



T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ALKALİ ATOMLARDA GEÇİŞ OLASILIKLARININ HESAPLANMASI

ALİ GÜLLÜLER

YÜKSEK LİSANS

FİZİK Anabilim Dalı

ARALIK-2010
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ BİLDİRİMİ

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

DECLARATION PAGE

I hereby declare that all information in this document has been obtained and presented in accordance with academic rules and ethical conduct. I also declare that, as required by these rules and conduct, I have fully cited and referenced all material and results that are not original to this work.

Ali GÜLLÜLER

07.12.2010

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ALKALİ ATOMLARDA GEÇİŞ OLASILIKLARININ HESAPLANMASI

Ali GÜLLÜLER

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Gültekin ÇELİK

2010, 77 Sayfa

Jüri
Doç. Dr. Gültekin ÇELİK
Yrd. Doç. Dr. Mehmet TAŞER
Yrd. Doç. Dr. Murat YILDIZ

Bu tez çalışmasında, lityum, sodyum, potasyum ve rubidyum gibi alkali sistemlerde elektrik dipol geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori "WBEPMT" ve kuantum kusur orbital "QDO" teori kullanılarak hesaplanmıştır. Geçiş olasılıklarının elde edilmesi için gerekli olan parametreler deneysel enerji verileri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri kullanılarak belirlenmiştir. Geçiş olasılıkları için hesaplanan değerler literatürdeki diğer teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmış ve oldukça iyi bir uyum gözlenmiştir.

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

ABSTRACT

MS THESIS

THE CALCULATIONS OF TRANSITION PROBABILITIES IN ALKALI ATOMS

Ali GÜLLÜLER

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF SELÇUK UNIVERSITY
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE IN PHYSICS

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK

2010, 77 Pages

Jury
Assoc. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK
Asst. Prof. Dr. Mehmet TAŞER
Asst. Prof. Dr. Murat YILDIZ

In this study, the electric dipole transition probabilities for alkali systems such as lithium, sodium, potassium and rubidium have been calculated using the weakest bound electron potential model theory "WBEPMT" and the quantum defect orbital "QDO" theory. The needed parameters for obtain of transition probabilities have determined using experimental energy data and values of expectation of radii belong to levels. The calculated values for transition probabilities are compared to the results obtained to other theoretical methods in the literature and a good agreement has been observed.

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

ÖNSÖZ

Bu tez çalışmasında lityum, sodyum, potasyum ve rubidyum gibi bazı alkali metallerde elektrik dipol geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori gibi yarı deneysel yöntemler kullanılarak hesaplanmıştır. Geçiş olasılıklarının hesaplanmasında gerekli olan parametreler deneysel enerji değerleri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri kullanılarak elde edilmiştir. Seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin belirlenmesinde hem sayısal Coulomb Yaklaşımı hem de relativistik olmayan sayısal Hartree-Fock yöntemi kullanılmıştır. Elde edilen sonuçlar çizelgeler halinde literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Bu tez çalışmasında birikimini ve desteğini benden esirgemeyen değerli hocam Doç. Dr. Gültekin Çelik'e teşekkürü borç bilirim. Katkılarından dolayı Dr. Şule Ateş'e teşekkür ederim. Ayrıca öğrenim hayatım boyunca beni hep destekleyen aileme şükranlarımı sunarım.

ALİ GÜLLÜLER
KONYA-2010

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **ix**

1. GİRİŞ **1**

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI **3**

2.1. Lityum Atomu ile İlgili Daha Önceki Çalışmalar 3

2.2. Sodyum Atomu ile İlgili Daha Önceki Çalışmalar……...4

2.3. Potasyum Atomu ile İlgili Daha Önceki Çalışmalar 4

2.4. Rubidyum Atomu ile İlgili Daha Önceki Çalışmalar 5

3. MATERYAL VE METOT **6**

3.1. Alkali Atomların Genel Özellikleri 6

3.2. Alkali Atomların Enerji Seviyeleri 10

3.3. Işıma Teorisi 19

3.3.1. Dipol yayınlaması 20

3.3.2. Manyetik dipol yayınlaması 22

3.3.3. Elektrik kuadropol yayınlaması 23

3.3.4. Elektrik dipol, manyetik dipol, elektrik kuadrapol geçiş olasılıklarının karşılaştırılması 23

3.4. Geçiş Olasılıklarının ve Osilatör Şiddetleri 24

3.4.1. Geçişler ve einstein katsayıları 25

3.4.2. Kendiliğinden geçişler 25

3.4.3. Mecburi geçişler 26

3.4.4. Soğurma geçişleri 28
3.5. Elektrik Dipol Geçiş Olasılığı 29
3.5.1. Bir Elektron Geçişleri 30
3.6. Radyal İntegralleri Hesaplama Yöntemleri 32
3.6.1. En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori 32
3.6.2. Kuantum kusur orbital teori 36

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA 40
4.1. Alkali Sistemlerde Hesaplamalar 40
4.1.1. Lityum atomunda hesaplamalar 40
4.1.2. Sodyum atomunda hesaplamalar 49
4.1.3. Potasyum atomunda hesaplamalar 62
4.1.4. Rubidyum atomunda hesaplamalar 69
4.2. Tartışma 71
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER 72
KAYNAKLAR 73
ÖZGEÇMİŞ 78

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

Ca Kalsiyum

Cs Sezyum

D Dipol momenti

Fr Fransiyum

K Potasyum

Li Lityum

N Azot

Na Sodyum

R Rydberg Sabiti

Rb Rubidyum

Kısaltmalar

CA	Coulomb Approximation
CI	Configuration Interaction
FCHF	Frozen Core Hartree-Fock
FCPC	Full Core Plus Correction
MBPT	Many-Body Perturbation Theory
MCDF	Multiconfiguration Dirac-Fock
MCHF	Multiconfiguration Hartree-Fock
MOT	Magneto Optical Trap
NCA	Numerical Coulomb-Approximation
NIST	National Institute of Standards and Technology
NRHF	Numerical Non-Relativistic Hartree-Fock
QDM	Quantum Defect Method
QDO	Quantum Defect Orbital
SCHF	Single Configüration Hartree-Fock
WBEPMT	Weakest Bound Electron Potential Model Theory

1. GİRİŞ

Fizik ve astrofizik gibi birçok alanda ışık-madde etkileşmesi sonucu gözlenebilen spektrumlar, atomlara ait elektronların belirli seviyeler arasındaki geçişleriyle karakterize edilirler. Bu elektron geçişleri, atomik yapı hesaplamalarında sıkça kullanılan geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri gibi birçok temel spektroskopik niceliğin doğru olarak belirlenmesi için oldukça önemlidir. Günümüzde madde biliminin temelini oluşturan uzmanlık alanı "*spektroskopi*" dir. Bu konuyla ilgili yapılan deneysel ve teorik çalışmalar günümüzde de yoğun şekilde ilgi görmektedir. Geçiş olasılıkları, herhangi iki seviye arasında geçiş yapacak elektronun istatistiksel olasılığını tasarlar. Uzak gezegenlerden gözlenen spektrumların ince yapı seviyeleri arasındaki geçiş olasılıkları, o gezegenlerde hangi maddelerin bulunabileceğine dair önemli bilgiler içermektedir. Ayrıca yıldızlar arası soğurma özelliklerinin araştırılmasında geçiş olasılıkları önemli rol oynamaktadır. Lazer sistemlerindeki gelişmelerle birlikte, çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde ışık madde etkileşmesinin bir sonucu olarak elektron geçişleriyle karakterize edilen hem tek foton hem de çok foton soğurma ile ilgili yapılan çalışmalar yaklaşık 50 yıldır yoğun olarak sürdürülmektedir. Çok elektronlu sistemler için geçiş olasılıklarının hesaplanması ya da ölçülmesi, atom fiziğinde çözülmesi zor olan bir problemdir. Geçiş olasılıklarının deneysel olarak belirlenmesinde günümüzde de birçok zorlukla karşılaşılmakta ve yapılan belirli ölçümler çoğu zaman düşük uyarılmış seviyeler içeren geçişlerle sınırlı kalmaktadır. Alkali atomlar, son yörüngelerinde kapalı kabuklar dışında tek bir elektron bulundurdukları için hidrojen atomuna benzerler. Bu nedenle alkali ve alkali benzeri elementler çok elektronlu sistemler için tasarlanan yaklaşım yöntemlerinin test edilmesi için sıkça kullanılmaktadırlar.

Bu tez çalışmasında, lityum, sodyum, potasyum ve rubidyum gibi alkali atomlarda elektrik dipol geçiş olasılıkları, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori gibi yarı deneysel yöntemler kullanılarak hesaplanmıştır. Her iki yöntem için geçiş olasılıklarının hesaplanmasında ve gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde, deneysel enerji değerleri kullanılmıştır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride deneysel enerjilerle birlikte seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri sayısal coulomb yaklaşımı (NCA) (Lindgrad ve Neilsen, 1977) ve relativistik olmayan Hartree-Fock (NRHF) yöntemi (Gaigalas ve Fischer, 1996)

kullanılarak belirlenmiş ve geçiş olasılığı hesaplamalarında gerekli parametrelerin elde edilmesinde kullanılmıştır.

Geçiş olasılıklarının belirlenmesi süreci her bir geçiş için seviyeleri tanımlayan dalga fonksiyonlarının bilinmesini gerektirir. Her iki yöntemin kendi hesaplama süreci içerisinde geçiş olasılıklarının hesaplanması için gerekli parametreler belirlendikten sonra, lityum, sodyum, potasyum ve rubidyum gibi alkali atomlarda hesaplamalar bilgisayar ortamında yapılmıştır. Elde edilen sonuçlar, literatürden elde edilebilen değerlerle karşılaştırılmış ve sonuçların literatür değerleri ile uyumlu olduğu gözlenmiştir.

Çalışmanın 1. bölümünü oluşturan giriş bölümünden ve 2. bölümünü oluşturan kaynak araştırması bölümünden sonra, 3. bölümünde alkali atomların genel özelliklerinden bahsedilmiştir. Enerji seviyeleri ve atomik yapı hesaplamaları için temel teşkil eden konulara değinilmiş, hesaplamalarda kullanılan yöntemler hakkında bilgiler verilmiştir. 3.1 kısmında alkali atomların genel özellikleri belirtilmiş, 3.2 kısmında alkali atomların enerji seviyeleri hakkında bilgi verilmiştir. 3.3 kısmında ışıma teorisi, dipol yayınlaması, manyetik dipol yayınlaması, incelenmiştir. Ayrıca elektrik kuadropol yayınlaması, elektrik dipol ve manyetik dipol geçiş olasılıkları karşılaştırılmıştır. 3.4 kısmında geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetlerinden bahsedilmiştir. 3.5 kısmında elektrik dipol geçiş olasılığından bahsedilmiş ve bir elektron geçişi için çizgi şiddeti verilmiş, ayrıca geçiş matris elemanının radyal kısmı ifade edilmiştir. 3.6 kısmında en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori açıklanmış ve kuantum kusur orbital teoriden bahsedilmiştir. Araştırma sonuçlarının yer aldığı 4. bölümde WBEPM teori ve QDO teori ile hesaplanan lityum, sodyum, potasyum ve rubidyum gibi alkali atomlarda elektrik dipol geçiş olasılıkları sonuçları literatürdeki değerlerle karşılaştırmalı olarak çizelgeler halinde sunulmuştur. Ayrıca hesaplamalar için kullanılan metotların elverişliliği tartışılmıştır. 5. bölümde ise elde edilen sonuçların değerlendirilmesi ve geleceğe yönelik planlar yer almaktadır.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Lityum Atomu ile İlgili Daha Önceki Çalışmalar

Lityum atomunda geçiş olasılıklarının belirlenmesi için birçok yöntem kullanılmaktadır. Caves ve Dalgaro (1972), lityum atomunda geçiş olasılıklarını model potansiyel teori yöntemi ile hesapladılar. Lindgard ve Nielsen (1977), lityum atomu için elektrik dipol geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini ve uyarılmış seviyelerin yaşam sürelerini, nümerik Coulomb yaklaşımını (NCA) kullanarak, $n \leq 12$, $l \leq 4$ şeklinde tanımlı alkali benzeri diziler için hesapladılar. Tayal ve Tripathi (1981), atomik lityum için, minimum ve maksimum osilatör şiddetlerini, izinli geçişler için Glauber yaklaşımı yöntemiyle hesapladılar. Brandus (1983), Rohrlich-Griem ve Slater, Roothaan-Hartree-Fock teorileri ve perdelenmiş hidrojenik dalga fonksiyonlarından yararlanarak lityum atomunun 3d ^{2}D seviyesinin yaşam süresini ve bazı seviyeler arasındaki geçiş olasılıklarını hesapladı. Schunke ve Kunze (1987), lityum atomunda 3s-4d geçiş için iki foton geçiş olasılıklarını indüklenmiş floresans sinyali yöntemi kullanarak elde ettiler ve sonuçları teorik hesaplamalarla karşılaştırdılar. Krishnan ve Stumpf (1992), lityum ve diğer alkali metal atomlar için sodyum, potasyum, rubidyum ve sezyum için Born yaklaşımı ve analitik Coulomb yaklaşımını da kullanarak geçiş olasılıklarını hesapladılar. Martin ve ark., (1993), atom numarası Z=3'ten Z=45'e kadar olan lityum ve benzeri atomlarda, 2s ^{2}S-np ^{2}P$^\circ$(n=2, 3, 4), 2p ^{2}P$^\circ$-nd ^{2}D (n=3, 4), 3d ^{2}D-4f ^{2}F$^\circ$ (n=2, 3, 4) ve 2p ^{2}P$^\circ$-ns ^{2}S (n=3, 4) geçişleri için osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıklarını hesapladılar. Qu ve ark., (1999), rölativistik olmayan elektrik dipol uzunluk, hız ve ivme soğurma osilatör şiddetlerini $1s^2$ 2s-$1s^2$np ($3 \leq n \leq 9$) için, lityum benzeri izoelektronik dizilerde Z=10'a kadar geçişleri, enerjileri ve multikonfigürasyonel etkileşimli dalga fonksiyonlarını FCPC yöntemini kullanarak hesapladılar. Fischer ve ark., (1998), Multikofigürasyonel Breit-Pauli enerji seviyelerini, yaşam sürelerini ve geçiş olasılıklarını lityum atomunun 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s seviyeleri için hesapladılar. Çelik (2007), lityum atomunda bazı seviyeler arasındaki geçiş olasılıklarını en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve tam kuantum kusur yöntemi kullanarak hesapladılar.

2.2. Sodyum Atomu ile İlgili Daha Önceki Çalışmalar

Ali (1971), sodyum için 3 ^{2}D-3 ^{2}S ve 4 ^{2}D-4 ^{2}S geçişleri elektrik kuadrapol geçiş olasılıklarını, Frozen-Core Hartree-Fock yaklaşımı ve deneysel geçiş enerjilerinden yararlanarak hesapladı. Lindgard ve Nielsen, (1977) nötr sodyum için elektrik dipol geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini ve yaşam sürelerini nümerik Coulomb yaklaşımı (NCA) ile $n \leq 12$, $l \leq 4$ şeklinde tanımlı alkali benzeri diziler için belirlediler. Langhoff ve ark., (1985), sodyum atomu için ^{2}S, ^{2}P, ^{2}D arasındaki geçiş olasılıklarını Hartree-Fock yöntemini kullanarak hesapladılar. Lowe ve Biemont (1994), sodyum atomunun 4p ^{2}P^o ve 5p ^{2}P^o seviyeleri için uyarılmış lazer floresans yöntemi ile yaşam sürelerini ölçerek geçiş olasılıklarını belirlediler. Siegel ve Migdalek (1998), elektrik dipol geçişler için osilatör şiddetlerini, sodyumun düşük seviye izoelektronik ardışık dizileri için (Na I'den Ca X'a kadar) hesapladılar. Zheng ve ark., (1999), en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) ile düşük seviyedeki sodyum atomunun geçiş olasılıklarını hesapladılar. Çelik ve Ateş (2008), nötr sodyum atomunun bazı seviyeleri arasındaki geçiş olasılıklarını en zayıf bağlı potansiyel model teori ile hesapladılar.

2.3. Potasyum Atomu ile İlgili Daha Önceki Çalışmalar

Potasyum atomunun geçiş olasılıklarını belirlemek için pek çok teorik çalışma yapılmıştır. Ali (1971), potasyum atomunda 3 ^{2}D-3 ^{2}S ve 4 ^{2}D-4 ^{2}S geçişleri için elektrik kuadrapol geçiş olasılıklarını, Frozen-Core Hartree-Fock yaklaşımını kullanarak ve deneysel geçiş enerjilerinden yararlanarak hesapladı. Weisheit ve Dalgarno (1971), 4s-np (n=4, 5, … , 16) geçişler için geçiş olasılıklarını model potansiyel yaklaşımı kullanılarak hesapladılar. Lindgard ve Nielsen (1977), potasyum atomu için elektrik dipol geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini ve yaşam sürelerini sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) ile elde ederek, $n \leq 12$, $l \leq 4$ şeklinde tanımlı her bir alkali benzeri diziler için hesapladılar. Aeschliman (1981), potasyum atomunda ns-4p (n=6-15), nd-4p (n=5-13), nf-3d (n=7-14) seri geçişleri için geçiş olasılığı değerlerini ölçtüler. Langhoff ve ark., (1985), potasyum atomu için ^{2}S, ^{2}P ve ^{2}D arasındaki geçiş olasılıklarını Hartree-Fock yöntemini kullanarak hesapladılar. Hart ve Atkinson (1986), potasyum atomunun S ve D seviyelerindeki yaşam sürelerini iki foton uyarılmasından yararlanarak hesapladılar. Berends ve ark., (1988), potasyum atomunda 5P, 6P, 7P seviyeleri için uyarılmış lazer floresans tekniği ile yaşam sürelerini hesapladılar. Çelik

ve Ateş (2008), atomik potasyumda bazı uyarılmış seviyeleri arasındaki geçişler için elektrik dipol geçiş olasılıklarını en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori yöntemini kullanarak hesapladılar. Glodz ve ark., (2008), nötr potasyum atomu için 5f, 6f, 7f ve 8f durumları için yaşam sürelerini relativistic linearized couple-cluster metodu ile ölçtüler.

2.4. Rubidyum Atomu ile İlgili Daha Önceki Çalışmalar

Hawkins (1969), rubidyum optiksel geçiş olasılıklarını optiksel pompalama yöntemi ile ölçtü. Lindgard ve Nielsen (1977), rubidyum atomu için elektrik dipol geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini ve yaşam sürelerini nümerik Coulomb yaklaşımını (NCA) kullanarak $n \leq 12$, $l \leq 4$ şeklinde tanımlı alkali diziler için hesapladılar. Caliebe ve Niemax (1979), rubidyum $5\ ^2S_{1/2}$- $n^2\ P_{3/2}$ ve $5\ ^2S_{1/2}$- $n^2\ P_{1/2}$ $(6 \leq n \leq 20)$ temel serileri için yüksek kararlı spektrometre kullanarak osilatör şiddetlerini belirlediler. Gounand ve ark., (1980), doğal uyarılmış ışınımsal yaşam sürelerini rubidyum atomu için $(9 \leq n \leq 18)$ uyarılmış S ve D seviyelerinde ölçtüler. Shabanova ve Khlyustalov (1984), rubidyum atomunun $5\ ^2S_{1/2}$- $n^2\ P_{3/2,\ 1/2}$ geçişleri için osilatör şiddetlerini Hook Metodu ile ölçtüler. Langhoff ve ark., (1985), rubidyum atomu için ^2S, ^2P, ^2D arasındaki geçiş olasılıklarını Hartree-Fock yöntemini kullanarak hesapladılar. Winjgaarden ve Sagle (1992), Hanle Effect yönteminden yararlanarak rubidyum atomunun, n $D_{3/2}$ seviyesinin yaşam sürelerini ölçtüler. Kim (1998), rubidyum atomunda elektron çarpışma iyonlaşma tesir kesitlerini hesapladı. Safranova ve ark., (2004), rubidyum atomu ns-n´p, nd- n´p ve 6d-4f geçişleri için elektrik dipol matris elemanlarını rölativistik high-order many body perturbation teori yöntemini kullanarak hesapladılar. Gomez ve ark., (2005), rubidyumun 6s seviyesindeki yaşam sürelerini MOT yöntemi kullanarak ölçtüler. Sansonetti (2006), rubidyum atomunu ve bütün pozitif iyon durumundaki rubidyumlar için geçiş olasılıklarını hesapladı. Sheng ve ark., (2008), rubidyum atomunun 5 $D_{3/2}$ ve 5 $D_{5/2}$ seviyelerinin yaşam sürelerini time-correlated single-photon-counting method yöntemi ile hesapladılar.

3. MATERYAL VE METOT

3.1. Alkali Atomların Genel Özellikleri

Alkali atomlar periyodik tablonun birinci grubunda yer alan metallerdir. Fransiyum dışında hepsi yumuşak yapıda ve parlak görünümdedir. Kolaylıkla eriyebilir ve uçucu hale geçebilirler. Bağıl atom kütleleri arttıkça, erime ve kaynama noktaları da düşüş gösterir. Diğer metallere kıyasla, özkütleleri de oldukça düşüktür. Hepsi tepkimelerde etkin rol oynar. En yüksek temel enerji düzeylerinde bir tek elektron bulundururlar. Bu elektronu çok kolay kaybederek +1 yüklü iyonlar oluşturabildikleri için, kuvvetli indirgendirler. Isı ve elektriği çok iyi iletirler. Suyla etkileşimleri çok güçlüdür, suyla tepkime sonucunda hidrojen gazı açığa çıkarırlar. 1 A grubunda yer alan Li, Na, K, Rb, Cs ve Fr elementleri alkali metalleri oluştururlar.

Lityum elementi 1817 yılında Arfvedson tarafından keşfedilmiştir. Lityum atomu doğada serbest halde oluşmaz. Lityum elementinin özgül ısısı yüksek olduğundan ısı transferi uygulamalarında kullanılmaktadır. Sodyum elementi ilk olarak 1807 yılında Davy tarafından izole edildi ve bileşikleri elde edildi. Sodyum elementi güneşte ve yıldızlarda bol miktarda bulunmaktadır. Sodyum yerkabuğunun yaklaşık % 2,6'sını oluşturur. Doğada en bol bulunan dördüncü elementtir. Sodyum elementi bütün reaktif elementler gibi doğada serbest halde bulunmaz. Potasyum metalleri yer kabuğunda ağırlıkça en bol bulunan elementlerdendir. Potasyum daha çok gübre sanayisinde kullanılmaktadır. Potasyum elementi özellikle bitki gelişimi için önemli olup toprakta önemli miktarda bulunmaktadır. Yer kabuğunda yaklaşık % 2,4 oranında bulunur. Rubidyum elementi ilk olarak 1861 yılında Robert Bunsen ve Gustav Kirchhoff tarafından keşfedilmiştir. Tuzları aleve tutulduğunda karakteristik olan koyu kırmızı rengini verir (Sansonetti, 2006). Rubidyum periyodik tabloda birinci ana gruptaki alkali metaller grubundandır. Düşük enerji seviyesine sahip olan bu element Paschen gösterimi ile iyi bir şekilde tanımlanabilir. Rubidyum atomu küresel simetrik yapıya sahip olup, kapalı kabuk dışındaki bir elektronu ışımaya aktif biçimdedir ve açısal momentumu 0, 1, 2… ve elektron spini ½ dir. Bunun sebebi yarı bağlı elektron spinidir. Temel durumu S olan bir elektronun orbital açısal momentumu, sıfırdır. Spin orbital açısal bağlaşımından dolayı toplam açısal momentum kuantum sayısı J=½ dir. Bu bağlaşımdan dolayı birinci ışıma seviyesi $P_{1/2}$ ve 2 $P_{3/2}$ seviyelerine ayrılır. Her iki durumda kolaylıkla gaz haline ışıyabilir. 2 $P_{1/2}$ ve 2 $P_{3/2}$ durumlarından, 2 $S_{3/2}$ durumuna

geçişler için karakteristik dublet D1 ve D2 yayınlamaları olur. Rubidyum için geçiş dalga boyları 794.8 nm (D1 çizgisi) ve 780 nm (D2 çizgisi) şeklindedir.

Sodyum ve potasyum doğada en çok bulunan alkali metallerdir ve çeşitli bileşikler halinde bulunurlar. Alkali metaller termonükleer füsyon, mağnetodinamik jeneratörlerde, astrofiziksel çalışmalarda, atmosferin üst tabakaları ile ilgili çalışmalarda yaygın olarak kullanılan elementlerdir.

Son yıllarda nötr ve iyonik sistemler için yapılan spektroskopik çalışmalar ve araştırmalar fizik çevrelerinde önemli ölçüde ilgi çekmektedir. Bazı modern deneysel teknikler; osilatör şiddetlerinde, yaşam sürelerinde ve geçiş olasılıklarının belirlenmesinde daha hassas ölçümler yapılmasına olanak sağlamaktadır. Alkali metal atomlarının tam dolmamış dış alt elektron katında yalnız bir elektron bulunur ve bu elektron s orbitalindedir. Alkali metal atomlarının spektrumu bu son yörüngedeki elektronun kuantum halleri arasındaki geçişleri sonucu oluşur. Alkali metal atomlarının son yörüngelerinde tek elektron bulunduğundan, enerji seviyeleri hidrojen ve diğer tek elektronlu iyonların enerji seviyelerine benzemelidir. Ancak alkali atomlarda dış elektron, yalnız çekirdek alanında değil, aynı zamanda iç alt katmanlardaki elektronların yarattığı alanda da hareket eder. Bu durumda alkali metal atomların enerji seviyeleri tek elektronlu sistemlerden farklılık göstermektedir. Rydberg, alkali metal atomlarının spektrumlarında hidrojen spektrumuna benzer birkaç spektral seri keşfetmiştir. Rydberg, alkali metal atomlarının spektral terimini hidrojen terimine benzer olarak, 3.1 denklemindeki gibi göstermiştir.

$$T(n) = \frac{R}{(n+\alpha)^2} \tag{3.1}$$

Burada R, Rydberg sabiti, n bir tam sayı veα ise verilen bir seri için sabit olan bir düzeltme çarpanıdır. Formülden de görüleceği üzere baş kuantum sayısı (n) sonsuza yaklaştıkça 3.1 denklemi,

$$\left[T(n)\right]_{n\to\infty} \to \frac{R}{n^2} \tag{3.2}$$

şeklinde olur. Yani n'nin çok büyük halleri için alkali metal atomlarının spektral terimlerine dönüşür. Rydberg, alkali metal atomların spektrumunda üç tür spektral seri

keşfetmiştir. Bunlar asal, keskin ve yaygın serilerdir. Bu seriler için denklem 3.1'deki α düzeltmesi, sırası ile p, s, d harfleri ile gösterilir. Keskin ve yaygın serilerin üst üste düştüğü de deneysel verilerle ispatlanmıştır. Bu duruma göre sırasıyla asal, keskin ve yaygın seriler şöyle yazılabilirler.

$$\nu^* = A - \frac{R}{(n+p)^2} \tag{3.3}$$

$$\nu^* = B - \frac{R}{(n+s)^2} \tag{3.4}$$

$$\nu^* = B - \frac{R}{(n+d)^2} \tag{3.5}$$

Burada |s|>|p|>|d| şeklindedir. Bu serilerin sınırları,

$$A = \frac{R}{(m+s)^2} \tag{3.6}$$

$$B = \frac{R}{(m+p)^2} \tag{3.7}$$

şeklinde yazılabilir. Burada (*m*) bir tam sayıdır.

Daha sonraları yapılan çalışmalarda, Bergman spektrumun kırmızı ötesi bölgesinde alkali metal atomlarının bir serisini daha keşfetmiştir. Bu seri Bergman veya *fundamental* (temel) seri olarak adlandırılır. Bu seri

$$\nu^* = C - \frac{R}{(n+f)^2} \tag{3.8}$$

şeklinde adlandırılır. Bu serinin sınırları ise,

$$C = \frac{R}{(m+d)^2} \tag{3.9}$$

3.9 denklemindeki gibi ifade edilir.

Eğer $\frac{R}{(n+x)^2}$ terimi sembolik olarak *nX* şeklinde gösterecek olursak, alkali metal atomlarının spektral serilerini aşağıdaki gibi yazabiliriz:

Asal seri, $\upsilon^* = mS - nP$
Keskin seri, $\upsilon^* = mP - nS$
Yaygın seri, $\upsilon^* = mP - nD$
Temel seri, $\upsilon^* = mD - nF$

Alkali metal atomları için genel halde yukarıdaki gibi yazılmış olan seri formülleri şöyle yazılabilir (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

1) Li I
- Asal seri : nP - 2S; (n=2, 3, 4,…)
- Keskin seri : nS - 2P; (n= 3, 4, 5,…)
- Yaygın seri : nD - 2P; (n= 3, 4, 5,…)
- Temel seri : nF - 3D; (n= 4, 5, 6,…)

2) Na I

- Asal seri : nP - 3S; (n= 3, 4, 5,…)
- Keskin seri : nS - 3P; (n= 4, 5, 6,…)
- Yaygın seri : nD - 3P; (n= 3, 4, 5,…)
- Temel seri : nF - 3D; (n= 4, 5, 6,…)

3) K I

- Asal seri : nP - 4S; (n=4, 5, 6,…)
- Keskin seri : nS - 4P; (n=5, 6, 7,…)
- Yaygın seri : nD - 4P; (n=3, 4, 5,…)
- Temel seri : nF - 3D; (n=4, 5, 6…)

4) Rb I

- Asal seri : nP - 5S; (n=5, 6, 7,…)
- Keskin seri : nP - 5S; (n=6, 7, 8,…)
- Yaygın seri : nS - 5D; (n=4, 5, 6,…)
- Temel seri : nD - 5P; (n=4, 5, 6,…)

5) Cs I

- Asal seri : nP - 6S; (n=6, 7, 8,…)
- Keskin seri : nS - 6P; (n=7, 8, 9,…)
- Yaygın seri : nD - 6P; (n=5, 6, 7,…)
- Temel seri : nF - 5D; (n=4, 5, 6,…)

3.2. Alkali Atomların Enerji Seviyeleri

Alkali metal atomların tam dolmamış dış alt elektron katında yalnız bir s-elektronu bulunur. Bu elektronun uyarılmasıyla çok sayıda bir elektronlu konfigürasyon elde edilir. Alkali metal atomların konfigürasyonlarının son yörüngeleri bir elektronlu olduğundan, hidrojen ve diğer bir elektronlu iyonların enerji seviyelerine benzemelidir. Ancak alkali metal atomlarda tek dış elektron yalnız çekirdek alanında değil, aynı zamanda iç alt katmanlardaki elektronların yarattığı alanda da hareket eder. Bu durumda alkali metal atomların enerji seviyeleri bir elektronlu atom ve iyonların enerji seviyelerinden biraz daha farklı olmalıdır. Alkali metal atomların spektrumu bu elektronun kuantum halleri arasındaki geçişleri sonucu oluşur. Alkali metal atomların kararlı hallerdeki enerjisi,

$$E_{nl} = -\frac{RZ^{*2}}{n^2}hc = -\frac{R(Z-\sigma_{nl})^2}{n^2}hc \qquad (3.10)$$

denklemindeki gibi verilir.

Alkali metal atomların hepsinin iç elektron alt katında (Z-1) sayıda elektron vardır. Bu elektronların hepsi çekirdeği perdelerse, başka bir deyişle dış elektron

atomun kalan kısmına nüfuz etmezse, perdeleme fonksiyonu, σ_{nl}= Z-1 olur. Bu terim denklem 3.10' da yerine yazılırsa,

$$E_{nl} = -\frac{R}{n^2}hc \qquad (3.11)$$

denklemi elde edilir. Bu durumda küresel simetrik alan yaklaşımında dış elektron atomun kalan kısmına nüfuz etmezse alkali metal atomların enerji seviyeleri hidrojenin enerji seviyesi gibi olmalıdır. Ancak böyle olmaz. Çünkü alkali metal atomlarda bulunan dış elektron atomun kalan kısmının küreselliğini bozar ve küresel simetri yaklaşımı geçerliliğini yitirir. Bu durumda alkali metal atomların enerji seviyeleri hidrojen atomundan farklı olur. Hidrojen atomundan farklı olarak alkali metal atomların enerji seviyeleri yörüngesel kuantum sayısına da bağlıdır.

Dış elektron atomun kalan kısmına nüfuz ederse, iç elektronlar çekirdeği tamamen perdelemediği için alkali metal atomların enerji seviyeleri hidrojenin enerji seviyelerinden daha fazla farklı olur.

Alkali atomların kararlı hallerinin enerji seviyesi

$$E_{nl} = -\frac{RZ^{*2}}{n^{*2}}hc = -\frac{RZ^2}{(n+\Delta)^2}hc \qquad (3.12)$$

şeklinde verilir (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

Burada $\Delta = n^* - n$ terimi kuantum kusuru olarak adlandırılır ve alkali metal atomların spektral serilerinin, hidrojenin spektral terimlerinden farklılığını ortaya koyar. Dış elektron atomun kalan kısmına ne kadar çok nüfuz ederse, kuantum kusuru o kadar büyük olur.

Dış elektron, atomun kalan kısmı tarafından yalnız çekirdeğin çekim durumuna göre daha kuvvetli olarak çekilir. Buna göre asal kuantum sayısının verilen bir değerinde alkali metal atomlarının enerji seviyeleri bir elektronlu atom ve iyonların enerji seviyesinden küçük olacaktır. Buna göre denklem 3.12'den $n^* < n$ ve $\Delta < 0$ olduğu, yani kuantum kusur değerinin daima negatif olduğu görülür.

Dış elektron atomun kalan kısmına nüfuz etmediği halde, kuantum kusuru atomun kalan kısmının kutuplanması ile bağlantılıdır. Bu durumda kuantum kusuru,

$$\Delta = \frac{3\beta Z^{*2}\left[1 - l(l+1)/3n^2\right]}{4a_0{}^3(l-1/2)(l+1/2)(l+1)(l+3/2)} \tag{3.13}$$

şeklinde verilir. Burada Z* çekirdeğin etkin yükü, β atomun kalan kısmının kutuplanma derecesidir. a_0 ise birinci Bohr yarıçapıdır. İfadeden görüldüğü üzere kuantum kusuru yörüngesel kuantum sayısına kuvvetli, asal kuantum sayısına ise zayıf olarak bağlıdır.

Ancak 3.13 ifadesi s-elektronları için geçerli değildir. Bunun nedeni s-elektronları çekirdeğe daha çok yaklaşır ve atomun kalan kısmına daima nüfuz eder. Böylece p-elektronları, d-elektronlarına göre, d-elektronları da f-elektronlarına göre atomun kalan kısmına daha çok yaklaşırlar. Bundan dolayı yörüngesel kuantum sayısı büyüdükçe kuantum kusuru mutlak değerce azalır. Bu durumda S terimleri için kuantum kusuru daha büyük olur. Kuantum kusuru yörüngesel kuantum sayısına bağlı olduğundan n ve *l*' nin verilen değerlerinde enerji,

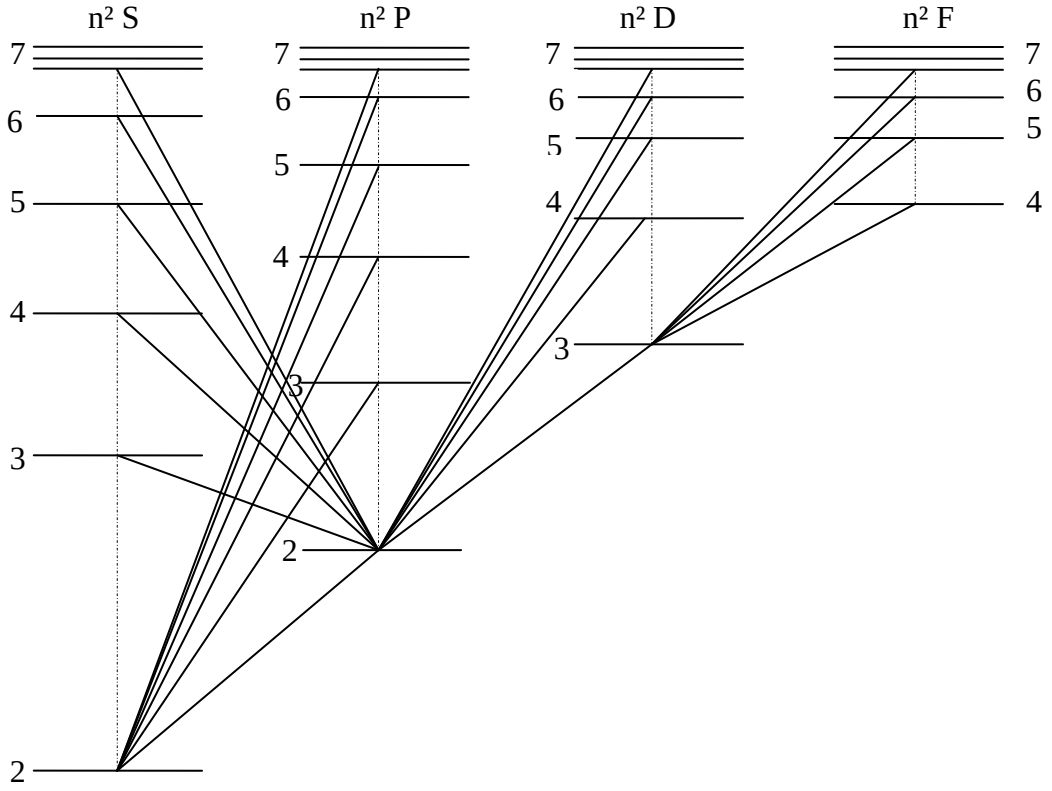
$$E_{nl} = -\frac{RZ^2}{(n+\Delta_{nl})^2}hc \tag{3.14}$$

şeklinde yazılmalıdır. Kuantum kusuru yörüngesel kuantum sayısına kuvvetli, asal kuantum sayısına ise zayıf olarak bağlıdır. Kuantum kusuru asal ve yörüngesel kuantum sayılarına bağlı olduğundan enerji değerleri (n) ve (*l*)' ye bağlılık göstermelidir. Yani alkali metal atomların enerji seviyeleri hidrojen atomunun enerji seviyelerinden farklı olur. Bunun nedeni yukarıda da belirtildiği gibi dış elektron atomun kalan kısmının küreselliğini bozar ve küresel simetri yaklaşımı geçerliliğini kaybeder. Hidrojen atomundan farklı olarak alkali metal atomların enerji seviyeleri son yörüngedeki tek elektrondan dolayı yörüngesel kuantum sayısına da bağlıdır. Bu duruma göre alkali metal atomları için asal kuantum sayısının verilen bir değerinde çeşitli yörüngesel kuantum sayılarına karşılık gelen enerji seviyeleri üst üste gelmez. Dış elektron atomun kalan kısmına nüfuz ederse iç elektronlar çekirdeği tamamen perdelemediği için alkali metal atomların enerji seviyeleri hidrojenden daha fazla farklı olur. Dış elektron atomun kalan kısmına ne kadar çok nüfuz ederse kuantum kusur o kadar fazla olur. Çizelge 3.1'de bazı alkali metal atomlarına ait kuantum kusurları verilmiştir (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

Çizelge 3.1. Bazı alkali metallerin kuantum kusur tablosu

	Kuantum Kusurları			
	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
Li I	0 , 412	0 , 041	0 , 002	0 , 000
Na I	1 , 373	0 , 883	0 , 100	0 , 001
K I	2 , 230	1 , 776	0 , 146	0 , 007

Çizelge 3.1'den de görüleceği gibi kuantum kusuru yörüngesel kuantum sayısına bağlıdır. Bunun yanında atomdaki elektronların sayısı arttıkça, enerji seviyelerinin hidrojenin enerji seviyelerinden farklı olması nedeniyle kuantum kusuru artar. Şekil 3.1'de Lityum atomunun enerji diyagramı görülmektedir.



Şekil 3.1. Lityum atomunun enerji seviyeleri

Şekil 3.1'de görüldüğü gibi asal kuantum sayısı n=2'ye karşılık gelen 2S ve 2P terimleri birbirine göre oldukça kaymıştır. Asal kuantum sayısı n=3'e karşılık gelen 3S ve 3P terimleri arasındaki kayma 2S ve 2P terimlerinin kaymasından daha azdır. 3D

terimi 3P terimine göre çok küçük bir miktar kaymıştır. Genel olarak baş kuantum sayısı arttıkça P terimlerinin S terimlerine göre kayma miktarı azalır; n'nin çok büyük değerlerinde ise kayma kaybolur. S terimlerinin çok kaymasının nedeni s-elektronları atomun kalan kısmına daha çok yaklaşırlar, hatta ona nüfuz ederler. Asal kuantum sayısı arttıkça elektron çekirdekten daha uzakta bulunur ve atomun kalan kısmına yaklaşamaz. Bu nedenle dış elektron atomun kalan kısmını bozamaz ve spektral terimler hidrojen terimlerine yaklaşır. Şekil 3.1'de Lityum atomunun spektral serileri görülmektedir. Bu terimleri incelersek:

1) Asal seri : n ^{2}P ⟶ 2 ^{2}S; n=2, 3, 4,… geçişine karşılık gelir. Bu serinin spektral serileri hem salma olayında hem de soğurma olayında kullanılır. Asal seri çizgilerinin soğurmada da bulunması bu serinin başlangıç seviyesi ve Lityum'un temel seviyesi olan 2S seviyesine bağlıdır ve düşük sıcaklıklarda atomların çoğu bu halde bulunur. Asal çizginin birinci çizgisi (2 ^{2}P ⟶ 2 ^{2}S) rezonans çizgisi olup, lityum spektrumundaki en şiddetli çizgidir.

2) Keskin seri : n ^{2}S ⟶ 2 ^{2}P; n=3, 4, 5,… geçişine karşılık gelir. Bu serinin spektral çizgileri yalnız emisyonda bulunur. Bu serinin yukarı seviyesi *nS* seviyeleridir. S seviyeleri keskin olduğundan bu serinin spektral çizgileri de keskin olur. Bu nedenle keskin çizgi olarak adlandırılır.

3) Yaygın seri : n ^{2}D ⟶ 2 ^{2}P ; n=3, 4, 5,… geçişine karşılık gelir. Bu seri de yalnız emisyonda bulunur. Yaygın serinin hem yukarı hem de aşağı seviyeleri yayılmış olduğundan, spektral çizgileri de yayılmış olur.

4) Temel seri: n ^{2}F ⟶ 3 ^{2}D; n=4, 5, 6,… geçişine karşılık gelir. Bu seri yalnız emisyonda olur. Doğal olarak bu serinin çizgileri de yayılmış olacaktır.

Alkali metal atomlarının dış alt elektron katında yalnız bir elektron vardır. Bu elektronun yörüngesel ve spin momentlerinin karşılıklı etkileşimi sonucunda hidrojen atomunda olduğu gibi S terimlerinden başka her bir terim iki terime parçalanır. Sonuçta spektral çizgiler iki veya daha fazla bileşene ayrılır; başka bir deyişle ince yapıya sahip olurlar.

Bir elektronlu atom ve iyonlar için spin-yörüngesel karşılıklı etkileşme, spektral terimlerin yarılmasına sebep olur. Bu durumda çekirdeğin etkin yükü, Z*= Z - σ_{nl} yazılarak, iki komşu j+1 ve j enerji seviyelerinin farkı,

$$\Delta E = E_{n(j+1)} - E_{nj} = \frac{R\alpha^2 Z^{*4}\, hc}{n^3 (j+1/2)(j+3/2)} \tag{3.15}$$

ile ifade edilir. Burada j= l - 1/2 ve j+1= l + 1/2 olduğundan,

$$\Delta E = \frac{R\alpha^2 Z^{*4}}{n^3} \frac{hc}{l(l+1)} \tag{3.16}$$

olur. 3.16 denklemi ise aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\Delta E = \zeta_{nl}(l+1/2) \tag{3.17}$$

3.17 denklemindeki ζ_{nl} terimi dublet parçalanma faktörüdür ve 3.18 denklemindeki gibi ifade edilir.

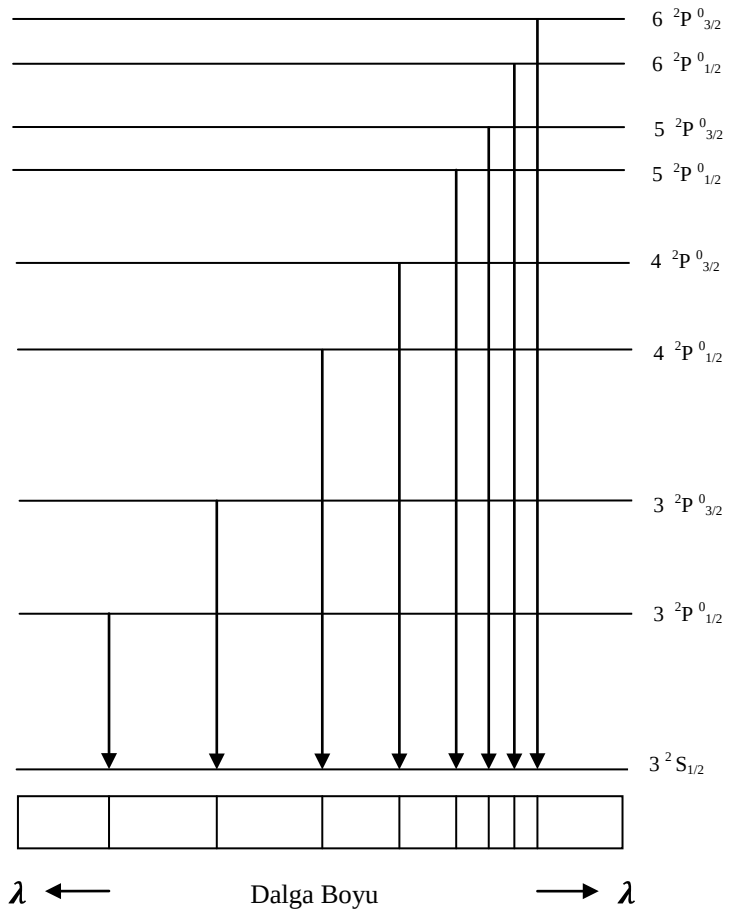
$$\zeta_{nl} = \frac{R\alpha^2 Z^{*4}}{n^3} \frac{hc}{l(l+1)(l+1/2} \tag{3.18}$$

3.15 denklemindeki enerji seviyelerinin parçalanması ve 3.18 denklemindeki dublet parçalanma faktörünün birimleri cm^{-1} birimindedir. 3.16 denkleminden de görüldüğü gibi spektral terimlerin dublet parçalanması asal ve yörüngesel kuantum sayılarının artması ile azalır.

Örneğin Na I için alkali metal atomlarının asal, keskin, yaygın ve temel serileri için enerji seviyelerinin dublet yapısı ve spektral serilerin ince yapıları aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

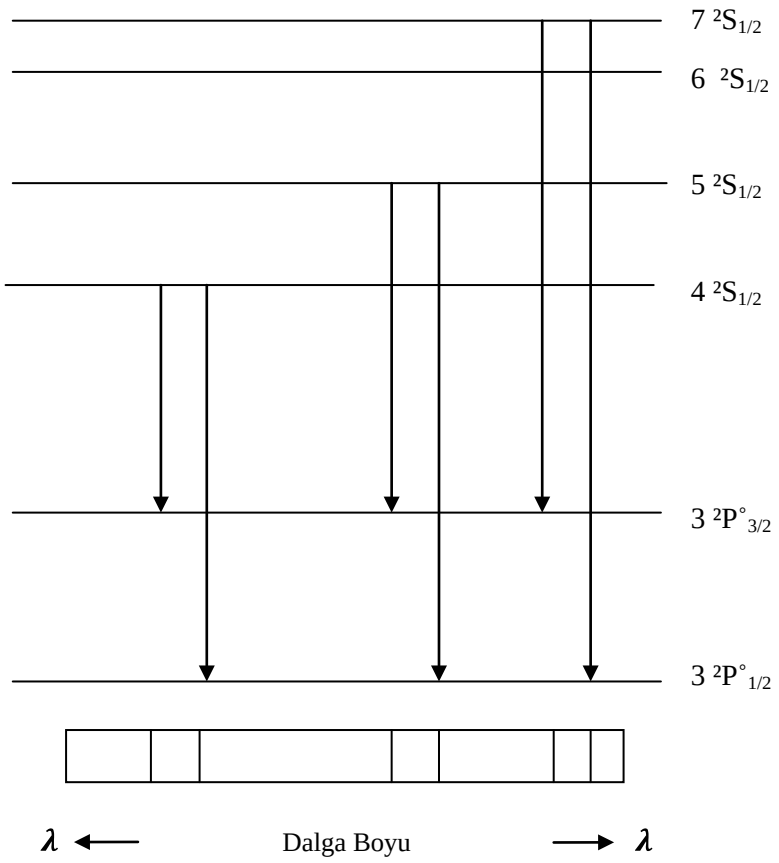
1) Asal Seri: n $^2P^o \longrightarrow$ 3 ^2S n=3, 4, 5,… geçişinde meydana gelir. Bu serinin bütün çizgileri için aynı olan aşağı 3 ^2S terimi spin-yörüngesel karşılıklı etkileşme sonucu olarak parçalanmaz; yukarı terimlerin her biri ise iki seviyeye parçalanır. Asal kuantum sayısı büyüdükçe parçalanmanın değeri azalır. Böylece spin yörüngesel karşılıklı etkileşim sonucunda asal serinin her bir spektral çizgisi iki bileşene parçalanır, yani spektral dubletler meydana gelir. Örneğin Na I için asal seri çizgilerinin ince yapı

serileri çizelgesi şekil 3.2'deki gibi verilmiştir. Çizelgeden görüldüğü gibi kısa dalga boyu bölgesine doğru gidildikçe, dubletlerin çizgileri arasındaki mesafe azalır ve n'nin çok büyük değerlerinde dubletin çizgileri üst üste düşer.



Şekil 3.2. Na atomu asal çizgilerinin ince yapısı

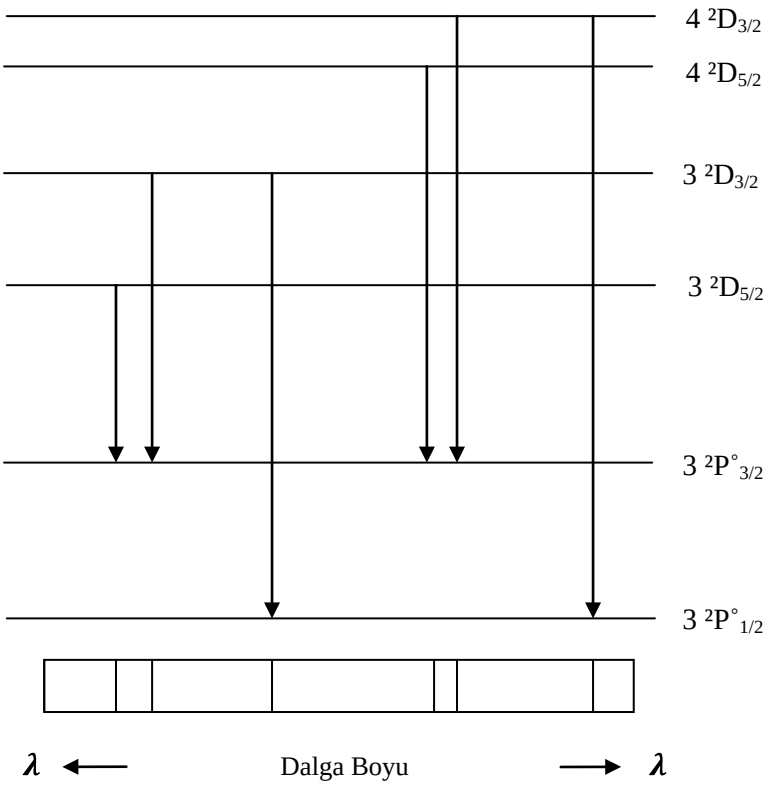
2) Keskin seri: n ²S ⟶ 3 ²Pº; n=4, 5, 6, … geçişine karşılık gelir. Bu seri için yukarı S terimleri parçalanmaz; bütün çizgiler için aynı olan 3 ²Pº terimi, 3 $^2P^o_{1/2}$ ve 3 $^2P^o_{3/2}$ alt seviyelerine parçalanır. Buna göre keskin serinin bütün çizgileri iki bileşene ayrılır. Bu serinin spektral terimlerinin dublet yapısı tüm çizgiler için aynı olan aşağı 3 ²Pº teriminin dublet yapısına bağlı olduğundan, spektrum boyunca dubletlerin çizgileri arasındaki mesafe, yani dubletin genişliği değişmez. Aşağıdaki şekilde Na I için keskin seri çizgilerinin ince yapısı verilmiştir. Şekil 3.3'ten görüldüğü gibi, yukarı terimlerin asal kuantum sayısı baş kuantum sayısına bağlı olmaksızın, dubletlerin genişliği daima aynı kalır. Spektrumun kısa dalga boylu bölgesine doğru, komşu dubletler arası mesafe azalır



Şekil 3.3. Na atomu keskin çizgilerinin ince yapısı

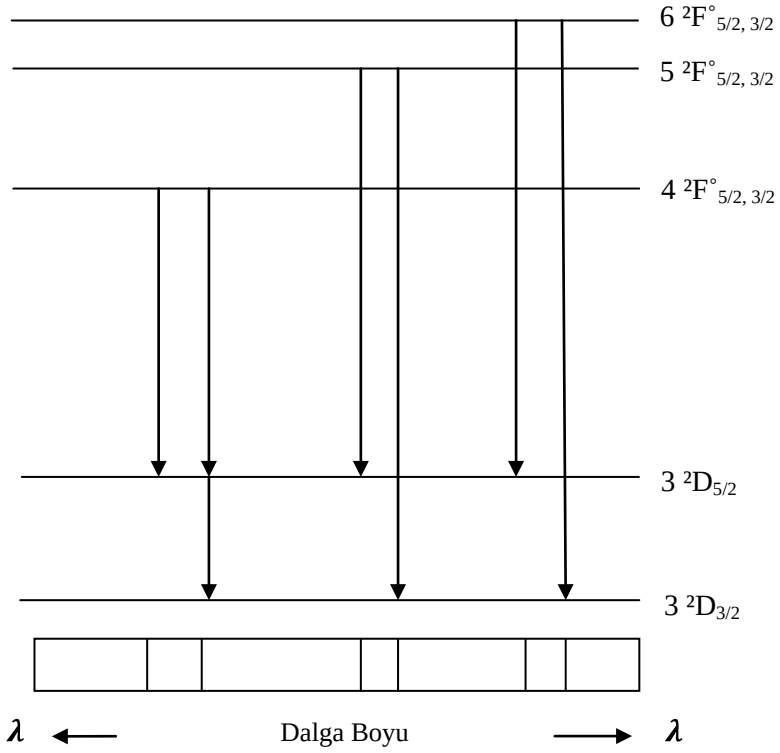
3) Yaygın seri: n ^{2}D ⟶ 3 ^{2}P^o; n=3, 4, 5, … geçişlerine karşılık gelir. Spin-yörüngesel etkileşme sonucunda n ^{2}D terimlerinin her biri n $^2D_{3/2}$ ve n $^2D_{5/2}$ seviyelerine parçalanmaktadır. 3 ^{2}P^o terimi ise 3 $^2P^\circ_{1/2}$ ve 3 $^2P^\circ_{3/2}$ parçalanmaktadır. Fakat $\Delta j = 0, \pm 1$ seçim kuralına göre spin yörüngesel karşılıklı etkileşme sonucunda yaygın serinin her bir çizgisinin üç bileşene parçalandığı gösterilebilir.

Genel olarak alkali metal atomları için n $^2D_{3/2}$ seviyeleri n $^2D_{5/2}$ seviyelerinden aşağıda (n ^2D_j terimlerinin enerji seviyelerinin doğru dizilişi) yerleşir. Fakat K I ve Na I için n $^2D_{3/2}$ seviyeleri n $^2D_{5/2}$ seviyelerinden yukarıda yerleşir. Bu nedenle şekil 3.4'te n $^2D_{3/2}$ seviyeleri n $^2D_{5/2}$ seviyelerinden yukarıda gösterilmiştir.



Şekil 3. 4. Na atomu yaygın seri çizgilerinin ince yapısı

4)Temel seri: n $^2F^o$ ⟶ 3 ^2D; n=4, 5, 6,… geçişlerine karşılık gelir. Spin yörüngesel karşılıklı etkileşme sonucunda n $^2F^o$ terimlerinden her biri n $^2F^o_{5/2}$ ve n $^2F^o_{7/2}$ seviyelerine, n $^2D_{3/2}$ ve n $^2D_{5/2}$ seviyelerine parçalanır. Yaygın seride olduğu gibi her bir spektral çizgi üç bileşene ayrılır. Ancak Na I için n $^2F^o_{5/2}$ ve n $^2F^o_{7/2}$ seviyeleri pratik olarak birbirinin üzerine düştüğünden her bir çizgi iki bileşene ayrılmış olur. Temel seri için enerji seviyelerinin parçalanması ve spektral çizgilerin ince yapısı şekil 3.5' te gösterilmiştir (Kulizade ve Tektunalı, 1995).



Şekil 3. 5. Na atomu temel seri çizgilerinin ince yapısı

3.3. Işıma Teorisi

Klasik elektrodinamik kanunlarına göre ivmeli hareket eden serbest elektrik yük sistemi, sürekli olarak enerji yayınlar. Buna göre sistemin birim zamanda bütün yönlere yayınladığı enerji,

$$\varepsilon_f = \frac{2}{3c^2}\left|\frac{d^2\vec{D}}{dt^2}\right| + \frac{2}{3c^3}\left|\frac{d^2\vec{\mu}}{dt^2}\right|^2 + \frac{}{180c^5}\left|\frac{d^3Q_{\alpha\beta}}{dt^3}\right|^2 \qquad (3.19)$$

denklemi ile verilir. Burada (D) sistemin elektrik dipol momenti, $\vec{\mu}$ manyetik momenti ve $Q_{\alpha\beta}$ sistemin kuadrapol momenti tensörüdür. Buna göre sistemin yayınladığı enerji birbirinden bağımsız üç terimden ibarettir. Birinci terim elektrik dipol yayınlamayı gösterir. İkinci ve üçüncü terimler sırasıyla manyetik dipol ve elektrik kuadrapol yayınlamaları tanımlamaktadır (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

3.3.1. Dipol yayınlaması

Dipol yayınlaması sistemin elektrik dipol momentinin zamana göre değişimi ile ilgilidir. Kütlesi elektronun kütlesine göre çok büyük olan pozitif çekirdeği durgun kabul edersek ve negatif yüklü elektronları ise çekirdek etrafında kapalı yörüngelerde hareket ettiğini düşünürsek, bu sisteme doğrusal harmonik osilatör gibi bakılabilir. Bu durumda osilatörün birim zamanda yayınladığı enerji 3.19 denkleminden,

$$\varepsilon_f = \frac{2}{3c^2}\left|\frac{d^2D}{dt^2}\right|^2 \tag{3.20}$$

şeklinde verilir. Bir proton ve bir elektrondan oluşan sistemin elektrik dipol momenti, $\vec{D} = e\vec{r}$ şeklinde ifade edilir. Burada **r**, elektronla çekirdek arasındaki mesafedir. $\vec{D} = e\vec{r}$ ifadesini 3.20 denkleminde yerine yazarsak,

$$\varepsilon_f(D) = \frac{2e}{3c^2}\left|\frac{d^2r}{dt^2}\right|^2 \tag{3.21}$$

denklemi elde edilir. Burada $\frac{d^2r}{dt^2}$ ifadesi elektronun ivmesidir. Elektronun lineer harmonik salınımının $\boldsymbol{r}$ = a cos ωt ile ifade edildiğini düşünelim. Bu durumda elektrik dipol momenti D = e.a cos ωt şeklini alır. (e.a) terimine D_0 dersek D = D_0 cos ωt şeklinde yazılabilir. Burada D_0 elektrik dipol momentinin en büyük değeridir. D= D_0 cos ωt değerini 3.20 denkleminde yerine yazarsak,

$$\varepsilon_f(D) = \frac{2}{3c^3}\omega^4\left|D_0\right|^2\cos^2\omega t \tag{3.22}$$

denklemi elde edilir.

Osilatör sürekli radyasyon yayınladığından salınımı zamanla söner. Bu durumda osilatörün çeşitli anlarda yayınladığı enerji farklı olacağından, ortalama enerji alınmalıdır. Bu durumda 3.22 denklemindeki $< cos^2\,\omega t >$ terimin ortalama değeri alınmalıdır. $< cos^2\,\omega t >= 1/2$ olduğu dikkate alınırsa, osilatörün yayınladığı ortalama enerji,

$$\varepsilon_f(D) = \frac{1}{3c^3}\omega^4 \left|D_0\right|^2 \tag{3.23}$$

denklemi ile verilir. 3.23 denklemindeki ω teriminin değerinin $\omega=2\pi f$ olduğu dikkate alınırsa ve ω değeri 3.23 denkleminde yerine yazılırsa,

$$\varepsilon_f(D) = \frac{16\pi^4 f^4}{3c^3}\left|D_0\right|^2 \tag{3.24}$$

3.24 denklemi elde edilir. Kuantum mekaniğinde klasik dipol momentinin genliği D_0'a karşılık gelen ayrık k-i geçişinin dipol momenti D_{ki} kullanılır. $D_0 = 2\ D_{ki}$ yazılabilinir. Bu durumda birim zamanda k-i geçişine karşılık gelen f_{ki} frekansında bir osilatörün ortalama yayınlama enerjisi,

$$\varepsilon_f(D_{ki}) = \frac{64\pi^4}{3c^3} f^4 \left|D_{ki}\right|^2 \tag{3.25}$$

3.25 denklemi ile verilir. $D_0 = e.a$ terimini 3.24 denkleminde yerine koyarsak,

$$\varepsilon_f(D) = \frac{16\pi^4 e^2}{3c^3} a^2 f^4 \tag{3.26}$$

denklemi elde edilir. f frekansında enerji yayınlayan osilatörlerin sayısı N_y ise, dipol yayınlaması için birim hacmin yayınlama gücü,

$$\varepsilon_f(D) = \frac{16\pi^4 e^2}{3c^3} a^2 f^4 N_y \tag{3.27}$$

ile verilir. Osilatörlerin salınımı zamanla sönümlü olduğundan enerji yayınlaması yalnız belli bir monokromatik (f) frekansında değil, belirli frekanslar aralığında olur. 3.24 denklemini f frekanslı fotonların ortalama enerjisine bölersek, birim zamanda yayınlanan fotonların sayısını buluruz. Bu durumda birim zamanda yayınlanan foton sayısı,

$$\frac{\varepsilon_f(D)}{hf} = \frac{16\pi^4}{3hc^3} f^3 \left|D_0\right|^2 \tag{3.28}$$

denklemi ile verilir (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

3.3.2. Manyetik dipol yayınlaması

Manyetik dipol yayınlaması sistemin manyetik dipol momentinin zamana göre değişimi ile ilgilidir. Manyetik dipol momenti,

$$\varepsilon_f(\mu) = \frac{2}{3c^3}\left|\frac{d^2\vec{\mu}}{dt^2}\right|^2 \tag{3.29}$$

denklemi ile verilir. Burada ($\vec{\mu}$) sistemin manyetik dipol momentidir. Bu momenti D = e.a cos ωt terimine benzer şekilde, $\vec{\mu} = \vec{\mu}_0$ cos ωt şeklinde yazabiliriz. Burada $\vec{\mu}_0$ manyetik dipol momentinin en büyük değeridir. Birim zamandaki osilatörün ortalama manyetik dipol yayınlaması için,

$$\varepsilon_f(\mu) = \frac{16\pi^4}{3c^3} f^4 \left|\vec{\mu}\right|^2 \tag{3.30}$$

denklemi elde edilir. Bu durumda birim zamanda manyetik dipol yayınlaması nedeniyle yayınlanan fotonları sayısı,

$$\frac{\varepsilon_f(\mu)}{hf} = \frac{16\pi^4}{3hc^3} f^3 \left|\overrightarrow{\mu_0}\right|^3 \tag{3.31}$$

şeklinde olur. *k* - *i* geçişi için manyetik dipol yayınlama enerjisi,

$$\varepsilon_f(\mu_{ki}) = \frac{64\pi^4}{3c^3} f_{ki}^4 \left|\overrightarrow{\mu_{ki}}\right|^2 \tag{3.32}$$

denklemi ile verilir. Burada ($\overrightarrow{\mu_{ki}}$) k - i geçişine karşılık gelen manyetik dipol momentidir (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

3.3.3. Elektrik kuadropol yayınlaması

İki aynı fakat zıt yönlü dipol bir kuadropol meydana getirir. Elektrik yükünün kuadropolun uzunluğunun karesi ile çarpımına, sistemin kuadropol momenti denir. Elektrik kuadropol yayınlaması sistemin kuadropol momentinin zamana göre değişiminden meydana gelir.

Birim zamanda *k-i* geçişine karşılık gelen ortalama kuadropol yayınlama enerjisi,

$$\varepsilon_f(Q) = \frac{1}{180c^5}\left(\frac{d^3Q_{\alpha\beta}}{dt^3}\right)^2 \tag{3.33}$$

denklemindeki gibi verilir. Burada $Q_{\alpha\beta}$ kuadropol momenti tensörüdür.

Birim zamanda k ⟶ i geçişine karşılık gelen ortalama kuadropol yayınlama enerjisi,

$$\varepsilon_f(Q_{ki}) = \frac{32\pi^6}{45c^5} f_{ki}^6 \left|Q_{ki}\right|^2 \tag{3.34}$$

denklemi ile verilir. Burada (Q_{ki}), k ⟶ i geçişine karşılık gelen kuadropol momentidir.

k⟶ i geçişine karşılık gelen kuadropol yayınlaması için yayınlanan fotonların sayısı,

$$\frac{\varepsilon_f(Q_{ki})}{hf_{ki}} = \frac{32\pi^6}{45hc^5} f_{ki}^5 \left|Q_{ki}\right|^2 \tag{3.35}$$

denklemi ile verilir (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

3.3.4. Elektrik dipol, manyetik dipol, elektrik kuadropol geçiş olasılıklarının karşılaştırılması

k-i kendiliğinden dipol ve kendiliğinden manyetik dipol geçişlerinin olasılıklarının oranı 3.36 denklemi ile verilir.

$$\frac{A_{ki}(D)}{A_{ki}(\mu)} \approx 10^{6} \tag{3.36}$$

Bu orana göre kendiliğinden dipol yayınlamasının olasılığı, kendiliğinden manyetik dipol yayınlanması olasılığından milyon kere büyüktür. Buna göre çoğu durumda manyetik dipol yayınlanması dikkate alınmayabilir. Ayrık k-i geçişi için kendiliğinden dipol ve kendiliğinden kuadropol geçişlerinin olasılıklarının oranları,

$$\frac{A_{ki}(D)}{A_{ki}(Q)} \approx 10^{7} \tag{3.37}$$

$$\frac{A_{ki}(\mu)}{A_{ki}(Q)} \approx 10 \tag{3.38}$$

şeklinde verilir. Buna göre kendiliğinden elektrik kuadropol yayınlaması olasılığı, kendiliğinden manyetik yayınlamasının olasılığından on defa, kendiliğinden dipol yayınlamasının olasılığından ise on milyon defa küçüktür (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

3.4. Geçiş Olasılıkları ve Osilatör Şiddetleri

Bir atomun temel ya da uyarılmış seviyedeki atomik enerji değeri bilinirse, atoma ait birçok fiziksel ve kimyasal özellik hesaplanabilir. Astrofizik, plazma fiziği, termonükleer fisyon araştırmaları, laserlerle izotop ayırma ve laser sistemlerinin geliştirilmesi gibi konular atomik spektroskopide oldukça yoğun çalışılan ilgi alanlarını oluşturmaktadır. Temel atomik verilerin kullanıldığı bu alanlarda atomların geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve yaşam süreleri gibi fiziksel özelliklerin doğru olarak belirlenmesi oldukça önemlidir. Ayrıca bu özellikler oldukça duyarlı olarak hesaplanabildiği için kullanılan teorik sürecin doğruluğunu da göstermektedir. Geçiş olasılıkları atomik spektroskopide en önemli parametrelerden biridir.

Çok elektronlu sistemlerde uyarılmış ve yüksek uyarılmış seviyelerin geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve yaşam süreleri gibi fiziksel parametrelerin hassas olarak belirlenmesi atomik spektroskopide yoğun çalışılan konular arasındadır.

Geçiş olasılıkları kendiliğinden emisyon durumlarında, plazma fiziğinde, lazer araştırmalarında ve aynı zamanda astrofizikte önemli rol oynar. Birçok kinetik

süreçlerde güvenilir verilere ihtiyaç duyulmaktadır. Geçişlerin sınıflandırılmasında ve asıl olarak enerji seviyelerinin belirlenmesinde, laboratuar çalışmalarında önemlidir (Hamdi ve Nessib, 2005). Osilatör şiddetleri ve radyoaktif yaşam süreleri, Rydberg serileri fizik biliminde astrofizik, uzay fiziği, füsyon reaksiyonları, lazer izotoplarının ayrılması gibi pek çok alanda kullanılmaktadır (Wiese, 1978).

Ancak son yıllarda yapılan çalışmalar itibariyle alkali atomların osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam süreleri hakkında çalışmalar artmıştır ve farklı yöntemlerle hesaplanmaya başlanmıştır. Geçiş olasılığı hesaplamalarında literatürde yaygın olarak kullanılan yöntemlerden bazıları, Single Konfigürasyonel Hartree-Fock Yöntemi (SCHF), Konfigürasyon Etkileşmesi Yöntemi (CI), R-Matrix yöntemi, Kuantum Kusur Orbital Yöntemi, Multikonfigürasyonel Hartree-Fock Yöntemi (MCHF), Multikonfigürasyonel Dirac-Fock Yöntemi (MCDF), En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori (WBEPMT) şeklinde sıralanabilinir.

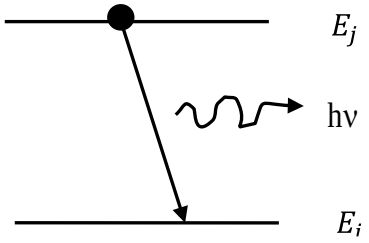
3.4.1. Geçişler ve Einstein katsayıları

1916 yılında Einstein, tesadüfî olayların istatistik bağlı olmaması prensibine göre yayınlama ve soğurmanın geçiş olasılıkları teorisini vermiştir. Bu teoriye göre atomun radyasyon soğurması ve yayınlaması ani olaylar olup, birbirine bağlı olmayarak meydana gelir. Atomun radyasyon soğurması ve yayınlaması olaylarının esas karakteristiği, onlara karşılık gelen geçişlerin olasılığıdır (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

Herhangi iki j ve i ayrık enerji seviyeleri arasındaki geçişler esnasında belirli bir monokromatik foton enerjisi yayınlanır veya soğurulur. Eğer j seviyesinin enerjisi i seviyesinin enerjisinden büyükse $E_j > E_i$ ise, j$\rightarrow$ i geçişinde hf_{ji} foton enerjisi soğurulur. Einstein'e göre j seviyesinden i seviyesine kendiliğinden ve mecburi olmak üzere iki tür geçiş mümkündür. Ayrıca bu iki geçiş dışında bir üçüncü geçiş olarak soğurma geçişlerinden bahsetmek mümkündür.

3.4.2. Kendiliğinden geçişler

Kendiliğinden geçişler ve onlara karşılık gelen kendiliğinden yayınlamalar dış etkilere bağlı olmadan atom sistemlerinin iç kanunlarına uygun olarak meydana gelir. Bu geçişler tesadüfî olaylar olduğundan verilen bir hacim elemanındaki çeşitli atomlar çeşitli anlarda ve birbirlerine bağlı olmayarak enerji yayınlarlar.



Şekil 3. 6. Kendiliğinden geçiş

Bunun dışında kendiliğinden yayınlama istenilen yönde aynı olasılıkla kendini gösterir. Böylece kendiliğinden yayınlama monokromatik olmayan, yönlendirilmemiş ve polarize olmamış yayınlama olarak ifade edilebilir.

Birim hacimde N sayıda aynı tür atom olduğunu varsayalım. Bu atomlar çeşitli kuantum hallerine göre (uyarılmış enerji seviyelerine göre) dağılmıştır. Birim zamanda, birim hacimde j→i kendiliğinden geçişlerin sayısı üst j seviyesinde birim hacimdeki atomların sayısı N_j ile orantılı olacaktır. Yani,

$$Z_{ji}^{ken} = A_{ji} N_j \tag{3.39}$$

ifadesi yazılabilir. Burada orantı katsayısı A_{ji}, $j \to i$ kendiliğinden geçişin Einstein katsayısı olarak adlandırılır. Yukarıdaki formülden kendiliğinden geçiş olasılığı,

$$A_{ji} = \frac{Z_{ji}^{ken}}{N_k} \tag{3.40}$$

biçiminde olur. Denklem 3.40'tan görüldüğü gibi j→i kendiliğinden geçiş olasılığı, birim zamanda, birim hacimde uyarılmış halde olan E_k enerjili bir atoma karşılık gelen, kendiliğinden yayınlanan f_{ki} frekanslı fotonların sayısıdır. Kendiliğinden geçişlerin Einstein katsayısının birimi zaman biriminin tersi olacaktır (Kulizade ve Tektunalı, 1995).

3.4.3. Mecburi (uyarılmış) geçişler

Elektromanyetik dalgaların madde ile karşılıklı etkileşmesi sonucunda da atomlar enerji yayınlayarak üst seviyelerden alt seviyelere geçebilirler. Bu mecburi geçişlerde yayınlanan fotonların ve bu yayınlamaya neden olan fotonların frekansı, fazı,

yayılma yönü ve polarizasyonu tamamıyla aynıdır. Buna göre mecburi yayınlama; monokromatik, koherent, yönlenmiş ve polarize olmuştur. Bu nedenle mecburi yayınlamada uyarılmış geçişlere neden olan bir dış elektromanyetik radyasyonun şiddeti artar. Yani radyasyon yayınlayan atomların enerjisi, dış elektromanyetik radyasyona verilir. Uyarılmış yayınlamanın bu özelliği, elektromanyetik dalgaların şiddetlendirilmesinde kullanılır. Doğal olarak; birim hacimde, birim zamanda j→i uyarılmış geçişlerinin sayısı, j seviyesindeki atomların sayısı N_j ve dış radyasyon alanının hacim yoğunluğu ρ_{ji} ile orantılı olacaktır.

$$Z_{ji}^{uy} = B_{ji} N_{ji} \rho_{ji} \tag{3.41}$$

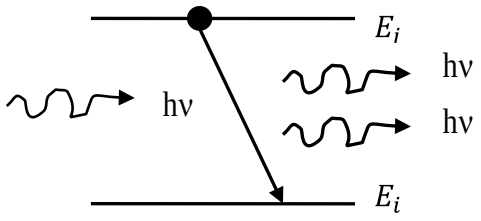
Burada Denklem 3.41'den görüldüğü gibi B_{ji}, $j \to i$ uyarılmış geçişinin Einstein katsayısı, $B_{ji}\rho_{ji}$ ise uyarılmış geçişin olasılığıdır. $j \to i$ uyarılmış geçişinin Einstein katsayısı ve olasılığı için,

$$B_{ji} = \frac{1}{\rho_{ji}} \frac{Z_{ji}^{uy}}{N_j} \tag{3.42}$$

$$B_{ji}\rho_{ji} = \frac{Z_{ji}^{uy}}{N_j} \tag{3.43}$$

ifadeleri yazılabilir.

Böylece $j \to i$ uyarılmış geçişinin Einstein katsayısı birim hacimde, birim zamanda j uyarılmış haldeki bir atoma ve dış radyasyon alanının bu geçişe karşılık gelen f_{ji} frekansında bir radyasyon yoğunluğuna karşılık gelen uyarılmış geçişlerin sayısıdır. O halde $j \to i$ uyarılmış geçişinin olasılığının birim hacimde, birim zamanda j uyarılmış haldeki bir atoma karşılık gelen uyarılmış geçişlerin sayısı olduğu açıktır (Kulizade ve Tektunalı, 1995).



Şekil 3.7. Mecburi geçişler

3.4.4. Soğurma geçişleri

Atomlar üzerlerine düşen ışık fotonlarını soğurarak alt seviyelerden üst seviyelere geçebilirler. Soğurma geçişlerinin sayısı dış radyasyon alanının spektral yoğunluğuna bağlıdır. Bu nedenle soğurma uyarılmış bir durumdur. Dış radyasyon alanı olmazsa soğurma geçişleri meydana gelmez. Birim hacimde, birim zamanda $i \rightarrow j$ geçişinde soğurulan fotonların sayısı, i seviyesindeki atomların sayısı N_i ve dış radyasyon alanının spektral yoğunluğu ρ_{ji} ile orantılı olacaktır. Buna göre,

$$Z_{ij}^{soğ} = B_{ij} N_i \rho_{ij} \tag{3.44}$$

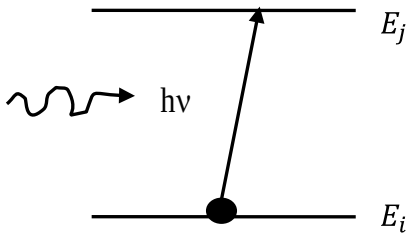
$$B_{ij} = \frac{1}{\rho_{ij}} \frac{Z_{ij}^{soğ}}{N_i} \tag{3.45}$$

soğurma için Einstein katsayısı,

$$B_{ij}\rho_{ij} = \frac{Z_{ij}^{soğ}}{N_i} \tag{3.46}$$

ifadesi ise i ⟶ j soğurma geçişinin olasılığıdır. Görüldüğü gibi i ⟶ j soğurma geçişi için Einstein katsayısı, birim hacimde, birim zamanda i uyarılmış halinde olan bir atoma ve f_{ji} frekansında birim radyasyon yoğunluğuna karşılık gelen soğurma geçişlerinin sayısıdır. Aynı i ⟶ j geçişin olasılığı ise birim zamanda, birim hacimde i uyarılmış halinde olan bir atoma karşılık gelen i ⟶ j geçişlerinin sayısıdır. Soğurulmanın tersi kendiliğinden yayınlama değil, mecburi yayınlamadır. Soğurma ve mecburi yayınlama dış radyasyon alanının yoğunluğuna bağlıdır; fakat kendiliğinden yayınlama dış radyasyon alanının yoğunluğuna bağlı değildir. Soğurmada her bir elemanter durum

(her bir i → j geçişinde) dış radyasyon alanında f_{ji} frekanslı fotonların sayısı bir eksilir. Uyarılmış yayınlamada ise (j → i geçişinde) bir artar (Kulizade ve Tektunalı, 1995).



Şekil 3. 8. Soğurma geçişleri

3.5. Elektrik Dipol Geçiş Olasılığı

γjm kuantum sayılarıyla tanımlı bir enerji seviyesi ileγ'j'm' kuantum sayılarıyla tanımlı farklı bir seviye arasındaki elektrik dipol geçiş olasılığı,

$$A_{JJ'} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^{\,2} \sigma^3}{3h} S \sum_q \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 \tag{3.47}$$

şeklinde verilir. Burada S niceliği elektrik dipol çizgi şiddeti olarak bilinir ve genel anlamda,

$$S\gamma\left|\left\langle J \quad P \right|\right|^{(1)}\left|\left| J' \quad ' \right\rangle\right|^2 \tag{3.48}$$

şeklinde ifade edilir (Shortley, 1935). Eğer göz önüne alınan sistemde γ' J' M' durumundan γ J seviyesinin tüm M durumlarına toplam geçiş olasılığı ile ilgileniliyorsa geçiş olasılığı ifadesi,

$$A = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^{\,2} \sigma^3}{3h} S \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^{\,2} \sigma^3}{3h(2J'+1)} S \tag{3.49}$$

olarak yazılır.

Bilinen fiziksel sabitlerin uygun birimlerde değerleri kullanılarak geçiş olasılığı ifadesini,

$$A_{JJ'} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^{\,2} \sigma^3}{(2J'+1)\,3h} S = 2,0261.10^{-6} \; {}^{3} \; {}^{-1} \qquad (3.50)$$

şeklinde yalın bir şekilde söz konusu iki seviye arasındaki enerji farkına ve S, elektrik dipol çizgi şiddetine bağlı olarak yazabiliriz. Geçiş olasılığı hesaplamalarında yapılması gereken ilk iş çizgi şiddetinin doğru olarak belirlenmesidir. Çizgi şiddetleri göz önüne alınan atomik sisteme, geçerli olan çiftlenim şekline ve elektronların enerji seviyeleri arasındaki geçiş tipine göre belirlenir (Cowan, 1981). Bilindiği gibi hafif atomlarda LS çiftlenimi, ağır atomlarda ise JJ çiftlenimi baskındır. Peryodik sistemdeki bir çok element bu çiftlenimlerden farklı olarak ara çiftlenimlerle tanımlanabilmektedir. Her çiftlenimde çizgi şiddeti ifadesi farklı ifade edilir.

3.5.1. Tek elektron geçişleri

LS çiftleniminin baskın olduğu bir sistemde iki uyarılmış seviye arasındaki tek bir elektron geçişi için çizgi şiddeti ifadesi,

$$\begin{aligned}
\sqrt{S_{LS}} &\equiv \left\langle \left[(...\alpha_1 L_1, l_2) L (...S_1 s_2) S \right] J \left\| \mathbf{r}_N^{(1)} \right\| \left[(...\alpha_1' L_1', l_2') L' (...S_1' s_2) S' \right] J' \right\rangle \\
&= \delta_{S_1 S_1'} \delta_{ss'} (-1)^{L+S+J'+1} [j, j']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \left\langle (...\alpha_1 L_1, l_2) L \left\| \mathbf{r}_N^{(1)} \right\| (...\alpha_1' L_1', l_2') L' \right\rangle \qquad (3.51) \\
&= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_1' L_1' S_1'} \delta_{ss'} (-1)^{S+J'+L_1+l_2'} [J, J', L, L']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l_2' \end{Bmatrix} P^{(1)}_{l_2 l_2'}
\end{aligned}$$

olarak verilir (Cowan, 1981).

Temel seviyeden uyarılmış seviyelere olan geçişler için ise çizgi şiddeti ifadesi,

$$\begin{aligned}
\sqrt{S_{LS}} &\equiv \left\langle \alpha_1 L_1, S_1, J \left\| r^{(1)} \right\| \alpha_1' L_1', S_1', l_2) L' S' J' \right\rangle \\
&= \delta_{S_1 S'} (-1)^{L_1'+l_2+S_1+J'} \left(n.[L_1, L', J, J'] \right)^{1/2} \qquad (3.52) \\
&\times \begin{Bmatrix} L_1 & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & L_1' & L_1 \\ L' & 1 & l_2 \end{Bmatrix} (l_1^n \alpha_1 L_1 S_1 \left\| l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1' \right) P^{(1)}_{l_2 l_2}
\end{aligned}$$

şeklinde verilir. Her iki ifade de açısal katsayılara ve radyal geçiş integrallerine bağlı olarak ifade edilmektedir. $P^{(1)}_{l_1,l_2}$ ifadesi, radyal geçiş integrali ya da geçiş matris elemanı olarak adlandırılır ve aşağıdaki denklem gibi ifade edilir.

$$\begin{aligned} P^{(1)}_{nl,n'l'} &\equiv \left\langle nl \left\| r^{(1)} \right\| n'l' \right\rangle = \left\langle l \left\| C^{(1)} \right\| l' \right\rangle \int_0^\infty P_{nl}(r)\, r\, P_{n'l'}(r)\, dr \\ &= (-1)^l \left[l, l' \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty P_{nl}(r)\, r\, P_{n'l'}(r)\, dr \end{aligned} \tag{3.53}$$

Burada l+1+l' toplamı çift sayı olmadıkça ve üç açı bağıntısını sağlamadıkça 3-j sembolü sıfır olur. Yani $l = l \pm 1$ olmadıkça $P^{(1)}_{ll'} = 0$ olur. 3-j sembolü basitleştirilerek,

$$P^{(1)}_{nl,n'l'} \equiv \delta_{l',l\pm1} (-1)^{l+l_>} (l_>)^{1/2} \int_0^\infty P_{nl}(r)\, r\, P_{n'l'}(r)\, dr = (-1)^{l-l'} P^{(1)}_{l'l} = -P^{(1)}_{l'l} \tag{3.54}$$

biçiminde elde edilir. Burada $l_>$, l ve l' 'nün en büyük değerli olanını göstermektedir. $l'=l \pm 1$ ifadesi $|ls\rangle$ ve $|l'sj'\rangle$ seviyelerinin zıt pariteye sahip olduklarını gösterir. Bu sonuç elektrik dipol geçişlerinin bir parite değişimi içerdiği genel sonucuyla tutarlıdır. Çok elektronlu atomlarda sıfır olmayan, $D_{\beta\beta}$, matris elemanları elektronun sadece nl ve n'l' farklı kuantum sayılı konfigürasyonlara ait iki baz fonksiyonundan kaynaklanır. Matris elemanı daima $P^{(1)}_{ll'}$ çarpanını içerir. l ve l' ise daima $l'= l \pm 1$ şartını sağlamalıdır.

Geçiş matris elemanının radyal kısmı radyal integrallere bağlı olarak,

$$\int_0^\infty P_{nl}\ r\, P_{n'l'}\, dr\ = (-1)^{l+l_>} (l_>)^{1/2}\ P^{(1)}_{ll'} \tag{3.55}$$

şeklinde ya da Condon ve Shortley'in indirgenmiş matris elemanı şeklinde,

$$\sigma\ \equiv \left\langle l \left\| r \right\| l' \right\rangle = \left(4l_>{}^2 - 1\right)^{-1/2} \int_0^\infty P_{nl}\ r\, P_{n'l'}\, dr\ = (-1)^{l+l_>} \left[l_> (4l_>{}^2 - 1) \right]^{-1/2} P^{(1)}_{ll'} \tag{3.56}$$

denklemindeki gibi verilir (Çelik, 2005; Tekeli, 2008).

3.6. Radyal İntegralleri Hesaplama Yöntemleri

3.6.1. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori atomik yapı hesaplamalarında kullanılan yarı deneysel bir yöntemdir. Bu yöntem ilk olarak Çinli kimyacı Zheng tarafından ortaya atılmıştır (Zheng, 1986; Zheng ve ark., 2001-a-c). Atomik ya da moleküler yapılardaki elektron yerleşimleri uyarılma ve iyonlaşma enerjileriyle ilgili birçok fiziksel özellik hakkında doğru bilgiler vermektedir. Hem uyarma hem de iyonlaşma sürecinde en az enerjiyle uyarılacak ya da iyonlaşacak elektron, sisteme en zayıf bağlı olan elektrondur ve bu süreç içerisinde önemli rol oynamaktadır. Atomik ve moleküler sistemlerde birçok fiziksel ve kimyasal özellik sistemdeki en zayıf bağlı elektronla ilgilidir ve bu sistemlerdeki elektron geçişlerine karşılık gelen uyarılma ve iyonlaşma gibi bazı atomik ya da iyonik özellikler en zayıf bağlı elektronun davranışına göre belirlenebilmektedir. Bu teori, çok elektronlu bir sistemde bulunan tüm elektronları sisteme en zayıf bağlı bir elektron ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar olarak ayırma temeline dayanır. Böylelikle seçilen sistemde en zayıf bağlı elektronun durumu tek elektron problemine benzetilmektedir (Zheng, 1988, Zheng ve ark., 1991, 1994, 2003). Böyle bir düşünceye örnek olarak $1s^2 2s^2 2p^3$ elektronik konfigürasyonuna sahip Azot atomu verilebilir. Bu konfigürasyondaki üç adet p elektronu özdeştir ve bunları birbirinden ayırt etmek mümkün değildir. Böyle bir sistemde uyarma ya da iyonlaşma işleminde ilk önce bu p elektronları uyarılacak ya da iyonlaşacaktır. Bu sebepten dolayı ilk uyarılmış ya da iyonize olmuş elektron nötr Azot atomunun en zayıf bağlı elektronu olacaktır. $1s^2 2s^2 2p^2$ ns konfigürasyonunda ns durumundaki elektronu en zayıf bağlı elektron olarak tanımlanırken diğer $1s^2 2s^2 2p^2$ elektronları en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak göz önüne alınmaktadır. Bu teoride en zayıf bağlı olan elektronun çekirdek ve en zayıf bağlı olmayan diğer elektronların oluşturduğu ortalama merkezsel bir potansiyelde hareket ettiği kabul edilir. Böylelikle çok elektrona sahip sistemler tek elektronlu sistemmiş gibi göz önüne alınabilmektedir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride sadece sisteme en zayıf bağlı elektronla ilgilenildiğinden sistemdeki diğer elektronlarla ilgili karmaşık hesaplamalardan kaçınılmaktadır. Çok elektronlu bir sistemin tek elektron problemine benzetilmesi atomik özelliklerin düzenliliklerinin araştırılmasında bazı kolaylıklar sağlamaktadır. Ayrıca bir atomun toplam dalga fonksiyonu, toplam enerjisi ve atomik enerji seviyeleri

arasındaki geçişler gibi birçok spektroskopik özellik sisteme en zayıf bağlı elektronun davranışı içersinde ele alınabilmektedir. Böylelikle karmaşık çok elektron problemi basit analitik tek elektron problemine indirgenebilmektedir (Çelik, 2005; Tekeli, 2008; Ateş, 2010).

En zayıf bağlı elektron çekirdek ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar tarafından oluşturulan bir potansiyel alanda hareket eder. Bu potansiyel alan iki kısma ayrılabilir. İlk potansiyel Coulomb potansiyeli ikincisi ise elektrik dipol potansiyelidir. En zayıf bağlı elektron atomik çekirdeği kutupladığından dolayı bir elektrik dipol moment oluşur. Oluşan bu elektrik dipol moment en zayıf bağlı elektronun davranışını etkiler ve elektrik dipol moment tarafından sistem için oluşturulan potansiyel fonksiyonu,

$$+\frac{\beta}{r_i^{\,2}} \tag{3.57}$$

şeklinde tanımlanabilir. Bu durumda toplam potansiyel,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{\beta}{r_i^{\,2}} \tag{3.58}$$

şeklinde verilir. Buradaki β parametresi,

$$\beta = \frac{\left[d(d+1) + 2dl\right]}{2} \tag{3.59}$$

olarak tanımlanır (Zheng, 2000). Bu toplam potansiyel kullanılarak en zayıf bağlı elektronun Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{-Z^*}{r_i} + \frac{d(d+1) + 2dl}{2r_i^{\,2}} \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \tag{3.60}$$

olarak yazılabilir. Burada ilk terim en zayıf bağlı elektronun kinetik enerjisini, ikinci terim Coulomb potansiyelini ve 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* ve d bilinmeyen parametrelerdir (Zheng, 2000).

Buradaki d niceliği, etkin baş kuantum sayısının ve etkin yörünge açısal momentum kuantum sayısının belirlenmesinde gerekli olan bir parametredir. En zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonu genel olarak,

$$\psi_i(r_i,\theta_i,\varphi_i) = R_{n^* l^*}(r_i) Y_{l,m}(\theta_i,\varphi_i) \tag{3.61}$$

biçiminde yazılır. Radyal denklemin çözümünde $\frac{l(l+1)}{2r^2}$ merkezcil potansiyelinin yerine, $\frac{l^*(l^*+1)}{2r^2}$ ifadesi yazılmaktadır. Hidrojen atomu problemine benzer olarak en zayıf bağlı elektron için tek elektron Schrödinger denkleminin çözümü,

$$\psi = C \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*}\right) r^{l^*} L^{2l^*+1}_{n^*-l^*-1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right) Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{3.62}$$

şeklinde ifade edilir. Burada C normalizasyon katsayısı olup,

$$C = \left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n^*-l^*-1)!}\Gamma(n^*-l^*+1)\right]^{-1/2} \tag{3.63}$$

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

$$l^* = l + d \tag{3.64}$$

$$n^* = n + d \tag{3.65}$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \tag{3.66}$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Denk. 3.66 ile tanımlanan ε, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisi olup, Z*; etkin çekirdek yükünü ifade etmektedir. n* ise en zayıf

bağlı elektronun kutuplanma etkisini hesaba katan etkin baş kuantum sayısını göstermektedir (Çelik, 2005; Tekeli, 2008).

Radyal fonksiyon için,

$$\int_0^{\infty} \left|R(r)\right|^2 r^2 \, dr = 1 \tag{3.67}$$

normalizasyon şartı kullanılarak ve (3.68) ifadesinde verilen iki Laguerre polinomunun integral formülü kullanılarak,

$$\int_0^{\infty} t^{\lambda} e^{-t} L_m^{\mu}(t) L_{m'}^{\mu'}(t) dt = (-1)^{m+m'} \Gamma(\lambda+1) \times \sum_k \binom{\lambda-\mu}{m-k} \binom{\lambda-\mu'}{m'-k} \binom{\lambda+k}{k} \tag{3.68}$$

herhangi farklı (n_i, l_i) seviyesinden, (n_f, l_f) seviyesine geçiş için radyal geçiş integrali,

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

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

$$\left[\frac{n_i^{*4}\,\Gamma(n_i^*+l_i^*+1)}{4Z_i^{*3}\,(n_i-l_i-1)!}\right]^{-1/2} \times \sum_{m_1=0}^{n_f-l_f-1} \sum_{m_2=0}^{n_i-l_i-1} \frac{(-1)^{m_2}}{m_1!\,m_2!} \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{m_1+m_2} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} + \frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{-m_1-m_2} x \tag{3.69}$$

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

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

olarak verilir (Zheng ve ark., 2002; Çelik, 2005; Tekeli, 2008). İfadedeki k niceliği elektrik dipol geçişler için bir alınır. Burada $S = \{n_f^* - l_f^* - 1 - m_1, n_i^* - l_i^* - 1 - m_2\}$

dir ve $k > -l_f^* - l_i^* - 3$ şartını sağlamaktadır. Elde edilen bu ifadede k=1 yazılarak göz önüne alınan en zayıf bağlı elektronun yarıçapının beklenen değeri,

$$\langle \mathrm{r} \rangle = \frac{3\mathrm{n}^{*2} - l^*(l^*+1)}{2\mathrm{Z}^*} \tag{3.70}$$

olarak elde edilir. En zayıf bağlı elektronun ε enerjisinin negatifi, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisine eşittir. Yani,

$$\mathrm{I} = -\varepsilon = \frac{\mathrm{Z}^{*2}}{2\mathrm{n}^{*2}} \tag{3.71}$$

olarak tanımlanır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak spektroskopik parametrelerin hesaplanmasında Z*, n* ve *l** parametrelerini belirlemek gerekir. Bu parametrelerin direk teoriden elde edilmesi zordur (Zheng ve ark.,1999). Bu parametrelerin belirlenmesinde seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri bilinen teorik yöntemlerle hesaplanabilir. Gerekli enerji değerleri yerine ise literatürdeki deneysel enerji verileri kullanılabilir. Yarıçaplar ve enerjiler elde edildikten sonra yukarıdaki iki denklem birlikte çözülerek ilk önce Z* ve d parametreleri daha sonra da n* ve l* parametreleri belirlenebilinir (Çelik, 2005; Tekeli, 2008).

3.6.2. Kuantum kusur orbital teori

Dış alanların yokluğunda hidrojenik problem analitik olarak çözülebilmektedir. Böyle bir sistemde elektronun enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları tam olarak bilinir ve atomla ilgili tüm bilgilere ulaşılabilir. Bir elektrondan daha fazla elektron içeren sistemlere ancak belirli yaklaşımlar yapılabilir. Böyle problemlerin çözümünde hidrojenik durumlar bir yol gösterici olarak kullanılmaktadır. Atomik özelliklerin hesaplanmasında bilinen enerji-seviye verilerinin kullanılmasına dayanan yarı deneysel yöntemlerden faydalanılmaktadır. Yarı deneysel yöntemlerde geçiş integralleri etkin kuantum sayıları n* 'ların bir fonksiyonu olarak ifade edilebilmektedir (Çelik 2005).

Kuantum kusuru $\delta(l)$, söz konusu elektrona diğer elektronların etkisini gösteren bir terimdir. Aynı zamanda Z elektronlu bir sistemdeki Z-1 elektronu ve Z çekirdek yükünün hidrojenik değerlerden uzaklaşan enerji özdeğerlerinin kaymasıyla oluşturulan

etkin yükü şekillendirmektedir. Hidrojen veya hidrojenik sistemler için enerji seviyeleri Rydberg birimlerinde,

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \tag{3.72}$$

şeklinde verilir. Çok elektronlu bir atom için, hidrojenik E_n değerlerinden *nl* seviye serisinin ayrılması, temel olarak *nl* elektronu tarafından kor nüfuzu veya *nl* elektronu 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,

$$E_{nl} = -\frac{Z_c^{\,2}}{(n-\delta_l)^2} = -\frac{Z_c^{\,2}}{n^{*2}} \tag{3.73}$$

şeklinde ifade edilebilir. İfadedeki Z_c, korun yüküdür ve $n^* = n - \delta$, etkin baş kuantum sayısıdır (Ateş, 2010).

Kuantum kusur teorileri, ilk kez Bates-Damgaard ve Ham tarafından öne sürülmüştür (Bates ve Damgaard, 1949; Ham, 1955). Daha sonra bu teori bir çok araştırmacı tarafından geliştirilerek atomik yapı hesaplamalarında kullanılmıştır. 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 tarafından geliştirilen Coulomb yaklaşımıdır (CA). QDO yöntemi Coulomb yaklaşımından sadece birkaç noktada 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; Ateş, 2010).

Kuantum kusur orbital teoride, elektronun öz fonksiyonlar perdeleme etkilerine bağlı olarak analitik bir şekilde ifade edilebilir. Daha sonra farklı seviyelere karşılık gelen geçiş integralleri analitik olarak hesaplanabilmektedir (Lavin ve ark., 1992). Bu yöntem, geçiş integralleri için analitik ifadeler ve radyal orbitaller için tam çözümler üretebilir. Merkezcil alan yaklaşımında Schrödinger denklemi,

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\mu}{dr^2}+\left[\frac{l(l+1)}{2r^2}+V(r)\right]\mu=E\mu \tag{3.74}$$

olarak verilir (Martin ve Simons, 1976). Tek elektron Schrödinger denkleminin analitik çözümü temeline dayanan QDO metodunda, yaklaşık merkezcil alan elektron perdeleme potansiyeli

$$V(r)=\frac{\lambda(\lambda+1)-l(l+1)}{2r^2}-\frac{Z_{net}}{r} \tag{3.75}$$

şeklinde yazılır (Ateş, 2010). Burada Z_{net}, uzak radyal mesafelerde elektron tarafından görülen etkin çekirdek yüküdür (Martin ve Simons, 1975). İfadedeki λ parametresi, model potansiyelin perdeleme kısmını göstermekte olup hem etkin potansiyelde hem de kuantum kusur orbitallerde göz önüne alınmaktadır. Bu parametre, *l* açısal momentum kuantum sayısına ve kuantum kusura bağlı olarak,

$$\lambda=l-\delta+c \tag{3.76}$$

ifadesinden belirlenebilir. Burada c, radyal orbitallerin normalize edilebilirliğini sağlamak için seçilen bir tamsayıdır (Martin ve Simons, 1975; Barrientos ve Martin, 1989; Lavin ve ark., 1992; Ateş, 2010).

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

$$E=-Z_{net}^2/2(n-\delta)^2 \tag{3.77}$$

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

$$\mu(r)=\left[\frac{Z_{net}\Gamma(n-\delta+\lambda+1)}{\Gamma(n-\delta+\lambda)}\right]^{1/2}\left[\frac{(2Z_{net}r/(n-\delta))^{\lambda+1}}{(n-\delta)\Gamma(2\lambda+2)}\right]\times e^{-Z_{net}r/(n-\delta)}\,{}_1F_1\left[\delta,\ 2\lambda+2,\ 2Z_{net}r/(n-\delta)\right] \tag{3.78}$$

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

$$R_{ij} = \int \psi_i(r)\, r\, \psi_j(r)\, dr^2 \tag{3.79}$$

ile verilen R_{ij} radyal geçiş integrallerine göre ifade edilebilir.

$$n^* = \delta n - \tag{3.80}$$

gösterimi kullanılarak radyal geçiş integrali,

$$R_{ij} = \frac{(2)^{\lambda_i+\lambda_j+2}\,(n_i^*)^{\lambda_j+2}\,(n_j^*)^{\lambda_i+2}}{Z_{net}\,(n_i^*+n_j^*)^{\lambda_i+\lambda_j+4}} \left[\frac{\Gamma\left(n_j^*+\lambda_j+1\right)\Gamma\left(n_i^*+\lambda_i+1\right)}{\left(n_i^*-\lambda_i-1\right)!\left(n_j^*-\lambda_j-1\right)!} \right]^{1/2}$$
$$\times \sum_{k_i=0}^{n_i^*-\lambda_i-1} \sum_{k_j=0}^{n_j^*-\lambda_j-1} \left[\frac{\left\langle \lambda_i - n_i^* + 1 \right\rangle_{k_i} \left\langle \lambda_j - n_j^* + 1 \right\rangle_{k_j} \Gamma(\lambda_i+\lambda_j+4+k_i+k_j)}{\Gamma(2\lambda_i+2+k_i)\,\Gamma(2\lambda_j+2+k_j)\,\Gamma(k_i+1)\,\Gamma(k_j+1)} \times \frac{n_i^{*k_j}\, n_j^{*k_i}}{\left[(n_i^*+n_j^*)/2\right]^{k_i+k_j}} \right] \tag{3.81}$$

ifadesi ile verilebilir. Burada $< x >_n$ ve $\Gamma(x)$, sırasıyla Pochhammer ve Gama fonksiyonlarıdır. (Simons, 1974; Martin ve Simons, 1975; Martin ve Simons, 1976; Ateş, 2010).

QDO teoride, osilatör şiddetlerinin hesaplanmasında gerekli olan radyal geçiş integralinin hesaplanabilmesi için öncelikle denklem (3.76) ile verilen λ parametresinin belirlenmesi gerekir. Bu parametreyi belirlemek için de kuantum kusur değerine ihtiyaç vardır. Göz önüne alınan elektronik seviye için kuantum kusur, deneysel enerjiler kullanılarak elde edilebilmektedir.

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

4.1. Alkali Sistemlerde Hesaplamalar

4.1.1. Lityum atomunda hesaplamalar

Üç elektrona sahip lityum atomunda elektrik dipol geçişler için geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) ve kuantum kusur orbital teori kullanılarak hesaplanmıştır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride geçiş olasılıklarının hesaplanması için gereken parametrelerin belirlenmesinde enerji ifadeleri için literatürdeki deneysel enerji verileri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri için sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) (Lindgrad ve Neilsen 1977) relativistik olmayan Hartree-Fock (NRHF) yöntemleri (Gaigalas ve Fischer, 1996) kullanılmıştır. Bu parametreler kullanılarak elde edilen elektrik dipol geçiş olasılıkları Çizelge 4.1'de verilmiştir. Çizelgede WBEPMT için verilen sütunda NRHF yöntemiyle belirlenen parametreler kullanılarak hesaplanan geçiş olasılığı değerleri yıldız üst indisi ile belirtilmiştir. Diğer sonuçlar ise NCA dalga fonksiyonları ile belirlenen parametreler kullanılarak hesaplanan geçiş olasılığı değerlerini göstermektedir. Kuantum kusur orbital teoriyle yapılan hesaplamalarda geçiş olasılıklarının hesaplanması için gerekli olan parametreler literatürdeki deneysel enerjiler kullanılarak belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar Çizelge 4.2' de verilmiştir. Hesaplamalarda hem multiplet hem de ince yapı seviyeleri arasındaki geçişler göz önüne alınmıştır. Lityum atomu için elde edilen geçiş olasılığı sonuçları her iki çizelgede de NIST'deki (Ralchenko ve ark., 2010) kritik değerlerle karşılaştırılmıştır.

Çizelge 4.1 Lityum atomunda en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanan geçiş olasılıkları ($x10^8$ *Hz*)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	WBEPMT	
1s²2s	***1s²2p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	3.67E-01	3.72E-01
				2	2	3.80E-01	3.72E-01 A'
				2	4	3.80E-01	3.72E-01 A'
1s²2s	***1s²3p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	5.98E-03	1.17E-02
				2	2	1.17E-02	1.17E-02 B'
				2	4	1.17E-02	1.17E-02 B'
1s²2s	***1s²4p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	8.48E-03	1.42E-02
				2	2	1.31E-02	1.42E-02 B'
				2	4	1.31E-02	1.42E-02 B'
1s²2s	***1s²6p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	4.02E-03*	6.97E-03
				2	2	5.60E-03	6.97E-03 B'
				2	4	5.60E-03	6.97E-03 B'
1s²2s	***1s²7p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	2.70E-03*	4.84E-03
				2	2	3.72E-03	4.84E-03 B'
				2	4	3.72E-03	4.84E-03 B'
1s²2s	***1s²8p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.84E-03	3.55E-03
				2	2	2.62E-03	3.55E-03 B'
				2	4	2.62E-03	3.55E-03 B'
1s²2s	***1s²9p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.35E-03*	2.68E-03
				2	2	1.83E-03	2.68E-03 B'
				2	4	1.83E-03	2.68E-03 B'
1s²2s	***1s²11p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	9.65E-04	1.65E-03
				2	2	1.32E-03	1.65E-03 B'
				2	4	1.32E-03	1.65E-03 B'
1s²2p	***1s²3s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	3.37E-01	3.49E-01
				2	2	1.12E-01	1.16E-01 B+'
				4	2	2.25E-01	2.33E-01 B+'
1s²2p	***1s²4s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	1.02E-01	1.01E-01
				2	2	3.41E-02	3.37E-02 B'
				4	2	6.82E-02	6.73E-02 B'
1s²2p	***1s²5s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	4.63E-02	4.60E-02
				2	2	1.54E-02	1.53E-02 B'
				4	2	3.09E-02	3.07E-02 B'
1s²2p	***1s²6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	2.50E-02	2.50E-02
				2	2	8.35E-03	8.33E-03 B'
				4	2	1.67E-02	1.67E-02 B'
1s²2p	***1s²3d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	7.05E-01*	7.16E-01
				2	4	5.88E-01*	5.97E-01 B+'
				4	4	1.18E-01*	1.19E-01 B+'
				4	6	7.05E-01*	7.16E-01 B+'
1s²2p	***1s²4d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	2.36E-01	2.30E-01
				2	4	1.97E-01	1.92E-01 B'

Çizelge 4.1 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	WBEPMT	
1s²2p	***1s²4d***	***²P***	***²D***	4	4	3.93E-02	3.83E-02 B'
				4	6	2.36E-01	2.30E-01 B'
1s²3s	***1s²3p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	3.78E-02*	3.77E-02
				2	2	3.78E-02*	3.77E-02 B+'
				2	4	3.78E-02*	3.77E-02 B+'
1s²3p	***1s²4s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	7.46E-02	7.46E-02
				2	2	2.49E-02	2.49E-02 B'
				4	2	4.98E-02	4.97E-02 B'
1s²3p	***1s²5s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	2.79E-02	2.76E-02
				2	2	9.29E-03	9.20E-03 B'
				4	2	1.86E-02	1.84E-02 B'
1s²3p	***1s²6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	1.43E-02	1.44E-02
				2	2	4.78E-03	4.80E-03 B'
				4	2	9.72E-03*	9.60E-03 B'
1s²3p	***1s²3d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	3.80E-05*	3.81E-05
				2	4	3.18E-05	3.18E-05 B'
				4	4	6.36E-06	6.35E-06 B'
				4	6	3.80E-05*	3.81E-05 B'
1s²3p	***1s²4d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	6.76E-02	6.85E-02
				2	4	5.64E-02	5.71E-02 B'
				4	4	1.13E-02	1.14E-02 B'
				4	6	6.76E-02	6.85E-02 B'
1s²3p	***1s²5d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	3.49E-02	3.41E-02
				2	4	2.91E-02	2.84E-02 B'
				4	4	5.82E-03	5.68E-03 B'
				4	6	3.49E-02	3.41E-02 B'
1s²3p	***1s²6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.99E-02	1.94E-02
				2	4	1.66E-02	1.62E-02 B'
				4	4	3.31E-03	3.23E-03 B'
				4	6	1.99E-02	1.94E-02 B'
1s²3d	***1s²4p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	5.50E-03	5.52E-03
				4	2	5.50E-03	5.52E-03 B'
				4	4	5.50E-04	5.52E-04 B'
				6	4	4.95E-03	4.97E-03 B'
1s²3d	***1s²5p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	2.29E-03	2.31E-03
				4	2	2.29E-03	2.31E-03 B'
				4	4	2.29E-04	2.31E-04 B'
				6	4	2.06E-03	2.08E-03 B'
1s²3d	***1s²4f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	1.38E-01	1.38E-01
				4	6	1.29E-01	1.29E-01 B'
				6	6	9.23E-03	9.20E-03 B'
				6	8	1.38E-01	1.38E-01 B'

Çizelge 4.1 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	WBEPMT	
1s²3d	***1s²5f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	4.64E-02	4.63E-02
				4	6	4.33E-02	4.32E-02 B'
				6	6	3.09E-03	3.09E-03 B'
				6	8	4.64E-02	4.63E-02 B'
1s²4s	***1s²4p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	7.73E-03	7.72E-03
				2	2	7.73E-03	7.72E-03 B'
				2	4	7.73E-03	7.72E-03 B'
1s²4p	***1s²5s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	2.25E-02	2.25E-02
				2	2	7.50E-03	7.50E-03 B'
				4	2	1.50E-02	1.50E-02 B'
1s²4p	***1s²6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	9.48E-03	9.22E-03
				2	2	3.16E-03	3.07E-03 B'
				4	2	6.32E-03	6.15E-03 B'
1s²4p	***1s²4d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.29E-05	1.28E-05
				2	4	1.07E-05	1.07E-05 B'
				4	4	2.14E-06*	2.13E-06 B'
				4	6	1.29E-05	1.28E-05 B'
1s²4p	***1s²5d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.35E-02	1.36E-02
				2	4	1.12E-02	1.13E-02 B'
				4	4	2.24E-03	2.27E-03 B'
				4	6	1.35E-02	1.36E-02 B'
1s²4p	***1s²6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	8.36E-03	8.19E-03
				2	4	6.97E-03	6.82E-03 B'
				4	4	1.39E-03	1.36E-03 B'
				4	6	8.36E-03	8.19E-03 B'
1s²4d	***1s²5p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	2.83E-03	2.86E-03
				4	2	2.83E-03	2.86E-03 B'
				4	4	2.83E-04	2.86E-04 B'
				6	4	2.55E-03	2.57E-03 B'
1s²4d	***1s²6p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	1.38E-03	1.39E-03
				4	2	1.38E-03	1.39E-03 B'
				4	4	1.38E-04	1.39E-04 B'
				6	4	1.24E-03	1.25E-03 B'
1s²4d	***1s²4f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	6.91E-10*	6.90E-10
				4	6	6.48E-10*	6.44E-10 B'
				6	6	4.60E-11	4.60E-11 B'
				6	8	6.90E-10	6.90E-10 B'
1s²4d	***1s²5f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	2.58E-02	2.58E-02
				4	6	2.40E-02	2.41E-02 B'
				6	6	1.72E-03	1.72E-03 B'
				6	8	2.58E-02	2.58E-02 B'

Çizelge 4.1 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İstatiksel Ağırlık i	İstatiksel Ağırlık s	Bu Çalışma WBEPMT	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)
1s²4f	***1s²5d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	5.18E-04	5.23E-04
				6	4	5.18E-04	5.23E-04 B'
				6	6	2.47E-05	2.49E-05 B'
				8	6	4.94E-04	4.98E-04 B'
1s²4f	***1s²6d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	2.20E-04	2.50E-04
				6	4	2.20E-04	2.50E-04 B'
				6	6	1.05E-05	1.19E-05 B'
				8	6	2.10E-04	2.38E-04 B'
1s²5s	***1s²5p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	2.34E-03	2.33E-03
				2	2	2.34E-03	2.33E-03 B'
				2	4	2.34E-03	2.33E-03 B'
1s²5p	***1s²6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	8.48E-03	8.48E-03
				2	2	2.83E-03	2.83E-03 B'
				4	2	5.65E-03	5.65E-03 B'
1s²5p	***1s²5d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	4.82E-06*	4.78E-06
				2	4	4.01E-06*	3.98E-06 B'
				4	4	8.02E-07*	7.97E-07 B'
				4	6	4.82E-06*	4.78E-06 B'
1s²5p	***1s²6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	3.92E-03	3.98E-03
				2	4	3.27E-03	3.32E-03 B'
				4	4	6.54E-04	6.63E-04 B'
				4	6	3.92E-03	3.98E-03 B'
1s²5d	***1s²6p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	1.40E-03	1.42E-03
				4	2	1.40E-03	1.42E-03 B'
				4	4	1.40E-04	1.42E-04 B'
				6	4	1.26E-03	1.28E-03 B'
1s²5d	***1s²5f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	6.88E-09	6.96E-09
				4	6	6.44E-09	6.50E-09 B'
				6	6	4.58E-10	4.64E-10 B'
				6	8	6.88E-09	6.96E-09 B'
1s²5f	***1s²6d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	4.15E-04	4.19E-04
				6	4	4.16E-04	4.19E-04 B'
				6	6	1.98E-05	2.00E-05 B'
				8	6	3.96E-04	3.99E-04 B'

Çizelge 4.2 Lityum atomunda kuantum kusur orbital teori kullanılarak hesaplanan geçiş olasılıları $(x10^8\ Hz)$

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	QDOT	
1s²2s	***1s²2p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	3.87E-01	3.72E-01
				2	2	3.87E-01	3.72E-01 A'
				2	4	3.87E-01	3.72E-01 A'
1s²2s	***1s²3p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.00E-02	1.17E-02
				2	2	1.00E-02	1.17E-02 B'
				2	4	1.00E-02	1.17E-02 B'
1s²2s	***1s²4p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.27E-02	1.42E-02
				2	2	1.27E-02	1.42E-02 B'
				2	4	1.27E-02	1.42E-02 B'
1s²2s	***1s²6p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	5.76E-03	6.97E-03
				2	2	5.76E-03	6.97E-03 B'
				2	4	5.76E-03	6.97E-03 B'
1s²2s	***1s²7p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	3.88E-03	4.84E-03
				2	2	3.88E-03	4.84E-03 B'
				2	4	3.88E-03	4.84E-03 B'
1s²2s	***1s²8p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	2.76E-03	3.55E-03
				2	2	2.76E-03	3.55E-03 B'
				2	4	2.76E-03	3.55E-03 B'
1s²2s	***1s²9p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.95E-03	2.68E-03
				2	2	1.95E-03	2.68E-03 B'
				2	4	1.95E-03	2.68E-03 B'
1s²2s	***1s²11p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.38E-03	1.65E-03
				2	2	1.38E-03	1.65E-03 B'
				2	4	1.38E-03	1.65E-03 B'
1s²2p	***1s²3s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	3.31E-01	3.49E-01
				2	2	1.10E-01	1.16E-01 B+'
				4	2	2.21E-01	2.33E-01 B+'
1s²2p	***1s²4s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	1.04E-01	1.01E-01
				2	2	3.45E-02	3.37E-02 B'
				4	2	6.91E-02	6.73E-02 B'
1s²2p	***1s²5s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	4.73E-02	4.60E-02
				2	2	1.58E-02	1.53E-02 B'
				4	2	3.15E-02	3.07E-02 B'
1s²2p	***1s²6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	2.56E-02	2.50E-02
				2	2	8.55E-03	8.33E-03 B'
				4	2	1.17E-02	1.67E-02 B'
1s²2p	***1s²3d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	7.16E-01	7.16E-01
				2	4	5.96E-01	5.97E-01 B+'
				4	4	1.19E-01	1.19E-01 B+'
				4	6	7.16E-01	7.16E-01 B+'
1s²2p	***1s²4d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	2.39E-01	2.30E-01
				2	4	1.99E-01	1.92E-01 B'

Çizelge 4.2 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	QDOT	
				4	4	3.99E-02	3.83E-02 B'
				4	6	2.39E-01	2.30E-01 B'
1s²3s	***1s²3p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	3.82E-02	3.77E-02
				2	2	3.82E-02	3.77E-02 B+'
				2	4	3.82E-02	3.77E-02 B+'
1s²3p	***1s²4s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	7.37E-02	7.46E-02
				2	2	2.46E-02	2.49E-02 B'
				4	2	4.91E-02	4.97E-02 B'
1s²3p	***1s²5s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	2.81E-02	2.76E-02
				2	2	9.35E-03	9.20E-03 B'
				4	2	1.87E-02	1.84E-02 B'
1s²3p	***1s²6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	1.45E-02	1.44E-02
				2	2	4.84E-03	4.80E-03 B'
				4	2	9.86E-03	9.60E-03 B'
1s²3p	***1s²3d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	3.80E-05	3.81E-05
				2	4	3.17E-05	3.18E-05 B'
				4	4	6.34E-06	6.35E-06 B'
				4	6	3.80E-05	3.81E-05 B'
1s²3p	***1s²4d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	7.04E-02	6.85E-02
				2	4	5.87E-02	5.71E-02 B'
				4	4	1.17E-02	1.14E-02 B'
				4	6	7.04E-02	6.85E-02 B'
1s²3p	***1s²5d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	3.59E-02	3.41E-02
				2	4	2.99E-02	2.84E-02 B'
				4	4	5.98E-03	5.68E-03 B'
				4	6	3.59E-02	3.41E-02 B'
1s²3p	***1s²6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	2.03E-02	1.94E-02
				2	4	1.69E-02	1.62E-02 B'
				4	4	3.38E-03	3.23E-03 B'
				4	6	2.03E-02	1.94E-02 B'
1s²3d	***1s²4p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	5.12E-03	5.52E-03
				4	2	5.12E-03	5.52E-03 B'
				4	4	5.12E-04	5.52E-04 B'
				6	4	4.61E-03	4.97E-03 B'
1s²3d	***1s²5p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	2.16E-03	2.31E-03
				4	2	2.16E-03	2.31E-03 B'
				4	4	2.16E-04	2.31E-04 B'
				6	4	1.95E-03	2.08E-03 B'
1s²3d	***1s²4f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	1.39E-01	1.38E-01
				4	6	1.29E-01	1.29E-01 B'
				6	6	9.24E-03	9.20E-03 B'
				6	8	1.39E-01	1.38E-01 B'

Çizelge 4.2 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İstatiksel Ağırlık i	İstatiksel Ağırlık s	Bu Çalışma QDOT	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)
1s²3d	***1s²5f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	4.62E-02	4.63E-02
				4	6	4.31E-02	4.32E-02 B'
				6	6	3.08E-03	3.09E-03 B'
				6	8	4.62E-02	4.63E-02 B'
1s²4s	***1s²4p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	7.77E-03	7.72E-03
				2	2	7.77E-03	7.72E-03 B'
				2	4	7.77E-03	7.72E-03 B'
1s²4p	***1s²5s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	2.23E-02	2.25E-02
				2	2	7.42E-03	7.50E-03 B'
				4	2	1.48E-02	1.50E-02 B'
1s²4p	***1s²6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	9.51E-03	9.22E-03
				2	2	3.17E-03	3.07E-03 B'
				4	2	6.34E-03	6.15E-03 B'
1s²4p	***1s²4d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.29E-05	1.28E-05
				2	4	1.07E-05	1.07E-05 B'
				4	4	2.14E-06	2.13E-06 B'
				4	6	1.29E-05	1.28E-05 B'
1s²4p	***1s²5d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.40E-02	1.36E-02
				2	4	1.16E-02	1.13E-02 B'
				4	4	2.33E-03	2.27E-03 B'
				4	6	1.40E-02	1.36E-02 B'
1s²4p	***1s²6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	8.59E-03	8.19E-03
				2	4	7.16E-03	6.82E-03 B'
				4	4	1.43E-03	1.36E-03 B'
				4	6	8.59E-03	8.19E-03 B'
1s²4d	***1s²5p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	2.69E-03	2.86E-03
				4	2	2.69E-03	2.86E-03 B'
				4	4	2.69E-04	2.86E-04 B'
				6	4	2.42E-03	2.57E-03 B'
1s²4d	***1s²6p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	1.32E-03	1.39E-03
				4	2	1.32E-03	1.39E-03 B'
				4	4	1.32E-04	1.39E-03 B'
				6	4	1.19E-03	1.25E-03[B']
1s²4d	***1s²4f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	6.92E-10	6.90E-10
				4	6	6.49E-10	6.44E-10 B'
				6	6	4.59E-11	4.60E-11 B'
				6	8	6.89E-10	6.90E-10 B'
1s²4d	***1s²5f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	2.59E-02	2.58E-02
				4	6	2.42E-02	2.41E-02 B'
				6	6	1.73E-03	1.72E-03 B'
				6	8	2.59E-02	2.58E-02 B'
1s²4f	***1s²5d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	5.15E-04	5.23E-04
				6	4	5.15E-04	5.23E-04 B'
				6	6	2.45E-05	2.49E-05 B'
				8	6	4.91E-04	4.98E-04 B'

Çizelge 4.2 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	QDOT	
1s²4f	***1s²6d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	2.19E-04	2.50E-04
				6	4	2.19E-04	2.50E-04 B'
				6	6	1.04E-05	1.19E-05 B'
				8	6	2.08E-04	2.38E-04 B'
1s²5s	***1s²5p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	2.36E-03	2.33E-03
				2	2	2.36E-03	2.33E-03 B'
				2	4	2.36E-03	2.33E-03 B'
1s²5p	***1s²6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	8.40E-03	8.48E-03
				2	2	2.80E-03	2.83E-03 B'
				4	2	5.60E-03	5.65E-03 B'
1s²5p	***1s²5d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	4.82E-06	4.78E-06
				2	4	4.01E-06	3.98E-06 B'
				4	4	8.03E-07	7.97E-07 B'
				4	6	4.82E-06	4.78E-06 B'
1s²5p	***1s²6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	4.05E-03	3.98E-03
				2	4	3.38E-03	3.32E-03 B'
				4	4	6.76E-04	6.63E-04 B'
				4	6	4.05E-03	3.98E-03 B'
1s²5d	***1s²6p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	1.35E-03	1.42E-03
				4	2	1.35E-03	1.42E-03 B'
				4	4	1.35E-04	1.42E-04 B'
				6	4	1.21E-03	1.28E-03 B'
1s²5d	***1s²5f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	6.86E-09	6.96E-09
				4	6	6.43E-09	6.50E-09 B'
				6	6	4.58E-10	4.64E-10 B'
				6	8	6.86E-09	6.96E-09 B'
1s²5f	***1s²6d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	4.09E-04	4.19E-04
				6	4	4.09E-04	4.19E-04 B'
				6	6	1.95E-05	2.00E-05 B'
				8	6	3.90E-04	3.99E-04 B'

4.1.2. Sodyum atomunda hesaplamalar

On bir elektrona sahip sodyum atomunda elektrik dipol geçişler için geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) ve kuantum kusur orbital teori (QDOT) kullanılarak hesaplanmıştır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride geçiş olasılıklarının hesaplanması için gereken parametrelerin belirlenmesinde enerji ifadeleri için literatürdeki deneysel enerji verileri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri için sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) ve relativistik olmayan Hartree-Fock (NRHF) yöntemleri kullanılmıştır. Bu parametreler kullanılarak elde edilen elektrik dipol geçiş olasılıkları Çizelge 4.3'te verilmiştir. Çizelgede WBEPMT için verilen sütunda NRHF yöntemiyle belirlenen parametreler kullanılarak hesaplanan geçiş olasılığı değerleri yıldız üst indisi ile belirtilmiştir. Diğer sonuçlar ise NCA dalga fonksiyonları ile belirlenen parametreler kullanılarak hesaplanan geçiş olasılığı değerlerini göstermektedir. Kuantum kusur orbital teoriyle yapılan hesaplamalarda geçiş olasılıklarının hesaplanması için gerekli olan parametreler literatürdeki deneysel enerjiler kullanılarak belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar Çizelge 4.4' de verilmiştir. Hesaplamalarda hem multiplet hem de ince yapı seviyeleri arasındaki geçişler göz önüne alınmıştır. Sodyum atomu için en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile belirlenen geçiş olasılığı sonuçları, Çizelge 4.3' de Multikonfigürasyonel Hartree-Fock yöntemi sonuçlarıyla (Bieron ve ark. 2002) ve NIST'deki (Ralchenko ve ark., 2010) kritik değerlerle karşılaştırılmıştır. Çizelge 4.4' deki kuantum kusur orbital teori sonuçları, Multikonfigürasyonel Hartree-Fock yöntemi sonuçlarıyla (Bieron ve ark., 2002) karşılaştırılmıştır.

Çizelge 4.3 Sodyum atomunda en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanan geçiş olasılıkları ($x10^8$ *Hz*)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatistik Ağırlık		Bu Çalışma	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	WBEPMT		
$2s^22p^63s$	$2s^22p^63p$	^2S	^2P	**2**	**6**	6.70E-01	6.08E-01	6.15E-01
				2	2	6.69E-01	6.06E-01	6.14E-01 AA
				2	4	6.55E-01*	6.08E-01	6.16E-01 AA
$2s^22p^63s$	$2s^22p^64p$	^2S	^2P	**2**	**6**	2.60E-02*	2.62E-02	2.74E-02
				2	2	2.61E-02*	2.59E-02	2.73E-02 B+
				2	4	2.60E-02*	2.64E-02	2.75E-02 A
$2s^22p^63s$	$2s^22p^65p$	^2S	^2P	**2**	**6**	4.30E-03	5.10E-03	5.36E-03
				2	2	4.23E-03	5.00E-03	5.31E-03 B+
				2	4	4.34E-03	5.15E-03	5.38E-03 B+
$2s^22p^64s$	$2s^22p^64p$	^2S	^2P	**2**	**6**	6.56E-02	6.52E-02	6.63E-02
				2	2	6.55E-02	6.51E-02	6.62E-02 A+
				2	4	6.57E-02	6.53E-02	6.64E-02 A+
$2s^22p^64s$	$2s^22p^66p$	^2S	^2P	**2**	**6**	2.20E-03*	2.22E-03	2.24E-03
				2	2	2.20E-03*	2.19E-03	2.21E-03 B+
				2	4	2.20E-03*	2.23E-03	2.25E-03 B+
$2s^22p^64s$	$2s^22p^67p$	^2S	^2P	**2**	**6**	1.10E-03	9.79E-04	9.85E-04
				2	2	1.09E-03	9.66E-04	9.72E-04 B
				2	4	1.10E-03	9.85E-04	9.91E-04 B
$2s^22p^66s$	$2s^22p^66p$	^2S	^2P	**2**	**6**	4.41E-03	4.35E-03	4.41E-03
				2	2	4.41E-03	4.34E-03	4.40E-03 A
				2	4	4.42E-03	4.35E-03	4.41E-03 A
$2s^22p^66s$	$2s^22p^67p$	^2S	^2P	**2**	**6**	7.17E-04*	8.73E-04	8.80E-04
				2	2	7.17E-04*	8.67E-04	8.75E-04 A
				2	4	7.17E-04*	8.76E-04	8.83E-04 A
$2s^22p^66s$	$2s^22p^68p$	^2S	^2P	**2**	**6**	3.21E-04*	3.79E-04	3.81E-04
				2	2	3.21E-04*	3.76E-04	3.78E-04 B+
				2	4	3.20E-04*	3.81E-04	3.83E-04 B+
$2s^22p^67s$	$2s^22p^67p$	^2S	^2P	**2**	**6**	1.71E-03	1.68E-03	1.70E-03
				2	2	1.71E-03	1.67E-03	1.70E-03 A
				2	4	1.71E-03	1.68E-03	1.70E-03 A
$2s^22p^67s$	$2s^22p^68p$	^2S	^2P	**2**	**6**	3.27E-04*	3.96E-04	3.96E-04
				2	2	3.16E-04	3.94E-04	3.94E-04 A
				2	4	3.27E-04*	3.97E-04	3.97E-04 A
$2s^22p^67s$	$2s^22p^69p$	^2S	^2P	**2**	**6**	1.55E-04*	2.45E-04	2.16E-04
				2	2	1.55E-04*	2.43E-04	2.14E-04 B
				2	4	1.55E-04*	2.46E-04	2.17E-04 B
$2s^22p^68s$	$2s^22p^68p$	^2S	^2P	**2**	**6**	7.69E-04	7.76E-04	7.63E-04
				2	2	7.67E-04	7.75E-04	7.62E-04 A
				2	4	7.69E-04	7.77E-04	7.64E-04 A
$2s^22p^68s$	$2s^22p^69p$	^2S	^2P	**2**	**6**	1.65E-04*	2.41E-04	1.83E-04
				2	2	1.65E-04*	2.39E-04	1.82E-04 B+
				2	4	1.65E-04*	2.41E-04	1.84E-04 B+

Çizelge 4.3 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İst. Ağırlık i	İst. Ağırlık s	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)	
$2s^22p^63p$	$2s^22p^64s$	^2P	^2S	**6**	**2**	2.55E-01*	2.61E-01	2.64E-01	
				2	2	8.53E-02*	8.73E-02	8.80E-02	A
				4	2	1.70E-01*	1.74E-01	1.76E-01	A
$2s^22p^63p$	$2s^22p^65s$	^2P	^2S	**6**	**2**	9.78E-02	7.42E-02	7.48E-02	
				2	2	3.27E-02	2.48E-02	2.50E-02	A
				4	2	6.52E-02	4.94E-02	4.98E-02	A
$2s^22p^63p$	$2s^22p^66s$	^2P	^2S	**6**	**2**	4.86E-02	3.38E-02	3.41E-02	
				2	2	1.62E-02	1.13E-02	1.14E-02	B+
				4	2	3.23E-02	2.25E-02	2.27E-02	B+
$2s^22p^64p$	$2s^22p^65s$	^2P	^2S	**6**	**2**	5.20E-02*	5.49E-02	5.40E-02	
				2	2	1.74E-02*	1.83E-02	1.80E-02	A+
				4	2	3.46E-02*	3.65E-02	3.60E-02	A+
$2s^22p^64p$	$2s^22p^66s$	^2P	^2S	**6**	**2**	2.21E-02	1.75E-02	1.76E-02	
				2	2	7.39E-03	5.88E-03	5.85E-03	A
				4	2	1.47E-02	1.17E-02	1.17E-02	A
$2s^22p^64p$	$2s^22p^67s$	^2P	^2S	**6**	**2**	1.20E-02	8.91E-03	8.89E-03	
				2	2	4.02E-03	2.97E-03	2.97E-03	B+
				4	2	8.01E-03	5.93E-03	5.92E-03	B+
$2s^22p^64p$	$2s^22p^68s$	^2P	^2S	**6**	**2**	7.27E-03	5.25E-03	5.26E-03	
				2	2	2.43E-03	1.75E-03	1.76E-03	B+
				4	2	4.84E-03	3.49E-03	3.50E-03	B+
$2s^22p^64p$	$2s^22p^69s$	^2P	^2S	**6**	**2**	4.73E-03	3.88E-03	3.86E-03	
				2	2	1.58E-03	1.30E-03	1.29E-03	B
				4	2	3.15E-03	2.58E-03	2.57E-03	B
$2s^22p^64p$	$2s^22p^610s$	^2P	^2S	**6**	**2**	3.59E-03*	4.55E-03	4.25E-03	
				2	2	1.20E-03*	1.52E-03	1.42E-03	B
				4	2	2.39E-03*	3.03E-03	2.83E-03	B
$2s^22p^67p$	$2s^22p^68s$	^2P	^2S	**6**	**2**	2.61E-03	2.67E-03	2.67E-03	
				2	2	8.72E-04	8.94E-04	8.92E-04	A
				4	2	1.74E-03	1.78E-03	1.78E-03	A
$2s^22p^67p$	$2s^22p^69s$	^2P	^2S	**6**	**2**	1.19E-03	1.16E-03	1.09E-03	
				2	2	3.98E-04	3.90E-04	3.64E-04	B+
				4	2	7.94E-04	7.76E-04	7.25E-04	B+
$2s^22p^67p$	$2s^22p^610s$	^2P	^2S	**6**	**2**	7.39E-04	1.15E-03	7.56E-04	
				2	2	2.62E-04*	3.87E-04	2.53E-04	B+
				4	2	5.23E-04*	7.70E-04	5.03E-04	B+
$2s^22p^68p$	$2s^22p^69s$	^2P	^2S	**6**	**2**	1.28E-03*	1.60E-03	1.28E-03	
				2	2	4.34E-04	5.35E-04	4.27E-04	B+
				4	2	8.65E-04	1.06E-03	8.52E-04	B+
$2s^22p^68p$	$2s^22p^610s$	^2P	^2S	**6**	**2**	6.17E-04*	7.91E-04	3.46E-04	
				2	2	2.06E-04*	2.65E-04	1.16E-04	B+
				4	2	4.11E-04*	5.26E-04	2.30E-04	B+

Çizelge 4.3 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İst. Ağırlık i	İst. Ağırlık s	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)	
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶3d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	5.32E-01*	5.07E-01	5.14E-01	
				2	4	4.44E-01*	4.23E-01	4.29E-01	A+
				4	4	8.85E-02*	8.45E-02	8.57E-02	A
				4	6	5.31E-01*	5.07E-01	5.14E-01	A+
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶4d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.37E-01*	1.20E-01	1.21E-01	
				2	4	1.14E-01*	1.00E-01	1.01E-01	A
				4	4	2.28E-02*	2.00E-02	2.02E-02	A
				4	6	1.37E-01*	1.20E-01	1.21E-01	A
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶5d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	5.61E-02*	4.85E-02	4.89E-02	
				2	4	4.69E-02*	4.06E-02	4.09E-02	A
				4	4	9.34E-03*	8.08E-03	8.15E-03	A
				4	6	5.61E-02*	4.84E-02	4.88E-02	A
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	2.89E-02*	2.47E-02	2.49E-02	
				2	4	2.41E-02*	2.06E-02	2.08E-02	B+
				4	4	4.81E-03*	4.11E-03	4.14E-03	B+
				4	6	2.88E-02*	2.46E-02	2.49E-02	A
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶7d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.70E-02*	1.45E-02	1.47E-02	
				2	4	1.42E-02*	1.21E-02	1.23E-02	B+
				4	4	2.82E-03*	2.42E-03	2.44E-03	B
				4	6	1.69E-02*	1.45E-02	1.46E-02	B+
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶8d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.17E-02	1.17E-02	1.17E-02	
				2	4	9.80E-03	9.82E-03	9.83E-03	B+
				4	4	1.95E-03	1.95E-03	1.95E-03	B
				4	6	1.17E-02	1.17E-02	1.17E-02	B+
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶9d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	7.40E-03*	-	6.60E-03	
				2	4	6.71E-03	-	5.50E-03	C
				4	4	1.33E-03	-	1.09E-03	C
				4	6	7.39E-03*	-	6.60E-03	C
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶4d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	6.57E-02	6.95E-02	7.01E-02	
				2	4	5.48E-02	5.80E-02	5.84E-02	A+
				4	4	1.21E-02*	1.15E-02	1.17E-02	A
				4	6	6.57E-02	6.95E-02	7.01E-02	A+
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶5d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	2.82E-02	2.61E-02	2.61E-02	
				2	4	2.35E-02	2.18E-02	2.81E-02	A
				4	4	4.69E-03	4.35E-03	4.35E-03	A
				4	6	2.81E-02	2.61E-02	2.61E-02	A
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.47E-02	1.29E-02	1.29E-02	
				2	4	1.23E-02	1.08E-02	1.08E-02	A
				4	4	2.44E-03	2.15E-03	2.16E-03	A
				4	6	1.47E-02	1.29E-02	1.29E-02	A

Çizelge 4.3 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İst. Ağırlık i	İst. Ağırlık s	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)	
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶7d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	8.66E-03	7.53E-03	7.53E-03	
				2	4	7.31E-03*	6.29E-03	6.29E-03	B+
				4	4	1.44E-03	1.25E-03	1.25E-03	B+
				4	6	8.65E-03	7.52E-03	7.52E-03	B+
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶8d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	5.59E-03*	6.02E-03	5.93E-03	
				2	4	4.66E-03*	5.03E-03	4.96E-03	B+
				4	4	9.31E-04*	1.00E-03	9.88E-04	B+
				4	6	5.58E-03*	6.01E-03	5.92E-03	B+
2s²2p⁶5p	***2s²2p⁶5d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.61E-02	1.67E-02	1.69E-02	
				2	4	1.34E-02	1.39E-02	1.41E-02	A+
				4	4	2.68E-03	2.79E-03	2.82E-03	A+
				4	6	1.61E-02	1.67E-02	1.69E-02	A+
2s²2p⁶5p	***2s²2p⁶6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	8.24E-03	7.68E-03	7.74E-03	
				2	4	6.88E-03	6.41E-03	6.46E-03	A
				4	4	1.37E-03	1.28E-03	1.29E-03	A
				4	6	8.24E-03	7.68E-03	7.74E-03	A
2s²2p⁶5p	***2s²2p⁶7d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	4.81E-03	4.34E-03	4.37E-03	
				2	4	4.02E-03	3.62E-03	3.65E-03	A
				4	4	8.01E-04	7.23E-04	7.28E-04	B+
				4	6	4.81E-03	4.34E-03	4.37E-03	A
2s²2p⁶5p	***2s²2p⁶8d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	3.14E-03*	3.42E-03	3.34E-03	
				2	4	2.62E-03*	2.85E-03	2.79E-03	A
				4	4	5.23E-04*	5.69E-04	5.56E-04	B+
				4	6	3.14E-03*	3.41E-03	3.34E-03	A
2s²2p⁶6p	***2s²2p⁶6d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	5.78E-03*	5.54E-03	5.61E-03	
				2	4	4.45E-03	4.62E-03	4.67E-03	A
				4	4	9.62E-04*	9.24E-04	9.34E-04	A
				4	6	5.77E-03*	5.54E-03	5.61E-03	A
2s²2p⁶6p	***2s²2p⁶7d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	3.04E-03	2.89E-03	2.91E-03	
				2	4	2.54E-03	2.41E-03	2.43E-03	A
				4	4	5.07E-04	4.82E-04	4.85E-04	A
				4	6	3.04E-03	2.89E-03	2.91E-03	A
2s²2p⁶6p	***2s²2p⁶8d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.98E-03*	2.21E-03	2.10E-03	
				2	4	1.65E-03*	1.84E-03	1.75E-03	A
				4	4	3.30E-04*	3.68E-04	3.50E-04	A
				4	6	1.98E-03*	2.21E-03	2.10E-03	A
2s²2p⁶6p	***2s²2p⁶9d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	1.29E-03	-	1.14E-03	
				2	4	1.07E-03	-	9.53E-04	E
				4	4	2.15E-04	-	1.90E-04	E
				4	6	1.29E-03	-	1.14E-03	D
2s²2p⁶7p	***2s²2p⁶7d***	***²P***	***²D***	**6**	**10**	2.32E-03*	2.25E-03	2.27E-03	
				2	4	1.80E-03	1.88E-03	1.89E-03	A
				4	4	3.86E-04*	3.76E-04	3.78E-04	A
				4	6	2.32E-03*	2.25E-03	2.27E-03	A

Çizelge 4.3 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İst. Ağırlık		Bu Çalışma	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)	
(i)	(s)	i	s	i	s	WBEPMT			
$2s^22p^67p$	$2s^22p^68d$	^2P	^2D	**6**	**10**	1.38E-03*	1.58E-03	1.41E-03	
				2	4	1.15E-03*	1.31E-03	1.18E-03	A
				4	4	2.29E-04*	2.63E-04	2.36E-04	A
				4	6	1.38E-03*	1.58E-03	1.41E-03	A
$2s^22p^68p$	$2s^22p^68d$	^2P	^2D	**6**	**10**	1.07E-03*	1.40E-03	1.06E-03	
				2	4	8.38E-04	1.16E-03	8.81E-04	A
				4	4	1.79E-04*	2.34E-04	1.76E-04	A
				4	6	1.07E-03*	1.40E-03	1.06E-03	A
$2s^22p^68p$	$2s^22p^69d$	^2P	^2D	**6**	**10**	6.42E-04	-	6.24E-04	
				2	4	5.35E-04	-	5.21E-04	D
				4	4	1.07E-04	-	1.04E-04	E
				4	6	6.42E-04	-	6.24E-04	D+
$2s^22p^69p$	$2s^22p^69d$	^2P	^2D	**6**	**10**	5.51E-04*	-	5.63E-04	
				2	4	4.60E-04*	-	4.70E-04	B
				4	4	9.17E-05*	-	9.38E-05	C+
				4	6	5.50E-04*	-	5.63E-04	B
$2s^22p^63d$	$2s^22p^64p$	^2D	^2P	**10**	**6**	1.54E-03*	1.59E-03	1.58E-03	
				4	2	1.52E-03*	1.57E-03	1.57E-03	A+
				4	4	1.54E-04*	1.60E-04	1.59E-04	A
				6	4	1.43E-03	1.44E-03	1.43E-03	A+
$2s^22p^64d$	$2s^22p^65p$	^2D	^2P	**10**	**6**	6.23E-04	6.98E-04	6.22E-04	
				4	2	6.17E-04	6.92E-04	6.16E-04	A+
				4	4	6.26E-05	7.02E-05	6.24E-05	A+
				6	4	5.53E-04*	6.30E-04	5.62E-04	A+
$2s^22p^64d$	$2s^22p^66p$	^2D	^2P	**10**	**6**	6.68E-05*	6.65E-05	6.55E-05	
				4	2	6.69E-05*	6.89E-05	6.78E-05	B+
				4	4	6.70E-06*	6.54E-06	6.43E-06	B+
				6	4	6.03E-05*	5.88E-05	5.79E-05	B+
$2s^22p^65d$	$2s^22p^66p$	^2D	^2P	**10**	**6**	2.51E-04	2.59E-04	2.52E-04	
				4	2	2.51E-04	2.57E-04	2.50E-04	A
				4	4	2.52E-05	2.61E-05	2.54E-05	A
				6	4	2.27E-04	2.35E-04	2.28E-04	A
$2s^22p^65d$	$2s^22p^67p$	^2D	^2P	**10**	**6**	4.82E-05*	4.88E-05	4.88E-05	
				4	2	4.81E-05*	5.01E-05	5.01E-05	B+
				4	4	4.83E-06*	4.81E-06	4.81E-06	B+
				6	4	4.35E-05*	4.33E-05	4.33E-05	B+
$2s^22p^65d$	$2s^22p^68p$	^2D	^2P	**10**	**6**	3.80E-05	3.10E-05	3.09E-05	
				4	2	3.87E-05	3.18E-05	3.17E-05	B+
				4	4	3.76E-06	3.06E-06	3.06E-06	B
				6	4	3.39E-05	2.76E-05	2.75E-05	B+
$2s^22p^66d$	$2s^22p^67p$	^2D	^2P	**10**	**6**	1.15E-04	1.17E-04	1.14E-04	
				4	2	1.13E-04	1.16E-04	1.13E-04	A
				4	4	1.15E-05	1.17E-05	1.15E-05	A
				6	4	1.04E-04	1.06E-04	1.03E-04	A

Çizelge 4.3 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İst. Ağırlık		Bu Çalışma	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)	
(i)	(s)	i	s	i	s	WBEPMT			
2s²2p⁶6d	***2s²2p⁶8p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	3.19E-05*	3.46E-05	3.42E-05	
				4	2	3.18E-05*	3.54E-05	3.50E-05	A
				4	4	3.20E-06*	3.42E-06	3.38E-06	B+
				6	4	2.88E-05*	3.08E-05	3.04E-05	A
2s²2p⁶6d	***2s²2p⁶9p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	2.75E-05	3.25E-05	2.75E-05	
				4	2	2.80E-05	3.32E-05	2.81E-05	B+
				4	4	2.73E-06	3.22E-06	2.72E-06	B
				6	4	2.45E-05	2.90E-05	2.45E-05	B+
2s²2p⁶3d	***2s²2p⁶4f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	1.42E-01*	1.40E-01	1.40E-01	
				4	6	1.33E-01*	1.31E-01	1.31E-01	A
				6	6	9.49E-03*	9.35E-03	9.35E-03	A
				6	8	1.42E-01*	1.40E-01	1.40E-01	A
2s²2p⁶3d	***2s²2p⁶5f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	4.73E-02*	4.70E-02	4.70E-02	
				4	6	4.42E-02*	4.38E-02	4.38E-02	A
				6	6	3.16E-03*	3.13E-03	3.13E-03	A
				6	8	4.73E-02*	4.70E-02	4.70E-02	A
2s²2p⁶3d	***2s²2p⁶6f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	2.24E-02*	2.23E-02	2.23E-02	
				4	6	2.10E-02*	2.08E-02	2.08E-02	A
				6	6	1.50E-03*	1.48E-03	1.49E-03	A
				6	8	2.24E-02*	2.23E-02	2.23E-02	A
2s²2p⁶3d	***2s²2p⁶7f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	1.27E-02*	1.26E-02	1.27E-02	
				4	6	1.18E-02*	1.18E-02	1.18E-02	B+
				6	6	8.44E-04*	8.45E-04	8.45E-04	B+
				6	8	1.27E-02*	1.26E-02	1.27E-02	A
2s²2p⁶4d	***2s²2p⁶5f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	2.65E-02*	2.62E-02	2.59E-02	
				4	6	2.48E-02*	2.45E-02	2.42E-02	A+
				6	6	1.77E-03*	1.75E-03	1.73E-03	A
				6	8	2.65E-02*	2.62E-02	2.59E-02	A+
2s²2p⁶4d	***2s²2p⁶6f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	1.33E-02*	1.32E-02	1.31E-02	
				4	6	1.24E-02*	1.23E-02	1.22E-02	A
				6	6	8.87E-04*	8.81E-04	8.74E-04	A
				6	8	1.33E-02*	1.32E-02	1.31E-02	A
2s²2p⁶4d	***2s²2p⁶7f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	7.62E-03*	7.62E-03	7.57E-03	
				4	6	7.11E-03*	7.12E-03	7.07E-03	A
				6	6	5.08E-04*	5.08E-04	5.05E-04	B+
				6	8	7.62E-03*	7.62E-03	7.57E-03	A
2s²2p⁶4d	***2s²2p⁶8f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	4.79E-03*	5.85E-03	5.70E-03	
				4	6	4.47E-03*	5.46E-03	5.32E-03	A
				6	6	3.20E-04*	3.90E-04	3.80E-04	B+
				6	8	4.79E-03*	5.85E-03	5.70E-03	A
2s²2p⁶6d	***2s²2p⁶7f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	2.53E-03	2.55E-03	2.55E-03	
				4	6	2.36E-03	2.38E-03	2.38E-03	A

Çizelge 4.3 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İst. Ağırlık i	İst. Ağırlık s	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)	
$2s^22p^66d$	$2s^22p^67f$	^2D	^2F	6	6	1.69E-04	1.70E-04	1.70E-04	A
				6	8	2.53E-03	2.55E-03	2.55E-03	A
$2s^22p^66d$	$2s^22p^68f$	^2D	^2F	**10**	**14**	1.77E-03*	2.10E-03	1.95E-03	
				4	6	1.65E-03*	1.96E-03	1.82E-03	A
				6	6	1.18E-04*	1.40E-04	1.30E-04	A
				6	8	1.77E-03*	2.10E-03	1.95E-03	A
$2s^22p^66d$	$2s^22p^69f$	^2D	^2F	**10**	**14**	1.19E-03	-	1.18E-03	
				4	6	1.11E-03	-	1.11E-03	D+
				6	6	7.90E-05	-	7.89E-05	E
				6	8	1.19E-03	-	1.18E-03	D+
$2s^22p^64f$	$2s^22p^65d$	^2F	^2D	**14**	**10**	5.86E-04	5.77E-04	5.75E-04	
				6	4	5.86E-04	5.77E-04	5.75E-04	A
				6	6	2.79E-05	2.75E-05	2.74E-05	B+
				8	6	5.58E-04	5.50E-04	5.48E-04	A
$2s^22p^64f$	$2s^22p^66d$	^2F	^2D	**14**	**10**	2.48E-04	2.46E-04	2.46E-04	
				6	4	2.48E-04	2.46E-04	2.46E-04	A
				6	6	1.18E-05	1.17E-05	1.17E-05	B+
				8	6	2.36E-04	2.34E-04	2.34E-04	A
$2s^22p^64f$	$2s^22p^67d$	^2F	^2D	**14**	**10**	1.30E-04	1.30E-04	1.30E-04	
				6	4	1.30E-04	1.30E-04	1.30E-04	B+
				6	6	6.18E-06	6.22E-06	6.21E-06	B
				8	6	1.24E-04	1.24E-04	1.24E-04	B+
$2s^22p^65f$	$2s^22p^66d$	^2F	^2D	**14**	**10**	4.05E-04*	4.42E-04	4.43E-04	
				6	4	4.05E-04*	4.42E-04	4.43E-04	A
				6	6	2.13E-05	2.10E-05	2.11E-05	A
				8	6	4.27E-04	4.21E-04	4.22E-04	A
$2s^22p^65f$	$2s^22p^67d$	^2F	^2D	**14**	**10**	2.18E-04	2.19E-04	2.19E-04	
				6	4	2.18E-04	2.19E-04	2.19E-04	A
				6	6	1.04E-05	1.04E-05	1.04E-05	B+
				8	6	2.08E-04	2.08E-04	2.09E-04	A
$2s^22p^65f$	$2s^22p^68d$	^2F	^2D	**14**	**10**	1.24E-04	1.56E-04	1.49E-04	
				6	4	1.24E-04	1.56E-04	1.49E-04	B+
				6	6	5.90E-06	7.46E-06	7.09E-06	B
				8	6	1.18E-04	1.49E-04	1.42E-04	B+

Çizelge 4.4 Sodyum atomunda kuantum kusur orbital teori kullanılarak hesaplanan geçiş olasılıkları ($x10^8$ *Hz*)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İst. Ağırlık		Bu Çalışma	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)
(i)	(s)	i	s	i	s	QDOT	
2s²2p⁶3s	***2s²2p⁶3p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	6.37E-01	6.08E-01
				2	2	6.35E-01	6.06E-01
				2	4	6.37E-01	6.08E-01
2s²2p⁶3s	***2s²2p⁶4p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	2.50E-02	2.62E-02
				2	2	2.48E-02	2.59E-02
				2	4	2.51E-02	2.64E-02
2s²2p⁶3s	***2s²2p⁶5p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	5.06E-03	5.10E-03
				2	2	5.00E-03	5.00E-03
				2	4	5.10E-03	5.15E-03
2s²2p⁶3s	***2s²2p⁶6p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.73E-03	1.71E-03
				2	2	1.73E-03	1.67E-03
				2	4	1.74E-03	1.73E-03
2s²2p⁶3s	***2s²2p⁶7p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	8.08E-04	7.70E-04
				2	2	7.94E-04	7.48E-04
				2	4	8.15E-04	7.82E-04
2s²2p⁶3s	***2s²2p⁶8p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	4.39E-04	4.21E-04
				2	2	4.30E-04	4.08E-04
				2	4	4.43E-04	4.28E-04
2s²2p⁶4s	***2s²2p⁶4p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	6.71E-02	6.52E-02
				2	2	6.69E-02	6.51E-02
				2	4	6.72E-02	6.53E-02
2s²2p⁶4s	***2s²2p⁶5p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	7.76E-03	7.25E-03
				2	2	7.72E-03	7.19E-03
				2	4	7.78E-03	7.28E-03
2s²2p⁶4s	***2s²2p⁶6p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	2.68E-03	2.22E-03
				2	2	2.69E-03	2.19E-03
				2	4	2.69E-03	2.23E-03
2s²2p⁶4s	***2s²2p⁶7p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	9.05E-04	9.79E-04
				2	2	8.96E-04	9.66E-04
				2	4	9.09E-04	9.85E-04
2s²2p⁶5s	***2s²2p⁶5p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.49E-02	1.40E-02
				2	2	1.49E-02	1.40E-02
				2	4	1.49E-02	1.40E-02
2s²2p⁶5s	***2s²2p⁶6p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	2.37E-03	2.27E-03
				2	2	2.20E-03	2.25E-03
				2	4	2.38E-03	2.28E-03
2s²2p⁶5s	***2s²2p⁶7p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	8.23E-04	8.53E-04
				2	2	8.17E-04	8.45E-04
				2	4	8.26E-04	8.57E-04
2s²2p⁶5s	***2s²2p⁶8p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	4.07E-04	4.35E-04
				2	2	4.04E-04	4.30E-04
				2	4	4.09E-04	4.37E-04

Çizelge 4.4 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İst. Ağırlık i	İst. Ağırlık s	Bu Çalışma QDOT	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)
2s²2p⁶5s	***2s²2p⁶9p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	3.69E-04	3.46E-04
				2	2	3.72E-04	3.41E-04
				2	4	3.67E-04	3.48E-04
2s²2p⁶6s	***2s²2p⁶6p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	4.31E-03	4.35E-03
				2	2	4.31E-03	4.34E-03
				2	4	4.32E-03	4.35E-03
2s²2p⁶6s	***2s²2p⁶7p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	8.61E-04	8.73E-04
				2	2	8.57E-04	8.67E-04
				2	4	8.64E-04	8.76E-04
2s²2p⁶6s	***2s²2p⁶8p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	3.64E-04	3.79E-04
				2	2	3.61E-04	3.76E-04
				2	4	3.65E-04	3.81E-04
2s²2p⁶6s	***2s²2p⁶9p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	2.29E-04	2.78E-04
				2	2	2.28E-04	2.75E-04
				2	4	2.30E-04	2.79E-04
2s²2p⁶7s	***2s²2p⁶7p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.68E-03	1.68E-03
				2	2	1.68E-03	1.67E-03
				2	4	1.68E-03	1.68E-03
2s²2p⁶7s	***2s²2p⁶8p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	3.86E-04	3.96E-04
				2	2	3.84E-04	3.94E-04
				2	4	3.87E-04	3.97E-04
2s²2p⁶7s	***2s²2p⁶9p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	2.42E-04	2.45E-04
				2	2	2.41E-04	2.43E-04
				2	4	2.43E-04	2.46E-04
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶4s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	2.41E-01	2.61E-01
				2	2	8.04E-02	8.73E-02
				4	2	1.60E-01	1.74E-01
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶5s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	6.80E-02	7.42E-02
				2	2	2.18E-02	2.48E-02
				4	2	4.34E-02	4.94E-02
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	3.66E-02	3.38E-02
				2	2	1.23E-02	1.13E-02
				4	2	2.43E-02	2.25E-02
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶7s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	1.84E-02	1.84E-02
				2	2	6.16E-03	6.15E-03
				4	2	1.22E-02	1.22E-02
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶8s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	1.33E-02	1.11E-02
				2	2	3.57E-03	3.73E-03
				4	2	7.07E-03	7.44E-03
2s²2p⁶3p	***2s²2p⁶9s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	8.53E-03	8.40E-03
				2	2	2.86E-03	2.80E-03
				4	2	5.68E-03	5.59E-03

Çizelge 4.4 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İst. Ağırlık		Bu Çalışma	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)
(i)	(s)	i	s	i	s	QDOT	
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶5s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	5.67E-02	5.49E-02
				2	2	1.89E-02	1.83E-02
				4	2	3.78E-02	3.65E-02
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	1.88E-02	1.75E-02
				2	2	5.59E-03	5.88E-03
				4	2	1.11E-02	1.17E-02
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶7s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	8.27E-03	8.91E-03
				2	2	2.74E-03	2.97E-03
				4	2	5.50E-03	5.93E-03
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶8s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	5.18E-03	5.25E-03
				2	2	1.73E-03	1.75E-03
				4	2	3.44E-03	3.49E-03
2s²2p⁶4p	***2s²2p⁶9s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	3.69E-03	3.88E-03
				2	2	1.08E-03	1.30E-03
				4	2	2.45E-03	2.58E-03
2s²2p⁶5p	***2s²2p⁶6s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	1.58E-02	1.60E-02
				2	2	5.28E-03	5.35E-03
				4	2	1.05E-02	1.06E-02
2s²2p⁶5p	***2s²2p⁶7s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	5.67E-03	5.63E-03
				2	2	1.82E-03	1.88E-03
				4	2	3.63E-03	3.74E-03
2s²2p⁶5p	***2s²2p⁶8s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	3.01E-03	3.07E-03
				2	2	1.01E-03	1.02E-03
				4	2	2.00E-03	2.04E-03
2s²2p⁶6p	***2s²2p⁶7s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	6.01E-03	6.04E-03
				2	2	2.00E-03	2.01E-03
				4	2	4.00E-03	4.02E-03
2s²2p⁶6p	***2s²2p⁶8s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	2.25E-03	2.24E-03
				2	2	7.50E-04	7.50E-04
				4	2	1.47E-03	1.49E-03
2s²2p⁶7p	***2s²2p⁶8s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	2.65E-03	2.67E-03
				2	2	8.86E-04	8.94E-04
				4	2	1.77E-03	1.78E-03
2s²2p⁶7p	***2s²2p⁶9s***	***²P***	***²S***	**6**	**2**	1.07E-03	1.16E-03
				2	2	3.57E-04	3.90E-04
				4	2	7.09E-04	7.76E-04
2s²2p⁶3d	***2s²2p⁶4f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	1.42E-01	1.40E-01
				4	6	1.32E-01	1.31E-01
				6	8	1.42E-01	1.40E-01
				6	6	9.44E-03	9.35E-03

Çizelge 4.4 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İst. Ağırlık		Bu Çalışma	MCHF Değerleri (Bieron ve ark., 2002)
(i)	(s)	i	s	i	s	QDOT	
$2s^22p^63d$	$2s^22p^65f$	^2D	^2F	**10**	**14**	4.72E-02	4.70E-02
				4	6	4.41E-02	4.38E-02
				6	8	4.72E-02	4.70E-02
				6	6	3.15E-03	3.13E-03
$2s^22p^63d$	$2s^22p^66f$	^2D	^2F	**10**	**14**	2.24E-02	2.23E-02
				4	6	2.09E-02	2.08E-02
				6	8	2.24E-02	2.23E-02
				6	6	1.50E-03	1.48E-03
$2s^22p^63d$	$2s^22p^67f$	^2D	^2F	**10**	**14**	1.27E-02	1.26E-02
				4	6	1.18E-02	1.18E-02
				6	8	1.27E-02	1.26E-02
				6	6	8.43E-04	8.45E-04
$2s^22p^64d$	$2s^22p^65f$	^2D	^2F	**10**	**14**	2.61E-02	2.62E-02
				4	6	2.44E-02	2.45E-02
				6	8	2.61E-02	2.62E-02
				6	6	1.74E-03	1.75E-03
$2s^22p^64d$	$2s^22p^66f$	^2D	^2F	**10**	**14**	1.32E-02	1.32E-02
				4	6	1.23E-02	1.23E-02
				6	8	1.32E-02	1.32E-02
				6	6	8.81E-04	8.81E-04
$2s^22p^64d$	$2s^22p^67f$	^2D	^2F	**10**	**14**	7.59E-03	7.62E-03
				4	6	7.08E-03	7.12E-03
				6	8	7.59E-03	7.62E-03
				6	6	5.06E-04	5.08E-04
$2s^22p^65d$	$2s^22p^66f$	^2D	^2F	**10**	**14**	7.21E-03	7.13E-03
				4	6	6.73E-03	6.65E-03
				6	8	7.21E-03	7.13E-03
				6	6	4.81E-04	4.75E-04
$2s^22p^65d$	$2s^22p^67f$	^2D	^2F	**10**	**14**	4.39E-03	4.37E-03
				4	6	4.10E-03	4.08E-03
				6	8	4.39E-03	4.37E-03
				6	6	2.93E-04	2.91E-04
$2s^22p^66d$	$2s^22p^66f$	^2D	^2F	**10**	**14**	3.29E-08	3.19E-08
				4	6	2.60E-08	2.98E-08
				6	8	3.29E-08	3.19E-08
				6	6	2.20E-09	2.12E-09
$2s^22p^66d$	$2s^22p^67f$	^2D	^2F	**10**	**14**	2.56E-03	2.55E-03
				4	6	2.39E-03	2.38E-03
				6	8	2.56E-03	2.55E-03
				6	6	1.71E-04	1.70E-04

Çizelge 4.4 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İst. Ağırlık i	İst. Ağırlık s	Bu Çalışma QDOT	MCHF Değerleri (Bieron ve ark. 2002)
2s²2p⁶6d	***2s²2p⁶8f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	2.23E-03	2.10E-03
				4	6	1.62E-03	1.96E-03
				6	8	2.23E-03	2.10E-03
				6	6	1.49E-04	1.40E-04
2s²2p⁶4f	***2s²2p⁶5d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	5.69E-04	5.77E-04
				8	6	5.41E-04	5.50E-04
				6	4	5.69E-04	5.77E-04
				6	6	2.71E-05	2.75E-05
2s²2p⁶4f	***2s²2p⁶6d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	2.42E-04	2.46E-04
				8	6	2.30E-04	2.34E-04
				6	4	2.42E-04	2.46E-04
				6	6	1.15E-05	1.17E-05
2s²2p⁶4f	***2s²2p⁶7d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	1.27E-04	1.30E-04
				8	6	1.21E-04	1.24E-04
				6	4	1.27E-04	1.30E-04
				6	6	6.04E-06	6.22E-06
2s²2p⁶5f	***2s²2p⁶6d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	4.38E-04	4.42E-04
				8	6	4.17E-04	4.21E-04
				6	4	4.38E-04	4.42E-04
				6	6	2.08E-05	2.10E-05
2s²2p⁶5f	***2s²2p⁶7d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	2.14E-04	2.19E-04
				8	6	2.03E-04	2.08E-04
				6	4	2.14E-04	2.19E-04
				6	6	1.02E-05	1.04E-05
2s²2p⁶5f	***2s²2p⁶8d***	***²F***	***²D***	**14**	**10**	1.22E-04	1.56E-04
				8	6	1.16E-04	1.49E-04
				6	4	1.22E-04	1.56E-04
				6	6	5.79E-06	7.46E-06

4.1.3. Potasyum atomunda hesaplamalar

On dokuz elektrona sahip potasyum atomunda elektrik dipol geçişler için geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) ve kuantum kusur orbital teori (QDOT) kullanılarak hesaplanmıştır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride geçiş olasılıklarının hesaplanması için gereken parametrelerin belirlenmesinde enerji ifadeleri için literatürdeki deneysel enerji verileri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri için sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) ve relativistik olmayan Hartree-Fock (NRHF) yöntemleri kullanılmıştır. Bu parametreler kullanılarak elde edilen elektrik dipol geçiş olasılıkları Çizelge 4.5'de verilmiştir. Çizelgede WBEPMT için verilen sütunda NRHF yöntemiyle belirlenen parametreler kullanılarak hesaplanan geçiş olasılığı değerleri yıldız üst indisi ile belirtilmiştir. Diğer sonuçlar ise NCA dalga fonksiyonları ile belirlenen parametreler kullanılarak hesaplanan geçiş olasılığı değerlerini göstermektedir. Kuantum kusur orbital teoriyle yapılan hesaplamalarda geçiş olasılıklarının hesaplanması için gerekli olan parametreler literatürdeki deneysel enerjiler kullanılarak belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar Çizelge 4.6' da verilmiştir. Hesaplamalarda hem multiplet hem de ince yapı seviyeleri arasındaki geçişler için sonuçlar verilmiştir. Potasyum atomu için en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori ile belirlenen geçiş olasılığı sonuçları Çizelge 4.5' ve Çizelge 4.6' da NIST'deki (Ralchenko ve ark., 2010) kritik değerlerle karşılaştırılmıştır.

Çizelge 4.5 Potasyum atomunda en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanan geçiş olasılıkları ($x10^8$ *Hz*)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark., 2010)	
(i)	(s)	i	s	i	s	WBEPMT		
3p⁶3d	***3p⁶5p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	1.75E-02*	1.50E-02	
				6	4	1.58E-02*	1.40E-02	D
				4	2	1.75E-02*	1.50E-02	D
				4	4	1.75E-03*	1.50E-03	D
3p⁶3d	***3p⁶6p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	4.44E-03	4.10E-03	
				6	4	4.02E-03	3.70E-03	D
				4	2	4.38E-03	4.10E-03	D
				4	4	4.46E-04	4.10E-04	D
3p⁶3d	***3p⁶7p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	2.22E-03	1.90E-03	
				6	4	2.01E-03	1.70E-03	D
				4	2	2.19E-03	1.90E-03	D
				4	4	2.22E-04	1.90E-04	D
3p⁶3d	***3p⁶8p***	***²D***	***²P***	**10**	**6**	1.31E-03	1.10E-03	
				6	4	1.18E-03	9.60E-04	D
				4	2	1.30E-03	1.10E-03	D
				4	4	1.31E-04	1.10E-04	D
3p⁶3d	***3p⁶4f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	1.74E-01	1.50E-01	
				6	8	1.74E-01	1.50E-01	D
				6	6	1.16E-02	1.00E-02	D
				4	6	1.62E-01	1.50E-01	D
3p⁶3d	***3p⁶5f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	7.45E-02	6.60E-02	
				6	8	7.45E-02	6.60E-02	D'
				6	6	4.97E-03	4.40E-03	D'
				4	6	6.95E-02	6.20E-02	D'
3p⁶3d	***3p⁶6f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	3.93E-02	3.50E-02	
				6	8	3.93E-02	3.50E-02	D
				6	6	2.62E-03	2.40E-03	D
				4	6	3.66E-02	3.30E-02	D
3p⁶3d	***3p⁶7f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	2.34E-02	2.10E-02	
				6	8	2.34E-02	2.10E-02	D
				6	6	1.56E-03	1.40E-03	D
				4	6	2.18E-02	2.00E-02	D
3p⁶3d	***3p⁶8f***	***²D***	***²F***	**10**	**14**	1.51E-02*	1.40E-02	
				6	8	1.51E-02*	1.40E-02	D
				6	6	1.01E-03	9.20E-04	D
				4	6	1.41E-02	1.30E-02	D
3p⁶4s	***3p⁶4p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	3.67E-01	3.85E-01	
				2	2	4.43E-01*	3.82E-01	B+
				2	4	4.49E-01*	3.87E-01	B+
3p⁶4s	***3p⁶5p***	***²S***	***²P***	**2**	**6**	1.53E-02*	1.24E-02	
				2	2	1.53E-02*	1.24E-02	C
				2	4	1.53E-02*	1.24E-02	C

Çizelge 4.5 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark. 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	WBEPMT	
$3p^64p$	$3p^65s$	^2P	^2S	**6**	**2**	2.37E-01*	2.40E-01
				2	2	8.02E-02*	7.90E-02 C
				4	2	1.57E-01*	1.56E-01 C
$3p^64p$	$3p^66s$	^2P	^2S	**6**	**2**	1.10E-01	8.01E-02
				2	2	3.70E-02	2.72E-02 C
				4	2	7.34E-02	5.40E-02 C
$3p^64p$	$3p^67s$	^2P	^2S	**6**	**2**	5.95E-02	3.69E-02
				2	2	1.99E-02	1.23E-02 C
				4	2	3.95E-02	2.46E-02 C
$3p^64d$	$3p^66p$	^2D	^2P	**10**	**6**	9.25E-03	8.50E-03
				6	4	8.53E-03	7.80E-03 D
				4	2	9.20E-03	8.30E-03 D
				4	4	9.26E-04	8.70E-04 D
$3p^64d$	$3p^67p$	^2D	^2P	**10**	**6**	2.89E-03	2.80E-03
				6	4	2.61E-03	2.50E-03 D
				4	2	2.86E-03	2.90E-03 D
				4	4	2.90E-04	2.80E-04 D
$3p^64d$	$3p^68p$	^2D	^2P	**10**	**6**	1.55E-03	1.50E-03
				6	4	1.40E-03	1.40E-03 D
				4	2	1.53E-03	1.50E-03 D
				4	4	1.55E-04	1.50E-04 D
$3p^64d$	$3p^69p$	^2D	^2P	**10**	**6**	9.55E-04	9.20E-04
				6	4	8.63E-04	8.30E-04 D
				4	2	9.48E-04	9.10E-04 D
				4	4	9.58E-05	9.50E-05 D
$3p^64d$	$3p^64f$	^2D	^2F	**10**	**14**	9.14E-04*	8.90E-04
				6	8	9.16E-04*	8.90E-04 D'
				6	6	6.11E-05*	5.90E-05 D'
				4	6	8.51E-04*	8.30E-04 D'
$3p^64d$	$3p^65f$	^2D	^2F	**10**	**14**	2.03E-02	2.00E-02
				6	8	2.03E-02	2.00E-02 D'
				6	6	1.35E-03	1.30E-03 D'
				4	6	1.89E-02	1.90E-02 D'
$3p^64d$	$3p^66f$	^2D	^2F	**10**	**14**	1.45E-02	1.40E-02
				6	8	1.45E-02	1.40E-02 D'
				6	6	9.68E-04	9.30E-04 D'
				4	6	1.36E-02	1.30E-02 D'
$3p^64d$	$3p^67f$	^2D	^2F	**10**	**14**	9.67E-03	8.80E-03
				6	8	9.67E-03	8.80E-03 D'
				6	6	6.45E-04	5.90E-04 D'
				4	6	9.03E-03	8.20E-03 D'

Çizelge 4.5 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İstatiksel Ağırlık i	İstatiksel Ağırlık s	Bu Çalışma WBEPMT	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark. 2010)	
$3p^6 4d$	$3p^6 8f$	^2D	^2F	**10**	**14**	6.62E-03	6.00E-03	
				6	8	6.62E-03	6.00E-03	D'
				6	6	4.41E-04	4.00E-04	D'
				4	6	6.17E-03	5.60E-03	D'
$3p^6 5s$	$3p^6 5p$	^2S	^2P	**2**	**6**	4.50E-02	4.60E-02	
				2	2	4.50E-02	4.50E-02	D
				2	4	4.50E-02	4.60E-02	D
$3p^6 5s$	$3p^6 7p$	^2S	^2P	**2**	**6**	1.01E-03*	1.40E-03	
				2	2	1.03E-03*	1.40E-03	D
				2	4	1.01E-03*	1.40E-03	D
$3p^6 5s$	$3p^6 8p$	^2S	^2P	**2**	**6**	6.21E-04*	5.90E-04	
				2	2	6.33E-04*	5.90E-04	D
				2	4	6.15E-04*	5.90E-04	D
$3p^6 5s$	$3p^6 9p$	^2S	^2P	**2**	**6**	4.40E-04*	3.20E-04	
				2	2	4.50E-04*	3.20E-04	D
				2	4	4.35E-04*	3.20E-04	D
$3p^6 5p$	$3p^6 6s$	^2S	^2P	**2**	**6**	4.80E-02*	4.80E-02	
				2	2	1.60E-02	1.60E-02	D
				4	2	3.20E-02	3.20E-02	D

Çizelge 4.6 Potasyum atomunda kuantum kusur orbital teori kullanılarak hesaplanan geçiş olasılıkları ($x10^8$ *Hz*)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark. 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	QDOT	
$3p^6 3d$	***$3p^6 5p$***	***^2D***	***^2P***	**10**	**6**	1.54E-02	1.50E-02
				6	4	1.39E-02	1.40E-02 D
				4	2	1.54E-02	1.50E-02 D
				4	4	1.54E-03	1.50E-03 D
$3p^6 3d$	***$3p^6 6p$***	***^2D***	***^2P***	**10**	**6**	5.24E-03	4.10E-03
				6	4	4.74E-03	3.70E-03 D
				4	2	5.20E-03	4.10E-03 D
				4	4	5.26E-04	4.10E-04 D
$3p^6 3d$	***$3p^6 7p$***	***^2D***	***^2P***	**10**	**6**	2.54E-03	1.90E-03
				6	4	2.30E-03	1.70E-03 D
				4	2	2.49E-03	1.90E-03 D
				4	4	2.55E-04	1.90E-04 D
$3p^6 3d$	***$3p^6 8p$***	***^2D***	***^2P***	**10**	**6**	1.42E-03	1.10E-03
				6	4	1.29E-03	9.60E-04 D
				4	2	1.39E-03	1.10E-03 D
				4	4	1.43E-04	1.10E-04 D
$3p^6 3d$	***$3p^6 4f$***	***^2D***	***^2F***	**10**	**14**	1.95E-01	1.50E-01
				6	8	1.95E-01	1.50E-01 D
				6	6	1.30E-02	1.00E-02 D
				4	6	1.81E-01	1.50E-01 D
$3p^6 3d$	***$3p^6 5f$***	***^2D***	***^2F***	**10**	**14**	7.65E-02	6.60E-02
				6	8	7.66E-02	6.60E-02 D'
				6	6	5.10E-03	4.40E-03 D'
				4	6	7.14E-02	6.20E-02 D'
$3p^6 3d$	***$3p^6 6f$***	***^2D***	***^2F***	**10**	**14**	3.88E-02	3.50E-02
				6	8	3.88E-02	3.50E-02 D
				6	6	2.59E-03	2.40E-03 D
				4	6	3.62E-02	3.30E-02 D
$3p^6 3d$	***$3p^6 7f$***	***^2D***	***^2F***	**10**	**14**	2.26E-02	2.10E-02
				6	8	2.27E-02	2.10E-02 D
				6	6	1.51E-03	1.40E-03 D
				4	6	2.11E-02	2.00E-02 D
$3p^6 3d$	***$3p^6 8f$***	***^2D***	***^2F***	**10**	**14**	1.45E-02	1.40E-02
				6	8	1.45E-02	1.40E-02 D
				6	6	9.64E-04	9.20E-04 D
				4	6	1.35E-02	1.30E-02 D
$3p^6 4s$	***$3p^6 4p$***	***^2S***	***^2P***	**2**	**6**	3.62E-01	3.85E-01
				2	2	3.59E-01	3.82E-01 B+
				2	4	3.64E-01	3.87E-01 B+
$3p^6 4s$	***$3p^6 5p$***	***^2S***	***^2P***	**2**	**6**	2.25E-02	1.24E-02
				2	2	2.25E-02	1.24E-02 C
				2	4	2.25E-02	1.24E-02 C

Çizelge 4.6 Devam

İlk Seviye (i)	Son Seviye (s)	Terimler i	Terimler s	İstatiksel Ağırlık i	İstatiksel Ağırlık s	Bu Çalışma QDOT	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark. 2010)
3p^{6}4p	***3p^{6}5s***	***^{2}P***	***^{2}S***	**6**	**2**	2.87E-01	2.40E-01
				2	2	9.64E-02	7.90E-02 C
				4	2	1.90E-01	1.56E-01 C
3p^{6}4p	***3p^{6}6s***	***^{2}P***	***^{2}S***	**6**	**2**	7.09E-02	8.01E-02
				2	2	2.62E-02	2.72E-02 C
				4	2	5.09E-02	5.40E-02 C
3p^{6}4p	***3p^{6}7s***	***^{2}P***	***^{2}S***	**6**	**2**	2.85E-02	3.69E-02
				2	2	1.59E-02	1.23E-02 C
				4	2	1.89E-02	2.46E-02 C
3p^{6}4d	***3p^{6}6p***	***^{2}D***	***^{2}P***	**10**	**6**	8.76E-03	8.50E-03
				6	4	7.91E-03	7.80E-03 D
				4	2	8.10E-03	8.30E-03 D
				4	4	8.78E-04	8.70E-04 D
3p^{6}4d	***3p^{6}7p***	***^{2}D***	***^{2}P***	**10**	**6**	3.11E-03	2.80E-03
				6	4	2.81E-03	2.50E-03 D
				4	2	3.09E-03	2.90E-03 D
				4	4	3.11E-04	2.80E-04 D
3p^{6}4d	***3p^{6}8p***	***^{2}D***	***^{2}P***	**10**	**6**	1.71E-03	1.50E-03
				6	4	1.54E-03	1.40E-03 D
				4	2	1.70E-03	1.50E-03 D
				4	4	1.71E-04	1.50E-04 D
3p^{6}4d	***3p^{6}4f***	***^{2}D***	***^{2}F***	**10**	**14**	9.20E-04	8.90E-04
				6	8	9.22E-04	8.90E-04 D'
				6	6	6.15E-05	5.90E-05 D'
				4	6	8.57E-04	8.30E-04 D'
3p^{6}4d	***3p^{6}5f***	***^{2}D***	***^{2}F***	**10**	**14**	2.61E-02	2.00E-02
				6	8	2.61E-02	2.00E-02 D'
				6	6	1.74E-03	1.30E-03 D'
				4	6	2.44E-02	1.90E-02 D'
3p^{6}4d	***3p^{6}6f***	***^{2}D***	***^{2}F***	**10**	**14**	1.71E-02	1.40E-02
				6	8	1.71E-02	1.40E-02 D'
				6	6	1.14E-03	9.30E-04 D'
				4	6	1.60E-02	1.30E-02 D'
3p^{6}5s	***3p^{6}5p***	***^{2}S***	***^{2}P***	**2**	**6**	4.56E-02	4.60E-02
				2	2	4.56E-02	4.50E-02 D
				2	4	4.56E-02	4.60E-02 D
3p^{6}5p	***3p^{6}6s***	***^{2}S***	***^{2}P***	**6**	**2**	4.08E-02	4.80E-02
				2	2	1.93E-02	1.60E-02 D
				4	2	3.86E-02	3.20E-02 D
3p^{6}5p	***3p^{6}7s***	***^{2}S***	***^{2}P***	**6**	**2**	1.69E-02	1.70E-02
				2	2	5.44E-03	5.60E-03 D
				4	2	1.09E-02	1.10E-02 D

Çizelge 4.6 Devam

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ralchenko ve ark. 2010)
(i)	(s)	i	s	i	s	QDOT	
3p^{6}5p	***3p^{6}9s***	***^{2}S***	***^{2}P***	**6**	**2**	5.95E-03	5.10E-03
				2	2	1.51E-03	1.70E-03 D
				4	2	3.96E-03	3.40E-03 D
3p^{6}5p	***3p^{6}10s***	***^{2}S***	***^{2}P***	**6**	**2**	3.80E-03	3.30E-03
				2	2	1.27E-03	1.10E-03 D
				4	2	2.53E-03	2.20E-03 D

4.1.4. Rubidyum atomunda hesaplamalar

Otuz yedi elektrona sahip rubidyum atomunda elektrik dipol geçişler için geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) kullanılarak hesaplanmıştır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride geçiş olasılıklarının hesaplanması için gereken parametrelerin belirlenmesinde enerji ifadeleri için literatürde ki deneysel enerji verileri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri için sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) ve relativistik olmayan Hartree-Fock (NRHF) yöntemleri kullanılmıştır. Bu parametreler kullanılarak elde edilen elektrik dipol geçiş olasılıkları Çizelge 4.7'de verilmiştir. Çizelgede WBEPMT için verilen sütunda NRHF yöntemiyle belirlenerek hesaplanan geçiş olasılığı değerleri yıldız üst indisi ile belirtilmiştir, diğer sonuçlar ise NCA dalga fonksiyonları ile belirlenen sonuçları göstermektedir. Hesaplamalarda hem multiplet hem de ince yapı seviyeleri arasındaki geçişler için sonuçlar verilmiştir. Rubidyum atomu için en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile belirlenen geçiş olasılığı sonuçları Çizelge 4.7' de Sansonetti'nin (2006) sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır.

Çizelge 4.7 Rubidyum atomunda geçiş olasılıkları ($x10^8$ *Hz*)

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık		Bu Çalışma	
(i)	(s)	i	s	i	s	WBEMPT	SANSONETTİ (2006)
$4p^6 5s$	$4p^6 6p$	^2S	^2P	2	2	1.63E+6*	1.50 E + 6
				2	4	1.57E+6*	1.77 E + 6
$4p^6 5s$	$4p^6 7p$	^2S	^2P	2	2	1.92E+5	2.89 E + 5
				2	4	4.32E+5*	3.96 E + 5
$4p^6 5s$	$4p^6 8p$	^2S	^2P	2	2	1.05E+5	8.91 E + 4
				2	4	2.10E+5*	1.37 E + 5
$4p^6 5s$	$4p^6 9p$	^2S	^2P	2	2	5.65E+4	3.84 E + 4
				2	4	2.56E+4	6.40 E + 4
$4p^6 5s$	$4p^6 10p$	^2S	^2P	2	2	3.20E+4	2.01 E + 4
				2	4	1.36E+4	3.38 E + 4
$4p^6 5s$	$4p^6 11p$	^2S	^2P	2	2	1.91E+4	1.27 E + 4
				2	4	4.74E+4*	2.51 E + 4
$4p^6 5s$	$4p^6 12p$	^2S	^2P	2	2	1.18E+4	6.98 E + 3
				2	4	4.64E+4*	1.49 E + 4
$4p^6 5s$	$4p^6 13p$	^2S	^2P	2	2	7.68E-05	-
				2	4	2.59E-05	-
$4p^6 5s$	$4p^6 14p$	^2S	^2P	2	2	5.15E-05	-
				2	4	1.55E-05	-
$4p^6 5s$	$4p^6 15p$	^2S	^2P	2	2	3.57E-05	-
				2	4	9.98E-06	-
$4p^6 5s$	$4p^6 16p$	^2S	^2P	2	2	2.54E-05	-
				2	4	6.13E-06	-
$4p^6 5s$	$4p^6 17p$	^2S	^2P	2	2	1.84E-05	-
				2	4	3.97E-06	-
$4p^6 5s$	$4p^6 18p$	^2S	^2P	2	2	1.31E-05	-
				2	4	2.19E-06	-
$4p^6 5s$	$4p^6 19p$	^2S	^2P	2	2	9.61E-06	-
				2	4	1.43E-06	-
$4p^6 5s$	$4p^6 20p$	^2S	^2P	2	2	7.29E-06	-
				2	4	9.12E-07	-
$4p^6 5p$	$4p^6 6s$	^2P	^2S	6	2	2.27E-01	-
				2	2	7.73E-02	-
				4	2	1.49E-01	-
$4p^6 5p$	$4p^6 7s$	^2P	^2S	6	2	1.40E-01	-
				2	2	4.83E-02	-
				4	2	9.23E-02	-
$4p^6 5p$	$4p^6 8s$	^2P	^2S	6	2	7.55E-02	-
				2	2	2.62E-02	-
				4	2	4.92E-02	-
$4p^6 5p$	$4p^6 9s$	^2P	^2S	6	2	4.03E-02	-
				2	2	1.42E-02	-
				4	2	2.62E-02	-

4.2 Tartışma

Çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerin, özellikle yüksek uyarılmış seviyelerine ait geçiş olasılıkları gibi spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde literatürde önemli eksiklikler bulunmaktadır. Saf teorik yöntemler tarafından verilen sonuçların birçoğu yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçişlerden ziyade düşük uyarılmış seviyeler arasındaki geçişleri içermektedir. Bu çalışmada en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori kullanılarak lityum, sodyum, potasyum ve rubidyum gibi alkali sistemlerde elektrik dipol geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar literatürdeki verilerle karşılaştırılmış ve oldukça iyi bir uyum elde edilmiştir.

Geçiş olasılıklarının belirlenebilmesi için söz konusu seviyelere ait dalga fonksiyonlarının oluşturulması gerekir. Saf teorik yöntemlerde dalga fonksiyonları oluşturulurken özellikle uyarılmış ve yüksek uyarılmış seviyeler için çok sayıda konfigürasyon ve orbital baz fonksiyonu hesaplamalara dahil edilmelidir. Çok sayıda konfigürasyonla ve orbital baz fonksiyonuyla çalışmak hesaplamaları oldukça karmaşık hale getirir. Teknolojik ve bilgisayar sistemlerindeki gelişmelerle birlikte bu karmaşıklık kısmen giderilse de bilinen saf teorik yöntemlerin birçoğu yüksek uyarılmış seviyelerden ziyade düşük uyarılmış seviyelere ait sonuçlar içermektedir. Hem en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori hem de kuantum kusur orbital teori yarı deneysel yöntemlerdir. Gerekli parametrelerin belirlenmesinde deneysel enerji verilerinin hassasiyeti geçiş olasılığı hesaplamalarındaki hassasiyeti doğrudan etkilemektedir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride geçiş olasılıklarının hesaplanması için Z^*, n^* ve l^* parametrelerinin belirlenmesi yeterlidir. Bu parametreler deneysel enerjiler ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri kullanılarak belirlenir. Bu nedenle bu yöntemle elde edilen sonuçların hassasiyeti deneysel enerji değerlerine ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerine bağlıdır. Modern teknolojik araçlarla daha hassas yeni enerji değerleri ölçüldükçe sonuçların da değişebileceği açıktır. Yine aynı şekilde daha doğru beklenen değerlerin belirlenmesi en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride sonuçları değiştirebilecektir. Kuantum kusur orbital teori de geçiş olasılıklarının belirlenmesi için $n^*\delta$ ve λ parametrelerinin belirlenmesi gerekir. Bu parametreler deneysel enerji verileri kullanılarak elde edilebilmektedir.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasıyla lityum, sodyum, potasyum ve rubidyum gibi bazı alkali atomlarda uyarılmış ve yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları yarı deneysel yöntemlerin kullanıldığı hesaplama programı kullanılarak hesaplanmış ve elde edilen sonuçların literatürde bulunan sonuçlarla oldukça uyumlu olduğu gözlenmiştir. Yarı deneysel yöntemlerle uyarılmış ve yüksek uyarılmış seviyeleri çalışmak saf teorik yöntemler kadar karmaşık değildir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori deneysel enerji değerlerini ve yarıçaplara ait beklenen değerleri kullanarak geçiş olasılıkları gibi spektroskopik parametreleri diğer yöntemlere göre daha basit bir hesaplama süreci içerisinde belirleyen yöntemlerdir. 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 olduğu söylenebilir. Bundan sonraki çalışmalarda, hesaplanan geçiş olasılıklarının sonuçlarını etkileyen özellikle seviyelere ait yarıçapların daha hassas olarak belirlenmesinin üzerinde durulması ve bu tez çalışmasında kullanılan yarı deneysel yöntemlerin başka çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlere uygulanması amaçlanmaktadır.

KAYNAKLAR

Aeschliman, D.P., 1981, Measurements of relative transition probabilities of ns-4p, nd-4p, and nf-3d transitions in neutral potassium, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 25(3), 221-232.

Ali, M.A., 1971, Electric Quadrapole Transition Probability in the Sodium and Potassium Sequences, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 11(11), 1611- 1619.

Ateş, Ş., 2010, Çok Elektronlu Sistemlerde Atomik Yapı Hesaplamaları, Doktora Tezi, *Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya, 80-89.

Barrientos, C., Martin, I., 1989, Core-Polarization Effects in Subordinate Series of the Alkali Atoms, *Can. J. Phys*, 67, 996-1001.

Bates, D.R., Damgaard, A., 1949, The Calculation of the Absolute Strengths of Spectral Lines, *Phil.Trans. R. Soc*. A, 242, 101-122.

Berends, R.B., Kedzierski, W., Atkinson, J.B., Krause, L., 1988, The radiative lifetimes of the potassium 5P, 6P and 7P states, *Spectrochimica Acta*, 43, 1069-1073.

Bieron, J., Fischer, C.F., Godefroid, M., 2002, Hyperfine-structure calculations of excited levels in neutral scandium, *Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics*,15, 3337-3345.

Brandus, L., 1983, Calculation of Transition Probabilities and Lifetimes for Lithium Atom, *Revue Roumaine de Physique*, 28(7), 595-600.

Caliebe, E., Niemax, K., 1979, Oscillator strengths of the principal series lines of Rb, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 12(2), 45-51.

Caves, T.C., Dalgarno, A., 1972, Model Potential Calculations of Lithium Transitions, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 12(11), 1539-1552.

Cowan, R.D., 1981. The Theory of Atomic Structure and Spectra. University of California Pres, *Berkeley*, 403-413.

Çelik, G., 2005, Çok Elektronlu Atomlarda Elektronik Geçişler. Doktora Tezi, *Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya, 65-71, 96-97.

Çelik, G., 2007**,** The calculation of transition probabilities between individual lines for atomic lithium, *J. Quant. Spect. Radiat. Trans.*, 103, 578-587.

Çelik, G., Ateş, Ş., 2008, Calculations of Transition Probabilities for Some Excited Levels of Na I, *Acta Phys. Pol*. A , 113(6), 1619-1627.

Çelik, G., and Ateş, Ş., 2008, Theoretical Calculations of Transition Probabilities for Individual and Multiplet Lines Between Some Excited Levels of Atomic Potassium, *Can. J. Phys*, 86, 487-494.

Fischer, C.F., Saparov, M., Gaigalas, G., Godefroid, M., 1998, Breit–Pauli energies, transition probabilities, and lifetimes for 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, $4s^2$l levels of the lithium sequence, Z= 3–8, *At. Data. and Nucl. Data Tabl*, 70, 119-134.

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

Głódź, M., Huzandrov , A., Safronova, M.S., Sydoryk, I., Szonert, J., Klavins , J., 2008, Experimental and theoretical study of the *nf*-level lifetimes of potassium, *Phys. Rev. A 77*, 022503-1, 022503-8

Gómez, E., Baumer, F., Lange, A.D., Sprouse, G.D., Orozco, L.A., 2005, Lifetime Measurement of the 6s Level of Rubidium, *Physical Review A*, 72, 012502-1, 012502-5

Gounand, F., Hugon, M., Fournier, P.R., 1980, Radiative lifetimes of highly excited states in rubidium, *J.Physique, France*, 41, 119-121.

Ham, F. S., 1955, Seitz, F., and Turnbull D. (ed), Solid State Physics, Academic Press, *NewYork*, 127-132.

Hamdi, R., Nessib, N.B., 2005, Electric Dipole Transition Probabilities in Al IV and Al V ions, *Mem.S.A.It*, 7, 228-229.

Hart, D.J., Atkinson, J.B., 1986, Lifetimes of some excited S and D states of potassium, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics Create an alert RSS this journal*, 19(1), 43-49.

Hawkins, W.B., 1969, Rubidium Transition Probabilities for Optical Pumping, *Phys. Rev*, 182, 39–42.

Kim, K.Y., 1998, Electron-impact ionization cross section of rubidium, *Phys. Rev. A*, 57, 246–254.

Krishnan, U., Stumpf, B., 1992, Calculated electron excitation cross sections for excited state-excited state transitions in alkali atoms, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 51(1), 151-169.

Kuli-Zade, C.M., 1995, Atom Spektroskopisinin Temelleri, Tektunalı, H.G, *İstanbul Ün. Yayınları*, 59-72, 149-166.

Langhoff, S.R., Bauschlicher Jr, C.W., and Partridge, H., 1985, Theorical transition probabilities between the lowest ^{2}S, ^{2}P and ^{2}D states of Na, K, Rb and Cs, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys*, 18, 13-21.

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*, 254, 161-170.

Lindgrad, A., 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 $^2P^o$ and 5p $^2P^o$ levels and calculation of transition probabilities in Na I, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 27, 953-4075.

Martin, I. and Simons, G., 1975, New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals II. Atomic Photoionization Cross Sections, *J. Chem. Phys*, 62, 4799-4801

Martin, I., Kawoswski, J., Diercksen G.H.F., Barrientos, C., 1993, Transition probabilities in the lithium sequence, *Astronomy and Astrophysics Supplement Series*, 100, 595-605.

Martin, I., Lavin, C., Barrientos, C., 1991 Systematic Trends Along the Potassium Sequence: Study of ns^2S-mp^2P Transitions, *Can. J. Phys*, 69, 1273-1283.

Martin, I., Simons, G., 1976, New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals III. The Be Isoelectronic Sequence, *Mol. Phys*, 32(4), 1017-1025.

Ou, L., Wang, Z., Li, B., 1999, Oscillator Strengths for $2\ ^2S - n^2P$ Transition of the Lithium Isoelectric Sequence, *Europan Physical Journal*, 5, 173-177.

Ralchenko,Y., Jou, F.C., Kelleher,D.E., Kramida, A. E., Musgrove, A., Reader, J., Wiese, W. L., Olsen, K., 2010, *NIST Atomic Spectra Database* (version 3.0.1) URL:http://physics.nist.gov, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

Safronova, M.S., Williams, C.J., Clark, C.W., 2004, Relativistic many-body calculations of electric-dipole matrix elements, lifetimes and polarizabilities in rubidium, *Physical Review A*, 69, 022509-1, 022509-8

Sansonetti, J.E., 2006, Wavelengths, Transition Probabilities, and Energy Levels for the Spectra of Rubidium, Rb I through Rb XXXVII, , *J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol.* 35,(1), 301-421.

Schunke, H., Kunze, J., 1987, Experimental Determination of the 2s-4d two-photon Transition Probability in Lithium, *Optics Communications*, 64(5), 481-484.

Shabanova, L.N., Khlyustalov, A.N., 1984, Oscillator strengths of lines of the principal series of rubidium , *Opt. Spektrosk*, 56, 205-208.

Sheng, D., Galvan, A.P., Orozco, L.A., 2008, Lifetime measurements of the 5*d* states of rubidium, *Phys. Rev. A*, 78(6), 062506(1-8)

Shortley, G.H., 1935, Line Strengths in Intermediate Coupling, *Phys. Rev*, 47 (4), 295–300.

Siegel, W., Migdalek, J., Kim, Y.K., 1998, Dirac-Fock Oscillator Strengths for E1 Transition in the Isoelectronic Sequence, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 68(2), 303-322.

Simons, G., 1974, New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals I. Atomic Oscillator Strengths, *J. Chem. Phys*, 60(2), 645-650.

Tayal, S.S., Tripathi, A.N., 1981, Glauber generalized oscillator strength for allowed transitions of lithium atom, *J. Chem. Phys*, 75, 4385-4390.

Tekeli, G., 2008, Elektrik Dipol Geçişler. Yüksek Lisans Tezi, *Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya, 48-53.

Weisheit, J.C., Dalgarno, A., 1971, Spin-Orbit and Core-Polarization Effects in Potassium, *APS Journals Phys. Rev. Lett*, 27(11), 701–703.

Wiese, W.L., 1978, Progress in Atomic Spectroscopy, Part B (ed) W. Hanle, H. Kleinpoppen , *New York: Plenum*, 1101-1155.

Wijngaarden, W.A.V., Sagle, J., 1992, Lifetime measurements of rubidium $nD_{3/2}$ (n=6–9) states using the Hanle effect, *Phys. Rev. A*, 45, 1502–1508.

Zheng, N.W., 1986, A New Theoretical Model for Many-Electron Atom and Ion SystemsI, *Chines Science Bulletin*, 31,1238-1242.

Zheng, N.W., 1988, A New Theoretical Model for Many-Electron Atom and Ion Systems III, *Chinese Science Bulletin*, 33, 916-920.

Zheng, N.W., Xin, H.W., 1991, Succesive Ionization Potentials of 4fn Electrons within WBEPM Theory, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 24(6), 1187-1191.

Zheng, N.W., Li, G.S., 1994, Electronegativity - Average Nuclear-Potential of The Valance Electron , J. *Phys Chem-Us* , 98 (15), 3964-3966.

Zheng, N.W., Wang. T., Zhou, T., Sun, Y.J., Su, Y., 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, 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., 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., 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., and Wang, T., 2002, Radiative Lifetimes and Atomic Transition Probabilities for Atomic Carbon and Oxygen, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 143, 231-240.

Zheng, N.W., and Wang, T., 2003, Theoretical Calculation of Transition Probabilities in Neutral Fluorine , *Spectrochimica Acta Part B* , 58, 27-32.

.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Ali Güllüler
Uyruğu : T.C
Doğum Yeri ve Tarihi : Adana, 1982
Telefon : -
Faks : -
e-mail : fizikali@hotmail.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	**Danişment Gazi Lisesi, Seyhan, Adana**	**2000**
Üniversite	:	**Selçuk Üniversitesi, Meram, Konya**	**2006**
Yüksek Lisans	:	**-**	
Doktora	:	**-**	

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**
2006	**Konya Pi-Analitik dershaneleri**	**Fizik Öğretmeni**
2007	**Konya Pi-Analitik dershaneleri**	**Fizik Öğretmeni**
2008	**Adana Toros dershanesi**	**Fizik Öğretmeni**
2009	**Adana Birey dershanesi**	**Fizik Öğretmeni**

YABANCI DİLLER: İngilizce