftlenim biçimi (sağda)	7
Şekil 2.2. Referans eksenini x veya y eksenine $\pi/4$ uzaklıkta seçildiğinde x' boyunca x ve y spin bileşenleri eşit bir katkı sağlar	9
Şekil 2.3. Dönmeler için spinör uzayı, birim vektörler $\mathcal{X}_+$ ve $\mathcal{X}_-$ eksenleri boyuncadır	12
Şekil 2.4. (j, m) durumunun spinör gösterimi. Toplam açısal momentum sayısı $j = 4$ ve izdüşüm sayısı $m = 1$ olan bir durumun spinör-uzay gösteriminin yarıklasik vektör modelinin gösterimi. Burada $j + m = 5$ yukarı spin spinörü ve $j - m = 3$ aşağı spin spinörü vardır	13
Şekil 3.1. Solda alt sistemler 1 ve 2, kendi dönme özelliklerine sahiptir. Sağda bütün sistemin dönme özellikleri dikkate alınmaktadır	18
Şekil 3.2. Klasik mekanikte $\mathbf{j}_1$ ve $\mathbf{j}_2$ gibi iki açısal momentumun $\mathbf{J}'$ 'yi verecek biçimde birleştirilmesi. Bunların z eksenini üzerindeki izdüşümü sırasıyla m_1 , m_2 ve M' 'dir. Yarıklasik modelde her bir vektör z eksenini etrafında döner (presesyon yapar)	19
Şekil 3.3. a) $(j_1 m_1 j_2 m_2)$ gösteriminde j_1 ve j_2 , O_z etrafında serbestçe presesyon yapar. $\mathbf{J}$ de belirsizlik hakimdir. b) (JM) gösteriminde j_1 ve j_2 , $\mathbf{J}'$ 'yi verecek şekilde birleşmiştir (çiftlenmiştir) ve O_z etrafında presesyon yapar. m_1 ve m_2 kararsızdır	23
Şekil 3.4. Yarı klasik vektör modelinin spinör-uzayı temsiline bir görüntüsü. Önce sistem döndürülür (sol taraf) ve sonra y eksenini etrafında β boyunca döndürülür (sağ taraf). Burada 5 spin-yukarı spin-1/2 altsistemi ve 3 spin aşağı spin-1/2 altsistemi vardır. Böylece sol taraf $m = (5-3)/2 = 1$ ve $j = (5+3)/2 = 4$ olan bir sistemi gösterir. Sağ tarafta görünün bir m bölgesi vardır fakat hâlâ $j = 4$ 'tür	28
Şekil 3.5. Bir Clebsch-Gordan katsayısı (solda) ile bir $3-j$ katsayısının (sağda) arasındaki farkın gösterimi. Sağ ve soldaki gösterimlerde j_3 ve m_3 'ün doğrultularının ters çevrildiğine dikkat edin ve m toplam kuralı iki katsayı arasındaki farktır	35
Şekil 3.6. e veya f açısal momentum aracı terimleriyle c bileşkesini elde etmek için a , b ve d gibi üç açısal momentumun toplamına göre dört çiftlenim üçgeni	41
Şekil 3.7. Racah ve $6-j$ katsayılarının geometrik gösterimi, bir dörtyüzlü (solda) veya bir dörtgen ve köşegenleri (sağda)	42
Şekil 3.8. Racah ve $6-j$ katsayıları ile ilgili olan altı açısal momentum çiftleniminin ağaç temsili. Sürekli çizgiler (4.10) eşitliğinin sol tarafındaki ketler ile ilgilidir. Kesikli çizgiler ise (4.10)'un sağ tarafını temsil eder	43

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge	<u>Sayfa</u>
Çizelge 2.1. Fermiyon ve Bozonların spin değerleri	5
Çizelge 4.1. Clebsch-Gordan katsayılarının hesaplanması	50
Çizelge 4.2. Gaunt katsayılarının hesaplanması	51
Çizelge 4.3. 3-j sembollerinin hesaplanması	51
Çizelge 4.4. 6-j sembollerinin hesaplanması	52
Çizelge 5.1. $F_n(m)$ binomial katsayıları için konumlarının kaynağı	54

1. GİRİŞ

Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayıları nükleer fizik, fiziksel kimya, astrofizik, atom ve moleköl fiziğı gibi alanlarda (Wei, 1999) özellikle atom ve moleküllerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin belirlenmesi sırasında sıkça karşımıza çıkarlar. Dolayısıyla bu katsayılar doğru hesaplanmalıdır. Bununla birlikte basit bir durum için mesela bir molekölün toplam enerjisi hesaplarırken ortaya çıkan söz konusu katsayıların sayısı binlerle ifade edilir. Bu yüzden katsayıların doğru ve hızlı hesaplanması oldukça önemlidir. Örneğın NH_3 molekölünün toplam enerjisi hesaplarırken 10000 tane terimin hesabı gerekmektedir. Her bir terimde de 1830 tane Clebsch-Gordan katsayısı vardır. Dolayısıyla toplam 18300000 tane Clebsch-Gordan katsayısının hesaplanması gerekmektedir. Her bir katsayının hesabını 1 ms kısalttığımızı düşünürsek tüm katsayıların hesap süresini 5 saat kısaltmış oluyoruz.

Arzettiğı önem yüzünden güncel bir çalışma konusu olan Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayıları ile $3j$, $6j$ sembolleri ile ilgili olarak literatürde faktöriyeler kullanılarak tanımlanmış analitik formüller (Wei, 1999; Varshalovich, 1988; Edmonds, 1957; Condon ve Shortly, 1935) mevcuttur. Ancak küçük kuantum sayıları için hesaplamalarda çok zorluk olmasada büyük kuantum sayıları için değişik güçlükler ortaya çıkmaktadır. Çünkü Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayıları ve $3j$, $6j$ sembollerinin kullanıldığı çok merkezli integrallerin (Guseinov, 1970; 1995) seri açılımlarında ve diğer uygulamalarda faktöriyeler son derece büyük argümanlara ihtiyaç duyar. Bu katsayıların hesabında özellikle büyük kuantum sayıları için faktöriyelerden kaçınmak adına literatürde yineleme bağıntıları kullanılmıştır (Schulten ve Gordon, 1976; Guseinov, 1995; Guseinov ve Mamedov, 2005; Weniger ve Steinborn, 1982). Burada öncelikle konu ile ilgili olan temel kavramlar açıklandıktan sonra bu katsayıların nereden kaynaklandığını gösterilmiş, daha sonra katsayıların binomial ifadeleri (Guseinov ve ark., 2009) verilerek bu denklemler ile yapılan hesaplamalar sonuç olarak sunulmuştur.

2 GENEL BİLGİLER

2.1 Açısal Momentum ve Spin Kavramları

“Spin sadece elektronlara özgü değil maddenin yapısını oluşturan, kuarklarla mezonların ve kuvvet taşıyan parçacıkların da spini var (Çizelge 2.1’e bakınız). Bir nokta etrafında dönen bir cismin, o nokta etrafında ‘açısal momentum’a sahip olduğu söylenir. Örneğin dünyamız güneş etrafındaki hareketinden dolayı, bir açısal momentuma sahiptir. Açısal momentum, tıpkı doğrusal momentum gibi korunan bir büyüklük olduğundan dolayı, önemli bir kinetik değişkendir. Parçacıkların birbirleriyle etkileşimini inceleyen 'parçacık kinematiği'nde de böyle...

Dünyamız güneşin etrafında olduğu gibi, kendi eksenini etrafında da dönüyor. Bu dönme hareketinden kaynaklanan bir açısal momentum bileşeni daha var: Buna veya genelde bir cismin kendi etrafında dönmesinden kaynaklanan açısal momentuma, spin deniyor. Spin, aslında açısal momentumdan farklı bir şey değil. Onunla aynı birime sahip ve ikisi vektörel olarak toplanabiliyor. Korunan büyüklük de bu toplam zaten. Ancak açısal momentum bazen, sadece spin bileşeninden oluşabiliyor. Tıpkı pürüzsüz bir yüzeyde, değme noktasını değiştirmeksizin, sürtünmesiz dönen ideal bir topağa olduğu gibi. Bu terim o zaman daha çok işe yarıyor. Çünkü bu durumda spin, toplam açısal momentumu oluşturuyor ve tek başına korunuyor. Aksi halde açısal momentum bileşenleri, korunum hesaplarına, birlikte katılıyor.

Yukarıda sözünü edegeldiğimiz parçacıklardan bazıları, deneysel gözlemler sırasında, böyle birer spin bileşenine sahipmiş gibi davranıyorlar. Aslında bu parçacıklar kendi etraflarında dönmüyor, yalnızca sanki öyleymiş gibi davranıyorlar. İşin bir o kadar ilginç diğer bir yanı; örneğin belli bir topacın spin vektörünün büyüklüğü, dönme hızına bağlı olarak değişebilirken, belli bir parçacığın spin büyüklüğü hep aynı oluyor: Parçacıktan parçacığa, Planck sabiti bölü 2π 'nin ($\hbar$); ya kesirli katları ($\hbar/2, 3\hbar/2, \dots$), ya da tamsayı katları ($0, \hbar, 2\hbar, \dots$) şeklinde değişerek. Birincilere fermion, ikincilere boson sınıfı parçacıklar deniyor. Dolayısıyla parçacık spini de, diğer fizik değişkenleri

gibi kuantum sıçramaları gösteren bir değişken. Varlığının nedeni bilinmiyor. Parçacıkların iç yapısından kaynaklandığı düşünülüyor ve bu nedenle bazen, 'içyapısal açısal momentum' olarak adlandırılıyor.

Parçacıklar spin büyüklüklerine bağlı olarak, önemli davranış farklılıkları sergiliyorlar. Örneğin; birbirleriyle etkileşim halindeki parçacıkların içinde bulundukları fiziksel koşullar, genellikle bu parçacıkların her birine; fiziksel değişkenlerinin sahip olabileceği değerler açısından, birer dizi seçenek sunuyor. Fiziksel değişkenlerin olası değer kümelerinden oluşan bu seçenekleri veya 'kuantum durumları'nı, bir otelin farklı katlarındaki odalara benzetecek olursak; spini $\hbar$ 'ın tamsayı katlarıyla orantılı ($0, \hbar, 2\hbar, \dots$) olan benzer parçacıklar; birbirlerine daha 'yakın' olabiliyor ve aynı odayı paylaşabiliyorlar. Yani, aynı kuantum durumunda oturmaya hiçbir itirazları yok. Bunlara 'bozon' deniyor. Halbuki, spini $\hbar$ 'ın kesirli katlarıyla orantılı ($\hbar/2, 3\hbar/2, \dots$) olan parçacıklar, aynı odayı asla paylaşmıyor ve farklı kuantum durumlarında bulunmayı tercih ediyorlar. Bunlara da fermion sınıfı parçacıklar deniyor ve aralarındaki geçimsizlik ilişkisi, bulucusunun adıyla, "Pauli'nin dışlama ilkesi" olarak anılıyor.

Örneğin elektronla, üçlü kuark gruplarından oluşan proton ve nötron birer fermion. Kuark ikililerinden oluşan mezonlarsa, bozon oluyor. Fotonlar da keza bozon. Çekirdeklerin hangi sınıftan olduğu ise, içerdikleri nötron ve proton sayılarının tek veya çift olmasına bağlı. Örneğin, ikişer proton ve nötrondan oluşan He^4 çekirdeği bir bozon. Benzer parçacık kümelerinden, bozon niteliği taşıyanların ortalama davranışları Bose-Einstein, Fermion niteliği taşıyanlarınkı ise Fermi-Dirac istatistiği denilen kurallar cümlesiyle belirleniyor. Bozonların aynı kuantum durumunu paylaşabilmeleri çok önemli sonuçlara veya şaşırtıcı olgulara yol açıyor.

Helyum bu özelliği nedeniyle, mutlak sıfırın 2 derece üstüne (2 K) kadar soğutulsa dahi kristalleşmiyor. Akışkanlık katsayısı ve yüzey gerilimi sıfır olan bir 'süper akışkan'a dönüşüyor. Mutlak sıfıra mikrok Kelvin düzeyinde yaklaşıldığında ise, ilginç özellikler sergileyen 'süperkatı' He^4 halini alıyor. İleride diğer bozon kümelerinin de, benzeri şekilde şaşırtıcı özelliklerinin keşfedileceğine kesin gözüyle bakılıyor.

Örneğin uyarılmış durumdaki bir atom veya molekül grubu birbirini, aynı frekanslı fotonlar ışıyacak şekilde tetikleyebiliyor ve aynı kuantum durumunda biriktirilebilen bu fotonlar, lazer ışınlarının üretimine imkan tanıyor. Öte yandan, mutlak sıfıra yakın derecelere kadar soğutulan bozon niteliğindeki benzer atom kümeleri, en düşük enerjili aynı kuantum durumuna geçmeye başlıyorlar. Bu düşük sıcaklıklardaki hızların çok düşük olması, momentumların sıfıra yakın ve dolayısıyla da oldukça kesin değerlere sahip olması anlamına geldiğinden, Heisenberg'in ilgili belirsizlik ilkesi gereğince ($\Delta x \Delta p_x \geq \hbar / 2$), atomların konumları belirsizleşiyor. Konumlarındaki bu belirsizlik, atomların parçacıktan çok, bulutumsu yapılara benzemesine yol açıyor ve aynı kuantum konumuna geçen bu bulutumsu yapılar, bir parçacıklar kümesi olmaktan çıkıp, tek bir 'süperparçacık' gibi davranmaya başlıyor. 'Bose-Einstein yoğuşması' denilen bu durum maddenin; katı, sıvı, gaz veya plazma gibi, fakat bunların hepsinden farklı ve ilginç özellikler sergileyen bir halini oluşturuyor. Örneğin bu yoğuşmaların optik yoğunluğunun türevini, yani kırılma indisini (n) çok yüksek değerlere çıkarmak ve dolayısıyla, ışığın ortamdaki hızını (c/n), saniyede birkaç metre düzeylerine kadar indirmek mümkün. Bu durum, ışık atımlarının yoğuşmalarda hapsedilip, daha sonra kullanılmak üzere serbest bırakılabilecekleri anlamına geliyor ve bu olgunun, 'ışıkla çalışan bilgisayarlar'ın yapımına temel oluşturabileceği düşünülüyor. Bir başka uygulama olasılığı; dönen yoğuşma ortamları oluşturup, fotonları sadece soğuran ve fakat dışarı kaçmalarına izin vermeyen yapılar inşa ederek, bunları 'kara delik' modelleri olarak kullanmak düşüncesi.

Öte yandan, bir bozon kümesi oluşturan He^4 atomları, 2.17 K'in (-270.98 °C) altına kadar soğutulsa dahi kristalleşmeyip, sıvı halini koruyor. Bu 'sıvı' akış halinde iken atomlar birbirlerinin üzerinden kaymak yerine, hep birlikte hareket ediyor ve sonuç olarak He^4 , akışkanlık katsayısı ve yüzey gerilimi sıfır olan bir 'süper akışkan'a' dönüşüyor. Mutlak sıfıra milikelvin düzeyinde yaklaşıldığında ise, 'uzayda dizinlenmiş süperakışkan' niteliğindeki 'süperkatı' He^4 halini alıyor. Hatta He^3 atomları dahi, birer Fermion olmalarına karşın, 2.6 milikelvine kadar soğutulduğunda süperakışkan halini alıyor. Çünkü, He^4 kümesinde elektronlar çiftler halinde eşleşerek ('Cooper pairing') tamsayı spine yol açarken, He^3 kümesinde atomlar çiftler halinde eşleşip, tamsayı spinli bozon taneciklere vücut veriyor.

Fakat Bose-Einstein yoğunmaları çok kırılgan yapılar. Dış dünya ile en ufak bir etkileşme, ısınarak yoğunlaşma durumundan çıkmalarına ve atomların tekrar bağımsız parçacıklar haline geçmesine yol açıyor. Bu nedenle, söz konusu uygulamaların ancak uzun vadede gerçekleşebileceği kanaati yaygın” (Altın, 2009).

Fermiyonlar		Bozonlar	
Leptonlar ve Kuarklar	$\text{Spin} = \frac{1}{2}$	$\text{Spin} = 1$	Kuvvet Taşıyıcı Parçacıklar
Baryonlar	$\text{Spin} = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$	$\text{Spin} = 0, 1, 2, \dots$	Mezonlar

Çizelge 2.1 Fermiyon ve Bozonların spin değerleri

2.2 Açısal Momentumun Toplamı

Tek elektronlu atomlarda l ve s , bireysel açısal momentumları j bileşke açısal momentumunu verecek şekilde bir araya gelir. Aynı atomdaki farklı açısal momentumlar arasında da benzer etkileşimler vardır. Önemli bir deneysel spektral analiz sonucu olarak, kapalı kabukların toplam açısal momentumları sıfıra eşittir. Bu bütün soy gaz atomlarının taban hallerinin 1S_0 hali olduğu gözleminden kaynaklanmaktadır. Bir atomun toplam açısal momentumunun hesabında bu sebeple sadece değerlik, yani doldurulmamış kabukların elektronlarının açısal momentumunu ele almak gereklidir. Bu açısal momentumlar, atomdaki elektronlar arasındaki manyetik ve elektrik etkiler yoluyla etkileşirler, Bunlar, atomun J toplam açısal momentumunu üreten özel kuantum mekanik kurallarına göre bir araya gelirler. Vektör modeli açısal momentumun içeriği hakkında bir fikir kazanmamızı sağlar. Açısal momentum toplamı için iki limit durum vardır: $L-S$ (Russell-Saunders) çiftlenimi ve $j-j$ çiftlenimi (Haken ve Wolf, 2000).

Atomlarda elektronların ve çekirdek içinde nükleonların açısal momentumlarının (ya da manyetik dipol momentlerin) çiftlenim şekillerini, çiftlenimin olduğu yerdeki manyetik alan şiddetleri belirler. Burada söz konusu olan manyetik alan yerel (sistemin iç yapısından kaynaklanan) veya dışarıdan uygulanan bir dış alan da olabilir. Örneğin hidrojen atomunda elektronun yörünge hareketinden kaynaklanan ve atomun

merkezinde oluşan yerel alan 10^4 gauss mertebesinde. Çok elektronlu bir atom içinde spin-spin, spin-yörünge, spin-diğer yörünge, dipol-dipol ve çekirdek içinde de benzer şekilde nükleonlar arasında spin-spin etkileşimleri söz konusudur. Burada bir atom içinde oluşabilecek tüm etkileşimler, yani çiftlenim şekilleri (sanki çiftlenim “kipleri” dense yeridir) incelenerek bir sınıflandırmaya tabi tutulacaktır.

Atom ve atom çekirdeklerinde çiftlenim şekillerini açıklamadan önce, (yani yerel alanlardan kaynaklanan çiftlenim şekillerini açıklamadan önce) dışarıdan uygulanan dış manyetik alanın şiddetine göre bölgelere ayrılmasını bilmekte fayda vardır. Hidrojen atomunun merkezinde oluşan yerel alan değeri referans alınarak dış alan şiddetinin $0 \leq B_0 \leq 10^4$ gauss bölgesi zayıf alan ya da Zeeman bölgesi olarak bilinir. Dış manyetik alanın $10^4 \leq B_0 \leq \infty$ gauss bölgesi de şiddetli alan ya da Paschen – Back bölgesi olarak bilinir. Çoğu atomlar L - S -çiftlenim türüne, iyi yada kötü örnek oluştururlar. L - S çiftlenimi özellikle hafif atomlarda oluşurken, ağır atomlara doğru gidildikçe j - j çiftlenimine az da olsa rastlanır. Öte yandan atomun çekirdeğindeki proton ve nötronlarda ise j - j çiftlenimi olduğu görülür. Nükleer kabuk modelinde manyetik kabuklar j - j çiftlenimi sonucu oluşur (Aygün ve Zengin, 1992). Şimdi bu çiftlenim türlerini daha yakından inceleyelim.

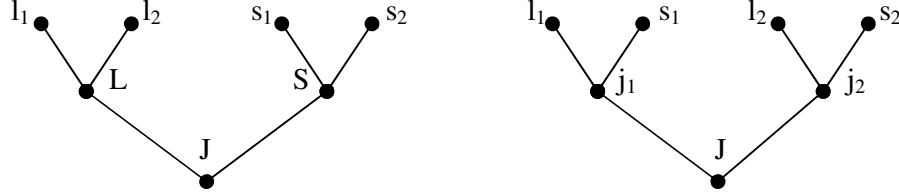
L-S ve j-j Çiftlenim Biçimleri: Varsayalım ki elimizde 1 ve 2 şeklinde iki sistem var, örneğin bir elektron ve bir çekirdek gibi. Her birinin tanımı, uzayda bazı noktalar civarında kendi kütle merkezinin dönmesiyle ilgili olarak bazı simetrileri içerir. Böylece yörünge açısal momentum sayısı l_i , $i=1,2$ diyelim. Her bir sistemin iç dönme simetrisi olabilir, ki buna da spin dediğimizi biliyoruz ve s_i , $i=1,2$ değerleriyle tanımlayalım, örneğin bir elektron için $s_1 = 1/2$ ve bir dueteron için $s_2 = 1$ gibi. Bu durum dört açısal momentum içerir ve operatörleri ve öz durumları birleştirmek için en azından iki yol vardır.

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2; \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2; \quad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (2.1)$$

gibi operatörleri L - S çiftlenimi biçiminde birleştirmek. Halbuki j - j çiftleniminde birleştirme yöntemi,

$$\mathbf{j}_1 = \mathbf{L}_1 + \mathbf{S}_1; \quad \mathbf{j}_2 = \mathbf{L}_2 + \mathbf{S}_2; \quad \mathbf{J} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 \quad (2.2)$$

şeklindedir. Şekil 2.1’de birleştirilen açısal momentum operatörleri için iki etkileşim biçimi şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 2.1 L - S çiftlenim biçimi(solda) ve j - j çiftlenim biçimi (sağda)

Peki bu etkileşim biçimlerinden birini diğerine tercih ettirecek sebep nedir? Matematiksel açıdan baktığımızda (ki sarfedilecek yeterli beyin ve bilgisayar gücüyle) çok da bir fark yoktur. Fiziksel bir bakış açısıyla, etkileşim biçimlerinden birinin kullanımı diğerine göre hesaplamalar ve model yaklaşımları açısından daha gerçekçi ve kolay olacaktır. Örneğin, sistemin Hamiltonyeninin, spin-yörünge operatörü $\mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i$, $i=1,2$ ile orantılı olarak her bir parçacık için spin-yörünge etkileşimlerinin toplamı olan merkezi etkileşimler yoluyla modellendiğini varsayalım. Sistem enerjileri ki Hamiltonyenin özdeğerleridir, açısal momentum sayıları l_i , s_i ve j_i den j - j biçimi kullanılmak şartıyla hemen verilir. O zaman spin-yörünge operatörleri bu gösterimde diagonaldir. Diğer taraftan eğer Hamiltonyen $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ ile orantılı bir spin-yörünge etkileşimine sahip ise iki operatör de denklem (2.1)’deki gibidir, o zaman da L - S şekli tercih edilir. Dikkat edilirse her iki spin-yörünge etkileşiminin içerdiği Hamiltonyen (ki ara çiftlenim olarak adlandırılır) karmakarışık olmaktansa hesaplanır olacaktır. Her iki etkileşim biçiminde spin-yörünge operatörünün indirgenmiş matris elemanı

$$\langle (l s) J \parallel \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \parallel (l' s') J' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{ll'} \delta_{ss'} [J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (2.3)$$

ile verilir (Thompson, 2004).

2.3 2x2 Matris Gösterimi: Pauli Matrisleri

Bir çok atom altı parçacığın (elektron,proton,nötron gibi) 1/2 spine sahip olduğunun gözlemlenmesiyle birlikte Pauli matrisleri kuantum mekaniğinde geniş bir kullanım alanı buldu. Ayrıca Pauli matrisleri çok elektronlu karmaşık bir atomu göstermek için kullanılabileceği gibi, matematiksel olarak açısal momentumu geliştirmek ve daha büyük açısal momentum sayılarından oluşan bir sistemin dönmelerini açıklamak için de kullanılabilir.

Açısal Momentum Operatörünün Bileşenleri Olarak Pauli Matrisleri: Kartezyen koordinatlarda Pauli matrisleri,

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

olarak verilir. Matrisleri x,y ve z koordinatlarına uygun olarak ilgili alt indislerle gösterdik ancak bu üç matris ortak olarak $\sigma=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ biçiminde de gösterilir. Spin matrisi s Pauli matrisleri cinsinden,

$$s = \frac{1}{2} \sigma \quad (2.5)$$

olarak tanımlanır.

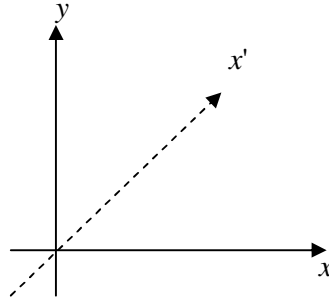
Pauli Matrislerinin Özellikleri: Hesaplama terimleri içinde Pauli matrisleri (2.4)'ü kullanmak spin matrisleri (2.5)'i kullanmaktan daha kolaydır çünkü her bir Pauli matrisi,

$$\sigma_j^2 = \mathbf{I}_2 \quad j = x, y, z \quad (2.6)$$

özelliklerine sahiptir. Burada $\mathbf{I}_2$, 2x2'lik bir birim matristir. Pauli matrislerinin bir diğer özelliği de antikomütasyon özelliği olup,

$$\sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 0 \quad j \neq k \quad (2.7)$$

şeklinde gösterilir. Burada j veya k x , y ve z koordinatlarından biridir. Spin değeri ile ilgili olarak yeni bir eksen dikkate alalım ve Şekil 2.2’de gösterildiği gibi x ve y eksenleri arasında tam orta kısımda yer alan bu eksene x' diyelim.



Şekil 2.2 Referans eksen x veya y eksenine $\pi/4$ uzaklıkta seçildiğinde x' boyunca x ve y spin bileşenleri eşit bir katkı sağlar.

Eksenlerin eşitliği dolayısıyla, x ve y spin bileşenleri eşit bir biçimde katkı sağlar. Böylece,

$$\sigma_{x'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_x \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_y \quad (2.8)$$

yazarız. Burada matrislerin önündeki katsayılar toplam olasılığın birimselliğinden emin olmamızı sağlar. Cebirsel olarak bu matrislerin karesini alabiliriz. Bu durumda

$$\sigma_{x'}^2 = \frac{1}{2} [\sigma_x^2 + \sigma_y^2 \pm (\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x)] \quad (2.9)$$

olduğunu görmek hiç de zor değildir. Yalnız burada operatörlerin sırasına dikkat edilmelidir.

Pauli Matrislerinin Özvektörleri: Açısal momentum operatörleri arasında

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i \mathbf{J} \quad (2.10)$$

biçiminde temel bir yer değiştirme bağıntısı vardır (Thompson, 2004). Bu şart yüzünden verilen bir eksen seçimi için sadece bir doğrultuda köşegen gösterimi yapabiliriz. (2.4) Pauli matrisleri tanımından bu eksen z eksen olarak seçeriz. Doğrusu, açısal momentumu ele alırken “ z eksenine” bakarsak, tanımının genellikle “köşegenel gösterimin yönü” olduğunu görürüz.

σ_z Pauli matrisinin özvektörleri nelerdir? Aslında iç(skaler) çarpımları mümkün kılabilmek için 2×1 (sütun) matrislerinin oluşturulması gerekir. Bunları a_+ ve a_- elemanları ile yazalım. Böylece özvektörler için matris cebri bilgilerimizi kullanarak

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_+ \\ a_- \end{bmatrix} = M_{\pm} \begin{bmatrix} a_+ \\ a_- \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

yazabiliriz. Burada $M_{\pm}$ şeklinde iki özdeğerdir. Sol taraf dışındaki çarpanlar yoluyla iki özvektör için,

$$\chi_+ \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \chi_- \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

gibi iki özvektör tanımlamak mümkündür. İlgili özdeğerler ise $M_+ = +1$, $M_- = -1$ dir. Çünkü (2.11) $a_{\pm}$ genliklerinde lineerdir, $\chi_{\pm}$ ’nin katsayıları da özdeğerlerdir. (2.12)’daki seçimler ortonormal özvektörler yapılı, yani,

$$\tilde{\chi}_{\pm} \chi_{\pm} = 1 \quad \tilde{\chi}_{\mp} \chi_{\pm} = 0 \quad (2.13)$$

Bu bağıntılardan ikincisi Hermitik operatörlerin özvektörlerinin ortogonalite bağıntısını gösterir.

$\chi_{\pm}$ özvektörleri açısal momentum matrisi $s_z = \sigma_z/2$ için de uygundur. s_z ’nin özdeğerleri bu matrisin köşegen elemanları olup $\pm 1/2$ dir. Bu yüzden χ_+ ve χ_- matris

gösterimlerini sırasıyla “spin yukarı” ve “spin aşağı” durumları olarak adlandırmak yerinde olacaktır.

Spin Öz durumlarının Matris Gösterimleri: Yukarıda Pauli matrisinin özvektörlerini (2.12) biçiminde gösterdik. Bunların spin izdüşümleri de $\chi_{\pm}$ için $m = \pm 1/2$ dir. $j(j+1)$ özdeğerine sahip $\mathbf{J}^2$ ve m özdeğerine sahip J_z ’nin özvektörü için sütun matrisi gösterimi χ_{jm} şeklinde gösterilir ve

$$\chi_{jm} = \begin{bmatrix} \delta_{j,m} \\ \delta_{j-1,m} \\ \vdots \\ \delta_{-j,m} \end{bmatrix} \quad (\chi_{jm})_{m'} = \delta_{m',m} \quad (2.14)$$

ile verilir (Thompson, 2004).

2.4 Spinör Uzayı ve Operatörleri

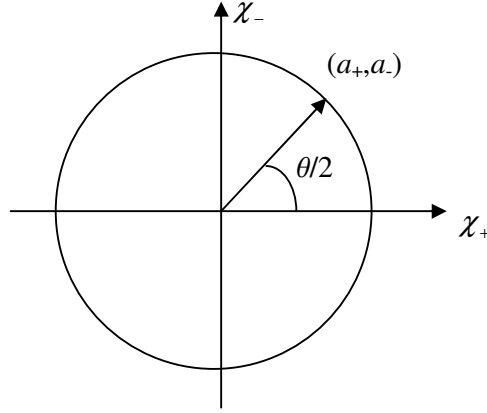
Spinörlerin Tanımı: Spinörün tanımı için matematiksel bir ifade olarak S kullanırız. Eğer 2π dönmesi altında işaret değiştiriyorsa S bir spinördür denir. Yani,

$$S(\theta + 2\pi) = -S(\theta) \quad (2.15)$$

Bu şart S ’nin onunla ilgili bir işarete sahip olabileceğine dair bir varsayımdır. Örneğin, geometrik bir şeklin (meselâ bir çokgen) işareti yoktur, dolayısıyla bir spinör olamaz. Halbuki matrisler işaretlenebilir, bu sebeple spinörler için aday olabilirler. (2.15)’den görülebileceği gibi bir spinör 4π kadar bir dönme sonrasında kendi başlangıç değerine döner. Dikkat edilirse bu (2.15) spinör tanımı çok da açık bir tanım değildir fakat bir spinöre sahip olup olmadığımızı test etmede kullanılabilir. Yoksa bir spinör oluşturmak için bir yol sağlamaz.

Spinör Uzayı ve Matris Gösterimi: Farzedelim ki uzayda birim vektör gibi etkiyen ve koordinatları χ_+ ve χ_- nicelikleri cinsinden tanımlanan, bir soyut uzayımız olsun.

Teknik olarak böyle bir uzaya Hilbert uzayı diyoruz. Bu spinör uzayını Şekil 2.3’de görmek mümkündür.



Şekil 2.3 Dönmeler için spinör uzayı, birim vektörler χ_+ ve χ_- eksenleri boyuncadır.

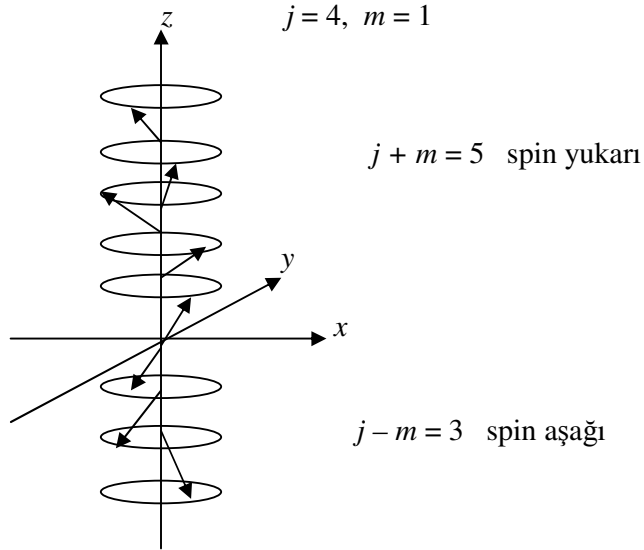
Spini 1/2 olan sistemler için dönmeleri bu uzayda tanımlamak istiyoruz. Bu uzaydaki noktaların koordinatları olan a_+ ve a_- ‘nin kompleks olmasına izin verilir ve

$$|a_+|^2 + |a_-|^2 = 1$$

olması gerekir. Böylece spinör uzayında noktaların dönmeleri Şekil 2.3’de gösterildiği gibi bir çembere bağlı olarak tanımlanır.

Özellikle spinör–uzay koordinatları $\theta = 2\pi$ iken işareti değişir ve $\theta = 4\pi$ dönmesi altında kendi başlangıç değerine döner. Bu, konfigürasyon uzayından spinör uzayına verilen bir eşlemedir.

Şimdi spin öz durumlarını tanımlamak için spinör gösterimini nasıl kullanacağımızı gösterelim. Spinör gösterimini Şekil 2.4’deki gibi resmetmek mümkündür (Thompson, 2004).



Şekil 2.4 (j, m) durumunun spinör gösterimi. Toplam açısal momentum sayısı $j = 4$ ve izdüşüm sayısı $m = 1$ olan bir durumun spinör-uzay gösteriminin yarıklasik vektör modeli gösterimi. Burada $j + m = 5$ yukarı spin spinörü ve $j - m = 3$ aşağı spin spinörü vardır.

Şekildeki her bir ok ve disk spini $1/2$ olan açısal momentum vektörünü temsil eder. Bunlar, açısal momentumun x ve y bileşenlerinin köşegen elemanları (beklenen değerleri) sıfır olacak şekilde z eksenini etrafında düzgün bir şekilde presesyon yaparlar. z bileşeni değerleri de ya $+1/2$ (spin-yukarı) veya $-1/2$ (spin-aşağı)'dır. $j + m$ spin-yukarı durumlarının her biri χ_+ spinörü ile ve $j - m$ durumlarının her biri de χ_- ile temsil edilir. Açısal momentumun spinör uzayı gösterimleri böylece,

$$u(jm) = \frac{\chi_+^{j+m} \chi_-^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \quad (2.16)$$

ile verilir (Thompson, 2004). Bu, ortonormaldir ve açısal momentum işlemcileri altında özdeğeri $j(j+1)$ olan $\mathbf{J}^2$ ve m olan J_z 'nin özfonksiyonları gibi davranır. Bunlar (j, m) olarak etiketlenmiş durumlardır.

Spinör Gösteriminde Açısal Momentum Operatörleri: Geleneksel olarak (x, y) gibi değişkenler için yaptığımız biçimde, spinör uzayında da (χ_+, χ_-) parçalı diferansiyel operatörler tanımlayacağız.

$$\partial_+ = \frac{\partial}{\partial \chi_+} \quad \partial_- = \frac{\partial}{\partial \chi_-} \quad (2.17)$$

bu operatörler çok kullanışlı özelliklere sahiptir. Küresel bazda açısal momentum operatörleri ilişkisini

$$J_{+1} = \chi_+ \partial_- \quad J_0 = \frac{1}{2}(\chi_+ \partial_+ - \chi_- \partial_-) \quad J_{-1} = \chi_- \partial_+ \quad (2.18)$$

yazabiliriz. Bunlar gerçekten de açısal momentum operatörüdürler çünkü

$$J_r J_s - J_s J_r = i \epsilon_{rst} J_t \quad (2.19)$$

şeklindeki komütasyon kuralına uyarlar. Ayrıca χ_+ ve χ_- 'e uygun olarak da davranırlar, yani,

$$J_{\pm 1} \chi_{\mp} = \chi_{\pm} \quad J_0 \chi_{\pm} = J_z \chi_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \chi_{\pm} \quad (2.20)$$

Dikkat ederseniz Şekil 2.3'de gösterildiği gibi χ_+ ve χ_- 'nin lineer bir kombinasyonu genellikle J_z 'nin bir özdurumu değildir.

2.5 Açısal Momentum Özdeğerleri ve Matris Elemanları

J^2 ve J_z 'nin Özdeğerleri: Özdeğerleri tanımlayarak işe başlayalım. $P = J_z$ biçiminde Hermitik bir operatör dikkate alalım. Böylece $P|n\rangle = p_n|n\rangle$ şeklindeki özdeğer denkleminde benzer olarak,

$$J_z |\lambda\mu\rangle = \mu |\lambda\mu\rangle \quad (2.21)$$

yazabiliriz. Burada bir $n \rightarrow \lambda\mu$ yazdık. Her bir özdurum için iki etiket olması gerektiğini kestirebiliriz. (Geleneksel olarak, eğer belirsizlik yoksa yani durum açık ve belirgin ise etiketler bir virgöl ile ayrılmaz.) $J_z = -i[J_x, J_y]$ komütasyon bağıntımız olduğuna göre,

$\alpha = J_x$ ve $\beta = J_y$ tanımlarını yapmamızda bir sakınca yok. Kuantum fiziği bilgilerimizden açısal momentum için basamak operatörlerinin

$$J_{\pm 1} = (J_x \pm iJ_y) \quad (2.22)$$

olduğunu biliyoruz. Burada antisimetrik ve simetrik bileşimler sırasıyla

$$\begin{aligned} A = -[\alpha, \beta] &\rightarrow i[J_x, J_y] = -J_z \\ S = \alpha^2 + \beta^2 &\rightarrow J_x^2 + J_y^2 = \mathbf{J}^2 - J_z^2 \end{aligned} \quad (2.23)$$

olacaktır. $\mathbf{J}^2$ ve J_z 'nin özdeğerlerinin de yine kuantum fiziği bilgilerimizden

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 |jm\rangle &= j(j+1) |jm\rangle & j = 0, 1/2, 1, \dots \\ J_z |jm\rangle &= m |jm\rangle & m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \end{aligned} \quad (2.24)$$

olduğunu biliyoruz.

2.6 Basamak Operatörlerinin Matris Elemanları

Burada vereceğimiz bilgiler yine kuantum fiziği bilgilerimiz kullanılarak hazır olarak verilecektir.

Küresel Koordinatlarda: Basamak operatörlerinin $\mathbf{J}^2$ ve bileşenleri cinsinden

$$J_{\pm 1} J_{\mp 1} = (\mathbf{J}^2 - J_z^2 \pm J_z) \quad (2.25)$$

yazıldığını biliyoruz. Bu basamak operatörlerinin çarpım matrisi m ve j 'nin ikisi için de köşegendir. Mademki bir operatör birimsellik yoluyla m değerini değiştirir ve diğeri yine birimsel özelliği ile diğer doğrultuda m değerini değiştirir. O halde

$$J_{\pm 1} |jm\rangle = \Gamma_{\pm}(jm) |jm \pm 1\rangle \quad (2.26)$$

yazabiliriz. Buradaki $\Gamma_{\pm}$ değerlerini bulalım. Bu son ifade (2.24) ifadesi de dikkate alınarak (2.25) bağıntısında yerine yazılırsa,

$$\begin{aligned}
J_{\pm 1} J_{\mp 1} |jm\rangle &= \Gamma_{\pm} |jm \mp 1\rangle \Gamma_{\mp} (jm) |jm\rangle \\
&= [j(j+1) - m^2 \pm m] |jm\rangle
\end{aligned}
\tag{2.27}$$

bulunur. Eğer $\Gamma_{\pm}$ değerleri pozitif kabul edilirse, $\Gamma_{\pm}$ değerleri için uygun çözümleri

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\pm} (jm) &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \\
&= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}
\end{aligned}
\tag{2.28}$$

olarak bulunur. Böylece açısal momentum basamak operatörleri $J_{\pm 1}$ için matris elemanları,

$$\begin{aligned}
\langle jm | J_{\pm 1} | j'm' \rangle &= \Gamma_{\pm} (jm') \delta_{m,m' \pm 1} \delta_{j,j'} \\
&= \sqrt{j(j+1) - m'(m' \pm 1)} \delta_{m,m' \pm 1} \delta_{j,j'} \\
&= \sqrt{(j \mp m')(j \pm m' + 1)} \delta_{m,m' \pm 1} \delta_{j,j'} \\
&= \sqrt{(j \pm m)(j \mp m + 1)} \delta_{m,m' \pm 1} \delta_{j,j'}
\end{aligned}
\tag{2.29}$$

olarak ifade edilebilir (Thompson, 2004).

Kartezyen Koordinatlarda: Basamak operatörü yaklaşımı, açısal momentum matris elemanlarının küresel koordinatlarda hızlı bir türetimini sağlamasa da yinede $\mathbf{J}$ 'nin kartezyen bileşenlerinin matris elemanlarını bulmak isteriz. J_x ve J_y , J_{+1} ve J_{-1} 'nin lineer bir bileşimidir. Birimsellik yoluyla m 'nin alçaltma ve yükseltme değerlerinin her ikisini içeren matris elemanlarını alırız. Böylece kartezyen bazda x bileşeni matris elemanları için

$$\begin{aligned}
\langle jm | J_x | j'm' \rangle \\
= \frac{1}{2} \left[\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m,m'+1} + \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m,m'-1} \right] \delta_{j,j'}
\end{aligned}
\tag{2.30}$$

alırız ki bu x bileşeni elemanları açık bir şekilde reeldir. y bileşeni değerleri ise tamamen sanaldır.

$$\begin{aligned}
& \langle jm | J_y | j'm' \rangle \\
&= \frac{i}{2} \left[\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m,m'+1} + \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m,m'-1} \right] \delta_{j,j'}
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Son olarak kuantizasyon eksenini seçimimiz yüzünden – ki bu, z eksenini boyuncadır – z bileşeni için gösterim, özellikle basit ve köşegendir, yani

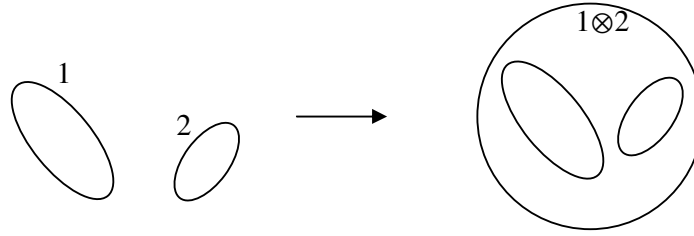
$$\langle jm | J_z | j'm' \rangle = m \delta_{m,m'} \delta_{j,j'} \tag{2.32}$$

Açısal momentumu gösteren matrisler Hermitik'tir.

3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1. İki Açısal Momentumun Toplamı ve Clebsch-Gordan Katsayıları

Her biri açısal momentum özdeğer ve öz durumları ile karakterize edilen iki alt sistem varsayalım. Burada iki alt sistemin dinamik olarak bağımsız olduğunu, yani birinin dönmesinin diğerinden bağımsız olarak gerçekleştiğini varsayacağız. Analitik olarak bu, sistemlerin dönme operatörlerinin yer değiştirdiği anlamına gelir ki operatör cebri açısından bu daha basittir. Örneğin spin (alt sistem 1) ve yörünge (alt sistem 2) açısal momentumu arasındaki farka vurgu yapalım. Bunun için aşağıdaki cebirin kullanımı uygun olacaktır. Bu birleştirmenin nasıl olduğu Şekil 3.1’de gösterilmiştir (Thompson, 2004).

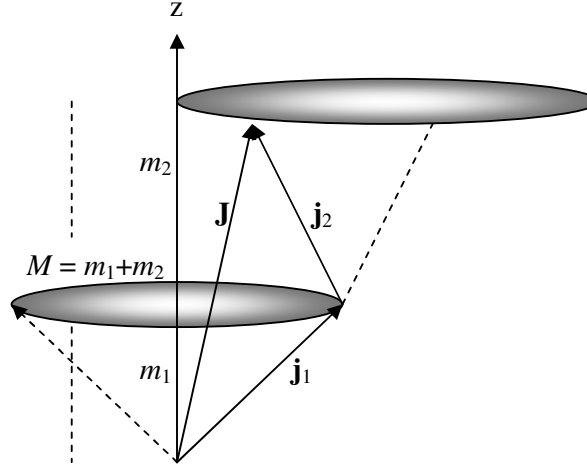


Şekil 3.1 Solda alt sistemler 1 ve 2, kendi dönme özelliklerine sahiptir. Sağda bütün sistemin dönme özellikleri dikkate alınmaktadır.

3.1.1 Toplama İçin Yarı Klasik Vektör Modeli

Farzedelim ki sistem 1 için açısal momentum “vektör”ü (açık konuşmak gerekirse bir vektör operatörü) $\mathbf{j}_1$ ve z eksenini üzerindeki izdüşümü (J_z ’nin özdeğeri) m_1 olsun. Benzer biçimde sistem 2 için vektör $\mathbf{j}_2$ ve kendi izdüşümü de m_2 olsun. Sonuçta $\mathbf{J}$ ’yi ve izdüşümü M ’yi verecek şekilde $\mathbf{j}_1$ ve $\mathbf{j}_2$ vektörleri için vektör toplam diyagramı Şekil 3.2’de gösterilmiştir. Burada vektörlerin toplamını klasik mekanikteki gibi varsayıyoruz.

Farzedelim ki Şekil 3.2'deki gibi (Thompson, 2004), $\mathbf{J}$ vektörünün büyüklüğü J ve izdüşümü M ile verilsin ve j_1 ve j_2 büyüklükleri de sabitlensin. Biz böyle bir durumu $|j_1 j_2 JM\rangle$ şeklinde yazacağız. Üstelik bu sınırlandırmalarla bile alt sistem vektörleri



Şekil 3.2 Klasik mekanikte $\mathbf{j}_1$ ve $\mathbf{j}_2$ gibi iki açısal momentumun $\mathbf{J}$ 'yi verecek biçimde birleştirilmesi. Bunların z eksenini üzerindeki izdüşümü sırasıyla m_1 , m_2 ve M 'dir. Yarıklasik modelde her bir vektör z eksenini etrafında döner(presesyon yapar).

(ki her biri z eksenini etrafında presesyon yapar) $M = m_1 + m_2$ toplam izdüşümü korunumu ile tutarlı bir izdüşümler bölgesine sahip olabilir. Bu yüzden birleştirildiğinde $|j_1 j_2 JM\rangle$ ketini veren $|j_1 m_1\rangle$ ve $|j_2 m_2\rangle$ alt sistem ketlerinin bir bölgesi vardır. Klasik olarak izdüşümler bölgesi, vektörlerin presesyon döngülerinin farklı evrelerinde var olan iki bileşen gibi yorumlanabilir fakat bir bakıma böyle bir seçim $\mathbf{J}$ 'nin izdüşümü M 'nin sabit olması demektir.

Bu vektör modeli tanımını doğrudan doğruya $\mathbf{J}$ 'nin bölgesi için de seçim kurallarını önerecektir. Şimdi iki açısal momentumun birleşiminin tam cebirik işlemini türetebiliriz.

3.1.2. Üçgen ve İzdüşüm Seçim Kuralları

Şimdi yukarıdaki vektör modelinde sunulan açısal momentum birleşiminin davranışını

formüle edelim. İlk olarak 1 ve 2 alt sistemlerini ayrı sistemler olarak tanımlamak zorundayız. Yani,

$$|j_1 m_1\rangle = |\alpha j_1 m_1\rangle \quad |j_2 m_2\rangle = |\beta j_2 m_2\rangle \quad \alpha \neq \beta \quad (3.1)$$

diyelim. Burada α ve β vektör uzaylarını ayıran etiketlerdir. Bu ayırıcılar eğer aşikâr ise biz genellikle α ve β etiketlerini kullanmayacağız. Örneğin bir cisim için α spin uzayını (iç serbestlik derecesi) ve β yörünge açısal momentum uzayını göstermelidir, böylece $\beta = (\theta, \phi)$ olur. Diğer bir örnek, α ve β farklı cisimleri gösterebilir, örneğin iki elektronu veya bir çekirdek ve yörüngesindeki bir elektron.

Makroskobik seviyede ilk açısal momentum Dünya'nın güneş etrafındaki yörüngesinin şekli (hemen hemen dairesel bir yörünge olduğundan çoğunlukla $l_1 = 0$) olarak tanımlanabilir, ikinci açısal momentum Ay'ın Dünya etrafındaki yörüngesinin şekli (çoğunlukla da $l_2 = 0$) olabilir. Bu örnekte toplam açısal momentum Ay'ın yörüngesinin şeklinin güneşten görüldüğü şekli gibi tanımlanabilir ki ayrı ayrı her bir yörüngeden daha az simetrik olacaktır (birleştirilen l_1 ve l_2 den daha büyük maksimum açısal momentum). Burada, kullanılan küçük açısal momentum sayıları için uygun yörünge geometrisini tartışacağız.

Açısal Momentum Operotörlerinin Birleştirilmesi: Şimdi açısal momentum toplamı için formülü sunacağız.

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (3.2)$$

Operatörünü dikkate alalım. Eğer 1 ve 2 alt sistemleri bağımsız ise o zaman $\mathbf{J}_1$ ve $\mathbf{J}_2$ operatörleri yer değiştirir. Böylece her bir operatör ayrı ayrı açısal momentumun temel komütasyon kuralı olan,

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\mathbf{J} \quad (3.3)$$

kurala uyar. Böylece

$$\mathbf{J}_1 \times \mathbf{J}_1 = i\mathbf{J}_1 \quad \mathbf{J}_2 \times \mathbf{J}_2 = i\mathbf{J}_2 \quad \mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\mathbf{J} \quad (3.4)$$

yazılabilir. Kavramsal olarak tüm sistemin ($\mathbf{J}$) sonsuz küçük dönmeleri, Şekil 3.1’de gösterildiği gibi bağımsız alt sistemlerin ($\mathbf{J}_1$ ve $\mathbf{J}_2$) sonsuz küçük dönmelerinin bir karışımıdır.

$\mathbf{J}$ ’nin etkin olduğu uzay bir doğrudan çarpım Hilbert uzayıdır. $\mathbf{J}$ ’nin bileşenleri için uygun ketler, aşağıdaki gibi alt sistem ketlerinin doğrudan çarpımı biçiminde olacaktır.

$$J_i |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = (J_{1i} |j_1 m_1\rangle) |j_2 m_2\rangle + |j_1 m_1\rangle (J_{2i} |j_2 m_2\rangle) \quad (3.5)$$

Burada i bir operatörün bileşenlerini gösterir, örneğin $i = x, y, z$ (Kartezyen bazda) veya $i = +1, 0, -1$ (küresel bazda) gibi.

$\mathbf{J}^2$ ’nin izin verilmiş özdeğerleri bölgesini tanımlayalım. Bunun için klasik mekanikten bildiğimiz iki vektörün toplamı işlemini hatırlayalım. Şekil 3.2’e dikkat edelim. Klasik mekanikte vektörlerin toplamı için kullanılan üçgen kuralı burada da geçerlidir. $\mathbf{j}_1$ ve $\mathbf{j}_2$ vektörleri ile bunların toplamı olan $\mathbf{J}$ vektörü bir üçgenin kenarlarını oluştururlar. Bu durumda, toplam vektörün büyüklüğü $J = j_1 + j_2$ (paralel durum) ile $J = |j_1 - j_2|$ (antiparalel durum) arasında olabilir. Ancak bu kez, toplam açısal momentum da kuantalandığından, tamsayı veya yarı tamsayı değerler alabilir. Yukarıdaki bu tartışmanın sonucu olarak, $J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| - 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2$ ya da,

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad (3.6)$$

yazılabileceği açıktır. Ayrıca toplam vektörün z -bileşeni, bu iki vektörün z -bileşenleri toplamına eşittir. Yani,

$$J_z = J_{1z} + J_{2z} \quad (3.7)$$

olur. O halde toplam açısal momentumun M kuantum sayısı da

$$M = m_1 + m_2 \quad (3.8)$$

olur ki bu, M 'nin korunum şartıdır. J 'nin her bir değerine karşılık $M = J, J-1, \dots, -J$ olan $2J + 1$ durum vardır (Karaoğlu, 2003). Böylece durumların sayısı

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

olur.

Eğer j_1, j_2 ve J büyüklükleri bir üçgenin kenar uzunluklarını gösterseydi, (3.6) bağıntısı söz konusu uzunlukların bir üçgen oluşturabilme şartı olurdu. j_1, j_2 ve J büyüklüklerinin bir üçgen oluşturabilme şartına üçgen kuralı adı verilir ve $\Delta(j_1 j_2 J)$ ile gösterilir. Üçgen kuralı şüphesiz söz konusu büyüklüklere göre simetriktir ve Clebsch-Gordan katsayılarının sıfırdan farklı olabilme şartıdır. Aksi halde, yani üçgen kuralı gerçekleşmediği takdirde Clebsch-Gordan katsayıları sıfır olur.

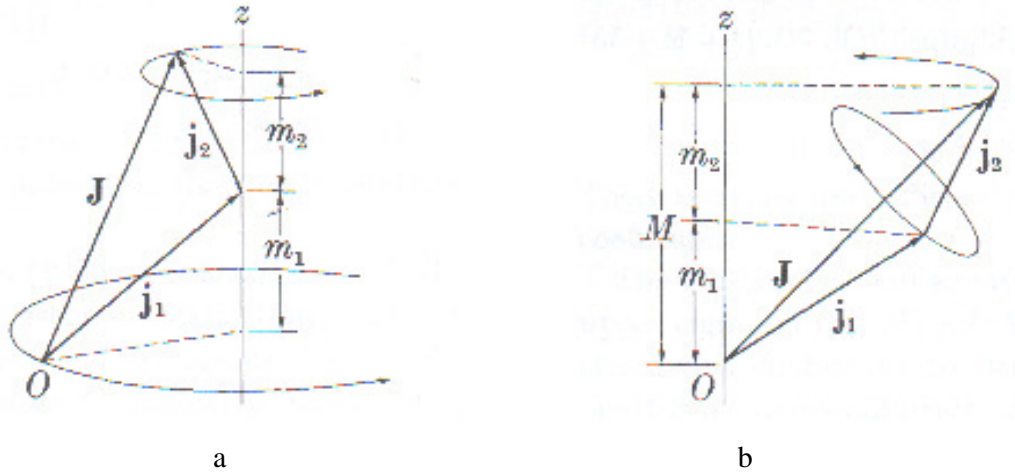
3.1.3. Clebsch-Gordan Katsayıları: Tanımlar ve Genel Özellikler

İki Açısal Momentumun Birleştirilmesi: Çok parçacıklı sistemlerin açısal momentumlarının etkileşmesine temel oluşturmak üzere açısal momentumları $\mathbf{J}_1$ ve $\mathbf{J}_2$ olan iki parçacığı göz önüne alalım Bu parçacıkların durumlarını iki şekilde ifade etmek mümkündür. Bunlar parçacıkların serbest olarak düşünüldüğü çiftlenimsiz gösterim ile parçacıkların birbirine bağlı olarak düşünüldüğü çiftlenimli gösterim denilen şekillerdir ve Şekil 3.3'de (Brink ve Satchler, 1968) gösterilmiştir.

a) Serbest (çiftlenimsiz) Gösterim: Bu gösterimde her parçacık serbest birbirinden bağımsız olarak düşünülür. Her parçacığın açısal momentumu ve momentumun z bileşeni sırasıyla; $\mathbf{J}_1$ ve $\mathbf{J}_{1z}$ ve $\mathbf{J}_2, \mathbf{J}_{2z}$; özvektörleri de $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ şeklinde ifade edilir. Söz konusu açısal momentumların beklenen değerleri, $k=1,2$ olmak üzere

$$\begin{aligned}\hat{J}_k^2 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= \hbar^2 j_k(j_k + 1) |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \\ \hat{J}_{kz} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= \hbar |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle\end{aligned}\quad (3.9)$$

şeklinde ifade edilir (Aygün ve Zengin, 1992).



Şekil 3.3 **a)** $(j_1 m_1 j_2 m_2)$ gösteriminde j_1 ve j_2 , O_z etrafında serbestçe presesyon yapar. $\mathbf{J}$ de belirsizlik hakimdir. **b)** (JM) gösteriminde j_1 ve j_2 , $\mathbf{J}$ 'yi verecek şekilde birleşmiştir ve O_z etrafında presesyon yapar. m_1 ve m_2 kararsızdır.

b) Çiftlenimli Durum: Bu gösterimde parçacıkların etkileşerek bağlandığı şeklinde düşünülür. Her parçacığın açısal momentumu $(\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2)$ toplam açısal momentum $(\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2)$ ve toplam açısal momentumun z bileşeni $(J_z = J_{1z} + J_{2z})$ olur. Özvektörü de $|j_1 j_2 JM\rangle$ şeklinde ifade edilir. Toplam açısal momentumun karesi ile z bileşeninin beklenen değerleri de;

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |j_1 j_2 JM\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j_1 j_2 JM\rangle \\ \hat{J}_z |j_1 j_2 JM\rangle &= \hbar m |j_1 j_2 JM\rangle\end{aligned}\quad (3.10)$$

olur (Aygün ve Zengin, 1992).

Farklı iki matris temsilinin taban vektörleri birbirlerine bir üniter (birimsel) dönüşüm yardımı ile dönüştürülebilir. Ve bu dönüşüm;

$$\Psi_{jm} = \sum_{m'} U_{m'm}^* \Phi_{jm'} \quad (3.11)$$

şeklinde yazılabilir. Benzer şekilde, serbest (çiftlenimsiz) temsilin taban vektörleri bağlı (çiftlenimli) temsilin taban vektörlerine

$$\Psi_{JM} = \sum_{m_1 m_2} C(j_1 j_2 J; m_1 m_2 M) \Psi_{j_1 m_1} \Psi_{j_2 m_2} \quad (3.12)$$

veya

$$|j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \quad (3.13)$$

Üniter dönüşümü ile dönüştürülebilir (Cansoy, 1994). Bu üniter dönüşüm matrisinin $C(j_1 j_2 J; m_1 m_2 M)$ şeklindeki elemanlarına CLEBSCH-GORDAN (veya WIGNER) katsayıları adı verilir.

Açısal momentum operatörünün öz durumlarını doğrudan çarpım gösterimi şeklinde

$$|j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle \quad (3.14)$$

yazarız. Burada teknik olarak bütün işlemlerin birim operatör açılımı,

$$\sum_t |t\rangle \langle t| = 1$$

birim operatör açılımı kullanılarak yapılmıştır. Ket durumlarının doğrudan çarpımı aşağıdaki şekilde verilir.

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = |\alpha j_1 m_1\rangle |\beta j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \quad (3.15)$$

Burada ortadaki ifade kısım 3.1.2’de tartışıldığı gibi doğrudan çarpımın şekillendirdiği durumların farklı Hilbert uzaylarından olması gerektiğini anımsatır. Son biçim kullanıldığında anlam belirsizliği olmaz. Dikkat edilirse bu sonuç için en azından $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ ve $|j_2 m_2\rangle |j_1 m_1\rangle$ durumları arasında bir fark vardır.

(3.14)'daki $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle$ katsayıları Clebsch-Gordan veya vektör toplam katsayıları olarak adlandırılan bu katsayılar birleştirilmiş durumlarda her bir çarpım durumu için genliği verir.

Doğrudan Çarpım Açılımları: Açısal momentumla ilgili çalışmalarda (3.14) açılımı, toplam aralığı ve katsayı notasyonu sebebiyle farklı şekillerde karşımıza çıkar. Özellikle biçimsel çalışmalarda bazen toplamada en büyük mümkün serbestlik istenir. O zaman (3.14) açıkça,

$$| j_1 j_2 JM \rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} | j_1 m_1 \rangle | j_2 m_2 \rangle \delta_{m_1+m_2, M} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle \quad (3.16)$$

olarak yazılabilir. Bazen δ fonksiyonu açıktır veya çiftlenim katsayıları içine dahil edilmiş olabilir. Sol taraftaki M 'nin sabit olduğuna dikkat edin.

Clebsch-Gordan Katsayılarının Birimselliği:

a. Birimsel J Toplamı: Açısal momentum operatörlerinin Hermitik olma özelliklerinden biliyoruz ki özfonksiyonlar (açısal momentumun özfonksiyonları) ortogonaldır ve ortonormal olarak seçilebilirler. Bu, alt sistem 1 ve alt sistem 2 nin her ikisi için doğru ise onların doğrudan çarpımı için de doğrudur. Böylece,

$$\langle j'_1 j'_2 m'_1 m'_2 | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = \langle j'_1 m'_1 | j_1 m_1 \rangle \langle j'_2 m'_2 | j_2 m_2 \rangle = \delta_{j'_1 j_1} \delta_{m'_1 m_1} \delta_{j'_2 j_2} \delta_{m'_2 m_2} \quad (3.17)$$

yazabiliriz. Bu çoğu zaman uygulanır. Bununla birlikte uygun j bileşenleri ve sonra (J, M) durumları cinsinden bir birim operatör ifadesi eklersek, Clebsch-Gordan katsayıları için J toplam birimsel bağıntısını buluruz.

$$\sum_J \langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | j_1 j_2 JM \rangle \langle j_1 j_2 JM | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (3.18)$$

Burada M üzerinden bir toplam olacaktır. Fakat böyle bir toplama sadece bir terim katkı sağlar, yani

$$m'_1 + m'_2 = M = m_1 + m_2 \quad (3.19)$$

Çiftlenim katsayıları gerçek (reel) olarak seçilebilir. (3.18)'daki ikinci bra-ket atılabilir. O zaman bir çiftlenim katsayısı ortaya çıkar. Bu ilişki bu yüzden Clebsch-Gordan katsayılarının ortonormalliği olarak da açıklanır.

b. Birimsel m -Bileşen Toplamı: Clebsch-Gordan katsayılarının diğer bir birimsel özelliği bağlı $|JM\rangle$ durumlarının ortonormalliğini dikkate alarak türetilir. Bra ve ketlerde bu açılımlar ile ve onların hesaplanan skaler çarpımları, doğrudan çarpım durumları cinsinden önceki türetime benzer olarak Clebsch-Gordan katsayıları için m -toplama ilişkisi için,

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 JM' | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (3.20)$$

buluruz (Thompson, 2004). Ayrıca bu $0=0$ şeklinde ilgimizi çekmeyen bir bağıntı değildir. Gerçek çiftlenim katsayılarının kullanımıyla ilk katsayılar atılabilir. Böylece ortonormal bir m -toplam elde ederiz.

Spinör Gösterimleriyle Clebsch-Gordan Katsayılarının Tanımlanması: Clebsch-Gordan katsayılarının formülünü türetmek için açısal momentum durumlarının spinör uzayı temsillerini ve indirgenmiş dönme matris elemanlarını kullanacağız. Böylece türetimimiz temel spin-yarı durumları arasında $\chi_{\pm}$ gibi kavramsal bir birime sahip olacaktır. Tek alt durumun sonlu dönmesini ve bağlı durumların sonsuz küçük dönmelerini kullanacağız.

Açısal momentum (j, m) 'in spinör uzayı temsili,

$$u(jm) = \frac{\chi_+^{j+m} \chi_-^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \quad (3.21)$$

ile verilmişti. Burada

$$\chi_+ \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \chi_- \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

olduğu Bölüm 2’de gösterilmişti. $\chi_{\pm}$ özvektörleri açısal momentum matrisi $s_z = \sigma_z / 2$ için de uygundur. s_z ’nin (Pauli matrislerinin z -bileşeni) özdeğerleri bu matrisin köşegen elemanları olup $\pm 1/2$ dir. Böylece χ_+ ve χ_- sırasıyla spin-yukarı ve spin-aşağı durumlarının öz vektörleridir ve ortonormallik özellikleri de,

$$\tilde{\chi}_{\pm} \chi_{\pm} = 1 \quad \tilde{\chi}_{\mp} \chi_{\pm} = 0 \quad (3.23)$$

dir.

Bu $j-m$ spin-aşağı durumlarıyla birleştirilmiş bir spin-1/2 sisteminin $j+m$ spin-yukarı durumları şeklinde Şekil 3.4 deki (Thompson, 2004) gibi gösterilebilir. Mademki mevcut uygulamalarda açısal bağıllık şimdilik ilgimizi çekmiyor, spinörlerdeki β ’yı ihmal edebiliriz.

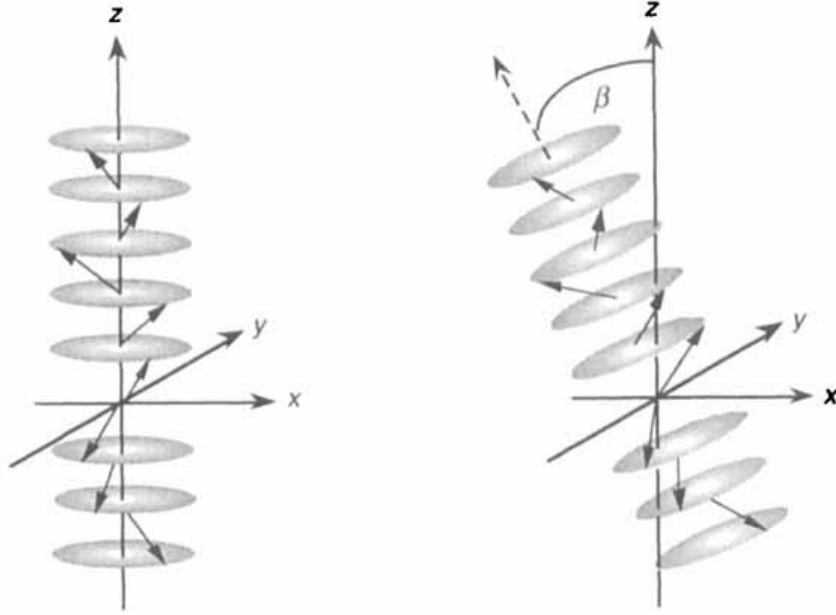
Amacımız $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle$ Clebsch-Gordan katsayılarını bulmak. Öyle ki,

$$u(JM) = \sum_{m_1} \sum_{m_2} u(j_1 m_1) u(j_2 m_2) \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle \quad (3.24)$$

yazalım. Buradaki her bir u (3.21) biçimindedir. (3.24)’ten anlaşılacağı gibi $u(j_1 m_1)$ alt sistem 1’i, $u(j_2 m_2)$ alt sistem 2’yi, $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle$ ise iki sistemi bağlayan matris elemanlarını temsil etmektedir.

Biz önce gergin- M özfonksiyonunu (burada “gergin” ile kastedilen durum açısal momentum vektörlerinin aynı doğrultuda zıt yönelimlerinin olduğu durumdur.) ve onunla ilişkili katsayıları doğrudan bulalım, sonra daha küçük M değerlerine başarılı bir

şekilde uygulayacak ve alçaltma operatörü J_{-1} 'in uygulamalarını tekrarlayıp yapacağız. Notasyonu hafifçe iki alt sistem spinörleri



Şekil 3.4 Yarı klasik vektör modelinin spinör-uzayı temsili. Önce sistem döndürülür (sol taraf) ve sonra y ekseninde β boyuncasıyla döndürülür (sağ taraf). Burada 5 spin-yukarı spin-1/2 alt sistemi ve 3 spin-aşağı spin-1/2 alt sistemi vardır. Böylece sol taraf $m = (5-3)/2 = 1$ ve $j = (5+3)/2 = 4$ olan bir sistemi gösterir. Sağ tarafta görünümün bir m bölgesi vardır fakat hâlâ $j = 4$ 'tür.

kapsayacak şekilde genişleteceğiz. Bunu $\chi_{1\pm}$ ve $\chi_{2\pm}$ ile yapacağız. Karma sistem için basamak operatörleri,

$$J_{\pm 1} = (\chi_{1\pm} \partial_{1\mp} + \chi_{2\pm} \partial_{2\mp}) \quad (3.25)$$

olarak tanımlanır. Eğer yükseltme operatörünü gergin duruma uygularsak sıfıra eşitlemek durumundayız. Böylece

$$(\chi_{1\pm} \partial_{1\mp} + \chi_{2\pm} \partial_{2\mp}) u(JJ) = 0 \quad (3.26)$$

olur. Bu denklemin çözümü,

$$u(JJ) = \phi(\chi_{1-}\chi_{2+} - \chi_{2-}\chi_{1+}, \chi_{1+}, \chi_{2+}) \quad (3.27)$$

olur. Burada ϕ belirtilen değişkenlerin herhangi bir fonksiyonudur. Halbuki $u(JJ)$ $\chi_{1+}\chi_{1-}$ de $2j_1$ dereceden ve $\chi_{2+}\chi_{2-}$ de $2j_2$ dereceden homojendir, bu durumda,

$$u(JJ) = \sum_k (\chi_{1-}\chi_{2+} - \chi_{2-}\chi_{1+})^k \chi_{1+}^{2j_1-k} \chi_{2+}^{2j_2-k} C_k \quad (3.28)$$

biçiminde belirli olmak zorundadır. Burada C_k katsayılarıdır. (3.28)'deki parantez içiyle J_z komütatiftir (yer değiştirir) ve $k = j_1 + j_2 - J$ olmadıkça $C_k = 0$ olur. Böylece (3.28)'deki toplamda sadece bir terim vardır, bu yüzden,

$$u(JJ) = (\chi_{1-}\chi_{2+} - \chi_{2-}\chi_{1+})^{j_1+j_2-J} \chi_{1+}^{J+j_1-j_2} \chi_{2+}^{J-j_1+j_2} C \quad (3.29)$$

olacaktır. Terimlerde bir tek katsayı vardır o da C 'dir ve aşağıda tanımlanacaktır. (3.28)'ün sağ tarafını genişletmek ve altsistem özfonksiyonlarına uyan terimleri birlikte toplamak için (3.21) kullanılırsa,

$$u(JJ) = C \sum_{m_1} (-1)^{j_1-m_1} \sqrt{\frac{(j_1+m_1)!(j_2+J-m_1)!}{(j_1-m_1)!(j_2-J+m_1)!}} \times (j_1+j_2-J)! u(j_1 m_1) u(j_2 m_2) \quad (3.30)$$

bulunur (Thompson, 2004). Buradaki sabit ile farkına vardık ki altsistem durumlarının katsayıları (3.24)'a göre sadece gerekli Clebsch-Gordan katsayılarıdır. Bu katsayılar ortonormal olup C 'yi mümkün kılar ve gergin- M çiftlenim katsayısını tanımlar.

Bu noktada Condon ve Shortley faz korunumundan bahsedelim. (3.30)'deki C gerçek ve pozitif olarak seçilir. Böylece bütün açısal momentum çiftlenim katsayıları gerçek olacak ve birimsel bağıntılar, ortonormallik bağıntıları olacaktır. Bu dünya çapında kullanılır (belki de evrenseldir). Yapılacak biraz işlem ile C 'yi,

$$C = \sqrt{\frac{(2J+1)!}{(J+j_1-j_2)!(J-j_1+j_2)!(j_1+j_2-J)!(J+j_1+j_2+1)!}} \quad (3.31)$$

buluruz. (3.30) içindeki bu değişkenler yoluyla $J = M$ için uygun Clebsch-Gordan katsayılarını tanımlayabiliriz. Fakat şimdi genel katsayıları türetilim.

Genel Clebsch-Gordan Katsayıları: Aslında $J = M$ katsayılarımız olduğundan biz diğerlerini $u(JJ)$ üzerine (3.25)'deki alçaltma operatörü J_{-1} 'in etkisini deneme yoluyla üretebiliriz. $J - M$ kere uygulanan operatör $u(JM)$ durumunu üretir ve onun çiftlenim katsayıları cinsinden ifadesi (3.24)'dur. Bazı ustaca cebirik işlemlerden sonra standart Clebsch-Gordan katsayısı için

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle &= \delta_{m_1+m_2, M} \sqrt{2J+1} \\ &\times \sqrt{\frac{(J+j_1-j_2)!(J-j_1+j_2)!(j_1+j_2-J)!(J+M)!(J-M)!}{(j_1+j_2+J+1)!(j_1-m_1)!(j_1+m_1)!(j_2-m_2)!(j_2+m_2)!}} \\ &\times \sum_k \frac{(-1)^{k+j_2+m_2} (j_2+J+m_1-k)!(j_1-m_1+k)!}{k!(J-j_1+j_2-k)!(J+M-k)!(k+j_1-j_2-M)!} \end{aligned} \quad (3.32)$$

ile verilen bir ifade bulunur (Thompson, 2004). Faktöriyeller negatif olmadığından k üzerinden toplam tüm tamsayılar üzerindedir. Bu çiftlenim katsayıları için iki özel değer bulalım.

$j_2 = 0$ için Clebsch-Gordan Katsayısı: Beklediğimiz gibi ikinci açısal momentum sıfır olduğunda, üçgen kuralı ve vektör-toplam modelinin her ikisi de sadece $J = j_1$ gerektirir, o zaman $M = m_1$ olur. Bu değerler (3.32) genel formülünde yerine yazılırsa,

$$\langle j_1 0 m_1 0 | j_1 J m_1 \rangle = 1 \quad (3.33)$$

toplamda sadece bir terim olduğundan (3.20) ortonormallik şartıyla tutarlı bir sonuç buluruz.

$J = 0$ için Clebsch-Gordan Katsayısı: Varsayalım ki $J = 0$, bu, (3.6) üçgen kuralı ve Şekil 3.2 vektör-toplama modelinin her ikisine göre eğer $j_2 = j_1$ ve $m_2 = -m_1$ ise

mümkündür. (3.32) genel formülünü yerine konursa toplamda sadece $k = 0$ terimlerinin kaldığını görürüz ve

$$\langle j_1 j_1 m_1, -m_1 | j_1 j_1 00 \rangle = \frac{(-1)^{j_1 - m_1}}{\sqrt{2 j_1 + 1}} \quad (3.34)$$

olur. Bu “paralel olmayan” çiftlenim dizilimi için bir olasılık verir.

Clebsch-Gordan katsayılarının yaygın kullanımına rağmen çok daha simetrik bir biçimi 3- j katsayısıdır. Şimdi bunu açıklayalım.

3.1.4 3- j Katsayıları ve Özellikleri

Şimdiye kadar iki açısal momentum öz durumlarını birleştirmeyi göz önüne alıp özel bir yöntemle üçüncü açısal momentum (J, M) 'i bulmak için işlem yaptık. Daha simetrik bir davranış, benzer terimlerde üç açısal momentum dikkate alıp 3- j katsayıları cinsinden ifade etmektir.

Semboller üzerine bir not: Şimdiye kadar toplam açısal momentum sayılarını gösteren çeşitli indisler yoluyla j harfini ve izdüşüm sayılarını göstermek için ise m etiketini kullandık. Her açısal momentum ve dönme özelliklerini vurguladığımızda bu pratiği devam ettireceğiz. Diğer taraftan, katsayıların cebirik işlemleri için indisleme yapmadan değişkenler kullanmak daha kolaydır, örneğin a, b, c gibi. Bunların izdüşüm kuantum sayıları ise Yunan alfabesi harfleriyle gösterilir, örneğin α, β, γ gibi.

j_1 ve j_2 gibi iki açısal momentum durumunu $(j_3, -m_3)$ gibi üçüncü bir biçimi oluşturacak şekilde birleştirdiğimizi varsayalım. Ayrıca aynı j_3 'ü bu durum ile birleştirelim fakat z izdüşümü m_3 zıt tarafta olsun, bu durumda toplam izdüşüm sıfır olur. Bu çiftlenim durumunda toplam $j = 0$ demektir. Biz şimdi sıfıra eşitlenen üç açısal momentum yoluyla biçimlenmiş izotropik bir niceliğe (bir skaler) sahibiz. Çiftlenim katsayılarının

yerini tutan ifade Wigner tarafından bulundu ve 3- j katsayısı olarak adlandırıldı. 3- j katsayısının simetri özellikleri Clebsch-Gordan katsayılarına nispeten daha basittir.

3- j Katsayısının Türetimi: 3- j katsayısını türetmek için, daha önceki paragrafta tanımlanan açısal momentum çiftleniminin cebiriyle oynayalım. İlk kombinasyon,

$$|(j_1 j_2) j_3, -m_3\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3, -m_3\rangle \quad (3.35)$$

dir. (0,0) durumunu üreten ikinci birleşim,

$$|(j_1 j_2 j_3) 00\rangle = \sum_{m_3} |(j_1 j_2) j_3, -m_3\rangle |j_3 m_3\rangle \langle j_3 j_3, -m_3 m_3 | j_3 j_3 00\rangle \quad (3.36)$$

dir. Gerekli katsayılar (3.34)'dan $(-1)^{j_3-m_3} / \sqrt{2j_3+1}$ olarak bulunmuştu. Eğer biz şimdi (3.36) de bunu kullanırsak ve (3.35) ile birleştirirsek üç açısal momentumu sıfıra eşitleyen ifadeyi buluruz. Yani,

$$|(j_1 j_2 j_3) 00\rangle \propto \sum_{m_1 m_2 m_3} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

olur. Burada orantı sabiti sadece bir aşamadır. Üç açısal momentumun sıfır olacak şekilde toplanmasıyla tanımlanan, Wigner'in 3- j katsayısı olarak adlandırdığı katsayıları açıkladık.

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1-j_2-m_3} \frac{\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3, -m_3\rangle}{\sqrt{2j_3+1}} \quad (3.38)$$

3- j katsayısı,

$$m_1 + m_2 + m_3 = 0 \quad (3.39)$$

olmadıkça sıfırdır ve (3.37) üçgen kurallarını sağlamak zorundadır. (3.38) içine Clebsch-Gordan katsayısı için verilen (3.32) formülünün dahil edilmesiyle, 3- j katsayısı için bir formülü hemen buluruz.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} &= \delta_{m_1+m_2+m_3,0} (-1)^{j_1-j_2-m_3} \\ &\times \sqrt{\frac{(j_3+j_1-j_2)!(j_3-j_1+j_2)!(j_1+j_2-j_3)!(j_3-m_3)!(j_3+m_3)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!(j_1-m_1)!(j_1+m_1)!(j_2-m_2)!(j_2+m_2)!}} \\ &\times \sum_k \frac{(-1)^{k+j_2+m_2} (j_2+j_3+m_1-k)!(j_1-m_1+k)!}{k!(j_3-j_1+j_2-k)!(j_3-m_3-k)!(k+j_1-j_2+m_3)!} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Bu formülden 3- j katsayısının çeşitli özelliklerini çıkarabiliriz.

3- j Notasyonunda Temel Formüller: Şimdi 3- j kullanılarak birleştirilen iki açısal momentum için temel formülü aşağıya yazacağız, sonraki formüller genellikle bu biçimde verilecektir. 3- j notasyonunda temel doğrudan çarpım genişlemesi (3.14)

$$\begin{aligned} |j_1 j_2 JM\rangle &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \delta_{m_1+m_2,M} \\ &\times (-1)^{j_1-j_2+M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.41)$$

yoluyla açıklanır. Bu ifade başlangıç olarak (3.14) Clebsch-Gordan tanımından çok daha kullanışsız sıkıcı olmasına rağmen 3- j katsayısının daha simetrik olması onu er geç daha uygun duruma getirecektir.

Birimsel J toplamı (3.18) ve (3.32)'nin birleştirilmesiyle

$$\sum_{j_3} (2j_3+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} \delta_{m_1+m_2, -m_3} \quad (3.42)$$

olarak bulunur. (3.20) de yerine yazılırsa, birimsel m toplamı,

$$\sum_{m_1, m_2} (2j_3 + 1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j'_3 \\ m_1 & m_2 & m'_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{j'_3 j_3} \delta_{m'_3 m_3} \quad (3.43)$$

olur. Böylece J ve m toplamının her ikisinde, 3- j katsayısı ortogonalite şartları $2j_3 + 1$ ağırlık faktörlerini gerektirir.

Bir 3- j katsayısında açısal momentumun birinin sıfır olması halinde ilk söylenecek, (3.34)'ün benzerine sahip olduğumuzdur. Yani,

$$\begin{pmatrix} j_1 & 0 & j_3 \\ m_1 & 0 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{j_1 j_3} \delta_{m_1, -m_3} \frac{(-1)^{j_3 - m_1}}{\sqrt{2j_1 + 1}} \quad (3.44)$$

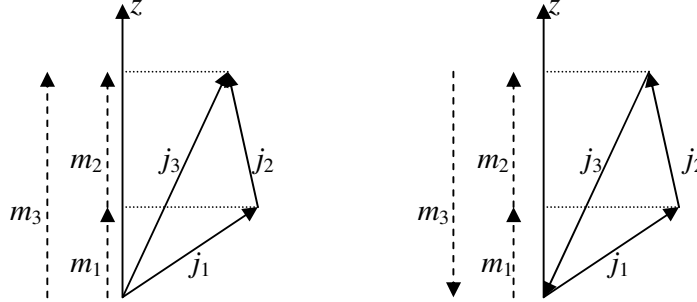
dir. Yine, bu Clebsch-Gordan katsayı bağıntısından daha çok karmaşıktır fakat j_1 ve j_3 'ün değişimi altında daha basittir.

3- j ve Clebsch-Gordan Katsayılarının Karşılaştırılması: Cebirsel bağıntı (3.38)'ün dışında iki çiftlenim katsayısı arasındaki farkı göz önüne alalım, Şekil 3.5'de gösterildiği gibi açısal momentumun kendi kombinasyonları için yarı klasik vektör modeli (Kısım 3.1) çizmeyi kolaylaştırır.

Toplam açısal momentumun sıfıra eşitlenmesi 3- j katsayısını üretir ve Clebsch-Gordan katsayısından daha simetriktr. Şimdi 3- j katsayılarının simetri özelliklerine bakalım.

J Yerdeğişimi ve İzdüşüm İşaretinin Değişmesi Altında Simetriler: Clebsch-Gordan katsayıları ile karşılaştırıldığında 3- j katsayılarının dört önemli simetri özelliği vardır. İlk olarak 3- j katsayısı için verilen (3.40) ifadesinde $k' = k - j_1 + j_2 + m_1 + m_2$ yazalım, o zaman toplam yeniden düzenlenir ve doğrudan

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ -m_2 & -m_1 & -m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (3.45)$$



Şekil 3.5 Bir Clebsch-Gordan katsayısı (solda) ile bir 3- j katsayısının (sağda) arasındaki farkın gösterimi. Sağ ve soldaki gösterimlerde j_3 ve m_3 'ün doğrultularının ters çevrildiğine dikkat edin ve m toplam kuralı iki katsayı arasındaki farktır.

olduğu görülebilir. İkinci simetri özelliği benzer olarak türetilebilir.

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

Üçüncü simetri özelliği (3.40)'te $k' = j_2 + j_3 - j_1 - k$ yazılır ve toplam yeniden düzenlenirse

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

olacaktır. Dördüncü simetri özelliği (3.46) ve (3.47)'nin birleşimiyle

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

olarak bulunur. Bu ve (3.47)'deki simetri bir 3- j katsayısının sütunlarının değişimi için genel simetri şartını verir:

3- j katsayısının sütunlarının çift permütasyonu onu değişmez bırakır.

3- j katsayısının sütunlarının tek permütasyonu $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ nin bir faz (3.49)

değişimini üretir.

Açısal Momentumun Birleştirilme Düzeninin Anlamı: Birleştirme düzeninin $|j_1 j_2\rangle JM\rangle$ veya $|j_2 j_1\rangle JM\rangle$ olmasının önemsiz olmasını ümit ediyoruz. Yinede genellikle bir fark sözkonusudur. (3.48)'teki permütasyon özelliğinin

$$|j_2 j_1\rangle JM\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} |j_1 j_2\rangle JM\rangle \quad (3.50)$$

olduğu görülür. Bu yüzden iki açısal momentumun birleşim düzeni önemlidir. Çiftlenim düzeninin yer değiştirmesi bağlı ve serbest durumların toplam açısal momentumunun her ikisine bağlı olarak bir faz değişimini ortaya çıkarabilir. Örneğin yörünge (l) ve spin (s) özketlerini toplam açısal momentumu (J) verecek şekilde birleştirdiğimizi farzedelim. Gergin ve katlamalı ("katlamalı" durum ile kastettiğimiz açısal momentum vektörlerinin aynı yönde paralel yönelimleridir.) durum için sırasıyla,

$$\begin{aligned} |sl\rangle J=l+s, M\rangle &\Rightarrow |ls\rangle J=l+s, M\rangle \\ |sl\rangle J=l-s, M\rangle &= (-1)^{2\min(l,s)} |ls\rangle J=l-s, M\rangle \end{aligned} \quad (3.51)$$

yazabiliriz. O nedenle $s = 1/2$ (nükleonlar veya elektronlar) katlamalı durumu için eğer $l = 0$ ise çiftlenim düzeninin yer değiştirmesi altında işaret değişmez, fakat daha büyük l değerleri için değişir.

İki açısal momentum birleşme düzenine operatörlerin matris elemanları da duyarlıdır. Örneğin aynı J 'nin durumları arasında bir O operatörünü dikkate alalım fakat l_1 ve l_2 yörünge açısal momentumları farklı olabilir. (3.50)'i kullanarak hemen,

$$\langle sl_1\rangle JM' | O | sl_2\rangle JM\rangle = (-1)^{l_1-l_2} \langle l_1 s\rangle JM' | O | l_2 s\rangle JM\rangle \quad (3.52)$$

olduğu görülür. Matris elemanlarında benzer bir faz değişimi olduğundan böyle bir faz değişiminin etkisi özellikle kafa karıştırıcı olabilir. Çiftlenimlerin yeniden düzenlenmesiyle artan faz değişimleri, eğer biri hesaplama süresince çiftlenim düzeniyle tutarlı ise sorun oluşturmaz. Bununla birlikte büyük hesaplamalarda bu duyarlılığı sürdürmeksizin farklı bilim adamları tarafından farklı işlemler yapılabilir, bilhassa büyük bilgisayar programı içeren durumlarda. Dolayısıyla parite işlemlerini taklit eden sahte etkiler kolaylıkla gösterilebilir. İki açısal momentum birleştirildiğinde yeniden etkileşme durumunda faz çoğunlukla bir sıkıntıdır. Üç veya daha çok açısal momentum ile yeniden etkileşme çok daha ilgi çekici bir problemdir. Sonraki kısımda bunu ele alacağız.

Tüm İzdüşümlerin Sıfır Yapılmasıyla Bağlı Durumlar: Eğer bir $3-j$ katsayısının kendi manyetik altdurum izdüşümlerinin tümü sıfıra eşitlenirse (3.40) genel ifadesi basit bir şekle indirgenir. İlk olarak (3.47) deki tüm m değerlerinin işaretinin değişimi için kural, eğer m değerleri sıfır ise özdeş çiftlenim katsayısı ortaya çıkar. Bu yüzden,

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0 \quad a+b+c \text{ tek} \quad (3.53)$$

olmalıdır. Sıfır olmayan katsayılar üzerindeki bu sınırlama kendi sayılarını, verilen a ve b için her zamanki $2\min(a,b)+1$ değerinden $\min(a,b) + 1$ 'e indirger. Sıfırdan farklı katlamalı durum $c = |b - a|$ ve gergin durum $c = a + b$ durumları da dahildir.

Çiftlenim katsayısı tartışmaları ile ilgili (3.53) şartı “parite korunumu” na yol açar. Çünkü bu katsayı bir sistemde parite korunumu ile ilgili olarak bir genlik faktörü olarak sıkça görünür. Bununla birlikte bu durum yansıma simetrisinden çok dönme simetrisi ile ilgilidir. $z \rightarrow -z$ altında parite ile bu katsayı ilişkisi bize $m \rightarrow -m$ 'yi verir, öyleki $m = 0$ ise katsayı değişmez. Bu şartın bir sonucu dönme simetrisinin parite simetrisinin yerini almasıdır. Dolayısıyla parite korunumu testi niyetiyle tasarlanan deneylerin en basiti sadece (3.53)'in doğruluğunun gösterilmesi olabilir.

Sıfırdan farklı katsayılar için $a+b+c$ çift için (3.40)'in basitleştirilmesiyle,

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^s \frac{g!}{(g-a)!(g-b)!(g-c)!} \sqrt{\frac{(2g-2a)!(2g-2b)!(2g-2c)!}{(2g+1)!}} \quad (3.54)$$

elde edilir (Thompson, 2004). Burada $g = (a+b+c) / 2$ bir tamsayıdır. Bu 3-j katsayılarının tüm izdüşümlerin sıfır olması pratik uygulamalarda yaygın olarak ortaya çıkar.

3.2 6-j Katsayıları

3.2.1 Üç Açısal Momentumun Toplamı

Burada üç açısal momentumun birleştirilerek dördüncü bir biçime ulaşıldığı çeşitli çiftlenim şekillerini göstereceğiz. Şüphesiz çiftlenim şekilleri arasındaki ilişkiyi anlamak pratik hesaplamalar açısından önemlidir. Aksi halde çiftlenim sırası değişirse tüm hesabı yeniden yapmak gerekir.

Üç Açısal Momentumun Toplamı İçin Racah ve 6-j Katsayıları: Burada üç açısal momentumun aralarında dördüncü bir biçime dönüştürülme problemini tesis edeceğiz. Bileşenler ve bileşkeler arasındaki fark anlamını yitirecek ve bir önceki kısımda kullandığımız bazı j ifadeleriyle, indislerini burada kullanmayacağız. Toplam açısal momentum için $(a, b, c, d, \dots)$ gibi Latin alfabesinin harflerini ve izdüşümler için onların Yunan alfabesindeki benzerleri olan $(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \dots)$ gibi harfleri kullanacağız.

İki Açısal Momentumun Toplamı: Kısım 3.1.3'te a ve b gibi iki açısal momentumun çiftlenimini türetirken, yerdeğiştiren a ve b 'nin çiftlenim durumları fazının, 3.45'e göre, $(-1)^{a+b-c}$ ile c şeklinde değiştiğini gösterdik. Bu faz önemsiz olmasına rağmen ihmal edilemez. Aşağıdaki tartışmamızda da dolaylı olarak ima edilecektir. Meselâ $\mathbf{J}_a + \mathbf{J}_b$ çiftlenim durumu $\mathbf{J}_b + \mathbf{J}_a$ gibi özdeş bir durumu vermez.

Üç Açısal Momentumun Toplamı: Spin ve yörünge açısal momentumu veya bağımsız yörünge açısal momentumlarını gösteren farklı Hilbert uzaylarına etkiyen üç açısal momentumun birleşimini dikkate alalım.

$$\mathbf{J}_c = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_b + \mathbf{J}_d \quad (3.55)$$

Burada üç operatörün farklı Hilbert uzaylarına etkidiğini varsaydık. Örneğin, spin ve yörünge açısal momentum veya bağımsız yörünge açısal momentumu gibi. $\mathbf{J}_c$ 'nin bir açısal momentum operatörü olduğu açıktır. Bunu göstermek için

$$\mathbf{J}_c = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_b \quad (3.56)$$

şeklinde bir ifade dikkate alalım. Çiftlenim için 3-j katsayılarıyla gösterilen (3.36) ifadesinin kullanımıyla özdurumlar;

$$|(ab)e\epsilon\rangle = \sum |a\alpha\rangle |b\beta\rangle (-1)^{a-b+\epsilon} \sqrt{2\epsilon+1} \begin{pmatrix} a & b & e \\ \alpha & \beta & -\epsilon \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

şeklinde yazılabilir. Burada toplam $\alpha + \beta = \epsilon$ şeklinde α ve β üzerindendir. Daha sonra

$$\mathbf{J}_c = \mathbf{J}_e + \mathbf{J}_d \quad (3.58)$$

şeklinde açısal momentum operatörünü dikkate alalım. Bu operatör,

$$|(ed)c\gamma\rangle = \sum |e\epsilon\rangle |d\delta\rangle (-1)^{e-d+\gamma} \sqrt{2c+1} \begin{pmatrix} e & d & c \\ \epsilon & \delta & -\gamma \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

şeklinde özdurumlara sahiptir. Operatör ve özdurumların neden farklı kombinasyonlarını seçmiyoruz? Şu kadarını söyleyelim ki bunun belirli bir sebebi yok.

$$\mathbf{J}_f = \mathbf{J}_b + \mathbf{J}_d \quad (3.60)$$

seçebiliriz. Bunun öz durumları da,

$$|(bd)f\phi\rangle = \sum |b\beta\rangle |d\delta\rangle (-1)^{b-d+\phi} \sqrt{2f+1} \begin{pmatrix} b & d & f \\ \beta & \delta & -\phi \end{pmatrix} \quad (3.61)$$

olarak düzenlenir. Burada toplam $\beta + \delta = \phi$ şeklinde β ve δ üzerindendir. Böylece toplam açısal momentum operatörü,

$$\mathbf{J}_c = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_f \quad (3.62)$$

ve öz durumları da,

$$|(af)c\gamma\rangle = \sum |a\alpha\rangle |f\phi\rangle (-1)^{a-f+\gamma} \sqrt{2c+1} \begin{pmatrix} a & f & c \\ \alpha & \phi & -\gamma \end{pmatrix} \quad (3.63)$$

olur.

Racah ve 6-j Katsayılarının Tanımı: (3.59) ve (3.63) daki $|(ed)c\gamma\rangle$ ve $|(af)c\gamma\rangle$ özketleri arasındaki ilişki nedir? Mademki her bir çiftlenim bir birimsel dönüşüm yoluyla tarif edildi, bu iki çiftlenim arasında da bir birimsel dönüşüm olmak zorundadır. Bu ilişkiyi W ile göstereceğimiz Racah katsayıları cinsinden,

$$|(ed)c\gamma\rangle = \sum_f |(af)c\gamma\rangle \sqrt{(2e+1)(2f+1)} W(abcd;ef) \quad (3.64)$$

olarak yazarız. Wigner 6-j katsayıları da Racah katsayıları cinsinden,

$$\left\{ \begin{matrix} a & b & e \\ d & c & f \end{matrix} \right\} = (-1)^\Sigma W(abcd;ef) \quad (3.65)$$

olarak tanımlanır. Σ ile gösterilen faz

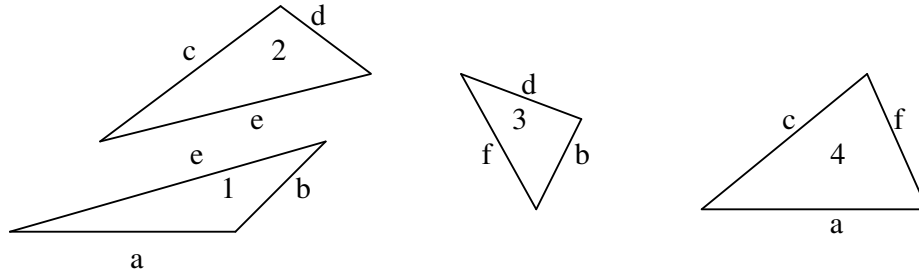
$$\Sigma \equiv a+b+c+d \quad (3.66)$$

ile verilir (Thompson, 2004). Böylece e ve f aracılığıyla bu iki yeniden çiftlenim katsayısı arasındaki bağıntı aşağıdaki gibidir.

$$|(ed)c\rangle = \sum_f |(af)c\rangle \sqrt{(2e+1)(2f+1)} (-1)^x \begin{Bmatrix} a & b & e \\ d & c & f \end{Bmatrix} \quad (3.67)$$

Bu ikinci açılım biraz karmaşık olmasına rağmen, $6-j$ katsayısı W katsayısından daha simetriktr (Thompson, 2004).

6-j İçin Geometrik Biçimler: Kısım 3.1.1’de iki açısal momentum bir üçüncüsünü verecek şekilde toplandığında (Clebsch-Gordan katsayıları) veya üç açısal momentum sıfır olacak şekilde ($3-j$ katsayıları) toplandığında üçgenlerle nasıl temsil edildiğini ve bilhassa bu katsayıların simetrilerini gördük. Şimdi üç açısal momentum arasında yeniden etkileşimler için özellikleri ortaya çıkarmak ve gözümüzde canlandırmak için benzer geometrik temsiller kullanacağız. Bu durum altı açısal momentumun toplamını içerir. Çünkü iki aracı terim ve bir de bileşke terim vardır.



Şekil 3.6 e veya f açısal momentum aracı terimleriyle c bileşkesini elde etmek için a , b ve d gibi üç açısal momentumun toplamına göre dört çiftlenim üçgeni.

a , b ve d ’nin e veya f aracı terimi aracılığıyla yeniden etkileşim durumu (3.66) ve (3.67)’de verildiği gibi bileşke açısal momentum c ’yi verir. Şekil 3.6 de gösterildiği gibi bu durum dört çiftlenim üçgeni içerir. 1, 2, 3 ve 4 şeklinde gösterilen ve dört üçgen ile temsil edilen çiftlenim (3.56) – (3.62) de yapıldı (Thompson, 2004).

Dörtüzlü ve Dörtgen Gösterimleri: Racah veya 6- j katsayılarının yeniden etkileşimi için katsayıların iki geometrik gösterimi vardır. Biri üç boyutlu dörtüzlü ve düzlemdeki izdüşümü, diğeri ise bir dörtgen ve köşegenleridir (Thompson, 2004).



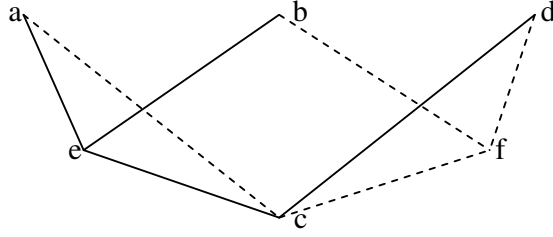
Şekil 3.7 Racah ve 6- j katsayılarının geometrik gösterimi, bir dörtüzlü (solda) veya bir dörtgen ve köşegenleri (sağda).

Her ikisinde de birbirine bağlı altı çizgi vardır ve katsayıların simetri özelliklerini özetler ve 6- j katsayılarını göstermek için kullanılabilir. Şekil 3.7’de gösterilen geometrik biçimler Şekil 3.6’daki dört üçgenin birbirine yapıştırılmış hali gibi düşünülebilir.

Şekil 3.7’deki şekiller $W(abcd;ef)$ Racah katsayılarını kendi üçgenleri $\Delta(abe)$, $\Delta(edc)$, $\Delta(bdf)$, $\Delta(afc)$ kullanılarak gösterebilir. Benzer şekilde 6- j katsayısı $\{abe,dcf\}$ ’yi de gösterebilir. Burada matbaa düzenine uygun olması için katsayıların ikinci sırası birincisinden bir virgül ile ayrılmıştır.

Karma gösterim: Yeniden etkileşim katsayılarının diğer bir grafik temsili Şekil 3.8 de gösterildiği gibi matematik ve bilgisayar alanında karma gösterim denilen gösterimdir (Thompson, 2004).

Karma gösterimin bu aşamada belirli bir avantajı olmamasına rağmen dokuz açısall momentumun etkileşimi söz konusu olduğunda oldukça faydalıdır.



Şekil 3.8 Racah ve 6- j katsayıları ile ilgili olan altı açısal momentum çiftleniminin ağaç temsili. Sürekli çizgiler (3.64) eşitliğinin sol tarafındaki ketler ile ilgilidir. Kesikli çizgiler ise (3.64)'un sağ tarafını temsil eder.

Üçgen Şartları: Racah veya 6- j katsayılarının her birinin sıfırdan farklı olması için Şekil 3.9 te kabaca gösterildiği gibi dört üçgen şartını sağlamalıdır. Bu şekilde değerleri Δ ile gösterilen dört üçlünden her biri katsayının sıfırdan farklı olması için Şekil 3.7'de de gösterildiği gibi kapalı bir üçgen biçiminde olmak zorundadır (Thompson, 2004).

$$\begin{Bmatrix} a & b & e \\ d & c & f \end{Bmatrix}$$

$$\begin{Bmatrix} \Delta & \Delta & \Delta \\ & & \end{Bmatrix} \quad \begin{Bmatrix} & & \Delta \\ \Delta & \Delta & \end{Bmatrix} \quad \begin{Bmatrix} & \Delta & \\ \Delta & & \Delta \end{Bmatrix} \quad \begin{Bmatrix} \Delta & & \\ & \Delta & \Delta \end{Bmatrix}$$

Şekil 3.9 Bir 6- j katsayısı için dört üçgen şartı.

3.2.2 6- j Katsayılarının Formülleri

3- j Katsayıları Cinsinden Açılım: 3- j ve 6- j katsayılarının çarpımları üzerinden birkaç açılımı aşağıda türetilip daha sonra kademeli olarak bunları ayıracağız. İlk açılımı (3.67)'deki bağıntı ile yapalım. 3- j katsayılarının bir çiftini içeren orijinal durumlar $|a \alpha\rangle, |b \beta\rangle$ ve $|d \delta\rangle$ içine her bir durumu genişletelim. Her bir durum farklı bir Hilbert uzayında çizilir ve her bir uzayda açısal momentum öz durumları ortogonaldır. Her iki yanda çarpımlarının katsayılarını eşitleyebiliriz. Böylece ilk kuralı,

$$\sum_f (2f+1)(-1)^\Sigma \begin{Bmatrix} a & b & e \\ d & c & f \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} b & d & f \\ \beta & \delta & -\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & f & c \\ \alpha & \phi & -\gamma \end{pmatrix} (-1)^{f-e-\alpha-\delta} \quad (3.68)$$

$$= \begin{pmatrix} a & b & e \\ \alpha & \beta & -\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e & d & c \\ \varepsilon & \delta & -\gamma \end{pmatrix}$$

buluruz. Bu formülde izdüşümler α , β ve γ ile verilir. Halbuki (3.34)'teki ϕ , γ ve ε , 3- j katsayılarının m -toplam şartı aracılığıyla türetilmişti. Sonraki formüllerde m -toplam şartları ve 6- j ve W katsayıları arasındaki bu ilişki devam ettirilecektir.

İkinci formül için (3.68)'ün sol tarafından f toplamı ve bir 3- j katsayısı kaldırılır ve (3.38) m ortogonallik şartının kullanılmasıyla sağ tarafda 3- j katsayılarıyla bir toplam çarpılır. Böylece ikinci kural,

$$(-1)^{a+b+c+d} \begin{Bmatrix} a & b & e \\ d & c & f \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} a & f & c \\ \alpha & \phi & -\gamma \end{pmatrix} \quad (3.69)$$

$$= \sum_{\beta\delta} (-1)^{f-e-\alpha-\delta} \begin{pmatrix} a & b & e \\ \alpha & \beta & -\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e & d & c \\ \varepsilon & \delta & -\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b & d & f \\ \beta & \delta & -\phi \end{pmatrix}$$

bulunur. Yukarıdaki ifade üç 3- j katsayısının çarpımları üzerinden toplama için bazen uygundur. Son toplama kuralımız 6- j katsayısı için açık bir ifadedir ve

$$(-1)^{a+b+c+d} \begin{Bmatrix} a & b & e \\ d & c & f \end{Bmatrix} \quad (3.70)$$

$$= \sum_{\alpha\beta\delta} (-1)^{f-e-\alpha-\delta} (2c+1) \begin{pmatrix} a & b & e \\ \alpha & \beta & -\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e & d & c \\ \varepsilon & \delta & -\gamma \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} b & d & f \\ \beta & \delta & -\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & f & c \\ \alpha & \phi & -\gamma \end{pmatrix}$$

olarak bulunur. Burada α , β ve δ üzerinden toplam, sabit bir toplam gerektirdiğinden zoraki bir ifadedir. Temel ifade olan (3.67)'ten görülebileceği gibi bu, iki çiftlenim durumu bra-ketinin kendi bileşen durumlarının genişletilmesiyle bulunacak sonucun aynıdır. Bu yöntemle görüleceği gibi 6- j katsayısı manyetik alt durumlardan bağımsızdır, yani z eksenini için seçilen doğrultuya bağlı değildir (Thompson, 2004).

Bir 6- j katsayısının açılımı dört 3- j katsayısının çarpımları üzerinden bir toplam biçiminde olması istenilmesine rağmen, meselâ (3.70)'deki gibi, sayısal işlemlerde çok da etkili değildir. Clebsch-Gordan ve Racah katsayıları arasındaki bağıntıya özdeş tek bir cebirsel toplam ifadesinin oluşturulmasına Racah öncülük etti. Bu cebirsel ifade,

$$\Delta(abc) = \sqrt{\frac{(a+b-c)!(a+c-b)!(b+c-a)!}{(a+b+c+1)!}} \quad (3.71)$$

şeklinde tanımlanan Δ fonksiyonuyla yazılabilir. Bu ve aşağıdaki ifade de katsayının altı elemanının da üçgen bağıntılarını sağladığını farzediyoruz. Bu durumda 6- j katsayısı

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{matrix} a & b & e \\ d & c & f \end{matrix} \right\} &= (-1)^{a+b+c+d} \Delta(abe) \Delta(acf) \Delta(bdf) \Delta(cde) \\ &\times \sum_k (-1)^k (a+b+c+d+1-k)! \\ &\times [k!(e+f-a-d+k)!(e+f-b-c+k)!]^{-1} \\ &\times [(a+b-e-k)!(c+d-e-k)!(a+c-f-k)!(b+d-f-k)!]^{-1} \end{aligned} \quad (3.72)$$

şeklinde olur (Thompson 2004). (3.72)'de k üzerinden toplam bölgesi, toplamdaki faktöriyel elemanları negatif olmayacak şekilde seçilir. (3.72)'deki ilk faz faktörü eğer ihmal edilirse, Racah katsayısı $W(abcd;ef)$ için bir ifade bulunur.

3.2.3 6- j Katsayılarının Özellikleri

6- j katsayıları için ifadeler türetmiş olmamıza rağmen bazı sadeleştirmeler olmaz ise katsayılardaki değerlerin büyümesi nedeniyle bu ifadeler çok kullanışsızdır. Bu sadeleştirmeler için ortogonallik ve simetri ilişkileri kullanılır.

6- j Katsayılarının Ortogonallik Bağıntıları: 3- j katsayılarının j toplamı ortogonallik bağıntısı olan (3.37)'yi çiftlenmiş durumların ortogonalliğini dikkate alarak türettik. $|c\gamma\rangle$ ile $|e\varepsilon\rangle$ çiftlenmiş durumları için benzer bir analiz birim operatörle yapılır. O zaman 6- j katsayıları arasındaki ortogonallik bağıntısını;

$$\sum_e (2e+1)(2f+1) \left\{ \begin{matrix} a & b & e \\ d & c & f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} a & b & e \\ d & c & g \end{matrix} \right\} = \delta_{fg} \quad (3.73)$$

buluruz. Eğer her bir 6- j katsayısı ilgili olduğu Racah katsayısı ile yer değiştirirse aynı toplama kuralıyla sonuçlanır. W ve 6- j katsayıları sadece (3.66) fazı kadar birbirinden farklıdır ve (3.73) daki her iki faktöre benzer. Toplama için çeşitli ara durumların kullanılmasıyla 6- j ve Racah katsayılarının çarpımları için bir çok toplam kuralı bulabiliriz.

3.3. Clebsch-Gordan, Gaunt, 3- j ve 6- j Katsayılarının Binomial Katsayıları Cinsinden İfadesi

Neden Binomial Katsayılar: Binomial katsayılar kullanılarak yapılan hesaplamalarda bir katsayının hesaplanması için geçen sürede kayda değer kısaltmalar görülmüştür. Bu süre kısaltmasını, doğrudan faktöriyelli hesaplarda yer almayan fakat binomial katsayılar için tanımlanan tekrarlama bağıntısı sağlamaktadır.

Clebsch-Gordan Katsayıları

$$C_{m_1 m_2 m_3}^{l_1 l_2 l_3} = (-1)^{\frac{1}{2}(m_1 + |m_1| + m_2 + |m_2| + m_3 + |m_3|)} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_1 l_2 l_3 m_3 \rangle$$

$$\langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_1 l_2 l_3 m_3 \rangle = \delta_{m_3, m_1 + m_2}$$

$$\left[\frac{(2l_3 + 1)^2 F_{l_1 + l_2 - l_3} (l_1 + l_2 + l_3 + 1) F_{l_3 + m_3} (2l_3)}{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1) F_{l_1 + l_2 - l_3} (l_1 + l_2 + l_3 + 1) F_{l_2 - l_1 + l_3} (l_1 + l_2 + l_3 + 1) F_{l_1 + m_1} (2l_1) F_{l_2 + m_2} (2l_2)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\times \sum_t (-1)^t F_t (l_1 + l_2 - l_3) F_{l_1 - m_1 - t} (l_3 - m_3) F_{l_2 + m_2 - t} (l_3 + m_3) \quad (3.74)$$

Burada t

$$\max[0, l_1 - m_1 - (l_3 - m_3), l_2 + m_2 - (l_3 + m_3)] \leq t \leq \min(l_1 - m_1, l_2 + m_2, l_1 + l_2 - l_3)$$

dir (Guseinov ve ark., 2009).

Gaunt Katsayıları

Gaunt katsayıları iki Clebsch-Gordan katsayısının veya 3j katsayısının çarpımı olarak tanımlanır.

$$C^{l_3}(l_1 m_1, l_2 m_2) = \frac{\sqrt{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}}{(2l_3 + 1)} C_{000}^{l_1 l_2 l_3} C_{m_1 - m_2 m_3}^{l_1 l_2 l_3} \quad (3.75)$$

$$C^{l_3}(l_1 m_1, l_2 m_2) = (-1)^{m_3 + m_2} \sqrt{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \quad (3.76)$$

En genel durumda ise Gaunt katsayıları,

$$\begin{aligned} C^{l_3}(l_1 m_1, l_2 m_2) &= (-1)^{g - (l_2 - m_2) + \frac{1}{2}(|m_1| + |m_2| + |m_3|)} \frac{F_{g-l_1}(2g - l_1 - l_2) F_{l_3}(g)}{(2g + 1) F_{2l_3}(2g)} \\ &\times \left[\frac{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1) F_{l_1+m_1}(l_1 + l_2 + m_3) F_{l_1+l_2+m_3}(2l_3 + l_1 + l_2 + m_3)}{F_{l_1-m_1}(l_1 + l_2 - m_3) F_{l_3-m_3}(2l_3) F_{l_3+m_3}(2l_3 + 2m_3) F_{l_1+l_2-m_3}(2l_3 + l_1 + l_2 + m_3)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \sum_t (-1)^t \frac{F_{l_3-m_3-t}(l_2 - m_2 - l_3 - m_3 - t) F_t(l_1 + m_1 + t) F_{l_1-m_1-t}(l_1 + l_2 - l_3) F_{l_1+l_2-l_3}(l_1 + l_2 + m_3)}{F_{l_1+m_1}(l_1 + l_2 + m_3)} \end{aligned} \quad (3.77)$$

burada $g = \frac{1}{2}(l_1 + l_2 + l_3)$, $m_3 = m_1 - m_2$ ve $l_3 - m_1 - l_2 \leq t \leq (l_1 - m_1, l_2 + m_2 - m_1)$ dir.

olarak tanımlanır (Guseinov ve ark., 2009).

3-j Katsayıları

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{-m_3, m_1+m_2} (-1)^{l_1-l_2-m_3} \Delta(l_1 l_2 l_3) \left[\frac{F_{l_1-l_2+l_3}(2l_1) F_{l_1+l_2-l_3}(2l_2) F_{-l_1+l_2+l_3}(2l_3)}{F_{l_1+m_1}(2l_1) F_{l_2+m_2}(2l_2) F_{l_3+m_3}(2l_3)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \times \sum_k (-1)^k F_k(l_1+l_2-l_3) F_{l_1-m_1-k}(l_1-l_2+l_3) F_{l_2+m_2-k}(-l_1+l_2+l_3) \quad (3.78)$$

burada $(0, l_1-l_3+m_2, l_2-l_3-m_1) \leq k \leq (l_1+l_2-l_3, l_1-m_1, l_2+m_2)$ dir (Guseinov ve ark., 2009).

6-j Katsayıları

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix} = \frac{\Delta(abc)\Delta(cde)\Delta(bdf)}{\Delta(aef)} \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{bmatrix} \quad (3.79)$$

burada

$$\Delta(abc) = \sqrt{\frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!}} \quad (3.80)$$

ve

$$\Delta(abc) = \sqrt{\frac{1}{F_{a+b-c}(a+b+c+1)F_{2c}(2c+1)F_{b+c-a}(2c)}} \quad (3.81)$$

dir (Guseinov ve ark., 2009).

Burada yer alan $F_m(n)$ nicelikleri binomial katsayıları olup,

$$F_m(n) = \begin{cases} \frac{n!}{m!(n-m)!} & \text{for } 0 \leq m \leq n \\ 0 & \text{for } m < 0 \text{ and } m > n. \end{cases} \quad (3.82)$$

şeklinde tanımlanırlar. Burada bütün katsayı ve semboller binomial katsayılar cinsinden ifade edilip bilgisayar hafızasında depolanmıştır. Binomial katsayıları için aşağıdaki tekrarlama bağıntısı kullanılmıştır.

$$F_m(n) = \left(\frac{n+1}{m} - 1 \right) F_{m-1}(n) \quad (3.83)$$

Binomial katsayıları hafızadan alıp Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayılarında, 3-j ve 6-j sembollerinde yerleştirmek için $F_m(n)$ katsayısının tam pozisyonu,

$$F(n, m) = \frac{n(n+1)}{2} + m + 1 \quad (3.84)$$

bağıntısıyla tanımlanmıştır (Guseinov ve ark., 2009).

4. BULGULAR

l_3	l_1	m_1	l_2	m_2	Denk. (3.74) için süre (s)	Mathematica süresi (s)
35	20	15	25	10	0.	0.
115	60	55	65	50	0.	0.
180	90	85	95	90	0.	0.016
380	190	185	195	-190	0.	0.031
480	290	185	295	-190	0.015	0.094
580	390	285	395	-290	0.016	0.125
680	390	285	395	290	0.031	0.141
900	500	400	550	410	0.031	0.156

Çizelge 4.1 Clebsch-Gordan katsayılarının hesaplanması (Guseinov ve ark., 2009).

Çizelge 4.1 dende görüldüğü gibi Clebsch-Gordan katsayılarının binomial katsayılar cinsinden ifade edilmiş bağıntısı olan Denklem (3.74) ile yapılan hesaplama süresi ile Mathematica'nın Clebsch-Gordan katsayıları için hazırladığı kendi programı ile yapılan hesaplamanın süresi karşılaştırıldığında belirgin bir fark vardır. Küçük açısal momentum değerlerinde, görüldüğü gibi kayda değer bir fark yoktur. Ancak açısal momentum değerleri büyüdükçe hesaplama süreleri değişmektedir. Her iki programın hesaplama süreleri karşılaştırıldığında binomial katsayılar kullanılarak yapılan programın, katsayıların hesaplama süresini % 80- 87 arasında azalttığı görülmüştür.

l_3	l_1	m_1	l_2	m_2	Denk. (3.75) (s)	Denk. (3.76) (s)	Denk. (3.77) (s)	Mathematica süresi (s)
4	4	2	4	2	0.016	0.015	0.	0.
14	18	2	14	2	0.	0.016	0.	0.
60	60	35	52	32	0.	0.016	0.	0.016
110	88	75	90	68	0.015	0.031	0.	0.
540	450	380	350	320	0.031	0.171	0.016	0.047
940	650	580	750	520	0.124	0.324	0.031	0.140
1394	965	458	975	452	0.141	0.656	0.187	0.499

Çizelge 4.2 Gaunt katsayılarının hesaplanması (Guseinov ve ark., 2009).

Çizelge 4.2’de üç farklı denklem için karşılaştırma gösterilmiştir. Bunlardan Denklem (3.75), Gaunt katsayısının iki Clebsch-Gordan katsayısının çarpımı, Denklem (3.76) Gaunt katsayısının iki 3-j katsayısının çarpımı olarak verildiği denklemlerdir. Denklem (3.77) ise Gaunt katsayılarının binomial katsayılarla ifade edildiği denklemdir. Çizelgeden de görüldüğü gibi binomial katsayıların kullanıldığı Denklem (3.77) ile yapılan hesaplamaların süresi Mathematicanın kendi programı ile karşılaştırıldığında % 63-77 daha kısadır. Denklem (3.75) ve (3.76) ile karşılaştırıldığında ise % 48-71 daha kısa hesaplama sürelerine sahiptir.

l_1	l_2	l_3	m_1	m_2	m_3	Denk. (3.78, 3.80)	Denk. (3.78, 3.81, 3.84)	Mathematica süresi
143	100	60	-10	60	-50	0.	0.	0.016
160	100	60	-10	60	-50	0.	0.	0.016
300	300	400	-100	160	-60	0.016	0.	0.016
300	300	400	-200	260	-60	0.016	0.	0.047
400	450	700	-300	-360	660	0.	0.016	0.078
800	700	900	-50	80	-30	0.094	0.078	0.140
750	650	1000	-50	-100	150	0.125	0.109	0.265

Çizelge 4.3 3-j sembollerinin hesaplanması (Guseinov ve ark., 2009).

Çizelge 4.3’de Denklem (3.78, 3.80) grubunda, temel denklemimiz (3.78)’deki üçgen kuralında faktöriyelli ifade kullanıldı. Denklem (3.78, 3.81, 3.84) grubunda ise üçgen kuralını gösteren ifade de binomial katsayılar cinsinden ifade edildi. Ayrıca binomial katsayıların hafızadaki yerlerini belirleyen (3.84) bağıntısı programa dahil edildi. Sonuçta Denklem (3.78, 3.81, 3.84) grubu ile yapılan hesaplama süreleri Matematica programına göre % 58-79, Denklem (3.78, 3.80) grubuna göre ise % 13-17 daha kısadır.

a	b	c	d	e	f	Denk. (3.79, 3.80)	Denk. (3.79, 3.81, 3.84)	Mathematica süresi
8	8	8	8	8	8	0.	0.	0.
20	20	20	20	20	20	0.	0.	0.016
128	120	72	112	48	80	0.	0.	0.
330	280	250	290	230	220	0.016	0.016	0.202
600	600	600	600	600	600	0.078	0.046	13.728
800	700	750	800	760	700	0.187	0.141	16.911
850	800	750	900	860	700	0.156	0.125	17.831

Çizelge 4.4 6-j sembollerinin hesaplanması (Guseinov ve ark., 2009).

Çizelge 4.4’de Denklem (3.79, 3.80) grubunda, temel denklemimiz (3.79)’deki üçgen kurallarını gösteren ifadelerde faktöriyelli ifade kullanıldı. Denklem (3.79, 3.81, 3.84) grubunda ise üçgen kuralını gösteren ifade de binomial katsayılar cinsinden ifade edildi. Ayrıca binomial katsayıların hafızadaki yerlerini belirleyen (3.84) bağıntısı programa dahil edildi. Sonuçta Denklem (3.79, 3.81, 3.84) grubu ile yapılan hesaplama süreleri Matematica programına göre % 92-99.3, Denklem (3.79, 3.80) grubuna göre ise % 19.8-41 daha kısadır.

5. TARTIŞMA ve SONUÇ

Binomial katsayılar kullanıldığında Clebsch-Gordan, Gaunt, $3j$ ve $6j$ katsayılarının hesaplanma süresinin daha kısa olduğu görülmüştür. Bu kıyaslama için Mathematica programı kullanılmıştır. Bu katsayıların hesaplanması ile ilgili olarak Mathematica’da hazır programlar mevcuttur. Bu programlar sözü geçen katsayıların hesabı için faktöriyelli formülleri kullanmaktadır. Esasen binomial katsayılarının tanımı da ve buradaki binomial fonksiyonlarda birer faktöriyel fonksiyondur. O halde binomial ifadeler bu katsayıların daha hızlı ve hassas hesaplamasını nasıl sağlamaktadır?

Hesaplamalar için geçen bilgisayarın hesaplama süresi, bilgisayarın özelliklerine bağlıdır. Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayıları ile $3j$ ve $6j$ sembollerinin hesabı için iyi bir bilgisayar hafızasına ihtiyaç olduğu gibi özellikle büyük yapıli atom ve moleküllerin analizinde bilgisayarın işlemcisi üzerine de ağır bir yük bindirmektedir. Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayıları ile $3j$ ve $6j$ sembolleri binomial katsayılar cinsinden ifade edildiğinde bilgisayarın hesaplama süresinin azaltılmasında önemli bir katkı sağlamaktadır. $F_m(n)$ binomial katsayılarına, sözü geçen katsayı ve sembollerin hesabı sırasında defalarca ve tekrar tekrar ihtiyaç duyulur. Eğer $F_m(n)$ ’lerin kullanım sırası bilirse (Tablo 5.1’e bakınız) hesaplamadan önce sıralı olarak girilebilir. $F_m(n)$ binomial katsayılarını hafızaya girmek veya hafızadan geri çağırarak için belirli bir katsayının yeri Denklem (3.84) kullanılarak tanımlanmaktadır. Kodun farklı kısımları için hafıza kullanımı işletim sistemi yoluyla bildirilen sanal hafızadır. Sanal hafıza kullanımı program için kullanılan sabit hafızanın üst sınırıdır. Bu yüzden Clebsch-Gordan ve Gaunt katsayıları ile $3j$ ve $6j$ sembolleri ile ilgili ortaya çıkan hesaplama probleminin üstesinden gelmenin en yaygın yolu bunları hesaplamak ve bunları sonraki hesaplamalar için bilgisayarın hafızasına depolamaktır. Örneğin 0’dan 1394’e kadarki bölgede ($0 \leq m \leq n$) n için binomial katsayılarının yerlerinin kaynağı hafıza bileşenlerinin 973710 değerini içerir. Dahası kaynak işlemci zamanı Denklem (3.84) kullanıldığında 4.3 saniyedir. Bu yöntemle yapılan hesaplamalar, bu konuyla ilgili olan (Wei, 1998; Wei, 1999; Varshalovich, 1988; Guseinov, 1995) deki formüller ile

karşılaştırıldığında işlemci zamanını azaltma avantajına sahiptir (Guseinov ve ark., 2009).

n	m	$F(n, m)$
0	0	1
1	0	2
	1	3
2	0	4
	1	5
	2	6
3	0	7
	1	8
	2	9
	3	10

Çizelge 5.1 $F_n(m)$ binomial katsayıları için konumlarının kaynağı (Guseinov ve ark., 2009).

KAYNAKLAR

- Altın, V., 2007. Tübitak. <http://www.biltek.tubitak.gov.tr/bilgipaket/madde/spin.html> (09.01.2009)
- Aygün, E. ve Zengin, D.M., 1992. Atom ve Molekül Fiziği. Ank. Üni. Fen Fak. Fizik Böl., 268 s, Ankara.
- Brink, D.M. ve Satchler, G.R., 1968. Angular Momentum. Clarendon Press, 160 p, Oxford.
- Cansoy, Ç. 1994. Kuantum Mekaniği. İst. Üni. Fen Fak. Yayınları, No: 228, 366 s, İstanbul
- Condon, E.U. ve Shortley, G.H., 1935. The Theory of Atomic Spectra. Cambridge Univ. Press, Cambridge.
- Edmonds, A.R., 1957. Angular Momentum in Quantum Mechanics. Princeton Univ. Press, 146 p, Princeton.
- Haken, H. ve Wolf, H.C., 2000. The Physics of Atoms and Quanta. Springer, Çeviri: Okur, İ., 2001. Atom ve Kuantum Fiziği. Değişim Yayınları, 545 s, Sakarya.
- Guseinov, I.I., Özmen, A. ve Yüksel, H., 1995. Computation of Clebsch-Gordan and Gaunt coefficients using binomial coefficients. J. Comput. Phys, 122, 343-347.
- Guseinov, I.I., 1995. On the evaluation of multielectron molecular integrals over Slater-type orbitals using binomial coefficients. J. Mol. Struct. (THEOCHEM), 336(1), 17-20.
- Guseinov, I.I., 1970. Analytical evaluation of two-centre Coulomb, hybrid and one-electron integrals for Slater-type orbitals. J. Phys. B, 3(11), 1399-1412.
- Guseinov, I.I. ve Mamedov, B.A., 2005. Algorithm for the storage of Clebsch-Gordan and Gaunt coefficients with the same selection rule and its applications to multicenter integrals. J. Mol. Struct. (Theochem), 715, 177-181.
- Guseinov, I.I., Mamedov, B.A. ve Çopuroğlu, E., 2009. Use of binomial coefficients in fast and accurate calculation of Clebsch-Gordan and Gaunt coefficients, and Wigner n-j symbols. J. Comput. Chem. 8, 251-259.
- Karaoğlu, B., 2003. Kuantum Mekaniğine Giriş. Seyir Yayıncılık, 271, İstanbul.
- Schulten, K. ve Gordon, R.G., 1976. Recursive evaluation of 3j and 6j coefficients. Comput. Phys. Commun., 11(2), 269-278.
- Thompson, W.J., 2004. Angular Momentum: an Illustrated Guide to Rotation Symmetries for Physical Systems. Wiley, 461 p, New York.
- Varshalovich, D.A., 1988. et al., Quantum Theory of Angular Momentum: Irreducible Tensors, Spherical Harmonics, Vector Coupling Coefficients, 3nj Symbols. World Scientific, Singapore.
- Wei, L., 1999. Unified approach for exact calculation of angular momentum coupling and recoupling coefficients. Comput. Phys. Commun, 120, 222-230.
- Weniger, E.J. ve Steinborn, E.O., 1982. Programs for the coupling of spherical harmonics. Comput. Phys. Commun., 25(2), 149-157.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı : Abdullah ÖZDEMİR
Doğum Tarihi ve Yer : 1974 Şişli
Medeni Hali : Evli
Yabancı Dili : İngilizce
Telefon : 536 2593044
e-mail : abdozdemir@mynet.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Tarihi
Yüksek Lisans	Gaziosmanpaşa Üniversitesi	2009
Lisans	Erc. Üni. Fen Ed. Fak. Fizik Bölümü	1995
Lise	Üsküdar Ticaret Lisesi	1990

İş Deneyimi: 1997 yılında başladığım öğretmenlik mesleğine halen Tokat Sağlık Meslek Lisesi Fizik öğretmeni olarak devam etmekteyim.