T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLERDE ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

Şule ATEŞ

DOKTORA TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

KONYA, 2010

ÖZET

DOKTORA TEZİ

ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLERDE ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

Şule ATEŞ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman : Doç. Dr. Gültekin ÇELİK

2010, 169 Sayfa

Jüri : Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
Prof. Dr. Ülfet ATAV
Prof. Dr. Mevlüt DOĞAN
Doç. Dr. Gültekin ÇELİK
Doç. Dr. Erhan AKIN

Bu tez çalışmasında, bazı çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori "WBEPMT" ve kuantum kusur orbital "QDO" teori kullanılarak hesaplanmıştır. azot, oksijen, sodyum ve potasyum atomlarında geçiş olasılıkları, Berilyum ve Oksijen atomlarında, bir kez iyonlaşmış Lityum'da, bir kez iyonlaşmış ve iki kez iyonlaşmış Oksijen'de osilatör şiddetleri belirlenmiştir. Geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri için hesaplanan değerler literatürde verilen diğer deneysel ve teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmış ve oldukça iyi bir uyum gözlenmiştir. Ayrıca literatürde bulunmayan bazı yüksek uyarılmış seviyelere ait geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti değerleri WBEPM teori ve QDO teori kullanılarak elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, Kuantum kusur orbital teori, Elektrik dipol geçiş olasılığı, Osilatör şiddeti

ABSTRACT

PhD Thesis

THE ATOMIC STRUCTURE CALCULATIONS IN MANY ELECTRON SYSTEMS

Şule ATEŞ

Selçuk University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK

2010, 169 Pages

Jury: Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
Prof. Dr. Ülfet ATAV
Prof. Dr. Mevlüt DOĞAN
Assoc. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK
Assoc. Prof. Dr. Erhan AKIN

In this study, the electric dipol transition probabilities and oscillator strengths for some many electron atomic and ionic systems have been calculated using the weakest bound electron potential model theory "WBEPMT" and the quantum defect orbital "QDO" theory. It has been determined the transition probabilities in nitrogen, oxygen, sodium and potassium atoms and the oscillator strengths have been determined in beryllium and oxygen atoms and singly ionized lithium, singly and doubly ionized oxygen. The calculated values for transition probabilities and oscillator strengths are compared to the results obtained to other experimental and theoretical methods and a good agreement has been observed. Moreover, the transition probability and oscillator strength values not exciting in literature for some highly excited levels have been obtained using WBEPM theory and QDO theory.

Key Words: Weakest bound electron potential model theory, Quantum defect orbital theory, Electric dipole transition probability, Oscillator strength

ÖNSÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Doktora tezi olarak sunulan bu çalışmada, bazı çok elektronlu sistemler için elektrik dipol geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini içeren atomik yapı hesaplamaları yapılmıştır. Azot, Berilyum, Oksijen, Sodyum, Potasyum atomları ve bir kez iyonlaşmış Lityum, bir kez iyonlaşmış ve iki kez iyonlaşmış Oksijen için En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve Kuantum kusur orbital teori kullanılarak, elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri hesaplanmıştır.

Atomik yapı hesaplamaları Schrödinger denkleminin çözümüyle başlar. Çok elektronlu sistemler için Schrödinger denklemi analitik olarak çözülemediğinden çeşitli yaklaşımlar yapılır. Yapılan her bir yaklaşım literatüre farklı bir çözüm yöntemi olarak girmektedir. Bu çözüm yöntemleri, saf-teorik ve yarı deneysel yöntemler olmak üzere iki ana başlık altında toplanabilir. Eğer tanımlanan geçişler yüksek uyarılmış seviyeler içerirse, çok sayıda konfigürasyon ve orbital baz fonksiyonları ile ilgilenileceğinden hesaplamalar oldukça karmaşık ve zaman alıcıdır. Bu durum, karmaşık olmayan ve çok zaman almayan hesaplama sürecine sahip yarı-deneysel model potansiyel metodların kullanılmasının sebeplerindendir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve Kuantum kusur orbital teori, karmaşık olmayan hesaplama sürecine sahip yarı-deneysel yöntemlerdir.

Akademik hayatım ve özellikle tez çalışmam süresince benden desteğini, bilgi ve tecrübelerini esirgemeyen, zaman kavramının özellikle akademik çalışmalarda ne kadar önemli olduğunu bana hatırlatan değerli hocam, danışmanım Doç. Dr. Gültekin ÇELİK'e en içten teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca bana kıymetli zamanlarını ayırmaktan kaçınmayan, bilgi ve tecrübelerinden yararlandığım değerli hocalarım Prof. Dr. Ülfet ATAV'a, Doç. Dr. Erhan AKIN'a, Yrd. Doç. Dr. Mehmet TAŞER'e ve her zaman maddi ve manevi desteklerine, hoşgörülerine sığındığım aileme, arkadaşlarıma teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET……..iii
ABSTRACT……iv
ÖNSÖZ……v
İÇİNDEKİLER……..vi
SİMGELER……ix
1. GİRİŞ……1
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI……6
2.1. Nötr Azot (Na I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar……..6
2.2. Nötr Berilyum (Be I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar……...7
2.3. Nötr Oksijen (O I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar……...8
2.4. Nötr Sodyum (Na I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar…….....10
2.5. Nötr Potasyum (K I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar……..11
2.6. Bir Kez İyonlaşmış Lityumda (Li II) Daha Önce Yapılan Çalışmalar……..12
2.7. Bir Kez İyonlaşmış Oksijen (O II)'de Daha Önce Yapılan Çalışmalar…….12
2.8. İki Kez İyonlaşmış Oksijen (O III)'de Daha Önce Yapılan Çalışmalar …...13
3. MATERYAL VE METOT……15
3.1. Enerji Seviyeleri……15
3.1.1. Atomun enerji seviyeleri……15
3.1.2. Atomların uyarılma mekanizmaları……17
3.1.2.1. Sıcaklık ile uyarılma……17
3.1.2.2. Optik uyarılma……18
3.1.2.3. Çarpışma ile uyarılma……..20
3.1.3. Soğurma ve yayınlama spektrumları……..20
3.2. Schrödinger Denklemi ve Açısal Momentum……21
3.2.1. θ ve φ değişkenlerine bağlı çözüm……..25
3.2.2. r değişkenine bağlı çözüm……..28
3.2.3. Açısal momentumun kuantumlanması……29
3.2.4. $\hat{L}^2$ *ve* $\hat{L}_z$ işlemcileri……...30
3.2.5. Elektron spini……..31
3.2.6. Toplam açısal momentum……...32

3.2.7. Açısal momentumun toplanması ve Clebsch-Gordon katsayıları.....34
3.2.8. Racah W katsayıları ve 6j sembolleri…….37
3.3. Çok Elektronlu Sistemler……...40
3.3.1. Merkezcil alan yaklaşımı……42
3.3.2. Bağımsız parçacık-merkezcil alan modelinin iyileştirilmesi……..47
3.3.3. Çok elektronlu atomlarda açısal momentum……..49
3.3.4. LS (Russel Saunders) çiftlenimi ($V_{ee} >> V_{SY}$ durumu)……..50
3.3.5. Farklı alt kabuklara ait elektronlar (özdeş olmayan elektronlar)……54
3.3.6. Aynı alt kabuktaki elektronlar durumu……...55
3.3.7. LS çiftleniminde ince yapı yarılması……..57
3.3.8. JJ çiftlenimi ($V_{SY} >> V_{ee}$ durumu)……..60
3.3.9. Diğer çiftlenim türleri…….62
3.3.10. Parite……..65
3.3.11. Elektrik dipol seçim kuralları…….67
3.4. Işıma Teorisi……...70
3.4.1. Dipol yayınlaması…….71
3.4.2. Geçiş olasılığı……73
3.4.3. Elektrik dipol çizgi şiddeti……76
3.4.4. Osilatör şiddeti……..78
3.4.5. Geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve çizgi şiddeti arasındaki bağıntılar...79
3.4.6. Hayat süresi……..80
3.5. Yarı Deneysel Atomik Yapı Hesaplama Yöntemleri……81
3.5.1. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT)……81
3.5.2. Kuantum kusur orbital (QDO) teori…….86
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI……...90
4.1. Geçiş Olasılıkları ve Osilatör Şiddetleri Hesaplamaları……90
4.2. Atomik Sistemlerde Hesaplamalar……92
4.2.1. Azot atomunda hesaplamalar……...92
4.2.2. Berilyum atomunda hesaplamalar……94
4.2.3. Oksijen atomunda hesaplamalar……...94
4.2.4. Sodyum atomunda hesaplamalar……..95

4.2.5. Potasyum atomunda hesaplamalar……95
4.3. İyonik Sistemlerde Hesaplamalar……..96
4.3.1. Bir kez iyonlaşmış Lityum'da hesaplamalar……96
4.3.2. Bir kez iyonlaşmış Oksijen'de hesaplamalar……...96
4.3.3. İki kez iyonlaşmış Oksijen'de hesaplamalar……97
5. TARTIŞMA……...99
6. SONUÇ VE ÖNERİLER……103
7. KAYNAKLAR……104
EK A……117
EK B……121
EK C……126
EK D……138
EK E……141
EK F……145
EK G……148
EK H……158

SİMGELER

Å Angstrom
B Bor
Be Berilyum
C Karbon
Ca Kalsiyum
Co Kobalt
Cr Krom
Cs Sezyum
Fe Demir
Fr Fransiyum
K Potasyum
Li Lityum
Mg Magnezyum
N Azot
Na Sodyum
Ne Neon
Ni Nikel
O Oksijen
Sc Skandiyum
Sr Stronsiyum
Ti Titanyum

Kısaltmalar

CA Coulomb Approximation
CI Configuration Interaction
CIV3 Configuration Interaction Version 3
D.A. Doğruluk Aralıkları
GRASP General-purpose Relativistic Atomic Structure Program

HF	Hartree-Fock
HKS	Hartree-Kohn-Sham
IM	Impact
MBPT	Many-Body Perturbation Theory
MCDF	Multiconfiguration Dirac-Fock
MCHF	Multiconfiguration Hartree-Fock
MCOPM	Multiconfiguration Optimized Potential Model
NCA	Numerical Coulomb-Approximation
NCMET	Nonclosed Shell Many Electron Theory
NIST	National Institute of Standards and Technology
NRHF	Numerical Non-Relativistic Hartree-Fock
OP	Opacity Project
PFC	Polarized Frozen-Core
RHF	Roothann-Hartree-Fock
RLIR	Relative Line Intensity Ratio
QDM	Quantum Defect Method
QDO	Quantum Defect Orbital
SCI	Science Citation Index
TDHF	Time Dependent Hartree-Fock
TFHF	Thomas-Fermi Hatree-Fock
VCI	Variational Configuration Interaction
WBEPMT	Weakest Bound Electron Potential Model Theory
N I	Nötr Azot
Be I	Nötr Berilyum
O I	Nötr Oksijen
Na I	Nötr Sodyum
K I	Nötr Potasyum
Li II	Bir Kez İyonlaşmış Lityum
O II	Bir Kez İyonlaşmış Oksijen
O III	İki Kez İyonlaşmış Oksijen

1. GİRİŞ

Teknolojideki gelişmelere paralel olarak yeni ve güçlü laserlerin icadı, ışık madde etkileşiminin bir sonucu olarak özellikle nano boyutta malzeme elde etme ve nano teknoloji alanında çok önemli gelişmelere sebep olmuştur. Bir aygıtta kullanılan malzemenin boyutu küçüldükçe çalışma hızı artmakta ve o malzemenin yeni özellikleri ortaya çıkmaktadır. Malzemelerin boyutları nanometre ölçeğinde olduğu zaman fiziksel özellikleri kuantum mekaniğinin kontrolüne girer. Elektron durumlarının fazı ve enerji spektrumunun kesikli yapısı daha belirgin hale gelir. Bu nedenle malzemeyi oluşturan atomların elektronik yapıları fiziksel özelliklerin belirlenmesinde önemli rol oynar. Nano teknolojiyi uygulanabilir kılan şey, atomların yapısı ve aralarındaki mükemmel organizasyon özelliğidir. Teknolojideki tüm gelişmeler atomdaki üstün tasarımın bir sonucudur. Madde bilimi, özellikle bazı yeni maddelerin üretilmesi ve bu yeni maddelere dayalı olarak yeni teknolojilerin geliştirilmesi son yıllarda yoğun bir şekilde çalışılan önemli konulardan biridir. Bu tür teknolojilerin üretilebilmesi için, doğada bulunan maddelerin atomik boyutta iyi anlaşılması ve bu maddelerin diğer maddelerle ilişkilerinin belirlenmesinin yanı sıra bu doğal maddeler yardımıyla yeni madde üretimi ve üretilen bu maddelerin özelliklerinin de çok iyi anlaşılmasına ihtiyaç duyulmaktadır. Bu özellikler tam anlamıyla analiz edildikten sonra ancak teknolojik üretimine başlanabilir. Günümüzde madde biliminin temelini oluşturan uzmanlık alanı "spektroskopi" olup, enerji-madde etkileşmesini esas almaktadır. Bu konuyla ilgili olarak deneysel ve teorik çalışmalar yoğun bir şekilde sürdürülmektedir. Bilindiği gibi deneysel olarak gerçekleştirilen çalışmalar çok güçlü bir makine-teçhizat altyapısı ve pahalı yatırımlarla sağlanabilmektedir. Dolayısıyla, ülkemizin ekonomisi göz önüne alındığında ve deneysel çalışmalarda kullanılan malzemelerde ve ekipmanlarda büyük oranlarda dışa bağımlılık söz konusu olduğundan çalışmaların çoğunluğunu teorik araştırmalar oluşturmaktadır. Maddeyi oluşturan atomik ve iyonik sistemlerde spektroskopik elektronik yapı hesaplamaları temel bilimsel araştırma kategorisine girer. Bu çalışmalardan elde edilen veriler astrofizik, plazma fiziği, termonükleer fisyon araştırmaları, laserlerle izotop ayırma ve laser sistemlerinin geliştirilmesi gibi

birçok alanda önemli rol oynar. Işık madde etkileşmesinin temelini oluşturan spektrum analizi için gereken çeşitli atomik ve iyonik veriler enerji seviyeleri, geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri, uyarılmış seviyelerin hayat süreleri ve iyonlaşma süreçleri gibi atomik yapı hesaplamalarını ve saçılma problemlerinin çözümünü gerektirir. Atomik yapı hesaplamaları, ışık madde etkileşmesinde ışıkla etkileşen atomik veya iyonik sistemlerin elektron konfigürasyonlarındaki elektronların geçişleriyle karakterize edilir. Bu geçişleri tanımlayan geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetlerini içeren veriler spektroskopik analiz için kullanılacak geçişlerin seçimini, sıcaklık gibi birçok kritik ölçümün doğruluğunu ve atomik konsantrasyonu etkileyerek plazma yorumlarında önemli rol oynamaktadırlar. Ayrıca bu tür hesaplamalardan elde edilen veriler spektroskopide hem atomik özelliklerin belirlenmesinde hem de deneysel verilerin yorumlanmasında kullanılmaktadır. Atomik yapı hesaplamaları Schrödinger denkleminin çözümüyle başlar. Tek elektronlu sistemler dışında Schrödinger denklemi analitik olarak çözülemediğinden, çok elektronlu sistemlerde çeşitli yaklaşımlar yapılır. Yapılan her bir yaklaşım literatüre farklı bir çözüm yöntemi olarak girmektedir. Bu çözüm yöntemleri teorik ve yarı deneysel yöntemler olmak üzere iki ana başlık altında toplanabilir.

Herhangi iki seviye arasındaki elektron geçişinin kuantum mekaniksel incelemesi, hem ilk seviyeye hem de son seviyeye ait dalga fonksiyonlarının bilinmesini gerektirir. Literatürde bu tip problemlerin çözümü için geliştirilen birçok yöntem mevcuttur. Literatürde verilen Multikonfigürasyonel Hartree-Fock "MCHF", Multikonfigürasyonel Dirac-Fock "MCDF", Konfigürasyon etkileşmesi "CI" ve R-matrix gibi yöntemler relativistik etkileri de hesaba katan güçlü yöntemlerdir. Bu yöntemler, temel ve düşük uyarılmış seviyeler içeren geçişleri çok hassas olarak karakterize edebilmektedirler. Fakat uyarılmış ve özellikle yüksek uyarılmış seviyelere doğru gidildikçe adı geçen bu yöntemlerde yüksek uyarılmış seviyeleri tanımlayacak dalga fonksiyonlarının oluşturulmasında çok fazla konfigürasyon ve orbital baz fonksiyonları kullanılması gerektiğinden hesaplamalar oldukça karmaşık bir hal almaktadır. Bunun için MCHF kodları, CIV3 kodları, GRASP kodları ve R-Matrix kodları gibi birçok profesyonel ve ticari paket programlar geliştirilmiştir. Bu tür paket programlarda gözönüne alınan sistemlerde baskın olan çiftlenime göre önceden belirlenen fiziksel parametreler hesaplanabilmektedir. Bahsedilen

zorluklardan dolayı bu yöntemlerin birçoğu yüksek uyarılmış seviyelerden ziyade düşük uyarılmış seviyeleri içeren sonuçlar verirler.

Yarı deneysel yöntemlerin kullanılması, çizgi şiddetlerini ve matris elemanlarını içeren bağıntıların açık olarak ifade edilmesine olanak sağlamaktadır ve yüksek uyarılmış seviyelere ait dalga fonksiyonları daha kolay tanımlanabilmektedir. Bu tez çalışmasında en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori "WBEPMT" ve kuantum kusur orbital "QDO" teori kullanılarak hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, Çinli bilim adamı Zheng tarafından çok elektronlu atomik ya da iyonik sistemlerde elektronik hareketi tanımlamak için kullanılan yarı deneysel bir yöntemdir (Zheng 1977, 1986, Zheng ve ark. 2000-a-e, 2001-a-c). Bu yöntem kullanılarak deneysel enerji değerlerinden ya da iyonlaşma enerjilerinden belirlenen bazı parametrelerle elektronik radyal dalga fonksiyonları Laguerre polinomlarına bağlı olarak ifade edilebilmektedir. Daha sonra çok elektronlu atomların dalga fonksiyonları, enerji seviyeleri, geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri analitik radyal fonksiyonlara bağlı olarak hesaplanabilmektedir. QDO teori ise, Simons (1974) ve Simons ve Martin (1975) tarafından Kuantum Kusur Metod'un "QDM" geliştirilmesiyle ortaya atılan yarı deneysel bir yöntemdir. Bu teorinin çıkış noktası Coulomb yaklaşım "CA" tekniğidir. Bu yöntemde orbitaller, Laguerre polinomlarına ya da Kummer fonksiyonlarına bağlı olarak ifade edilebilir. Yaklaşık Hamiltoniyenden dalga fonksiyonları elde edilerek enerji seviyeleri, geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri gibi birçok atomik yapı hesaplamaları gerçekleştirilebilir.

Atom numarası 1-10 arasında olan elementler "hafif atomlar" sınıfına girerler. Hafif atomlar atmosferde en fazla bulunan elementlerdir. Özellikle azot, %78 oranla en fazla bulunan elementtir. Bu nedenle azot atomunun spektroskopik özellikleri atmosferin baskın spektrumunu oluşturmaktadır. Hafif atomların astrofizikte büyük bir uygulama alanı bulması hafif atomlar üzerindeki ilgiyi arttırmış ve bu atomların spektroskopik özellikleri birçok deneysel ve teorik araştırmacıya konu olmuştur. Ayrıca atomik yapı hesaplamalarında kullanılan yaklaşım yöntemleri, literatürde çok miktarda karşılaştırma verisi bulunduğundan, ilk önce hafif atomlara ve son yörüngelerinde tek elektron bulunduran alkali atomlara uygulanarak test edilmiştir.

Bu nedenle bu tez çalışmasında en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur yöntemi bazı hafif atomlara ve alkali atomlara uygulanmıştır.

Bu çalışmada en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak azot, oksijen, sodyum, potasyum gibi atomik sistemlerde ve bir kez iyonlaşmış lityum, bir kez iyonlaşmış oksijen gibi iyonik sistemlerde hesaplamalar yapılmıştır. Berilyum atomu ve iki kez iyonlaşmış oksijende osilatör şiddetleri hem en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori hem de kuantum kusur orbital teori kullanılarak hesaplanmıştır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori için gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde seviyelerin yarıçaplarının beklenen değer hesaplamaları için Nümerik Coulomb Yaklaşımı "NCA" (Lindgrad ve Neilsen 1975, 1977) ve Nümerik non-relativistik Hartree-Fock "NRHF" yöntemi kullanılmıştır (Gaigalas ve Fischer 1996). Hem WBEPM teori hem de QDO teoride enerji değerleri için literatürdeki deneysel enerji verileri kullanılmıştır (Ralchenko ve ark. 2007, Wiese 2006). Elde edilen sonuçlar, farklı teorik ve deneysel yöntemlerle elde edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Karşılaştırmalar en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriden ve kuantum kusur orbital teoriden elde edilen sonuçların, hesaplama süreci çok daha karmaşık olan ve zaman alan teorik yöntemlerle ve farklı deneysel yöntemlerle elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğunu göstermektedir. Ayrıca literatürde bulunmayan bazı yüksek uyarılmış seviyeler içeren geçişlere ait geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti değerleri bu yöntemler kullanılarak belirlenmiştir.

Çalışmanın 1. bölümünü oluşturan giriş ve 2. bölümünü oluşturan kaynak araştırması kısımlarından sonra 3. bölümünde atomik yapı hesaplamaları için temel teşkil eden konulara değinilmiş, hesaplamalarda kullanılan yöntemler hakkında bilgiler verilmiştir. Kesim 3.1'de atomun enerji seviyeleri, uyarılma mekanizmaları, soğurma ve yayınlama spektrumları hakkında bilgi verilmiştir. Kesim 3.2'de, Schrödinger denklemi ve çözümü hakkında bilgiler verilmiştir. Ayrıca açısal momentum, açısal momentumun toplanması ve Clebsch-Gordan katsayıları gibi konulara yer verilmiştir. Kesim 3.3'de çok elektronlu sistemler ve böyle sistemlerin Schrödinger denklemlerinin çözümü için yapılan yaklaşımlardan, çiftlenim şemalarından, parite ve seçim kurallarından bahsedilmiştir. Kesim 3.4'de ışımalı geçişler ele alınarak elektrik dipol geçiş olasılıkları, çizgi şiddetleri, osilatör şiddetleri ve hayat süreleri hakkında bilgiler verilmiştir. Kesim 3.5'de bu çalışmada

incelenen bazı atomik ve iyonik sistemlerin osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıklarını hesaplamak amacıyla kullanılan hesaplama yöntemlerinden en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori anlatılmıştır. Araştırma sonuçlarının yer aldığı 4. bölümde WBEPM teori ve QDO teori ile hesaplanan bazı atomik ve iyonik sistemlerin elektrik dipol geçiş olasılıkları ile osilatör şiddetleri sonuçları literatürdeki diğer deneysel ve teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırmalı olarak çizelgeler halinde sunulmuştur. 5. bölümde hesaplamalar için kullanılan metotların elverişliliği ve bilgisayar hesaplama programı tartışılmakta, 6. bölümde ise elde edilen sonuçların değerlendirilmesi ve geleceğe yönelik planlar yer almaktadır. 7. bölüm çalışmanın kaynaklar kısmını oluşturmaktadır. Son olarak da atomik ve iyonik sistemlerde yapılan hesaplamalardan elde edilen sonuçlar çizelgeler halinde Ek A-H'de verilmektedir.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Nötr Azot (N I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Azot atomunda geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini belirlemek için literatürde pek çok teorik çalışma bulunmaktadır. Beck ve Nicolaides (1976), MCHF metodu ile varyasyonel konfigürasyon etkileşim "VCI" hesaplamalarının bir kombinasyonunu kullanarak atomik azot ve oksijen için osilatör şiddetlerini hesapladılar. Hofsaess (1989), Thomas-Fermi-Hartree-Fock "TFHF" metodunu kullanarak azot atomunda enerji seviyelerini ve osilatör şiddetlerini hesapladı. Suskin ve Weiss (1989), CI yöntemini kullanarak azotun çok sayıda dörtlü seviyelerinde korelasyon etkilerini çalıştılar. Bell ve Berrington (1991), LS çiftleniminde *R-Matrix* metodu kullanarak atomik azot için osilatör şiddetlerini ve foto-iyonizasyon tesir kesitlerini hesapladılar. Hibbert ve ark. (1991), konfigürasyon etkileşim dalga fonksiyonları temeline dayanan konfigürasyon-etkileşim versiyonu "CIV3" kodu kullanarak bireysel çizgiler için geçiş olasılıklarını hesapladılar. Tong ve ark. (1994), MCHF metodu ile azot atomunda düşük uyarılmış dörtlü durumları arasında elektrik dipol izinli geçişlerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Robinson ve Hibbert (1997), hem düşük hem de yüksek uyarılmış seviyeler için sınırlandırılmış ortogonal olmayan ifadeler kullanarak CIVNON kodu ile temel seviyeden, en düşük 4 tane ^{4}P seviyesine geçişleri çalıştılar. Zheng ve ark. (2000-e) ve Zheng-Wang (2002-a) azot atomu ve iyonunda WBEPM teoriyi kullanarak bazı uyarılmış durumlar için hayat süreleri ve çeşitli seviyeler arasındaki geçişler için geçiş olasılıklarını hesapladılar. Gerekli parametrelerin belirlenmesinde seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerini NCA yöntemiyle belirlediler. Tachiev ve Fischer (2002), azot benzeri sistemlerde (Z = 7–17) $2p(2)3d$ ve oksijen benzeri sistemlerde (Z = 8–20) $2p(3)3d$'ye kadar tüm seviyeler için Breit-Pauli yaklaşımı ile enerji seviyeleri, hayat süreleri değerlerini elde ettiler.

2.2. Nötr Berilyum (Be I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Berilyumun uyarılmış durumlarının enerji seviyeleri, geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve hayat süreleri özellikle son yıllarda çeşitli metodlarla araştırılmaktadır. Altick ve Glasscold (1964), Be, Mg, Ca ve Sr için *Random-Phase* yaklaşım metodu kullanarak uyarılma enerjileri, osilatör şiddetleri ve foto iyonizasyon tesir kesitlerini hesapladılar. Kelly (1964), Berilyum için Hartree-Fock dalga fonksiyonlarını kullanarak osilatör şiddetleri ve foto-iyonizasyon tesir kesitlerini hesapladı. Andersen ve ark. (1969), *foil-excitation* tekniği kullanarak Berilyum ve Bor atomu ve iyonlarında uyarılmış seviyelerin hayat sürelerini belirlediler. Hibbert (1974), konfigürasyon etkileşim dalga fonksiyonlarını kullanarak Berilyum dizisinde birkaç geçiş için soğurma osilatör şiddetlerini elde etti. Moser ve ark. (1976), verilen bir geçişin başlangıç ve son seviyelerine varyosyonel hesaplamaların bir *Bethe-Goldstone* hiyerarşisini uygulayarak Be dizisinde atomik osilatör şiddetlerini elde ettiler. Amusia ve ark. (1976), *random-phase* yaklaşımı altında helyum, lityum ve berilyum atomları için foto-iyonizasyon tesir kesitleri ve osilatör şiddetleri hesaplamaları yaptılar. Hibbert (1976), Berilyum dizisinde osilatör şiddetlerini birkaç geçiş için konfigürasyon etkileşim dalga fonksiyonlarını kullanarak elde etti. Fawcett (1978), Be I, B I, C I, N I ve O I dizileri için $2s^2 2p^n$-$2s2p^{n+1}$ ve $2s2p^{n+1}$-$2p^{n+2}$ elektrik dipol geçişler ve $2s^2 2p^n$ manyetik dipol ve elektrik kuadropol geçişler için osilatör şiddetlerini teorik olarak hesapladı. Markiewicz ve ark. (1981), *polarized frozen-core* yaklaşımını kullanarak Be izoelektronik dizisi için osilatör şiddetlerini hesapladılar. Be I ve Be izoelektronik dizileri için dalgaboyları ve osilatör şiddetleri Fawcett (1984) tarafından Hartree-Fock relativistik bilgisayar paket programı kullanılarak hesaplandı. Moccia ve Spizzo (1985), varyasyonel dalga fonksiyonlarını kullanarak Berilyum atomu spektrumunun ayrık ve düşük-sürekli kısımlarında soğurma osilatör şiddetleri ve hayat süreleri hesaplamaları yaptılar. Saha ve Fischer (1987), MCHF yaklaşımı kullanarak birkaç geçiş için osilatör şiddetlerini hesapladılar. Chang ve Tang (1990), basit konfigürasyon etkileşim hesaplama prosedüründen belirlenen *B-splines* yöntemini kullanarak berilyum ve magnezyum atomlarının bağlı-bağlı geçişleri için teorik osilatör şiddetlerini elde ettiler. Chang (1989), tek bir baz seti kullanarak Berilyum atomunun enerji özdeğerlerini, uyarma enerjilerini ve osilatör

şiddetlerini elde etti. Chang (1990), *B- splines* temeline dayalı sonlu bir baz set kullanarak basit bir konfigürasyon etkileşim sürecinde hesaplanan geçiş olasılıklarından türetilen, nötr magnezyumun ve berilyumun bazı uyarılmış durumlarının serileri için, hayat sürelerini hesapladı. Sarandaev ve ark. (1997), konfigürasyon etkileşim metodu kullanarak Be I, Mg I ve Ca I'de çizgilerin osilatör şiddetlerini çalıştılar. Villoresi ve ark. (1997), yeni bir deneysel yöntem kullanarak görünür spektral aralıkta Be I ve Be II'nin soğurma spektrumunu gözlemlediler. Uyarılmış seviyeler arasındaki geçişleri inceleyerek n=3 seviyelerinden n=4 seviyelerine Be II çizgilerinin osilatör şiddet oranlarını ölçtüler. Chen (1998), konfigürasyon etkileşim şemasında seçilmiş *B-spline* baz fonksiyonları kullanarak model potansiyel metodu ile berilyumun enerjilerini belirleyerek dalga fonksiyonlarını oluşturdular. Irving ve ark. (1999), deneysel *beam foil* yöntemiyle yapılan hayat süresi ölçümlerine dayanarak Be I ve B II' de $2s^2\ ^1S$-$2s2p\ ^1S$ geçişi için geçiş olasılığını hesapladılar. Zheng ve ark. (2001-d), WBEPM teori kullanarak Be I, Be II, Mg I and Mg II'de bazı seviyeler arasındaki geçişler için geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini hesapladılar. Savukov ve Johnson (2002), CI+MBPT metodunu kullanarak Be, Mg, Ca ve Sr için enerji seviyeleri ve geçiş genliklerini hesapladılar. Glowacki ve Migdalek (2006), *Numerical Dirac Fock* dalga fonksiyonları ile relativistik konfigürasyon–etkileşim metodu kullanarak Berilyum, Magnezyum ve Çinko'da bazı spin-izinli ve spin-yasaklı geçişler için osilatör şiddetlerini hesapladılar. Tachiev ve Fischer (1999), Be-benzeri spektrumun (Z=4-12) 2s(2), 2s2p, 2p(2), 2s3s, 2s3p ve 2s3d konfigürasyonlarının tüm seviyeleri için *Breit-Pauli* enerji seviyelerini ve hayat sürelerini hesapladılar.

2.3. Nötr Oksijen (O I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Oksijen atomu için literatürde geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin deneysel ölçümlerini veya teorik hesaplamalarını konu alan pek çok çalışma mevcuttur. Solarski ve Wiese (1964), *wall-stabilized highcurrent arc* tekniği kullanarak oksijenin bazı multipletleri için geçiş olasılıkları ölçümleri yaptılar ve diğer teorik ve deneysel yöntemlerle uyumlu sonuçlar elde ettiler. Samson ve

Petrosky (1974), oksijen atomu için fotoelektron spektroskopi tekniğini kullanarak foto-iyonizasyon geçiş olasılığı ölçümleri yaptılar. Fawcett (1978), Be I, B I, C I, N I ve O I dizileri için $2s^2 2p^n$-$2s2p^{n+1}$ ve $2s2p^{n+1}$-$2p^{n+2}$ elektrik dipol geçişler ve $2s^2 2p^n$ manyetik dipol ve elektrik kuadropol geçişler için osilatör şiddetlerini teorik olarak hesapladı. Jenkins (1985), *line absorption* deneysel yöntemini kullanarak 130 nm'de (3P-3S) O I geçişlerinin soğurma osilatör şiddetlerini ölçtü. Goldbach ve Nollez (1994), *wall-stabilized arc* tekniği ile oksijenin 950–1200 Å spektral aralığında 5'li multiplete ait 12 çizginin osilatör şiddetlerini elde ettiler. Bridges ve Wiese (1998), *wall-stabilized arc* tekniği ile O I'de $3s\ ^3S^\circ - 4p\ ^3P$ ve $3s\ ^5S^\circ - 4p\ ^5P$ multipletleri için geçiş olasılıkları ölçtüler. Musielok ve ark. (2000), C I, N I ve O I'in multipletlerinin geçiş olasılıklarını ölçtüler. Pradhan ve Saraph (1977), nötr oksijenin kuantum sayısı n=4 olan seviyelerinde osilatör şiddetlerini elde etmek için *frozen-core* yaklaşımında *close-coupling* metodu ile elde edilen bağlı durum dalga fonksiyonları çalıştılar. MCHF yaklaşımında *Breit-Pauli* sonuçları, Tachiev ve Fischer (2002) tarafından azot benzeri seri (Z = 7–17) için ve oksijen benzeri seri (Z = 8–20) için bazı geçiş parametreleri belirlendi. Tayal ve Henry (1989), atomik oksijenin bazı izinli geçişleri için konfigürasyon etkileşim dalga fonksiyonlarını kullanarak osilatör şiddetlerini hesapladılar. Bell ve Hibbert (1990), atomik oksijen için bazı izinli geçişlerde hem *R-matrix* hem de CI metodu kullanarak osilatör şiddetlerini hesapladılar. Hibbert ve ark. (1991) nötr oksijenin bireysel çizgileri için üçlü ve beşli durumlarda atomik geçiş oranlarını ve osilatör şiddetlerini hesapladılar. Biemont ve ark. (1991), konfigürasyon etkileşim ve relativistik etkiyi hesaba katarak $2p^3(^4S^o)nl - 2p^3(^4S^o)n'l'$ geçişleri için osilatör şiddeti sonuçları elde ettiler. Osilatör şiddetlerinin hesaplanmasında CIV3 konfigürasyon etkileşim kodu ve *pseudo-relativistic Hartree-Fock* programı olmak üzere iki farklı bilgisayar kodu kullandılar. Oksijen atomunun $2p$–$3s$ ve $3s$–$3p$ izinli geçişi için osilatör şiddetleri verileri Biemont ve Zeippen (1992) tarafından *Superstructure* atomik yapı bilgisayar programı kullanarak elde edildi. Butler ve Zeippen (1994), sadece multiplet durumlar için *close-coupling* yaklaşımı ile bağlantılı *R-matrix* kodunu kullandılar. Escalante ve Victor (1994), uyarılmış durum tekli konfigürasyon dalga fonksiyonlarının hesaplanmasına izin veren *açık-kabuk model potansiyel* metodunu kullanarak oksijenin uyarılmış durumlarını içeren dipol izinli geçişler için *f*-değerlerini ve foto-

iyonizasyon tesir kesitlerini belirlediler. Jönsson ve Godefroid (2000), MCHF metodunu ve CI metodunu kullanarak atomik oksijende düşük uyarılmış seviyeler arasındaki geçişler için osilatör şiddetlerini hesapladılar.

2.4. Nötr Sodyum (Na I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Weisheit ve Dalgarno (1971), sodyumun $3s–np$ (n = 3, 4, …, 15) geçişleri için osilatör şiddetlerini hesapladılar. Biemont (1975), Z=26'ya kadar olan sodyum izoelektronik dizisinin $1s^2 2s^2 2p^6 nl$ (nl = 3, 4, 5s; 3, 4, 5p; 3, 4, 5d ve 6f) konfigürasyonları için Hartree-Fock dalga fonksiyonlarını hesapladı ve elektrik dipol geçişler için osilatör şiddetlerini, geçiş matris elemanının dipol uzunluk gösterimi ile hesapladı. Lindgard ve Nielsen (1977), alkali atomlar dizisinin (Li I, Na I, K I, Rb I, Cs I, Fr I) üyelerinin her biri için deneysel olarak saptanan $n \leq 12$, $l \leq 4$ durumları için sayısal Coulomb yaklaşımından türetilen dipol geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini ve uyarılmış seviyelerin hayat sürelerini hesapladılar. Brown ve Parsons (1979), *flame atomic absorption spectroscopy* tekniği kullanarak Na, Sc, Ti, Cr, Fe, Co ve Ni için atomik geçiş olasılıklarını belirlediler. Hem çizgi yayılma hem de sürekli uyarma kaynakları kullanarak *air-acetylene* ve *nitrous oxide-acetylene flames*'de soğurma ölçümleri çalıştılar. Fischer (1988), Martinson (1989), *beam-foil excitation* tekniği ile Li I, Be I, Ne I ve Na I dizileri için enerji seviyeleri ve geçiş olasılığı ölçümleri yaptılar. Lavin ve ark. (1992), kuantum kusur orbital teori ve onun relativistik yöntemini içeren teori olmak üzere iki kuantum kusur teori ile sodyum izoelektronik dizisi için bazı spektral serilerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Lowe ve Biemont (1994), *time-resolved laser-induced fluorescence* ile Na I'in 4p ^{2}P ve 5p ^{2}P seviyeleri için hayat süreleri ölçtüler ve sonuçların konfigürasyon etkileşim etkilerini içeren *Superstructure* atomik yapı programı ile hesaplanan osilatör şiddetlerinden türetilen teorik hayat süreleri ile mükemmel uyumda olduğunu gösterdiler. Siegel ve ark. (1998), tek-konfigürasyon Dirac-Fock metodu kullanarak n=24'e kadar olan baş serilere ilaveten sodyum izoelektronik dizisinde düşük uyarılmış geçişler için elektrik dipol geçiş osilatör şiddetlerini hesapladılar. Fischer

(2002), MCHF yöntemi ile sodyumda pek çok geçiş için geçiş olasılıklarını belirledi. Gonzalez-Ferez ve Schmelcher (2003), sodyumda n=3, 4, 5, 6 ve 7 baş kuantum sayılarına sahip seviyeler için iyonizasyon enerjileri, geçiş dalgaboyları ve dipol osilatör şiddetlerini elde ettiler. Kupliauskiene ve ark. (2007), büyük ölçekli konfigürasyon etkileşim yaklaşımı ile sodyum atomunda bazı geçişler için dalgaboylarını ve geçiş olasılıklarını hesapladılar.

2.5. Nötr Potasyum (K I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Weisheit ve Dalgarno (1971), kor kutuplanma etkisini hem hesaplamalara dahil ederek hem de etmeyerek potasyumun 4*s*–*np* (*n* = 4,5, …, 16) geçişleri için osilatör şiddetlerini hesapladılar. Aeschliman (1981), nötr potasyumda *ns*–4*p* (*n* = 6–15) ve *nd*–4*p* (*n* = 5–13) için geçiş olasılığı ölçümleri yaptı. Lindgard ve Nielsen (1977), sayısal Coulomb yaklaşımından elde edilen dalga fonksiyonlarını kullanarak alkali benzeri diziler için multiplet çizgiler arasında elektrik dipol geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini ve hayat sürelerini hesapladılar. Hart ve Atkinson (1986), iki foton uyarımını kullanarak *time-resolved laser-induced fluorescence* yöntemi ile potasyumda uyarılmış ince yapı S ve D durumlarının hayat sürelerini ölçtüler. Berends ve ark. (1988), *time-resolved laser spektroskopisi* teknikleri kullanarak potasyumda 5P, 6P ve 7P durumlarının ince-yapı bileşenlerinin hayat sürelerini belirlediler. Langhoff ve ark. (1985), *Hartree–Fock quality Slater* baz setleri kullanarak multiplet çizgiler için potasyumun en düşük ^{2}S, ^{2}P ve ^{2}D durumları arasındaki geçiş olasılıklarını hesapladılar. Rahmanattia ve ark. (1986) tarafından bazı bireysel çizgiler için potasyumda kor kutuplanma etkileri ve spin-orbit etkileşimini içeren kuantum kusur metodu kullanılarak osilatör şiddetleri ve foto-iyonizasyon tesir kesitleri hesaplandı. Lavin ve ark. (1992), kor kutuplanma etkileri içeren kuantum kusur orbital metodunu kullanarak potasyum izoelektronik dizisinin bazı üyelerinin spektral serilerindeki geçişler için osilatör şiddetlerini hesapladılar.

2.6. Bir Kez İyonlaşmış Lityumda (Li II) Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Li II, helyum izoelektronik dizisinin ikinci üyesidir. Teorik olarak Li II için literatürde birçok çalışma mevcuttur. Schiff ve ark. (1971), Z=10'a kadar olan He izoelektronik dizisi üyeleri için osilatör şiddetlerini hesapladılar. Drake (1972), *Hylleraas–Scherr–Knight* varyasyon-perturbasyon metodunu kullanarak helyum ve helyum benzeri iyonların bazı baskın geçişleri için osilatör şiddeti değerlerini elde etti. Anderson ve Weinhold (1974), *Hylleraas-type* dalga fonksiyonları kullanarak He ve Li II'de düşük uyarılmış tekli ve üçlü geçişlerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Kono ve Hattori (1984), Z =3–7 olan helyum-benzeri iyonlarda $n \leq 5$ olan geçişler için relativistik olmayan osilatör şiddetlerini elde ettiler. Theodosiou (1985), *Hylleraas-type* dalga fonksiyonları kullanarak bir kez iyonlaşmış lityumda *s-p* ve *p-d* geçişleri için Rydberg seviye hayat sürelerini ve osilatör şiddetlerini hesapladı.

2.7. Bir Kez İyonlaşmış Oksijen (O II)'de Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Bir kez iyonlaşmış oksijenin osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları, özellikle son yıllarda birçok araştırmacı tarafından teorik ve deneysel olarak çalışılmaktadır. Teorik çalışmalar; Luken and Sinanoğlu'nun (1976) *nonclosed shell many electron* teori "NCMET" hesaplamalarını, Ho ve Henry'nin (1983, 1984) multikonfigürasyon hesaplamalarını, Bell ve çalışma arkadaşlarının (1991, 1994) CI hesaplamalarını, Becker ve Butler (1988), Nahar (1998), Tayal ve Richardson'ın (2000) *R-matrix* hesaplamalarını, Tachiev ve Fischer'in (2002) MCHF hesaplamalarını ve Andersen ve Aashamar'ın (1993) *multiconfiguration optimized potansiyel model* "MCOPM" hesaplamalarını içermektedir. Ayrıca Zheng ve ark. (2002-b), en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriyi kullanarak oksijen atom ve iyonlarında bazı uyarılmış seviyeler arasındaki geçişler için geçiş olasılıklarını hesapladılar. Ayrıca deneysel olarak ölçülen osilatör şiddetleri farklı deney grupları tarafından çalışıldı. Martinson

ve ark. (1971), O I-O VI'de *beam-foil* tekniği kullanarak 450 - 2200 Å aralığındaki bölgede ölçüm yapmışlardır. Lin ve ark. (1972), O I – O V'de *beam-foil* tekniği ile 1050 ve 1800 Å arasındaki oksijen spektrumunu çalışmışlardır. Irwin ve ark. (1973), yine *beam-foil* tekniğini kullanarak oksijen iyonlarında bazı geçişler için soğurma osilatör şiddetlerini ve uyarılmış seviyelerin hayat sürelerini ölçtüler. Pinnington ve ark. (1974), *beam-foil* tekniğini kullanarak O I – O VI'nın bazı enerji seviyeleri için ortalama hayat süresi ölçümü yaptılar. Ryan ve ark. (1989), iyonize olmuş oksijende birkaç geçiş için *beam-foil* kaynağı kullanarak osilatör şiddetleri ölçtüler. Wiese ve ark. (1996), deneysel veriler ve büyük ölçekli hesaplamalardan yararlanarak atomik geçiş olasılığı verilerini derlemişlerdir. Del Val ve ark. (2001), *pulsed discharge lamp* yöntemi kullanarak O II'nin 3*s*-3*p*, 3*p*-3*d* ve 3*d*-4*f* multipletlerine ait bazı spektral çizgiler için geçiş olasılıkları ölçtüler. Sreckovic ve ark., *relative line intensity ratio (RLIR)* (2002) ve *linear low pressure pulsed arc* (2001) metodları kullanarak O II yüksek multipletlerinde geçiş olasılıklarını ölçtüler.

2.8. İki kez iyonlaşmış Oksijen (O III)'de Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Bazı araştırmacılar tarafından bugüne kadar O III'ün fiziksel özellikleri ile ilgili pek çok teorik çalışma yapılmıştır. Ho ve Henry (1983), O III'de HF ve CI yaklaşımlarını kullanarak $2s^22p^2\ ^3P$ -$2s2p^3\ ^3D^o$, $2s^22p^2\ ^3P$ -$2s2p^3\ ^3P^o$ ve $2s^22p^2\ ^3P$-$2s2p^3\ ^3S^o$ geçişleri için osilatör şiddetleri ve çarpışma şiddetlerini hesapladılar. Fawcett (1987), *Hartree-Fock-Relativistic* program paketi ile C I, N II ve O III için izinli geçişlerin osilatör şiddetlerini hesapladı. Luo ve ark. (1989) *R-Matrix* çarpışma kodu kullanarak bağlı durumlar arasındaki geçişler için osilatör şiddetleri hesapladılar. Aggarwal ve Hibbert (1991-a,1991-b), CIV3 kodu ile bazı izinli geçişler için uzunluk ve hız gösteriminde osilatör şiddetlerini elde ettiler. Bhatia ve Kastner (1993), *superstructure* ve *distortedwave* bilgisayar programları kullanarak $2s2p^3$, $2s^22p^2$, $2p^4$, $2s^22p3s$, $2s^22p3p$ ve $2s^22p3d$ konfigürasyonlarını içeren bir modelden O III'ün ince yapı seviyeleri arasında geçiş oranlarını, osilatör şiddetlerini ve çarpışma şiddetlerini elde ettiler. Fischer (1994), çok sayıda düşük uyarılmış üçlü

seviyeler için MCHF atomik yapı paketi kullanarak geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti içeren geçişleri çalıştı. Tachiev ve Fischer (2001), MCHF+Breit-Pauli yaklaşımını kullanarak $2s\,2p^3$, $2s^2 2p^2$, $2p^4$, $2s^2 2p3s$, $2s^2 2p3p$ ve $2s^2 2p3d$ konfigürasyonlarının tüm durumlarını içeren seviyeler için enerji seviyeleri, hayat süreleri, osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları gibi bazı geçiş verileri elde ettiler. Saraph ve Seaton (1980), O III için LS çiftlenimi yaklaşımında geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri hesapladılar. Aggarwal ve ark. (1997), CIV3 programı kullanarak O III'ün 46 ince-yapı seviyeleri arasındaki geçişler için osilatör şiddetleri ve enerji seviyelerini belirlediler. Nahar (1998), O I ve O II - O VII iyonları için *R-matrix* metodu kullanarak saf teorik *close-coupling* hesaplamaları ile foto-iyonizasyon tesir kesitleri, osilatör şiddetleri ve enerji seviyeleri sonuçlarını belirledi. Zheng ve ark. (2002-b), O I-O IV iyonlarında WBEPM teori kullanarak birkaç geçiş için geçiş olasılıklarını hesapladılar.

3. MATERYAL VE METOT

3.1. Enerji Seviyeleri

3.1.1. Atomun enerji seviyeleri

Bohr atom modeline göre atomik sistemler yalnız belirli hallerde dayanıklı (dengede) olabilir. Böyle hallere, kararlı haller denir. Kararlı hallerde atom, ne herhangi bir enerji soğurabilir ne de yayınlayabilir. Başka bir ifadeyle, kararlı halde atomun enerjisi sabittir. Atomun her kararlı haline bir enerji seviyesi karşılık gelir. Bu enerji seviyelerinin temel karakteristiği, her bir seviyeye karşılık gelen enerjinin değeridir.

Kuantum fiziğine göre atom yalnız belirli kuantum hallerinde bulunabilir. Bu kuantize olmuş hallerin her birine atomun özel bir enerjisi karşılık gelir. Atomun her bir özel enerji haline belirli bir dalga fonksiyonu karşılık gelir. Bu fonksiyona o halin özel dalga fonksiyonu denir. Atomun genel kuantum hali, özel kuantum hallerinin toplamı gibi verilebilir. Atomun en dayanıklı (dengeli) hali, en küçük enerjili kararlı halidir. Bu hale atomun temel veya normal hali de denir. Temel halden başka diğer bütün kararlı haller, atomun uyarılmış halleridir. Temel halde atom uzun süre kalabilir. Uyarılmış hallerde ise yaşam süresi çok kısadır.

Temel halden uzaklaştıkça enerji seviyeleri birbirine yaklaşır ve nihayet atomun enerjisi $E = E_{\infty}$ olduğu andan itibaren enerji sürekli bir hal alır. Bu durumda enerji $E < E_{\infty}$ olduğunda atomun enerji seviyeleri ayrık, $E > E_{\infty}$ olduğunda ise atomun enerji seviyeleri süreklidir. Ayrık enerji seviyeleri atomdaki bağlı elektronlara, sürekli enerji seviyeleri ise serbest elektronlara karşılık gelir. Bağlı elektronlar gibi serbest elektronların da çekirdeğin Coulomb alanında ivmeli bir harekette bulunduklarını belirtmek gerekir. Genel olarak toplam enerjisi E>0 olan elektronlar serbest, E<0 olan elektronlar ise bağlı olarak adlandırılırlar.

Atomun temel haline karşılık gelen enerjiyi E_1, uyarılmış hallere karşılık gelen enerjileri ise sırasıyla E_2, E_3, E_4,… şeklinde gösterirsek,

$$E_1 \langle E_2 \langle E_3 \langle E_4 \langle ... \tag{3.1}$$

ifadesi yazılır. Atomu temel seviyeden daha yüksek enerjili farklı bir seviyeye uyarmak için gereken enerjiye, o halin uyarılma enerjisi veya uyarılma potansiyeli denir. Herhangi bir k seviyesi için uyarılma potansiyeli

$$\varepsilon_k = E_k - E_1 \tag{3.2}$$

şeklinde olurken, temel seviyenin uyarılma potansiyeli için

$$\varepsilon_1 = E_1 - E_1 = 0 \tag{3.3}$$

ifadesi yazılır.

Atomun enerjisi $E \geq E_\infty = 0$ olduğunda iyonlaşma başlar. Buna göre, atomu temel seviyeden $E = E_\infty$ enerjisi olan seviyeye çıkarmak için gerekli olan enerjiye, atomun iyonlaşma enerjisi veya iyonlaşma potansiyeli denir. Atomun iyonlaşma potansiyelinin,

$$\chi = \varepsilon_\infty = E_\infty - E_1 = -E_1 \tag{3.4}$$

olduğu açıktır. Atom bir kararlı halden diğerine geçerken yayınlanan veya soğurulan enerji, bu kararlı hallerin enerjilerinin farkıyla belirlenir. Örneğin k ve i seviyeleri arasındaki geçişte yayınlanan enerji kuantı,

$$h\nu_{ki} = E_k - E_i \tag{3.5}$$

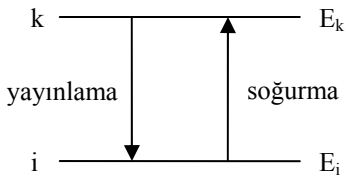
şeklinde yazılabilir. Burada h Planck sabiti, E_k ve E_i sırasıyla k ve i seviyelerine karşılık gelen enerjiler, ν_{ki} ise k → i geçişinde yayınlanan fotonun frekansıdır.

(3.5) formülü, radyasyonla ilgili olan mikroskopik süreçlerde enerjinin korunumu kanunudur. Eğer $E_k > E_i$ ise, k→i geçişinde $h\nu_{ki}$ enerji kuantı yayınlanır,

i→k geçişinde ise aynı enerji kuantı soğurulur. Bu geçişler Şek. 3.1'de gösterilmiştir. Denk.(3.5)'den k→i geçişinde yayınlanan fotonun frekansı için,

$$\nu_{ki} = \frac{E_k - E_i}{h} \tag{3.6}$$

ifadesi elde edilir. Kararlı enerji seviyeleri arasında, radyasyon yayınlanması ile ilgili olmayan radyasyonsuz geçişler de mümkün olabilir. Doğrudan doğruya uyarılmış halde olan bir atom çarpışma sonucu kendi uyarılma enerjisini çevresindeki taneciklere tamamen ya da kısmen vererek temel veya aşağı herhangi bir seviyeye geçebilir. Bu esnada herhangi bir elektromanyetik enerji yayınlanmaz (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995).



Şekil 3.1. Enerji kuantının yayınlanması ve soğurulması

3.1.2. Atomların uyarılma mekanizmaları

Dış etkiler olmadığı sürece, atomların hepsi enerjilerinin minimum değerine karşılık gelen temel halde bulunurlar. Atomlar, uyarılmış hallere yalnız dış etkiler sonucu geçebilir.

3.1.2.1. Sıcaklık ile uyarılma

Birim hacimde N sayıda aynı tür atom bulunduğunu varsayalım. Eğer sıcaklık mutlak sıfır olursa, bu atomların hepsi temel halde bulunur. Sıcaklık mutlak sıfırdan büyük olduğunda, atomların bir kısmı temel halden uyarılmış hallere (enerji seviyelerine) göre dağılırlar. Bu olaya sıcaklık ile uyarılma denir. Sıcaklık ile uyarılan

atomların elektromanyetik enerji yayınlamasına sıcaklık radyasyon yayınlanması adı verilir. Sıcaklık arttıkça radyasyon yayınlanmasının şiddeti artar.

Termodinamik denge halinde atomların farklı enerji seviyelerine göre dağılması Boltzmann kanunu ile verilir. Bu kanun, birim hacimdeki k ve i uyarılmış seviyelerindeki atomların sayısı için aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$N_k = N_i \frac{g_k}{g_i} \exp\left[-\frac{E_k - E_i}{kT} \right] \tag{3.7}$$

Burada g_k, g_i, E_k ve E_i, sırasıyla k ve i uyarılmış enerji seviyelerinin istatistiksel ağırlıkları ve enerjileri, k Boltzmann sabiti, T ise sıcaklıktır. (3.7) ifadesindeki sıcaklık, atomların uyarılmış enerji seviyelerine göre dağılımını karakterize eder ve uyarılma sıcaklığı diye adlandırılır. Benzer olarak, atomun temel ve herhangi bir k uyarılmış seviyesi için aynı kanun yazılabilir:

$$N_k = N_1 \frac{g_k}{g_i} \exp\left[-\frac{E_k - E_1}{kT} \right] = N_1 \frac{g_k}{g_i} \exp\left[-\frac{\varepsilon_k}{kT} \right] \tag{3.8}$$

Bu ifadeden görüldüğü gibi T → 0'a yaklaştıkça, N_k → 0'a yaklaşır. Yani sıcaklık sıfıra yaklaştıkça, herhangi bir uyarılmış haldeki atomların sayısı sıfıra yaklaşır. Başka bir deyişle, atomların hepsi temel halde olur.

Termodinamik denge koşulunda, sıcaklığın istenilen bir değerinde atom sayıları

$$N_1 > N_2 > N_3 > \ldots \tag{3.9}$$

şeklinde olur. Burada N_1 birim hacimde temel halde olan atomların sayısı, N_2, N_3,... ise sırasıyla birinci, ikinci,… uyarılmış haldeki atomların sayısıdır.

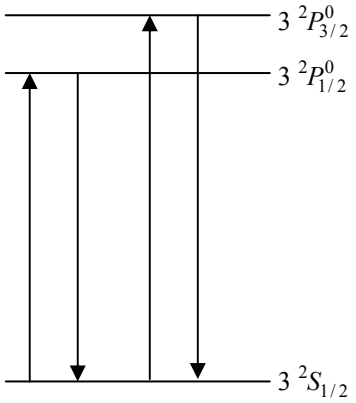
3.1.2.2. Optik uyarılma

Atomlar optik yolla da uyarılabilirler. Temel halde bulunan atomlar, üzerilerine düşen ışık fotonlarını soğurarak temel halden uyarılmış hallere geçebilirler. Atomun

temel halden herhangi bir uyarılmış hale geçmesi için, üzerine düşen fotonun enerjisi söz konusu seviyenin uyarılma enerjisinden küçük olmamalıdır. Eğer atom üzerine düşen fotonun enerjisi, iyonlaşma enerjisinden küçük olmazsa atom elektron kaybeder veya iyonlaşır. Bu olaya *fotoiyonizasyon* denir.

Atom belli ν frekanslı fotonları soğurarak temel halden herhangi bir hale uyarılırsa ve hemen aynı frekansta foton yayınlayarak tekrar temel hale düşerse, elektromanyetik radyasyon yayınlama *rezonans* yayınlaması olarak adlandırılır. Rezonans yayınlamasına karşılık gelen spektral çizgiler, rezonans çizgiler olarak adlandırılır. Rezonans çizgiler atomun temel ve ona en yakın uyarılmış seviyeleri arasında meydana gelir ve atomun en şiddetli çizgileridir.

Şekil 3.2 de örnek olarak Na I'in (nötr sodyumun) spektrumunda meydana gelen rezonans çizgilerine karşılık gelen geçişler gösterilmektedir.



Şekil 3.2 Sodyum atomundaki rezonans çizgiler

3.1.2.3. Çarpışma ile uyarılma

Atomun uyarılma mekanizmalarından biri de çarpışma ile uyarılmadır. Elektronun bir atomu uyarabilmesi için enerjisinin atomun uyarılma enerjisine eşit ya da ondan büyük olması gerekir. Elektronların enerjisi atomun uyarılma enerjisinden küçükse esnek çarpışmalar gerçekleşir. Elektronlar enerji yitirmez ve atom ışıma yapmaz. Elektronların enerjisi atomun uyarılma enerjisine eşit ya da ondan büyükse

esnek olmayan çarpışmalar gözlenir ve atom uyarılır. Çarpışan parçacıkların (atomlar, iyonlar, elektronlar,..) kinetik enerjisi atomun uyarılma enerjisinden küçük olmazsa, atomlar bu enerjiyi ya kısmen ya da tamamen soğurarak temel halden uyarılmış hallere geçebilir. Uyarılmış durumdaki atom enerji bakımından kararsızdır. En kısa sürede ($\sim 10^{-8}$ s'de) ışıma yaparak ya doğrudan doğruya ya da basamak basamak temel enerji seviyesine geri döner.

3.1.3. Soğurma ve yayınlama spektrumları

Her bir atom, belirli ayrık ve sürekli enerji seviyeleri ile karakterize edilir. Bu enerji seviyeleri arasında üç tür geçiş olabilir:

1-) Bağlı-bağlı geçişler,

2-) Bağlı-serbest ve serbest-bağlı geçişler,

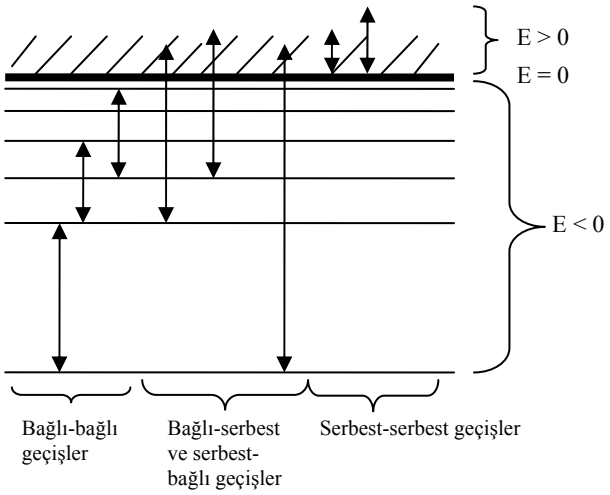
3-) Serbest-serbest geçişler.

Bağlı-bağlı geçişler ayrık enerji seviyeleri arasında olur. Bu geçişlerde monokromatik bir enerji kuantı yayınlanır veya soğurulur. Her bir bağlı-bağlı geçiş, atomun spektrumundaki bir spektral çizgiye karşılık gelir. Buna göre bağlı-bağlı geçişler atomun çizgi spektrumunu meydana getirir. Yukarı ayrık seviyelerden aşağı ayrık seviyelere geçişlerin atomun yayınlama çizgi (lineer) spektrumunu, aşağı ayrık seviyelerden daha yukarıdaki ayrık seviyelere geçişlerin ise atomun soğurma çizgi spektrumunu meydana getireceği açıktır.

Bağlı-serbest ve serbest-bağlı geçişler ayrık seviyelerle sürekli seviyeler arasında olur. Bu geçişlerde elektromanyetik enerji, sürekli spektrumda soğurulur veya yayınlanır. Serbest-bağlı geçişler enerjinin sürekli spektrumda yayınlanmasına, bağlı-serbest geçişler ise enerjinin sürekli spektrumda soğurulmasına karşılık gelir.

Serbest-serbest geçişler sürekli enerji seviyeleri arasında meydana gelir. Bu geçişler serbest elektronların halinin değişmesine karşılık gelir. Serbest-serbest geçişlerde enerji sürekli spektrumda yayınlanır veya soğurulur.

Bağlı-bağlı, serbest-bağlı, bağlı-serbest ve serbest-serbest geçişler Şekil 3.3'de gösterilmiştir (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995).



Şekil 3.3 Geçiş tipleri

3.2. Schrödinger Denklemi ve Açısal Momentum

Zamana bağlı Schrödinger denkleminin genel yapısı

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{et.}\right]\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{3.10}$$

ile verilir. Burada

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{3.11}$$

(x,y,z) dik koordinat sisteminde tanımlanmış bir işlemcidir. $V_{et.}$ ise

$$V_{et.}(r) = \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \tag{3.12}$$

ifadesi ile tanımlanan etkin potansiyel enerjidir ve yalnızca r vektörünün büyüklüğüne bağlıdır. Bu durum Denk.(3.10)'da verilen Schrödinger denkleminin her terimini, küresel koordinatlarda yazmaya zorlar.

Denk. (3.10)'daki ∇^2 işlemcisi (r, θ, φ) küresel koordinat sisteminde

$$\begin{aligned}\nabla^2\psi(r,t) &= \frac{2}{r}\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial r} + \frac{\partial^2\psi(r,t)}{\partial r^2} \\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial r}) \\ &= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi(r,t))\end{aligned} \tag{3.13}$$

bağıntılarından herhangi biri ile tanımlanır. Denk.(3.10)'un ilk terimi Denk.(3.13)'ün ikinci ifadesinden

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})\psi(r,t) \tag{3.14}$$

olarak yazılabilir. μ kütleli kuantum parçacığının momentumunun $\vec{r}$ doğrultusundaki bileşeninin karesine ilişkin işlemci,

$$\frac{P_r^2}{2\mu} + V_{et.}(r) = E \tag{3.15}$$

ifadesinden, Denk.(3.10)'dan ve Denk.(3.14)'den hareketle

$$\hat{P}_r^2 = -\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) = -\hbar^2\nabla^2 \tag{3.16}$$

olarak yazılabilir. Şimdi de Denk.(3.10)'da verilen Schrödinger denkleminin ikinci terimini ele alalım. Bu terim, Denk.(3.12)'den görüldüğü gibi L^2 yi yani açısal momentumun büyüklüğünü içermektedir. Açısal momentumun L_x, L_y, L_z bileşenlerine karşı gelen işlemciler (r, θ, φ) cinsinden şu şekilde yazılmaktadır:

$$\hat{L}_x = -i\hbar(-Sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - Cot\theta\, Cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})$$
$$\hat{L}_y = -i\hbar(Cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - Cot\theta\, Sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}) \qquad (3.17)$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Diğer taraftan $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ olduğundan $\hat{L}^2$ işlemcisi Denk. (3.17) bağıntılarının kullanılmasıyla

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2(\frac{1}{Sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}Sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{Sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}) \qquad (3.18)$$

biçiminde yazılır. Burada

$$\Lambda^2 = (\frac{1}{Sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}Sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{Sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}) \qquad (3.19)$$

kısaltması yapılırsa, açısal momentumun büyüklüğünün karesini veren işlemci daha basit biçiminde yazılabilir:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\Lambda^2 \qquad (3.20)$$

Böylece Denk.(3.10) ile verilen denklemin 1. terimi için (3.14) denklemi, 2. terimi içindeki $L^2/2\mu r^2$ yerine de (3.20) eşitliği kullanılırsa, merkezcil bir potansiyel içindeki kuantum sisteminin dönme hareketini niteleyen zamana bağlı Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \Lambda^2\right]\psi(r,\theta,\varphi,t) + V(r)\psi(r,\theta,\varphi,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,\theta,\varphi,t) \qquad (3.21)$$

biçiminde yazılabilir. Burada hem uzaysal koordinatların hem de zamanın fonksiyonu olan dalga fonksiyonu $\psi(r,\theta,\varphi,t)$ 'yi

$$\psi(r,\theta,\varphi,t) = \psi(r,\theta,\varphi)\,e^{-iEt/\hbar} \qquad (3.22)$$

şeklinde yazabiliriz. Bağıntıdaki E niceliği sistemin toplam enerjisidir. Bu dalga fonksiyonu

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,\theta,\varphi,t)=E\psi(r,\theta,\varphi,t) \tag{3.23}$$

denklemini sağladığında, enerji özfonksiyonu özelliğini taşır. Bu nedenle $\psi(r,\theta,\varphi,t)$, enerjisinde belirsizlik olmayan ve $|\psi(r,\theta,\varphi,t)|^2=|\psi(r,\theta,\varphi)|^2$ gibi zamandan bağımsız olasılık yoğunluğu veren bir kararlı durumu belirler. O halde, zamandan bağımsız $\psi(r,\theta,\varphi)$ dalga fonksiyonları ve E enerji değeri, zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümüyle elde edilir. Böyle bir denklem

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}(\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\Lambda^2)\psi(r,\theta,\varphi)+V(r)\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi) \tag{3.24}$$

dir. Bu denklemin çözümü ise büyük ölçüde V(r) potansiyelinin seçimine bağlıdır.

(3.21) bağıntısında potansiyel enerji yalnızca r'nin fonksiyonu olduğu için, kuantum sistemi için öngörülen dalga fonksiyonunun uzaysal koordinatlara bağlı kısmı

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\,Y(\theta,\varphi) \tag{3.25}$$

biçiminde yazılabilir. Buna göre (3.21) bağıntısı yeniden yazılırsa

$$\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}R(r)\,Y(\theta,\varphi)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E-V(r))R(r)\,Y(\theta,\varphi)=-\Lambda^2R(r)\,Y(\theta,\varphi) \tag{3.26}$$

eşitliği elde edilir. R(r), yalnızca r'ye ilişkin işlemciler ve $Y(\theta,\varphi)$'de (θ,φ)'ye ilişkin işlemciler tarafından işlem görürler. Bu nedenle yukarıdaki bağıntı

$$Y(\theta,\varphi)\left[\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right]+Y(\theta,\varphi)\left[\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E-V(r))R(r)\right]=-R(r)\left[\Lambda^2\,Y(\theta,\varphi)\right] \tag{3.27}$$

biçiminde yazılabilir. Bu bağıntının her iki tarafı $R(r).Y(\theta,\varphi)$ çarpımına bölünürse,

$$\frac{1}{R(r)}\left[\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right]+\frac{1}{R(r)}\left[\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E-V(r))R(r)\right]=-\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\Lambda^2Y(\theta,\varphi) \tag{3.28}$$

ifadesi elde edilir. Görüldüğü gibi, bu bağıntının sol tarafı yalnızca r'ye, sağ tarafı da yalnızca (θ,φ)'ye bağlıdır. Bu durumda, λ sabit sayı ise, eşitliğin birinci tarafından

$$\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}R(r)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E-V(r))R(r)=\lambda R(r) \tag{3.29}$$

ve ikinci tarafından da

$$-\Lambda^2 Y(\theta,\varphi)=\lambda Y(\theta,\varphi) \tag{3.30}$$

bağıntıları türetilir. Böylece (3.26) denkleminin çözümü, yalnızca r'ye bağlı (3.29) ve (θ,φ)'ye bağlı (3.30) denklemlerinin çözümüne indirgenmiş olur.

3.2.1. θ ve φ değişkenlerine bağlı çözüm

(3.30) bağıntısındaki Λ^2 işlemcisi yerine (3.19) daki değeri yazılırsa

$$-\left[\frac{1}{Sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}Sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{Sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)=\lambda Y(\theta,\varphi) \tag{3.31}$$

elde edilir. Bu bağıntı, $\sin^2\theta$ ile çarpılır ve yeniden düzenlenirse,

$$-\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}Y(\theta,\varphi)=\left[Sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\lambda Sin^2\theta\right]Y(\theta,\varphi) \tag{3.32}$$

bağıntısına ulaşılır. Bu bağıntının sol tarafı yalnızca φ'ye, sağ tarafı da yalnızca θ'ya göre işlem göreceğinden

$$Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \tag{3.33}$$

şeklinde yazılabilir. Buna göre (3.32) bağıntısı yeniden düzenlenirse

$$-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}=\frac{1}{\Theta(\theta)}\left[Sin\theta\frac{d}{d\theta}Sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}+\lambda Sin^2\theta\Theta(\theta)\right] \tag{3.34}$$

ifadesi elde edilir. Bu eşitliğin sağlanabilmesi için, m sabit bir sayı olmak üzere,

$$\frac{d^2}{d\varphi^2}\Phi(\varphi)=-m_l{}^2\Phi(\varphi) \tag{3.35}$$

ve

$$\left[Sin\theta \frac{d}{d\theta} Sin\theta \frac{d}{d\theta} + \lambda Sin^2\theta \right] \Theta(\theta) = m_l^2 \, \Theta(\theta) \tag{3.36}$$

eşitliklerinin ayrı ayrı sağlanmaları gerekir. (3.35) ile verilen ikinci dereceden diferansiyel denklemin çözümü

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l\varphi} \tag{3.37}$$

olacaktır. Denk.(3.36)'nın çözümü için denklem $\sin^2\theta$'ya bölünerek yeniden düzenlenirse

$$\frac{1}{Sin\theta} \frac{d}{d\theta} Sin\theta \frac{d\,\Theta(\theta)}{d\theta} + (\lambda - \frac{m_l^2}{Sin^2\theta}) \Theta(\theta) = 0 \tag{3.38}$$

bağıntısına ulaşılır. Burada θ, 0 ile π arasında değerler aldığı için (3.38) denklemi θ'nın 0 ve π değerlerinde sonsuza ulaşır. Oysa bu denklemin çözümünden elde edilen $\Theta(\theta)$ fonksiyonu, 0-π aralığında her yerde sonlu ve tek değerli olmalıdır. (3.38) denklemini daha belirgin bir duruma getirmek için,

$$\eta = Cos\theta \tag{3.39}$$

gibi yeni bir değişken ile,

$$P(\eta) = P(Cos\theta) \equiv \Theta(\theta) \tag{3.40}$$

gibi yeni bir fonksiyon tanımlansın. Bu durumda (3.38) denklemi

$$\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2) \frac{dP(\eta)}{d\eta} + (\lambda - \frac{m_l{}^2}{1-\eta^2}) P(\eta) = 0 \tag{3.41}$$

şeklinde yazılabilir. Eğer, $l = 0,1,2,...$ olmak üzere,

$$\lambda = l(l+1) \tag{3.42}$$

gibi sınırlı değerler alacak şekilde seçilirse, (3.41) denklemi Legendre denklemine dönüşür:

$$\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2) \frac{dP(\eta)}{d\eta} + \left[l(l+1) - \frac{m_l{}^2}{1-\eta^2} \right] P(\eta) = 0 \tag{3.43}$$

Bu denklemin çözümleri Legendre polinomlarını verir ve l'nin her değeri için, m pozitif değer almak üzere

$$P_{lm}(\eta) = (1-\eta^2)^{m/2} \frac{d^{m_l}}{d\eta^{m_l}} P_l(\eta) \equiv \Theta_{lm}(\theta) \tag{3.44}$$

bağıntısıyla verilirler. Burada $P_l(\eta)$

$$P_l(\eta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\eta^l} (\eta^2 - 1)^l \tag{3.45}$$

şeklinde verilir. Buradan dönme hareketine karşı gelen dalga fonksiyonunun θ değişkenine bağlı $\Theta(\theta)$ kısmı, $m_l \le l$ olmak üzere, m_l ve l gibi iki tam sayı yardımıyla tanımlanır. Böylece (3.37) ve (3.44) eşitliklerinin birleştirilmesi ile

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \Theta_{lm}(\theta) e^{im_l\varphi} \tag{3.46}$$

fonksiyonları elde edilir. Dönme hareketinin yalnızca açısal kısmını belirleyen bu fonksiyonlara küresel harmonikler denir. Küresel harmoniklerde m_l sayısı l'nin

$$l = 0, 1, 2, ... \tag{3.47}$$

gibi tamsayı değerlerinden her biri için,

$$m_l = -l, -l+1, ..., l-1, l \tag{3.48}$$

olmak üzere $(2l+1)$ tane değer alır.

Kuantum sisteminin potansiyel enerjisi V(r), Schrödinger denkleminin açısal kısmını belirleyen ve (3.35) ile verilen denklemin çözümünü etkilememektedir. Demek ki dalga fonksiyonlarının açısal kısmı, merkezcil kuvvetin yapısına bağlı değildir. Başka bir ifadeyle, merkezcil kuvvet ne olursa olsun dalga fonksiyonlarının θ ve φ'ye bağlılığı, küresel harmoniklerce kontrol edilir.

3.2.2. r değişkenine bağlı çözüm

(3.29) denkleminde λ yerine Denk.(3.42)'deki değer kullanılır ve denklem yeniden düzenlenirse

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}(rR(r))+\left[V(r)+\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}l(l+1)\right](rR(r))=E(rR(r)) \tag{3.49}$$

ifadesi elde edilir.

$$V_{et.}(r)=V(r)+\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}l(l+1) \tag{3.50}$$

gibi bir etkin potansiyel enerji tanımlanırsa r değişkeni, 0 ile +∞ arasında değerler alır. O halde, E'nin belli bir değeri sistemin enerji özdeğeri ise, R(r) her yerde olduğu gibi r =0 ve r =∞ durumunda da sürekli ve sonlu olmalıdır.

Çözümü aranılan (3.49) özdeğer denklemi l sayısını içermektedir. Bu durum, (3.49) denklemine önemli bir özellik kazandırır. l sayısının seçimi, (3.49) denkleminin biçiminin değişmesine neden olur. Bu demektir ki l sayısının her değeri için R(r)'nin bir seri değeri vardır. Böylece V(r) potansiyel enerjisi için belli bir r bağımlılığı seçildikten sonra (3.49) denkleminden elde edilecek çözümler iki ayrı sayı içerecektir. Bu sayılardan biri 0, 1, 2,… gibi pozitif tam sayılar olan l 'dir, diğeri de n sayısıdır. Buna göre r değişkenine bağlı çözüm, $R_{nl}(r)$ biçiminde bir gösterimle belirlenir.

Sonuç olarak, merkezcil bir kuvvet etkisinde dönme hareketi yapan bir kuantum sisteminin kararlı durum dalga fonksiyonları

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi,t)=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)\,e^{-iE_{nl}t/\hbar} \tag{3.51}$$

biçiminde yazılır. Böyle bir sistemin kararlı durum dalga fonksiyonları n,l ve m gibi üç kuantum sayısı ile belirlenir.

3.2.3. Açısal momentumun kuantumlanması

(3.30) ile (3.42) denklemleri birleştirilirse

$$-\Lambda^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3.52}$$

özdeğer denklemi elde edilir. Burada Denk.(3.20)'den dolayı

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3.53}$$

ifadesi yazılır. Burada $\hat{L}^2$, açısal momentumun karesinin büyüklüğünü veren bir işlemci olduğu için (3.53) özdeğer denkleminin özdeğeri, momentumun büyüklüğüne ilişkin bir sayı verir. Yani

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \tag{3.54}$$

dir. Diğer taraftan, (3.17) ve (3.46) bağıntılarından

$$\begin{aligned}\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) &= \hat{L}_z \Theta_{lm}(\theta)\, e^{im_l\varphi} \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Theta_{lm}(\theta,\varphi)e^{im_l\varphi} \\ &= \hbar\, m_l Y_{lm}(\theta,\varphi)\end{aligned} \tag{3.55}$$

ifadeleri yazılabilir. Buna göre, $\hat{L}_z$ işlemcisinin küresel harmoniklere göre özdeğeri $\hbar m_l$ gibi bir sayıdır. Oysa $\hat{L}_z$ işlemcisi, açısal momentumun polar eksen doğrultusundaki bileşenini veren bir işlemcidir. Yani açısal momentumun polar eksen olan z doğrultusundaki bileşeninin değeri

$$\hat{L}_z = \hbar m_l \quad ; \qquad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l \tag{3.56}$$

şeklinde verilir. Açısal momentumun bileşenlerini veren işlemciler arasında

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] &= i\hbar\,\hat{L}_z \\ \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] &= i\hbar\,\hat{L}_x \\ \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] &= i\hbar\,\hat{L}_y\end{aligned} \tag{3.57}$$

ifadeleri ile verilen bir ilişki vardır. Bu eşitlikler, açısal momentumun bileşenlerine karşı gelen işlemcilerin komüte etmeyen işlemciler olduklarını ifade etmektedir.

3.2.4. $\hat{L}^2$ *ve* $\hat{L}_z$ işlemcileri

(3.53) ve (3.55) bağıntıları, $\hat{L}^2$ *ve* $\hat{L}_z$ işlemcilerinin komüte eden işlemciler olduğunu göstermektedir. Yani,

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0 \tag{3.58}$$

dır. $\hat{L}^2$ *ve* $\hat{L}_z$ işlemcileri komüte eden işlemciler oldukları için, bunların özfonksiyonları aynıdır. O halde $\hat{L}^2$ *ve* $\hat{L}_z$ işlemcileri için l açısal ve m_l magnetik kuantum sayılarının oluşturduğu $|l, m_l\rangle$ gibi bir özfonksiyon seçilebilir. Bu durumda (3.53) ve (3.55) özdeğer denklemleri

$$\hat{L}^2 |l, m_l\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m_l\rangle \tag{3.59}$$

ve

$$\hat{L}_z |l, m_l\rangle = \hbar m_l |l, m_l\rangle \tag{3.60}$$

biçiminde yazılabilir. Bu demektir ki $\hat{L}^2$ işlemcisi, kuantum sisteminin $|l, m_l\rangle$ gibi bir öz ketine ya da öz durumuna uygulandığı zaman, açısal momentumun büyüklüğünün karesini verir. Benzer şekilde $\hat{L}_z$, $|l, m_l\rangle$ gibi bir öz duruma uygulandığı zaman, açısal momentumun z bileşeninin olası değerlerini verir. $\hat{L}^2$ *ve* $\hat{L}_z$ işlemcileri aynı özfonksiyonlara sahiptirler. Başka bir ifadeyle $\hat{L}^2$ *ve* $\hat{L}_z$ işlemcileri kuantum sisteminin aynı öz durumunu belirlerler (Apaydın 2004).

3.2.5. Elektron spini

Yüklü bir küre olarak tasarlanan elektron, çekirdek etrafındaki yörüngesel hareketinden başka, kendi ekseni etrafındaki hareketinden ileri gelen $\vec{S}$ spin açısal momentumuna da sahip olur. Spin açısal momentum, yörüngesel hareketi niteleyen açısal momentumun taşıdığı özellikleri aynen taşır. Negatif yükün dönme hareketinden dolayı elektronun sahip olacağı $\vec{\mu}_S$ spin manyetik momenti, elektronun spini ile zıt yöndedir.

Spin açısal momentum vektörünün büyüklüğü

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \qquad ; \qquad s=1/2 \tag{3.61}$$

şeklindedir. Burada s, spin kuantum sayısıdır. $\hat{S}$ spin açısal momentum işlemcisinin bileşenleri $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ ise, bu bileşenler arasında

$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] = i\hbar\,\hat{S}_z \quad , \qquad \left[\hat{S}_y, \hat{S}_z\right] = i\hbar\,\hat{S}_x \quad , \qquad \left[\hat{S}_z, \hat{S}_x\right] = i\hbar\,\hat{S}_y \tag{3.62}$$

ile verilen komutasyon bağıntıları vardır. Bu eşitlikler, spin işlemcisinin bileşenlerini niteleyen kendi aralarında komüte eden işlemciler değildir. $\hat{S}$ işlemcisinin karesinin büyüklüğü

$$\hat{S}^2\left|s, m_s\right\rangle = \hbar^2\, s\,(s+1)\left|s, m_s\right\rangle \tag{3.63}$$

bağıntısıyla bulunur. $\hat{S}$ işlemcisinin $\hat{S}_z$ bileşeninin büyüklüğü ise

$$\hat{S}_z\left|s, m_s\right\rangle = \hbar m_s\left|s, m_s\right\rangle \tag{3.64}$$

bağıntısıyla verilmektedir. Burada m_s ise spin açısal momentumun z doğrultusundaki bileşenini belirleyen bir sayıdır ve spin magnetik kuantum sayısı adını alır. Spin magnetik kuantum sayısı –s'den +s'ye kadar (2s+1) tane değer alır. (3.63) ve (3.64) bağıntıları yörüngesel açısal momentum gibi spin açısal momentumun da kuantumlandığını göstermektedir.

Elektron ve proton gibi parçacıkların spin kuantum sayıları yalnızca (1/2) değerini alır. Yani elektronun spin kuantum sayısı s=1/2'dir. Buna göre m_s, -s'den +s'ye kadar (2s+1) değer alacağı için

$$m_s = \pm\frac{1}{2} \tag{3.65}$$

olacaktır. Elektronun ya da protonun $|s, m_s\rangle$ ile belirlenen özfonksiyonları,

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = |\alpha\rangle \qquad , \qquad \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = |\beta\rangle \tag{3.66}$$

ketleriyle belirlenir. Buna göre, (3.63) ve (3.64)'den

$$\begin{aligned}
&\hat{S}^2\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hat{S}^2|\alpha\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|\alpha\rangle \\
&\hat{S}^2\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hat{S}^2|\beta\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|\beta\rangle \\
&\hat{S}_z\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hat{S}_z|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle \\
&\hat{S}_z\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hat{S}_z|\beta\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\beta\rangle
\end{aligned} \tag{3.67}$$

özdeğer denklemleri yazılır (Apaydın 2004).

3.2.6. Toplam açısal momentum

Kaynakları farklı birden fazla açısal momentuma sahip olan bir kuantum sistemini toplam olarak niteleyen açısal momentum işlemcisi, farklı türden açısal momentumlara karşı gelen işlemcilerin toplamı olacaktır.

Bir kuantum sisteminin hem yörüngesel harekete ilişkin açısal momentumu hem de spine ilişkin spin açısal momentumu varsa, yörüngesel harekete ilişkin açısal momentum işlemcisi $\hat{L}$, spine ilişkin alan da $\hat{S}$ ise kuantum sistemini toplam olarak niteleyen açısal momentum işlemcisi, bunların toplamı biçimindedir. Yani,

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \tag{3.68}$$

yazılabilir. Burada $\hat{J}$ işlemcisi, kuantum kuramına göre açısal momentumu belirleyen bir işlemci ise

$$\left[\hat{J}_x,\hat{J}_y\right]=i\hbar\hat{J}_z \quad , \quad \left[\hat{J}_y,\hat{J}_z\right]=i\hbar\hat{J}_x \quad , \quad \left[\hat{J}_z,\hat{J}_x\right]=i\hbar\hat{J}_y \tag{3.69}$$

ve

$$\left[J^2,J_z\right]=0 \tag{3.70}$$

komutasyon bağıntılarını sağlar. Bu durumda toplam açısal momentumda

$$J^2\psi_{jm_j}=\hbar^2\, j(j+1)\psi_{jm_j} \tag{3.71}$$

$$J_z\psi_{jm_j}=\hbar\, m_j\psi_{jm_j} \tag{3.72}$$

şeklindeki özdeğer denklemleri sağlanmalıdır. Burada j ve m_j kuantum sayılarıdır. j'ye toplam açısal momentum kuantum sayısı denir ve sıfır, pozitif yarı ya da tam sayılar biçiminde değerler alır. m_j'ye de toplam manyetik açısal momentum kuantum sayısı denir ve –j'den +j'ye kadar (2j+1) tane değer alır (Apaydın 2004).

$\hat{J}$ ve $\hat{J}_z$ belirli değerlere sahip olduklarından, dalga fonksiyonunun belirtilmesinde m_l ve m_s kuantum sayıları yerine j ve m_j kuantum sayıları kullanılabilir. Yani

$$\psi_{nljm_j} \tag{3.73}$$

veya daha sade bir gösterimle

$$\psi_{jm_j} \tag{3.74}$$

olarak ifade edilebilir. Verilen bir j değeri için J sabittir. Fakat m_j, (2j+1) değer aldığından $\vec{J}$ vektörü bu değer kadar yönelim gösterir. Bir dış magnetik alanda, bu yönelimlerden her birine bir enerji seviyesi karşılık olur (Başar 2000).

3.2.7. Açısal momentumun toplanması ve Clebsch-Gordon katsayıları

$j_1^2, j_2^2, j_{1z}, j_{2z}$ operatörlerinin özdeğerleri ve $\psi_{j_1 m_1}$ ve $\psi_{j_2 m_2}$ fonksiyonları bilinirse, iki etkileşmeyen sistemin j_1 ve j_2 açısal momentumunun toplanması problemi, $j^2 = (j_1 + j_2)^2$, $j_z = j_{1z} + j_{2z}$ operatörlerinin özdeğerlerini ve ψ_{jm} özfonksiyonlarını bulmaktan ibaret olur. j ve m'nin değerleri için

$$j = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1, ..., |j_1 - j_2| \tag{3.75}$$

$$m = m_1 + m_2 \tag{3.76}$$

ifadeleri yazılabilir. $\psi_{m_1 m_2} = \psi_{j_1 m_1}\psi_{j_2 m_2}$ fonksiyonlarına göre açılım formunda j^2, j_z operatörlerinin ψ_{jm} özfonksiyonları yeniden ifade edilsin. (3.76)'ya göre $m = m_1 + m_2$ ile $\psi_{m_1 m_2}$ fonksiyonları

$$\psi_{jm} = \sum_{m=m_1+m_2} C^{j}_{m_1 m_2} \cdot \psi_{m_1 m_2} \tag{3.77}$$

genişletme ifadesi ile yazılabilir. Burada $C^{j}_{m_1 m_2}$ genişletme katsayıları Clebsch-Gordan katsayıları olarak adlandırılır (Sobelman 1996).

$$C^{j}_{m_1 m_2} = (j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m) \tag{3.78}$$

notasyonu ile verilen Clebsch-Gordan katsayılarının temel özelliklerini ve onlarla ilişkili katsayılar olan

$$V(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) \tag{3.79}$$

ile verilen Racah V katsayılarını ve

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \tag{3.80}$$

ile verilen Wigner 3j sembollerini göz önüne alalım.

Clebsch-Gordan katsayıları, $j_1^2 j_{z_1} j_2^2 j_{z_2}$ operatörlerin özfonksiyonlarında $j_1^2 j_2^2 j^2 j_z$ $(j = j_1 + j_2)$ operatörlerinin özfonksiyonlarının açılımını tanımlayacak şekilde

$$\psi_{j_1 j_2 jm} = \sum_{m_1 m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 jm) \psi_{j_1 m_1 j_2 m_2} \tag{3.81}$$

olarak yazılır. Bu katsayılar argümanların tam sayı ve yarı-tamsayı değerleri için belirlenir ve eğer aşağıdaki iki koşulu sağlarsa sıfır değildir:

$$m_1 + m_2 = m \tag{3.82}$$

$$j = j_1 + j_2 , j_1 + j_2 - 1, ..., |j_1 - j_2| \tag{3.83}$$

$j_1 - m_1 , j_2 - m_2 , j - m$ farkları ve aynı zamanda $j_1 + j_2 + j$ toplamı tamsayıdır. (3.83) koşulu, genellikle üç açı şartı olarak adlandırılır ve $\Delta(j_1 j_2 j)$ olarak ifade edilir. Bu koşula göre $j_1\ j_2\ j$ sayılarının herhangi biri diğer ikisinin farkına eşittir ya da daha büyüktür ve diğer ikisinin toplamına eşittir veya daha küçüktür.

Racah V katsayıları ve 3j sembolleri, aşağıdaki bağıntı ile Clebsch-Gordan katsayıları ile ilişkilendirilir:

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 jm) = (-1)^{-j_1 + j_2 - m} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \tag{3.84}$$

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 jm) = (-1)^{j+m} \sqrt{2j+1}\ V(j_1 j_2 j; m_1 m_2 - m) \tag{3.85}$$

$$V(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) = (-1)^{-j_1 + j_2 + j} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \tag{3.86}$$

Denklem (3.84) ve (3.85)'ten hareketle

$$V(j_1 j_2 j; m_1 m_2 - m) = (-1)^{-j - j_1 + j_2 - 2m} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}^* \tag{3.87}$$

olduğu görülür. j-m bir tamsayı ve 2j-2m çift sayı olduğundan Denk.(3.84) ve (3.85), Denk. (3.86) ile özdeştir. Denk. (3.84) ve (3.85)'e göre Denk. (3.79) ve (3.80)'de verilen katsayılar, eğer (3.83) koşulu ve düzenlenen (3.82) koşulu yani

$$m_1 + m_2 + m = 0 \tag{3.88}$$

koşulu sağlanırsa sıfır olmayacaktır.

V katsayılarının avantajı ve özellikle 3j sembollerinin avantajı, onların Clebsch-Gordan katsayılarından gözle görülür derecede daha yüksek simetriye sahip olmasıdır. 3j sembolleri şu simetrilere sahiptir:

$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j & j_1 \\ m_2 & m & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j & j_1 & j_2 \\ m & m_1 & m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j \\ m_2 & m_1 & m \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{j_1+j_2+j} \begin{pmatrix} j_1 & j & j_2 \\ m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j} \begin{pmatrix} j & j_2 & j_1 \\ m & m_2 & m_1 \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{3.89}$$

Dolayısıyla 3j sembolünün sütunlarının çift yer değiştirmesi durumunda onun değeri değişmez; tek yer değiştirme durumunda başlangıç değeri $(-1)^{j_1+j_2+j}$ ile çarpılır. Ayrıca

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ -m_1 & -m_2 & -m \end{pmatrix} \tag{3.90}$$

dir. Denk. (3.84) ve (3.85)'i kullanarak Denk.(3.78) ve (3.79) daki katsayılar için benzer bağıntılar elde etmek zor değildir. Özellikle Denk.(3.84-3.87)'den

$$(j_1\, j_2\, m_1\, m_2 | j_1\, j_2 j m) = (-1)^{j_1+j_2-j} (j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 j m) \tag{3.91}$$

olduğu görülür. 3j sembolleri aşağıdaki ortogonallik şartlarına uyar;

$$\sum_{j,m} (2j+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1' & m_2' & m \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m_1'}\, \delta_{m_2 m_2'} \tag{3.92}$$

$$\sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ m_1 & m_2 & m' \end{pmatrix} = \frac{1}{2j+1} \delta_{jj'}\, \delta_{mm'} \tag{3.93}$$

Denk.(3.78) ve (3.79) katsayıları aynı zamanda Denk.(3.84)-(3.86) ile uyumlu benzer bağıntılar sağlar. Dolayısıyla

$$\sum_{j,m}(j_1 j_2 m_1 m_2 \left| j_1 j_2 jm\right.)(j_1 j_2 jm \left| j_1 j_2 m_1' m_2'\right.) = \delta_{m_1 m_1'}\ \delta_{m_2 m_2'} \tag{3.94}$$

$$\sum_{m_1 m_2}(j_1 j_2 m_1 m_2 \left| j_1 j_2 jm\right.)(j_1 j_2 j'm' \left| j_1 j_2 m_1 m_2\right.) = \delta_{jj'}\,\delta_{mm'} \tag{3.95}$$

dır. j_2=0 olduğunda Denk.(3.81) Clebsch-Gordan katsayılarının tanımından

$$\left(j_1\, 0\, m_1\, 0 \left| j_1\, 0\, j\, m\right.\right) = \delta_{jj_1}\delta_{m\, m_1} \tag{3.96}$$

$$V(j_1\ 0\ j; m_1\ 0\, m) = (-1)^{-j+m}\ (2j+1)^{-1/2}\ \delta_{jj_1}\delta_{-m_1\, m} \tag{3.97}$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & 0 & j \\ m_1 & 0 & m \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 - m}\,(2j+1)^{-1/2}\delta_{jj_1}\delta_{-m_1 m} \tag{3.98}$$

olduğu görülür (Sobelman 1996).

3.2.8. Racah *W* katsayıları ve 6j sembolleri

j_1, j_2 ve j_3 açısal momentumun toplamının iki şemasını göz önüne alalım:

$$j_1 + j_2 = J' \ ,\ \ J' + j_3 = J \tag{3.99}$$

$$j_2 + j_3 = J'' \ ,\ j_1 + J'' = J \tag{3.100}$$

İlk durumda

$$\begin{aligned}\psi_{JM}(j_1 j_2 [J'] j_3) &= \sum_{m_3 M'}(J'\, j_3 M' m_3 \left| J'\, j_3 JM\right.)\psi_{J'M'}\psi_{j_3 m_3} \\ &= \sum_{m_1 m_2 m_3 M'}(j_1 j_2 m_1 m_2 \left| j_1\ j_2 J'M'\right.)(J'\, j_3 M'\, m_3 \left| J'\, j_3 JM\right.)\psi_{j_1 m_1}\psi_{j_2 m_2}\psi_{j_3 m_3}\end{aligned} \tag{3.101}$$

ikinci durumda

$$\psi_{JM}(j_1, j_2 j_3[J'']) = \sum_{m_1 M''} (j_1 J'' m_1 M'' | j_1 J'' JM) \psi_{j_1 m_1} \psi_{J'' M''}$$
$$= \sum_{m_1 m_2 m_3 M''} (j_2 j_3 m_2 m_3 | j_2 j_3 J'' M'') (j_1 J'' m_1 M'' | j_1 J'' JM) \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2} \psi_{j_3 m_3} \quad (3.102)$$

ifadeleri yazılabilir ve $\psi_{JM}(j_1, j_2 j_3[J'']),\ \psi_{JM}(j_1 j_2[J'] j_3)$ fonksiyonlarına göre genişletilebilir:

$$\psi_{JM}(j_1, j_2 j_3[J'']) = \sum_{J'} (j_1 j_2[J'] j_3 J | j_1, j_2 j_3[J''] J)\ \psi_{JM}(j_1 j_2[J'] j_3) \quad (3.103)$$

$\psi_{JM}(j_1 j_2[J'] j_3)$ ve $\psi_{JM}(j_1, j_2 j_3[J''])$ fonksiyonları için yukarıda verilen ifadelerin yardımı ile $(j_1 j_2[J'] j_3 J | j_1, j_2 j_3[J''] J)$ katsayıları, Clebsch-Gordan katsayılarına göre ifade edilebilir:

$$(j_1 j_2[J'] j_3 J | j_1, j_2 j_3[J''] J) = \sum_{m_1 m_2 m_3 M' M''} (J' j_3 JM | J' j_3 M' m_3)$$
$$\times (j_1 j_2 J' M' | j_1 j_2 m_1 m_2)(j_2 j_3 m_2 m_3 | j_2 j_3 J'' M'')(j_1 J'' m_1 M'' | j_1 J'' JM) \quad (3.104)$$

Sağ taraftaki toplam, $j_1 j_2 j_3 J' J'' J$ altı elemanlı bir fonksiyondur. (3.104) ifadesi, aşağıdaki şekilde yeniden yazılabilir:

$$(j_1 j_2[J'] j_3 J | j_1, j_2 j_3[J''] J) = \sqrt{(2J'+1)(2J''+1)}\, W(j_1 j_2 J\ j_3; J' J'') \quad (3.105)$$

Denk.(3.105)'in sağ tarafındaki W fonksiyonu, Racah W katsayısıdır. Eğer j_2 ve j_3 vektörleri yer değiştirirse aşağıdaki ilave açısal momentum şemaları elde edilir:

$$j_1 + j_3 = J'' \quad , \quad J'' + j_2 = J \quad (3.106)$$

Bu durumda

$$(j_1 j_2[J'] j_3 J | j_1 j_3[J''] j_2 J) = \sqrt{(2J'+1)(2J''+1)}\, W(J' j_3 j_2 J''; J j_1) \quad (3.107)$$

Denk.(3.105), (3.107) formülleri, üç elektronun spinlerinin ve orbital açısal momentumların toplam sırasının kendiliğinden değiştiğindeki duruma genelleştirilir. Örneğin;

$$l_1 + l_2 = L' \quad , \quad s_1 + s_2 = S' \quad , \quad L' + l_3 = L \quad , \quad S' + s_3 = S \tag{3.108}$$

şemasından

$$l_2 + l_3 = L'' \quad , \quad s_2 + s_3 = S'' \quad , \quad l_1 + L'' = L \quad , \quad s_1 + S'' = S \tag{3.109}$$

şemasına geçiş için,

$$\left(l_1 s_1, l_2 s_2 [L'S'] l_3 s_3 LS \,|\, l_1 s_1; l_2 s_2, l_3 s_3 [L''S''] LS\right) = \sqrt{(2L'+1)(2L''+1)(2S'+1)(2S''+1)} \times W(l_1 l_2 L l_3; L'L'') W(s_1 s_2 S s_3; S'S'') \tag{3.110}$$

ifadesi yazılabilir.

$$\Delta(abe),\ \Delta(cde),\ \Delta(acf),\ \Delta(bdf) \tag{3.111}$$

şeklinde verilen üç açı şartları sağlanırsa *W(abcd,ef)*'nin sıfır olmadığı Denk.(3.104)'den görülür. *W* katsayıları bir simetri bağıntıları serisi sağlarlar.

6j sembolleri olarak adlandırılan, daha fazla simetri katsayılarına bağlı olarak *W*'yı ifade eden bu bağıntıları yazmak uygundur:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}$$

$$W(j_1 j_2 l_2 l_1; j_3 l_3) = (-1)^{-j_1 - j_2 - l_1 - l_2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \tag{3.112}$$

6j sembolü, sütununun herhangi bir yer değiştirmesi ve aynı zamanda herhangi iki sütununun her birindeki üst ve alt elemanlarının yer değiştirmesi durumunda değişmez kalır. Denk.(3.112)'den *W* katsayıları için simetri bağıntıları elde etmek kolaydır:

$$\begin{aligned} &W(abcd; ef) = W(badc; ef) = W(cdab; ef) = W(acbd; fe) \\ &= (-1)^{e+f-a-d} W(ebcf; ad) = (-1)^{e+f-b-c} W(aefd; bc) \end{aligned} \tag{3.113}$$

6j sembolleri,

$$\sum_j (2j+1)(2j''+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_3 & j_2 & j \\ j_1 & j_4 & j'' \end{Bmatrix} = \delta_{j'j''} \tag{3.114}$$

$$\sum_j (-1)^{j+j'+j''}(2j+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_2 & j_3 & j \\ j_1 & j_4 & j'' \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j' \\ j_3 & j_4 & j'' \end{Bmatrix} \tag{3.115}$$

şeklinde verilen ve aynı zamanda

$$\sum_x (-1)^{j_1+j_2+j_3+l_1+l_2+l_3+l_1'+l_2'+l_3'+x}(2x+1)\begin{Bmatrix} l_1 & x & l_1' \\ l_3' & j_2 & l_3 \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} l_2 & x & l_2' \\ l_1' & j_3 & l_1 \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} l_3 & x & l_3' \\ l_2' & j_1 & l_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1' & l_2' & l_3' \end{Bmatrix} \tag{3.116}$$

ile verilen toplam kuralına uyar. Denk.(3.112)'yi kullanarak *W* katsayıları için benzer bağıntılar elde etmek kolaydır. Sonuç olarak üç 3j sembollerinin çarpımlarının toplamı için formül

$$\sum_{\mu_1\mu_2\mu_3} (-1)^{l_1+l_2+l_3+\mu_1+\mu_2+\mu_3}\begin{pmatrix} j_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & \mu_2 & -\mu_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & j_2 & l_3 \\ -\mu_1 & m_2 & \mu_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & j_3 \\ \mu_1 & -\mu_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \tag{3.117}$$

ve $j_1, j_2 \rangle\rangle x$ olduğunda, 6j sembolü için

$$\begin{Bmatrix} j & j_2 & j_1 \\ x & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \to (-1)^{j_1+j_2+j}\frac{P_x(Cos(j_1.j_2))}{\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)}} \tag{3.118}$$

şeklinde önemli bir asimptotik ifade verilir (Sobelman 1996).

3.3. Çok Elektronlu Sistemler

Çok elektronlu bir atom, +Ze yüklü çekirdek ile her birinin yükü –e olan, N tane elektronun oluşturduğu bir kuantum sistemidir (Apaydın 2004). En basit çok elektronlu sistem helyum atomudur. Çok elektronlu bir atomda elektronlardan her biri, +Ze yüklü çekirdek ile Coulomb çekim etkileşmesi ve geri kalan (N-1) tane elektron ile Coulomb itme kuvvetine karşı gelen elektron-elektron etkileşmesi içine girer. Bu etkileşmeler atomun potansiyel enerjisini oluşturur. Bu durumu daha açık

bir şekilde ifade edecek olursak; dış alanların yokluğunda, N elektronlu bir atom için Hamiltoniyen operatörü,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\sum_{i=1}^{N}\nabla_{r_i}^2 - \sum_{i=1}^{N}\frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_o)r_i} + \sum_{i<j=1}^{N}\frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_o)r_{ij}} \tag{3.119}$$

şeklinde yazılabilir. Burada ilk toplam, N sayıda elektronun kinetik enerji operatörünü içerir. İkinci toplam, elektronlar ve +Ze yüklü çekirdek arasındaki çekimler için potansiyel enerjiyi ifade eder. En son toplam, elektronlar arası itmelerin potansiyel enerjisini gösterir. Ayrıca r_i, çekirdeğe göre i. elektronun bağıl koordinatıdır ve $r_{ij} = |r_i - r_j|$ dir. Buradaki j>i sınırlaması, aynı elektronlar arası iki kat itmeyi engeller ve e'^2/r_{ii} gibi terimleri önler (Köksal ve Gümüş 1999, Levine 2000). Atomik birimlerde Hamiltoniyen,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{1}{2}\nabla_{r_i}^2 - \frac{Z}{r_i}\right) + \sum_{i<j=1}^{N}\frac{1}{r_{ij}} \tag{3.120}$$

şeklinde verilir ve N elektronlu atom için dalga fonksiyonu $\psi(q_1, q_{2,}..., q_N)$ olmak üzere Schrödinger denklemi,

$$\left[\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{1}{2}\nabla_{r_i}^2 - \frac{Z}{r_i}\right) + \sum_{i<j=1}^{N}\frac{1}{r_{ij}}\right]\psi(q_1, q_2, ..., q_N) = E\psi(q_1, q_2, ..., q_N) \tag{3.121}$$

bağıntısı ile verilir. Burada q_i'ler, i. elektronun r_i (sürekli) uzay koordinatlarını ve kesikli spin koordinatları topluluğunu gösterir (Köksal ve Gümüş 1999).

Çok elektronlu atomlarda, yukarıda sözü edilen temel etkileşmelerden başka etkileşmeler de vardır. Özellikle Coulomb çekim etkileşmesinden daha zayıf olan ve açısal momentum içeren bu etkileşmelerden bazıları şunlardır:

i) Elektronların yörüngesel açısal momentumlarının kendi aralarında çiftlenimine neden olan etkileşme. Bu etkileşme çok elektronlu atomda, toplam yörüngesel açısal momentumu verir.

ii) Elektronların spin açısal momentumlarının yine kendi aralarında çiftlenimine neden olan etkileşme. Bu da, atomda toplam spin açısal momentumu verir.

iii) Spin-yörünge etkileşmesi adını alan, elektronların yörünge açısal momentumları ile spin açısal momentumları arasında çiftlenim oluşturan etkileşme. Bu etkileşme, tek elektronlu atomda olduğu gibi çok elektronlu atomda da ince yapı yarılmalarına sebep olur.

iv) Atom üzerine uygulanan dış manyetik alan ile atomun manyetik momenti arasındaki etkileşme. Bu etkileşme, Zeeman yarılmalarına neden olur.

v) Aşırı ince yapı etkileşmesi adını da alan, elektronların toplam açısal momentumlarıyla çekirdeğin spin açısal momentumu arasında çiftlenim oluşturan etkileşme.

vi) Uygulanan dış manyetik alanla, yörünge ile spin dipol momentlerin bileşkesi olan atomun toplam dipol momenti arasındaki etkileşme.

Bu etkileşmelerin büyüklükleri birbirinden çok farklıdır. Bu sebeple, çok elektronlu atomlar incelenirken önce büyük olan etkileşmeler göz önüne alınır, daha sonra zayıf olan etkileşmelerden gelen katkılar hesaplamaya dahil edilir (Apaydın 2004). Birbirinden farklı çok sayıdaki bu etkileşmeler tümüyle göz önüne alındığında, çok elektronlu bir atomun incelenmesi, tek elektronlu bir atomun incelenmesi gibi kolay değildir. Schrödinger denklemini, verilen çok elektronlu bir atom için yazmak kolay olsa da, Helyum atomu gibi sadece iki elektronlu basit bir atom halinde bile Schrödinger denkleminin tam çözümüne ulaşmak çok zordur. Dolayısıyla, çok elektronlu atomların çözümü için yaklaşık hesaplama yöntemleri kullanılmalıdır.

Çok elektronlu atomlar üzerindeki tüm hesaplamaların başlangıç noktası, Merkezcil Alan Yaklaşımı'dır. Bu yaklaşıklıktaki temel düşünce, atomik elektronların, çekirdek ve diğer tüm elektronların oluşturdukları etkin, küresel simetrik V(r) potansiyelinde hareket etmeleridir (Köksal ve Gümüş 1999).

3.3.1. Merkezcil alan yaklaşımı

+Ze yüklü bir çekirdek ile N tane elektrondan oluşan bir atomu veya iyonu göz önüne alalım. Bu atomda (veya iyonda) sadece elektronlarla çekirdek arasındaki (çekirdeği sonsuz ağır kabul ediyoruz) çekici Coulomb etkileşmesi ve elektronlar arasındaki Coulomb itmelerini göz önünde bulundurarak, dış alan yokken atomun Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2\psi + V\psi = E\psi \tag{3.122}$$

şeklinde yazılır. Burada m_e, elektronun kütlesini gösterir. Öte yandan, bağıntıdaki V potansiyel enerjisi, i. elektron ile j. elektron arasındaki uzaklık $|r_i - r_j|$ olmak üzere

$$V=-\mathrm{k}\,e^2 Z\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{r_i} + \mathrm{k}\,e^2\sum_{i<j=1}^{N}\frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{3.123}$$

biçiminde tanımlanmıştır. Bu ifadeden potansiyel enerjinin iki terimden oluştuğu görülmektedir. İlk terim, çekirdek ile elektronlar arasındaki çekim etkileşmesinden kaynaklanırken, ikinci terim elektron-elektron itme etkileşmesinden kaynaklanır. Bilindiği gibi, çekirdek ile elektronlar arasındaki çekim kuvveti merkezcil kuvvet türündedir. Dolayısıyla Denk.(3.123)'deki birinci terim, tek elektronlu atomda olduğu gibi merkezcil alandan doğan potansiyel enerjidir. Oysa iki elektron arasındaki itme kuvveti merkezcil kuvvet türünde değildir. Yani Denk.(3.123)'deki ikinci terim, atomun toplam potansiyel enerjisine merkezcil olmayan bir katkı getirir. Bu katkıdan dolayı (3.122) eşitliği ile verilen Schrödinger denkleminin çözümünü bulmak için, tek elektronlu atom durumunda uygulanan, değişkenlerine ayırma yönteminin uygulanması olanağı yoktur. İşte çok elektronlu atomların Schrödinger kuramına göre incelenmesindeki zorluklardan biri de budur.

Bu zorluğu gidermek için ilk akla gelen şey, merkezcil olmayan katkının, merkezcil katkı yanında çok küçük olduğunu varsaymaktır. Böylece çok elektronlu

atomun potansiyel enerjisi, tıpkı tek elektronlu atomda olduğu gibi, tümüyle merkezcil alandan kaynaklanan enerji türünde olacaktır. Bu durumda atomu oluşturan elektronlar birbirini etkilemeden hareket ettikleri için bunlara birbirinden bağımsız parçacıklar denir. Yapılan yaklaşım da birbirinden bağımsız parçacık yaklaşımı adını alır (Apaydın 2004).

Gerçekte çok elektronlu bir atomda elektronlar arasındaki elektron-elektron etkileşmesini göz ardı etme olanağı yoktur. Bu nedenle denklemin çözümü kolayca bulunamaz. Fakat her elektronu bağımsız kabul edip, bir merkezcil alanda hareket ettiklerini varsayarak Schrödinger denklemi çözülebilir. Oysa bu varsayım bir çelişkidir. Çünkü eğer elektron-elektron etkileşmesi varsa, hem elektronlar birbirinden bağımsız olamazlar hem de oluşan alan merkezcil sayılamaz. O halde bu varsayımdaki çelişkiyi ortadan kaldırmak gereklidir.

Çok elektronlu bir atomdaki bir elektronu göz önüne alalım. Bu elektron, geri kalan (N-1) tane elektron ile elektron-elektron etkileşmesi içine girer. Eğer, bu elektron çekirdeğe yakın ise, elektron-elektron etkileşmesi simetriden dolayı birbirini yok eder ve bu elektron, +Ze yüklü çekirdek tarafından daha büyük bir Coulomb çekim etkisi içine girer. Aksine, bu elektron çekirdeğe uzak ise (N-1) tane elektron ile oluşturacağı elektron-elektron etkileşmelerinin toplamı, +Ze yüklü çekirdeğin bu elektron üzerine uyguladığı Coulomb çekim etkisini azaltır. Yani bu elektron, atom içinde etkin yükü +Ze'den daha küçük olan bir dış çekirdek yükünün neden olduğu Coulomb çekim etkisinde kalır.

Merkezcil alan yaklaşımı, her elektronun

$$V_m(r) = -k\frac{Ze^2}{r} \qquad , r \to 0 \tag{3.124}$$

ve

$$V_m(r) = -k\frac{e^2}{r} \qquad , r \to \infty \tag{3.125}$$

gibi potansiyel enerji fonksiyonuna neden olan bir merkezcil alan içinde hareket ettiğini öngörür. (3.124) ve (3.125) bağlantıları birleştirilirse,

$$\mathrm{V}_m(r) = -\mathrm{k}\frac{e^2}{r} Z_{et}(r) \tag{3.126}$$

elde edilir. Burada Z_{et}(r) niceliğine çekirdeğin etkin yükü ya da her elektronun gördüğü etkin çekirdek yükü adı verilir ve elektronun çekirdeğe olan uzaklığına bağlı olarak

$$Z_{et.}(r) = \begin{cases} Z & ;\ r \to 0 \\ 1 & ;\ r \to \infty \end{cases} \tag{3.127}$$

şeklinde yazılabilir. Böylece, $(r_i, \theta_i, \varphi_i)$ koordinatlarında tanımlanan her elektronun davranışı, $V_m(r_i)$ gibi bir merkezcil potansiyel tarafından kontrol edilir ve E_i enerji öz değeri ile ona karşı gelen ψ_i özfonksiyonu

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2\psi_i + V_m(r_i)\psi_i = E_i\psi_i \tag{3.128}$$

Schrödinger denkleminin çözümünden bulunur. Gözönüne alınan atomda, N tane elektron olduğu için merkezcil potansiyel,

$$V_m = \sum_{i=1}^{N} V_m(r_i) \tag{3.129}$$

şeklinde yazılır. O halde atomu niteleyen toplam enerji öz değeri,

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_i \tag{3.130}$$

ve buna karşı gelen özfonksiyon da,

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^{N} \psi_i(\vec{r}_i) \tag{3.131}$$

bağıntılarıyla belirlenir. $V_m\,(r_i)$ merkezcil bir potansiyel olduğu (dolayısıyla küresel simetrik olduğu) için, i. elektronun $\psi_i(r_i)$ özfonksiyonu, tek elektronlu atomdakine benzer biçimde değişkenlerine ayrılarak

$$\psi(\vec{r}) = \left[R_{n\ell}(r).Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)\right].\psi_{m_s} \tag{3.132}$$

şeklinde yazılır. Burada n, ℓ, m_ℓ, m_s, sayıları i. elektronu niteleyen kuantum sayılarıdır ve $R_{n\ell}$, $Y_{\ell m_l}$ nicelikleri de tek elektronlu atom durumundaki özelliklerini aynen taşırlar. Yani (3.132)'deki küresel harmonikler, yalnızca ℓ ve m_ℓ kuantum sayılarını içerdikleri için bunlar, tek elektronlu atomdaki açısal momentum kavramıyla açıklanırlar. Dolayısıyla, merkezcil alan yaklaşımında Schrödinger denkleminin $Y_{\ell m_l}(\theta,\varphi)$ kısmına ilişkin çözümü, tek elektronlu atomdaki çözümle aynıdır. Fakat merkezcil alan modelinde, $V_m(r)$ potansiyel fonksiyonu, tek elektronlu atomdaki gibi doğrudan ters kare yasasına uyan Coulomb türü bir potansiyel olmadığı için Schrödinger denkleminin yalnızca konumuna ilişkin,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d^2}{dr^2}r^2\right)R_{n\ell}(r)+\left[V_m(r)+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_e r^2}\right]R_{n\ell}(r)=E_{n\ell}R_{n\ell}(r) \tag{3.133}$$

kısmının çözümlerinin, tek elektronlu atomdaki çözümlerden farklı olması beklenir. Ancak bu denklemin çözümü, tıpkı tek elektronlu atomda olduğu gibi, her elektron için ardışık enerji düzeyleri verir. Bu ardışık düzeylere karşı gelen $E_{n\ell}$ enerji değerleri, hem n hem de ℓ kuantum sayılarını içerir.

Merkezcil alan modelinde (3.133) denkleminin çözümü, temelde $V_m(r)$ potansiyel fonksiyonu için doğru bir değer seçilip seçilmediğine bağlıdır. Bu amaçla ileri sürülen teknik, önce Hartree, sonra Fock ve daha sonra da Slater tarafından geliştirildi. Bu teknikte $Z_{et}(r)$' ye uygun bir değer verilerek sistemin potansiyeli tanımlanır, sonra bu potansiyel (3.133) Schrödinger denkleminde kullanılır ve denklemin çözümünden $E_{n\ell}$ ve $R_{n\ell}(r)$ değerleri bulunur. Atomdaki elektronlar, bulunan bu $E_{n\ell}$ enerji durumlarında, Pauli dışarlama ilkesine göre yerleştirilir.

$R_{n\ell}(r)$ değerleri yardımıyla elektronların olasılık dağılım fonksiyonları bulunur. Elektronlar için elde edilen yük dağılımı çekirdeğin yükü ile birleştirilerek atomun toplam yük dağılımı elde edilir. Bu toplam yüke klasik olarak uygulanan Gauss yasası, atom içindeki elektriksel alanı verir ve elektriksel alanda da $V_m(r)$ merkezcil potansiyeli için bir değer bulunur. $V_m(r)$ için bulunan bu değer, işlemlerde $V_m(r)$ için kullanılan ilk değerle karşılaştırılır. Bu iki değer arasındaki yakınlık, tekniğin öz uyumluluğunu belirler. Eğer bulunan değer ile kullanılan ilk değer arasında uyum yoksa, o zaman $Z_{et}(r)$'ye yeni bir değer verilerek yukarıdaki işlemler tekrarlanır.

3.3.2. Bağımsız parçacık-merkezcil alan modelinin iyileştirilmesi

Çok elektronlu atomların elektronik yapısını ortaya koyarken çözmeye çalışılan (3.133) Schrödinger denkleminde yalnızca iki tür etkileşmeye yer verilmişti. Bunlardan birisinin, atomdaki elektronların her biri ile yükü +Ze olan çekirdek arasındaki çekim ve ötekinin de elektronlar arasındaki elektron-elektron itme etkileşmeleri olduğu söylenmişti. Bunlardan ilki, tümüyle merkezcil (tıpkı tek elektronlu atomda olduğu gibi) ve ikincisi de merkezcil olmayan türden etkileşmedir.

(3.133) Schrödinger denklemini çözerek atomların taban enerji durumunu oluştururken ileri sürülen merkezcil alan modelinde elektronların, sanki merkezcil alandan türemiş bir potansiyel içinde birbirinden bağımsızmış gibi hareket ettikleri yaklaşımı yapılmıştı. Bu yaklaşım, (3.133) içinde geçen $V_m(r)$ potansiyelinin, elektronlar arasındaki elektron-elektron etkileşmesinin yalnızca merkezcil bileşenini içerdiğini gösterir. Yani atomu oluşturan elektronların her biri, bu iki ayrı etkileşmeden kaynaklanan bir ortalama merkezcil potansiyel içinde hareket eder.

Gerçekte bu iki etkileşmenin oluşturduğu ve (3.123) ile verilen bu potansiyel

$$V = -\mathrm{k}Z\, e^2 \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{r_i} + \mathrm{k}\, e^2 \overline{\left[\sum_{i<j=1}^{N} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right]} + \mathrm{k}\, e^2 \sum_{i<j=1}^{N} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \mathrm{k}\, e^2 \overline{\left[\sum_{i<j=1}^{N} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right]} \qquad (3.134)$$

biçiminde yazılsın. Yani bağıntıya, elektron-elektron etkileşmesine karşı gelen kesimin ortalama değeri hem eklensin hem de çıkarılsın. Denk. (3.134)'ün ilk iki teriminin toplamı, bu iki etkileşmeden kaynaklanan

$$V_m(r) = -\mathrm{k}\,Z\,e^2\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{r_i} + \mathrm{k}\,e^2\overline{\left[\sum_{i<j=1}^{N}\frac{1}{\left|\vec{r}_i-\vec{r}_j\right|}\right]} \tag{3.135}$$

şeklinde verilen bir ortalama merkezcil potansiyeldir. Yani bu kesim, bağımsız parçacık yaklaşımına götüren merkezcil alan modeline göre, (3.133) Schrödinger denkleminin çözümü bulunurken kullanılan $V_m(r)$ merkezcil potansiyelidir. Öte yandan (3.134)'ün son iki teriminin toplamı, yani

$$V_{ee} = \mathrm{k}\,e^2\sum_{i<j=1}^{N}\frac{1}{\left|\vec{r}_i-\vec{r}_j\right|} - \mathrm{k}\,e^2\overline{\left[\sum_{i<j=1}^{N}\frac{1}{\left|\vec{r}_i-\vec{r}_j\right|}\right]} \tag{3.136}$$

ifadesi ise yalnızca elektron-elektron etkileşmesinden kaynaklanan merkezcil olmayan potansiyelin, merkezcil alan modelinde kullanılan kesiminden arta kalan kısmını verir. Yani V_{ee} potansiyeli, verilen bir elektronun, geri kalan (N-1) tane elektron yardımıyla çekirdekten perdelenmesine karşı gelen etkileşmenin merkezcil olmayan kısmıdır. Elektron-elektron etkileşmesinin bu kesimine, çoğu kez, *artık potansiyel* adı verilir. Böylece çok elektronlu bir atomda, merkezcil çekme ve elektron-elektron itme etkileşmelerinden kaynaklanan toplam potansiyel, Denk.(3.134)-(3.136)'dan,

$$V = V_m(r) + V_{ee} \tag{3.137}$$

şeklinde yazılabilir. Merkezcil alan modelinde bağımsız parçacık yaklaşımı yapmak demek, (3.137)'deki V_{ee} terimini göz ardı etmek demektir. Yani merkezcil alan modelinin içerdiği terim, (3.137)'nin yalnızca $V_m(r)$ terimidir. O halde, elektronların bireysel $E_{n\ell}$ enerjileri ile bunların toplamının oluşturduğu atomun enerjisi için, bağımsız parçacık-merkezcil alan yaklaşımına göre, bulunan değerlere (3.137)'deki

V_{ee}'nin getireceği katkı eklenmelidir. Ayrıca, bağımsız parçacık-merkezcil alan modelinde, spin ile her elektronun yörüngesel hareketine ilişkin açısal momentumu göz ardı edilmiştir. Bu durumda, tek parçacık-merkezcil alan modelinin sonuçlarına spin-yörünge etkileşmesinin getireceği katkı da eklenmelidir.

Çok elektronlu atomda i. elektrona ilişkin spin-yörünge etkileşmesine karşı gelen enerji, tek elektronlu atomdakine benzer biçimde,

$$V_{SY}(i) = \xi(r_i)\vec{S}_i.\vec{L}_i \tag{3.138}$$

olarak yazılabilir. Burada $\hat{S}_i$ ve $\hat{L}_i$, i. elektronun sırasıyla, spin ve yörüngesel hareketine ilişkin açısal momentum işlemcileridir. Böylece atom için toplam spin yörünge etkileşme enerjisi,

$$V_{SY} = \sum_{i=1}^{N} \xi(r_i)\vec{S}_i.\vec{L}_i \tag{3.139}$$

şeklinde olacaktır. İşte bağımsız parçacık-merkezcil alan yöntemine spin yörünge etkileşmesinden gelecek katkı budur.

Demek ki, çok elektronlu bir atomda elektronların içinde hareket ettiği toplam potansiyel, Denk.(3.137) ve Denk. (3.139)'dan,

$$V_T = V_m(r) + V_{ee} + V_{SY} \tag{3.140}$$

olarak yazılır. Bağımsız parçacık-merkezcil alan modelinde, (3.140)'ın yalnızca $V_m(r)$ kesiminin kullanılması V_{ee} ve V_{SY}'nin değerlerinin $V_m(r)$ yanında çok küçük olmasındandır. O halde V_{ee} ve V_{SY}'den gelecek katkılar, birinci dereceden perturbasyon kuramı uygulanarak bulunabilir ve böylece merkezcil alan modelinin iyileştirilmesi yapılabilir (Apaydın 2004).

3.3.3. Çok elektronlu atomlarda açısal momentum

Atomun tam dolmamış katındaki elektronlar, başka bir ifadeyle dış elektronlar arasında elektrostatik karşılıklı etkileşme, her bir dış elektronun yörüngesel ve spin momentlerinin manyetik karşılıklı etkisi (spin-yörüngesel karşılıklı etkileşme) ve diğer etkileşmeler olmasaydı, her bir elektron konfigürasyonuna yalnız bir enerji seviyesi karşılık gelirdi. Fakat bu etkileşmeler kaçınılmaz olduğundan, verilen bir elektron konfigürasyonuna birçok enerji seviyesi karşılık gelir. Bu seviyelerin sayısını ve karşılıklı durumlarını tayin etmek için atomun dış elektronlarının momentlerinin vektörel toplamına ihtiyaç vardır. Atomdaki dış elektronların momentleri birkaç modele göre toplanabilir. Genelde momentlerin *LS çiftlenimi* diye adlandırılan modele göre toplanması geçerlidir. Fakat momentlerin *JJ çiftlenimine* göre toplanmasının da geçerli olduğu durumlar vardır. Momentlerin *LS* ve *JJ* çiftlenimlerine göre toplanması mümkün olmakla birlikte, ara çiftlenimlerle de toplanması mümkündür. Fakat ara çiftlenimler nadir hallerde geçerlidir (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995).

Bir dış manyetik alan ve spin-yörünge etkileşmesi yoksa, $\hat{L}'$ orbital açısal momentum vektörü ile $\hat{S}'$ spin açısal momentum vektörünün büyüklükleri ve bunların z bileşenlerinin büyüklükleri sabit kalır. Bu büyüklükler sırasıyla ℓ, m_l, s ve m_s kuantum sayılarına bağlıdır. Elektronun yörünge hareketinden, yörünge düzlemine dik bir $\hat{L}'$ orbital açısal momentum vektörü, kendi merkezi etrafındaki dönme hareketinden de $\hat{S}'$ spin açısal momentum vektörü oluşur.

Spin yörünge etkileşmesi, Z atom numarası küçük olan atomlarda oldukça zayıftır ve Z atom numarası büyük olan atomlarda spin yörünge etkileşmesine karşı gelen V_{SY} potansiyeli, elektron-elektron itme etkileşmesini gösteren V_{ee} potansiyelinden daha büyüktür. Yani bu durumda $V_{SY} >> V_{ee}$'dir. Bunun yanında Z atom numarası küçük olan atomlarda da $V_{ee} >> V_{SY}$'dir. (3.139) bağıntısından görüldüğü gibi, elektronların yörüngesel açısal momentumu ile spin açısal momentumu, toplam açısal momentum oluşturacak biçimde bir çiftlenim içine girer.

Bu çiftlenim, $V_{ee} >> V_{SY}$ durumunda *Russel-Saunders* ya da *LS çiftlenimi* ve $V_{SY} >> V_{ee}$ durumunda da *JJ çiftlenimi* adını alır (Apaydın 2004).

3.3.4. LS (Russel Saunders) çiftlenimi ($V_{ee} >> V_{SY}$ durumu)

LS çiftlenimi, Z atom numarası küçük (genelde Z<40) olan atomlarda geçerli olan bir çiftlenimdir (Apaydın 2004). N elektronlu bir atomun toplam elektronik orbital açısal momentum işlemcisi, bireysel elektronların yörüngesel açısal momentumları kendi aralarında toplanarak

$$\hat{L}' = \hat{L}_1 + \hat{L}_2 + ... + \hat{L}_N = \sum_{i=1}^{N} \hat{L}_i \tag{3.141}$$

bağıntısından elde edilir. Burada $\hat{L}_i$, i. yörüngesel açısal momentum işlemcisidir. Bir atomun toplam elektronik spin açısal momentumu $\hat{S}'$, bireysel elektronların spinlerinin vektör toplamı olarak tanımlanır (Levine 2000). Yani elektronların spin açısal momentumları da kendi aralarında toplanarak

$$\hat{S}' = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 + ... + \hat{S}_N = \sum_{i=1}^{N} \hat{S}_i \tag{3.142}$$

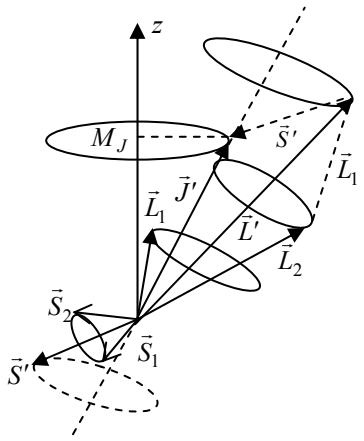
şeklinde verilen toplam spin açısal momentum işlemcisi oluştururlar.

LS çiftleniminin meydana geldiği hafif atomlarda, elektronlar arasındaki elektrostatik itme kuvvetleri, bu atomlardaki spin-yörünge manyetik etkileşmesindeki manyetik kuvvetlerden daha üstündür. Spin-yörünge etkileşmesi ise ağır atomlarda, elektrostatik kuvvetlerinden daha baskın çıkar. Bu da LS çiftleniminin varlığını elektrostatik kuvvetlere, JJ çiftleniminin de spin-yörünge kuvvetlerine borçlu olduğu anlamına gelmektedir. Bu kuvvetler çiftlenimlerin ilk evrelerinde rol oynar (Başar 2000). (3.141) ve (3.142) deki ifadeler, LS çiftleniminin ilk evresini oluştururlar. LS çiftleniminin ikinci evresinde $\hat{L}'$ ve $\hat{S}'$ bileşke açısal

momentum vektörleri arasında, elektrostatik kuvvetlere göre daha küçük olan spin-yörünge manyetik etkileşmesi vardır. Bu etkileşme, $\hat{L}'$ ve $\hat{S}'$ vektörlerinin vektörel olarak birleşmesiyle $\hat{J}'$ toplam açısal momentum vektörünü verir:

$$\hat{J}' = \hat{L}' + \hat{S}' \tag{3.143}$$

$\hat{L}'$ ve $\hat{S}'$ vektörleri, kendi $\hat{J}'$ bileşkeleri etrafında, $\hat{J}'$ vektörü de z ekseni etrafında döner. Ayrıca $\hat{L}$ vektörleri, elektrostatik itmelerden ileri gelen dönme momentleri yüzünden kendi $\hat{L}'$ bileşkeleri etrafında, $\hat{s}$ vektörleri de kendi $\hat{S}'$ bileşkeleri etrafında dönerler. Yani her vektör kendi bileşkesi etrafında, $\hat{J}'$ de z ekseni (varsa bir $\hat{B}$ dış alanı) etrafında döner. Bu vektörlerin büyüklükleri sabit olup kuantlaşmıştır (Başar 2000).



Şekil 3.4 Açısal momentum vektörleri ve bileşkeleri

$\hat{L}'$ açısal momentum işlemcisi ile onun kuantumlanma doğrultusundaki bileşeni olan $\hat{L}'_z$ işlemcisine karşı gelen büyüklükler, sırasıyla $\hat{L}'$ ve $\hat{L}'_z$ ise,

$$L' = \hbar\sqrt{\ell'(\ell'+1)} \tag{3.144}$$

$$L'_z = \hbar m_{\ell'} \tag{3.145}$$

bağıntılarıyla verilir. Burada ℓ' niceliğine atomun yörüngesel hareketine ilişkin toplam yörünge açısal momentum kuantum sayısı adı verilir ve 0,1, 2,… gibi tam sayılarla belirlenir. $m_{\ell'}$ ise atomun toplam manyetik kuantum sayısıdır ve $-\ell'$ den + ℓ' ye kadar $(2\ell'+1)$ tane değer alır. Yani $m_{\ell'} = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ gibi değerlere sahiptir.

Benzer biçimde toplam spin açısal momentum işlemcisi $\hat{S}'$ ile bunun kuantumlanma doğrultusundaki bileşeni S'_z'ye karşı gelen büyüklükler de

$$S' = \hbar\sqrt{s'(s'+1)} \tag{3.146}$$

$$S'_z = \hbar m_{s'} \tag{3.147}$$

bağıntılarıyla verilir. Burada, s' ve $m_{s'}$ sırasıyla, toplam spin kuantum sayısı ile toplam spin manyetik kuantum sayısıdır. s' kuantum sayısı, 0,1/2, 1, 3/2 … gibi tam ve yarı tam sayılar biçimindedir. $m_{s'}$ ise $-s'$ den $+s'$ ye kadar $(2s'+1)$ tane değer alır.

LS çiftleniminde yörüngesel açısal kuantum sayısının $\ell' = 0,1,2,3,...$ gibi değerlerinin her birini, sırasıyla, S,P,D,F,… gibi harflerle göstererek yazılan $^{2s'+1}L$ gösterimine atomun spektroskopik terimi adı verilir. Bu gösterimdeki $(2s'+1)$ niceliğine, spektroskopik terimin *çokluğu* adı verilir. Örneğin, $2s'+1 = 1,2,3,...$ gibi değerler alıyorsa bunlara karşı gelen spektroskopik terimlere, sırasıyla, tekli (singlet), ikili (dublet), üçlü (triplet), … terimler denir.

Atomların spektroskopik terimlerini belirlemek için ℓ' ve s' kuantum sayılarının tüm olası değerlerini bulmak gerekir. Bu değerler, elektronların bireysel yörüngesel açısal momentum kuantum sayıları ℓ_i ve spin açısal momentum kuantum sayıları s_i'lerle ilişkilidir. Bu nedenle bu sayıların olası değerleri bulunurken, elektronların birbirinden ayırt edilemezliği ve Pauli dışarlama ilkesinin getirdiği kısıtlamalar göz önünde tutulmalıdır (Apaydın 2004).

Önce dolu bir alt kabuk için, yani özdeş (aynı n ve ℓ değerlerine sahip) elektronların $(2s+1)(2\ell+1)=2(2\ell+1)$ maksimum sayısını bulunduran bir yerleşim olan dolu alt kabuk için yalnız bir mümkün terim vardır, o da S terimidir. Bu,

$\sum_i m_{\ell_i} = 0$ ($m_{\ell i}$, 0, ±1, ±2,…., $\pm\ell$ gibi bütün mümkün değerler üzerinden alındığı için) ve benzer şekilde $\sum_i m_{s_i} = 0$ olmasının sonucudur. Sonuç olarak dolu bir alt kabuk için $\ell' = 0$ ve $s' = 0$ dır.

Şimdi tam dolmamış alt kabuklara sahip atomları (ya da iyonları) göz önüne alalım. Dolu alt kabuklarda $\ell' = s' = 0$ olduğu için, ℓ' ve s''nün mümkün olan değerlerini elde ederken sadece dolu kabuklar dışındaki elektronları (optiksel aktif elektronları) göz önüne almamız gerekir (Köksal ve Gümüş 1999).

3.3.5. Farklı alt kabuklara ait elektronlar (özdeş olmayan elektronlar)

Bu durumda elektronlar farklı kabuklarda bulunduğundan aynı kuantum sayısı takımına sahip olabilirler ve Pauli dışarılama ilkesi kendiliğinden sağlanır. ℓ' ve s' kuantum sayılarının izin verilen değerleri, bu durumda ℓ' yü oluşturan optiksel aktif elektronların bireysel ℓ_i' yörüngesel açısal momentumlarını ve s' yü oluşturmak için bu elektronların s_i' spin açısal momentumlarını toplayarak elde edilir (Köksal ve Gümüş 1999).

ℓ' ve s' kuantum sayılarının olası değerleri, elektronların ℓ_i, s_i bireysel kuantum sayıları cinsinden

$$\ell' = \left|\ell_1 + \ell_2 + ... + \ell_N\right|_{\min}, \left|\ell_1 + \ell_2 + ... + \ell_N\right|_{\min} + 1, ..., \left|\ell_1 + \ell_2 + ... + \ell_N\right|_{maks.} \qquad (3.148)$$

$$s' = \left|s_1 + s_2 + ... + s_N\right|_{\min}, \left|s_1 + s_2 + ... + s_N\right|_{\min} + 1, ..., \left|s_1 + s_2 + ... + s_N\right|_{maks.} \qquad (3.149)$$

eşitlikleri yardımıyla bulunur. Burada min. ve maks. kısaltmaları sırasıyla, en küçük ve en büyük değerleri göstermek için kullanılmıştır.

Bu duruma örnek olarak, $np^1\, n'p^1$ deki iki elektronu ele alalım. Yerleşime göre, np^1 deki bir elektronun bireysel kuantum sayıları $\ell_1 = 1,\ s_1 = 1/2$ ve $n'p$ deki ikinci elektronunkiler de $\ell_2 = 1,\ s_2 = 1/2$ 'dir. O halde Denk.(3.148)'den $\ell' = 0,1,2$ ve $s' = 0,1$ değerlerini alır. Buna göre $np^1 n'p^1$ durumundaki bir atomun $^{2s'+1}L$

spektroskopik terimlerinin sayısı, $s'=0$ iken $\ell'=0,1,2$ değerlerine karşı gelen üç tane tekli ve $s'=1$ iken yine $\ell'=0,1,2$ değerlerine karşı gelen üç tane üçlü olmak üzere altı tanedir:

$$^1S,\ ^1P,\ ^1D,\ \ ^3S,^3P,^3D \tag{3.150}$$

Eğer verilen yerleşimde ikiden fazla elektron varsa önce iki elektron için yukarıdaki işlem yapılır. Sonra bulunan ℓ' ve s' kuantum sayıları ile 3. elektronun bireysel kuantum sayıları, (3.148)'de ve (3.149)'da kullanılarak yeni ℓ'' ve s'' kuantum sayıları bulunur. Bu işlem elektron sayısı arttıkça yinelenir (Apaydın 2004).

3.3.6 Aynı alt kabuktaki elektronlar durumu

$ns^2, np^2, ns^2n's^2n'p^2$ gibi yerleşimler bu durumlara örnek olarak verilebilir. ns^2 durumu kapalı bir kabuk olduğu için ona yalnızca ^1S gibi bir tek terimin karşılık geldiği bilinmektedir.

Yukarıdaki örneklerden np^2'yi ele alalım. Burada eşdeğer elektron durumları söz konusu olduğundan, böyle durumları incelemek zordur. Pauli dışarlama ilkesi, farklı alt kabuklardaki elektronlar durumundaki gibi kendiliğinden sağlanmaz. Elektronlar birbirinden ayırt edilemez parçacıklar oldukları için, iki elektronun kendi aralarında yer değiştirmeleri, atomun yeni bir kuantum durumuna karşı geliyormuş gibi görünürse de bu yeni bir kuantum durumu değildir.

np^2 durumundaki iki elektronun bireysel kuantum sayıları $\ell_1=1,\ \ s_1=1/2$ ve $\ell_2=1,\ \ s_2=1/2$'dir. $n,\ell',m_{\ell'}$ kuantum sayıları farklı olmak koşuluyla, s''nün 0, 1 gibi olası değerler alacağı kolayca görülür. Burada sorun, ℓ''nün olası değerlerini elde ederken iki elektronun kendi aralarında yer değiştirmesine karşı gelen durumun sayılmamasını garanti altına almaktır. Bunun için s' spin kuantum sayısının olası her değeri için atomun $m_{\ell'}$ magnetik kuantum sayısı, elektronların bireysel m_{ℓ_1}, m_{ℓ_2} kuantum sayılarının eşlendirilmesinden bulunur. Daha sonra da ℓ' elde edilir. Bu

örnekte, $\ell_1 = 1$; $m_{\ell_1} = 0, \pm 1$, $\ell_2 = 1$; $m_{\ell_2} = 0, \pm 1$ olduğundan $s' = 0, 1$ değerleri için m_{ℓ_1}, m_{ℓ_2} nin eşlendirilmesi, Çizelge 3.1'de verildiği gibi yapılır.

Çizelge 3.1. $s' = 0, 1$ değerleri için m_{ℓ_1}, m_{ℓ_2} nin eşlendirilmesi

	$m\ell_1$ (elektron)	$m\ell_2$ (elektron)	$m\ell'$ (atom)	ℓ'
$s' = 1$	1	0	1	
	1	-1	0	1
	-1	0	-1	
$s' = 0$	1	1	2	
	1	0	1	
	1	-1	0	2
	0	-1	-1	
	-1	-1	-2	
	0	0	0	0

Bu eşlendirmeden sonra yapılacak iş ℓ' yü bulmaktır. $s' = 1$ için $m_{\ell'}$ nün $0, \pm 1$ değerleri olduğundan $\ell' = 1$'dir. Yine $s' = 0$ için, $m_{\ell'} = 0, \pm 1, \mp 2$ değer aldığından $\ell' = 2$ ve aynı s' değeri için $m_{\ell'} = 0$ olduğundan $\ell' = 0$'dır. Görülüyor ki, np^2 durumundaki bir atomda yörüngesel açısal kuantum sayısının olası değerleri $s' = 0$ için $\ell' = 0, 2$ ve $s' = 1$ için de $\ell' = 1$'dir. Böylece np^2 durumundaki bir atomun spektroskopik terimleri,

$$s' = 0,\ \ell' = 0, 2 \text{ için } {}^1S,\ {}^1D$$

$$s' = 1,\ \ell' = 1 \text{ için } {}^3P \qquad (3.151)$$

dür. Yani bu atomda, tekli ${}^1S$, tekli ${}^1D$ ve üçlü ${}^3P$ olmak üzere üç ayrı terim vardır.

3.3.7. LS çiftleniminde ince yapı yarılması

Toplam açısal momentum işlemcileri, $\hat{L}'$ ve $\hat{S}'$ işlemcileri gibi kuantum kuramının tüm özelliklerini taşır. Başka bir ifadeyle toplam açısal momentum işlemcisi iki yeni kuantum sayısı tanımlar. Bu kuantum sayılarından biri, j' ile gösterilen toplam açısal momentum kuantum sayısıdır ve

$$J' = \hbar\sqrt{j'(j'+1)} \tag{3.152}$$

bağıntısı ile toplam açısal momentumun büyüklüğünü belirler. Toplam açısal momentum kuantum sayısı, s' ve ℓ' kuantum sayılarına bağlı olarak,

$$j' = |\ell' - s'|,\ |\ell' - s'| + 1, \ldots,\ \ell' + s' \tag{3.153}$$

değerlerini alır. İkinci kuantum sayısı ise toplam açısal momentumun z doğrultusunda kuantumlandığını gösterir. Bu doğrultudaki bileşen J_z' ise,

$$J_z' = \hbar m_{j'} \tag{3.154}$$

ile verilir. $m_{j'}$ ye toplam manyetik kuantum sayısı adı verilir ve $-j'$ den $+j'$ ye kadar $(2j'+1)$ tane değer alır.

Spin-yörünge etkileşmesinin beklenen değeri, j' toplam kuantum sayısına da bağlı olduğu için atomun spektroskopik terimleri ${}^{2s'+1}L_{j'}$ biçiminde gösterilir. Örneğin $s'=1$ ve $\ell'=1$ olan bir atomda spektroskopik terimin ${}^3P$ olduğu bilinmektedir. Bu atomda, toplam açısal momentum (3.153)'den $j'=0, 1, 2$ gibi üç değer alacağı için ${}^3P_0$, ${}^3P_1$, ${}^3P_2$ gibi üç spektroskopik terim oluşur yani bu atomda ${}^3P$ teriminin enerji düzeyi, spin-yörünge etkileşmesinden dolayı üçe yarılır.

Şimdi ince yapı yarılmalarını, farklı alt kabuklardaki elektronlar durumunda incelediğimiz örneklerde ele alalım. Oradaki ilk örnekte, spektroskopik terimleri (3.150)'de verilen, $np^1\,n'p^1$ yerleşiminde iki elektronu olan bir atomda, $\ell'=0, 1, 2$ ve $s'=0, 1$ olası değerleri almıştı. Bu değerler, (3.153)'de kullanılırsa toplam açısal

momentum kuantum sayısı için $j' = 0, 0, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 3$ değerleri bulunur. Buna göre (3.150)'deki terimler

$$^1S \rightarrow {}^1S_0$$

$$^1P \rightarrow {}^1P_1$$

$$^1D \rightarrow {}^1D_2$$

$$^3S \rightarrow {}^3S_1$$

$$^3P \rightarrow {}^3P_0 \ , \ {}^3P_1 \ , \ {}^3P_2$$

$$^3D \rightarrow {}^3D_1 \ , \ {}^3D_2 \ , \ {}^3D_3 \qquad (3.155)$$

biçimini alırlar. Görüldüğü gibi, spin-yörünge etkileşmesi $^1S, ^1P, ^1D$ ve ^3S terimlerine etki etmezken, ^3P ve ^3D terimlerinin yarılmasına neden olmuştur.

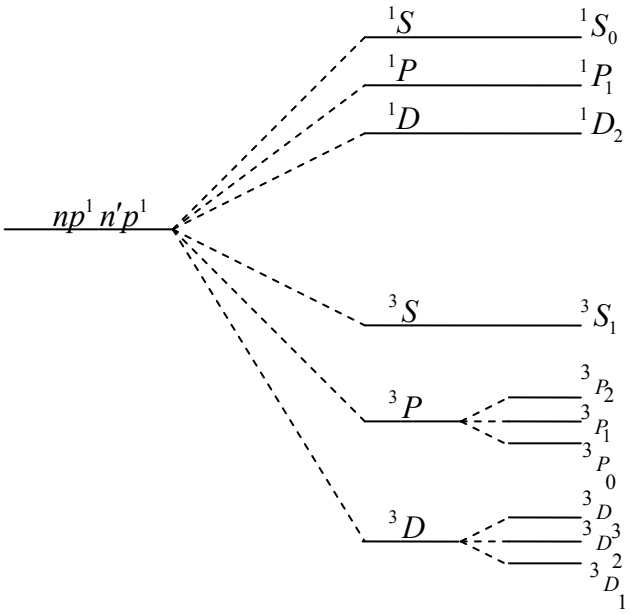
Bu terimlere karşı gelen enerji değerlerinin sıralanışı Hund kuralları adını alan üç ayrı kural göz önünde tutularak gerçekleşir.

1. Kural : s' spin kuantum sayısı en büyük olan terimin enerji değeri en küçüktür (daha çok negatiftir). s' sayısı azaldıkça enerji artar (daha az negatif olur).

2. Kural : s' spin kuantum sayısının en büyük olduğu terimler arasında ℓ' kuantum sayısı en büyük olanın enerji değeri en düşüktür (en çok negatiftir).

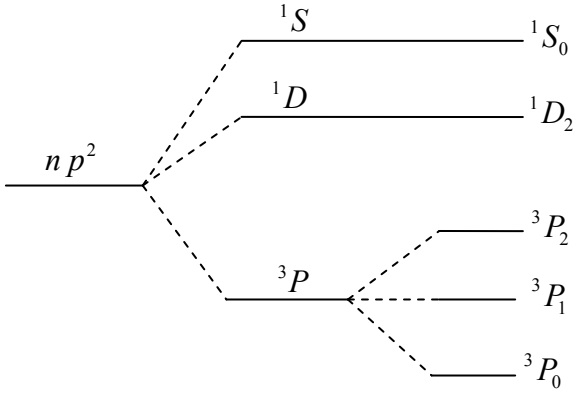
3. Kural : s' spin kuantum sayısı ve ℓ' kuantum sayısı için, elektron alt kabuğu yarıdan az dolu ise j' toplam kuantum sayısı en düşük seviyenin enerjisi en düşük, alt kabuk yarıdan fazla dolu ise j' değeri en büyük olan seviyenin enerjisi en düşüktür.

Bu kurallara göre yukarıda incelenen $np^1 n'p^1$ yerleşimindeki iki elektronlu atomun enerji düzeyleri Şekil 3.5'de gösterilmiştir.



Şekil 3.5 $np^1\, n'p^1$ yerleşiminde iki elektron bulunan bir atomda terimlerin sıralanışı

İkinci örnek olarak aynı alt kabuktaki elektronlar durumunda incelediğimiz np^2 yerleşimindeki iki elektronlu atomu ele alalım. Denk. (3.151)'de verilen değerlere göre $s'=0$ için $j'=0,\,2$ ve $s'=1$ için de $j'=0,\,1,\,2$ gibi değerler alır. Buna göre spin-yörünge etkileşmesi yalnızca ^3P teriminde ince yapı yarılmasına neden olur. Bu terimler, $^1S_0$, $^1D_2$, $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$ biçimindedir ve Hund kurallarına göre sıralanışları Şekil 3.6'daki gibidir.



Şekil 3.6 np^2 yerleşiminde iki elektronu bulunan bir atomun terimlerinin sıralanışı

3.3.8. JJ çiftlenimi ($V_{SY} >> V_{ee}$ durumu)

Deneysel verilerin analizi, LS çiftleniminin uygulanabilirlik aralığının sınırlı olduğunu gösterir. Pek çok atomda elektron konfigürasyonları LS çiftlenimi ile tanımlanamaz (Sobelman 1996). Z atom numarası büyük olan ağır atomlar ya da Z atom numarası büyük olan atomların oluşturduğu iyonlarda JJ çiftlenimi ortaya çıkar (Okur 2000). Spin yörünge etkileşimi, hafif atomlardaki gibi elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşim ile karşılaştırıldığında zayıf değilse, JJ çiftlenimi kullanılır (Agaker 2006).

Düşük ve orta Z atom numaralı elementler için elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşim, baskındır. JJ çiftlenimi, yüksek atom sayılı elementler için ve

$$[(\ell_1 s_1) j_1 , (\ell_2 s_2) j_2] J \tag{3.156}$$

ifadesi ile tanımlanır (Cowan ve Andrew 1965).

Bu tip bir çiftlenimde J kuantum sayısı, genelleştirilmiş bir kuantum mekaniksel vektör modelinden açığa çıkar. Bir L bileşke yörünge açısal momentumu tanımlı değildir. Böylece burada S, P, D vs. gibi terim sembolü yoktur. j bireysel elektronların açısal momentum sayılarını göstermek üzere (j_1, j_2) vs. gibi terim notasyonları kullanılmalıdır (Okur 2000).

JJ çiftleniminde, tek bir elektron için $(\ell_i s_i)$ spin yörünge etkileşimi, farklı elektronlar arasındaki (ℓ_i, ℓ_j) ve (s_i, s_j) etkileşmeleriyle karşılaştırıldığında büyüktür. Bu çiftlenimde bireysel elektronların açısal momentumları

$$j_1 = \ell_1 + s_1 \qquad\qquad j_2 = \ell_2 + s_2 \tag{3.157}$$

ifadelerine göre çiftlenip, bu bireysel toplamlar j toplam açısal momentumunu verirler. Bunlar daha sonra atomun J toplam açısal momentumunu verecek şekilde vektörel olarak bir araya gelirler. Burada toplam açısal momentum,

$$J = \sum j_i \tag{3.158}$$

$$|J| = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar \tag{3.159}$$

olarak ifade edilir. Optik geçişler için seçim kuralı ΔJ=0, ±1 dir ve J=0'dan J=0'a geçiş yasaktır (Okur 2000). Spin yörünge etkileşmesi, merkezcil alan modelinden elde edilen $E_{n\ell}$ enerji düzeyine i. elektronun j_i toplam açısal kuantum sayısına bağlı $E_{n_i \ell_i j_i}$ gibi bir katkı getirir ve toplam enerji, tüm elektronların $E_{n_i \ell_i j_i}$ enerjilerinin toplamından oluşur:

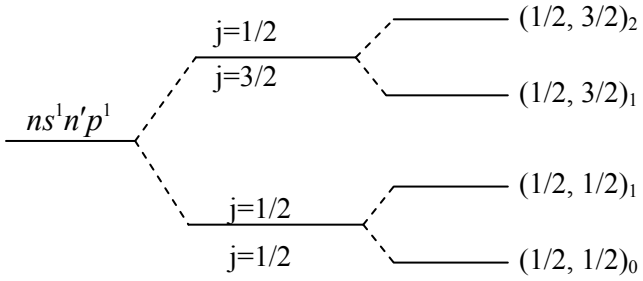
$$E = \sum_{i=1}^{N} E_{n_i \ell_i j_i} \tag{3.160}$$

JJ çiftleniminde spektral terimleri belirlemek için her elektronun n_i, ℓ_i, j_i bireysel kuantum sayıları ile j toplam açısal kuantum sayısının belirlenmesi gerekir.

Örneğin $ns^1 n'p^1$ yerleşiminde iki elektronu olan bir atom ele alalım. s'deki bir elektron için $\ell_1 = 0$, $s_1 = 1/2$ olduğundan $j_1 = 1/2$ 'dir. p'deki bir elektron için $\ell_2 = 1$, $s_2 = 1/2$ olduğundan $j_2 = 1/2$, 3/2 gibi iki ayrı değer alır. Bireysel j_i kuantum sayısının bu değerlerine göre $ns^1 n'p^1$ yerleşimine karşı gelen toplam açısal kuantum sayısı, $j_1 = 1/2, j_2 = 1/2$ için $j = 0,1$ ve $j_1 = 1/2,\ j_2 = 3/2$ için de *j=1, 2* gibi değerler alır. Buna göre $ns^1 n'p^1$ yerleşimine karşı gelen terimler, (j_1, j_2) gibi bir gösterimde,

$$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)_0, \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)_1, \left(\frac{1}{2},\frac{3}{2}\right)_1, \left(\frac{1}{2},\frac{3}{2}\right)_2 \tag{3.161}$$

dir. Buna göre, $ns^1 n'p^1$ yerleşimindeki bir atomun $V_{SY} >> V_{ee}$ olduğu durumdaki enerji düzeyleri Şekil 3.7'deki gibi olur.



Şekil 3.7 $ns^1n'p^1$ yerleşimindeki bir atomda JJ çiftlenimine göre oluşan yarılmalar

Elektronların bireysel $E_{n_i\ell_i j_i}$ enerjileri ile atomun toplam enerji değeri, sırasıyla, bireysel m_{ji} manyetik kuantum ve m_j toplam manyetik kuantum sayılarına bağlı olmadığı için Şekil 3.7'deki enerji düzeyleri m_j'ye göre (2j+1) kez çakışıktır. Bu çakışıklık, LS çiftleniminde olduğu gibi, atom üzerine bir dış manyetik alan uygulanarak kaldırabilir (Apaydın 2004).

3.3.9. Diğer çiftlenim türleri

Verilen bir atom veya iyon için çiftlenim şartları genellikle bir konfigürasyondan diğerine değişir. Örneğin $n_1 l_1^2$ konfigürasyonundaki elektronlar LS çiftlenimine çok yakın olabilir, fakat $n_1 l_1\ n_2 l_2\ (n_2 \to \infty)$ uyarılmış konfigürasyonlarının Rydberg serilerinde iki elektron arasındaki Coulomb etkileşimi n_2'nin artışı ile sıfıra doğru gider. Aynı noktada bu etkileşim $n_1 l_1$ elektronun spin-orbit etkileşiminden daha zayıf olmalıdır. Bu durumda çiftlenim koşulları $j_1 j_2$ veya $j_1 K$ veya benzer çiftlenime doğru gitme eğilimindedir (Cowan 1981).

Dış elektron daha yüksek uyarıldığında ve özellikle ℓ'nin büyük değerlerine sahip olduğunda, elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşim ve spin-orbit etkileşimi aynı büyüklüğe sahip olduğunda, LS ve JJ çiftlenimleri genellikle iyi yaklaşımlar değildir, bu çiftlenim yaklaşımları uygulanamaz (Sobelman 1996).

Bazı durumlarda hemen hemen doldurulmuş kabuğun dışında dış valans elektron veya uyarılmış elektron, kor elektronları ile karşılaştırıldığında farklı etkileşim durumları ortaya çıkar. Bu durumda ara çiftlenim (JK ve LK çiftlenimi) olarak adlandırılan çiftlenimler kullanılır. Ara çiftlenim temel olarak, uyarılmış elektron büyük açısal momentuma sahip olduğunda uygulanır, elektron bu durumda kor içine girmez (nüfuz etmez) (Agaker 2006).

Ara çiftlenimin en yaygın tipi, JK çiftlenimidir. Aynı zamanda literatürde *jl* (*veya Jl*) çiftlenimi olarak da bilinmektedir. Racah, bu çiftlenim türünü

$$[((\ell_1 s_1) j_1, \ell_2) K, s_2] J \tag{3.162}$$

şeklinde tanımlamıştır (Racah 1942). Optik elektron (dış elektron) yüksek uyarıldığında, içteki elektronla onun etkileşimi öyle küçüktür ki iç elektronun spin-orbit etkileşimi $(\ell_1 s_1)$, baskın olur. Aynı zamanda optik elektronun $(\ell_2 s_2)$ spin orbit etkileşimi öyle zayıftır ki elektrostatik etkileşim $(\ell_1 \ell_2)$, ikinci önemli etkileşmedir (Cowan ve Andrew 1965).

İç elektronların spini ile yörüngesel açısal momentumu, atomik korun toplam açısal momentumu j_1'i oluşturmak üzere çiftlenirler:

$$j_1 = l_1 + s_1 \tag{3.163}$$

Daha sonra daha dış elektronların açısal momentumu ℓ_2 , atomik korun toplam açısal momentumuyla çiftlenir. Bunun sonucu olarak yeni bir kuantum sayısı *K* ortaya çıkar:

$$K = j_1 + \ell_2,\ j_1 + \ell_2 - 1, \ldots\ldots\ldots |j_1 - \ell_2| \tag{3.164}$$

Sistemin toplam açısal momentumu, *K* kuantum sayısı ile dış elektronun spini çiftlenerek belirlenir:

$$J = K \pm s_2 \tag{3.165}$$

Bu çiftlenimde terim sembolü $j_1[K]_J$ ile verilir.

Ara çiftlenimin literatürde oldukça az kullanılan diğer şekli LK (Ls veya LS_c) çiftlenimidir. Bu çiftlenim de

$$[((\ell_1 \ell_2) L, s_1) K, s_2] J \tag{3.166}$$

ifadesi ile tanımlanır. Bu çiftlenimde, korun yörüngesel açısal momentumu ℓ_1, toplam yörüngesel açısal momentum L'yi elde etmek için dış elektron ya da elektronların yörüngesel açısal momentumu ℓ_2 ile çiftlenir. Sonra toplam yörüngesel açısal momentum L ile kor (iç) elektronun spini s_1 çiftlenerek K kuantum sayısı elde edilir. Daha sonra K ile s_2 dış elektronun spini çiftlenerek toplam açısal momentum J elde edilir. Yani,

$$\begin{aligned} L &= \ell_1 + \ell_2, \ell_1 + \ell_2 - 1, ..., |\ell_1 - \ell_2| \\ K &= L \pm s_1 \\ J &= K \pm s_2 \end{aligned} \tag{3.167}$$

bağıntıları yazılabilir. LK çiftleniminde terim sembolü $L[K]_J$ şeklinde verilir (Agaker 2006, Cowan 1981).

Aslında Denk.(3.162) ve (3.166),

$$[(l_1 l_2 s_1) K, s_2] J \tag{3.168}$$

şeklinde verilen daha genel çiftlenimin özel durumlarıdır. Burada K bir kuantum sayısı olmakla birlikte s_2'nin K ile çiftlenimi zayıftır. Böyle bir durum, $(\ell_2 s_2)$ ve $(s_1 s_2)$ etkileşmeleri $(\ell_1 \ell_2)$ ve $(\ell_1 s_1)$ ile karşılaştırıldığında küçük olduğunda mevcuttur (Cowan ve Andrew 1965).

3.3.10. Parite

Dalga fonksiyonlarının sınıflandırılması açısal momentum özelliklerinin yanı sıra parite ile de tanımlanabilir (Cowan 1981). Parite, bir fonksiyonun orijine göre

simetri özelliklerini belirler (Aygün ve Zengin 1998). Bir parçacığın açısal momentumunun farklı değerlerine karşılık gelen

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3.169}$$

ile verilen dalga fonksiyonları, $(x \to -x,\ y \to -y,\ z \to -z)$ ters dönüşüm altında farklı davranış sergiler (Sobelman 1996). Parite işlemi, uzayın bir (x, y, z) noktasından, merkeze göre simetriği olan $(-x,-y,-z)$ noktasına gidildiğinde fonksiyonun işaret değişimini gösterir. Yani merkeze göre yansıtma işlemine parite işlemi denir (Aygün ve Zengin 1998). Küresel koordinatlar için bu dönüşüm

$$r \to r,\quad \theta \to \pi - \theta,\quad \varphi \to \varphi + \pi \tag{3.170}$$

şeklindedir. R_{El} fonksiyonları böyle bir dönüşümde değişmez. Bu sebeple parite işlemi küresel harmonikler tarafından belirlenir. Dolayısıyla

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) \propto P_l^m(Cos\,\theta)\exp(im\varphi) \tag{3.171}$$

fonksiyonlarının nasıl davranış gösterdiğine bakılmalıdır. $\varphi,\ \varphi+\pi$ ile yer değiştirdiğinde $\exp(im\varphi)$ faktörü $(-1)^m$ ile çarpılır. $\theta,\ \pi-\theta$ ile yer değiştirdiğinde ise

$$Cos(\pi-\theta) = -Cos\,\theta,\quad Sin(\pi-\theta) = Sin\,\theta,\quad P_l^m(Cos(\pi-\theta)) = P_l^m(Cos\,\theta)(-1)^{l-m} \tag{3.172}$$

ifadeleri elde edilir. Sonuç olarak

$$Y_{lm}(\pi-\theta,\varphi+\pi) = Y_{lm}(\theta,\varphi)(-1)^l \tag{3.173}$$

ifadesi yazılabilir. Dolayısıyla l 'nin çift değerli durumlarına uyan ψ_{Elm} fonksiyonları işaret değiştirmez. Böyle durumlar ve aynı zamanda fonksiyonlar *çift* olarak adlandırılır. Tek değerli l için ψ_{Elm} fonksiyonlarının ters dönüşüm ile işareti değişir. Böyle bir durum *tek* olarak adlandırılır. Bir durumun paritesi tam olarak l 'nin değerleri ile belirlenir, E'ye ve m'ye bağlı değildir.

Dönüşüm operasyonu, merkezcil simetrik bir alanda bir parçacığın $H = p^2/2m + U(r)$ Hamiltoniyenini değişmez bırakır. Bu, bir kararlı durumun dalga fonksiyonunun paritesinin korunumlu olduğu anlamına gelir. Dolayısıyla merkezcil simetrik bir alanda bir parçacığın her bir durumu kesin pariteli olarak karakterize edilir.

Çok elektronlu sistemlerde parite, l_i kuantum sayılarının toplamı ile belirlenir (Sobelman 1996). Yani pariteyi belirlemek için

$$P = (-1)^{\sum_i l_i} \tag{3.174}$$

bağıntısı kullanılır. Buradaki toplam işlemi i'nin tüm N değerleri üzerinden yapılır. Açısal momentum kuantum sayılarının toplamının tek veya çift olmasına göre parite, tek veya çifttir. Çiftlenmiş dalga fonksiyonlarının paritesi, açısal momentumların çiftleniminde l_i ve s_i'nin sabit değerleri için manyetik kuantum sayıları üzerinden toplamlar içerdiğinden aynı ifadeyle verilmektedir (Cowan 1981).

Pariteye göre durumların sınıflandırılması, ışımalı geçişler için seçim kuralları oluşturulmasında önemlidir. Dolayısıyla $\Delta l = \pm 1$ seçim kuralı, aynı pariteli durumlar arasındaki elektrik dipol geçişleri yasaklayan genel bir kuralın özel durumudur (Sobelman 1996).

3.3.11. Elektrik dipol seçim kuralları

Foton alanı bir A(r,t) vektör potansiyeli ile tanımlanabilir ve nötr atomlar için N=Z ve iyon için N≠Z olmak üzere ışınım alanı ile konum vektörleri r_j olan atomik elektronların belli bir sayısı (1,2,….,N) arasındaki etkileşme enerjisi

$$-\sum_{j=1}^{N} \frac{i\hbar e}{m} A(r_j,t).\nabla_j = \sum_{j=1}^{N} \frac{e}{m} A(r_j,t)\, p_j \tag{3.175}$$

dir. İzinli geçişler söz konusu olduğundan daha yüksek mertebeden olan süreçler

ihmal edilebilir, bu nedenle sadece bir tek fotonun yayıldığı veya soğrulduğu geçişler göz önüne alınmıştır. Elektrik dipol yaklaşıklığı yapılarak, geçiş olasılığının her elektrondan gelen katkıların toplamı olarak ifade edilebilen M_{ba} matris elemanlarına bağlı olduğu bulunur. M_{ba} ise $(r_j)_{ba}$ ilgilenilen iki atomik durum arasındaki r_j konum vektörünün matris elemanları olmak üzere,

$$M_{ba} = -\sum_{j=1}^{N} \frac{m\omega_{ba}}{\hbar} \hat{\varepsilon}.\left(r_j\right)_{ba} \tag{3.176}$$

ile verilir.

Her bir atomik durum, $J = \sum_{j=1}^{N} J_j$ toplam açısal momentum işlemcisi J ve M_j kuantum sayıları olmak üzere, J^2 ve J_z nin öz durumudur. Bu aynı zamanda parite işlemcisi P'nin de öz durumudur, fakat toplam yörüngesel açısal momentumun veya toplam spin açısal momentumun öz durumu olması gerekmez. Durumlar bundan başka (açısal momentum olmayan) bir γ gösterimi ile belirlenebilir. a ve b durumlarının kuantum sayıları,

$$a \rightarrow (\gamma, J, M_J) \tag{3.177}$$

$$b \rightarrow (\gamma', J', M'_J) \tag{3.178}$$

ve M_{ba} ise,

$$M_{ba} = -\sum_{j=1}^{N} \frac{m\omega_{ba}}{\hbar} \hat{\varepsilon}.\langle \gamma', J', M'_J | r_j | \gamma, J, M_J \rangle \tag{3.179}$$

olarak yazılabilir. Atom (iyon) daki elektronlar ayırtedilebilir olmadığı için,

$$M_{ba} = -N \frac{m\omega_{ba}}{\hbar} \hat{\varepsilon}.\langle \gamma', J', M'_J | r_1 | \gamma, J, M_J \rangle \tag{3.180}$$

olduğunu belirtebiliriz. Bu durumda atomun toplam dipol moment işlemcisi,

$$D = -\sum_{j=1}^{N} e\, r_j \tag{3.181}$$

şeklinde ifade edilebilir. Yani

$$M_{ba} = \frac{m\omega_{ba}}{\hbar e}\hat{\varepsilon}.\langle \gamma', J', M'_J | D | \gamma, J, M_J \rangle \tag{3.182}$$

olur. $\hat{\varepsilon}$ kutuplanma vektörünün küresel bileşenleri ε_q olmak üzere $\hat{\varepsilon}.D$ skaler çarpımı, küresel bileşenler cinsinden

$$\hat{\varepsilon}.D = \sum_{q=0,\pm 1} \varepsilon_q{}^* D_q \tag{3.183}$$

şeklinde ifade edilebilir.

Clebsch-Gordan katsayıları, Denk.(3.78) ile tanımlandığı gibi $\langle J1M_J q | J'M'_J \rangle$ ifadesi ile de tanımlanabilir. Wigner Eckart teoremi, J^2 ve J_z nin durumlarına göre bir vektör işlemcisinin matris elemanlarının sadece M_J, M'_J ve $\langle J1M_J q | J'M'_J \rangle$ Clebsch-Gordan katsayıları aracılığıyla q ya bağlı olduğunu ifade eder. Buna göre, $\langle \gamma' J' \| D \| \gamma J \rangle$ indirgenmiş matris elemanı q, M_J ve M'_J' den bağımsız olmak üzere

$$\langle \gamma', J', M'_J | D_q | \gamma, J, M_J \rangle = \frac{1}{\sqrt{2J'+1}} \langle J1M_J q | J'M'_J \rangle \langle \gamma' J' \| D \| \gamma J \rangle \tag{3.184}$$

yazılabilir. Clebsch-Gordan katsayıları $\langle J1M_J q | J'M'_J \rangle$

(a) $M_J + q = M'_J$ (3.185)

(b) $|J-1| \le J' \le |J+1|$ (3.186)

(c) $J + J' \ge 1$ (3.187)

koşulları sağlanmadıkça sıfırdır. Bu durumda elektrik dipol geçişleri için seçim kuralları

$$\Delta M_J = 0, \pm 1 \tag{3.188a}$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \tag{3.188b}$$

dir, fakat

$$J = 0 \longleftrightarrow J' = 0 \tag{3.188c}$$

izinsizdir.

Parite işlemcisi altında, D işaret değiştirdiğinden ve atomik durumlar paritenin özdurumları olduğundan a ve b durumları zıt pariteye sahip olmadığı müddetçe elektrik dipol matris elemanlarının sıfır olduğu görülür. Bu Laporte kuralı olarak bilinir.

Elektrik ya da manyetik çok kutup geçişleri için tüm matris elemanları, $\langle J\lambda M_J q | J'M'_J \rangle$ Clebsch-Gordan katsayılarıyla orantılıdır. Burada dipol geçişler için λ=1, kuadrapol geçişler için λ=2 v.b. dir. Elektrik çok kutup geçişlerinde λ'nın çift değerleri için parite değişmez, tek değerleri için parite değişir. Manyetik çok kutup geçişleri için λ çift olduğunda parite değişir, tek olduğunda değişmez. Bu parite kuralı Clebsch-Gordan katsayılarının özellikleri ile birleştirilerek herhangi çok kutup için seçim kuralları elde edilebilir.

Spin-yörünge etkileşmesi zayıf olduğu zaman, toplam yörüngesel açısal momentum ve toplam spin açısal momentumun her ikisinin de korunduğu durumda LS çiftlenimi yaklaşıklığı doğrudur. D işlemcisi spinden bağımsız olduğundan

$$\langle J', L', S', M'_J | D | J, L, S, M_J \rangle = \delta_{ss'} \langle J', L', S', M'_J | D | J, L, S, M_J \rangle \tag{3.189}$$

dir. Elektrik dipol geçişleri için Denk.(3.188)'deki ifadelere ek seçim kuralları

$$\Delta L = 0, \pm 1 \qquad (L = 0 \longleftrightarrow L' = 0 \ izinsiz) \tag{3.190}$$

$$\Delta S = 0 \tag{3.191}$$

dir (Köksal ve Gümüş, 1999).

3.4. Işıma Teorisi

Klasik elektrodinamikten bilindiği gibi ivmeli hareket eden serbest elektrik yükler sistemi, sürekli olarak enerji yayınlar. Bu, sistemin birim zamanda bütün yönlerde yayınladığı enerji aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\varepsilon_{\nu} = \frac{2}{3c^3}\left|\frac{d^2D}{dt^2}\right|^2 + \frac{2}{3c^3}\left|\frac{d^2\vec{\mu}}{dt^2}\right|^2 + \frac{1}{180c^5}\left|\frac{d^3Q_{\alpha\beta}}{dt^3}\right|^2 \tag{3.192}$$

Burada D sistemin elektrik dipol momenti, $\vec{\mu}$ manyetik momenti ve $Q_{\alpha\beta}$ kuadrapol momenti tensörüdür.

Denk. (3.192)'den görüldüğü gibi sistemin yayınladığı enerji birbirine bağlı olmayan üç terimden ibarettir. Birinci terim sıfırıncı yaklaşıma karşılık gelir ve dipol yayınlamayı gösterir, ikinci ve üçüncü terimler birinci yaklaşıma karşılık gelir ve sırasıyla manyetik dipol ve elektrik kuadrapol yayınlamayı gösterirler. Manyetik dipol ve elektrik kuadrapol yayınlamaları dipol yayınlamasından kat kat zayıftır. Bu durumda, manyetik dipol ve elektrik kuadrapol yayınlamaları yalnız dipol yayınlamasının yasaklanmış olduğu hallerde dikkate alınır.

3.4.1. Dipol yayınlaması

Dipol yayınlaması sistemin elektrik dipol momentinin zamana göre değişimi ile ilgilidir. Negatif yüklü elektronların, durgun olan ve kütlesi elektronun kütlesinden çok büyük olan pozitif yüklü çekirdeğin etrafında kapalı yörüngeler üzerinde hareket ettiklerini varsayalım. Böyle bir sisteme lineer harmonik osilatör gibi bakılabilir. Bu osilatörün birim zamanda yayınladığı enerji için Denk.(3.192)'den

$$\varepsilon_{\nu}(D) = \frac{2}{3c^3}\left|\frac{d^2D}{dt^2}\right|^2 \tag{3.193}$$

olarak yazılabilir.

Bir proton ve bir elektrondan ibaret olan sistemin elektrik dipol momenti

$$\vec{D} = -e.\vec{r} \tag{3.194}$$

şeklinde verilir. Burada r, elektronla çekirdek arasındaki mesafedir. Denk. (3.194)'ü, Denk. (3.193)'de yerine koyarsak

$$\varepsilon_\nu(D) = \frac{2}{3}\frac{e}{c^3}\left|\frac{d^2r}{dt^2}\right|^2 \tag{3.195}$$

elde edilir. Burada d^2r/dt^2 elektronun ivmesidir. Elektronun lineer harmonik salınımının

$$r = a\cos\omega t \tag{3.196}$$

kanunuyla verildiğini varsayalım. Burada a, salınımın genliği, ω salınımın açısal frekansıdır. (3.194) ve (3.196) denklemlerinden bir proton ve bir elektrondan ibaret olan sistemin elektrik dipol momenti için aşağıdaki ifadeyi elde ederiz:

$$D = e.a\cos\omega t = D_o\cos\omega t \tag{3.197}$$

Burada,

$$D_o = e.a \tag{3.198}$$

olup, elektrik dipol momentinin genlik değeridir. Denk. (3.197)'den

$$\left|\frac{d^2D}{dt^2}\right| = D_o\,\omega^2\cos\omega t \tag{3.199}$$

yazılabilir. Denk. (3.199)'u, Denk. (3.193)'de yerine koyarak bir osilatörün birim zamanda yayınladığı enerji için

$$\varepsilon_\nu(D) = \frac{1}{3c^3}\omega^4|D_o|^2 \tag{3.200}$$

ifadesi elde edilir. Pratikte bizi osilatörün herhangi bir anda yayınladığı değil, ortalama enerjisi ilgilendirir. Bu sebeple Denk.(3.200)'de $\cos^2\omega t$ nin ortalama

değeri yazılmalıdır. Dolayısıyla Denk.(3.200)'de $\langle \cos^2 \omega t \rangle = 1/2$ ve $\omega = 2\pi\nu$ olduğu dikkate alınarak bir osilatörün yayınladığı enerjinin ortalama değeri için

$$\varepsilon_\nu(D) = \frac{16\pi^4\nu^4}{3c^3}|D_o|^2 \tag{3.201}$$

formülü elde edilir.

Kuantum mekaniğinde klasik dipol momentinin genlik değeri D_o'a karşılık gelen ayrık $k \to i$ geçişinin dipol momenti D_{ki} kullanılır ve

$$D_o = 2\,D_{ki} \tag{3.202}$$

dir. Buna göre birim zamanda $k \to i$ geçişine karşılık gelen ν_{ki} frekansında bir osilatörün ortalama yayınlama enerjisi

$$\varepsilon_\nu(D_{ki}) = \frac{64\pi^4}{3c^3}\nu_{ki}^4|D_{ki}|^2 \tag{3.203}$$

olur. Eğer Denk.(3.198)'i, Denk. (3.201)'de yerine koyarsak

$$\varepsilon_\nu(D) = \frac{16\pi^4 e^2}{3c^3}a^2\nu^4 \tag{3.204}$$

elde edilir. Birim hacimde ν frekansında enerji yayınlayan osilatörlerin sayısı N_ν ise, dipol yayınlaması için birim hacmin yayınlama gücü

$$\varepsilon_\nu(D) = \frac{16\pi^4 e^2}{3c^3}a^2\nu^4 N_\nu \tag{3.205}$$

ile verilir. Böylece dipol yayınlaması için birim hacmin yayınlama gücünün, osilatörlerin salınım genliklerinin karesi, frekansın dördüncü kuvveti ve birim hacimdeki osilatörlerin sayısı ile doğru orantılı olduğu görülür.

Eğer Denk. (3.201), ν frekanslı fotonların ortalama enerjisine bölünürse, bir osilatörün dipol yayınlaması sonucunda birim zamanda yayınlanan fotonların sayısı, yani;

$$\frac{\varepsilon_\nu(D)}{h\nu} = \frac{16\pi^4}{3hc^3}\nu^3\left|D_o\right|^2 \tag{3.206}$$

ifadesi elde edilir (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995).

3.4.2. Geçiş olasılığı

E_j enerjili uyarılmış durumda bulunan bir atom, genelde

$$\sigma_{ji} = 1/\lambda_{ji} = (E_j - E_i)/hc \tag{3.207}$$

dalga sayılı bir spektrum çizgisine uyan

$$h\nu = E_j - E_i \tag{3.208}$$

enerjili bir foton salınımı ile E_i düşük enerjili bir duruma kendiliğinden ışımalı bir geçiş yapabilir.

j durumundaki bir atomun i durumuna böyle bir geçiş yapmasının birim zaman başına olasılığı a_{ji} ile gösterilebilir. Toplam açısal momentumu J_i olan bir durumda izole, serbest uzayda bir atom için M_i manyetik kuantum sayısının $2J_i+1$ olası değerlerine karşılık E_i enerjisinin

$$g_i=2J_i+1 \tag{3.209}$$

tane dejenere kuantum durumu vardır. $2J_i+1$ ifadesi *istatistiksel ağırlık* olarak adlandırılır. Einstein kendiliğinden salma geçiş olasılığı oranı, i enerji seviyeli g_i durumlarının herhangi birine bir geçiş yapan j durumundaki bir atomun birim zaman başına toplam geçiş olasılığı olarak tanımlanır:

$$A_{ji} = \sum_{M_i} a_{ji} \tag{3.210}$$

$\gamma'J'M'$ uyarılmış bir durumdan, daha düşük enerjili bir γJM durumuna geçişin birim zaman başına kendiliğinden salma elektrik dipol geçiş olasılığı için

$$a = \frac{4\omega^3 e^2 {a_o}^2}{3\hbar c^3} \sum_q \left| \langle \chi JM \left| P_q^{(1)} \right| \gamma' J' M' \rangle \right|^2 \tag{3.211}$$

ifadesi yazılabilir. Frekans ifadesi,

$$\omega = 2\pi\nu = \left| E' - E \right| / h \tag{3.212}$$

şeklinde olduğundan ve (3.207) ve (3.208) denklemlerini de göz önüne alarak bir önceki denklem

$$\begin{aligned} a &= \frac{32\pi^3 e^2 {a_o}^2 \sigma^3}{3\hbar} \sum_q \left| \langle \chi JM \left| P_q^{(1)} \right| \gamma' J' M' \rangle \right|^2 \\ &= \frac{64\pi^4 e^2 {a_o}^2 \sigma^3}{3h} \sum_q \left| \langle \chi JM \left| P_q^{(1)} \right| \gamma' J' M' \rangle \right|^2 \end{aligned} \tag{3.213}$$

olarak da yazılabilir. Burada $P_q^{(1)}$, atomun elektrik dipol moment operatörüdür ve

$$P_q^{(1)} \equiv \sum_{i=1}^{N} r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^{N} r_i \, C_q^{(1)}(i) \tag{3.214}$$

şeklinde verilir. Elektrik dipol matris elemanının üç alternatif şekli vardır: (Bethe ve Salpeter 1957, Cowan 1981)

$$\langle \chi JM \left| \sum_i r(i) \right| \gamma' J' M' \rangle \tag{3.215}$$

$$2(E' - E)^{-1} \langle \chi JM \left| \sum_i \nabla_i \right| \gamma' J' M' \rangle \tag{3.216}$$

$$2(E' - E)^{-2} \langle \chi JM \left| (\sum_i \nabla_i V) \right| \gamma' J' M' \rangle \tag{3.217}$$

Burada E ve E' Rydberg biriminde χJM ve $\gamma' J' M'$ durumlarının enerjileridir. V, Rydberg birimlerinde merkezcil potansiyel enerjidir ve tüm mesafeler Bohr birimlerindedir. Denk. (3.215) ve (3.216)'daki operatörler sırasıyla klasik momentuma ve kuvvete karşılık gelmektedir. Dolayısıyla bu üç matris elemanı, uzunluk, hız ve ivme olarak adlandırılmaktadır. Tüm bu matris gösterim şekilleri, hesaplamalarda tam dalga fonksiyonları kullanıldığı zaman özdeş sonuçlar

vermektedir. Fakat genellikle yaklaşık dalga fonksiyonları kullanıldığında farklı sonuçlarla karşılaşılmaktadır.

Wigner-Eckart teoremine göre elektrik dipol matris elemanı;

$$\langle \gamma JM | P_q^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle = (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \langle \gamma J \| P^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \tag{3.218}$$

olarak ifade edilir. Burada $\langle \gamma J \| P^{(1)} \| \gamma' J' \rangle$ indirgenmiş matris elemanıdır. Ayrıca 3-j sembolünün özelliklerinden geçişlerin, sadece $(J 1 J')$'nün üç açı bağıntısını sağlarsa meydana gelebileceği görülmektedir. Yani

$$\Delta J \equiv J - J' = 0, \pm 1 \qquad (J = J' = 0 \text{ izinli değil}) \tag{3.219}$$

olmalıdır. Ayrıca $-M + q + M' = 0$ olmalıdır. Bu durumda $\gamma' J' M'$ durumundan γJ seviyesinin tüm M durumlarına kendiliğinden salma geçiş olasılığı ifadesi

$$A_{J'J} = \frac{64\pi^4 e^2 {a_o}^2 \sigma^3}{3h} \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 \left| \langle \gamma J \| P^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \right|^2 \tag{3.220}$$

biçiminde verilir (Cowan 1981).

3.4.3. Elektrik dipol çizgi şiddeti

Elektrik dipol çizgi şiddeti,

$$S(\gamma J; \gamma' J') = S(\gamma' J'; \gamma J) = \sum_{MM'} \left| \langle \gamma J M | P^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2 = \left| \langle \gamma J \| P^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \right|^2 \tag{3.221}$$

ifadesi ile tanımlanır. Bu nicelik, m, m' farklı J_z öz durumları arasındaki tüm olası geçişleri içeren spektral çizginin toplam şiddetinin bir ölçüsüdür. İndirgenmiş matris elemanında $P^{(1)}$ tensör operatörü, $e a_o$ birimlerindeki atom için klasik dipol momentidir (Costa ve ark. 2001, Sobelman 1996).

Elektrik dipol çizgi şiddeti, LS çiftleniminde iki uyarılmış seviye arasındaki tek elektron geçişi için

$$\begin{aligned}\sqrt{S_{LS}} &\equiv \left\langle [(...\alpha_1 L_1, l_2)L(...S_1 s_2)S]J \left\| \boldsymbol{r}_N^{(1)} \right\| [(...\alpha_1' L_1', l_2')L'(...S_1' s_2)S']J' \right\rangle \\ &= \delta_{S_1 S_1'} \delta_{ss'} (-1)^{L+S+J'+1} [J, J']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \left\langle (...\alpha_1 L_1, l_2)L \left\| \boldsymbol{r}_N^{(1)} \right\| (...\alpha_1' L_1', l_2')L' \right\rangle \\ &= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_1' L_1' S_1'} \delta_{ss'} (-1)^{S+J'+L_1+l_2'} [J, J', L, L']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l_2' \end{Bmatrix} P^{(1)}_{l_2 l_2'}\end{aligned} \tag{3.222}$$

ifadesi ile verilir. Burada $P^{(1)}_{l_2 l_2'}$ elektrik dipol geçiş için radyal geçiş integrali (veya geçiş matris elemanı) olup, genel ifadesi

$$P^k_{l_i l_f} = l_> \left\langle n_i, l_i \left| r^k \right| n_f, l_f \right\rangle = l_> \int_0^\infty r^{k+2} R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r)\, dr \tag{3.223}$$

şeklindedir. $l_1^n\, l_2^{k-1} \rightarrow l_1^{n-1}\, l_2^{\,k}$ şeklindeki geçişler için çizgi şiddeti ifadesi

$$\begin{aligned}\sqrt{S_{LS}} &\equiv \left\langle [(\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_2 L_2, S_2)LS, J]J \left\| \boldsymbol{r}^{(1)} \right\| (\alpha_1' L_1' S_1', \alpha_2' L_2', S_2')L'S', J' \right\rangle \\ &= \delta_{S_1 S_1'} (-1)^{k+l_2+L_2+L_2'+L+S_1'+S_2'+J'} (nk\, [L_1, S_1, L_2', S_2', L, L', J, J'])^{1/2} x \\ &\begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_1' & S_2' & S \\ S_2 & S_1 & s \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & L_1' & l_1 \\ L_2 & L_2' & l_2 \\ L & L' & 1 \end{Bmatrix} x \\ &(l_1^n \alpha_1 L_1 S_1 \{ l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1') (l_2^{k-1} \alpha_2 L_2 S_2 \{ l_2^k \alpha_2' L_2' S_2') P^{(1)}_{l_2 l_2}\end{aligned} \tag{3.224}$$

biçiminde verilir. Burada $\left(l_1^n \alpha_1 L_1 S_1 \{ \left| l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1' \right. \right)$ ve $\left(l_2^{k-1} \alpha_2 L_2 S_2 \{ \left| l_2^k \alpha_2' L_2' S_2' \right. \right)$ ifadeleri antisimetrikleşme katsayılarıdır ve literatürde bu katsayı değerleri tablolar halinde verilmektedir (Sobelman 1975, Cowan 1981).

$l_1^n \rightarrow l_1^{n-1}\, l_2$ şeklindeki geçişler için çizgi şiddeti ise

$$\sqrt{S_{LS'}} \equiv \left\langle \alpha_1 L_1 S_1, J \left\| \boldsymbol{r}^{(1)} \right\| \alpha_1' L_1' S_1', l_2) L' S', J' \right\rangle$$

$$= \delta_{S_1 S'} (-1)^{L_1' + l_2 + S_1 + J'} \left(n.[L_1, L', J, J'] \right)^{1/2} x \qquad (3.225)$$

$$\begin{Bmatrix} L_1 & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & L_1' & L_1 \\ L' & 1 & l_2 \end{Bmatrix} (l_1^n \alpha_1 L_1 S_1 \left\{ l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1') P^{(1)}_{l_2 l_2} \right.$$

ifadesi ile verilir. Burada n kabuktaki özdeş elektronların sayısıdır (Cowan 1981, Gaigalas ve Fischer 1996, Çelik 2005).

Pek çok amaç için özellikle de astrofiziksel uygulamalarda, spektral çizgilerle ilişkili *f* osilatör şiddetlerinin ve *A* geçiş olasılıklarının bilinmesi gereklidir. Bu ilgili nicelikler *S* çizgi şiddetine göre ifade edilebilirler. *S* çizgi şiddetine göre $A_{J'J}$ geçiş olasılığı

$$A_{J'J} = \frac{64\pi^4 e^2 {a_o}^2 \sigma^3}{3h} \frac{1}{2J'+1} S \qquad (3.226)$$

olarak verilir. Burada $2J'+1$, üst seviyenin istatistiksel ağırlığıdır. Sabitlerin değerleri yerlerine konulduğunda ve atomik birimlerde bu ifade

$$A_{J'J} = \frac{2{,}0261.10^{-6}}{2J'+1} \sigma^3 S \quad (sn^{-1}) \qquad (3.227)$$

şeklinde yazılabilir. Burada *S* atomik birimlerde, σ Kaysers (cm^{-1}) biriminde alınmıştır (Cowan 1981).

3.4.4. Osilatör şiddeti

Osilatör şiddeti, verilen bir spektroskopik geçiş için soğurmaya karşılık gelen atom başına elektronların sayısı olarak tanımlanabilir. Kuantum mekaniğinde J kuantum halinde olan atom çok sayıda başka kuantum hallerine geçebilir. Bu

geçişlerin her biri bir osilatör şiddeti olarak karakterize edilir. Osilatör şiddeti aynı zamanda geçiş şiddetini ifade eden birimsiz bir niceliktir (Hilborn 1982).

$\chi J \to \gamma' J'$ geçişi için osilatör şiddeti S çizgi şiddetine bağlı olarak,

$$f(\chi J, \gamma' J') = \frac{8\pi^2 mca_o{}^2}{3h(2J+1)} \sigma S(\chi J, \gamma' J') = \frac{(E_{J'} - E_J)}{3(2J+1)} S(\chi J, \gamma' J') \tag{3.228}$$

ifadesi ile verilir. $E_{J'} - E_J$, Rydberg birimlerinde geçiş enerjisidir. $(2J+1) = g_J$ ifadesi ise alt seviyenin istatistiksel ağırlığıdır. $\gamma' J' \to \chi J$ geçişi için osilatör şiddeti ise

$$f(\gamma' J', \chi J) = -\frac{8\pi^2 mca_o{}^2}{3h(2J'+1)} \sigma S(\gamma' J', \chi J) = \frac{(E_J - E_{J'})}{3(2J'+1)} S(\gamma' J', \chi J) \tag{3.229}$$

ile verilir. Bu durumda soğurma ve yayınlama osilatör şiddeti ifadeleri arasında şöyle bir bağıntı vardır:

$$(2J+1) f(\chi J, \gamma' J') = -(2J'+1) f(\gamma' J', \chi J) \tag{3.230}$$

$$f_{J'J} = f_{JJ'} \frac{g_J}{g_{J'}} \tag{3.231}$$

Bu durum verilen bir geçiş için her bir atomik seviyenin istatistiksel ağırlığının farklı olabilmesi sebebiyledir (Tektunalı ve Kulizade 1995, Cowan 1981).

Elektrik dipol osilatör şiddeti, elektrik dipol operatörünün aşağıdaki üç farklı şeklinin herhangi biri ile ifade edilebilir:

$$f_L = \frac{2}{3}(E_{J'} - E_J) \left| \langle \psi_{J'} | \sum_i r_i | \psi_J \rangle \right|^2$$

$$f_V = \frac{2}{3(E_{J'} - E_J)} \left| \langle \psi_{J'} | \sum_i \nabla_i | \psi_J \rangle \right|^2 \tag{3.232}$$

$$f_A = \frac{2}{3(E_{J'} - E_J)^3} \left| \langle \psi_{J'} | \sum_i \frac{1}{r_i^3} | \psi_J \rangle \right|^2$$

Burada E_J ve $E_{J'}$, dipol geçiş için sırasıyla başlangıç ve son durumun enerjileridir. Bu üç alternatif gösterim, sırasıyla uzunluk, hız ve ivme şekli olarak adlandırılır. Bu ifadeler tam dalga fonksiyonları kullanıldığında aynı sonuçları verir.

3.4.5. Geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve çizgi şiddeti arasındaki bağıntılar

SI birim sisteminde (A; sn^{-1}, λ; m, S; m^2 C^2) elektrik dipol geçiş için A, f ve S arasındaki bağıntılar,

$$A_{J'J} = \frac{2\pi e^2}{m_e c \in_o \lambda^2} \frac{g_J}{g_{J'}} f_{JJ'} = \frac{16\pi^3}{3h \in_o \lambda^3 g_{J'}} S \tag{3.233}$$

şeklindedir. Sayısal olarak bilinen birimlerde (A; sn^{-1}, λ; Å, S; atomik birimlerde) geçiş olasılığı için

$$A_{J'J} = \frac{6{,}6702.10^{15}}{\lambda^2} \frac{g_J}{g_{J'}} f_{JJ'} = \frac{2{,}0261.10^{18}}{\lambda^3 g_{J'}} S \tag{3.234}$$

ifadesi ve atomik birimlerde osilatör şiddeti için S ve ΔE'ye bağlı olarak

$$f_{JJ'} = \frac{2}{3}\left(\frac{\Delta E}{g_J}\right) S \tag{3.235}$$

ifadesi yazılabilir.

3.4.6. Hayat süresi

Bir atomun uyarılmış durumu

$$-\left(\frac{dN_j}{dt}\right) = N_j \sum_{(i<j)} A_{ji} \tag{3.236}$$

ile verilen bozunma sebebiyle ayırt edici bir yaşam süresine sahip olacaktır. Burada N_j, j uyarılmış durumdaki nüfus yoğunluğudur ve A_{ji}'ler j seviyesinden kaynaklanan tüm ışımalı geçişler için Einstein kendiliğinden yayınlama katsayılarıdır. Oranın zamanla azalması sebebiyle negatif işaret ortaya çıkar. Bu bağıntının integrali alınarak

$$N_j(t) = N_j(0).e^{-t/\tau_j} \tag{3.237}$$

ifadesi elde edilir. Burada $N_j(t)$, herhangi bir t anındaki uyarılmış durum nüfus yoğunluğu, $N_j(0)$ ise t=0'daki başlangıç uyarılmış durum nüfus yoğunluğudur. τ_j ise

$$\tau_j = \frac{1}{\sum_{(i<j)} A_{ji}} \tag{3.238}$$

şeklinde tanımlanan hayat süresidir. Güçlü atomik geçişlerde A_{ji} , 10^8 ile 10^9 s^{-1} dir ve böylece hayat süreleri 1 ile10 ns arasındadır. Hayat süreleri çarpışmalar veya etkilemeli yayınlama ile kısaltılabilir (Sobelman 1996, Cowan 1981).

3.5. Yarı Deneysel Atomik Yapı Hesaplama Yöntemleri

3.5.1. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT)

Atomik ya da moleküler yapıların uyarılma ve iyonlaşma verileri bu yapılara ait birçok fiziksel özellik hakkında doğru bilgiler vermektedir. En zayıf bağlı elektronun kabulü serbest bir parçacığın iyonlaşma potansiyelinin tanımlanmasıyla başlamaktadır (Thewlis 1961). Bu durum ilk defa Zheng tarafından, En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile ortaya atılmıştır (Zheng 1986, Zheng ve ark 2001-a,b,c). En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, çok elektronlu sistemlerde çeşitli atomik özelliklerin hesaplanması için kullanılmıştır (Zheng ve ark. 2000-b, Zheng ve Wang 2003, Ma ve ark. 2005, Zhang ve ark. 2009). Bu teori dinamik ardışık iyonlaşma, kuantum mekaniğinde sıfır enerji seçimi ve çok elektronlu bir

sistemdeki elektronları en zayıf bağlı elektron ve en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak ayırma düşüncesi üzerine kurulmuştur (Zheng ve ark. 2004-c). Sistemdeki en zayıf bağlı olan elektronu uyarmak ve iyonlaştırmak en kolaydır. Bir atomun toplam dalga fonksiyonu, toplam enerjisi ve atomik enerji seviyeleri arasındaki geçişler gibi birçok özellik, sisteme en zayıf bağlı elektronun davranışıyla ilgilidir. Böylelikle karmaşık çok elektron problemi sisteme en zayıf bağlı olan tek bir elektronun basit analitik tek elektron problemine indirgenebilmektedir (Zheng ve ark. 2004-b,c).

Birinci iyonlaşma işleminde sistemden sadece tek bir elektron yani sisteme en zayıf bağlı bir elektron koparılabilir. Sistemdeki diğer elektronlar sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak adlandırılırlar. Bu yüzden iyonlaşma sürecine katılan sisteme en zayıf bağlı elektronun davranışı diğerlerinden farklı olacaktır. Bunun için sistemdeki tüm elektronları sisteme en zayıf bağlı bir elektron ve sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak ayırmak anlamlıdır. En zayıf bağlı olmayan elektronlardan oluşan iyon çekirdeği ile çekirdek bir bütün olarak davranır ve en zayıf bağlı elektron iki çekirdek etkisinden kaynaklanan ortalama küresel simetrik bir potansiyelde hareket etmektedir. Dolayısıyla çok sayıda değerlik elektrona sahip sistemler tek elektronlu sistemler gibi göz önüne alınabilmektedir. Benzer kabuller çift uyarılma işleminde ya da alt kabuklardan olan geçişlerde de yapılabilir (Çelik 2005).

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisinde verilen bir sistemdeki en zayıf bağlı elektron, çekirdek ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar tarafından oluşturulan

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{\beta}{r_i^2} \tag{3.239}$$

şeklinde verilen bir potansiyel alanda hareket eder. Bu potansiyel alan iki kısma ayrılabilir. İlk kısım Coulomb potansiyelidir. Sisteme en zayıf bağlı elektronun dışındaki diğer elektronların perdelemesi en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisinden dolayı tam değildir. Bu sebeple, bu yöntemde potansiyel fonksiyonunun Coulomb teriminde bir etkin çekirdek yükü, Z^* kullanılır. Potansiyel alanın ikinci kısmı dipol potansiyelidir. En zayıf bağlı elektron atomik çekirdeği kutupladığından bir elektrik

dipol moment oluşur. Oluşan bu elektrik dipol moment en zayıf bağlı elektronun davranışını etkiler.

Toplam potansiyel en zayıf bağlı elektronun Schrödinger denkleminde kullanılarak,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r_i)\right]\psi_i = \varepsilon_i \psi_i \tag{3.240}$$

ve bazı dönüşümler yapılarak radyal denklem çözülüp β parametresi,

$$\beta = \frac{\left[d(d+1)+2dl\right]}{2} \tag{3.241}$$

biçiminde türetilebilir. Bu durumda potansiyel,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{\left[d(d+1)+2dl\right]}{2r_i^2} \tag{3.242}$$

şeklinde yeniden yazılır. Bu potansiyel Denk.(3.240)'da kullanılarak Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{-Z^*}{r_i} + \frac{d(d+1)+2dl}{2r_i^2}\right]\psi_i = \varepsilon_i \psi_i \tag{3.243}$$

şeklinde yazılabilir. Burada ilk terim en zayıf bağlı elektronun kinetik enerjisini, ikinci terim Coulomb potansiyelini, üçüncü terim ise kutuplanma etkisinden kaynaklanan elektrik dipol potansiyelini göstermektedir. İfadedeki r_i; en zayıf bağlı elektron ile çekirdek arasındaki uzaklık, l; yörünge açısal momentum kuantum sayısı, Z^*; sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronların perdeleme etkisi ile en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisini göz önüne alan etkin çekirdek yükü ve *d* ise kuantum kusurunun belirlenmesinde gerekli olan bir parametredir. Buradaki *d*; tamsayı olmayan n^* ve l^* kuantum sayılarıyla, tam sayı olan n ve l kuantum sayılarından yararlanılarak belirlenmektedir.

En zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonu genel olarak,

$$\psi_i(r_i,\theta_i,\varphi_i) = R_{n^*l^*}(r_i)\ Y_{l,m}(\theta_i,\varphi_i) \tag{3.244}$$

şeklinde yazılır. Radyal denklemin çözümü sürecinde Denk.(3.240)'daki $\frac{l(l+1)}{2r^2}$ merkezcil potansiyelinin yerine $\frac{l^*(l^*+1)}{2r^2}$ ifadesi yazılmaktadır ve *d*' ye bağlı terim Denk.(3.242)'deki ikinci terimle gösterilmektedir. Hidrojen atomu problemine benzer olarak en zayıf bağlı elektron için tek elektron Schrödinger denkleminin çözümü,

$$\psi = N\exp\left(-\frac{Z^*r}{n^*}\right)r^{l^*}L_{n-l-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^*r}{n^*}\right)\ Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{3.245}$$

şeklinde verilir. Burada N normalizasyon katsayısı olup,

$$N = \left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2}\left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!}\Gamma(n^*-l^*+1)\right]^{-1/2} \tag{3.246}$$

olarak verilir ve ifadedeki n^*, l^* ve ε,

$$l^* = l + d \tag{3.247}$$

$$n^* = n + d \tag{3.248}$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \tag{3.249}$$

şeklinde tanımlanmaktadır (Zheng 1977, 1986, 1987, Zheng ve Xin 1991, Zheng ve Li 1994, Zheng ve ark. 2000-a,d, 2001-a,b,c). Denk.(3.249) ile tanımlanan ε, en zayıf bağlı elektronun enerjisi olup buradaki $n*$ ise en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisinden kaynaklanan etkin baş kuantum sayısını göstermektedir. Atomik hacim arttıkça zayıf bağlı olmayan elektronlar çok daha kolay bozunur ve en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisi artar (Zheng ve ark. 2000-c). Sonuç olarak WBEPM teoriye göre, yarıçapın beklenen değerleri ve deneysel enerji verileri

kullanılarak belirlenen bazı parametrelere göre Laguerre polinomunun bir fonksiyonu olarak ifade edilen elektronik radyal dalga fonksiyonu

$$R=\left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2}\left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!}\Gamma(n^*-l^*+1)\right]^{-1/2}\exp\left(-\frac{Z^*r}{n^*}\right)r^{l^*}L_{n-l-1}^{2l^*+1}(\frac{2Z^*r}{n^*}) \tag{3.250}$$

ifadesi ile verilir. Radyal fonksiyon için,

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2\,dr=1 \tag{3.251}$$

normalizasyon şartı kullanılarak ve iki Laguerre polinomunun integral formülünden,

$$\int_0^\infty t^\lambda e^{-t} L_m^\mu(t) L_{m'}^{\mu'}(t)\,dt=(-1)^{m+m'}\Gamma(\lambda+1)\times\sum_k\binom{\lambda-\mu}{m-k}\binom{\lambda-\mu'}{m'-k}\binom{\lambda+k}{k} \tag{3.252}$$

ifadesi elde edilir. (n_i,l_i) seviyesinden (n_f,l_f) seviyesine geçiş için r^k nın beklenen değeri ya da radyal geçiş integrali $S=\min\left\{n_f^*-l_f^*-1-m_1,\ n_i^*-l_i^*-1-m_2\right\}$ ve $k>-l_f^*-l_i^*-3$ olmak üzere,

$$\langle n_i,l_i|r^k|n_f,l_f\rangle=\int_0^\infty r^{k+2}R_{n_il_i}(r)\,R_{n_fl_f}(r)\,dr$$

$$=(-1)^{n_f+n_i+l_f+l_i}\left(\frac{2Z_f^*}{n_f^*}\right)^{l_f^*}\left(\frac{2Z_i^*}{n_i^*}\right)^{l_i^*}\times\left(\frac{Z_f^*}{n_f^*}-\frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{-l_f^*-l_i^*-k-3}x\left[\frac{{n_f^*}^4\Gamma(n_f^*+l_f^*+1)}{4{Z_f^*}^3(n_f-l_f-1)!}\right]^{-1/2}x$$

$$\left[\frac{{n_i^*}^4\Gamma(n_i^*+l_i^*+1)}{4{Z_i^*}^3(n_i-l_i-1)!}\right]^{-1/2}\times\sum_{m_1=0}^{n_f-l_f-1}\sum_{m_2=0}^{n_i-l_i-1}\frac{(-1)^{m_2}}{m_1!m_2!}\left(\frac{Z_f^*}{n_f^*}-\frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{m_1+m_2}\times\left(\frac{Z_f^*}{n_f^*}+\frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{-m_1-m_2}x \tag{3.253}$$

$$\Gamma(l_f^*+l_i^*+m_1+m_2+k+3)\times\sum_{m_3=0}^{S}\binom{l_i^*-l_f^*+k+m_2+1}{n_f^*-l_f^*-1-m_1-m_3}\times\binom{l_f^*-l_i^*+k+m_1+1}{n_i^*-l_i^*-1-m_2-m_3}\times$$

$$\binom{l_i^*+l_f^*+k+m_1+m_2+m_3+2}{m_3}$$

şeklinde verilir (Zheng 2000-a,b,c,d, Çelik 2005).

Elde edilen bu ifadede $i = f$ ve k=1 yazılarak en zayıf bağlı elektronun konumunun beklenen değer ifadesi,

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^*+1)}{2Z^*} \tag{3.254}$$

olarak bulunur. Denk. (3.249)'da verilen en zayıf bağlı elektronun ε enerjisinin negatifi, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisine eşit olup

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \tag{3.255}$$

olarak tanımlanır. Denk. (3.253)'de verilen radyal geçiş integrali kullanılarak atomik sistemlere ait osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve hayat süreleri gibi fiziksel özellikler hesaplanabilir. Radyal geçiş integralinin hesaplanmasında Z^*, n^* ve l^* parametrelerini belirlemek yeterlidir. Bu parametrelerin doğrudan teoriden hesaplanmasında bazı zorluklarla karşılaşıldığı bilinmektedir (Zheng ve ark.1999). Bunun için Zheng enerji değerleri için literatürdeki deneysel enerji verilerini kullanmayı ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin de literatürdeki teorik yöntemler kullanılarak belirlenebileceğini önermiştir. Deneysel enerji değerleri günümüzde modern tekniklerle ölçülebildiğinden, literatürdeki değerler arasında önemli farklılıklar bulunmamaktadır. Seviyelerin yarıçaplarının beklenen değerleri ise NCA, Roothann-Hartree-Fock yöntemi "RHF", Multikonfigürasyonel Hartree-Fock yöntemi, Hartree-Slater yöntemi "HS", Hartree-Kohn-Sham yöntemi "HKS" ve Zamana bağlı Hartree-Fock "TDHF" yöntemi gibi birçok teorik yöntemle belirlenebilir (Desclaux 1969, Lindgard ve Nielsen 1975, 1977, Kundu ve Mukherje 1984, Theodosiou 1984, Viswanath ve Sen 1989, King 1991).

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride Z^*, n^* ve l^* parametreleri Denk. (3.254) ve Denk.(3.255) birlikte çözülerek bulunur. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, hem düşük hem de yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçişler için etkili bir metodtur. Bu metod ile geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve hayat süreleri gibi spektroskopik veriler diğer yöntemlere nazaran daha kısa zamanda

ve karmaşık hesaplamalara girmeden elde edilebilmektedir (Zheng ve ark. 2000, Fan ve Zheng 2004, Zheng ve Wang 2004-a, Zheng ve ark. 2004-b,c, Çelik 2005).

3.5.2. Kuantum kusur orbital (QDO) teori

Kuantum kusuru $\delta(l)$, söz konusu elektrona diğer elektronların etkisini gösteren bir terimdir. Aynı zamanda N elektronlu bir sistemdeki N-1 elektronu ve Z çekirdek yükünün hidrojenik değerlerden uzaklaşan enerji özdeğerlerinin kaymasıyla oluşturulan etkin yükü şekillendirmektedir. Hidrojen veya hidrojenik (tek elektronlu) iyon için Bohr enerji seviyeleri Rydberg birimlerinde

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \tag{3.256}$$

ile verilir. Çok elektronlu bir atom için, hidrojenik E_n değerlerinden *nl* (kor) seviye serisinin ayrılması, temel olarak *nl* elektronu (düşük *l* değeri serileri) tarafından kor nüfuzu veya *nl* elektronu (yüksek *l* değeri serileri) tarafından kor kutuplanması veya bu iki etkinin kombinasyonu sebebiyle olabilir. Her bir durumda bu ayrılmaların, yaklaşık olarak Rydberg formülünde δ_l sabit bir kuantum kusur ile ifade edilebildiği gösterilebilir:

$$E_{nl} = -\frac{{Z_c}^2}{(n-\delta_l)^2} = -\frac{{Z_c}^2}{{n^*}^2} \tag{3.257}$$

Burada Z_c, korun yüküdür ve $n^* = n - \delta$, etkin baş kuantum sayısıdır.

Kuantum kusur teorileri, ilk kez Bates ve Damgaard (1949) ve Ham (1955) tarafından öne sürülmüştür. Daha sonra bu teori geliştirilerek Seaton (1958) ve Fano (1970) tarafından atomik süreçlere uygulanmıştır.

Simons (1974) ve Martin ve Simons (1975), kuantum kusur teoriyi geliştirerek Kuantum Kusur Orbital "QDO" metodunu öne sürdüler. Bu sürecin çıkış noktası, Bates ve Damgaard (1949) tarafından geliştirilen Coulomb yaklaşım tekniğidir. QDO yöntemi Coulomb yaklaşımından bazı noktalarda farklılıklar gösterir. Bu farklılıklar,

sadece Hamiltoniyendeki merkezcil terimin, potansiyel enerji teriminden çok daha az katkı getirdiği radyal mesafelerde gözlemlenir. QDO ve CA radyal orbitaller, birbirine çok benzer olabilir. Bununla birlikte eğer küçük r bölgeleri, geçiş integraline önemli bir katkı getirirse, her iki süreç de aynı enerji öz değerlerine sahip olsa bile osilatör şiddetleri oldukça farklı olabilir (Martin ve ark. 1991).

Bu yöntemde, elektronun perdeleme etkilerini hesaba katan yaklaşık bir Hamiltoniyen kullanılarak, analitik olarak ifade edilebilen tam öz fonksiyonlar elde edilir ve geçiş integralleri analitik olarak hesaplanabilmektedir (Lavin ve ark. 1992). QDO yöntemi spektral verilerden valans, Rydberg ve sürekli orbitaller üretmek için geliştirilmiştir. Bu yöntem, geçiş integralleri için analitik ifadeler ve radyal orbitaller için tam çözümler üretir. Bazı araştırmacılar bu metodu kullanarak, atomik ve iyonik sistemlerde geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve fotoiyonizasyon tesir kesitleri gibi spektroskopik parametreler için hesaplamalar yapmışlardır (Martin ve Simons 1975, Martin ve Simons 1976, Barrientos ve Martin 1985, Martin ve ark. 1991, Lavin ve ark. 1992).

Merkezcil alan yaklaşımında valans, Rydberg veya sürekli orbitallerin radyal kısmı için Schrödinger denklemi,

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\mu}{dr^2}+\left[\frac{l(l+1)}{2r^2}+V(r)\right]\mu = E\,\mu \tag{3.258}$$

olarak verilir (Martin ve Simons 1975). Tek elektron Schrödinger denkleminin analitik çözümü temeline dayanan QDO metodunda, yaklaşık merkezcil alan elektron perdeleme potansiyeli

$$V(r)=\frac{\lambda(\lambda+1)-l(l+1)}{2\,r^2}-\frac{Z_{net}}{r} \tag{3.259}$$

şeklinde yazılır. Burada Z_{net}, büyük radyal mesafelerde elektron tarafından görülen etkin çekirdek yüküdür (Martin ve Simons 1975). λ parametresi ise, model potansiyelin perdeleme kısmını ifade etmektedir ve hem etkin potansiyelde hem de kuantum kusur orbitallerde karşımıza çıkmaktadır. Bu parametre, *l* açısal kuantum sayısına ve kuantum kusura bağlı olarak

$$\lambda = l - \delta + c \tag{3.260}$$

genel ifadesinden belirlenebilir. Burada c, radyal orbitallerin normalize edilebilirliğini sağlamak için ve doğru düğüm sayıları elde etmek için seçilen bir tamsayıdır (Martin ve Simons 1975, Barrientos ve Martin 1989, Lavin ve ark. 1992).

Bağlı durumlara ait dalga fonksiyonları, ikinci Whittaker fonksiyonlarına bağlı olarak ifade edilebilir:

$$\mu(r) = W_{n-\delta,\lambda+1/2}\left[2Z_{net}\, r/(n-\delta)\right] \tag{3.261}$$

Hartree birimlerinde kuantum kusur δ, bağlı durumların iyonizasyon enerjisinin negatifi ile ilişkilidir:

$$E = -Z_{net}^2 / 2(n-\delta)^2 \tag{3.262}$$

Normalize bağlı durum orbitaller, genelleştirilmiş Laguerre polinomlarına veya Kummer fonksiyonlarına bağlı olarak ifade edilebilir:

$$\mu(r) = \left[\frac{Z_{net}\,\Gamma(n-\delta+\lambda+1)}{\Gamma(n-\delta+\lambda)}\right]^{1/2}\left[\frac{\left(2Z_{net}r/(n-\delta)\right)^{\lambda+1}}{(n-\delta)\Gamma(2\lambda+2)}\right] \times e^{-Z_{net}r/(n-\delta)}\; F\left[\lambda+1-n+\delta,\; 2\lambda+2,\; 2Z_{net}\,r/(n-\delta)\right] \tag{3.263}$$

Burada *F*, Kummer fonksiyonları olarak bilinir. Dipol uzunluk gösteriminde bir çok spektroskopik özellik

$$R_{ij} = \int \mu_i(r)\, r\, \mu_j(r)\, r^2\, dr \tag{3.264}$$

ile verilen R_{ij} radyal geçiş integrallerine göre ifade edilebilir. Denk. (3.263) bağlı durum orbital fonksiyonları Denk.(3.264)'de yerine yazılarak ve

$$n^* = n - \delta \tag{3.265}$$

gösterimi kullanılarak radyal geçiş integrali

$$R_{ij}=\frac{(2)^{\lambda_i+\lambda_j+2}(n_i^*)^{\lambda_j+2}(n_j^*)^{\lambda_i+2}}{Z_{net}(n_i^*+n_j^*)^{\lambda_i+\lambda_j+4}}\left[\frac{\Gamma\left(n_j^*+\lambda_j+1\right)\Gamma\left(n_i^*+\lambda_i+1\right)}{\left(n_i^*-\lambda_i-1\right)!\left(n_j^*-\lambda_j-1\right)!}\right]^{1/2}$$
$$\times\sum_{k_i=0}^{n_i^*-\lambda_i-1}\sum_{k_j=0}^{n_j^*-\lambda_j-1}\left[\frac{\left\langle\lambda_i-n_i^*+1\right\rangle_{k_i}\left\langle\lambda_j-n_j^*+1\right\rangle_{k_j}\Gamma(\lambda_i+\lambda_j+4+k_i+k_j)}{\Gamma(2\lambda_i+2+k_i)\Gamma(2\lambda_j+2+k_j)\Gamma(k_i+1)\Gamma(k_j+1)}\times\frac{n_i^{*k_j}\,n_j^{*k_i}}{\left[(n_i^*+n_j^*)/2\right]^{k_i+k_j}}\right] \tag{3.266}$$

ifadesi ile verilebilir. Burada $\langle x\rangle_n$ ve Γ(x), sırasıyla Pochhammer ve Gama fonksiyonlarıdır. Denklemdeki her iki toplam sonlu olduğundan, gerekli hesaplamalar kolaylıkla yapılabilir (Simons 1974, Martin ve Simons 1975, Martin ve Simons 1976).

QDO teoride, osilatör şiddetlerinin hesaplanmasında gerekli olan radyal geçiş integralinin belirlenebilmesi için öncelikle Denk. (3.260) ile verilen model potansiyele perdeleme etkisi getiren λ parametresinin elde edilmesi gerekir. Bu parametreyi belirlemek için de δ kuantum kusur değerine ihtiyaç vardır. Göz önüne alınan elektronik seviye için δ kuantum kusur, deneysel enerjiler kullanılarak elde edilebilmektedir. Deneysel enerjilerden haraketle Denk.(3.262)'den δ parametresi bulunabilir.

QDO metodu ile dalga fonksiyonlarının analitik olarak kolaylıkla elde edilebilmesi, geçiş integrallarinin analitik olarak çözülebilmesi ve atomik özelliklerin basit matematiksel ifadeler ve kısa hesaplama süreci ile belirlenebilmesi, bir çok durumda QDO metodunun yüksek uyarılmış seviyelerde daha avantajlı olabileceğini göstermektedir (Barrientos ve Martin 1989, Barrientos ve Martin 1990).

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI

4.1. Geçiş Olasılıkları ve Osilatör Şiddetleri Hesaplamaları

Herhangi bir $\gamma' J' M'$ seviyesinden γJ seviyesinin tüm M durumlarına toplam geçiş olasılığı

$$A_{JJ'} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0{}^2 \sigma^3}{3h} S \sum_{M\,q} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^4 e^2 a_0{}^2 \sigma^3}{3h(2J'+1)} S \tag{4.1}$$

ve iki seviye arasındaki soğurma osilatör şiddeti

$$f_{JJ'} = \frac{8\pi^2 mc a_0{}^2 \sigma}{3h(2J+1)} S = \frac{(E_{J'} - E_J)}{3(2J+1)} S \tag{4.2}$$

biçiminde tanımlanır. İfadedeki nicelikler bölüm 3.4'de detaylı olarak açıklanmıştır. Her temel spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde yapılacak ilk iş S çizgi şiddetinin belirlenmesidir. Çizgi şiddeti S, hesaplamalarda göz önüne alınan çiftlenim durumuna ve elektronun geçiş tipine göre tanımlanır. Hafif atomlar için baskın olan çiftlenim durumu LS çiftlenimi olduğundan, bu çalışmadaki geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri hesaplamalarında LS çiftleniminin baskınlığı göz önüne alınmıştır. Elektrik dipol operatörü spin koordinatı içermediği için LS çiftleniminde matris elemanlarının çözümü diğer çiftlenim şemalarına göre daha kolaydır. Bu çalışmada iki uyarılmış seviye arasındaki geçişleri sembolize eden $l_1^n l_2 \rightarrow l_1^n l_2^{'}$ tipi geçişlere ve temel seviyeden uyarılmış seviyelere geçişleri sembolize eden $l_1^n \rightarrow l_1^{n-1} l_2$ tipi geçişlere ait geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri hesaplanmıştır.

Tüm durumlarda çizgi şiddeti, açısal katsayılara ve radyal geçiş integrallerine bağlı olarak ifade edilmektedir. Açısal katsayıları sembolize eden 6-j katsayısının özellikleri kesim 3.2'de ayrıntılı olarak verilmiştir. Bu tez çalışmasında çizgi şiddetindeki 6-j katsayılarını hesaplayan bir kod oluşturulmuştur. Bu kod yardımıyla

6-j katsayıları tam ve yarım tam sayı durumunda hesaplanabilmektedir. Matris elemanının radyal kısmı yani radyal geçiş integrali tüm çiftlenim durumlarında

$$P^{(1)}_{nl,n'l'} \equiv \delta_{l',l\pm1}(-1)^{l+l_>}(l_>)^{1/2}\int_0^\infty P_{nl}(r)\; r\, P_{n'l'}(r)\, dr = (-1)^{l-l'}\; P^{(1)}_{l'l} = -P^{(1)}_{l'l} \qquad (4.3)$$

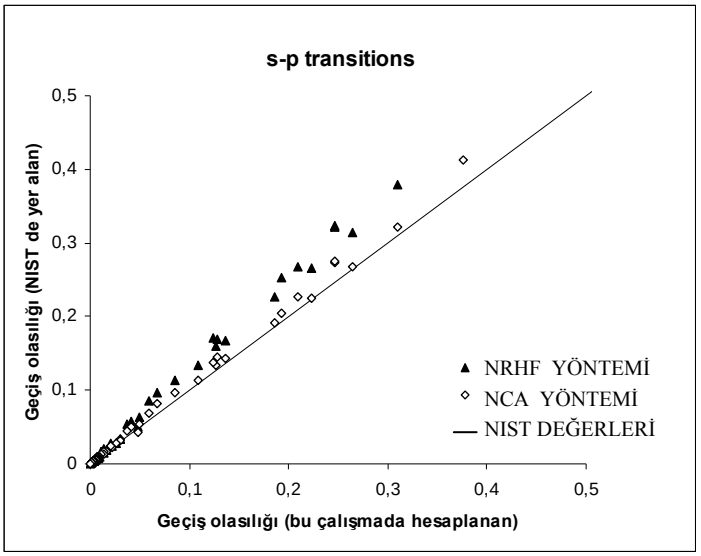
biçiminde tanımlanmaktadır. $l_1^n \rightarrow l_1^{n-1} l_2$ tipindeki geçişler n>1 durumunda özdeş elektronlar içerdiğinden çizgi şiddeti bu tür geçiş durumunda özdeş elektron sayısı ve antisimetrikleşme katsayısıyla çarpılmaktadır. p, d ve f kabuklarının antisimetrikleşme katsayıları literatürde tablolar halinde verilmektedir (Sobelman 1975, Cowan 1981). Matris elemanının radyal kısmı birçok yöntemle hesaplanabilmektedir. Bu çalışmada radyal geçiş integrallerinin hesaplanmasında WBEPM teori ve QDO teori kullanılmıştır. Bu yöntemlerle ilgili ayrıntılı inceleme Kesim 3.5'de verilmiştir.

Tüm hesaplamalarda Fortran 77 programlama dilinde real*8 aritmetiğinde (çift hassasiyet) bilgisayar programları kullanılmıştır. WBEPM teoride, radyal geçiş integrallerinin hesaplanması için gerekli olan Z^*, n^*, l^* parametrelerinin belirlenmesinde enerji değerleri için literatürdeki deneysel enerji verileri (Ralchenko ve ark. 2007, Wiese 2006) kullanılmıştır. Seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin belirlenmesi için Nümerik Coulomb yaklaşımı (Lindgard ve Nielsen 1975, 1977) ile Nümerik non-relativistik Hartree-Fock yaklaşımını temel alan HF96 paket programı kullanılmıştır (Gaigalas ve Fischer 1996). QDO teorisinde, radyal geçiş integralini hesaplayabilmek için n^*, λ ve δ parametrelerinin elde edilmesi amacıyla gerekli olan enerji değerleri için yine literatürdeki deneysel enerji verilerinden yararlanılmıştır.

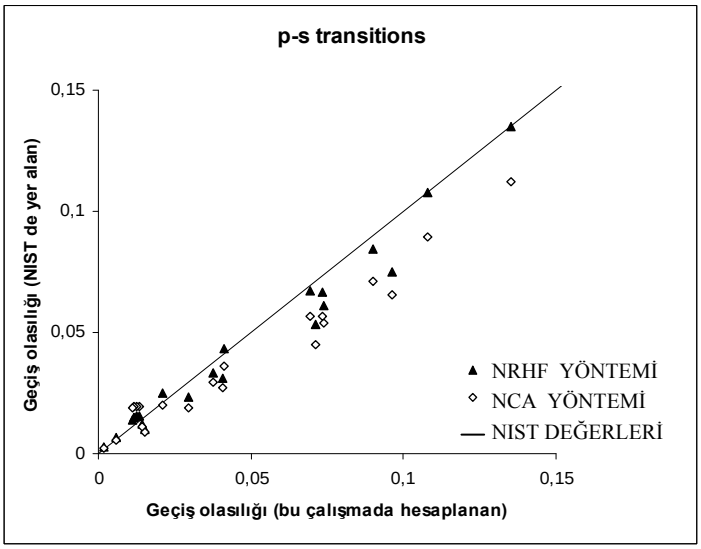
4.2. Atomik Sistemlerde Hesaplamalar

4.2.1. Azot atomunda hesaplamalar

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin sonuçlara etkisini göstermek için Azot atomunda s-p ve p-s geçişlerinde yarıçapların beklenen değerleri hem NCA hem de NRHF yöntemiyle belirlenerek geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Farklı yöntemlerle belirlenen parametreler Ek A'da Çizelge 4.1'de verilmiştir. Belirlenen bu parametreler kullanılarak elektrik dipol geçiş olasılıkları hesaplanmış ve Çizelge 4.2'de verilmiştir. Elde edilen geçiş olasılığı sonuçları National Institute of Standarts and Technology "NIST" deki kabul edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Hesaplama sonuçları kullanılarak s-p ve p-s geçişleri için grafikler çizilmiştir. Şekil 4.1'deki grafiklerde orta eksen NIST'deki kabul edilen değerler olmak üzere, NCA ve NRHF yöntemlerinden belirlenen yarıçapların beklenen değeri kullanılarak hesaplanan geçiş olasılığı değerleri orta eksendeki NIST değerlerine göre çizilmiştir. Geçiş olasılıklarının küçük değerlerinde her iki yöntemle elde edilen yarıçap değerleri kullanılarak elde edilen sonuçların NIST deki kabul edilen değerlerle uyumlu olduğu görülürken, geçiş olasılıklarının yüksek olduğu değerlerde s-p geçişlerinde NCA yönteminden elde edilen parametrelerin kullanılarak hesaplandığı değerlerin, NIST deki kabul edilen değerlerle daha uyumlu sonuçlar verdiği, p-s geçişlerinde ise NRHF yöntemi ile belirlenen parametreler kullanılarak hesaplanan değerlerin NIST deki kabul edilen değerlerle daha uyumlu olduğu görülmüştür. Bu hesaplamanın sonucu olarak seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorinin sonuçlarını oldukça etkilediği söylenebilir (Çelik ve Ateş 2008).



(a)



(b)

Şekil 4.1. Azot atomunda NCA ve NRHF yöntemlerinden elde edilen parametreler kullanılarak hesaplanan geçiş olasılığı değerlerinin NIST de yer alan değerlere göre grafiği (a) s-p geçişleri (b) p-s geçişleri

4.2.2. Berilyum atomunda hesaplamalar

Dört elektrona sahip Berilyum atomunda elektrik dipol osilatör şiddetleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplamalarda hem multiplet çizgiler arasındaki geçişler hem de ince yapı çizgileri arasındaki geçişler göz önüne alınmıştır. Hesaplanan tüm geçişler, Tachiev ve Fischer (1999) tarafından verilen MCHF sonuçlarıyla, Markiewicz ve ark. (1981) tarafından verilen polarized frozen-core "PFC" yöntemi sonuçlarıyla, Moccia ve Spizzo (1985) tarafından verilen varyasyonel dalga fonksiyonları kullanılarak elde edilen sonuçlarla, Chang ve Tang (1990) tarafından verilen konfigürasyon etkileşmesi sonuçlarıyla ve Chen (1998) tarafından verilen model potansiyel yöntemi sonuçlarıyla karşılaştırılmış ve Ek B'deki Çizelge 4.3'de verilmiştir. Literatürden de görülebileceği gibi karşılaştırma materyallerinin büyük bir çoğunluğu, genel geçiş dizileri için olmayıp sınırlı sayıda geçiş içeren sonuçlar ya da sadece multiplet çizgiler için sonuçlar içermektedir. Yüksek uyarılmış seviyelere doğru gidildikçe dalga fonksiyonlarını oluşturmak için çok sayıda konfigürasyon ve orbital baz fonksiyonu kullanılması gerektiğinden literatürdeki sonuçlar yüksek uyarılmış durumlara ait çok fazla geçiş içermemektedir. Sadece MCHF sonuçları çok sayıda genel geçiş dizisine ait sonuçlar içermektedir.

4.2.3. Oksijen atomunda hesaplamalar

Sekiz elektrona sahip oksijen atomunda elektrik dipol geçişler için geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır. Geçiş olasılıkları hem multiplet hem de ince yapı seviyeleri arasındaki geçişler için hesaplanırken, osilatör şiddetleri sadece multiplet çizgiler için hesaplanmıştır. Çizelge 4.4'de verilen multiplet çizgiler için elde edilen osilatör şiddeti sonuçları literatürdeki farklı teorik yöntemlerle elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmış ve oldukça iyi bir uyum gözlenmiştir. Çizelge 4.5'de ve 4.6'da verilen üçlü ve beşli terimler arasındaki hesaplanan geçiş olasılıkları ise Tachiev ve Fischer (2002) tarafından verilen MCHF sonuçlarıyla, Hibbert ve ark. (1991)

tarafından verilen konfigürasyon etkileşmesi hesaplamalarıyla ve NIST'deki (Wiese 2006) kabul edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Ek C'de verilen Çizelge 4.4, Çizelge 4.5'deki ve Çizelge 4.6'daki sonuçlar, bu çalışmadan elde edilen sonuçların diğer yöntemlerle iyi uyumlu olduğunu ve diğer yöntemlerle belirlenemeyen bazı yüksek uyarılmış seviyelere ait osilatör şiddetlerinin ve geçiş olasılıklarının en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak elde edilebildiğini göstermektedir.

4.2.4. Sodyum atomunda hesaplamalar

Alkali bir atom olan sodyumda bazı uyarılmış ve yüksek uyarılmış ince yapı ve multiplet çizgiler arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır. Tüm seviyeler için yarıçapların beklenen değerleri NRHF yöntemiyle belirlenmiştir. Elde edilen geçiş olasılığı sonuçları Fischer (2002) tarafından verilen MCHF sonuçlarıyla ve NIST'deki (Wiese 2006) kabul edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Ek D'deki Çizelge 4.7'de verilen En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak elde edilen sonuçların literatürdeki diğer karmaşık yöntemler kadar doğru sonuçlar verebildiği görülmektedir.

4.2.5. Potasyum atomunda hesaplamalar

On dokuz elektrona sahip potasyum atomunda bazı uyarılmış ve yüksek uyarılmış ince yapı ve multiplet çizgiler arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır. Z^*, n^* ve l^* parametrelerinin belirlenmesinde yarıçapların beklenen değerleri NRHF yöntemi ile belirlenmiştir. Belirlenen parametreler Ek E'deki Çizelge 4.8'de verilmektedir. Bu hesaplamada göz önüne alınan geçişler için literatürde yeterli deneysel ve teorik veri olmadığı için sonuçlar sadece NIST'deki (Wiese 2006) kabul edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak elde edilen sonuçlar doğruluk aralıkları verilen kabul edilen değerlerle uyumludur. Ayrıca

potasyum atomundaki bazı yeni geçiş olasılıkları da bu yöntem kullanılarak hesaplanmıştır (Çelik ve Ateş 2008).

4.3. İyonik Sistemlerde Hesaplamalar

4.3.1. Bir kez iyonlaşmış Lityum'da hesaplamalar

Bir kez iyonlaşmış Lityum, Helyuma benzer elektron dizilişine sahiptir. Hem multiplet hem de ince yapı çizgileri arasındaki elektrik dipol osilatör şiddetleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır. Osilatör şiddetlerinin hesaplanmasında gerekli olan Z^*, n^* ve l^* parametreleri hem NCA hem de NRHF yöntemiyle belirlenmiştir. Her iki yönteme ait sonuçlar Ek F'deki Çizelge 4.9'da verilmiştir. Elde edilen osilatör şiddeti değerleri hem birbirleriyle, hem de doğruluk aralıkları verilen NIST'deki (Ralchenko ve ark. 2007) kabul edilen değerlerle, Atomic Line Data (2009) sonuçlarıyla, Cann ve Thakkar'ın (1992) sonuçlarıyla, varyasyon-perturbasyon yöntemini kullanan Drake'nin (1972) sonuçlarıyla ve yine Hylleraas tipi dalga fonksiyonlarını kullanan Anderson ve Weinhold'un (1974) sonuçlarıyla, aynı tip dalga fonksiyonlarını kullanan Theodosiou'nun (1985) sonuçlarıyla ve lityum iyonunda bazı geçişler için osilatör şiddetleri hesaplayan Kono ve Hattori'nin (1984) sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Bazı geçişlerde NCA yönteminden elde edilen yarıçap değerleri kullanılarak yapılan hesaplamaların literatürle daha uyumlu olduğu, bazı geçişlerde ise NRHF yönteminden elde edilen yarıçap değerleri kullanılarak yapılan hesaplama sonuçlarının literatürle daha uyumlu olduğu görülmüştür (Ateş ve Çelik 2009).

4.3.2. Bir kez iyonlaşmış Oksijen'de hesaplamalar

Bir kez iyonlaşmış Azot benzeri Oksijen'de ikili ve dörtlü terimlerin hem multiplet hem de ince yapı çizgileri arasındaki elektrik dipol osilatör şiddetleri WBEPM teori ile hesaplanmış ve Ek G'deki Çizelge 4.10'da ve 4.11'de verilmiştir.

Z^*, n^* ve l^* parametreleri hem NCA hem de NRHF yöntemiyle belirlenmiştir. Elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Ho-Henry (1983, 1984) tarafından verilen multikonfigürasyon hesaplama sonuçlarıyla, Bell ve ark. (1991,1994) tarafından verilen konfigürasyon etkileşmesi hesaplamalarıyla, Becker ve Butler (1988), Lennon ve Burke (1991), Tayal ve Richardson (2000) tarafından verilen R-Matrix hesaplamalarıyla, Tachiev ve Fischer (2002) tarafından verilen MCHF sonuçlarıyla ve NIST'deki (Ralchenko ve ark. 2007) kabul edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Karşılaştırmaların sonucu olarak multiplet çizgiler arasındaki geçişler için osilatör şiddeti sonuçlarının MCHF, CI, R-Matrix yöntemleri sonuçlarıyla ve NIST'deki kabul edilen değerlerle ortalama % 9-15 arası uyumlu olduğu görülmektedir. Bu çalışmada gözönüne alınan geçişler için literatürdeki deneysel çalışmalar sınırlı olduğundan sadece birkaç deneysel sonuçla karşılaştırılabilmiştir. Elde edilen sonuçların deneysel sonuçlarla da uyumlu olduğu görülmüştür. Ayrıca Çizelge 4.11'den görüldüğü gibi literatürde bulunmayan bazı yeni osilatör şiddetleri hesaplanmıştır (Ateş ve ark. 2009).

4.3.3. İki kez iyonlaşmış Oksijen'de hesaplamalar

İki kez iyonlaşmış Oksijen'in spektral çizgileri, Jüpiter gezegen sistemi, gaz bulutsuları, Seyfert galaksileri, son-tip yıldızlar gibi çeşitli astronomik nesnelerde kızıl-ötesi bölgeden mor-ötesi bölgeye geniş bir dalgaboyu aralığında gözlenmektedir. Osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları, enerji değerleri, geçiş oranları gibi fiziksel parametrelerin teorik olarak bilinmesi, iki kez iyonlaşmış oksijenin spektrum çizgilerinin yorumlanması için oldukça önemlidir (Aggarwal ve ark. 1997). Bu çalışmada iki kez iyonlaşmış oksijenin tekli ve üçlü durumlarının çok sayıdaki geçiş dizilerini içeren elektrik dipol osilatör şiddetleri, WBEPM teori ve QDO teori kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplamalarda hem multiplet hem de ince yapı geçişleri göz önüne alınmıştır. WBEPM teori kullanılarak yapılan çalışmada gerekli parametrelerin belirlenmesi için NIST'den alınan deneysel enerji değerleri kullanılmıştır. Seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri NCA ve NRHF dalga fonksiyonları kullanılarak belirlenmiştir. QDO metodunda ise yaklaşık merkezcil-

alan elektron perdeleme potansiyeli ile tek elektron Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen radyal geçiş integrali kullanılmıştır. Hem WBEPM teori hem de QDO teori kullanılarak elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, üçlü durumlar arasındaki geçişler için Ek H-Çizelge 4.12'de, tekli durumlar arasındaki geçişler için Ek H-Çizelge 4.13'de verilmiştir. Çizelgelerde NRHF dalga fonksiyonlarından elde edilen parametrelerin kullanılarak hesaplanan sonuçlar yıldız üst indisi ile belirtilmiştir, diğer sonuçlar ise NCA dalga fonksiyonları ile belirlenen WBEPM teori sonuçlarını göstermektedir. O III için elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, NIST'deki (Ralchenko ve ark. 2007) kabul edilen değerlerle, Tachiev ve Fischer (2001) tarafından verilen hem multiplet hem ince yapı geçişler için MCHF sonuçları ile, ince yapı geçişler için Aggarwal ve ark. (1997) tarafından verilen konfigürasyon etkileşmesi sonuçlarıyla, Fawcett (1987) tarafından verilen Hartree-Fock-Relativistic program paketi sonuçlarıyla, Bhatia ve Kastner (1993) tarafından elde edilen superstructure and distortedwave kodlu hesaplama sonuçlarıyla, Fischer (1994) tarafından verilen MCHF atomik yapı paket programı sonuçları ile ve multiplet geçişler için ise Luo ve ark.'nın (1989) hesapladığı R-matrix sonuçları ile, Aggarwal ve Hibbert'in (1991-a) CI sonuçları ile, Saraph ve Seaton (1980) tarafından verilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Ayrıca bu çalışmada literatürde olmayan bazı yüksek uyarılmış tekli ve üçlü ince yapı çizgileri arasındaki geçişler için yeni osilatör şiddetleri WBEPM teori ve QDO teori kullanılarak belirlenmiştir (Ateş ve ark. 2010).

5. TARTIŞMA

Temel atomik verilerin kullanıldığı fizik ve astrofizik gibi birçok alanda laser atom etkileşmesi sonucu gözlenebilen atomlara ait geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve hayat süreleri gibi fiziksel özelliklerin doğru olarak belirlenmesi oldukça önemlidir. Uzak gezegenlerden gözlenen spektrumların ince yapı seviyeleri arasındaki geçiş olasılıkları o gezegenlerde hangi maddelerin bulunabileceğine dair önemli bilgiler vermektedir. Laser sistemlerindeki gelişmelerle birlikte çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde ışık madde etkileşmesinin bir sonucu olarak elektron geçişleriyle karakterize edilen temel spektroskopik parametrelerin deneysel ve teorik olarak belirlenmesi için yapılan çalışmalar yaklaşık 50 yıldır yoğun olarak sürdürülmektedir. Fakat çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerin özellikle yüksek uyarılmış seviyelerine ait spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde önemli eksiklikler bulunmaktadır. Bu tez çalışmasıyla, çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde literatürde iyi bilinen saf teorik yöntemlerle belirlenemeyen bazı yüksek uyarılmış seviyelere ait temel spektroskopik veriler en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori kullanılarak diğer yöntemler kadar karmaşık bir hesaplama prosedürüne girmeden belirlenmiştir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, deneysel enerji değerlerini ve yarıçaplara ait beklenen değerleri kullanarak geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri gibi temel spektroskopik parametreleri diğer yöntemlere göre daha basit bir hesaplama süreci içerisinde belirleyen yarı deneysel bir yöntemdir. Bu yöntemde geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin hesaplanması için Z^*, n^* ve l^* parametrelerinin belirlenmesi yeterlidir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriyle yapılan hesaplamaların hassasiyeti ilgili parametrelerin belirlenmesinde kullanılan deneysel enerji değerlerine ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerine bağlıdır.

Deneysel enerjiler modern teknolojik araçlarla ölçülebildiği için literatürdeki değerler birbirine çok yakındır. Bu nedenle en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride sonuçları etkileyen seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleridir. Dolayısıyla yarıçapların beklenen değerlerinin doğru olarak belirlenmesi geçiş

olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin hesaplanma sürecinin hassasiyeti açısından büyük önem taşımaktadır.

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriyi ortaya atan Zheng, yaptığı tüm çalışmalarda bu parametreleri belirlerken seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerini bulmak için NCA yöntemini kullandı. NCA yönteminde uyarılmış seviyelerin yarıçaplarının beklenen değerleri makul doğrulukla hesaplanabilirken, temel seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri gerçek değerlerinden oldukça farklı çıkabilmektedir. Bu nedenle Zheng hesaplamalarda temel seviyelerin beklenen değerlerini literatürdeki farklı teorik yöntemlerden belirlemek zorunda kalmıştır. Bu tez çalışmasında seviyelere ait yarıçapların belirlenmesinde hem NCA hem de NRHF yöntemi kullanılmıştır. NRHF yöntemi, NCA yöntemine göre daha karmaşık bir yöntem olup atomik yapı hesaplamalarında Hartree-Fock prosedürünü temel almaktadır. Bu yöntem kullanılarak hem temel hem de uyarılmış seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri yeterli hassasiyette belirlenebilmektedir. Yapılan bu tez çalışmasıyla WBEPM teori literatüründe parametreler NRHF gibi farklı bir yöntemle belirlenmiştir. NRHF yönteminde Hartree-Fock dalga fonksiyonları kullanılarak enerjiler, indirgenmiş tensör matris elemanları, manyetik dipol ve elektrik kuadrapol aşırı ince yapı sabitleri, kendiliğinden iyonlaşma özellikleri, geçiş operatörleri için açısal integralleri, Breit-Pauli Hamiltoniyenini, geri çiftlenim katsayıları, atomik spektrumdaki izotop kaymaları ve radyal geçiş integrallerini belirleyen HF96 kodu kullanılmaktadır. Yaptığımız hesaplamalarda seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri HF96 paket programıyla belirlenmiştir.

Kuantum kusur orbital teori, gerekli parametrelerin belirlenmesinde deneysel enerji değerlerini kullanan basit hesaplama sürecine sahip, yarı deneysel bir yöntemdir. Bu teori ile geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin belirlenmesi için n^*, δ ve λ parametrelerinin belirlenmesi yeterlidir. Bu parametrelerin belirlenmesi için ise literatürdeki deneysel enerji verilerinden yararlanılmıştır. Deneysel enerji verileri ne ölçüde doğru ise geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti sonuçları da o ölçüde doğru olacaktır.

Temel spektroskopik özellikler olan geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin hesaplanması için gerekli parametreler belirlendikten sonra bazı çok

elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde hesaplamalar bilgisayar ortamında yapılmıştır. Tez çalışmasındaki spektroskopik niceliklerin hesaplanması süreci her bir geçiş için seviyeleri tanımlayan dalga fonksiyonlarının oluşturulmasında bilgisayar ortamına çok sayıda veri girilmesini öngörür. Bu verilerin bilgisayar ortamına her bir geçiş için ayrı ayrı aktarılması hem çok fazla zaman almakta hem de yanlış veri girme ihtimali oluşturmaktadır. Bu nedenle spektroskopik niceliklerin hesaplanması için gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde veri dosyaları oluşturulmuş ve bu veri dosyalarını kullanarak hesaplama yapabilen Fortran dilinde çalışan bir paket program yapılmıştır. Bu paket program ile en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori kullanılarak geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri hesaplanabilmektedir. Hesaplamalarda paket programın kullanılması hesaplama sürecinin oldukça kısalmasına sebep olmuştur. Ayrıca çok elektronlu atomik ve iyonik sisteme ait bilgiler veri dosyaları şeklinde hazırlanarak, yanlış sonuç alınmasına neden olan hatalı veri girişi de önlenmiş bulunmaktadır. Hazırlanan program ile LS çiftleniminin baskın olduğu çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri hem en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori hem de kuantum kusur orbital teoriye göre aynı veriler kullanılarak hesaplanabilmektedir. Yani bilgisayara tek bir veri girişiyle farklı yöntemlerle istenilen fiziksel parametreler çok kısa sürede elde edilebilmektedir. Hesaplamalarda farklı yöntemlerin kullanılması elde edilen sonuçların birbirleriyle karşılaştırılması için imkan da sağlamaktadır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori gibi yarı deneysel yöntemler kullanılarak hem yüksek uyarılmış hem de düşük uyarılmış seviyelere ait spektroskopik veriler karmaşık hesaplama sürecine girmeden elde edilebilmektedir.

Literatür dikkatlice incelenecek olursa söz konusu spektroskopik parametreleri hesaplayan birçok teorik yöntem olduğu görülebilir. MCHF, MCDF, CI ve R-Matrix gibi relativistik etkileri hesaba katan bilinen güçlü teorik yöntemler bu yöntemlere örnek olarak verilebilir. Bu yöntemlerde geçişe iştirak eden elektronların bulunduğu seviyeyi tanımlayan dalga fonksiyonları, konfigürasyonların ve orbital baz setlerinin kombinasyonu şeklinde oluşturulur. Bu yöntemlerle yapılan hesaplamalar düşük uyarılmış seviyeler için makulken yüksek uyarılmış seviyelere doğru gidildikçe çok sayıda konfigürasyonun ve orbital baz setinin göz önüne alınmasını gerektirir. Çok

sayıda konfigürasyon ve baz seti ile çalışmak hesaplamaları oldukça karmaşıklaştırmaktadır. Bu nedenle güçlü teorik yöntemler birçok durumda yüksek uyarılmış seviyelerden ziyade düşük uyarılmış seviyeleri içeren sonuçlar verirler. Buna bir örnek verecek olursak, azot atomunda MCHF ve CI gibi yöntemler sadece 4s ve 3d seviyelerine kadar olan uyarılmış seviyelere ait sonuçları içermektedir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori gibi yarı deneysel yöntemlerle yüksek uyarılmış seviyeler daha kolay çalışılabilmektedir. Bu yarı deneysel yöntemler kullanılarak yapılan hesaplamalar en az diğer saf teorik yöntemler kadar doğru sonuçlar verebilmektedir.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Düşük ve yüksek uyarılmış seviyeleri doğru tanımlayan dalga fonksiyonlarının oluşturulmasıyla ilgili çalışmalar hala ilgi çekici konular arasında yer almaktadır. Bu tez çalışmasında göz önüne alınan atomik ve iyonik sistemlerde elde edilen geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri verilerinin diğer teorik ve deneysel yöntemlerle elde edilen sonuçlarla uyum sağladığı görülmüştür. Ortaya çıkan bu uyum en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorinin ve kuantum kusur orbital teorinin, en az karmaşık yöntemler kadar doğru sonuçlar verebileceğinin bir göstergesidir.

Bu tez çalışmasıyla bazı atomik ve iyonik sistemlerde literatürde bulunmayan birçok geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti, yarı deneysel yöntemlerin kullanıldığı bir paket program oluşturularak hesaplanmış ve elde edilen sonuçlar SCI tarafından taranan birçok dergide yayın olarak sunulmuştur. Bu tez çalışmasında kullanılan yarı deneysel yöntemler olan en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorinin ve kuantum kusur orbital teorinin literatürdeki diğer saf teorik yöntemlerle karşılaştırıldığında özellikle yüksek uyarılmış seviyelerin çalışılmasında daha avantajlı olduğunu söyleyebiliriz. QDO teoride spektroskopik niceliklerin hesaplanması için gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde deneysel enerji değerlerinin, WBEPM teoride de spektroskopik niceliklerin hesaplanması için gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde deneysel enerji değerlerinin ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin hassas olarak belirlenmesi geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetlerinin sonuçlarındaki hassasiyeti arttıracaktır. Bundan sonraki çalışmalarda, özellikle seviyelere ait yarıçapların daha hassas olarak belirlenmesinin üzerinde durulması ve bu tez çalışmasında oluşturulan paket program kullanılarak ağır atomlar gibi farklı çiftlenimlerin baskın olduğu çok elektronlu sistemlerde atomik yapı parametrelerinin araştırılması amaçlanmaktadır.

7. KAYNAKLAR

Aeschliman, D.P. 1981 *Measurements of Relative Transition Probabilities of ns-4p, nd-4p, and nf-3d Transitions in Neutral Potassium.* J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 25: 3, 221.

Agaker M. 2006. *Double Excitations in Helium Atoms and Lithium Compounds.* Ph.D.Thesis Uppsala Universty, Uppsala, Sweden.

Aggarwal, K.M., Hibbert, A. 1991-a *Electron Impact Excitation with O III: Oscillator Strengths and Collision Strengths.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24: 3445.

Aggarwal, K. M., Hibbert, A. 1991-b *The Lifetime of the 2p3s* $^1P^o$ *level in O III.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24: 4685.

Aggarwal, K. M., Hibbert, A., Keenan, F. P. 1997 *Oscillator Strengths for Transitions in O III.* Astr. J. Suppl. Ser. 108: 393.

Altick, P. L., Glassgold, A. E. 1964 *Correlation Effects in Atomic Structure Using the Random-Phase Approximation.* Phys Rev. 133: A632.

Amusia, M.Y., Cherepkov, N.A., Zinanovic, D., Radojevic, V. 1976 *Photoabsorption for Helium, Lithium, and Beryllium Atoms in the Random-Phase Approximation with Exchange.* Phys Rev. A 13: 4, 1466.

Andersen, T., Jessen, K. A, Sorensen, G. 1969 *Mean-Life Measurements of Excited Electronic States in Neutral and Ionic Species of Beryllium and Boron*. Phys. Rev. 188: 1, 76.

Andersen, J.O., Aashamar, K. 1993 *Oscillator strengths for transitions among low-lying quartet terms in the nitrogen isoelectronic sequence.* Phys. Scr. 47: 2, 160.

Anderson, M.T., Weinhold, F. 1974 *Dipole oscillator strengths, with rigorous limits of error, for He and* Li^+. Phys. Rev. A 9: 1, 118.

Apaydın, F. 2004. *Kuantum Fiziği,* Hacettepe Üniv. Yayınları, Ankara.

Ateş, Ş. and Çelik, G. 2009 *Oscillator Strengths for Allowed Transitions in Li II.* Acta Phys. Pol. A 115:169.

Ateş, Ş., Tekeli, G., Çelik, G., Akın, E. and Taşer, M. 2009 *Oscillator Strengths for Singly Ionized Oxygen.* Eur. J. Phys. D 54: 21-24.

Ateş, Ş., Çelik, G., Tekeli, G., Taşer, M. 2010 *Oscillator Strengths of Allowed Transitions for O III.* Atomic Data and Nuclear Data Tables (kabul edildi).

Atomic Line List v2.04, 2009, available at http://www.pa.uky.edu/»peter/atomic.

Aygün, E. ve Zengin, M. 1998. *Kuantum Fiziği,* Ankara Üniversitesi 4. Baskı Bilim Yayınları, Ankara.

Barrientos, C. and Martin, I. 1985 *Quantum Defect Orbital Calculations on the Alkaline-Earth Elements: Oscillator Strenghts and Photoionization Cross Sections.* Can. J. Phys. 63: 1441.

Barrientos, C., Martin, I. 1989 *Core-Polarization Effects in Subordinate Series of the Alkali Atoms.* Can. J. Phys. 67: 996.

Barrientos, C., Martin, I. 1990 *Quantum-defects Studies of Systematic Trends of f Values.* Phys. Rev. A 42: 1,432.

Bates, D.R. and Damgaard, A. 1949 *The Calculation of the Absolute Strengths of Spectral Lines.* Phil.Trans. R. Soc. A 242: 101.

Başar, B. 2000. *Fizikçiler ve Kimyacılar İçin Kuantum Kimyası,* Birsen Yayınevi, İstanbul.

Beck, D.R., Nicolaides, C.A. 1976 *Theoretical Oscillator Strengths for N I and O I Resonance Transitions.* J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 16: 297.

Becker, S.R., Butler, K. 1988 *Non-LTE Line Formation in Early B and Late O Stars.* Astron. Astrophys. 201: 232.

Bell, K.L., Hibbert, A. 1990 *Oscillator Strengths for Allowed Transitions in Atomic Oxygen.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23: 2673-2685.

Bell, K.L., Hibbert, A., McLaughlin, B.M., Higgins, K. 1991 *Oscillator Strengths for Optically Allowed Transitions from the $2s^2 2p^3\ ^4S^0$, $^2D^0$ and $^2P^0$ States of Singly Ionized Oxygen.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24: 2665.

Bell, K.L., Hibbert, A., Stafford, R.P., McLaughlin, B.M. 1994 *Accurate Transition Probabilities for Some Spectral Lines of Singly Ionized Oxygen.* Phys. Scr. 50: 343.

Bell, K.L., Berrington, K.A. 1991 *Photoionization of the $4S^o$ Ground-State of Atomic Nitrogen and Atomic Nitrogen $4S^o$-4P Oscillator-Strengths.* J. Phys. At. Mol. Opt. Phys. 24: 5, 933.

Berends, R.W., Kedzierski, W., Atkinson, J.B. and Krause, L. 1988 *The Radiative Lifetimes of the Potassium 5P, 6P and 7P states.* Spectrochim. Acta Part B 43: 1069.

Bethe, H.A. and Salpeter, E.E. 1957. *Quantum Mechanics of One and Two-Electron Atoms*, Springer-Verlag, Berlin.

Bhatia, A. K., Kastner, S. O.,1993 *Collision Strengths and Transition Rates for O III.* At. Data Nucl. Data Tabl. 54: 133.

Biemont, E. 1975 *Systematic Trends of Hartree-Fock Oscillator Strengths Along the Sodium Isoelectronic Sequence.* Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 15: 6, 531.

Biemont, E., Hibbert, A., Godefroid, M., Vaeck, N., Fawcett, B.C. 1991 *Accurate Oscillator-Strengths of Astrophysical Interest for Neutral Oxygen.* Astr. J. 375: 2, 818.

Biemont, E., Zeippen, C.J. 1992 *Electric Dipole Transitions in Atomic Oxygen and The Lifetimes of the* $2p^3(^4S^o)3s\,^5S^o$ *and* $^3S^o$ *States.* Astron. and Astrophys. 265: 850.

Bridges, J.M., Wiese, W.L. 1998 *Transition Probabilities for the* $3s^3S^o–4p^3P$ *and* $3s^5S^0–4p^5P$ *Multiplets in O I.* Phys. Rev. A 57: 4960.

Brown, P.J., Parsons, M.L. 1979 *Relative Atomic Transition Probabilities for Na, Sc, Ti, Cr, Fe, Co, and Ni Using Flame Atomic Absorption Spectroscopy.* Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 21: 6, 553.

Butler, K., Zeippen, C.J. 1994 *Atomic Data from the IRON Project. V. Effective Collision Strengths for Transitions in the Ground Configuration of Oxygen-like Ions.* Astron. Astrophys. Suppl. 108: 1.

Cann, N.M., Thakkar, A.J. 1992 *Oscillator Strengthsfor S-P and P-D Transitions in Heliumlike Ions.* Phys. Rev. A 46: 5397.

Chang, T. N. 1989 *Energy Levels and the* O*scillator Strengths of the Be Atom Determined by a Configuration-Interaction Calculation with a Finite Basis Set from B Splines.* Phys Rev. A 39: 4946.

Chang, T. N. 1990 *Radiative Lifetimes of the Bound Excited States of Magnesium and Beryllium.* Phys Rev. A 41: 4922.

Chang, T. N., Tang, X. 1990 *Oscillator Strengths for the Bound-Bound Transitions in Beryllium and Magnesium.* J. Quant. Spect. Radiat. Transfer 43: 3, 207.

Chen, M. K. 1998 *The Energies and Oscillator Strengths of Bound States of Be.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 31: 4523.

Costa, I.V.L., Cavalcanti,G.H. and Trigueiros, A.G. 2001 *Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Neutral Oxygen Spectrum, OI.* Brazilian Journal of Physics 31: 1, 48.

Cowan, R. D. and Andrew, K. L. 1965 *Coupling Considerations in Two-Electron Spectra.* Journal of the Optical Society of America 55: 5, 502.

Cowan, R.D. 1981. *The Theory of Atomic Structure and Spectra.* University of California Pres, Berkeley.

Çelik G. 2005. *Çok Elektronlu Atomlarda Elektronik Geçişler.* Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.

Çelik, G. and Ateş, Ş. 2007 *The Calculation of Transition Probabilities for Atomic Oxygen.* Eur. J. Phys. D 44: 433.

Çelik, G. and Ateş, Ş. 2008 *Investigation of the effects of expectation values for radii on the determination of transition probabilities using WBEPM theory.* J.Astr.and Astron. 29: 367-378.

Çelik, G. and Ateş, Ş. 2008 *Theoretical Calculations of tTransition Probabilities for Individual and Multiplet Lines Between Some Excited Levels of Atomic Potassium.* Can. J. Phys. 86: 487.

Çelik, G. and Ateş, Ş. 2008 *Calculations of Transition Probabilities for Some Excited Levels of Na I.* Acta Phys. Pol. A 113: 1619.

Del Val, J.A., Aparicio, J.A., Gonzales, V.R., Mar, S. 2001 *Transition Probability Measurement of Several O II Spectral Lines.* J. Phys. B 34: 4531.

Desclaux, J.P. 1969 *Hartree-Fock-Slater Self Consistent Field Calculations.* Computer Physics Communications 1: 216.

Drake, G.W.F. 1972 *Radiative Transition Rate from the $2p3p\,^3P$ and $2p3d\,^{1,3}D$ States of the Helium Isoelectronic Sequence.* Phys. Rev. A 5: 2, 614.

Escalante,V., Victor, G.A. 1994 *Transition Probabilities and Photoionization of Neutral Atomic Oxygen.* At. Data Nucl. Data Tabl. 56: 2, 213.

Fan, J., Zheng, N.W. 2004 *Oscillator Strengths and Transition Probabilities for Mg-Like Ions.* Chem. Phys. Lett. 400: 273.

Fano, U. 1970 *Quantum defect Theory of I Uncoupling in H_2 as an Example of Channel-Interaction Treatment.* Phys. Rev. A 2: 353.

Fawcett, B. C. 1978 *Theoretical Oscillator Strengths for $2s^2 2p^n$-$2s2p^{n+1}$ and $2s2p^{n+1}$-$2p^{n+2}$Transitions and for $2s^2 2p^n$ "Forbidden" Transitions Be I, B I, C I, N I, O I Series, $Z \leq 26$.* Atomic Data and Nuclear Data Tables 22: 6, 473.

Fawcett, B. C. 1984 *Calculated Wavelengths and Oscillator Strengths for Be I, B II, C III, and N IV for n=2-2, 2-3, 3-3, and Other Transitions.* At. Data and Nucl. Data Tabl. 30: 423.

Fawcett, B. C. 1987 *Oscillator Strengths of Allowed Transitions for C I, N II, and O III.* At. Data Nucl. Data Tabl. 37: 411.

Fischer, C. F. 1988 *Accurate Oscillator Strengths*. Nuclear Instruments and methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 31:1, 265.

Fischer, C. F. 1994 *Transition Probabilities in O III.* Phys. Scr. 49: 51.

Fischer, C.F. 2002 The MCHF and MCDHF collection, Vanderbilt University, Nashville,TN http://www.vuse.vanderbilt.edu/»c®/mchf collection

Gaigalas, G. and Fischer C.F. 1996 *Extension of the HF Program to Partially Filled F-Subshells.* Comput. Phys. Commun. 98: 1-2, 255-264.

Glowacki, L., Migdalek, J. 2006 *Relativistic Configuration-Interaction Oscillator Strengths Calculations with Ab Initio Screened Model-Potential Wavefunctions.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39: 1721.

Goldbach, C., Nollez, G. 1994 *Oscillator Strength Measurements in the Vacuum-Ultraviolet. 5: Neutral Oxygen Lines in the 950-1200 A^o Range.* Astron. Astrophys. 284: 307.

Gonzalez-Ferez, R., Schmelcher, P. 2003 *Sodium in a Strong Magnetic Field.* European Physical Journal D 23: 2, 189.

Ham, F. S. 1955 in Seitz F. and Turnbull D. (ed), Solid State Physics, p.127 Academic Press, NewYork.

Hart, D.J. and Atkinson, J.B. 1986 *Lifetimes of Some Excited S and D States of Potassium.* J.Phys. B: At. Mol. Phys. 19: 43.

Hibbert, A. 1974 *Oscillator Strengths of Transitions in the Beryllium Sequence.* J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 7: 1417.

Hibbert, A. 1976 *Oscillator Strengths of Transitions Involving $2s3l^3L$ States in the Beryllium Sequence.* J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 9: 2805.

Hibbert, A., Biemont, E., Godefroid, M., Vaeck, N. 1991 *E1 Transitions of Astrophysical Interest in Neutral Oxygen.* J. Phys. B: At. Mol.Opt. Phys. 24: 3943.

Hibbert, A., Biemont, E., Godefroid, M., Vaeck, N. 1991 *New Accurate Transition Probabilities for Astrophysically Important Spectral Lines of Neutral Nitrogen.* Astron. Astroph. Suppl. Ser. 88: 3, 505.

Hilborn, R.C. 1982 *Einstein Coefficients, Cross Sections, f values, Dipol Moments, and all that.* Am. J. of Phys. 50: 982.

Ho, Y.K., Henry, R.J.W. 1983 *Oscillator Strengths and Collision Strengths for O II and O III.* Astrophys. J. 264: 733.

Ho, Y.K., Henry, R.J.W. 1984 *Oscillator Strengths for O II Ions.* J. Quant. Spectr. Rad. Trans. 31: 1, 57.

Hofsaess, D. 1989 *Theoretical Term Energies and Oscillator Strengths for Nitrogen and Oxygen.* J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 42: 1, 45.

Irving, R. E., Henderson, M., Curtis, L.J., Martinson, I., Bengtsson, P. 1999 *Accurate Transition Probabilities for the* $2s^2\ ^1S$ *-* $2s2p\ ^1P$ *Transition in Be I and B II.* Can. J. Phys. 77:137.

Irwin, D.J.G., Livingston, A.E., Kernahan, J.A. 1973 *Recent Lifetime Measurements for Oxygen, Fluorine and Neon in the Vacuum Ultraviolet.* Nucl.Instrum. Meth. 110: 105.

Jenkins, D.B. 1985 *Oscillator Strength of the 130-nm OI Triplet.* J. Quant. Radiat. Transfer 34: 1, 55.

Jönsson, P., Godefroid, M.R. 2000 *Theoretical Studies of Isotope Shifts, Hyperfine Structures and Oscillator Strengths in Transitions Between Low-lying Levels in O I* Mol. Phys. 98. 1141.

Kelly, H. P. 1964 *Many-Body Perturbation Theory Applied to Atoms.* Phys Rev. 136: 3B, B896.

King, F.W. 1991 *Radial Electronic Density Functions for Selected Low-Lying Excited 2S States of The Li I Isoelectronic Series.* Phys. Rev. A 44: 3350-3353.

Kono, A., Hattori, S. 1984 *Accurate Nonrelativistic Oscillator Strengths for P-D Transitions in the Helium Isoelectronic Sequence.* Phys. Rev. A 30: 2093.

Köksal, F., Gümüş, H. 1999. *Atom ve Molekül Fiziği*, Bilim Yayıncılık, Ankara.

Kundu, B. and Mukherje, P.K. 1984 *Time-Dependent Hartree-Fock Calculations for The Excited "S" States of Lithium Isoelectronic Sequence.* Theor.Chim. Acta 66: 173-181.

Kupliauskiene, A., Bogdanovich, P., Borovik, A. 2007 *Radiative transitions between lowest autoionizing states in sodium.* Lithuanian Journal of Physics 47: 1, 7.

Langhoff, S.R., Bauschlicher, C.W. and Patridge, H. 1985 *Theoretical Transition-Probabilities Between the Lowest 2S, 2P and 2D States of Na, K, Rb and Cs.* J. Phys. B: At. Mol. Phys. 18: 13.

Lavin, C., Barrientos, C. and Martin, I. 1992 *Quantum-Defect Studies of Transitions in the Diffuse spectral Series of the Potassium Isoelectronic Sequence.* J. Quant. Spect. Radiat. Transfer 47: 411.

Lavin, C., Martin, I., Karwowski, J. 1992 *Relativistic Effects on the Computation of Oscillator Strengths for the Principal Series in Na-like Systems.* Journal of Molecular Structure: Theochem 254: 161.

Lennon, D.J., Burke, V.M. 1991 private communication with Bell et al. 1991

Levine, I.N. 2000 *Quantum Chemistry* 5th ed. Prentice-Hall, Inc. New Jersey.

Lin, C.C., Irwin, D.J.G., Kernahan, J.A., Livingston, A.E., Pinnington, E.H. 1972 *Beam Foil Studies of Oxygen Below 2000 Å.* Can. J. Phys. 50: 2496.

Lindgrad, A. and Neilsen, S.E. 1975 *Numerical Approach to Transition Probabilities in the Coulomb Approximation: Be II and Mg II. Rydberg Series* Journal Physics B 8: 1183.

Lindgrad, A. and Neilsen, S.E. 1977 *Transition Probabilities for the Alkali Isoelectronic Sequences Li I, Na I, K I, Rb I,Cs I, Fr I Sequences.* Atomic Data and Nuclear Data Tables 19: 6, 533-633.

Lowe, R.M., Biemont, E. 1994 *Lifetime Measurements for the 4P(2)P(O) and 5P(2)P(O) Levels and Calculation of Transition-Probabilities in Na-I.* Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics 27: 11, 2161.

Luken, W.L., Sinanoglu, O. 1976 *Oscillator Strengths for Transitions Involving Excited States not Lowest of Their Symmetry Oxygen I and Oxygen II.* J. Chem. Phys. 64: 4, 1495.

Luo, D., Pradhan, A.K., Saraph, H. E., Storey, P. J., Yan Yu 1989 *Atomic Data for Opacity Calculations: X. Oscillator Strengths and Photoionization Cross Sections for O III.* J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys. 22: 389.

Ma, D.X., Zheng, N.W., Fan, J. 2005 *Variational Treatment on the Energy of the He-Sequence Ground State with Weakest Bound Electron Potential Model Theory.* Int. J. Quant. Chem. 105: 12-17.

Markiewicz, E., McEachran, R. P., Cohen, M. 1981 *The Polarized Frozen-Core Approximation: Oscillator Strengths for the Beryllium Isoelectronic Sequence.* Physica Scripta 23: 828.

Martin, I. and Simons, G. 1975 *New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals II. Atomic Photoionization Cross Sections.* J. Chem. Phys. 62: 4799.

Martin, I. and Simons, G. 1976 *New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals III. The Be Isoelectronic Sequence.* Mol. Phys. 32: 1017.

Martinson, I., Berry, H.G., Bickel, W.S., Oona, H. 1971 *Mean Lives of Excited Levels in O I–O VI* J. Opt. Soc. Am. 61: 519-523.

Martinson, I. 1989 *Time-resolved Studies of the Structure of Multiply Ionized, Complex Atoms.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Volumes 40-41 Part 1: 211.

Martin, I., Lavin, C. and Barrientos, C. 1991 *Systematic Trends Along the Potassium Sequence: Study of* $ns^2S - mp^2P^o$ *Transitions.* Can. J. Phys. 69: 1273.

Moccia, R., Spizzo, P. 1985 *One-photon Transition Probabilities and Photoionisation Cross Section Calculations of Be.* J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 18: 3537.

Moser, C. M., Nesbet, R. K., Gupta, M. N. 1976 *Variational Bethe-Goldstone Calculations of Atomic Oscillator Strengths. Be Sequence.* Phys. Rev A 13:1, 17.

Musielok, J., Bridges, J.M., Fuhr, J.R., Wiese, W.L. 2000 *Transition Probability Ratios for Selected Multiplets of C I, N I, and O I, and Comparisons with Recent Calculations.* Phys. Rev. A 61: 044502.

Nahar, S.N. 1998 *Photoionization Cross-Section and Oscillator Strengths for Oxygen Ions: O I- O VII.* Phys. Rev. A 58: 3766.

Okur, İ. 2000. *Atom ve Kuantum Fiziği,* Değişim Yayınları, Sakarya.

Pradhan, A.K., Saraph, H.E. 1977 *Oscillator Strengths for Dipole Transitions in Neutral Oxygen.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 10: 3365.

Pinnington, E.H., Irwin, D.J.G., Livingston, A.E., Kernahan, J.A. 1974 *Mean Life Measurements for Some Energy Levels of O I-O VI.* Can. J. Phys. 52: 1961.

Racah, G. 1942 *On a new Type of Vector Coupling in Complex Spectra.* Phys. Rev. 61: 537.

Rahmanattia, M., Jaouen, M., Laplanche, G. and Rachman, A. 1986 *An Application of the Quantum Defect Method-Oscillator Strengths and Photoionization Cross-Sections of Potassium.* J.Phys. B: At. Mol. Phys. 19: 6, 897.

Ralchenko,Y., Jou, F. C.,Kelleher,D. E., Kramida, A. E., Musgrove, A., Reader, J.,Wiese,W. L.,Olsen, K. 2007, *NIST Atomic Spectra Database* (version 3.0.1). URL: http://physics.nist.gov, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

Ryan, L.J., Rayburn, L.A., Cunningham, A.J. 1989 *Measurements of Oscillator Strengths for EUV Emissions of Ionized Oxygen, Nıtrogen and Sulfur.* J. Quant.Spectr. Rad. Trans. 42: 4, 295.

Robinson, D.J.R., Hibbert, A. 1997 *Quartet Transitions in Neutral Nitrogen,* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30: 21, 4813.

Saha, H. P., Fischer, C. F. 1987 *Multiconfiguration Hartree-Fock Calculations of the Oscillator Strength for the 2s2p $^1P^2$, 2snd ^1D(n=3-6) Transitions in Beryllium.* Phys Rev. A 35: 5240.

Samson, J.R., Petrosky, V.E. 1974 *Continuum Ionization Transition Probabilities of Atomic Oxygen.* Phys. Rev. A 9: 2449.

Sarandaev, E. V., Konovalova, O. A., Salakhov, M. K. 1997 *Regularities in the Distribution of oscillator Strengths of Lines in Spectra of Group II Atoms: Be I, Mg I, and Ca I.* J. Quant. Spect. Radiat. Trans. 57: 2, 281.

Saraph, H. E., Seaton, M. J. 1980 *Oscillator-Strengths for O-III and The Bowen Fluorescent Mechanism.* Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 193: 2, 617.

Savukov, I. M., Johnson, W. R. 2002 *Combined Configuration-Interaction and Many-Body-Perturbation-Theory Calculations of Energy Levels and Transition Amplitudes in Be, Mg, Ca, and Sr.* Phys Rev. A 65: 4, 042503.

Schiff, B., Pekeris, C.L., Accad, Y. 1971 *f Values for Transitions between the Low-Lying S and P States of the helium Isoelectronic Sequence up to Z=10.* Phys. Rev. A 4: 3, 885.

Seaton, M. J. 1958 *The Quantum Defect Method.* Mon. Not. R. Astron. Soc. 118:504.

Siegel, W., Migdalek, J., Kim, Y.K. 1998 *Dirac-Fock Oscillator Strengths for E1 Transitions in the Sodium Isoelectronic Sequence (Na I-Ca X).* Atomic Data and Nuclear Data Tables 68: 2, 303.

Simons, G. 1974 *New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals I. Atomic Oscillator Strengths.* J. Chem. Phys. 60: 645.

Sobelman, I.I. 1996 *Atomic Spectra and Radiative Transitions,* Springer Series in Chemical Physics 1 Berlin.

Solarski, J.E., Wiese, W.L. 1964 *Experimental Transition Probabilities for Six Oxygen Multiplets.* Phys. Rev. 135: 5A, A1236.

Sreckovic, A., Drincic, V., Bukvic, S., Djenize, S. 2001 *Stark Broadening Parameters and Transition Probabilities in the O II.* Spectrum Phys. Scr. 63: 306.

Sreckovic, A., Drincic, V., Bukvic, S., Djenize, S. 2002 *Measured Transition Probabilities in the O II Higher Multiplets.* Phys. Scr. 65: 359.

Suskin, M.A., Weiss, A.W. 1989 private communication to Hibbert et al. 1991.

Tachiev, G., Fischer, C. F. 1999 J. Phys. B 32: 5805.

Tachiev, G., Fischer, C. F. 2001 *Breit-Pauli Energy Levels and Transition Rates for the Carbonlike Sequence.* Can. J. Phys. 79: 955.

Tachiev, G., Fischer, C. F. 2002 *Breit-Pauli Energy levels and Transition Rates for Nitrogen-Like and Oxygen-like Sequences.* Astron. Astrophys. 385: 716.

Tayal, S.S., Henry, R.J.W. 1989 *Oscillator Strengths and Electron Collisional Excitation cross Sections for Atomic Oxygen.* Phys. Rev. A 39: 4531-4536.

Tayal, S.S., Richardson, L.M. 2000 *Oscillator Strengths and Inelastic Scattering of Electrons From O II.* J. Phys. B 33: 3, 443.

Tektunalı, H.G. ve Kuli-Zade, C.F. 1995. *Atom Spektroskopisinin Temelleri,* İstanbul Üniv. Basımevi, İstanbul.

Theodosiou, C.E. 1984 *Lifetimes of Alkali-Metal–Atom Rydberg States.* Physical Review A 30: 2881.

Theodosiou, C.E. 1985 *Lifetimes of the Singly Excited States in Li II.* Phys. Scr. 32: 129.

Thewlis, J. 1961. *Encylopedic Dictionary of Physics,* Vol. 2, p. 60 Pergamon Press, Oxford.

Tong, M., Fischer, C.F., Sturesson, L. 1994 *Systematic Transition Probability Studies for Neutral Nitrogen.* J. Phys. B: At. Mol.Opt. Phys. 27: 4819.

Villoresi, P., Bidoli, P., Nicolosi, P. 1997 *Absorption Spectra and Oscillator Strength Ratio Measurements from Dn=1 Transitions from Excited Levels od Be I and Be II.* J. Quant. Spect. Radiat. Trans. 57: 847.

Viswanath, M.B. and Sen, K.D. 1989 *Density Functional Theory Calculations of One Electron Rydberg States in Li Atom.* Theor. Chim. Acta 76: 373-375.

Weisheit, J.C. and Dalgarno, A. 1971 *Model Potential Calculations of Sodium and Potassium Oscillator Strengths.* Chem. Phys. Lett. 9: 6, 517.

Wiese, W.L., Smith, M.W., Glennon, B. 1996. *Atomic Transition Probabilities, NSRDS-NBS 4* US Government Printing Office Washington, D.C.

Wiese, W. L. 2006 Atomic transition probabilities (Web Version 2.0). [Online] Available:URL:http://physics.nist.gov/PhysRefData/datarefs/IAU/WG2/report2.html National Instituteof Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

Zhang, T.Y., Zheng, N.W. and Ma, D.X. 2009 *Theoretical Calculations of Transition Probabilities and Oscillator Strengths for Ti III and Ti IV* International Journal of Quantum Chemistry 109:145-159.

Zheng, N.W. 1977 A *New Empirical Formule About Calculation of Ionization Potential.* Chinese Science Bulletin 22: 531-535.

Zheng, N.W. 1986 *A New Theoretical Model for Many-Electron Atom and Ion Systems I.* Chinese Science Bulletin, 31: 1238-1242.

Zheng, N.W. 1987 A New *Theoretical Model For Many-Electron Atom and Ion Systems II.* Chinese Science Bulletin, 32 1263-1267.

Zheng, N.W. and Xin, H.W. 1991 *Succesive Ionization Potentials of $4f^n$ Electrons within WBEPM Theory.* Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 24: 6, 1187-1191.

Zheng, N.W. and Li, G.S. 1994 *Electronegativity - Average Nuclear-Potential of The Valence Electron.* J. Phys Chem-Us 98 (15): 3964-3966.

Zheng, N.W., Wang. T., Zhou, T., Sun, Y.J., Su, Y. and Zhang, Y. 1999 *Study of Transition Probability of Low States of Alkali Metal Atoms with WBEPM Theory.* Journal of The Physical Society of Japan 68: 3859-3862.

Zheng, N.W., Ma, D.X., Yang, R., Zhou, T., Wang. T. and Han, S. 2000-a *An Efficient Calculation of The Energy Levels of The Carbon Group.* Journal of Chemical Physics 113: 5, 1681-1687.

Zheng, N.W., Sun, Y.J., Wang. T., Ma, D.X., Zhang, Y. and Su, W. 2000-b *Transition Probability of Lithium Atom and Lithiumlike Ions With Weakest Bound Electron Wave Functions and Coupled Equations.* International Journal of Quantum Chemistry 76: 51-61.

Zheng, N.W., Wang. T. and Yang, R. 2000-c *Transition Probability of Cu I, Ag I and Au I from Weakest Bound Electron Potential Model Theory.* Journal of Chemical Physics 113: 15, 6169.

Zheng, N.W., Zhou, T., Yang, R., Wang. T. and Ma, D.X. 2000-d *Analysis of Bound Odd-Parity Spectrum of Krypton by Weakest Bound Electron Potential Model Theory.* Chemical Physics 258: 37-46.

Zheng, N.W., Wang, T., Yang, R., Wu, Y.G. 2000-e *Theoretical Calculation of Transition Probability for N Atom and Ions.* J. Chem. Phys.112: 16, 7042.

Zheng, N.W., Sun, Y.J., Ma, D.X., Yang, R., Zhou, T. and Wang. T. 2001-a *Theoretical Study on Regularity of Changes in Quantum Defects in Rydberg State Series of Many-Valence Electron Atoms within WBEPM Theory.* International Journal of Quantum Chemistry 81: 232-237.

Zheng N.W., Wang T., Yang R., Zhou T., Ma D.X., Wu, Y.G. and Xu H.T. 2001-b *Transition Probabilities For Be I, Be Ii, Mg I, and Mg II.* Atomic Data and Nuclear Data Tables 79:1, 109-141(33).

Zheng N.W., Wang T., Ma D.X. and Zhou T. 2001-c *Calculation of Transition Probability for C (I-IV).* J. Opt. Soc. Am. B 18: 1395-1409.

Zheng, N. W., Wang, T.,Yang, R. Y., Zhou, T., Ma, D.X.,Wu, Y. G., Xu, H. T. 2001-d *Transition Probabilities Be I, Be II, Mg I, and Mg II.* At. Data and Nucl. Data Tabl. 79: 1, 109.

Zheng, N.W., Wang, T. 2002-a *Theoretical Resonance Transition Probabilities and Lifetimes for Atomic Hydrogen.* Chem. Phys. 282: 1, 31.

Zheng, N.W., Wang, T., Zhou, T., Ma, D.X. 2002-b *Theoretical Study of Transition Probability for Oxygen Atom and Ions.* J. Phys. Soc. Jpn 71: 1672.

Zheng, N.W., Wang. T. 2003 *Transition Probabilities for Ne II* Spectrochimica Acta Part B 58: 1319-1324.

Zheng, N.W. and Wang, T. 2004-a *Calculation of Excited-State Ionization Potential for Boron-Like Sequence.* Int. J. Quant. Chem. 98: 495.

Zheng, N.W., Li, Z., Ma, D.X., Zhou, T. and Fan, J. 2004-b *Theoretical Study of Energy Levels of Atomic Ga.* Canadian Journal of Physics 82: 523-529.

Zheng, N.W., Wang. T., Ma, D.X., Zhou, T. and Fan, J. 2004-c *Weakest Bound Electron Potential Model Theory.* Int. J.Quant. Chem. 98: 281-290.

Ek A: WBEPM teori kullanılarak Azot atomunda elde edilen parametreler ve geçiş olasılığı sonuçları

Çizelge 4.1. Azot atomunda NCA ve NRHF metotları kullanılarak elde edilen parametreler (Çelik ve Ateş 2008)

Seviye	n	l	NCA		NRHF		Enerji (cm^{-1})
			d	Z^*	d	Z^*	Ralchenko ve ark. (2007)
$2p^2\,(^3P)3s\ ^4P$	3	0	-1.165497	1.019477	-1.026685	1.096618	33890.102
$2p^2\,(^3P)3s\ ^4P_{1/2}$	3	0	-1.166581	1.019649	-1.025417	1.098157	33941.63
$2p^2\,(^3P)3s\ ^4P_{3/2}$	3	0	-1.165871	1.019536	-1.026248	1.097149	33907.87
$2p^2\,(^3P)3s\ ^4P_{5/2}$	3	0	-1.164886	1.019380	-1.027399	1.095752	33861.08
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4S$	3	1	-0.967354	0.878000	-0.987073	0.869483	20474.86
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	3	1	-0.967354	0.878000	-0.987073	0.869483	20474.86
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4P$	3	1	-1.057978	0.863903	-0.914685	0.927647	21715.843
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4P_{1/2}$	3	1	-1.060374	0.863523	-0.912676	0.929278	21750.39
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4P_{3/2}$	3	1	-1.059100	0.863725	-0.913745	0.928410	21732.01
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4P_{5/2}$	3	1	-1.056428	0.864149	-0.915981	0.926594	21693.55
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4D$	3	1	-1.103459	0.856627	-0.942736	0.929222	22387.919
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4D_{1/2}$	3	1	-1.107858	0.855916	-0.939026	0.932288	22454.82
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4D_{3/2}$	3	1	-1.106374	0.856156	-0.940279	0.931251	22432.21
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4D_{5/2}$	3	1	-1.103913	0.856554	-0.942354	0.929538	22394.81
$2p^2\,(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	3	1	-1.100550	0.857096	-0.945180	0.927205	22343.88
$2p^2\,(^3P)4s^4P$	4	0	-1.134515	1.006234	-1.061183	1.031985	13531.82
$2p^2\,(^3P)4s^4P_{1/2}$	4	0	-1.140992	1.006603	-1.054343	1.037111	13603.19
$2p^2\,(^3P)4s^4P_{3/2}$	4	0	-1.136948	1.006372	-1.058622	1.033903	13558.54
$2p^2\,(^3P)4s^4P_{5/2}$	4	0	-1.130711	1.006020	-1.065172	1.028999	13490.22
$2p^2\,(^3P)4p^4P$	4	1	-0.915302	0.940991	-0.837940	0.964590	10211.742
$2p^2\,(^3P)4p^4P_{1/2}$	4	1	-0.921791	0.940549	-0.831999	0.967985	10245.22
$2p^2\,(^3P)4p^4P_{3/2}$	4	1	-0.918781	0.940754	-0.834758	0.966408	10229.668
$2p^2\,(^3P)4p^4P_{5/2}$	4	1	-0.910800	0.941297	-0.842043	0.962247	10188.631

Çizelge 4.1. Devamı

Seviye	n	l	NCA		NRHF		Enerji (cm^{-1})
			d	Z^*	d	Z^*	Ralchenko ve ark. (2007)
$2p^2\,(^3P)4p\,^4D$	4	1	-0.951765	0.938506	-0.866069	0.964891	10402.368
$2p^2\,(^3P)4p\,^4D_{1/2}$	4	1	-0.963857	0.937681	-0.854953	0.971315	10466.969
$2p^2\,(^3P)4p\,^4D_{3/2}$	4	1	-0.960201	0.937931	-0.858325	0.969365	10447.363
$2p^2\,(^3P)4p\,^4D_{5/2}$	4	1	-0.953433	0.938930	-0.864541	0.965773	10411.241
$2p^2\,(^3P)4p\,^4D_{7/2}$	4	1	-0.943206	0.939090	-0.873873	0.960390	10357.065
$2p^2\,(^3P)4p\,^4S$	4	1	-0.828160	0.946902	-0.909403	0.922648	9780.078
$2p^2\,(^3P)4p\,^4S_{3/2}$	4	1	-0.828160	0.946902	-0.909403	0.922648	9780.078
$2p^2\,(^3P)5s\,^4P$	5	0	-1.122025	1.003044	-1.078360	1.014338	7341.491
$2p^2\,(^3P)5s\ ^4P_{1/2}$	5	0	-1.38945	1.003551	-1.060930	1.023828	7413.467
$2p^2\,(^3P)5s\ ^4P_{3/2}$	5	0	-1.128571	1.003237	-1.071652	1.017987	7369.18
$2p^2\,(^3P)5s\ ^4P_{5/2}$	5	0	-1.111900	1.002751	-1.088652	1.008747	7299.039
$2p^2\,(^3P)5p\ ^4P$	5	1	-0.834685	0.967605	-0.817246	0.971656	5921.82
$2p^2\,(^3P)5p\ ^4P_{1/2}$	5	1	-0.848169	0.967098	-0.804571	0.977254	5954.104
$2p^2\,(^3P)5p\ ^4P_{3/2}$	5	1	-0.842317	0.967318	-0.810085	0.974817	5940.056
$2p^2\,(^3P)5p\ ^4P_{5/2}$	5	1	-0.825034	0.967969	-0.826253	0.967686	5898.902
$2p^2\,(^3P)5p\ ^4D$	5	1	-0.872337	0.966193	-0.840934	0.973544	6012.758
$2p^2\,(^3P)5p\ ^4D_{1/2}$	5	1	-0.900389	0.965147	-0.814340	0.985405	6082.133
$2p^2\,(^3P)5p\ ^4D_{3/2}$	5	1	-0.891720	0.965469	-0.822610	0.981711	6060.542
$2p^2\,(^3P)5p\ ^4D_{5/2}$	5	1	-0.875979	0.966057	-0.837509	0.975068	6021.684
$2p^2\,(^3P)5p\ ^4D_{7/2}$	5	1	-0.852619	0.966931	-0.859346	0.965363	5964.827

Çizelge 4.2. Azot atomunda bazı uyarılmış seviyeler arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları (Çelik ve Ateş 2008)

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma (NCA)	Bu Çalışma (NRHF)	NIST* Değerleri (Wiese 2006)
		i	s						
$2s^2 2p^2(^3P)3s$	$2s^2 2p^2(^3P)3p$	^4P	^4P	8214.05	12	12	3.21e-01	3.79e-01	3.10e-01[B+]
				8187.111	4	6	9.7e-02	1.14e-01	8.58e-02[B+]
				8190.263	2	4	1.34e-01	1.59e-01	1.27e-01[B+]
				8202.611	2	2	5.3e-02	6.3e-02	4.95e-02[B+]
				8212.98	4	4	4.29e-02	5.05e-02	4.84e-02[B+]
				8218.60	6	6	2.25e-01	2.65e-01	2.23e-01[B+]
				8225.40	4	2	2.67e-01	3.14e-01	2.64e-01[B+]
				8244.66	6	4	1.43e-01	1.68e-01	1.36e-01[B+]
$2s^2 2p^2(^3P)3s$	$2s^2 2p^2(^3P)3p$	^4P	^4D	8694.00	12	20	2.74e-01	3.22e-01	2.47e-01[B+]
				8682.666	6	8	2.75e-01	3.23e-01	2.46e-01[B+]
				8721.232	6	6	8.17e-02	9.58e-02	6.75e-02[B+]
				8749.771	6	4	1.34e-02	1.58e-02	1.04e-02[B+]
				8685.788	4	6	1.92e-01	2.26e-01	1.86e-01[B+]
				8714.096	4	4	1.45e-01	1.70e-01	1.28e-01[B+]
				8731.298	4	2	4.51e-02	5.30e-02	3.76e-02[B+]
				8688.535	2	4	1.14e-01	1.34e-01	1.09e-01[B+]
				8705.637	2	2	2.27e-01	2.67e-01	2.10e-01[B+]
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	$2s^2 2p^2(^3P)4s$	^4P	^4P	12218.9	12	12	6.55e-02	7.52e-02	9.62e-02[B]
				12190.17	6	6	4.5e-02	5.32e-02	7.11e-02 [B]
				12292.55	6	4	2.94e-02	3.31e-02	3.76e-02[B]
				12133.29	4	6	1.9e-02	2.31e-02	2.95e-02[B]
				12234.711	4	4	8.7e-03	9.9e-03	1.52e-02[B]
				12301.91	4	2	5.4e-02	6.10e-02	7.41e-02[B]
				12207.26	2	4	2.73e-02	3.13e-02	4.08e-02[B]
				12274.16	2	2	1.09e-02	1.22e-02	1.43e-02[B]
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	$2s^2 2p^2(^3P)4s$	^4D	^4P	11291.7	20	12	1.12e-01	1.35e-01	1.35e-01[B]
				11294.76	8	6	8.95e-02	1.08e-01	1.08e-01[B]
				11230.16	6	6	2.01e-02	2.48e-02	2.09e-02[B]
				11316.99	6	4	7.10e-02	8.44e-02	9.02e-02[B]
				11183.19	4	6	2.24e-03	2.19e-03	2.01e-03[C+]
				11269.29	4	4	3.61e-02	4.34e-02	4.13e-02[B]
				11326.281	4	2	5.66e-02	6.65e-02	7.36e-02[B]
				11240.66	2	4	5.64e-03	6.83e-03	6.00e-03[B]
				11297.35	2	2	5.67e-02	6.70e-02	6.92e-02[B]

* NIST deki doğruluk aralıkları : $B+ \le 7\%$, $B \le 10\%$, $C+ \le 18\%$

Çizelge 4.2. Devamı

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma (NCA)	Bu Çalışma (NRHF)	NIST* Değerleri (Wiese 2006)
		i	s						
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	$2s^2 2p^2(^3P)4s$	^4S	^4P	14402.9	4	12	1.93e-02	1.55e-02	1.24e-02[C]
				14317.13	4	6	1.93e-02	1.58e-02	1.33e-02[C]
				14458.55	4	4	1.92e-02	1.52e-02	1.18e-02[C]
				14552.51	4	2	1.90e-02	1.40e-02	1.10e-02[C]
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	$2s^2 2p^2(^3P)5s$	^4S	^4P	7614.19	4	12	7.51e-03	7.05e-03	6.94e-03[D+]
				7589.660	4	6	7.6e-03	7.24e-03	7.01e-03[D+]
				7630.280	4	4	7.4e-03	6.90e-03	6.90e-03[D+]
				7656.151	4	2	7.31e-03	6.73e-03	6.83e-03[D+]
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	$2s^2 2p^2(^3P)6s$	^4S	^4P	6294.33	4	12	5.17 e-03	5.08e-03	3.72e-03[D+]
				6277.248	4	6	5.2e-03	4.71e-03	3.75e-03[D+]
				6305.658	4	4	5.0e-03	4.7e-03	3.70e-03[D+]
				6323.259	4	2	4.9e-03	4.6e-03	3.67e-03[D+]
$2s^2 2p^2(^3P)4s$	$2s^2 2p^2(^3P)4p$	^4P	^4D	31954	12	20	3.24e-02	3.41e-02	3.06e-02[D+]
				31916.7	6	8	3.27e-02	3.42e-02	3.07e-02[D+]
				32478.3	6	6	9.36e-03	9.74e-03	8.74e-03[D+]
				32863.9	6	4	1.51e-03	1.56e-03	1.41e-03[D+]
				31773.3	4	6	2.3e-02	2.42e-02	2.18e-02[D+]
				32142.2	4	4	1.7e-02	1.78e-02	1.60e-02[D+]
				32346.0	4	2	5.22e-03	5.47e-03	4.92e-03[D+]
				31687.4	2	4	1.37e-02	1.45e-02	1.31e-02[D+]
				31885.5	2	2	2.70e-02	2.85e-02	2.57e-02[D+]
$2s^2 2p^2(^3P)4s$	$2s^2 2p^2(^3P)4p$	^4P	^4S	26654	12	4	5.06e-02	5.81e-02	4.14e-02[D+]
				26953.1	6	4	2.47e-02	2.81e-02	2.00e-02[D+]
				26465.8	4	4	1.71e-02	1.98e-02	1.41e-02[D+]
				26156.7	2	4	8.75e-03	1.02e-02	7.29e-03[D+]
$2s^2 2p^2(^3P)5s$	$2s^2 2p^2(^3P)5p$	^4P	^4D	75260	12	20	8.07e-03	8.31e-03	7.07e-03[D+]
				74950.6	6	8	8.20e-03	8.43e-03	7.15e-03[D+]
				78286.8	6	6	2.2e-03	2.21e-03	1.88e-03[D+]
				80743.0	6	4	3.38e-04	3.35e-04	2.86e-04[D+]
				74211.7	4	6	5.83e-03	6.06e-03	5.16e-03[D+]
				76415.3	4	4	4.12e-03	4.22e-03	3.60e-03[D+]
				77697.2	4	2	1.23e-03	1.25e-03	1.07e-03[D+]
				73913.9	2	4	3.48e-03	3.64e-03	3.11e-03[D+]
				75112.6	2	2	6.68e-03	6.94e-03	5.92e-03[D+]

*NIST deki doğruluk aralıkları: $C \leq 25\%$, $D+ \leq 40\%$

EK B: Berilyum atomu için WBEPM teori ve ODO teori kullanılarak hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

Çizelge 4.3. Berilyum atomu için izinli geçişler arasındaki osilatör şiddetleri

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma		Tachiev ve Fischer (1999)	Chang ve Tang (1990)	Chen (1998)	Moccia ve Spizzo (1985)	Markiewicz ve ark. (1981)
					WBEPMT	QDOT					
2s(1)2p(1)	**2s(1)3s(1)**	**P3 S3**	**3**	**1**	**6.76E-02***	**9.68E-02**	**8.269E-02**				
			1	1	6.76E-02*	9.68E-02	8.270E-02				
			2	1	6.76E-02*	9.68E-02	8.26E-02				
			0	1	6.76E-02*	9.68E-02	9.269E-02				
2s(1)2p(1)	**2s(1)3s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**1.34E-01**	**1.55E-01**	**1.193E-01**	**0.122**	**0.118**	**0.1199**	**0.140**
			1	0	1.34E-01	1.55E-01	1.193E-01				
2s(1)2p(1)	**2s(1)4s(1)**	**P3S3**	**3**	**1**	**1.14E-02***	**1.39E-02**	**1.161E-02**				
			1	1	1.14E-02*	1.39E-02	1.161E-02				
			2	1	1.14E-02*	1.39E-02	1.161E-02				
			0	1	1.14E-02*	1.39E-02	1.161E-02				
2s(1)2p(1)	**2s(1)4s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**1.02E-02**	**1.07E-02**	**9.701E-03**	**0.0098**	**0.00982**	**0.01**	**0.0107**
			1	0	1.02E-02	1.07E-02	9.701E-03				
2s(1)2p(1)	**2s(1)5s(1)**	**P3S3**	**3**	**1**	**4.18E-03***	**4.96E-03**	**4.096E-03**				
			1	1	4.18E-03*	4.96E-03	4.089E-03				
			2	1	4.18E-03*	4.96E-03	4.101E-03				
			0	1	4.18E-03*	4.96E-03	4.094E-03				
2s(1)2p(1)	**2s(1)5s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**3.22E-03**	**3.34E-03**	**3.520E-03**	**0.0036**	**0.00362**	**0.0037**	**0.033**
			1	0	3.22E-03	3.34E-03	3.520E-03				
2s(1)2p(1)	**2s(1)6s(1)**	**P3S3**	**3**	**1**	**2.03E-03***	**2.40E-03**	**1.961E-03**				
			1	1	2.03E-03*	2.40E-03	1.958E-03				
			2	1	2.03E-03*	2.40E-03	1.963E-03				
			0	1	2.03E-03*	2.40E-03	1.960E-03				
2s(1)2p(1)	**2s(1)6s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**1.48E-03**	**1.52E-03**	**1.862E-03**	**0.0019**	**0.00196**	**0.0019**	**0.0017**
			1	0	1.48E-03	1.52E-03	1.862E-03				
2s(1)2p(1)	**2s(1)3d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**2.64E-01***	**2.60E-01**	**2.957E-01**	**0.294**			
			0	1	2.64E-01*	2.60E-01	2.954E-01				
			1	1	6.61E-02*	6.50E-02	7.390E-02				
			1	2	1.98E-01*	1.95E-01	2.217E-01				
			2	1	2.64E-03*	2.60E-03	2.961E-03				
			2	2	3.96E-02*	3.90E-02	4.441E-02				
			2	3	2.22E-01*	2.18E-01	2.484E-01				

Çizelge 4.3. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma		Tachiev ve Fischer (1999)	Chang ve Tang (1990)	Chen (1998)	Moccia ve Spizzo (1985)	Markiewicz ve ark. (1981)
					WBEPMT	QDOT					
2s(1)2p(1)	**2s(1)4d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**9.32E-02***	**8.86E-02**	**9.574E-02**	**0.096**			**0.091**
			1	1	2.33E-02*	2.21E-02	2.394E-02				
			1	2	6.99E-02*	6.64E-02	7.183E-02				
			2	1	9.32E-04*	8.86E-04	9.583E-04				
			2	2	1.40E-02*	1.33E-02	1.438E-02				
			2	3	7.83E-02*	7.44E-02	8.04E-02				
			0	1	9.32E-02*	8.86E-02	9.574E-02				
2s(1)2p(1)	**2s(1)4d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**1.63E-01***	**1.42E-01**	**1.756E-01**	**0.178**	**0.174**	**0.1769**	**0.121**
			1	2	1.63E-01*	1.42E-01	1.756E-01				
2s(1)2p(1)	**2s(1)5d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**4.39E-02***	**4.09E-02**	**4.328E-02**	**0.043**			**0.041**
			1	1	1.10E-02*	1.02E-02	1.082E-02				
			1	2	3.29E-02*	3.06E-02	3.245E-02				
			2	1	4.39E-04*	4.09E-04	4.329E-04				
			2	2	6.58E-03*	6.13E-03	6.494E-03				
			2	3	3.69E-02*	3.43E-02	3.636E-02				
			0	1	4.39E-02*	4.09E-02	4.325E-02				
2s(1)2p(1)	**2s(1)5d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**5.66E-02***	**6.09E-02**	**8.382E-02**	**0.085**	**0.0828**	**0.0848**	**0.050**
			1	2	5.66E-02*	6.09E-02	8.382E-02				
2s(1)2p(1)	**2s(1)6d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**2.43E-02***	**2.23E-02**	**2.337E-02**	**0.023**			**0.022**
			1	1	6.07E-03*	5.58E-03	5.843E-03				
			1	2	1.82E-02*	1.67E-02	1.753E-02				
			2	1	2.43E-04*	2.23E-04	2.338E-04				
			2	2	3.64E-03*	3.35E-03	3.507E-03				
			2	3	2.04E-02*	1.87E-02	1.963E-02				
			0	1	2.43E-02*	2.23E-02	2.337E-02				
2s(1)2p(1)	**2s(1)6d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**3.00E-02**	**3.69E-02**	**4.624E-02**	**0.047**	**0.0456**	**0.0473**	**0.026**
			1	2	3.00E-02	3.69E-02	4.624E-02				
2s(1)2p(1)	**2s(1)7d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**1.49E-02***	**1.36E-02**	**1.411E-02**	**0.014**			**0.014**
			1	1	3.73E-03*	3.39E-03	3.527E-03				
			1	2	1.12E-02*	1.02E-02	1.058E-02				
			2	1	1.49E-04*	1.36E-04	1.411E-04				
			2	2	2.23E-03	2.67E-03	2.551E-03				
			0	1	1.49E-02*	1.36E-02	1.411E-02				

Çizelge 4.3. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma		Tachiev ve Fischer (1999)	Chang ve Tang (1990)	Chen (1998)	Moccia ve Spizzo (1985)	Markiewicz ve ark. (1981)
					WBEPMT	QDOT					
2s(1)2p(1)	**2s(1)7d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**1.80E-02**	**2.41E-02**	**2.824E-02**	**0.029**	**0.0279**		**0.015**
			1	2	1.80E-02	2.41E-02	2.824E-02				
2s(1)2p(1)	**2s(1)8d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**9.82E-03***	**8.86E-03**	**9.190E-03**	**0.092**			
			1	1	2.46E-03*	2.21E-03	2.298E-03				
			1	2	7.37E-03*	6.64E-03	6.892E-03				
			2	1	9.82E-05*	8.86E-05	9.195E-05				
			2	2	1.47E-03*	1.33E-03	1.379E-03				
			2	3	8.25E-03*	7.44E-03	7.720E-03				
			0	1	9.82E-03*	8.86E-03	9.190E-03				
2s(1)2p(1)	**2s(1)8d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**1.16E-02**	**1.65E-02**	**1.854E-02**	**0.019**	**0.0183**		**0.010**
			1	2	1.16E-02	1.65E-02	1.854E-02				
2s(1)3p(1)	**2s(1)4s(1)**	**P3S3**	**3**	**1**	**2.20E-01***	**2.59E-01**	**2.165E-01**	**2.17E-01**	**2.15E-01**	**2.14E-01**	**2.01E-01**
			1	1	2.20E-01*	2.59E-01	2.165E-01				
			2	1	2.20E-01*	2.59E-01	2.165E-01				
			0	1	2.20E-01*	2.59E-01	2.164E-01				
2s(1)3p(1)	**2s(1)4s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**2.03E-01**	**2.49E-01**	**2.095E-01**	**0.213**	**0.209**	**0.2098**	**0.267**
			1	0	2.03E-01	2.49E-01	2.095E-01				
2s(1)3p(1)	**2s(1)5s(1)**	**P3S3**	**3**	**1**	**2.31E-02**	**2.67E-02**	**2.324E-02**	**2.30E-02**	**2.33E-02**	**2.35E-02**	**2.30E-02**
			1	1	2.31E-02	2.67E-02	2.324E-02				
			2	1	2.31E-02	2.67E-02	2.325E-02				
			0	1	2.31E-02	2.67E-02	2.325E-02				
2s(1)3p(1)	**2s(1)5s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**2.47E-02***	**2.67E-02**	**2.429E-02**	**0.025**	**0.0243**	**0.0245**	**0.022**
			1	0	2.47E-02*	2.67E-02	2.429E-02				
2s(1)3p(1)	**2s(1)6s(1)**	**P3S3**	**3**	**1**	**8.04E-03**	**8.84E-03**	**7.897E-03**	**0.0080**	**0.0792**	**0.0080**	**0.0077**
			1	1	8.04E-03	8.84E-03	7.898E-03				
			2	1	8.04E-03	8.84E-03	7.896E-03				
			0	1	8.04E-03	8.84E-03	7.899E-03				
2s(1)3p(1)	**2s(1)6s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**8.23E-03**	**8.70E-03**	**8.539E-03**	**0.0087**	**0.00857**	**0.0087**	**0.073**
			1	0	8.23E-03	8.94E-03	8.539E-03				

Çizelge 4.3. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma		Tachiev ve Fischer (1999)	Chang ve Tang (1990)	Chen (1998)	Moccia ve Spizzo (1985)	Markiewicz ve ark. (1981)
					WBEPMT	QDOT					
2s(1)3p(1)	**2s(1)7s(1)**	**P3S3**	**3**	**1**	**3.89E-03**	**3.90E-03**	**3.789E-03**	**0.0038**	**0.00380**	**0.0038**	**0.0037**
			1	1	3.89E-03	3.90E-03	3.790E-03				
			2	1	3.89E-03	3.90E-03	3.789E-03				
			0	1	3.89E-03	3.90E-03	3.790E-03				
2s(1)3p(1)	**2s(1)7s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**3.97E-03**	**4.24E-03**	**4.195E-03**	**0.0042**	**0.00423**		**0.0033**
			1	0	3.97E-03	4.24E-03	4.195E-03				
2s(1)3p(1)	**2s(1)8s(1)**	**P3S3**	**3**	**1**	**2.23E-03**	**2.14E-02**	**2.154E-03**	**2.22E-03**	**2.16E-03**		**2.00E-03**
			1	1	2.23E-03	2.14E-02	2.155E-03				
			2	1	2.23E-03	2.14E-02	2.154E-03				
			0	1	2.23E-03	2.14E-02	2.155E-03				
2s(1)3p(1)	**2s(1)8s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**2.26E-03**	**2.39E-03**	**2.430E-03**	**0.0024**	**0.00247**		**0.002**
			1	0	2.26E-03	2.39E-03	2.430E-03				
2s(1)3p(1)	**2s(1)9s(1)**	**P1S1**	**1**	**0**	**1.42E-03**	**1.49E-03**	**1.553E-03**				
			1	0	1.42E-03	1.49E-03	1.553E-03				
2s(1)3p(1)	**2s(1)3d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**5.22E-01**	**5.59E-01**	**4.989E-01**	**0.501**			**0.570**
			1	1	1.31E-01	1.40E-01	1.248E-01				
			1	2	3.92E-01	4.20E-01	3.742E-01				
			2	1	5.22E-03	5.59E-03	4.990E-03				
			2	2	7.83E-02	8.39E-02	7.481E-02				
			2	3	4.39E-01	4.70E-01	4.189E-01				
			0	1	5.22E-01	5.59E-01	4.994E-01				
2s(1)3p(1)	**2s(1)3d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**8.64E-01***	**7.42E-01**	**6.878E-01**	**0.689**	**0.687**	**0.7010**	**0.289**
			1	2	8.64E-01*	7.42E-01	6.878E-01				
2s(1)3p(1)	**2s(1)4d(1)**	**P3D3**	**2**	**1**	**1.03E-03***	**1.39E-03**	**1.326E-03**				
			2	2	1.54E-02*	2.08E-02	1.992E-02				
			2	3	8.65E-02*	1.17E-01	1.115E-01				
			0	1	1.03E-01*	1.39E-01	1.323E-01				
2s(1)3p(1)	**2s(1)4d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**9.96E-03**	**5.47E-02**	**1.730E-02**	**0.018**	**0.0180**	**0.0144**	**0.270**
			1	2	9.96E-03	5.47E-02	1.730E-02				

Çizelge 4.3. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma		Tachiev ve Fischer (1999)	Chang ve Tang (1990)	Chen (1998)	Moccia ve Spizzo (1985)	Markiewicz ve ark. (1981)
					WBEPMT	QDOT					
2s(1)3p(1)	**2s(1)5d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**4.78E-02***	**6.00E-02**	**5.720E-02**	**0.057**			**0.046**
			1	1	1.19E-02*	1.50E-02	1.428E-02				
			1	2	3.58E-02*	4.50E-02	4.288E-02				
			2	1	4.78E-04*	6.00E-04	5.719E-04				
			2	2	7.16E-03*	9.00E-03	8.585E-03				
			2	3	4.01E-02*	5.04E-02	4.808E-02				
			0	1	4.78E-02*	6.00E-02	5.710E-02				
2s(1)3p(1)	**2s(1)5d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**1.73E-02**	**4.06E-02**	**2.011E-02**	**0.020**	**0.0203**	**0.0187**	**0.092**
			1	2	1.73E-02	4.06E-02	2.011E-02				
2s(1)3p(1)	**2s(1)6d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**2.52E-02***	**3.06E-02**	**2.921E-02**	**0.029**			**0.024**
			1	1	6.29E-03*	7.66E-03	7.297E-03				
			1	2	1.89E-02*	2.30E-02	2.190E-02				
			2	1	2.52E-04*	3.06E-04	2.921E-04				
			2	2	3.77E-03*	4.60E-03	4.384E-03				
			2	3	2.11E-02*	2.57E-02	2.455E-02				
			0	1	2.52E-02*	3.06E-02	2.917E-02				
2s(1)3p(1)	**2s(1)6d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**1.27E-02**	**2.43E-02**	**1.366E-02**	**0.014**	**0.0137**	**0.0130**	**0.043**
			1	2	1.27E-02	2.43E-02	1.366E-02				
2s(1)3p(1)	**2s(1)7d(1)**	**P3D3**	**3**	**6**	**1.49E-02***	**1.78E-02**	**1.700E-02**	**0.017**			**0.014**
			1	1	3.72E-03*	4.46E-03	4.247E-03				
			1	2	1.12E-02*	1.34E-02	1.275E-02				
			2	1	1.49E-04*	1.78E-04	1.700E-04				
			2	2	2.23E-03*	2.67E-03	2.551E-03				
			2	3	1.25E-02*	1.50E-02	1.429E-02				
			0	1	1.49E-02*	1.50E-02	1.698E-02				
2s(1)3p(1)	**2s(1)7d(1)**	**P1D1**	**1**	**2**	**8.67E-03**	**1.52E-02**	**9.087E-03**	**0.0092**	**0.0091**		**0.024**
			1	2	8.67E-03	1.52E-02	9.087E-03				

Ek C: Oksijen atomu için WBEPM teori ile hesaplanan osilatör şiddeti ve geçiş olasılığı sonuçları

Çizelge 4.4. Atomik oksijende bazı üçlü ve beşli multiplet terimler arasındaki osilatör şiddetleri (Çelik ve Ateş 2007)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	WBEPMT (Bu Çalışma)	NIST Değerleri (Wiese 2006)	Bell ve Hibbert (1990)	Hibbert ve ark. (1991)	Pradhan ve Saraph (1977)	Tayal ve Henry (1989)	Tachiev ve Fischer (2002)	Escalante ve Victor (1994)	Biemont ve ark. (1991)	Jönsson ve Godefroid (2000)	Biemont ve Zieppen (1992)
$2s^22p^4$	$2s^22p^3(^4S°)3s$	^3P	^3S	1302.96	0.0503	0.0519	0.0496	0.0529	0.0512	0.0560	0.0479	-	-	0.0420	0.0522
$2s^22p^4$	$2s^22p^3(^4S°)4s$	^3P	^3S	1039.35	0.00901	0.00918	0.00817	0.00919	0.00924	0.0098	0.00904	-	-	-	-
$2s^22p^4$	$2s^22p^3(^4S°)3d$	^3P	^3D	1025.82	0.0195	0.0201	0.0207	0.0212	0.0203	0.030	0.0194	0.0210	-	-	-
$2s^22p^3(^4S°)3s$	$2s^22p^3(^4S°)3p$	^5S	^5P	7773.37	1.03	1.00	0.976	1.01	0.978	1.09	0.967	0.947	1.088	0.962	0.990
$2s^22p^3(^4S°)3s$	$2s^22p^3(^4S°)3p$	^3S	^3P	8446.48	1.11	1.00	1.03	1.082	1.06	1.07	1.02	1.02	1.009	1.03	0.929
$2s^22p^3(^4S°)3p$	$2s^22p^3(^4S°)4s$	^5P	^5S	11299.36	0.161	0.170	0.165	0.173	0.164	0.137	0.187	0.163	0.173		
$2s^22p^3(^4S°)3p$	$2s^22p^3(^4S°)3d$	^5P	^5D	9263.87	0.985	0.954	0.928	0.961	0.926	0.848	0.983	0.908	0.960		
$2s^22p^3(^4S°)3p$	$2s^22p^3(^4S°)3d$	^3P	^3D	11286.78	0.975	0.983	0.971	0.976	0.966	1.01	0.898	0.948	-		
$2s^22p^3(^4S°)3p$	$2s^22p^3(^4S°)4d$	^5P	^5D	6157.27	0.0580	0.0722	0.0750	0.0705	0.0634	-	-	0.0702	0.0705		
$2s^22p^3(^4S°)3p$	$2s^22p^3(^4S°)4d$	^3P	^3D	7002.12	0.0364	0.0432	0.0432	0.0458	0.0275	-	-	0.0403	0.0456		
$2s^22p^3(^4S°)3p$	$2s^22p^3(^4S°)6d$	^5P	^5D	4968.21	0.00887	0.00783	0.00783	0.00816	-	-	-	0.0073			
$2s^22p^3(^4S°)4s$	$2s^22p^3(^4S°)4p$	^5S	^5P	27637.1	1.59	1.47	1.48	1.47	1.46	1.72	-	1.44			
$2s^22p^3(^4S°)4s$	$2s^22p^3(^4S°)4p$	^3S	^3P	28927.3	1.64	1.54	1.51	1.55	-	-	-	1.50			
$2s^22p^3(^4S°)3d$	$2s^22p^3(^4S°)4p$	^5D	^5P	59745	0.149	0.160	0.161	0.161	0.159	0.146	-				
$2s^22p^3(^4S°)3d$	$2s^22p^3(^4S°)4p$	^3D	^3P	45596.0	0.176	0.184	0.185	0.187	-	-					
$2s^22p^3(^4S°)3d$	$2s^22p^3(^4S°)4f$	^5D	^5F	18021.2	1.01	1.01	-								

Çizelge 4.4. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST Değerleri (Wiese 2006)	Bell ve Hibbert (1990)	Hibbert ve ark. (1991)	Pradhan ve Saraph (1977)	Escalante ve Victor (1994)
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	$2s^2 2p^3(^4S°)5f$	^5D	^5F	12464.02	0.165	0.162	-	-	-	-
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	$2s^2 2p^3(^4S°)5f$	^3D	^3F	12570.04	0.161	0.160	-	-	-	-
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	$2s^2 2p^3(^4S°)6f$	^3D	^3F	10753.53	0.0600	0.0553	-	-	-	-
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	$2s^2 2p^3(^4S°)7f$	^3D	^3F	9891.74	0.0290	0.0263	-	-	-	-
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)5s$	^5P	^5S	33074.7	0.292	0.301	0.297	-	0.300	-
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)5s$	^3P	^3S	36607.4	0.308	0.322	0.321	-	0.323	0.323
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	^5P	^5D	26507.4	1.25	1.13	1.11	1.13	1.13	1.108
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	^3P	^3D	30976.5	1.31	1.21	1.23	1.18	-	-
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)6s$	^5P	^5S	16872.34	0.0334	0.0283	0.0282	-	0.0216	0.0278
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)6s$	^3P	^3S	18229.3	0.0330	0.0282	0.0280	-	0.0286	-
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	^5P	^5D	15890.57	0.097	0.122	0.123	-	0.119	0.119
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	^3P	^3D	17453.46	0.072	0.0898	0.0912			
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)6d$	^5P	^5D	13055.70	0.0390	0.0368	0.0378			
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	$2s^2 2p^3(^4S°)7d$	^5P	^5D	11790.03	0.0201	0.0163	0.0169			
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	$2s^2 2p^3(^4S°)4f$	^5D	^5F	973568	0.0477	0.0477	-			
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	$2s^2 2p^3(^4S°)4f$	^3D	^3F	1668353	0.0274	0.0273	-			
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	$2s^2 2p^3(^4S°)6p$	^5D	^5P	34200.7	0.00137	0.00142	0.00110			

Çizelge 4.4. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST Değerleri (Wiese 2006)
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	$2s^2 2p^3(^4S°)6f$	$^3D°$	^3F	25787.6	0.181	0.187
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	$2s^2 2p^3(^4S°)7f$	$^3D°$	^3F	21331.0	0.0760	0.0726
$2s^2 2p^3(^4S°)4f$	$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	^5F	$^5D°$	41360.0	0.0110	0.0118
$2s^2 2p^3(^4S°)4f$	$2s^2 2p^3(^4S°)6d$	^5F	$^5D°$	26425.3	0.00183	0.00210
$2s^2 2p^3(^4S°)4f$	$2s^2 2p^3(^4S°)7d$	^5F	$^5D°$	21708.5	8.25 E-04	7.57E-04
$2s^2 2p^3(^4S°)5p$	$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	^3P	^3D	64985.460	1.559	
$2s^2 2p^3(^4S°)5p$	$2s^2 2p^3(^4S°)6s$	^5P	^5S	71811.621	0.341	
$2s^2 2p^3(^4S°)5p$	$2s^2 2p^3(^4S°)6s$	^3P	^3S	77216.230	0.422	
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	$2s^2 2p^3(^4S°)6p$	^5D	^5P	247985.12	0.465	
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	$2s^2 2p^3(^4S°)6p$	^3D	^3P	198820.51	0.534	
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	$2s^2 2p^3(^4S°)6f$	^3D	^3F	72672.431	0.866	
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	$2s^2 2p^3(^4S°)6f$	^5D	^5F	71448.119	0.856	
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	$2s^2 2p^3(^4S°)7f$	^3D	^3F	45747.910	0.183	
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	$2s^2 2p^3(^4S°)7f$	^5D	^5F	45258.995	0.098	

Çizelge 4.5. Oksijen atomunun bazı üçlü terimleri arasındaki geçiş olasılıkları ($x10^8$ *Hz*) (Çelik ve Ateş 2007)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST* Değerleri (Wiese 2006)	Tachiev ve Fischer (2002)	Hibbert ve ark. (1991)
$2s^22p^4$	**$2s^22p^3(^4S°)3s$**	**^3P**	**^3S**	**1302.96**	**9**	**3**	**5.92**	**6.12**	**5.645**	**-**
				1301.634	5	3	3.30	3.41 [A]	3.148	3.463
				1304.325	3	3	1.98	2.03 [A]	1.873	2.071
				1305.496	1	3	0.655	0.676 [A]	0.622	0.689
$2s^22p^4$	**$2s^22p^3(^4S°)4s$**	**^3P**	**^3S**	**1039.35**	**9**	**3**	**1.66**	**1.70**	**1.673**	**-**
				1038.50	5	3	0.928	0.943 [A]	0.933	0.945
				1040.217	3	3	0.554	0.564 [A]	0.555	0.565
				1040.964	1	3	0.184	0.188 [A]	0.184	0.188
$2s^22p^4$	**$2s^22p^3(^4S°)3d$**	**^3P**	**^3D**	**1025.82**	**9**	**15**	**0.744**	**0.763**	**0.737**	**-**
				1025.001	5	5	0.186	0.191 [B]	0.184	0.201
				1025.001	5	3	0.0207	0.0211[B]	0.0204	0.0223
				1025.000	5	7	0.745	0.766 [B]	0.740	0.808
				1026.673	3	3	0.310	0.317 [B]	0.306	0.334
				1026.673	3	5	0.557	0.571 [B]	0.552	0.602
				1027.401	1	3	0.412	0.422 [B]	0.408	0.445
$2s^22p^3(^4S°)3s$	**$2s^22p^3(^4S°)3p$**	**$^3S°$**	**^3P**	**8 446.480**	**3**	**9**	**0.346**	**0.322**	**0.31808**	**-**
				8 446.247	3	1	0.346	0.322 [B]	0.31810	0.3369
				8 446.359	3	5	0.346	0.322 [B]	0.31809	0.3369
				8 446.758	3	3	0.346	0.322 [B]	0.31804	0.3369
$2s^22p^3(^4S°)3p$	**$2s^22p^3(^4S°)4s$**	**^3P**	**$^3S°$**	**13164.570**	**9**	**3**	**0.256**	**0.214**	**0.193**	**-**
				13163.889	3	3	0.0652	0.0714 [B+]	0.0644	0.0702
				13164.858	5	3	0.108	0.119 [B+]	0.1074	0.117
				13165.131	1	3	0.0217	0.0238 [B+]	0.0214	0.0234
$2s^22p^3(^4S°)3p$	**$2s^22p^3(^4S°)3d$**	**^3P**	**$^3D°$**	**11 286.780**	**9**	**15**	**0.306**	**0.309**	**0.282**	**0.309**
				11 286.317	3	5	0.229	0.232 [A]	0.211	0.229
				11 286.914	5	7	0.306	0.309 [A]	0.282	0.306
				11 287.029	5	5	0.0765	0.0774 [A]	0.0705	0.0766
				11 287.318	1	3	0.170	0.172 [A]	0.156	0.170
				11 286.406	3	3	0.127	0.129 [A]	0.1175	0.127
				11 287.118	5	3	0.850	0.860 [A]	0.00783	0.00851
$2s^22p^3(^4S°)3p$	**$2s^22p^3(^4S°)5s$**	**^3P**	**$^3S°$**	**7 254.360**	**9**	**3**	**0.0734**	**0.0672**		
				7 254.154	3	3	0.0264	0.0224 [C+]		
				7 254.448	5	3	0.0441	0.0373 [C+]		
				7 254.531	1	3	0.00882	0.00745[C+]		
$2s^22p^3(^4S°)3p$	**$2s^22p^3(^4S°)4d$**	**^3P**	**$^3D°$**	**7002.12**	**9**	**15**	**0.0297**	**0.0353**		
				7001.922	3	5	0.0222	0.0265 [B]		
				7002.230	5	7	0.0297	0.0353 [B]		
				7002.250	1	3	0.0165	0.0196 [B]		
				7002.196	5	5	7.43 e-03	8.83 e-03[B]		
				7001.899	3	3	0.0123	0.0147 [B]		
				7002.173	5	3	8.25e-04	9.83e-04 [B]		
$2s^22p^3(^4S°)4s$	**$2s^22p^3(^4S°)4p$**	**$^3S°$**	**^3P**	**28 927.30**	**3**	**9**	**0.0416**	**0.0410**		
				28 927.30	3	5	0.0416	0.0410 [A]		0.0411
				28 927.97	3	3	0.0416	0.0410 [A]		0.04109
				28 925.12	3	1	0.0416	0.0410 [A]		0.0411
$2s^22p^3(^4S°)3d$	**$2s^22p^3(^4S°)4p$**	**$^3D°$**	**^3P**	**45 596.00**	**15**	**9**	**0.00969**	**0.00986**		
				45 597.38	7	5	0.00813	0.00828 [A]		0.00840
				45 597.19	5	3	0.00726	0.00739 [A]		0.007503
				45 588.64	3	1	0.00966	0.00986 [A]		0.010
				45 595.50	5	5	0.00145	0.00148 [A]		0.00150
				45 595.73	3	3	0.00242	0.00246 [A]		0.00250
				45 594.05	3	5	9.69 e-05	9.86 e-05[A]		1.0e-04

Çizelge 4.5. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT	NIST* Değerleri (Wiese 2006)
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4f$**	**$^3D°$**	**^3F**	**18 243.60**	**15**	**21**	**0.148**	**0.147**
				18 243.54	5	5	0.0230	0.0230 [C+]
				18 243.54	5	7	0.131	0.131 [C+]
				18 243.84	7	9	0.148	0.147 [C+]
				18 243.31	3	5	0.124	0.124 [C+]
				18 243.84	7	7	0.0164	0.0164 [C+]
				18 243.84	7	5	6.59 e-04	6.48e-04 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5p$**	**$^3D°$**	**^3P**	**15 665.910**	**15**	**9**	**1.09 e-03**	**1.83e-03**
				15 666.188	7	5	1.05 e-03	1.54e-03 [C+]
				15 665.820	5	3	9.43 e-04	1.37e-03 [C+]
				15 665.098	3	1	1.25 e-03	1.83e-03 [C+]
				15 665.967	5	5	1.88 e-04	2.74e-04 [C+]
				15 665.648	3	3	3.14 e-04	4.57e-04 [C+]
				15 665.796	3	5	1.25 e-05	1.83e-05 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5f$**	**$^3D°$**	**^3F**	**12 570.040**	**15**	**21**	**4.86 e-02**	**4.82e-02**
				12 569.996	5	5	7.58 e-03	7.52e-03 [C+]
				12 569.996	5	7	4.33 e-02	4.28e-02 [C+]
				12 570.138	7	9	4.87 e-02	4.82e-02 [C+]
				12 569.886	3	5	4.09 e-02	4.05e-02 [C+]
				12 570.138	7	7	5.42 e-03	5.37e-03 [C+]
				12 570.138	7	5	2.16 e-04	2.12e-04 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6f$**	**$^3D°$**	**^3F**	**10 753.530**	**15**	**21**	**2.49 e-02**	**2.28e-02**
				10 753.602	7	9	2.49 e-02	2.28e-02 [C+]
				10 753.498	5	7	2.21 e-02	2.02e-02 [C+]
				10 753.417	3	5	2.09 e-02	1.91e-02 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)7f$**	**$^3D°$**	**^3F**	**9 891.740**	**15**	**21**	**1.50 e-02**	**1.28e-02**
				9 891.803	7	9	1.50 e-02	1.28e-02 [C+]
				9 891.715	5	7	1.34 e-02	1.14e-02 [C+]
				9 891.647	3	5	1.26 e-02	1.08e-02 [C+]
				9 891.803	7	7	1.67 e-03	1.43e-03 [C+]
				9 891.715	5	5	2.34 e-03	2.00e-03 [C+]
				9 891.803	7	5	6.70 e-05	5.63e-05 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5s$**	**^3P**	**$^3S°$**	**36 607.40**	**9**	**3**	**4.60 e-02**	**4.82e-02**
				36 607.37	5	3	2.56 e-02	2.68e-02 [C+]
				36 606.28	3	3	1.53 e-02	1.61e-02 [C+]
				36 610.85	1	3	5.11 e-03	5.35e-03 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4d$**	**^3P**	**$^3D°$**	**30976.5**	**9**	**15**	**5.17e-02**	**5.04e-02**
				30976.96	5	7	5.17e-02	5.04e-02[B+]
				30975.52	3	5	3.88e-02	3.78e-02[B+]
				30978.36	1	3	2.87e-02	2.80e-02[B+]
				30976.30	5	5	1.29e-02	1.26e-02[B+]
				30975.08	3	3	2.15e-02	2.10e-02[B+]
				30975.86	5	3	1.43e-03	1.40e-03[B+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6s$**	**^3P**	**$^3S°$**	**18 229.30**	**9**	**3**	**1.98e-02**	**1.70e-02**
				18 229.28	5	3	1.10e-02	9.47e-03 [C+]
				18 229.01	3	3	6.62 e-03	5.68e-03 [C+]
				18 230.14	1	3	2.20 e-03	1.89e-03 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5d$**	**^3P**	**$^3D°$**	**17 453.46**	**9**	**15**	**9.47e-03**	**1.18 e-02**
				17 453.459	5	7	9.47e-03	1.18 e-02[C+]
				17 453.212	3	5	7.10 e-03	8.85 e-03[C+]
				17 454.251	1	3	5.26 e-03	6.56 e-03[C+]
				17 453.459	5	5	2.36 e-03	2.95 e-03[C+]
				17 453.212	3	3	3.94 e-03	4.92 e-03[C+]
				17 453.459	5	3	2.63 e-04	3.28 e-04[C+]

Çizelge 4.5. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT	NIST* Değerleri (Wiese 2006)
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4f$**	**$^3D°$**	**^3F**	**1 668 353**	**15**	**21**	**4.69 e-07**	**4.68e-07**
				1 667 074	7	9	4.71 e-07	4.69e-07 [C+]
				1 668 994	5	7	4.17 e-07	4.15e-07 [C+]
				1 670 277	3	5	3.93 e-07	3.92e-07 [C+]
				1 667 074	7	7	5.23 e-08	5.23e-08 [C+]
				1 668 994	5	5	7.30 e-08	7.29e-08 [C+]
				1 667 074	7	5	2.09 e-09	2.06e-09 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6d$**	**^3P**	**$^3D°$**	**14 110.96**	**9**	**15**	**5.71e-03**	**4.65e-03**
				14 110.958	5	7	5.71e-03	4.65e-03[C+]
				14 110.797	3	5	4.28 e-03	3.49 e-03[C+]
				14 111.476	1	3	3.17 e-03	2.58 e-03[C+]
				14 110.958	5	5	1.42 e-03	1.16 e-03[C+]
				14 110.797	3	3	2.38 e-03	1.94 e-03[C+]
				14 110.958	5	3	1.50 e-04	1.29 e-04[C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5p$**	**$^3D°$**	**^3P**	**104005.8**	**15**	**9**	**3.75 e-03**	-
				103 965.7	7	5	3.15 e-03	3.06e-03 [C+]
				103 966.7	5	3	2.81 e-03	2.73e-03 [C+]
				103 947.4	3	1	3.75 e-03	3.64e-03 [C+]
				103 973.2	5	5	5.62 e-04	5.46e-04 [C+]
				103 971.6	3	3	9.37 e-04	9.09e-04 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5f$**	**$^3D°$**	**^3F**	**39 463.40**	**15**	**21**	**2.76 e-02**	**2.72 e-02**
				39 462.66	7	9	2.76 e-02	2.72e-02 [C+]
				39 463.74	5	7	2.45 e-02	2.42e-02 [C+]
				39 464.46	3	5	2.32 e-02	2.29e-02 [C+]
				39 462.66	7	7	3.07 e-03	3.03e-03 [C+]
				39 463.74	5	5	4.30 e-03	4.25e-03 [C+]
				39 462.66	7	5	1.22 e-04	1.20e-04 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6f$**	**$^3D°$**	**^3F**	**25 787.60**	**15**	**21**	**1.29 e-02**	**1.34e-02**
				25 787.25	7	9	1.29 e-02	1.34e-02 [C+]
				25 787.71	5	7	1.25 e-02	1.19e-02 [C+]
				25 788.02	3	5	1.08 e-02	1.12e-02 [C+]
				25 787.25	7	7	1.43 e-03	1.49e-03 [C+]
				25 787.71	5	5	2.01 e-03	2.09e-03 [C+]
				25 787.25	7	5	5.75 e-05	5.89e-05 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)7f$**	**$^3D°$**	**^3F**	**21 331.00**	**15**	**21**	**8.03 e-03**	**7.60e-03**
				21 330.82	7	9	8.03 e-03	7.60e-03 [C+]
				21 331.14	5	7	7.13 e-03	6.75e-03 [C+]
				21 331.35	3	5	6.74 e-03	6.38e-03 [C+]
				21 330.82	7	7	8.92 e-04	8.47e-04 [C+]
				21 331.14	5	5	1.24 e-03	1.19e-03 [C+]
				21 330.82	7	5	3.56 e-05	3.34e-05 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)5p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5d$**	**^3P**	**^3D**	**64985.43**	**9**	**15**	**0.0147**	
				64982.90	5	7	0.0147	
				64982.90	5	5	0.00369	
				64982.90	5	3	0.00041	
				64985.439	3	5	0.0110	
				64985.439	3	3	0.00615	
				64985.101	1	3	0.0082	
$2s^2 2p^3(^4S°)5p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6s$**	**^3P**	**^3S**	**77216.23**	**9**	**3**	**0.0141**	
				77213.05	5	3	0.00788	
				77216.63	3	3	0.00472	
				77229.98	1	3	0.00157	
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6p$**	**^3D**	**^3P**	**198820.514**	**15**	**9**	**0.00150**	
				198820.514	7	5	0.00126	
				198820.514	5	5	0.000225	
				198820.514	5	3	0.00112	

Çizelge 4.5. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6p$**	**^3D**	**^3P**	198820.514	3	5	1.50 e-05
				198820.514	3	3	3.75 e-04
				198820.514	3	1	1.50 e-03
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6f$**	**^3D**	**^3F**	**72672.43**	**15**	**21**	**7.81 e-03**
				72672.43	7	9	7.81 e-03
				72672.43	7	7	8.68 e-04
				72672.43	7	5	3.47 e-05
				72672.43	5	7	6.95 e-03
				72672.43	5	5	1.21 e-03
				72672.43	3	5	6.56 e-03
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)7f$**	**^3D**	**^3F**	**45747.91**	**12**	**21**	**4.17 e-03**
				45747.91	7	9	4.17 e-03
				45747.91	7	7	4.63 e-03
				45747.91	7	5	1.85 e-03
				45747.91	5	5	6.49 e-04
				45747.91	5	7	3.70 e-03
				45747.91	3	5	1.81 e-03

* NIST Doğruluk Aralıkları : $A \leq 3\%,\ B \leq 10\%,\ B+ \leq 7\%, C+ \leq 18\%$

Çizelge 4.6. Oksijen atomunun beşli terimleri arasındaki geçiş olasılıkları ($x10^8$ *Hz*) (Çelik ve Ateş 2007)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT	NIST* Değerleri (Wiese 2006)	Tachiev ve Fischer (2002)	Hibbert ve ark. (1991)
$2s^2 2p^3(^4S°)3s$	**$2s^2 2p^3(^4S°)3p$**	**^5S**	**^5P**	**7 773.370**	**5**	**15**	**0.378**	**0.369**	**0.3557**	**-**
				7 771.944	5	7	0.378	0.369 [A]	0.3559	0.370
				7 774.166	5	5	0.378	0.369 [A]	0.3556	0.370
				7 775.388	5	3	0.378	0.369 [A]	0.3551	0.373
$2s^2 2p^3(^4S°)3s$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4p$**	**^5S**	**^5P**	**3 947.42**	**5**	**15**	**4.39e-03**	**4.89e-03**		
				3 947.295	5	7	4.37e-03	4.91e-03[B]		
				3 947.481	5	5	4.41e-03	4.88e-03[B]		
				3 947.586	5	3	4.43e-03	4.87e-03[B]		
$2s^2 2p^3(^4S°)3p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4s$**	**^5P**	**^5S**	**11 299.360**	**15**	**5**	**0.252**	**0.267**	**0.293**	**-**
				11 295.103	3	5	0.0505	0.0534[A]	0.0587	0.0543
				11 297.682	5	5	0.0841	0.0890[A]	0.0978	0.0905
				11 302.378	7	5	0.117	0.125 [A]	0.136	0.1267
$2s^2 2p^3(^4S°)3p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)3d$**	**^5P**	**^5D**	**9 263.870**	**15**	**25**	**0.459**	**0.445**	**0.4583**	**-**
				9 260.806	3	1	0.459	0.446 [A]	0.458	0.4479
				9 260.848	3	3	0.344	0.334 [A]	0.344	0.3359
				9 260.936	3	5	0.160	0.156 [A]	0.160	0.156
				9 262.582	5	3	0.114	0.111 [A]	0.114	0.112
				9 262.670	5	5	0.267	0.260 [A]	0.267	0.261
				9 262.776	5	7	0.306	0.297 [A]	0.305	0.298
				9 265.932	7	7	0.152	0.148 [A]	0.1527	0.149
				9 266.006	7	9	0.458	0.445 [A]	0.458	0.447
				9 265.826	7	5	0.0305	0.0297[A]	0.0305	0.0298
$2s^2 2p^3(^4S°)3p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5s$**	**^5P**	**^5S**	**6 454.99**	**15**	**5**	**8.66e-02**	**8.25e-02**		
				6 453.602	3	5	1.73 e-02	1.65e-02[C+]		
				6 454.444	5	5	2.88 e-02	2.75e-02[C+]		
				6 455.977	7	5	4.04 e-02	3.85e-02[C+]		
$2s^2 2p^3(^4S°)3p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6d$**	**^5P**	**^5D**	**4 968.210**	**15**	**25**	**1.43 e-02**	**1.27e-02**		
				4 968.794	7	9	1.31 e-02	1.27e-02 [C+]		
				4 967.884	5	7	8.76 e-03	8.44e-03 [C+]		
				4 967.381	3	5	4.60 e-03	4.43e-03 [C+]		
				4 968.791	7	7	4.37 e-03	4.22e-03 [C+]		
				4 967.880	5	5	7.66 e-03	7.38e-03 [C+]		
				4 967.378	3	3	9.86 e-03	9.50e-03 [C+]		
				4 968.788	7	5	8.75 e-04	8.43e-04 [C+]		
				4 967.877	5	3	3.28 e-03	3.16e-03 [C+]		
				4 967.376	3	1	1.31 e-02	1.27e-02 [C+]		
$2s^2 2p^3(^4S°)3p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4d$**	**^5P**	**^5D**	**6 157.27**	**15**	**25**	**6.14 e-02**	**7.62 e-02**		
				6 155.971	3	3	4.61 e-02	5.72 e-02[B+]		
				6 156.778	5	7	4.10 e-02	5.08 e-02[B+]		
				6 158.187	7	9	6.14 e-02	7.62 e-02[B+]		
				6 155.989	3	5	2.15 e-02	2.67 e-02[B+]		
				6 158.172	7	7	2.04 e-02	2.54 e-02[B+]		
				6 156.755	5	5	3.58 e-02	4.45 e-02[B+]		
				6 158.149	7	5	4.09 e-03	5.07 e-03[B+]		
				6 156.737	5	3	1.53 e-02	1.91 e-02[B+]		
				6 155.961	3	1	6.15 e-02	7.62 e-02[B+]		
$2s^2 2p^3(^4S°)4s$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4p$**	**^5S**	**^5P**	**27 637.10**	**5**	**15**	**4.40e-02**	**4.29e-02**		**-**
				27 631.21	5	7	4.40 e-02	4.30e-02 [A]		4.26 e-02
				27 640.35	5	5	4.40 e-02	4.29e-02 [A]		4.26 e-02
				27 645.49	5	3	4.39 e-02	4.29e-02 [A]		4.26 e-02
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4p$**	**^5D**	**^5P**	**59 745.0**	**25**	**15**	**4.91e-03**	**4.97e-03**		
				59 713.5	9	7	3.79 e-03	3.84e-03 [A]	3.859 e-03	
				59 759.2	7	5	2.75 e-03	2.78e-03 [A]	2.796 e-03	
				59 787.7	5	3	1.71 e-03	1.74e-03 [A]	1.746 e-03	
				59 716.5	7	7	9.84 e-04	9.95e-04 [A]	1.00 e-03	
				59 763.6	5	5	1.71 e-03	1.74e-03 [A]	1.746 e-03	
				59 791.4	3	3	2.20 e-03	2.23e-03 [A]	2.244 e-03	

Çizelge 4.6. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT	NIST* Değerleri (Wiese 2006)
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4f$**	**^5D**	**^5F**	**18 021.20**	**25**	**35**	**1.48 e+01**	**1.40e+01**
				18 021.11	7	7	4.46 e-02	4.43e-02 [C+]
				18 021.11	7	5	5.94 e-03	5.91e-03 [C+]
				18 021.11	7	9	1.23 e+01	1.20e+01 [C+]
				18 020.83	9	11	1.48 e+01	1.48e+01 [C+]
				18 021.51	5	7	1.01 e+01	1.01e+01 [C+]
				18 021.84	3	5	8.32 e-02	8.27e-02 [C+]
				18 022.00	1	3	6.93 e-02	6.90e-02 [C+]
				18 020.83	9	9	2.47e-02	2.46e-02 [C+]
				18 021.51	5	5	5.94e-02	5.91e-02 [C+]
				18 021.84	3	3	6.93e-02	6.90e-02 [C+]
				18 020.83	9	7	2.12e-03	2.11e-03 [C+]
				18 021.51	5	3	9.91e-03	9.85e-03 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5p$**	**^5D**	**^5P**	**16 110.270**	**25**	**15**	**4.15 e-04**	**4.04e-04**
				16 109.087	9	7	3.20 e-04	3.12e-04 [C+]
				16 110.608	7	5	2.32 e-04	2.26e-04 [C+]
				16 111.854	5	3	1.45 e-04	1.41e-04 [C+]
				16 109.310	7	7	8.30 e-05	8.08e-05 [C+]
				16 110.928	5	5	1.45 e-04	1.41e-04 [C+]
				16 112.122	3	3	1.86 e-04	1.82e-04 [C+]
				16 109.629	5	7	1.18 e-05	1.15e-05 [C+]
				16 111.195	3	5	3.73 e-05	3.63e-05 [C+]
				16 112.249	1	3	8.30 e-05	8.07e-05 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)3d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5f$**	**^5D**	**^5F**	**12 464.020**	**25**	**35**	**5.06 e-02**	**4.96e-02**
				12 463.974	7	7	1.51 e-02	1.49e-02 [C+]
				12 463.974	7	5	2.02 e-03	1.98e-03 [C+]
				12 463.974	7	9	4.21 e-02	4.14e-02 [C+]
				12 463.840	9	11	5.06 e-02	4.96e-02 [C+]
				12 464.165	5	7	3.47 e-02	3.41e-02 [C+]
				12 464.325	3	5	2.83 e-02	2.78e-02 [C+]
				12 464.401	1	3	2.36 e-02	2.32e-02 [C+]
				12 463.840	9	9	8.43 e-03	8.27e-03 [C+]
				12 464.165	5	5	2.02 e-02	1.98e-02 [C+]
				12 464.325	3	3	2.36 e-02	2.32e-02 [C+]
				12 463.840	9	7	7.23 e-04	7.09e-04 [C+]
				12 464.165	5	3	3.37 e-03	3.31e-03 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5s$**	**^5P**	**^5S**	**33 074.70**	**15**	**5**	**5.34 e-02**	**5.51e-02**
				33 083.17	7	5	2.49 e-02	2.57e-02 [C+]
				33 070.08	5	5	1.78 e-02	1.84e-02 [C+]
				33 062.72	3	5	1.07 e-02	1.10e-02 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4d$**	**^5P**	**^5D**	**26 507.4**	**15**	**25**	**6.48 e-02**	**6.45 e-02**
				26 513.26	7	9	6.48 e-02	6.44 e-02 [A]
				26 504.57	5	7	4.32 e-02	4.30 e-02 [A]
				26 499.42	3	5	2.27 e-02	2.26 e-02 [A]
				26 512.97	7	7	2.16 e-02	2.15 e-02 [A]
				26 504.15	5	5	3.78 e-02	3.76 e-02 [A]
				26 499.08	3	3	4.86 e-02	4.84 e-02 [A]
				26 512.26	7	5	4.32 e-03	4.29 e-03 [A]
				26 503.81	5	3	1.61 e-02	1.61 e-02 [A]
				26 498.91	3	1	6.48 e-02	6.45 e-02 [A]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6s$**	**^5P**	**^5S**	**16 872.340**	**15**	**5**	**0.0234**	**0.0199**
				16 874.538	7	5	0.0109	0.00930 [C+]
				16 871.132	5	5	0.00783	0.00664 [C+]
				16 869.216	3	5	0.00470	0.00399 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5d$**	**^5P**	**^5D**	**15 890.570**	**15**	**25**	**0.0153**	**0.0193**
				15 892.602	7	9	0.0153	0.0193 [C+]
				15 889.523	5	7	0.0102	0.0129 [C+]

Çizelge 4.6. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT	NIST* Değerleri (Wiese 2006)
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5d$**	**^5P**	**^5D**	15892.463	7	5	0.00102	0.00129 [C+]
				15889.374	5	3	0.00384	0.00482 [C+]
				15887.642	3	1	0.0153	0.0193 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6d$**	**^5P**	**^5D**	**13055.700**	**15**	**25**	**8.54e-03**	**8.65e-03**
				1357.039	7	9	8.54 e-03	8.65e-03 [C+]
				13054.981	5	7	5.70 e-03	5.77e-03 [C+]
				13053.807	3	5	2.99 e-03	3.03e-03 [C+]
				13057.020	7	7	2.84 e-03	2.88e-03 [C+]
				13054.954	5	5	4.98 e-03	5.05e-03 [C+]
				13 053.784	3	3	6.41 e-03	6.49e-03 [C+]
				13 056.993	7	5	5.69 e-04	5.77e-04 [C+]
				13 054.932	5	3	2.13 e-03	2.16e-03 [C+]
				13 053.773	3	1	8.55 e-03	8.65e-03 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)7d$**	**^5P**	**^5D**	**11 790.030**	**15**	**25**	**5.31 e-03**	**4.70 e-03**
				11 791.118	7	9	5.31 e-03	4.70 e-03 [C+]
				11 789.444	5	7	3.54 e-03	3.13 e-03 [C+]
				11 788.493	3	5	1.86 e-03	1.65 e-03 [C+]
				11 791.107	7	7	1.77 e-03	1.57 e-03 [C+]
				11 789.429	5	5	3.10 e-03	2.74 e-03 [C+]
				11 788.481	3	3	3.98 e-03	3.53 e-03 [C+]
				11 791.092	7	5	3.54 e-04	3.13 e-04 [C+]
				11 789.416	5	3	1.32 e-03	1.18 e-03 [C+]
				11 788.475	3	1	5.31 e-03	4.70 e-03 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)8d$**	**^5P**	**^5D**	**11 093.260**	**15**	**25**	**3.63 e-03**	**2.87 e-03**
				11 094.220	7	9	3.63 e-03	2.87 e-03 [C+]
				11 092.741	5	7	2.42 e-03	1.91 e-03 [C+]
				11 091.903	3	5	1.27 e-03	1.00 e-03 [C+]
				11 094.214	7	7	1.21 e-03	9.55 e-04 [C+]
				11 092.732	5	5	2.12 e-03	1.67 e-03 [C+]
				11 091.896	3	3	2.73 e-03	2.15 e-03 [C+]
				11 094.204	7	5	2.42 e-04	1.91 e-04 [C+]
				11 092.724	5	3	9.09 e-04	7.17 e-04 [C+]
				11 091.892	3	1	3.64 e-03	2.87 e-03 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)4f$**	**^5D**	**^5F**	**973 568**	**25**	**35**	**2.39 e-06**	**2.40 e-06**
				973 037	9	11	2.40 e-06	2.40e-06 [C+]
				973 426	7	9	1.99 e-06	2.00e-06 [C+]
				973 985	5	7	1.64 e-06	1.64e-06 [C+]
				974 450	3	5	1.33 e-06	1.34e-06 [C+]
				974 678	1	3	1.11 e-06	1.12e-06 [C+]
				973 037	9	9	4.00 e-07	4.00e-07 [C+]
				973 426	7	7	7.19 e-07	7.20e-07 [C+]
				973 985	5	5	9.57 e-07	9.58e-07 [C+]
				974 450	3	3	1.11 e-06	1.12e-06 [C+]
				973 037	9	7	3.43 e-08	3.43e-08 [C+]
				973 426	7	5	9.59 e-08	9.60e-08 [C+]
				973 985	5	3	1.59 e-07	1.60e-07 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5p$**	**^5D**	**^5P**	**131 420**	**25**	**15**	**1.98 e-03**	**2.02e-03**
				131 352.1	9	7	1.53 e-03	1.56e-03 [C+]
				131 445.6	7	5	1.11 e-03	1.13e-03 [C+]
				131 517.4	5	3	6.94 e-04	7.04e-04 [C+]
				131 359.2	7	7	3.98 e-04	4.04e-04 [C+]
				131 455.8	5	5	6.95 e-04	7.05e-04 [C+]
				131 525.9	3	3	8.92 e-04	9.06e-04 [C+]
				131 369.4	5	7	5.68 e-05	5.77e-05 [C+]
				131 464.2	3	5	1.78 e-04	1.81e-04 [C+]
				131 530.1	1	3	3.96 e-04	4.02e-04 [C+]

Çizelge 4.6. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT	NIST* Değerleri (Wiese 2006)
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5f$**	**^5D**	**^5F**	**38 808.00**	**25**	**35**	**2.71 e-02**	**2.68e-02**
				38 807.20	9	11	2.71e-02	2.68e-02 [C+]
				38 807.82	7	9	2.26e-02	2.24e-02 [C+]
				38 808.71	5	7	1.86e-02	1.84e-02 [C+]
				38 809.45	3	5	1.52e-02	1.50e-02 [C+]
				38 809.81	1	3	1.26e-02	1.25e-02 [C+]
				38 807.20	9	9	4.52e-03	4.47e-03 [C+]
				38 807.82	7	7	8.14e-03	8.05e-03 [C+]
				38 808.71	5	5	1.08e-02	1.07e-02 [C+]
				38 809.45	3	3	1.26e-02	1.25e-02 [C+]
				38 807.20	9	7	3.87e-04	3.83e-04 [C+]
				38 807.82	7	5	1.08e-03	1.07e-03 [C+]
				38 808.71	5	3	1.81e-03	1.79e-03 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6p$**	**^5D**	**^5P**	**34 200.70**	**25**	**15**	**1.30 e-04**	**1.35e-04**
				34 198.00	9	7	1.00 e-04	1.04e-04 [C+]
				34 201.53	7	5	7.31 e-05	7.57e-05 [C+]
				34 204.14	5	3	4.56 e-05	4.73e-05 [C+]
				34 198.48	7	7	2.61 e-05	2.71e-05 [C+]
				34 202.23	5	5	4.56 e-05	4.73e-05 [C+]
				34 204.72	3	3	5.87 e-05	6.08e-05 [C+]
				34 199.17	5	7	3.72 e-06	3.86e-06 [C+]
				34 202.80	3	5	1.17 e-05	1.22e-05 [C+]
				34 205.00	1	3	2.61 e-05	2.70e-05 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4f$	**$2s^2 2p^3(^4S°)5d$**	**^5F**	**^5D**	**41 360.00**	**35**	**25**	**5.97 e-04**	**6.44e-04**
				41 360.53	11	9	5.21 e-04	5.62e-04 [C+]
				41 360.13	9	7	4.57 e-04	4.93e-04 [C+]
				41 359.58	7	5	4.10 e-04	4.41e-04 [C+]
				41 359.12	5	3	3.98 e-04	4.30e-04 [C+]
				41 358.90	3	1	5.97 e-04	6.44e-04 [C+]
				41 360.53	9	9	7.11 e-05	7.67e-05 [C+]
				41 360.13	7	7	1.28 e-04	1.38e-04 [C+]
				41 359.58	5	5	1.70 e-04	1.84e-04 [C+]
				41 359.12	3	3	1.99 e-04	2.15e-04 [C+]
				41 360.53	7	9	4.74 e-06	5.11e-06 [C+]
				41 360.13	5	7	1.22 e-05	1.31e-05 [C+]
				41 359.58	3	5	1.70 e-05	1.84e-05 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4f$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6d$**	**^5F**	**^5D**	**26 425.30**	**35**	**25**	**2.45 e-04**	**2.81e-04**
				26 425.45	11	9	2.13 e-04	2.45e-04 [C+]
				26 425.38	9	7	1.87 e-04	2.15e-04 [C+]
				26 425.26	7	5	1.68 e-04	1.93e-04 [C+]
				26 425.17	5	3	1.63 e-04	1.87e-04 [C+]
				26 425.13	3	1	2.45 e-04	2.81e-04 [C+]
				26 425.45	9	9	2.91 e-05	3.35e-05 [C+]
				26 425.38	7	7	5.25 e-05	6.03e-05 [C+]
				26 425.26	5	5	7.00 e-05	8.03e-05 [C+]
				26 425.17	3	3	8.17 e-05	9.37e-05 [C+]
				26 425.45	7	9	1.94 e-06	2.23e-06 [C+]
				26 425.38	5	7	5.01 e-06	5.74e-06 [C+]
				26 425.26	3	5	7.01 e-06	8.03e-06 [C+]
$2s^2 2p^3(^4S°)4f$	**$2s^2 2p^3(^4S°)7d$**	**^5F**	**^5D**	**21 708.50**	**35**	**25**	**1.63 e-04**	**1.50e-04**
				21 708.54	11	9	1.42 e-04	1.31e-04 [C+]
				21 708.50	9	7	1.25 e-04	1.15e-04 [C+]
				21 708.45	7	5	1.12 e-04	1.03e-04 [C+]
				21 708.40	5	3	1.09 e-04	9.98e-05 [C+]
				21 708.39	3	1	1.63 e-04	1.50e-04 [C+]
				21 708.54	9	9	1.94 e-05	1.78e-05 [C+]
				21 708.50	7	7	3.50 e-05	3.21e-05 [C+]
				21 708.45	5	5	4.67 e-05	4.28e-05 [C+]
				21 708.40	3	3	5.45 e-05	4.99e-05 [C+]
				21 708.54	7	9	1.29 e-06	1.19e-06 [C+]
				21 708.50	5	7	3.33 e-06	3.05e-06 [C+]
				21 708.45	3	5	4.67 e-06	4.28e-06 [C+]

Çizelge 4.6. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT
$2s^2 2p^3(^4S°)5p$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6s$**	**^5P**	**^5S**	**71811.621**	**15**	**5**	**0.00903**
				71818.66	3	5	0.00329
				71785.51	5	5	0.00548
				71811.28	7	5	0.00767
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6p$**	**^5D**	**^5P**	**247985.12**	**25**	**15**	**8.40 e-04**
				248018.65	7	5	4.71 e-04
				247872.36	7	7	1.68 e-04
				248153.43	5	3	2.94 e-04
				248052.50	5	5	2.94 e-04
				247892.01	5	7	2.40 e-05
				248069.10	3	3	3.77 e-04
				248069.10	3	5	7.56 e-05
				248178.61	1	3	1.67 e-04
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)6f$**	**^5D**	**^5F**	**71448.11**	**25**	**35**	**7.99 e-03**
				71446.53	9	11	7.99 e-03
				71446.53	9	9	1.33 e-03
				71446.53	9	7	1.14 e-04
				71447.71	7	9	6.66 e-03
				71447.71	7	7	2.39 e-03
				71447.71	7	5	3.19 e-03
				71450.72	5	7	5.48 e-03
				71450.72	5	5	3.19 e-03
				71450.72	5	3	5.33 e-04
				71450.72	3	5	4.47 e-03
				71450.72	3	3	3.73 e-03
				71451.38	1	3	3.73 e-03
$2s^2 2p^3(^4S°)5d$	**$2s^2 2p^3(^4S°)7f$**	**^5D**	**^5F**	**45258.99**	**25**	**35**	**2.28 e-03**
				45258.36	9	11	2.28 e-03
				45258.36	9	9	2.83 e-04
				45258.36	9	7	3.25 e-05
				45258.83	7	9	1.90 e-05
				45258.83	7	7	6.48 e-04
				45258.83	7	5	9.12 e-05
				45259.48	5	7	1.56 e-03
				45259.48	5	5	9.12 e-04
				45259.48	5	3	1.52 e-04
				45260.04	3	5	1.27 e-03
				45260.04	3	3	1.06 e-03
				45260.04	1	3	1.06 e-03

* NIST Doğruluk Aralıkları : $A \leq 3\%,\ B \leq 10\%, B+ \leq 7\%, C+ \leq 18\%$

Ek D: Sodyum atomunda WBEPM teori ile hesaplanan geçiş olasılığı sonuçları

Çizelge 4.7. Sodyum atomunun bazı uyarılmış seviyeleri arasındaki geçiş olasılıkları ($x10^8\,Hz$) (Çelik ve Ateş 2008)

Geçişler	Bu Çalışma WBEPMT	Fischer (2002)	NIST Değerleri (Wiese 2006)
$1s^2 2s^2 2p^6 3p\ ^2P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4s\ ^2S$	2.54e-01	2.61 e-01	2.64e-01
$1s^2 2s^2 2p^6 3p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4s\ ^2S_{1/2}$	1.69e-01	1.71 e-01	1.76e-01
$1s^2 2s^2 2p^6 3p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4s\ ^2S_{1/2}$	8.53e-02	8.73 e-02	8.80e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 3p\ ^2P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D$	5.31e-01	5.07 e-01	5.14e-01
$1s^2 2s^2 2p^6 3p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{5/2}$	5.31e-01	5.07 e-01	5.14e-01
$1s^2 2s^2 2p^6 3p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{3/2}$	8.85e-02	8.45 e-02	8.57e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 3p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{3/2}$	4.44e-01	4.23 e-01	4.29e-01
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4p\ ^2P$	1.53e-03	1.59 e-03	1.58e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4p\ ^2P_{3/2}$	1.54e-04	1.602 e-04	1.59e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4p\ ^2P_{1/2}$	1.51e-03	1.57 e-03	1.57e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4p\ ^2P_{3/2}$	1.38e-03	1.44 e-03	1.43e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F$	1.42e-01	1.40 e-01	1.40e-01
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F_{5/2}$	1.32e-01	1.31 e-01	1.31e-01
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F_{7/2}$	1.42e-01	1.40 e-01	1.40e-01
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F_{5/2}$	9.49e-03	9.35 e-03	9.35e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F$	4.73e-02	4.702 e-02	4.70e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F_{5/2}$	4.41e-02	4.389 e-02	4.38e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F_{7/2}$	4.73e-02	4.702 e-02	4.70e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 3d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F_{5/2}$	3.15e-03	3.134 e-03	3.13e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 5s\ ^2S \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P$	1.63e-02	1.407 e-02	1.43e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 5s\ ^2S_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P_{3/2}$	1.63e-02	1.408 e-02	1.43e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 5s\ ^2S_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P_{1/2}$	1.63e-02	1.404 e-02	1.42e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 4d\ ^2D \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P$	6.33e-04	6.98 e-04	6.22e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 4d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P_{3/2}$	5.73e-04	6.308 e-04	5.62e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 4d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P_{1/2}$	6.26e-04	6.92 e-04	6.16e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 4d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P_{3/2}$	6.36e-05	7.028 e-05	6.24e-05
$1s^2 2s^2 2p^6 4d\ ^2D \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F$	2.65e-02	2.628 e-02	2.59e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 4d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F_{7/2}$	2.65e-02	2.627 e-02	2.59e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 4d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F_{5/2}$	2.47e-02	2.454 e-02	2.42e-02

Çizelge 4.7. Devamı

Geçişler	Bu Çalışma WBEPMT	Fischer (2002)	NIST Değerleri (Wiese 2006)
$1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5d\ ^2D$	5.26e-04	5.779 e-04	5.75e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F_{7/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5d\ ^2D_{5/2}$	5.01e-04	5.506 e-04	5.48e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5d\ ^2D_{3/2}$	5.26e-04	5.776 e-04	5.75e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5d\ ^2D_{5/2}$	2.53e-05	2.75 e-05	2.74e-05
$1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D$	2.20e-04	2.461 e-04	2.46e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F_{7/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{5/2}$	2.09e-04	2.345 e-04	2.34e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{3/2}$	2.20e-04	2.460 e-04	2.46e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 4f\ ^2F_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{5/2}$	1.04e-05	1.171 e-05	1.17e-05
$1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6s\ ^2S$	1.57e-02	1.604 e-02	1.61e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6s\ ^2S_{1/2}$	1.04e-02	1.068 e-02	1.07e-02
$1s^2 2s^2 2p^6 5p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6s\ ^2S_{1/2}$	5.26e-03	5.358 e-03	5.36e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 5d\ ^2D \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P$	2.63e-04	2.599 e-04	2.52e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 5d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P_{3/2}$	2.38e-04	2.351 e-04	2.28e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 5d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P_{1/2}$	2.61e-04	2.572 e-04	2.50e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 5d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P_{3/2}$	2.65e-05	2.613 e-05	2.54e-05
$1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D$	4.04e-04	4.428 e-04	4.43e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F_{7/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{5/2}$	3.85e-04	4.217 e-04	4.22e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{3/2}$	4.04e-04	4.429 e-04	4.43e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 5f\ ^2F_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{5/2}$	1.92e-05	2.108 e-05	2.11e-05
$1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7s\ ^2S$	5.97e-03	6.045 e-03	6.05e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7s\ ^2S_{1/2}$	3.97e-03	4.026 e-03	4.03e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7s\ ^2S_{1/2}$	1.99e-03	2.019 e-03	2.02e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8s\ ^2S$	2.64e-03	2.242 e-03	2.25e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8s\ ^2S_{1/2}$	1.76e-03	1.492 e-03	1.50e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8s\ ^2S_{1/2}$	8.84e-04	7.5 e-04	7.52e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7p\ ^2P$	1.21e-04	1.173 e-04	1.14e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7p\ ^2P_{3/2}$	1.09e-04	1.061 e-04	1.03e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7p\ ^2P_{1/2}$	1.19e-04	1.160 e-04	1.13e-04

Çizelge 4.7. Devamı

Geçişler	Bu Çalışma WBEPMT	Fischer (2002)	NIST Değerleri (Wiese 2006)
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7f\ ^2F$	2.71e-03	2.550 e-03	2.55e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7f\ ^2F_{7/2}$	2.71e-03	2.550 e-03	2.55e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7f\ ^2F_{5/2}$	2.53e-03	2.38 e-03	2.38e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 7f\ ^2F_{5/2}$	1.80e-04	1.700 e-04	1.70e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8f\ ^2F$	1.54e-03	2.106 e-03	1.95e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8f\ ^2F_{7/2}$	1.54e-03	2.106 e-03	1.95e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8f\ ^2F_{5/2}$	1.43e-03	1.966 e-03	1.82e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 6d\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8f\ ^2F_{5/2}$	1.02e-04	1.404 e-04	1.30e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 7p\ ^2P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8s\ ^2S$	2.65e-03	2.676 e-03	2.67e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 7p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8s\ ^2S_{1/2}$	1.76e-03	1.782 e-03	1.78e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 7p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 8s\ ^2S_{1/2}$	8.87e-04	8.94 e-04	8.92e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 7p\ ^2P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 9s\ ^2S$	1.18e-03	1.166 e-03	1.09e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 7p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 9s\ ^2S_{1/2}$	7.87e-04	7.764 e-04	7.25e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 7p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 9s\ ^2S_{1/2}$	3.95e-04	3.903 e-04	3.64e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 8p\ ^2P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 9s\ ^2S$	1.31e-03	1.604 e-03	1.28e-03
$1s^2 2s^2 2p^6 8p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 9s\ ^2S_{1/2}$	8.78e-04	1.068 e-04	8.52e-04
$1s^2 2s^2 2p^6 8p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 9s\ ^2S_{1/2}$	4.41e-04	5.359 e-04	4.27e-04

Ek E: WBEPM teori kullanılarak Potasyum atomu için elde edilen geçiş olasılığı sonuçları

Çizelge 4.8. Uyarılmış potasyum atomu için atomik geçiş olasılıkları $(x10^8\ Hz)$ (Çelik ve Ateş 2008)

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık i	İstatistiksel Ağırlık s	Bu Çalışma WBEPMT	NIST Değerleri (Wiese 2006)	Doğruluk Aralıkları
[Ar]3*d*	**[Ar]5p**	**^{2}D°**	**^{2}P**	**31454.90**	**10**	**6**	**1.77e-02**	**1.5e-02**	
				31384.09	6	4	1.60e-02	1.4e-02	D
				31406.84	4	4	1.78e-03	1.5e-03	D
				31593.01	4	2	1.74e-02	1.5e-02	D
[Ar]3*d*	**[Ar]6p**	**^{2}D°**	**^{2}P**	**13384.50**	**10**	**6**	**5.01e-03**	**4.1e-03**	
				13377.79	6	4	4.53e-03	3.7e-03	D
				13381.93	4	4	5.02e-04	4.1e-04	D
				13397.06	4	2	4.99e-03	4.1e-03	D
[Ar]3*d*	**Ar]7p**	**^{2}D°**	**^{2}P**	**10482.30**	**10**	**6**	**2.62e-03**	**1.9e-03**	
				10479.62	6	4	2.36e-03	1.7e-03	D
				10482.15	4	4	2.62e-04	1.9e-04	D
				10487.10	4	2	2.61e-03	1.9e-03	D
[Ar]3*d*	**[Ar]4f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**15165.20**	**10**	**14**	**1.91e-01**	**1.5e-01**	
				15163.07	6	8	1.91e-01	1.5e-01	D
				15163.07	6	6	1.27e-02	1.0e-02	D
				15168.38	4	6	1.78e-01	1.5e-01	D
[Ar]3*d*	**[Ar]5f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**11021.00**	**10**	**14**	**7.73e-02**	**6.6e-02**	
				11019.85	6	8	7.73e-02	6.6e-02	D+
				11019.85	6	6	5.15e-03	4.4e-03	D+
				11022.65	4	6	7.21e-02	6.2e-02	D+
[Ar]3*d*	**[Ar]6f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**9596.50**	**10**	**14**	**5.47e-02**	**3.5e-02**	
				9595.69	6	8	5.48e-02	3.5e-02	D
				9595.69	6	6	3.65e-03	2.4e-03	D
				9597.81	4	6	5.11e-02	3.3e-02	D
[Ar]5*s*	**[Ar]5*p***	**^{2}S**	**^{2}P**	**27112.50**	**2**	**6**	**5.77e-02**	**4.6e-02**	
				27066.57	2	4	5.80e-02	4.6e-02	D
				27204.72	2	2	5.71e-02	4.5e-02	D
[Ar]5*s*	**[Ar]6*p***	**^{2}S**	**^{2}P**	**12530.50**	**2**	**6**	**6.62e-03**	**4.5e-03**	
				12526.08	2	4	6.65e-03	4.5e-03	D
				12539.34	2	2	6.57e-03	4.5e-03	D
[Ar]4*d*	**[Ar]4f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**136884**	**10**	**14**	**9.14e-04**	**8.9e-04**	
				136804	6	8	9.15e-04	8.9e-04	D+
				136804	6	6	6.10e-05	5.9e-05	D+
				137005	4	6	8.51e-04	8.3e-04	D+
[Ar]4*d*	**[Ar]5f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**31152.0**	**10**	**14**	**2.95e-02**	**2.0e-02**	
				31147.5	6	8	2.95e-02	2.0e-02	D+
				31147.5	6	6	1.96e-03	1.3e-03	D+
				31157.9	4	6	2.75e-02	1.9e-02	D+
[Ar]4*d*	**[Ar]6f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**21945.0**	**10**	**14**	**1.28e-02**	**1.4e-02**	D+
				21942.6	6	8	1.28e-02	1.4e-02	D+
				21942.6	6	6	8.55e-04	9.3e-04	D+
				21947.8	4	6	1.19e-02	1.3e-02	D+
[Ar]4*d*	**[Ar]7f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**18626.0**	**10**	**14**	**1.19e-02**	**8.8e-03**	D+
				18624.8	6	8	1.19e-02	8.8e-03	D+
				18624.8	6	6	7.96e-04	5.9e-04	D+
				18628.5	4	6	1.11e-02	8.2e-03	D+

Doğruluk Aralıkları : $D+\leq 40\%,\ D\leq 50\%$

Çizelge 4.8. Devamı

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT	NIST Değerleri (Wiese 2006)	Doğruluk Aralıkları
		i	s		i	s			
[Ar]4*d*	**[Ar]8p**	**^{2}D°**	**^{2}P**	**20691.0**	**10**	**6**	**1.78e-03**	**1.5e-03**	D
				20685.3	6	4	1.60e-03	1.4e-03	D
				20689.9	4	4	1.78e-04	1.5e-04	D
				20701.3	4	2	1.77e-03	1.5e-03	D
[Ar]5*p*	**[Ar]6s**	**^{2}P**	**^{2}S**	**36528.70**	**6**	**2**	**4.82e-02**	**4.8e-02**	D
				36612.38	4	2	3.19e-02	3.2e-02	D
				36362.60	2	2	1.63e-02	1.6e-02	D
[Ar]5*p*	**[Ar]7s**	**^{2}P**	**^{2}S**	**17979.50**	**6**	**2**	**2.34e-02**	**1.7e-02**	D
				17999.77	4	2	1.55e-02	1.1e-02	D
				17939.19	2	2	7.89e-03	5.6e-03	D
[Ar]5*d*	**[Ar]6f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**56576.14**	**10**	**14**	**7.79e-03**		
				56569.34	6	8	7.79e-03		
				56569.34	6	6	5.19e-04		
				56584.83	4	6	7.26e-03		
[Ar]5*d*	**[Ar]7f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**38773.67**	**10**	**14**	**2.63e-03**		
				38770.59	6	8	2.63e-03		
				38770.59	6	6	1.75e-04		
				38778.23	4	6	2.45e-03		
[Ar]5*d*	**[Ar]8f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**32199.77**	**10**	**14**	**2.81e-03**		
				32197.68	6	8	2.81e-03		
				32197.68	6	6	1.87e-04		
				32202.91	4	6	2.62e-03		
[Ar]6*d*	**[Ar]5f**	**^{2}D°**	**^{2}F**	**91814.18**	**10**	**14**	**5.70e-04**		
				91823.13	6	8	5.70e-04		
				91823.13	6	6	3.80e-05		
				66214.13	4	6	5.32e-04		
[Ar]6*s*	**[Ar]7*p***	**^{2}S**	**^{2}P**	**27610.66**	**2**	**6**	**1.76e-03**		
				27599.23	2	4	1.76e-03		
				27633.54	2	2	1.74e-03		
[Ar]6*s*	**[Ar]8*p***	**^{2}S**	**^{2}P**	**20929.33**	**2**	**6**	**1.39e-03**		
				20925.44	2	4	1.39e-03		
				20937.13	2	2	1.39e-03		
[Ar]7*s*	**[Ar]7*p***	**^{2}S**	**^{2}P**	**125224.92**	**2**	**6**	**4.41e-03**		
				124990.17	2	4	4.44e-03		
				125697.08	2	2	4.36e-03		
[Ar]7*s*	**[Ar]8*p***	**^{2}S**	**^{2}P**	**51157.29**	**2**	**6**	**6.04e-04**		
				51134.01	2	4	6.06e-04		
				51203.91	2	2	6.00e-04		
[Ar]7*s*	**[Ar]9*p***	**^{2}S**	**^{2}P**	**37498.00**	**2**	**6**	**4.96e-04**		
				37489.93	2	4	5.00e-04		
				37514.16	2	2	5.01e-04		
[Ar]8*s*	**[Ar]8*p***	**^{2}S**	**^{2}P**	**215613.87**	**2**	**6**	**1.78e-03**		
				215200.95	2	4	1.78e-03		
				216444.47	2	2	1.75e-03		
[Ar]8*s*	**[Ar]9*p***	**^{2}S**	**^{2}P**	**85045.21**	**2**	**6**	**2.48e-04**		
				85003.69	2	4	2.48e-04		
				85128.37	2	2	2.46e-04		
[Ar]4*f*	**[Ar]5d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**48605.78**	**14**	**10**	**1.21e-03**		
				48610.55	8	6	1.15e-03		
				48610.55	6	6	5.78e-05		
				48598.65	6	4	1.21e-03		

Çizelge 4.8. Devamı

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık i	İstatistiksel Ağırlık s	Bu Çalışma WBEPMT
[Ar]4*f*	**[Ar]6d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**28028.77**	**14**	**10**	**4.34e-04**
				28029.60	8	6	4.34e-04
				28029.60	6	6	2.17e-05
				28027.51	6	4	4.56e-04
[Ar]4*f*	**[Ar]7d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**22371.33**	**14**	**10**	**2.64e-04**
				22371.64	8	6	2.52e-04
				22371.64	6	6	1.26e-05
				22370.86	6	4	2.65e-04
[Ar]4*f*	**[Ar]8d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**19802.90**	**14**	**10**	**1.93e-04**
				19803.05	8	6	1.84e-04
				19803.05	6	6	9.20e-06
				19802.66	6	4	1.93e-04
[Ar]4*f*	**[Ar]9d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**18370.08**	**14**	**10**	**1.67e-04**
				18370.17	8	6	1.59e-04
				18370.17	6	6	7.96e-06
				18369.94	6	4	1.67e-04
[Ar]5*f*	**[Ar]5d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**237395.45**	**14**	**10**	**8.52e-04**
				237281.96	8	6	8.12e-04
				237281.96	6	6	4.06e-05
				237565.86	6	4	8.50e-04
[Ar]5*f*	**[Ar]6d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**91814.18**	**14**	**10**	**7.98e-04**
				91823.13	8	6	7.60e-04
				91823.13	6	6	3.80e-05
				91800.74	6	4	7.99e-04
[Ar]5*f*	**[Ar]7d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**50215.92**	**14**	**10**	**3.52e-04**
				50217.49	8	6	3.35e-04
				50217.49	6	6	1.67e-05
				50213.56	6	4	3.52e-04
[Ar]5*f*	**[Ar]8d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**38892.96**	**14**	**10**	**2.26e-04**
				38893.55	8	6	2.16e-04
				38893.55	6	6	1.08e-05
				38892.06	6	4	2.27e-04
[Ar]5*f*	**[Ar]9d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**33726.49**	**14**	**10**	**1.78e-04**
				33726.79	8	6	1.69e-04
				33726.79	6	6	8.48e-06
				33726.04	6	4	1.78e-04
[Ar]6*f*	**[Ar]6d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**388900.94**	**14**	**10**	**4.66e-04**
				388740.40	8	6	4.44e-04
				388740.40	6	6	2.22e-05
				389142.14	6	4	4.65e-04
[Ar]6*f*	**[Ar]7d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**155012.55**	**14**	**10**	**4.59e-04**
				155027.50	8	6	4.37e-04
				155027.50	6	6	2.18e-05
				154990.12	6	4	4.59e-04
[Ar]6*f*	**[Ar]8d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**81641.45**	**14**	**10**	**2.26e-04**
				81644.07	8	6	2.15e-04
				81644.07	6	6	1.07e-05
				81637.51	6	4	2.26e-04
[Ar]6*f*	**[Ar]9d**	**^{2}F**	**^{2}D°**	**61776.57**	**14**	**10**	**1.56e-04**
				61777.57	8	6	1.49e-04
				61777.57	6	6	7.45e-06

Çizelge 4.8. Devamı

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma WBEPMT
		i	s		i	s	
[Ar]5*d*	**[Ar]6p**	**^{2}D°**	**P**	**84715.97**	**10**	**6**	**3.36e-02**
				84328.20	6	4	3.00e-02
				84896.31	4	4	3.34e-03
				84932.62	4	2	3.40e-02
[Ar]5*d*	**[Ar]7p**	**^{2}D°**	**^{2}P**	**112694.27**	**10**	**6**	**9.29e-03**
				112478.61	6	4	8.43e-03
				113127.96	4	2	9.15e-03
				112542.37	4	4	9.35e-04
[Ar]5*d*	**[Ar]8p**	**^{2}D°**	**P**	**48934.48**	**10**	**6**	**6.61e-04**
				48908.36	6	4	5.94e-04
				48984.38	4	2	6.62e-04
				48920.41	4	4	6.60e-05
[Ar]6*d*	**[Ar]7p**	**^{2}D°**	**^{2}P**	**160503.89**	**10**	**6**	**1.35e-02**
				160918.69	6	4	1.21e-02
				159694.17	4	2	1.37e-02
				160849.55	4	4	1.34e-03
[Ar]6*d*	**[Ar]8p**	**^{2}D°**	**^{2}P**	**187562.93**	**10**	**6**	**5.54e-03**
				187213.16	6	4	5.02e-03
				188247.62	4	2	5.46e-03
				187306.28	4	4	5.57e-04
[Ar]6*d*	**[Ar]9p**	**^{2}D°**	**P**	**80307.89**	**10**	**6**	**2.07e-04**
				80264.03	6	4	1.86e-04
				80392.34	4	2	2.09e-04
				80281.14	4	4	2.07e-05

Ek F: Bir kez iyonlaşmış Lityum için WBEPMT ile hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

Çizelge 4.9. Li II için soğurma osilatör şiddetleri (Ateş ve Çelik 2009)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		Osilatör Şiddetleri						
i	s	i	s	i	s	Bu Çalışma (NCA)	Bu Çalışma (NRHF)	NIST* (Ralchenko ve ark. 2007)	Atomic Line Data (2009)	Theodosiou (1985)	Cann ve Thakkar (1992)	Diğerleri
1*s*^{2}	**1*s*2*p***	**^{1}S**	**^{1}P°**	**1**	**3**	**4.10e-01**	**4.70e-01**	**4.57e-01[A]**	**4.62e-01**	**4.51e-01**	**4.566e-01**	**4.56e-01** [a]
1*s*^{2}	**1*s*3*p***	**^{1}S**	**^{1}P°**	**1**	**3**	**1.01e-01**	**1.21 e-01**	**1.11e-01[A]**	**1.12e-01**	**1.089e-01**	**1.106e-01**	**1.10e-01** [a]
1*s*2*s*	**1*s*2*p***	**^{3}S**	**^{3}P°**	**3**	**9**	**3.09e-01**	**3.12e-01**	**3.08e-01**	**3.08e-01**		**3.079e-01**	**3.07e-01** [a]
				3	1	3.43e-02	3.46e-02	3.43e-02[A+]				
				3	5	1.71e-01	1.73e-01	1.71e-01[A+]				
				3	3	1.03e-01	1.04e-01	1.03e-01[A+]				
1*s*2*s*	**1*s*3*p***	**^{3}S**	**^{3}P°**	**3**	**9**	**1.72e-01**	**1.86e-01**	**1.86e-01**	**1.87e-01**		**1.87e-01**	**1.87e-01** [a]
				3	5	9.59e-02	1.03e-01	1.03e-01[A+]				
				3	3	5.75e-02	6.23e-02	6.20e-02[A+]				
				3	1	1.91e-02	2.07e-02	2.07e-02[A+]				
1*s*2*s*	**1*s*2*p***	**^{1}S**	**^{1}P°**	**1**	**3**	**2.12e-01**	**2.01e-01**	**2.14e-01 [A]**	**2.13e-01**	**2.14e-01**	**2.125e-01**	**2.13e-01** [a]
1*s*2*s*	**1*s*3*p***	**^{1}S**	**^{1}P°**	**1**	**3**	**2.52e-01**	**1.06e-01**	**2.56e-01 [A]**	**2.64e-01**	**2.55e-01**	**2.57e-01**	**2.57e-01** [a]
1*s*2*p*	**1*s*3*s***	**^{3}P°**	**^{3}S**	**9**	**3**	**3.84e-02**	**3.63e-02**	**3.89e-02**	**3.91e-02**			
				3	3	3.84e-02	3.63e-02	3.89e-02[B+]				
				5	3	3.84e-02	3.63e-02	3.88e-02[B+]				
				1	3	3.84e-02	3.63e-02	3.90e-02[B+]				
1*s*2*p*	**1*s*3*d***	**^{3}P°**	**^{3}D**	**9**	**15**	**6.27e-01**	**6.26e-01**	**6.24e-01**	**6.26e-01**	**6.20e-01**	**6.246e-01**	**6.246e-01** [b]
				3	5	4.70e-01	4.70e-01	4.68e-01[A+]				
				5	7	5.27e-01	5.26e-01	5.24e-01[A+]				
				1	3	6.27e-01	6.26e-01	6.24e-01[A+]				
				5	5	9.41e-02	9.40e-02	9.36e-02[A+]				
				3	3	1.56e-01	1.56e-01	1.56e-01[A+]				
				5	3	6.27e-03	6.26e-03	6.24e-03[A+]				
1*s*2*p*	**1*s*4*s***	**^{3}P°**	**^{3}S**	**9**	**3**	**6.94e-03**	**6.71e-03**	**6.94e-03**	**7.18e-03**			
				3	3	6.94e-03	6.71e-03	6.94e-03[B+]				
				5	3	6.94e-03	6.71e-03	6.94e-03[B+]				
				1	3	6.94e-03	6.71e-03	6.92e-03[B+]				
1*s*2*p*	**1*s*4*d***	**^{3}P°**	**^{3}D**	**9**	**15**	**1.25e-01**	**1.25e-01**	**1.22e-01**	**1.23e-01**	**1.22e-01**	**1.232e-01**	**1.232e-01** [b]
				1	3	1.25e-01	1.25e-01	1.22e-01[B+]				
				5	7	1.05e-01	1.05e-01	1.02e-01[B+]				
				3	5	9.40e-02	9.41e-02	9.12e-02[B+]				
				5	5	1.88e-02	1.88e-02	1.82e-02[B+]				
				3	3	3.13e-02	3.13e-02	3.03e-02[B+]				
				5	3	1.25e-03	1.25e-03	1.22e-03[B+]				
1*s*2*p*	**1*s*3*s***	**^{1}P°**	**^{1}S**	**3**	**1**	**3.13e-02**	**6.61e-02**	**3.14e-02 [B]**	**3.08e-02**			
1*s*2*p*	**1*s*3*d***	**^{1}P°**	**^{1}D**	**3**	**5**	**7.13e-01**	**7.29e-01**	**7.14e-01 [A]**	**7.14e-01**	**7.15e-01**	**7.116e-01**	**7.116e-01** [b]
1*s*2*p*	**1*s*4*s***	**^{1}P°**	**^{1}S**	**3**	**1**	**6.04e-03**	**1.10e-02**	**6.09e-03 [B]**	**6.14e-03**			
1*s*2*p*	**1*s*4*d***	**^{1}P°**	**^{1}D**	**3**	**5**	**1.19e-01**	**1.50e-01**	**1.19e-01 [B]**	**1.20e-01**	**1.20e-01**	**1.192e-01**	**1.192e-01** [b]
1*s*2*p*	**1*s*5*d***	**^{1}P°**	**^{1}D**	**3**	**5**	**4.64e-02**	**4.65e-02**	**4.16e-02 [B]**	**4.27e-02**	**4.33e-02**	**4.274e-02**	**4.27e-02** [b]
1*s*3*s*	**1*s*3*p***	**^{3}S**	**^{3}P°**	**3**	**9**	**5.12e-01**	**5.15e-01**	**5.07e-01**	**5.12e-01**		**5.13e-01**	
				3	5	2.84e-01	2.86e-01	2.82e-01[B+]				
				3	3	1.70e-01	1.71e-01	1.69e-01[B+]				
				3	1	5.69e-02	5.73e-02	5.63e-02[B+]				

[a] Anderson and Weinhold (1974) [b] Kono and Hattori (1984)

Çizelge 4.9. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		Osilatör Şiddetleri						
i	s	i	s	i	s	Bu Çalışma (NCA)	Bu Çalışma (NRHF)	NIST* (Ralchenko ve ark. 2007)	At. Line Data (2009)	Theodosiou (1985)	Cann ve Thakkar (1992)	Kono ve Hattori (1984)
1*s*3*s*	**1*s*4*p***	**^{3}S**	**^{3}P°**	**3**	**9**	**2.54e-01**	**2.55e-01**	**1.89e-01**	**1.86e-01**		**1.868e-01**	
				3	5	1.41e-01	1.42e-01	1.05e-01[B+]				
				3	3	8.47e-02	8.52e-02	6.29e-02[B+]				
				3	1	2.82e-02	2.84e-02	2.10e-02[B+]				
1*s*3*s*	**1*s*3*p***	**^{1}S**	**^{1}P°**	**1**	**3**	**3.62e-01**	**3.44e-01**	**3.61e-01 [B]**	**3.63e-01**	**3.63e-01**	**3.627e-01**	
1*s*3*p*	**1*s*3*d***	**^{3}P°**	**^{3}D**	**9**	**15**	**9.08e-02**	**9.08e-02**	**9.05e-02**	**9.08e-02**	**9.05e-02**	**9.08e-02**	**9.07e-02**
				5	7	7.63e-02	7.62e-02	7.61e-02[A+]				
				3	5	6.81e-02	6.81e-02	6.79e-02[A+]				
				1	3	9.08e-02	9.07e-02	9.06e-02[A+]				
				5	5	1.36e-02	1.36e-02	1.36e-02[A+]				
				3	3	2.27e-02	2.27e-02	2.26e-02[A+]				
				5	3	9.08e-04	9.08e-04	9.06e-04[A+]				
1*s*3*p*	**1*s*4*s***	**^{3}P°**	**^{3}S**	**9**	**3**	**8.41e-02**	**8.40e-02**	**8.50e-02**	**8.51e-02**			
				3	3	8.41e-02	8.40e-02	8.51e-02[B+]				
				5	3	8.41e-02	8.40e-02	8.51e-02[B+]				
				1	3	8.41e-02	8.40e-02	8.50e-02[B+]				
1*s*3*p*	**1*s*4*d***	**^{3}P°**	**^{3}D**	**9**	**15**	**5.00e-01**	**5.10e-01**	**5.09e-01**	**5.05e-01**	**5.02e-01**	**5.033e-01**	**5.034e-01**
				3	3	1.25e-01	1.27e-01	1.27e-01[B+]				
				5	7	4.20e-01	4.28e-01	4.28e-01[B+]				
				5	5	7.50e-02	7.65e-02	7.66e-02[B+]				
				5	3	5.00e-03	5.10e-03	5.10e-03[B+]				
				3	5	3.75e-01	3.82e-01	3.83e-01[B+]				
				1	3	5.00e-01	5.10e-01	5.10e-01[B+]				
1*s*3*p*	**1*s*5*s***	**^{3}P°**	**^{3}S**	**9**	**3**	**1.52e-02**	**1.53e-02**	**1.58e-02**	**1.60e-02**			
				3	3	1.52e-02	1.53e-02	1.58e-02[B+]				
				5	3	1.52e-02	1.53e-02	1.59e-02[B+]				
				1	3	1.52e-02	1.53e-02	1.58e-02[B+]				
1*s*3*p*	**1*s*6*d***	**^{3}P°**	**^{3}D**	**9**	**15**	**5.24e-02**	**5.33e-02**	**5.29e-02**	**5.39e-02**		**5.388e-02**	
				3	3	1.31e-02	1.33e-02	1.32e-02[B+]				
				5	7	4.40e-02	4.47e-02	4.45e-02[B+]				
				3	5	3.93e-02	3.99e-02	3.97e-02[B+]				
				1	3	5.24e-02	5.33e-02	5.28e-02[B+]				
				5	5	7.87e-03	7.99e-03	7.94e-03[B+]				
				5	3	5.24e-04	5.33e-04	5.30e-04[B+]				
1*s*3*d*	**1*s*4*p***	**^{3}D**	**^{3}P°**	**15**	**9**	**1.99e-02**	**1.89e-02**	**1.99e-02**	**1.96e-02**			
				7	5	1.99e-02	1.89e-02	1.99e-02[B+]				
				5	3	1.49e-02	1.41e-02	1.49e-02[B+]				
				3	1	1.10e-02	1.05e-02	1.10e-02[B+]				
				5	5	4.97e-03	4.73e-03	4.96e-03[B+]				
				3	3	8.30e-03	7.88e-03	8.27e-03[B+]				
				3	5	5.53e-04	5.25e-04	5.52e-04[B+]				
				3	3	1.52e-03	1.44e-03	1.54e-03[B+]				

Çizelge 4.9. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		Osilatör Şiddetleri						
i	s	i	s	i	s	Bu Çalışma (NCA)	Bu Çalışma (NRHF)	NIST* (Ralchenko ve ark. 2007)	At. Line Data (2009)	Theodosiou (1985)	Cann ve Thakkar (1992)	Kono ve Hattori (1984)
1s3*d*	**1s5*p***	**^{3}D**	**^{3}P°**	**15**	**9**	**3.66e-03**	**3.47e-03**	**3.68e-03**	**3.71e-03**			
				7	5	3.66e-03	3.47e-03	3.68e-03[B+]				
				5	3	2.74e-03	2.60e-03	2.76e-03[B+]				
				3	1	2.03e-03	1.92e-03	2.05e-03[B+]				
				5	5	9.14e-04	8.68e-04	9.22e-04[B+]				
1s3*d*	**1s3*p***	**^{1}D**	**^{1}P°**	**5**	**3**	**1.45e-02**	**1.45e-02**	**1.56e-02 [B]**	**1.46e-02**			
1s3*d*	**1s4*p***	**^{1}D**	**^{1}P°**	**5**	**3**	**8.97e-03**	**8.20e-03**	**9.11e-03 [B]**	**8.90e-03**			
1s3*p*	**1s4*s***	**^{1}P°**	**^{1}S**	**3**	**1**	**6.87e-02**	**1.31e-01**	**6.86e-02 [B]**	**6.69e-02**			
1s3*p*	**1s4*d***	**^{1}P°**	**^{1}D**	**3**	**5**	**6.52e-01**	**6.68e-01**	**6.53e-01 [B]**	**6.54e-01**		**6.5174e-01**	**6.517e-01**
1s3*p*	**1s5*s***	**^{1}P°**	**^{1}S**	**3**	**1**	**1.32e-02**	**2.28e-02**	**1.38e-02 [B]**	**1.36e-02**			
1s3*p*	**1s5*d***	**^{1}P°**	**^{1}D**	**3**	**5**	**1.30e-01**	**1.33e-01**	**1.39e-01 [B]**	**1.42e-01**		**1.414e-01**	**1.414e-01**
1s3*p*	**1s6*s***	**^{1}P°**	**^{1}S**	**3**	**1**	**6.36e-03**	**9.75e-03**	**5.41e-03 [B]**	**5.34e-03**			
1s3*p*	**1s6*d***	**^{1}P°**	**^{1}D**	**3**	**5**	**5.67e-02**	**5.76e-02**	**5.53e-02 [B]**	**5.64e-02**		**5.623e-02**	

*NIST Doğruluk Aralıkları : $A+ \leq 2\%,\ A \leq 3\%,\ B+ \leq 7\%,\ B \leq 10\%$

Ek G: O II için WBEPM teori kullanılarak elde edilen osilatör şiddeti sonuçları

Çizelge 4.10. Bir kez iyonlaşmış Oksijenin bazı ikili ve dörtlü seviyeleri arasındaki geçişler için multiplet osilatör şiddetleri (Ateş ve ark. 2009)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	Bu Çalışma	NIST (Ralchenko ve ark. 2007)	Becker ve Butler (1988)	Tachiev ve Fischer (2002)	Bell ve ark. (1991)	Lennon ve Burke (1991)	Tayal ve Richardson (2000)	Andersen and Aashamar (1993)	Wiese (1996)	Deneysel Sonuçlar
$2s^22p^3$	$2s^22p^2(^3P)3s$	$^4S°$	^4P	539.368	0.113	0.128	0.1216	0.1318	0.127	0.133	0.135	0.15	0.129	0.14±0.01[a].0.15±0.05[b].0.16±0.04[c]
$2s^22p^3$	$2s^22p^2(^3P)3d$	$^4S°$	^4P	430.088	0.360	0. 354	0.3695	0.3151	0.339	0.375	0.374		0.355	
$2s^22p^3$	$2s^22p^2(^3P)3d$	$^2D°$	^2D	481.660	0.0218	0.0273	0.0257	0.02797	0.029	0.026	0.024	0.028	0.027	0.019[d]
$2s^22p^3$	$2s^22p^2(^3P)4d$	$^2D°$	^2D	436.572	0.00897	0.00886	0.00510							
$2s^22p^3$	$2s^22p^2(^3P)3s$	$^2P°$	^2P	673.220	0.039	0.0385	0.04092	0.03792	0.039	0.038	0.043	0.044	0.039	0.038±0.002[a]
$2s^22p^3$	$2s^22p^2(^3P)3d$	$^2P°$	^2D	515.556	0.112	0.122	0.1135	0.1184	0.131	0.115	0.118	0.127	0.122	0.097[d]
$2s^22p^3$	$2s^22p^2(^3P)4d$	$^2P°$	^2P	465.677	0.0376	0.0543	0.0044							
$2s^22p^2(^3P)3s$	$2s^22p^2(^3P)3p$	^4P	$^4D°$	4651.508	0.446*	0.426	0.4476	0.4394	0.459	0.443	0.442	0.423	0.427	
$2s^22p^2(^3P)3s$	$2s^22p^2(^3P)3p$	^4P	$^4S°$	3735.92	0.121	0.121	0.1249	0.1201	0.128	0.123	0.119	0.113	0.121	
$2s^22p^2(^3P)3s$	$2s^22p^2(^3P)3p$	$^2P°$	^2P	3966.938	0.339*	0.293	0.3155	0.3011	0.305	0.313				
$2s^22p^2(^3P)3p$	$2s^22p^2(^3P)4s$	$^4D°$	^4P	3133.78	0.127	0.136	0.1309	0.1347			0.114		0.136	
$2s^22p^2(^3P)3p$	$2s^22p^2(^3P)3d$	^4P	$^4P°$	4151.672	0.226	0.25	0.2534	0.2652	0.249	0.256	0.233	0.208	0.249	
$2s^22p^2(^3P)3p$	$2s^22p^2(^3P)3d$	^4P	$^4D°$	4111.423	0.686	0.498	0.6423	0.5288	0.560	0.643	0.604	0.513	0.500	
$2s^22p^2(^3P)3p$	$2s^22p^2(^3P)3d$	$^2D°$	^2F	4703.92	0.693	0.497	0.6648	0.5247	0.527		0.648			
$2s^22p^2(^3P)3p$	$2s^22p^2(^3P)3d$	$^2D°$	^2D	4385.23	0.13	0.112	0.1204	0.1172	0.112	0.123				
$2s^22p^2(^3P)3p$	$2s^22p^2(^3P)5s$	$^4D°$	^4P	1961.920	0.0208	0.0204	0.01968							
$2s^22p^2(^3P)3p$	$2s^22p^2(^3P)5s$	^4P	^4P	2022.222	0.0172*	0.0173	0.01773							
$2s^22p^2(^3P)3p$	$2s^22p^2(^3P)5s$	$^2D°$	^2P	2131.30	0.0177*	0.0202	0.01895							
$2s^22p^2(^3P)3p$	$2s^22p^2(^3P)5s$	$^4S°$	^4P	2187.34	0.0229	0.0245	0.02336							

[a]Pinnington ve ark. 1974 [b]Martinson ve ark.1971 [c]Lin ve ark.1972 [d]Wiese 1996

Çizelge 4.11. Bir kez iyonlaşmış oksijen için ince yapı seviyeleri arasındaki osilatör şiddetleri (Ateş ve ark. 2009)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST[#] (Ralchenko ve ark. 2007)	Bell ve ark. (1991)	Tachiev ve Fischer (2002)	Becker ve Butler (1988)
$2s^22p^3$	**$2s^22p^2(^3P)3s$**	**$^4S°$**	**^4P**	**539.368**	**4**	**12**	**0.113**	**0.128**	**0.139**	**0.1318**	**0.1216**
				539.0861	4	6	0.0569	0.0642 [B+]	0.0634	0.06598	
				539.5473	4	4	0.0378	0.0428 [B+]	0.0423	0.04388	
				539.8540	4	2	0.0188	0.0214 [B+]	0.0211	0.02191	
		$^2P°$	**^2P**	**673.220**	**6**	**6**	**0.0393**	**0.0385**	**0.039**	**0.03792**	**0.04092**
				672.9452	4	4	0.0328	0.0325 [B+]	0.0329	0.03202	
				672.9542	2	4	0.0131	0.0131 [B+]	0.0133	0.01294	
				673.7612	4	2	0.00653	0.00633 [B+]	0.0064	0.006135	
				673.7703	2	2	0.0261	0.0247 [B+]	0.0250	0.02452	
$2s^22p^3$	**$2s^22p^2(^1D)3s$**	**$^2P°$**	**^2D**	**600.588**	**6**	**10**	**0.0528**	**0.0429**	**0.049**		
				600.587	4	6	0.0475	0.0382 [B]	0.0403		
				600.584	4	4	0.00528	0.00472 [C+]	0.0050		
				600.591	2	4	0.0528	0.0428 [B]	0.0452		
$2s^22p^3$	**$2s^22p^2(^3P)4s$**	**$^2D°$**	**^2D**	**430.164**	**10**	**10**	**0.00833***	**0.00760**			
				430.150	6	6	0.00778*	0.00710 [D]			
				430.149	6	4	0.00055*	0.000507 [D]			
				430.187	4	6	0.00833*	0.00762 [D]			
				430.186	4	4	0.00750*	0.00685 [D]			
$2s^22p^3$	**$2s^22p^2(^3P)3d$**	**$^4S°$**	**^4P**	**430.088**	**4**	**12**	**0.360**	**0.354**	**0.377**	**0.3151**	**0.3695**
				429.9180	4	2	0.0601	0.0589 [B+]	0.0563	0.04704	
				430.0410	4	4	0.120	0.115 [B+]	0.1093	0.09995	
				430.1765	4	6	0.180	0.181 [B+]	0.1732	0.1681	
		$^2D°$	**^2D**	**481.660**	**10**	**10**	**0.0218**	**0.0273**	**0.028**	**0.02797**	**0.0257**
				481.5933	6	6	0.0203	0.0264 [B]	0.0279	0.02707	
				481.6397	4	6	0.00218	0.00196 [C]	0.0021	0.001998	
				481.7136	6	4	0.00146	0.00383 [C]	0.0040	0.004006	
				481.7600	4	4	0.0196	0.0209 [B]	0.0220	0.02132	
		$^2P°$	**^2D**	**515.556**	**6**	**10**	**0.111**	**0.122**	**0.127**	**0.1184**	**0.1135**
				515.4995	4	6	0.100	0.109 [B]	0.1167	0.1056	
				515.6372	4	4	0.0111	0.020 [D]	0.0214	0.01894	
				515.6425	2	4	0.0111	0.108 [B]	0.1164	0.106	
$2s^22p^3$	**$2s^22p^2(^1D)3d$**	**$^2D°$**	**^2D**	**442.029**	**10**	**10**	**0.0907**	**0.0817**			**0.0852**
				442.012	6	6	0.0847	0.0764 [D]			
				442.016	6	4	0.00605	0.00545 [D]			
				442.055	4	4	0.0816	0.0735 [D]			
				442.051	4	6	0.00907	0.00817 [D]			
$2s^22p^3$	**$2s^22p^2(^1D)3d$**	**$^2D°$**	**^2P**	**440.581**	**10**	**6**	**0.0211**	**0.0267**			
				440.603	4	4	0.00352	0.00445 [D]			
				440.607	4	2	0.00176	0.00223 [D]			
				440.564	6	4	0.0211	0.0266 [D]			
		$^2P°$	**^2D**	**470.413**	**6**	**10**	**0.0511**	**0.0446**			**0.0363**
				470.418	2	4	0.0511	0.0445 [D]			
				470.409	4	6	0.0460	0.0401 [D]			
				470.414	4	4	0.00511	0.00445[D]			
$2s^22p^3$	**$2s^22p^2(^3P)4d$**	**$^4S°$**	**^4P**	**391.961**	**4**	**12**	**0.144**	**0.164**			**0.1638**
				391.9062	4	2	0.0241	0.0274 [C+]			

Çizelge 4.11. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST[#] (Ralchenko ve ark. 2007)	Bell ve ark. (1991)	Tachiev ve Fischer (2002)	Becker ve Butler (1988)
$2s^2 2p^3$	**$2s^2 2p^2(^3P)4d$**	**$^2D°$**	**^2D**	**436.572**	**10**	**10**	**0.00897**	**0.00886**			**0.005101**
				436.5153	6	6	0.00839	0.00826 [D]			
				436.5535	4	6	8.99e-04	8.87e-04[D]			
				436.6195	6	4	5.97e-04	5.91e-04 [D]			
				436.6577	4	4	0.00806	0.00798 [D]			
		$^2P°$	**^2D**	**464.237**	**6**	**10**	**0.0449**	**0.0483**			**0.05578**
				464.311	2	4	0.0448	0.0483 [D]			
				464.189	4	6	0.0405	0.0435 [D]			
				464.307	4	4	0.00448	0.00482 [E]			
$2s^2 2p^3$	**$2s^2 2p^2(^3P)5d$**	**$^4S°$**	**^4P**	**376.724**	**4**	**10**	**0.0778**				**0.0867**
				376.693	4	4	0.00260				
				376.745	4	6	0.0388				
$2s^2 2p^2(^3P)3s$	**$2s^2 2p^2(^3P)3p$**	**^4P**	**$^4D°$**	**4 651.508**	**12**	**20**	**0.446***	**0.426**	**0.459**		**0.4476**
				4 638.855	2	4	0.223*	0.233 [B]	0.2466		
				4 641.810	4	6	0.281*	0.284 [B]	0.3035		
				4 649.134	6	8	0.358*	0.339 [B]	0.3672		
				4 650.838	2	2	0.222*	0.217 [B]	0.2335		
				4 661.632	4	4	0.142*	0.132 [B]	0.1409		
				4 673.733	4	2	0.0221*	0.0203 [B]	0.0208		
				4 676.235	6	6	0.0800*	0.0672 [B]	0.0729		
				4 696.352	6	4	0.00885*	0.00695 [B]	0.0073		
		^4P	**$^4P°$**	**4342.495**	**12**	**12**	**0.288***	**0.260**	**0.276**		**0.2674**
				4326.977	2	2	0.0481*	0.0399 [B]	0.0417		
				4318.353	2	4	0.241*	0.206 [B]	0.2209		
				4346.782	4	2	0.120*	0.113 [B]	0.117		
				4338.078	4	4	0.0385*	0.0432 [B]	0.0458		
				4320.844	4	6	0.130*	0.104 [B]	0.110		
				4368.122	6	4	0.0862*	0.0748 [B]	0.0799		
				4350.649	6	6	0.202*	0.192 [B]	0.2027		
		^4P	**$^4S°$**	**3 735.92**	**12**	**4**	**0.121**	**0.121**	**0.128**		**0.1249**
				3 712.744	2	4	0.122	0.114 [B]	0.119		
				3 727.319	4	4	0.122	0.118 [B]	0.1238		
				3 749.484	6	4	0.121	0.126 [B]	0.1316		
		^2P	**$^2P°$**	**3 966.938**	**6**	**6**	**0.339***	**0.293**	**0.305**	**0.3011**	**0.3155**
				3 945.037	2	4	0.0113*	0.0938 [B]	0.10	0.09742	
				3 954.361	2	2	0.226*	0.201 [B]	0.2010	0.1984	
				3 973.256	4	4	0.282*	0.242 [B]	0.2546	0.2522	
				3 982.714	4	2	0.0563*	0.0495 [B]	0.0521	0.05152	
		^2P	**$^2D^o$**	**4419.311**	**6**	**10**	**0.509***	**0.414**	**0.452**	**0.4480**	**0.4767**
				4416.138	4	6	0.459*	0.371 [B]	0.4061	0.4030	
				4453.628	4	4	0.0506*	0.0407 [B]	0.0438	0.04282	
				4418.215	2	4	0.508*	0.419 [B]	0.4548	0.4523	
		^2P	**$^2S^o$**	**6696.235**	**6**	**2**	**0.0638***	**0.0627**		**0.06049**	**0.0722**
				6723.243	4	2	0.0636*	0.0613 [B+]	0.0616	0.05922	
				6642.865	2	2	0.0642*	0.0654 [B+]	0.0655	0.06305	
$2s^2 2p^2(^3P)3s$	**$2s^2 2p^2(^3P)5p$**	**^2P**	**$^2D^o$**	**1373.760**	**6**	**10**	**0.00265***	**0.00306**			**0.00233**
				1373.599	4	6	0.00262*	0.00275 [C]			
				1376.837	4	4	2.231e-04*	3.04e-04 [D]			

Çizelge 4.11. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST[#] (Ralchenko ve ark. 2007)	Tachiev ve Fischer (2002)	Becker ve Butler (1988)
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	**$2s^2 2p^2(^3P)4s$**	**$^4D°$**	**^4P**	**3133.78**	**20**	**12**	**0.127**	**0.136**	**0.1347**	**1.309e-01**
				3113.617	4	6	0.00641	0.00685 [C]	0.005395	
				3122.524	6	6	0.0384	0.0410 [C]	0.03578	
				3123.910	2	4	0.0211	0.0227 [C]	0.06895	
				3129.340	4	4	0.0676	0.0726 [C]	0.1141	
				3134.213	2	2	0.105	0.113 [C]	0.1348	
				3134.726	8	6	0.127	0.136 [C]	0.09884	
				3138.337	6	4	0.0885	0.0949 [C]	0.06019	
				3139.678	4	2	0.0524	0.0565 [C]		
		$^4P°$	**^4P**	**3293.240**	**12**	**12**	**0.115***	**0.0954**	**0.1167**	**0.1124**
				3302.362	2	2	0.0196*	0.0173 [B]	0.01737	
				3290.930	2	4	0.0966*		0.09899	
				3307.403	4	2	0.0492*	0.0455 [B]	0.0465	
				3295.936	4	4	0.0155*	0.0163 [B]	0.01986	
				3278.506	4	6	0.0511*	0.0488 [B]	0.05043	
				3305.955	6	4	0.0351*	0.0316 [B]	0.03050	
				3288.418	6	6	0.08019*	0.0798 [B]	0.08626	
		$^4S°$	**^4P**	**3754.615**	**4**	**12**	**0.153**	**0.183**	**0.2234**	**0.2355**
				3778.493	4	2	0.02518	0.0241 [B]	0.03536	
				3763.534	4	4	0.0507	0.0658 [B]	0.07295	
				3740.824	4	6	0.0770	0.0935 [B]	0.1151	
		$^2D°$	**^2P**	**3470.004**	**10**	**6**	**0.118***	**0.102**	**0.1396**	**0.1298**
				3471.666	6	4	0.117*	0.104 [B]	0.1398	
				3471.271	4	2	0.0994*	0.0985 [B]	0.1172	
				3448.843	4	4	0.0193*		0.02221	
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	**$2s^2 2p^2(^3P)5s$**	**$^4D°$**	**^4P**	**1961.920**	**20**	**12**	**0.0208**	**0.0204**		**0.01968**
				1953.933	4	6	0.0106	0.00102[D]		
				1957.435	6	6	0.00638	0.00615 [C]		
				1958.128	2	4	0.00345	0.00341 [C]		
				1960.259	4	4	0.0110	0.0109 [C]		
				1962.131	2	2	0.0168	0.0170 [C]		
				1962.222	8	6	0.0211	0.0204 [C]		
				1963.785	6	4	0.0144	0.0143 [C]		
				1964.271	4	2	0.00842	0.00850 [C]		
		$^4P°$	**^4P**	**2022.222**	**12**	**12**	**0.0172***	**0.0173**		**0.01773**
				2016.582	4	6	0.00754*	0.00784 [C]		
				2020.329	6	6	0.0118*	0.0122 [C]		
				2021.436	2	4	0.0144*	0.0145 [C]		
				2023.325	4	4	0.00232*	0.00232 [C]		
				2025.704	2	2	0.00295*	0.00289 [C]		
				2027.097	6	4	0.00525*	0.00522 [C]		
				2027.601	4	2	0.00741*	0.00722 [C]		
		$^2D°$	**^2P**	**2131.30**	**10**	**6**	**0.0177***	**0.0202**		**0.01895**
				2123.182	4	4	0.00289*	0.00338 [C]		
				2131.813	6	4	0.0176*	0.0202 [C]		
				2132.017	4	2	0.0154*	0.0168 [C]		
		$^4S°$	**^4P**	**2187.34**	**4**	**12**	**0.0229**	**0.0245**		**0.02336**
				2182.569	4	6	0.0111	0.0123 [C]		
				2190.469	4	4	0.00722	0.00813 [C]		
				2195.482	4	2	0.00354	0.00409 [C]		

Çizelge 4.11. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST# (Ralchenko ve ark. 2007)	Bell ve ark. (1991)	Tachiev ve Fischer (2002)	Becker ve Butler (1988)
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	**$2s^2 2p^2(^3P)3d$**	**$^2D°$**	**^2D**	**4385.23**	**10**	**10**	**0.130***	**0.116**	**0.112**	**0.1172**	**0.1204**
				4359.395	4	6	0.0013*	0.00616 [C+]	0.0060	0.006458	
				4369.272	4	4	0.117*	0.102 [B]	0.0988	0.1036	
				4395.935	6	6	0.121*	0.113 [B]	0.1094	0.1144	
				4405.978	6	4	0.00866*	0.00835 [B]	0.0081	0.007597	
		$^4D°$	**^4F**	**4075.929**	**20**	**28**	**0.681***	**0.690**	**0.699**	**0.6796**	**0.7055**
				4070.772	2	4	0.678*	0.706 [B+]	0.7185	0.6970	
				4079.994	4	4	0.135*	0.130 [B+]	0.1336	0.1291	
				4071.031	4	6	0.543*	0.552 [B+]	0.5788	0.5618	
				4095.296	6	4	0.00644*	0.00645 [C+]	0.0056	0.005412	
				4086.266	6	6	0.118*	0.108 [B+]	0.1113	0.1073	
				4073.302	6	8	0.556*	0.594 [B+]	0.5854	0.5681	
				4107.180	8	6	0.00345*	0.00286 [B+]	0.0028	0.002631	
				4094.084	8	8	0.0693*	0.0616 [B+]	0.0617	0.05915	
				4077.012	8	10	0.610*	0.617 [B+]	0.6264	0.6070	
		$^2P°$	**^2P**	**5192.433**	**6**	**6**	**0.197**	**0.183**	**0.188**	**0.2345**	**0.2807**
				5191.944	2	4	0.0659	0.0954 [B]	0.0969	0.1176	
				5161.378	2	2	0.132	0.125 [B]	0.1286	0.1610	
				5208.100	4	4	0.164	0.135 [B]	0.1374	0.1732	
				5177.345	4	2	0.0330	0.0293 [B]	0.0313	0.03931	
$2s^2 2p^2(^1D)3p$	**$2s^2 2p^2(^1D)3d$**	**$^2P°$**	**^2P**	**4699.235**	**6**	**6**	**0.398**	**0.367**			**0.3744**
				4692.201	2	4	0.132	0.123 [D]			
				4692.732	2	2	0.265	0.245 [D]			
				4702.494	4	4	0.331	0.306 [C]			
				4703.027	4	2	0.663	0.612 [D]			
		$^2F°$	**^2F**	**4447.218**	**14**	**14**	**0.169**	**0.157**			**0.1447**
				4444.770	6	8	0.00806	0.00746 [D]			
				4444.257	6	6	0.161	0.150 [D]			
				4449.440	8	8	0.163	0.151 [D]			
				4448.925	8	6	0.00604	0.00561 [D]			
		$^2D°$	**^2D**	**4329.22**	**10**	**10**	**0.212***	**0.203**			**0.2086**
				4327.460	6	6	0.198*	0.190[D]			
				4327.849	6	4	0.0141*	0.0136[D]			
				4331.466	4	6	0.0212*	0.0203[D]			
				4331.857	4	4	0.191*	0.183[D]			
		$^2F°$	**^2G**	**4189.101**	**14**	**18**	**0.696**	**0. 669**			**0.6796**
				4186.619	6	8	0.696	0.669 [D]			
				4190.969	8	10	0.676	0.652 [D]			
				4190.762	8	8	0.0193	0.0186 [D]			
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	**$2s^2 2p^2(^3P)4d$**	**$^4P°$**	**^4D**	**2150.204**	**12**	**20**	**0.0017**				**0.00278**
				2150.511	2	2	8.217e-04				
				2148.908	2	4	8.430e-04				
				2152.648	4	2	8.258e-05				
				2151.041	4	4	5.422e-04				
				2150.345	4	6	0.00108				
				2155.304	6	4	3.422e-05				
				2154.605	6	6	3.113e-04				
				2148.896	6	8	0.00151				

Çizelge 4.11. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST[#] (Ralchenko ve ark. 2007)	Becker ve Butler (1988)
$2s^2 2p^2(^3P)3p$	**$2s^2 2p^2(^3P)4d$**	**$^4D°$**	**^4F**	**2110.331**	**8**	**6**	**1.890e-05**		
				2106.251	8	8	3.974e-04		
				2101.391	8	10	0.00368		
		$^4D°$	**^4D**	**2081.465**	**20**	**20**	**7.538e-05**		**3.89e-04**
				2078.314	2	2	3.130e-05		
				2076.817	2	4	3.31e-05		
				2080.715	4	2	1.589e-05		
				2079.215	4	4	2.687e-05		
				2078.564	4	6	2.408e-05		
				2083.181	6	4	1.607e-05		
				2082.528	6	6	4.061e-05		
				2077.194	6	8	1.612e-05		
				2087.947	8	6	1.040e-05		
				2082.585	8	8	7.470e-05		
		^4D	**^4P**	**2073.292**	**20**	**12**	**2.193e-06**		**1.49e-03**
				2065.619	2	4	3.545e-07		
				2064.737	2	2	1.858e-06		
				2069.591	4	6	9.967e-08		
				2067.990	4	4	1.159e-06		
				2067.107	4	2	9.495e-07		
				2073.521	6	6	6.212e-07		
				2071.914	6	4	1.578e-06		
				2078.893	8	6	2.178e-06		
		^2D	**^2D**	**2260.437**	**10**	**10**	**3325e-04**		
				2256.277	4	4	2634e-04		
				2253.497	4	6	3309e-05		
				2266.023	6	4	2139e-05		
				2263.219	6	6	3364e-04		
		^2F	**^2D**	**2165.164**	**14**	**10**	**1.854e-02**		
				2164.870	6	4	1.728e-02		
				2164.307	6	6	1.237e-03		
				2165.414	8	6	1.855e-02		
		$^2P°$	**^2P**	**2439.028**	**6**	**6**	**9.137e-03**	**1.07e-02**	
				2438.807	2	4	3.019e-03	3.58e-03 [D]	
				2432.379	2	2	6.196e-03	7.18e-03 [D]	
				2442.366	4	4	7.549e-03	8.94e-03 [D]	
				2435.920	4	2	1.549e-03	1.79e-03 [D]	
$2s^2 2p^2(^3P)3d$	**$2s^2 2p^2(^3P)4p$**	**^4D**	**$^4D°$**	**7587.06**	**20**	**20**	**4.19e-02***	**4.08e-02**	**3.004e-02**
				7527.065	6	8	7.92e-03*	7.83e-03[D]	
				7530.611	8	8	3.57e-02*	3.53e-02[D]	
				7598.285	4	6	1.47e-02*	1.43e-02[D]	
				7599.198	6	6	2.42e-02*	2.34e-02[D]	
				7602.812	8	6	6.00e-03*	5.81e-03[D]	
				7628.542	2	4	2.10e-02*	2.03e-02[D]	
				7648.583	4	4	1.68e-02*	1.62e-02[D]	
				7649.508	6	4	9.85e-03*	9.48e-03[D]	
				7656.779	2	2	2.11e-02*	2.02e-02[D]	
				7676.970	4	2	1.05e-02*	1.01e-02[D]	
		^4F	**$^4D°$**	**6897.56**	**28**	**20**	**1.54e-01***	**1.55e-01**	**1.505e-01**
				6810.477	6	8	1.44e-03*	1.52e-03[D]	
				6844.098	4	6	3.05e-03*	3.13e-03[D]	
				6907.873	4	2	1.08e-01*	1.08e-01[C]	
				6910.562	6	4	1.15e-01*	1.16e-01[C]	

Çizelge 4.11. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST[#] (Ralchenko ve ark. 2007)	Becker ve Butler (1988)
$2s^2 2p^2(^3P)3d$	**$2s^2 2p^2(^3P)4p$**	**^4D**	**$^4P°$**	**7299.33**	**20**	**12**	**1.21e-01***		**1.177e-01**
				7259.280	2	4	2.01e-02*		
				7277.426	4	4	6.44e-02*		
				7278.264	6	4	8.46e-02*		
				7292.124	4	6	6.05e-03*		
				7292.965	6	6	3.63e-02*		
				7296.294	8	6	1.21e-01*		
				7346.355	2	2	1.01e-01*		
				7364.939	4	2	5.10e-02*		
		^2F	**$^2D°$**	**6565.60**	**14**	**10**	**1.37e-01***	**1.38e-01**	**1.36e-01**
				6495.787	6	6	9.03e-03*	9.37e-03[D]	
				6565.283	8	6	1.37e-01*	1.39e-01[D]	
				6571.108	6	4	1.29e-01*	1.29e-01[D]	
		^2D	**$^2P°$**	**7114.58**	**10**	**6**	**1.13e-01***	**1.02e-01**	**1.006e-01**
				7083.962	4	4	1.88e-02*	1.72e-02[D]	
				7110.078	6	4	1.13e-01*	1.03e-01[D]	
				7128.865	4	2	9.51e-02*	8.54e-02[D]	
$2s^2 2p^2(^3P)3d$	**$2s^2 2p^2(^3P)5p$**	**^2F**	**$^2D°$**	**3457.77**	**14**	**10**	**1.17e-02**	**1.31e-02**	**1.282e-02**
				3457.933	8	6	1.17e-02	1.30e-02 [D]	
				3458.923	6	4	1.08e-02	1.22e-02 [D]	
				3438.556	6	6	7.95e-04	8.74e-04 [D]	
		^2D	**$^2D°$**	**3652.92**	**10**	**10**	**2.67e-03***	**2.68e-03**	**2.827e-03**
				3646.558	6	6	2.51e-03*	2.51e-03 [D]	
				3662.504	4	4	2.38e-03*	2.41e-03 [D]	
				3669.472	6	4	1.75e-04*	1.78e-04 [E]	
				3639.676	4	6	2.71e-04*	2.69e-04 [E]	
$2s^2 2p^2(^3P)3d$	**$2s^2 2p^2(^3P)5p$**	**^4D**	**$^4P°$**	**3501.05**	**20**	**12**	**7.88e-03**		**8.345e-03**
				3494.277	4	6	3.97e-04		
				3494.470	6	6	2.38e-03		
				3495.234	8	6	7.94e-03		
				3501.668	2	4	1.31e-03		
				3505.885	4	4	4.18e-03		
				3506.080	6	4	5.48e-03		
				3507.421	2	2	6.50e-03		
				3511.651	4	2	3.23e-03		
		^4D	**$^4D°$**	**3529.79**	**20**	**20**	**2.52e-03**		**2.693e-03**
				3516.031	6	8	4.87e-04		
				3516.805	8	8	2.19e-03		
				3532.803	4	6	8.80e-04		
				3533.000	6	6	1.44e-03		
				3533.781	8	6	3.59e-03		
				3539.190	2	4	1.24e-03		
				3543.498	4	4	0.99e-03		
				3543.697	6	4	5.79e-04		
				3545.046	2	2	1.23e-03		
				3549.368	4	2	6.17e-04		
$2s^2 2p^2(^3P)4s$	**$2s^2 2p^2(^3P)4p$**	**^4P**	**$^4D°$**	**14027.1**	**12**	**20**	**7.12e-01***	**7.08e-01**	**6.915e-01**
				14010.93	6	8	5.72e-01*	5.65e-01[C+]	
				13942.07	4	6	4.50e-01*	4.50e-01 [C+]	
				13905.87	2	4	3.56e-01*	3.57e-01 [C+]	
				14262.93	6	6	1.26e-01*	1.25e-01 [C+]	

Çizelge 4.11. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST[#] (Ralchenko ve ark. 2007)	Becker ve Butler (1988)
$2s^2 2p^2(^3P)4s$	**$2s^2 2p^2(^3P)4p$**	**^2P**	**$^2D°$**	**13049.3**	**6**	**10**	**8.10e-01***	**7.62e-01**	**7.117e-01**
				13035.45	4	6	7.31e-01*	6.84e-01 [C+]	
				13016.90	2	4	8.07e-01*	7.62e-01 [C+]	
				13342.35	4	4	7.97e-01*	7.45e-01 [C+]	
		^4P	**$^4P^o$**	**13112.178**	**12**	**12**	**0.472**		**0.4011**
				13176.347	6	4	1.410e-01		
				13224.594	6	6	3.277e-01		
				12902.115	4	4	6.400e-02		
				12948.371	4	6	2.152e-01		
				13179.683	4	2	1.956e-01		
				12729.356	2	4	4.054e-01		
				12999.462	2	2	7.935e-02		
$2s^2 2p^2(^3P)4p$	**$2s^2 2p^2(^3P)5s$**	**$^4D°$**	**^4P**	**8371.3**	**20**	**12**	**2.26e-01**	**2.33e-01**	**2.28 e-01**
				8375.844	8	6	2.28e-01	2.34e-01 [C]	
				8403.379	6	4	1.57e-01	1.62e-01 [C]	
				8415.88	4	2	9.27e-02	9.67e-02 [C]	
				8288.30	6	6	6.93e-02	7.07e-02 [C]	
				8342.70	4	4	1.20e-01	1.25e-01 [C]	
				8381.77	2	2	1.86e-01	1.94e-01 [C]	
				8229.27	4	6	1.16e-02	1.19e-02 [C]	
				8309.19	2	4	3.79e-02	3.91e-02 [C]	
		$^4P°$	**^4P**	**8709.441**	**12**	**12**	**2.42e-01**		**2.017e-01**
				8686.103	6	6	1.72e-01		
				8707.050	4	6	11.04e-02		
				8708.528	2	4	2.01e-01		
				8790.70	2	2	3.96e-02		
				8815.00	6	4	7.17e-02		
				8836.57	4	4	3.18e-02		
				8918.68	4	2	9.77e-02		
		$^2D°$	**^2P**	**9589.5**	**10**	**6**	**2.52e-01***	**2.77e-01**	**2.681e-01**
				9594.56	6	4	2.51e-01*	2.77e-01 [C]	
				9611.80	4	2	2.13e-01*	2.31e-01 [C]	
				9434.83	4	4	4.05e-02*	4.70e-02 [C]	
$2s^2 2p^2(^3P)4p$	**$2s^2 2p^2(^3P)4d$**	**$^2D°$**	**^2F**	**13733.0**	**10**	**14**	**9.86e-01**	**9.62e-01**	**9.166e-01**
				13733.53	6	8	9.39e-01	9.17e-01 [D]	
				13710.14	4	6	9.87e-01	9.64e-01 [D]	
				14050.04	6	6	4.58e-02	4.50e-02 [D]	
		$^2D°$	**^2D**	**12883.7**	**10**	**10**	**1.84e-01**	**1.78e-01**	**1.708e-01**
				12965.02	6	6	1.70e-01	1.65e-01 [D]	
				12763.53	4	4	1.67e-01	1.62e-01 [D]	
				13057.62	6	4	1.21e-02	1.17e-02 [D]	
				12675.05	4	6	1.87e-02	1.81e-02 [D]	
		$^2P°$	**^2P**	**14868.0**	**6**	**6**	**2.86e-01**	**3.55e-01**	**2.781e-01**
				15014.79	4	4	2.36e-01	2.94e-01[D]	
				14582.80	2	2	1.94e-01	2.42e-01 [D]	
				14774.37	4	2	4.80e-02	5.98e-02 [D]	
				14816.98	2	4	0.96e-01	1.19e-01 [D]	

Çizelge 4.11. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	NIST[#] (Ralchenko ve ark. 2007)	Becker ve Butler (1988)
$2s^2 2p^2(^3P)4p$	**$2s^2 2p^2(^3P)4d$**	**$^4D°$**	**^4F**	**11686.994**	**20**	**28**	**10.78e-01**		**10.27e-01**
				11663.08	4	6	8.64e-01		
				11659.12	6	8	8.82e-01		
				11669.65	2	4	1.08e+00		
				11681.28	8	10	9.64e-01		
				11737.84	4	4	2.14e-01		
				11785.23	6	6	1.86e-01		
				11833.05	8	8	1.08e-01		
				11856.23	6	4	10.12e-03		
				11962.97	8	6	5.37e-03		
		$^4D°$	**^4D**	**11092.746**	**20**	**20**	**1.87e-01***		**1.852e-01**
				11119.89	8	8	1.60e-01*		
				10969.11	6	8	3.58e-02*		
				10973.33	2	4	9.35e-02*		
				11013.56	4	6	6.54e-02*		
				11015.27	2	2	933e-02*		
				11031.84	4	4	7.47e-02*		
				11074.22	4	2	4.66e-02*		
				11119.52	6	6	1.07e-01*		
				11138.16	6	4	4.35e-02*		
				11277.61	8	6	2.65e-02*		
		$^4P°$	**^4P**	**11487.793**	**12**	**12**	**3.3085e-01**		**3.682e-01**
				11334.882	2	4	2.7944e-01		
				11308.387	2	2	5.6021e-02		
				11561.521	6	6	2.3010e-01		
				11511.744	6	4	9.9052e-02		
				11598.650	4	6	1.4745e-01		
				11548.554	4	4	4.3883e-02		
				11521.052	4	2	1.3747e-01		
$2s^2 2p^2(^3P)4d$	**$2s^2 2p^2(^3P)5p$**	**^2P**	**$^2D°$**	**15166.3**	**6**	**10**	**8.33e-03***	**4.69e-03**	
				14929.41	4	6	7.33e-03*	4.29e-03 [D]	
				15579.79	2	4	8.62e-03*	4.57e-03 [D]	
				15321.08	4	4	8.46e-04*	4.65e-04 [D]	
		^2F	**$^2D°$**	**15607.0**	**14**	**10**	**3.10e-01**	**2.71e-01**	**2.454e-01**
				15611.37	8	6	3.12e-01	2.82e-01 [D]	
				15628.94	6	4	2.87e-01	2.10e-01 [D]	
				15221.57	6	6	2.13e-02	4.31e-02 [D]	
		^2D	**$^2D°$**	**16875.529**	**10**	**10**	**8.381e-02***	**8.36e-02**	**8.343 e-02**
				16743.828	6	6	7.756e-02*	7.86e-02 [D]	
				17076.969	4	4	7.634e-02*	7.43e-02 [D]	
				17237.932	6	4	5.698e-03*	5.43e-03 [D]	
				16591.920	4	6	8.240e-03*	8.48e-03 [D]	
		^4D	**$^4D°$**	**16311.617**	**20**	**20**	**8.238e-02***		**8.20e-02**
				16487.285	2	2	4.163e-02*		
				16361.417	2	4	4.135e-02*		
				16582.125	4	2	2.091e-02*		
				16454.811	4	4	3.324e-02*		
				16226.759	4	6	2.871e-02*		
				16495.662	6	4	1.942e-02*		
				16266.484	6	6	4.737e-02*		
				15913.000	6	8	1.531e-02*		
				15589.412	2	4	3.934e-02*		

Çizelge 4.11. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		Dalgaboyu (Å)	İstatistiksel Ağırlık		Bu Çalışma (WBEPMT)	Becker ve Butler (1988)
$2s^2 2p^2(^3P)4d$	**$2s^2 2p^2(^3P)5p$**	**^4D**	**$^4P°$**	**15790.055**	**4**	**2**	**9.971e-02***	
				15674.178	4	4	1.265e-01*	
				15444.850	4	6	1.165e-02*	
				15711.240	6	4	1.665e-01*	
				15480.835	6	6	7.012e-02*	
				15782.106	8	6	2.384e-01*	
		^4P	**$^4P°$**	**16197.768**	**12**	**12**	**1.359e-01***	**1.847e-01**
				16243.576	6	4	4.091e-02*	
				15997.415	6	6	9.394e-02*	
				16468.875	4	2	5.755e-02*	
$2s^2 2p^2(^3P)4d$	**$2s^2 2p^2(^3P)5p$**	**^4P**	**$^4P°$**	**16342.860**	**4**	**4**	**1.828e-02***	
				16093.704	4	6	6.073e-02*	
				16525.129	2	2	2.308e-02*	
				16398.255	2	4	1.146e-01*	
		^4F	**$^4D°$**	**15176.856**	**28**	**20**	**3.076e-01***	**3.069e-01**
				15173.148	10	8	3.066e-01*	
				14924.504	8	8	4.300e-02*	
				15235.008	8	6	2.649e-01*	
				14722.835	6	8	2.822e-03*	
				15024.919	6	6	7.425e-02*	
				15220.237	6	4	2.310e-01*	
				14911.085	4	6	6.040e-03*	
				15103.436	4	4	8.596e-02*	
				15210.629	4	2	2.167e-01*	
$2s^2 2p^2(^3P)5s$	**$2s^2 2p^2(^3P)5p$**	**^4P**	**$^4D°$**	**31218.684**	**12**	**20**	**9.876e-01**	**9.042e-01**
				31092.400	2	2	4.952e-01	
				30647.771	2	4	5.025e-01	
				32133.366	4	2	4.791e-02	
				31658.694	4	4	3.113e-01	
				30825.190	4	6	6.300e-01	
				33405.601	6	4	1.844e-02	
				32478.921	6	6	1.708e-01	
				31099.556	6	8	7.938e-01	
$2s^2 2p^2(^3P)5s$	**$2s^2 2p^2(^3P)5p$**	**^4P**	**$^4P°$**	**29106.150**	**12**	**12**	**6.297e-01**	**5.161e-01**
				28419.344	2	2	1.074e-01	
				28046.164	2	4	5.444e-01	
				29286.522	4	2	2.605e-01	
				28890.378	4	4	8.456e-02	
				28120.773	4	6	2.934e-01	
				30338.149	6	4	1.811e-01	
				29490.609	6	6	4.353e-01	
		^2P	**$^2D°$**	**30673.529**	**6**	**10**	**1.0374**	**0.9215**
				30418.343	2	4	1.0451	
				32337.343	4	4	9.829e-02	
				30641.104	4	6	9.352e-01	

[#] NIST Doğruluk Aralıkları: $B+ \le 7\%, B \le 10\%, C+ \le 18\%, C \le 25\%, D \le 50\%, E > 50\%$

Ek H: O III için WBEPM teori ve QDO teori ile hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

Çizelge 4.12. O III'ün üçlü durumları arasındaki osilatör şiddetleri (Ateş ve ark. 2010)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST		Tachiev ve Fischer (2001)	Fawcett (1987)	Saraph ve Seaton (1980)	Aggarwal ve ark. (1997)	Luo ve ark. (1989) OP Metodu	Nahar (1998)	Aggarwal ve Hibbert (1991-a)	Fischer (1994)	Bhatia ve Kastner (1993)
							WBEPMT	QDOT	(Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.									
$2s^22p^2$	**$2s^22p^2(^2P^o)3s$**	**^3P**	**$^3P^o$**	**9**	**9**	**374.113**	**6.90e-02**	**9.35e-02**	**7.95e-02**		**8.23e-02**		**8.96e-02**	**8.27e-02**	**8.30e-02**	**8.044e-02**	**8.07e-02**		
				1	3	374.004	6.88e-02	9.39e-02	7.93e-02	C+	8.22e-02	1.06e-01		8.39e-02				7.90e-02	7.29e-02
				3	1	374.328	2.29e-02	3.15e-02	2.65e-02	C+	2.74e-02	3.50e-02		2.80e-02				2.63e-02	2.43e-02
				3	3	374.162	1.72e-02	2.35e-02	1.99e-02	C+	2.05e-02	2.63e-02		2.09e-02				1.96e-02	1.82e-02
				3	5	373.803	2.88e-02	3.87e-02	3.32e-02	C+	3.42e-02	4.43e-02		3.49e-02				3.26e-02	3.03e-02
				5	3	374.432	1.72e-02	2.35e-02	1.99e-02	C+	2.06e-02	2.64e-02		2.10e-02				1.98e-02	1.83e-02
				5	5	374.073	5.18e-02	6.98e-02	5.98e-02	C+	6.17e-02	7.94e-02		6.30e-02				5.90e-02	5.48e-02
$2s^22p^2$	**$2s^22p^2(^2P^o)4s$**	**^3P**	**$^3P^o$**	**9**	**9**	**280.288**	**1.75e-02***	**1.66e-02**								**1.014e-02**			
				1	3	280.234	1.77e-02*	1.68e-02				1.10e-02							
				3	1	280.408	5.96e-03*	5.67e-03				3.66e-03							
				3	3	280.323	4.43e-03*	4.21e-03				2.66e-03							
				3	5	280.109	7.20e-03*	6.82e-03				4.66e-03							
				5	3	280.474	4.42e-03*	4.21e-03				2.80e-03							
				5	5	280.261	1.30e-02*	1.23e-02				8.40e-03							
$2s^22p^2$	**$2s^22p^2(^2P^o)5s$**	**^3P**	**$^3P^o$**	**9**	**9**	**255.192**	**6.12e-03***	**5.91e-03**								**6.75e-03**			
				1	3	255.156	6.30e-03*	6.09e-03				6.00e-03							
				3	1	255.286	2.13e-03*	2.07e-03				2.00e-03							
				3	3	255.229	1.58e-03*	1.52e-03				1.33e-03							
				3	5	255.039	2.48e-03*	2.39e-03				2.66e-03							
				5	3	255.355	1.57e-03*	1.52e-03				1.40e-03							
				5	5	255.165	4.46e-03*	4.31e-03				4.80e-03							
$2s^22p^2$	**$2s^22p(^2P^o)3d$**	**^3P**	**$^3P^o$**	**9**	**9**	**303.656**	**1.44e-01**	**1.40e-01**	**1.77e-01**		**1.62e-01**		**1.62e-01**	**1.98e-01**	**1.60e-01**	**1.656e-01**	**1.95e-01**		
				1	3	303.413	1.44e-01	1.40e-01	1.78e-01	C	1.35e-01	1.43e-01		1.66e-01				1.32e-01	1.32e-01
				3	1	303.461	4.81e-02	4.65e-02	5.94e-02	C	5.39e-02	5.76e-02		6.41e-02				5.23e-02	5.35e-02
				3	3	303.517	3.60e-02	3.49e-02	4.43e-02	C	4.72e-02	5.10e-02		5.47e-02				4.60e-02	4.75e-02
				3	5	303.622	6.00e-02	5.83e-02	7.39e-02	C	4.81e-02	4.93e-02		6.09e-02				4.63e-02	4.57e-02
				5	3	303.695	3.60e-02	3.49e-02	4.43e-02	C	4.17e-02	4.46e-02		4.93e-02				4.06e-02	4.15e-02
				5	5	303.800	1.08e-01	1.05e-01	1.33e-01	C	1.33e-01	1.43e-01		1.56e-01				1.30e-01	1.34e-01

Çizelge 4.12. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma WBEPMT	Bu Çalışma QDOT	NIST (Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.	Tachiev ve Fischer (2001)	Fawcett (1987)	Saraph ve Seaton (1980)	Aggarwal ve ark. (1997)	Luo ve ark. (1989) OP Metodu	Nahar (1998)	Aggarwal ve Hibbert (1991-a)	Fischer (1994)	Bhatia ve Kastner (1993)
$2s^22p^2$	**$2s^22p(^2P^o)4d$**	**^3P**	**$^3P^o$**	**9**	**9**	**262.808**	**4.58e-02***	**4.69e-02**								**2.044e-02**			
				1	3	262.662	4.58e-02*	4.69e-02											
				3	1	262.727	1.53e-02*	1.56e-02											
				3	3	262.740	1.15e-02*	1.17e-02											
				3	5	262.748	1.91e-02*	1.96e-02											
				5	3	262.873	1.15e-02*	1.17e-02											
				5	5	262.881	3.44e-02*	3.52e-02											
$2s^22p^2$	**$2s^22p(^2P^o)3d$**	**^3P**	**$^3D^o$**	**9**	**15**	**305.721**	**4.43e-01**	**4.39e-01**	**5.04e-01**		**4.74e-01**		**4.78e-01**	**5.49e-01**	**4.71e-01**	**4.867e-01**	**5.39e-01**		
				1	3	305.596	4.43e-01	4.39e-01	5.04e-01	C+	5.01e-01	5.24e-01		5.69e-01				4.82e-01	5.14e-01
				3	3	305.702	1.11e-01	1.10e-01	1.26e-01	C+	1.12e-01	1.15e-01		1.29e-01				1.07e-01	1.14e-01
				3	5	305.656	3.32e-01	3.29e-01	3.78e-01	C+	3.75e-01	3.92e-01		4.20e-01				3.61e-01	3.86e-01
				5	3	305.882	4.42e-03	4.39e-03	5.05e-03	C	3.51e-03	3.60e-03		4.20e-03				3.40e-03	3.51e-03
				5	5	305.836	6.64e-02	6.59e-02	7.57e-02	C+	5.93e-02	6.02e-02		6.96e-02				5.64e-02	5.95e-02
				5	7	305.767	3.72e-01	3.68e-01	4.24e-01	C+	3.99e-01	4.14e-01		4.56e-01				3.85e-01	4.09e-01
$2s^22p(^2P^o)3s$	**$2s^22p(^2P^o)3p$**	**$^3P^o$**	**^3S**	**9**	**3**	**3327.567**	**8.52e-02***	**7.09e-02**	**7.08e-02**		**6.97e-02**		**7.13e-02**	**6.88e-02**	**7.20e-02**	**6.744e-02**	**6.68e-02**		
				1	3	3300.335	8.57e-02*	8.88e-02	8.03e-02	C+	8.21e-02	8.60e-02		6.53e-02				8.40e-02	8.08e-02
				3	3	3313.282	8.55e-02*	7.11e-02	7.57e-02	C+	7.60e-02	7.93e-02		6.21e-02				7.83e-02	7.83e-02
				5	3	3341.726	8.49e-02*	6.97e-02	6.60e-02	C+	6.35e-02	6.60e-02		5.55e-02				6.58e-02	7.29e-02
$2s^22p(^2P^o)3s$	**$2s^22p(^2P^o)3p$**	**$^3P^o$**	**^3D**	**9**	**15**	**3763.405**	**3.71e-01***	**3.59e-01**	**3.46e-01**		**3.39e-01**		**3.48e-01**	**3.47e-01**	**3.45e-01**	**3.25e-01**	**3.30e-01**		
				1	3	3758.299	3.71e-01*	3.59e-01	3.53e-01	C+	3.45e-01	3.53e-01		2.87e-01				3.72e-01	3.88e-01
				3	3	3775.098	9.24e-02*	8.95e-02	8.35e-02	C+	8.21e-02	8.36e-02		6.94e-02				8.86e-02	9.37e-02
				3	5	3755.763	2.79e-01*	2.69e-01	2.65e-01	C+	2.59e-01	2.65e-01		2.15e-01				2.78e-01	2.91e-01
				5	3	3812.067	3.67e-03*	3.55e-03	3.10e-03	C+	3.09e-03	3.20e-03		2.64e-03				3.40e-03	3.65e-03
				5	5	3792.352	5.53e-02*	4.51e-02	4.83e-02	C+	4.79e-02	4.86e-02		4.07e-02				5.12e-02	5.56e-02
				5	7	3760.944	3.13e-01*	3.02e-01	2.91e-01	C+	2.85e-01	2.90e-01		2.38e-01				3.06e-01	3.23e-01
$2s^22p(^2P^o)3s$	**$2s^22p(^2P^o)3p$**	**$^3P^o$**	**^3P**	**9**	**9**	**3042.405**	**2.82e-01***	**2.65e-01**	**2.72e-01**		**2.72e-01**		**2.89e-01**	**2.87e-01**	**2.75e-01**	**2.611e-01**	**2.70e-01**		
				1	3	3025.421	2.83e-01*	2.66e-01	2.54e-01	C+	2.53e-01	2.57e-01		2.43e-01				2.65e-01	3.53e-01
				3	1	3043.879	9.38e-02*	8.82e-02	8.98e-02	C+	9.07e-02	9.26e-02		8.47e-02				9.50e-02	1.21e-01
				3	5	3024.306	1.18e-01*	1.11e-01	1.09e-01	C+	1.08e-01	1.10e-01		1.03e-01				1.13e-01	1.48e-01
				5	3	3060.167	7.01e-02*	7.22e-02	7.35e-02	C+	7.45e-02	7.64e-02		6.70e-02				7.76e-02	9.37e-02

Çizelge 4.12. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST	D.A.	Tachiev ve Fischer (2001)	Fawcett (1987)	Saraph ve Seaton (1980)	Aggarwal ve ark. (1997)	Luo ve ark. (1989) OP Metodu	Nahar (1998)	Aggarwal ve Hibbert (1991-a)	Fischer (1994)	Bhatia ve Kastner (1993)
						WBEPMT	QDOT	(Ralchenko ve ark. 2007)										
$2s^2 2p(^2P^o)3p$	**$2s^2 2p(^2P^o)4s$**	**^3D**	**$^3P^o$**	**15**	**9**	**1589.682**	**1.02e-01**	**1.14e-01**	**1.07e-01**							**9.733e-02**		
				3	1	1590.589	5.63e-02	6.38e-02	5.95e-02	C+		4.93e-02						
				3	3	1587.844	4.24e-02	4.76e-02	4.46e-02	C+		3.40e-02						
				3	5	1581.015	2.86e-03	3.12e-03	3.00e-03	C+								
				5	3	1591.289	7.62e-02	8.60e-02	8.04e-02	C+		6.60e-02						
				5	5	1584.431	2.57e-02	2.82e-02	2.69e-02	C+		2.00e-02						
				7	5	1589.978	1.03e-01	1.13e-01	1.07e-01	C+		8.64e-02						
$2s^2 2p(^2P^o)3p$	**$2s^2 2p(^2P^o)5s$**	**^3D**	**$^3P^o$**	**15**	**9**	**1020.493**	**1.88e-02**	**1.80e-02**	**1.92e-02**							**2.527e-02**		
				3	1	1020.780	1.02e-03	1.00e-02	1.06e-02	C+								
				3	3	1019.874	7.72e-03	7.53e-03	7.98e-03	C+								
				3	5	1016.849	5.32e-04	4.97e-04	5.35e-04	C+								
				5	3	1021.295	1.39e-02	1.35e-02	1.44e-02	C+								
				5	5	1018.261	4.78e-03	4.48e-03	4.80e-03	C+								
				7	5	1020.549	1.90e-02	1.79e-02	1.92e-02	C+								
$2s^2 2p(^2P^o)3p$	**$2s^2 2p(^2P^o)4s$**	**^3P**	**$^3P^o$**	**9**	**9**	**1766.515**		**1.67e-01**	**1.55e-01**							**1.356e-01**		
				1	3	1766.315		1.68e-01	1.56e-01	C+								
				3	1	1772.285		5.65e-02	5.16e-02	C+		5.13e-02						
				3	3	1768.878		4.20e-02	3.87e-02	C+		3.83e-02						
				3	5	1760.407		6.86e-02	6.49e-02	C+		7.33e-02						
				5	3	1772.973		4.22e-02	3.87e-02	C+		3.92e-02						
				5	5	1764.463		1.24e-01	1.17e-01	C+		1.24e-01						
$2s^2 2p(^2P^o)3p$	**$2s^2 2p(^2P^o)5s$**	**^3P**	**$^3P^o$**	**9**	**9**	**1090.574**		**2.50e-02**	**2.89e-02**							**3.544e-02**		
				1	3	1090.657		2.52e-02	2.88e-02	C+								
				3	1	1092.672		8.48e-03	9.61e-03	C+								
				3	3	1091.633		6.32e-03	7.20e-03	C+								
				3	5	1088.168		1.03e-02	1.20e-02	C+								
				5	3	1093.192		6.33e-03	7.19e-03	C+								
				5	5	1089.717		1.85e-02	2.17e-02	C+								

Çizelge 4.12. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST		Tachiev ve Fischer (2001)	Fawcett (1987)	Saraph ve Seaton (1980)	Aggarwal ve ark. (1997)	Luo ve ark. (1989) OP Metodu	Nahar (1998)	Aggarwal ve Hibbert (1991-a)	Fischer (1994)	Bhatia ve Kastner (1993)
							WBEPMT	QDOT	(Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.									
$2s^22p(^2P^o)3p$	**$2s^22p(^2P^o)3d$**	**^3P**	**$^3D^o$**	**9**	**15**	**3713.667**	**3.97e-01**	**3.51e-01**	**3.36e-01**		**3.47e-01**		**3.52e-01**	**2.82e-01**	**3.57e-01**	**3.844e-01**	**3.16e-01**		
				1	3	3703.797	3.98e-01	3.51e-01	3.37e-01	C+	3.67e-01	3.69e-01		2.99e-01				3.90e-01	3.96e-01
				3	3	3715.084	9.91e-02	8.76e-02	8.40e-02	C+	8.34e-02	8.30e-02		6.90e-02				8.86e-02	8.88e-02
				3	5	3708.327	2.98e-01	2.63e-01	2.52e-01	C+	2.71e-01	2.71e-01		2.22e-01				2.88e-01	2.94e-01
				5	3	3733.196	3.95e-03	3.49e-03	3.35e-03	C+	2.79e-03	2.80e-03		2.35e-03				3.00e-03	2.83e-03
				5	5	3726.372	5.93e-02	5.25e-02	5.02e-02	C+	4.56e-02	4.48e-02		3.80e-02				4.80e-02	4.71e-02
				5	7	3716.143	3.33e-01	2.94e-01	2.82e-01	C+	2.91e-01	2.91e-01		2.39e-01				3.08e-01	3.13e-01
$2s^22p(^2P^o)3p$	**$2s^22p(^2P^o)4d$**	**^3P**	**$^3D^o$**	**9**	**15**	**1266.878**	**6.07e-02***		**5.93e-02**							**4.922e-02**			
				5	3	1269.284	6.28e-04*		5.94e-04	C									
				5	5	1268.223	9.22e-03*		8.92e-03	C+		1.12e-02							
				5	7	1267.199	5.06e-02*		4.99e-02	C+		3.64e-02							
				1	3	1265.867	6.14e-02*		5.95e-02	C+		3.60e-02							
				3	3	1267.183	1.55e-02*		1.49e-02	C+		1.36e-02							
				3	5	1266.126	4.55e-02*		4.45e-02	C+		2.70e-02							
$2s^22p(^2P^o)3p$	**$2s^22p(^2P^o)5d$**	**^3P**	**$^3D^o$**	**9**	**15**	**979.364**	**2.98e-02**									**3.667e-02**			
				1	3	979.818	2.89e-02												
				3	3	980.606	7.21e-03												
				3	5	979.436	2.21e-02												
				5	3	981.864	2.88e-04												
				5	5	980.691	4.41e-03												
				5	7	979.521	2.521e-02												
$2s^22p(^2P^o)3p$	**$2s^22p(^2P^o)6d$**	**^3P**	**$^3D^o$**	**9**	**15**	**871.045**	**1.63e-02**	**2.23e-02**	**1.97e-02**							**2.044e-02**			
				1	3	869.943	1.64e-02	2.22e-02	1.97e-02	C+									
				3	3	870.564	4.08e-03	5.57e-03	4.92e-03	C+									
				3	5	870.564	1.67e-02	1.67e-02	1.48e-02	C+									
				5	3	871.555	1.63e-04	2.24e-04	1.97e-04	D									
				5	5	871.555	2.45e-03	3.36e-03	2.95e-03	C+									
				5	7	871.555	1.37e-02	1.88e-02	1.66e-02	C+									

Çizelge 4.12. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST	D.A.	Tachiev ve Fischer (2001)	Fawcett (1987)	Saraph ve Seaton (1980)	Aggarwal ve ark. (1997)	Luo ve ark. (1989) OP Metodu	Nahar (1998)	Aggarwal ve Hibbert (1991-a)	Fischer (1994)	Bhatia ve Kastner (1993)
							WBEPMT	QDOT	(Ralchenko ve ark. 2007)										
$2s^22p(^2P^o)3p$	**$2s^22p(^2P^o)3d$**	**^3D**	**$^3F^o$**	**15**	**21**	**3266.673**	**4.66e-01***	**4.15e-01**	**4.21e-01**		**4.03e-01**			**3.60e-01**	**4.41e-01**	**4.8e-01**	**4.00e-01**		
				5	5	3282.776	5.13e-02*	4.59e-02	4.67e-02	C+	3.69e-02	4.22e-02		3.14e-02				3.50e-02	5.54e-02
				5	7	3261.798	4.14e-01*	3.69e-01	3.75e-01	C+	3.91e-01	4.07e-01		3.29e-01				4.37e-01	4.79e-01
				3	5	3268.146	4.64e-01*	4.14e-01	4.22e-01	C+	2.98e-01	3.93e-01		2.82e-01				3.12e-01	5.17e-01
				7	5	3306.680	1.04e-03*	9.32e-04	9.34e-04	C+	5.42e-04			5.51e-04				5.71e-04	1.00e-03
				7	7	3285.396	3.68e-02*	3.28e-02	3.33e-02	C+	3.00e-02	3.07e-02		2.67e-02				3.24e-02	3.87e-02
				7	9	3266.270	4.29e-01*	3.82e-01	3.87e-01	C+	4.00e-01	4.14e-01		3.36e-01					4.90e-01
$2s^22p(^2P^o)3p$	**$2s^22p(^2P^o)4d$**	**^3D**	**$^3F^o$**	**15**	**21**	**1197.293**	**1.12e-01**	**1.03e-01**	**9.96e-02**							**8.067e-02**			
				5	5	1199.289	1.23e-02	1.19e-02	1.11e-02	C+									
				5	7	1196.753	9.92e-02	9.17e-02	8.87e-02	C+									
				3	5	1197.331	1.11e-01	1.06e-01	9.96e-02	C+									
				7	5	1202.465	2.50e-04	2.46e-04	2.23e-04	C									
				7	7	1199.915	8.84e-03	8.31e-03	7.92e-03	C+									
				7	9	1197.239	1.04e-01	9.27e-02	9.15e-02	C+									
$2s^22p(^2P^o)3p$	**$2s^22p(^2P^o)5d$**	**^3D**	**$^3F^o$**	**15**	**21**	**928.763**	**4.64e-02**	**4.54e-02**	**4.56e-02**							**4.667e-02**			
				5	5	930.086	4.99e-03	5.31e-03	5.08e-03	C+									
				5	7	928.309	4.11e-02	4.04e-02	4.07e-02	C+									
				3	5	928.908	4.50e-02	4.75e-02	4.57e-02	C+									
				7	5	931.995	1.02e-04	1.09e-04	1.02e-04	D									
				7	7	930.211	3.66e-03	3.65e-03	3.63e-03	C+									
				7	9	928.763	4.33e-02	4.05e-02	4.19e-02	C+									
$2s^22p(^2P^o)3p$	**$2s^22p(^2P^o)3d$**	**^3D**	**$^3D^o$**	**15**	**15**	**3009.817**	**9.26e-02***	**8.09e-02**	**8.29e-02**		**8.66e-02**		**8.99e-02**	**7.18e-02**	**8.90e-02**	**9.6e-02**	**7.69e-02**		
				3	3	2997.354	6.96e-02*	6.08e-02	6.25e-02	C	6.46e-02	6.16e-02		5.48e-02				6.73e-02	8.00e-02
				3	5	2992.954	2.33e-02*	2.03e-02	2.09e-02	C	1.65e-02	1.50e-02		1.56e-02				1.56e-02	2.20e-02
				5	3	3009.656	1.39e-02*	1.21e-02	1.25e-02	C	1.17e-02	1.08e-02		1.00e-02				1.22e-02	1.45e-02
				5	5	3005.219	6.44e-02*	5.62e-02	5.78e-02	C	6.42e-02	6.20e-02		5.30e-02				6.78e-02	7.78e-02
				5	7	2998.563	1.45e-02*	1.26e-02	1.30e-02	C	9.18e-02	8.00e-03		9.15e-03				8.40e-03	1.27e-02
				7	5	3025.240	1.03e-02*	8.96e-03	9.20e-03	C	8.41e-03	7.57e-03		7.09e-03				8.71e-03	1.01e-02
				7	7	3018.494	8.23e-02*	7.18e-02	7.35e-02	C	8.16e-02	7.81e-02		6.70e-02				8.60e-02	9.79e-02

Çizelge 4.12. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST (Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.	Tachiev ve Fischer (2001)
							WBEPMT	QDOT			
$2s^2 2p(^2P^o)3p$	**$2s^2 2p(^2P^o)4d$**	**^3D**	**$^3D^o$**	**15**	**15**	**1173.279**	**1.39e-02**	**1.25e-02**	**1.13e-02**	**C+**	
				7	5	1175.503	1.54e-03	1.42e-03	1.26e-03	C+	
				7	7	1174.623	1.24e-02	1.12e-02	1.01e-02	C+	
				5	3	1173.374	2.07e-03	1.91e-03	1.70e-03	C+	
				5	5	1172.468	9.64e-03	8.69e-03	7.91e-03	C+	
				5	7	1171.593	2.17e-03	1.91e-03	1.77e-03	C+	
				3	3	1171.500	1.04e-02	9.43e-03	8.52e-03	C+	
				3	5	1170.596	3.47e-03	3.09e-03	2.84e-03	C+	
$2s^2 2p(^2P^o)3p$	**$2s^2 2p(^2P^o)5d$**	**^3D**	**$^3D^o$**	**15**	**15**	**922.474**	**6.71e-03**	**6.65e-03**			
				3	3	922.312	4.89e-03	5.21e-03			
				3	5	921.277	1.66e-03	1.68e-03			
				5	3	923.473	9.75e-04	1.05e-03			
				5	5	922.436	4.61e-03	4.69e-03			
				5	7	921.400	1.05e-04	1.01e-03			
				7	5	924.313	7.35e-04	7.60e-04			
				7	7	923.274	6.00e-03	5.87e-03			
$2s^2 2p(^2P^o)3p$	**$2s^2 2p(^2P^o)6d$**	**^3D**	**$^3D^o$**	**15**	**15**	**825.753**	**3.71e-03**	**3.37e-03**	**3.96e-03**		
				3	3	824.310	2.79e-03	2.50e-03	2.97e-03	D	
				3	5	824.310	9.31e-04	8.34e-04	9.90e-04	D	
				5	3	825.238	5.57e-04	5.04e-04	5.94e-04	D	
				5	5	825.238	2.58e-03	2.33e-03	2.76e-03	C	
				5	7	825.238	5.78e-04	5.22e-04	6.17e-04	D	
				7	5	826.741	4.11e-04	3.77e-04	4.40e-04	D	
				7	7	826.741	3.29e-03	3.02e-03	3.51e-03	C	

Çizelge 4.12. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST (Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.	Tachiev ve Fischer (2001)
							WBEPMT	QDOT			
$2s^2 2p(^2P^o)4p$	**$2s^2 2p(^2P^o)5d$**	**^3D**	**$^3D^o$**	**15**	**15**	**2792.386**	**7.27e-03**	**6.17e-03**			
				7	5	2808.288	7.93e-04	7.66e-04			
				7	7	2798.715	6.52e-03	5.52e-03			
				5	3	2801.596	1.04e-03	1.06e-03			
				5	5	2792.069	4.97e-03	4.43e-03			
				5	7	2782.606	1.15e-03	8.90e-04			
				3	3	2793.199	5.23e-03	5.10e-03			
				3	5	2783.728	1.79e-03	1.53e-03			
$2s^2 2p(^2P^o)4p$	**$2s^2 2p(^2P^o)6d$**	**^3D**	**$^3D^o$**	**15**	**15**	**2061.466**		**3.48e-03**	**3.33e-03**	**D**	
				3	3	2053.744		2.49e-03	2.51e-03	C	
				3	5	2053.744		8.29e-04	8.36e-04	D	
				5	3	2058.281		5.12e-04	4.99e-04	D	
				5	5	2058.281		2.37e-03	2.32e-03	C	
				5	7	2058.281		5.31e-04	5.20e-04	D	
				7	5	2067.082		4.01e-04	3.70e-04	D	
				7	7	2067.082		3.21e-03	2.95e-03	C	
$2s^2 2p(^2P^o)4p$	**$2s^2 2p(^2P^o)4d$**	**^3P**	**$^3D^o$**	**9**	**15**	**11310.84**	**5.46e-01**	**5.11e-01**	**4.79e-01**		
				1	3	11238.52	5.50e-01	5.12e-01	4.83e-01	C+	
				3	3	11352.25	1.36e-01	1.27e-01	1.20e-01	C+	
				3	5	11267.97	4.11e-01	3.84e-01	3.62e-01	C+	
				5	3	11493.38	5.38e-03	5.03e-03	4.73e-03	C+	
				5	5	11407.01	8.13e-02	7.61e-02	7.14e-02	C+	
				5	7	11324.70	4.58e-01	4.29e-01	4.04e-01	C+	
$2s^2 2p(^2P^o)4p$	**$2s^2 2p(^2P^o)5d$**	**^3P**	**$^3D^o$**	**9**	**15**	**3123.634**	**7.09e-02***	**9.76e-02**			
				1	3	3128.860	7.79e-02*	1.04e-01			
				3	3	3137.611	2.00e-02*	2.66e-02			
				3	5	3125.666	5.51e-02*	7.50e-02			
				5	3	3148.296	8.26e-04*	1.09e-03			
				5	7	3124.335	5.84e-02*	8.10e-02			

Çizelge 4.12. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST (Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.	Tachiev ve Fischer (2001)
							WBEPMT	QDOT			
$2s^2 2p(^2P^o)4p$	**$2s^2 2p(^2P^o)6d$**	**^3P**	**$^3D^o$**	**9**	**15**	**2236.562**		**3.94e-02**	**3.91e-02**	**C+**	
				1	3	2229.614		3.84e-02	3.91e-02	C+	
				3	3	2234.054		9.75e-03	9.80e-03	C+	
				3	5	2234.054		2.93e-02	2.93e-02	C+	
				5	3	2239.466		3.97e-04	3.91e-04	C+	
				5	5	2239.466		5.96e-03	5.86e-03	C+	
				5	7	2239.466		3.34e-02	3.28e-02	C+	
$2s^2 2p(^2P^o)4p$	**$2s^2 2p(^2P^o)4d$**	**^3D**	**$^3F^o$**	**15**	**21**	**9149.775**	**7.22e-01***	**7.57e-01**	**7.13e-01**		
				5	5	9267.995	7.89e-02*	8.28e-02	7.84e-02	C+	
				5	7	9118.638	6.42e-01*	6.74e-01	6.35e-01	C+	
				3	5	9176.728	7.16e-01*	7.51e-01	7.11e-01	C+	
				7	5	9449.152	1.59e-03*	1.66e-03	1.55e-03	C+	
				7	7	9293.948	5.65e-02*	5.92e-02	5.59e-02	C+	
				7	9	9135.799	6.66e-01*	6.98e-01	6.56e-01	C+	
$2s^2 2p(^2P^o)4p$	**$2s^2 2p(^2P^o)5d$**	**^3D**	**$^3F^o$**	**15**	**21**	**2850.825**		**6.06e-02**	**5.54e-02**	**C+**	
				5	5	2863.357		7.63e-03	6.16e-03	C+	
				5	7	2846.583		5.35e-02	4.93e-02	C+	
				3	5	2854.586		6.67e-02	5.54e-02	C+	
				7	5	2880.418		1.65e-04	1.23e-04	C+	
				7	7	2863.444		5.08e-03	4.40e-03	C+	
				7	9	2849.768		5.26e-02	5.10e-02	C+	
$2s^2 2p(^2P^o)4s$	**$2s^2 2p(^2P^o)4p$**	**$^3P^o$**	**^3D**	**9**	**15**	**10323.33**	**5.59e-01***	**5.64e-01**	**5.40e-01**		
				3	3	10369.71	1.39e-01*	1.40e-01	1.34e-01	C+	
				3	5	10255.59	4.21e-01*	4.25e-01	4.07e-01	C+	
				1	3	10254.15	5.60e-01*	5.65e-01	5.44e-01	C+	
				5	3	10670.72	5.42e-03*	5.48e-03	5.22e-03	C+	
				5	5	10549.91	8.23e-02*	8.31e-02	7.93e-02	C+	
				5	7	10324.60	4.71e-01*	4.75e-01	4.54e-01	C+	

Çizelge 4.12. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST (Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.
							WBEPMT	QDOT		
$2s^22p(^2P^o)4s$	**$2s^22p(^2P^o)4p$**	**$^3P^o$**	**^3S**	**9**	**3**	**9115.878**	**1.27e-01***	**1.27e-01**	**1.10e-01**	
				5	3	9227.74	1.26e-01*	1.26e-01	1.09e-01	C+
				1	3	8914.563	1.29e-01*	1.29e-01	1.13e-01	C+
				3	3	9001.775	1.28e-01*	1.28e-01	1.12e-01	C+
$2s^22p(^2P^o)4s$	**$2s^22p(^2P^o)4p$**	**$^3P^o$**	**^3P**	**9**	**9**	**7415.930**	**4.60e-01***	**4.58e-01**	**4.43e-01**	
				1	3	7308.860	4.63e-01*	4.61e-01	4.49e-01	
				3	1	7416.090	1.53e-01*	1.52e-01	1.48e-01	
				3	3	7367.380	1.15e-01*	1.15e-01	1.11e-01	
				3	5	7309.140	1.94e-01*	1.93e-01	1.88e-01	
				5	3	7518.060	1.14e-01*	1.14e-01	1.09e-01	
				5	5	7457.410	3.44e-01*	3.43e-01	3.31e-01	
$2s^22p(^2P^o)3d$	**$2s^22p(^2P^o)4p$**	**$^3D^o$**	**^3P**	**15**	**9**	**2316.662**	**5.05e-02***	**4.46e-02**	**4.87e-02**	
				3	1	2320.189	2.84e-02*	2.51e-02	2.72e-02	C+
				3	3	2315.401	2.11e-02*	1.86e-02	2.04e-02	C+
				3	5	2309.616	1.38e-03*	1.23e-03	1.36e-03	C+
				5	3	2318.033	3.80e-02*	3.36e-02	3.66e-02	C+
				5	5	2312.235	1.25e-02*	1.11e-02	1.23e-02	C+
				7	5	2316.192	5.03e-02*	4.44e-02	4.89e-02	C+
$2s^22p(^2P^o)3d$	**$2s^22p(^2P^o)4p$**	**$^3F^o$**	**^3D**	**21**	**15**	**2382.070**	**8.68e-02***	**7.75e-02**	**8.74e-02**	
				5	3	2379.617	7.32e-02*	6.56e-02	7.39e-02	C+
$2s^22p(^2P^o)3d$	**$2s^22p(^2P^o)4p$**	**$^3F^o$**	**^3D**	**5**	**5**	**2373.556**	**1.34e-02***	**1.20e-02**	**1.38e-02**	**C+**
				5	7	2361.959	3.75e-04*	3.37e-04	3.89e-04	C
				7	5	2384.645	7.75e-02*	6.93e-02	7.79e-02	C+
				7	7	2372.940	9.50e-03*	8.50e-03	9.79e-03	C+
				9	7	2383.018	8.64e-02*	7.71e-02	8.74e-02	C+

Doğruluk aralıkları (D.A.): $C+ \leq 18\%$, $C \leq 25\%$, $D \leq 50\%$

Çizelge 4.13. O III'ün tekli seviyeleri arasındaki osilatör şiddetleri (Ateş ve ark. 2010)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST (Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.	Tachiev ve Fischer (2001)	Luo ve ark. (1989) OP Metodu	Nahar (1998)	Aggarwal ve Hibbert (1991-a) Teorik	Aggarwal ve Hibbert (1991-a) Deneysel
							WBEPMT	QDOT							
$2s^22p^2$	$2s^22p(^2P^o)3d$	^1D	$^1F^o$	5	7	320.978	4.20e-01	4.95e-01	4.69e-01	C+	4.26e-01		4.34e01	5.29e-01	5.20e-01
$2s^22p^2$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1D	$^1F^o$	5	7	277.386	1.53e-01*	1.69e-01	1.52e-01	B			1.45e-01		
$2s^22p^2$	$2s^22p(^2P^o)3d$	^1S	$^1P^o$	1	3	345.312	5.23e-01	6.50e-01	7.24e-01	C	6.33e-01	6.16e-01	6.57e-01	8.58e-01	8.53e-01
$2s^22p^2$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1S	$^1P^o$	1	3	295.942	1.82e-01	2.15e-01	2.19e-01	C+			2.1e-01		
$2s^22p^2$	$2s^22p(^2P^o)5s$	^1D	$^1P^o$	5	3	268.450	5.39e-03*	5.92e-03					4.52e-03		
$2s^22p^2$	$2s^22p(^2P^o)5s$	^1S	$^1P^o$	1	3	286.045	5.63e-03*	6.94e-03					1.19e-02		
$2s^22p^2$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1D	$^1P^o$	5	3	277.150	1.81e-03*	2.00e-03					3.48e-03		
$2s^22p(^2P^o)3s$	$2s^22p(^2P^o)3p$	$^1P^o$	^1S	3	1	2455.709	1.24e-01*	1.09e-01	1.03e-01	B	1.07e-01	1.12e-01	1.04e-01	9.96e-02	9.50e-02
$2s^22p(^2P^o)3s$	$2s^22p(^2P^o)3p$	$^1P^o$	^1D	3	5	2984.651	5.12e-01	4.74e-01	4.78e-01	B	4.77e-01	4.89e-01	4.00e-01	5.05e-01	4.83e-01
$2s^22p(^2P^o)3s$	$2s^22p(^2P^o)3p$	$^1P^o$	^1P	3	3	5593.805	1.53e-01*	1.52e-01	1.53e-01	B	1.45e-01	1.45e-01	1.24e-01	1.40e-01	1.53e-01
$2s^22p(^2P^o)3s$	$2s^22p(^2P^o)4p$	$^1P^o$	^1P	3	3	1079.384	6.65e-02*		6.50e-02	B			6.20e-02		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)4s$	^1P	$^1P^o$	3	3	1476.873	8.14e-02	9.87e-02	9.97e-02	B		9.90e-02	8.76e-02		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)4s$	^1S	$^1P^o$	1	3	2228.853		1.61e-01	1.44e-01	B		1.41e-01	1.30e-01		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)4s$	^1D	$^1P^o$	5	3	1920.019	1.40e-01*	1.40e-01	1.54e-01	B		1.53e-01	1.182e-01		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)3d$	^1P	$^1D^o$	3	5	2960.559	4.48e-01*	3.96e-01	4.00e-01	B	2.79e-01	4.19e-01	4.56e-01	3.54e-01	3.80e-01
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)3d$	^1D	$^1D^o$	5	5	5509.772	5.16e-02	4.99e-02	4.82e-02	B	3.54e-02	5.00e-02	5.06e-02	3.22e-02	4.55e-02

Çizelge 4.13. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST (Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.	Tachiev ve Fischer (2001)	Luo ve ark. (1989) OP Metodu	Nahar (1998)	Aggarwal ve Hibbert (1991-a) Teorik	Aggarwal ve Hibbert (1991-a) Deneysel
							WBEPMT	QDOT							
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)3d$	^1P	$^1P^o$	3	3	2391.161		1.64e-01	1.39e-01	C	1.58e-01	1.60e-01	1.697e-01	1.25e-01	1.21e-01
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)3d$	^1D	$^1F^o$	5	7	3962.694		3.98e-01	4.12e-01	B	4.20e-01		4.02e-01	3.48e-01	3.80e-01
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)3d$	^1S	$^1P^o$	1	3	5269.767	4.30e-01*	4.35e-01	4.37e-01	B	4.30e-01	4.72e-01	4.92e-01	3.55e-01	3.99e-01
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)5s$	^1P	$^1P^o$	3	3	982.094	1.64e-02	1.82e-02	1.94e-02	C+			2.477e-02		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)5s$	^1D	$^1P^o$	5	3	1160.155	2.10e-02*	2.58e-02	2.35e-02	C+			2.56e-02		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)5s$	^1S	$^1P^o$	1	3	1266.164	2.41e-02*	2.69e-02					2.46e-02		
$2s^22p(^2P^o)4s$	$2s^22p(^2P^o)4p$	$^1P^o$	^1D	3	5	8174.396	7.28e-01*	7.28e-01	7.09e-01	B			6.90e-01		
$2s^22p(^2P^o)4s$	$2s^22p(^2P^o)4p$	$^1P^o$	^1P	3	3	14168.60	2.61e-01	2.57e-01	2.66e-01	B			2.63e-01		
$2s^22p(^2P^o)3d$	$2s^22p(^2P^o)4p$	$^1D^o$	^1D	5	5	2166.070	1.29e-02*	1.21e-02	1.18e-02	C+			1.252e-02		
$2s^22p(^2P^o)3d$	$2s^22p(^2P^o)4p$	$^1D^o$	^1P	5	3	2439.553	7.13e-02*		7.49e-02	B			6.98e-02		
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)5s$	^1P	$^1P^o$	3	3	3696.214	1.47e-01	1.62e-01	1.59e-01	B			1.59e-01		
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)5s$	^1D	$^1P^o$	5	3	4570.541	2.29e-01*	2.49e-01	2.38e-01	B			2.32e-01		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1P	$^1D^o$	3	5	1153.022		7.18e-02	7.47e-02	B			5.90e-02		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1P	$^1P^o$	3	3	1109.496		8.61e-03					4.30e-03		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1D	$^1D^o$	5	5	1406.455		3.89e-02	4.00e-02	B			2.74e-02		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1S	$^1P^o$	1	3	1486.182		2.42e-01	2.01e-01	B			1.68e-01		

Çizelge 4.13. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistiksel Ağırlık		λ(Å)	Bu Çalışma		NIST (Ralchenko ve ark. 2007)	D.A.
							WBEPMT	QDOT		
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1P	$^1D^o$	3	5	8361.155	6.90e-01*	6.08e-01	6.86e-01	B
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)5d$	^1D	$^1P^o$	5	3	1031.485		6.41e-04		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)5d$	^1P	$^1D^o$	3	5	902.255	3.96e-02	3.43e-02	4.05e-02	C+
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)5d$	^1P	$^1P^o$	3	3	888.293		6.08e-03		
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)5d$	^1D	$^1D^o$	5	5	1050.358		1.33e-02	1.34e-02	C+
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)5d$	^1D	$^1F^o$	5	7	1033.123		5.58e-02	5.15e-02	B
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)6d$	^1P	$^1D^o$	3	5	808.291		1.80e-02	2.58e-02	C+
$2s^22p(^2P^o)3p$	$2s^22p(^2P^o)6d$	^1D	$^1D^o$	5	5	925.156		6.20e-03		
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1D	$^1D^o$	5	5	14739.24	8.45e-02	8.89e-02	8.14e-02	B
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1D	$^1F^o$	5	7	10121.51	7.33e-01*	7.55e-01	7.24e-01	B
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)4d$	^1P	$^1P^o$	3	3	6509.353		2.47e-01	2.53e-01	B
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)5d$	^1P	$^1P^o$	3	3	2645.017	1.00e-03	1.29e-03		
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)5d$	^1P	$^1D^o$	3	5	2772.776	3.73e-02*	3.89e-02	3.67e-02	B
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)5d$	^1D	$^1D^o$	5	5	3237.348	3.12e-02*	2.94e-02	3.12e-02	B
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)6d$	^1P	$^1D^o$	3	5	2042.933	2.90e-02	2.22e-02	2.27e-02	C+
$2s^22p(^2P^o)4p$	$2s^22p(^2P^o)6d$	^1D	$^1D^o$	5	5	2284.473		1.10e-02	1.27e-02	C+

Doğruluk aralıkları (D. A.) : $B \leq 10\%,\ C+ \leq 18\%,\ C \leq 25\%$