**T.C.**
**SELÇUK ÜNİVERSİTESİ**
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

# ELEKTRİK DİPOL GEÇİŞLER

**Gökhan TEKELİ**
**YÜKSEK LİSANS TEZİ**
**FİZİK ANABİLİMDALI**
**Konya, 2009**

# ÖZET

**Yüksek Lisans Tezi**

## ELEKTRİK DİPOL GEÇİŞLER

**Gökhan TEKELİ**

**Selçuk Üniversitesi**
**Fen Bilimleri Enstitüsü**
**Fizik Anabilim Dalı**

**Danışman: Yrd. Doç. Dr. Gültekin ÇELİK**

**2009, 80 Sayfa**

**Juri: Prof. Dr. Hamdi Şükür KILIÇ**
**Yrd. Doç. Dr. Erhan AKIN**
**Yrd. Doç. Dr. Gültekin ÇELİK**

Bu çalışmada Bor, Karbon ve bir kez iyonlaşmış Oksijende elektrik dipol osilatör şiddetleri ve Berilyum atomunda elektrik dipol geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) kullanılarak hesaplanmıştır. Seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin belirlenmesinde sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) ve nümerik non-relativistik Hartree-Fock (NRHF) dalga fonksiyonları kullanılmıştır. Gerekli enerji değerleri, literatürdeki deneysel enerji verilerinden alınmıştır. Tüm hesaplamalar hem ince yapı hem de multiplet seviyeler için yapılmıştır. Hesaplanan sonuçlar, literatürle karşılaştırılmış ve iyi bir uyum elde edilmiştir.

**Anahtar Kelimeler:** En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi, elektrik dipol geçiş olasılığı, osilatör şiddeti.

**ABSTRACT**

**M. S. Thesis**

**ELECTRIC DIPOLE TRANSITIONS**

**Gökhan TEKELİ**

**Graduate School of Natural and Applied Sciences**
**Department of Physics**

**Supervisor: Asst. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK**

**2009, 80 Pages**

**Jury: Prof. Dr. Hamdi Şükür KILIÇ**

**Asst. Prof. Dr. Erhan AKIN**

**Asst. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK**

In this study, electric dipole oscillator strengths for Boron atom, Carbon atom and singly ionized oxygen and electric dipole transition probabilities for Beryllium atom have been calculated using the Weakest Bound Electron Potential Model Theory (WBEPMT). Numerical Coulomb Approximation (NCA) and Numeric non-relativistic Hartree-Fock (NRHF) wave functions have been employed in the determination of the expectation values of radii belong to levels. Required energy values are taken from experimental energy data in the literature. All calculations have been done for both individual and multiplet levels. The results calculated have been compared with literature and a good agreement has been obtained.

**Key Words:** Weakest bound electron potential model theory, electric dipole transitions, transition probability, oscillator strength.

# ÖNSÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisan Tezi olarak sunulan bu çalışmada çok elektronlu sistemlerde elektrik dipol geçişleri için geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır.

Bu çalışma süresince bilgi ve tecrübeleriyle bana her konuda yardımcı olan, beni sürekli destekleyen ve yönlendiren danışmanım Sayın Yrd. Doç. Dr. Gültekin ÇELİK'e en içten teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca bu çalışma sırasında benden maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen sevgili aileme, her zaman manevi desteklerimi yanımda hissettiğim Yrd. Doç. Dr. Mehmet ERDOĞAN'a, Yrd. Doç. Dr. Osman Murat ÖZKENDİR'e ve Arş. Grv. Şule ATEŞ'e en içten teşekkürlerimi sunarım.

**Gökhan TEKELİ**

**Konya, 2009**

# İÇİNDEKİLER

**ÖZET**.....i
**ABSTRACT**.....ii
**ÖNSÖZ**.....iii
**İÇİNDEKİLER**.....iv

**1. GİRİŞ** ..... 1

**2. IŞIMALI GEÇİŞLER** ..... 4
2.1 Geçişler ve Einstein Katsayıları ..... 4
2.1.1 Kendiliğinden geçişler ..... 4
2.1.2 Mecburi (uyarılmış) geçişler ..... 5
2.1.3 Soğurma geçişleri ..... 7
2.2 Uyarılmış Hallerin Yaşam Süresi ve Einstein Katsayıları Arasındaki İlişki ... 8
2.3 Elektrik Dipol Geçişleri ..... 14
2.4 Elektrik Dipol Geçişleri İçin Seçim Kuralları ..... 16
2.5 Elektrik Dipol Geçiş Olasılığı ve Osilatör Şiddeti ..... 24
2.5.1 Elektrik dipol geçiş olasılığı ..... 24
2.5.2 Osilatör şiddeti ..... 25
2.6 Radyal Geçiş İntegrali ..... 26
2.7 Tek Elektron Geçişleri ..... 28
2.7.1 LS Gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti ..... 29
2.7.2 LK Gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti ..... 31
2.7.3 JK Gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti ..... 31
2.7.4 JJ Gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti ..... 32
2.8 Fraksiyonel Parantez (Antisimetrikleşme) Katsayısı ..... 33

**3. 3n-j SEMBOLLERİ** ..... 35
3.1 3-j Sembolleri ..... 35
3.1.1 3-j Sembolünün gösterimi ..... 36

3.2 6-j Sembolü ..... 37
3.2.1 6-j Sembolünün gösterimi ..... 38

**4. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLERDE ÇİFTLENİMLER** ..... 39
4.1 LS-Çiftlenimi ..... 39
4.2 JJ-Çiftlenimi ..... 42
4.3 Çiftlenim Şekilleri Arasındaki Dönüşümler ..... 45

**5. EN ZAYIF BAĞLI ELEKTRON POTANSİYEL MODEL TEORİ (WBEPMT)** ..... 48

**6. ARAŞTIRMA, SONUÇLARI VE TARTIŞMA** ..... 54
6.1 Araştırma ve Sonuçları ..... 54
6.2 Tartışma ..... 72

**KAYNAKLAR** ..... 75

# 1. GİRİŞ

Atomların temel ya da uyarılmış seviyedeki atomik enerji değeri bilinirse, fiziksel ve kimyasal açıdan birçok özelliği belirlenebilir. Astrofizik, plazma fiziği, termonükleer füzyon araştırmaları, laserlerle izotop ayırma ve laser sistemlerinin geliştirilmesi gibi birçok alanda atomların uyarılmış seviyedeki kalma süreleri, geçiş olasılıkları ve osilatör şiddeti gibi spektroskopik özellikleri oldukça önemlidir. Geçiş olasılıkları atomik spektroskopide belki de en önemli parametredir. Geçiş olasılığı değerleri, sıcaklık ve atomik konsantrasyon gibi birçok kritik ölçümün doğruluğunu test etmek ve analizini yapmak için kullanılan geçişlerin seçiminde önemli rol oynar. Güneş ışığından bize ulaşan soğurma çizgilerinin ince yapı çizgileri arasındaki geçiş olasılıkları uzak yıldızlarla ilgili çok önemli bilgiler içerir. Ayrıca uzak gezegenlerde bulunan madde miktarı, güçlü olarak geçiş olasılıklarına bağlıdır. Geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti atomik yapı hesaplamaları ve spektroskopide hem atomik özelliklerin belirlenmesinde hem de deneysel verilerin yorumlanmasında önemli bir yol oynamaktadır. Çok elektronlu sistemler için geçiş olasılıklarının hesaplanması ya da ölçülmesi atom fiziğinde çözülmesi zor olan bir problemdir. Geçiş olasılıklarının deneysel olarak belirlenmesinde halen birçok zorlukla karşılaşılmakta ve yapılan belirli ölçümler çoğu zaman düşük uyarılmış seviyeler içeren geçişlerle sınırlı kalmaktadır. Çok elektronlu atomik ya da iyonik sistemlerde özellikle yüksek uyarılmış seviyelerde enerji seviyeleri ile ilgili teorik hesaplamalar elektronların ayırt edilemezliğinden ve uyarılmış seviyeleri doğru tanımlayabilmek için çok sayıda konfigürasyon ve orbital baz set fonksiyonu kullanmak gerektiğinden her zaman zor olmuştur. Bu zorluğun üstesinden gelebilmek için yeni yöntemlerin geliştirilmesi birçok araştırmacı tarafından yoğun bir şekilde çalışılmaktadır. Bu doğrultuda literatürde geçiş olasılıklarının hesaplanmasında kullanılan, Kuantum Kusur Yöntemleri (Bates ve Damgaard 1949, Martin ve ark. 1991, Kostelecky ve Nieto 1985), Sayısal Coulomb Yaklaşımı (NCA) (Lindgard ve Nielsen 1977, Simons 1974), Hartree-Fock Yöntemleri, (Weiss 1967, Chang ve Tang 1990, Fischer 1975, Ynnerman ve Fischer 1995), Konfigürasyon Etkileşmesi Yöntemleri, (Mallow ve Bagus 1976, Luken ve Sinanoğlu 1976, Migdalek ve Banasinska 1988, Sanders ve Knight 1989, Quinet ve Biemont 1993, Chen 1994, Weiss 1995, Hibbert 1975), R-

Matrix Yöntemleri (Bell ve ark. 1990) ve En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori (WBEPMT) (Zheng 1986, 1987, 1988-a-b) gibi birçok yöntem geliştirilmiştir.

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT), çok elektronlu atomik ya da iyonik sistemlerde çeşitli fiziksel parametrelerin hesaplanmasında oldukça duyarlı sonuçlar verebilmektedir (Çelik ve ark. 2006-a-c, 2007). Bu teoriye göre, çok elektronlu atomik ya da iyonik sistemlerde elektronik hareketi tanımlamak için Zheng yeni bir potansiyel model önermiştir (Zheng 1986, 1987). Bu modelde potansiyel teorinin bu yeni biçimi kullanılarak deneysel enerji değerlerinden ya da iyonlaşma enerjilerinden belirlenen bazı parametrelerle elektronik radyal dalga fonksiyonları Lagueere polinomlarına bağlı olarak ifade edilebilmektedir. Çok elektronlu atomların tam dalga fonksiyonları, enerji seviyeleri, geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri Zheng tarafından önerilen analitik radyal fonksiyonlara bağlı olarak hesaplanabilmektedir (Wen ve ark. 1991). En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi (WBEPMT), verilen bir sistemdeki elektronları sisteme en zayıf bağlı elektron ve sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak ayırma temeline dayanır. Bu teori kullanılarak çok sayıda valans elektronuna sahip atomik ya da iyonik sistemlerde, geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve yaşam süreleri gibi fiziksel parametre değerleri, karmaşık ve uzun zaman alan hesaplama prosedürü içeren yöntemler kadar doğru sonuçlar verebilmektedir (Zheng ve ark. 1999, 2000-a-d, Çelik ve ark 2006-a-c, 2007).

Bu çalışmada karmaşık olmayan bir hesaplama sürecine sahip en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak Bor, Berilyım, Karbon ve bir kez iyonlaşmış Oksijen gibi çok elektronlu sistemlerde hem düşük hem de yüksek uyarılmış seviyelere ait geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri gibi spektroskopik parametreler duyarlı olarak hesaplanmıştır.

Çalışmanın 2. bölümünde ışımalı geçişler ele alınarak, elektrik dipol geçişleri ve elektrik dipol seçim kuralları, elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri, radyal geçiş integrali ve fraksiyonel parantez katsayısı ile ilgili bilgiler verilmiştir.

3. bölümde matris elemanlarının hesaplanmasında karşılaşılan 3-j ve 6-j sembolleri özellikleri hakkında bilgiler verilmiştir.

4. bölümde çok elektronlu sistemlerde çiftlenim şekilleri ve bu çiftlenim şekilleri arasındaki dönüşümler hakkında bilgiler verilmiştir.

5. bölümde en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) ile ilgili bilgiler verilmiştir.

6. bölümde en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak Karbon ve Bor atomunda bazı ince yapı seviyeleri arasındaki osilatör şiddetleri, Berilyum atomunda elektrik dipol geçiş olasılıkları ve bir kez iyonlaşmış Oksijenin bazı seviyeleri arasındaki osilatör şiddetleri hesaplanarak literatürdeki deneysel ve teorik yöntemlerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

# 2. IŞIMALI GEÇİŞLER

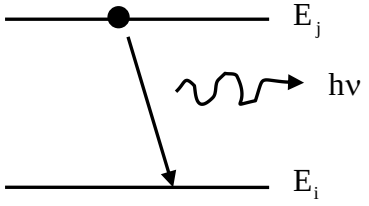
## 2.1 Geçişler ve Einstein Katsayıları

1916 yılında Einstein, tesadüfî süreçlerin istatistik bağlı olmaması prensibine göre ışıma ve soğurmanın geçiş olasılıkları teorisini vermiştir. Bu teoriye göre atomun radyasyon soğurması ve yayınlaması ani süreçler olup, birbirinden bağımsız olarak meydana gelir. Atomun radyasyon soğurması ve yayınlaması olaylarının esas karakteristiği, onlara karşılık gelen geçişlerin olasılığıdır (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995).

Sistemin $j$ ve $i$ gibi herhangi iki enerji seviyesi arasındaki geçişler esnasında belirli bir monokromatik foton enerjisi yayınlanır veya soğurulur. Eğer $j$ seviyesinin enerjisi $i$ seviyesinin enerjisinden büyükse, yani $E_j > E_i$ ise, $j \rightarrow i$ geçişinde $h\nu_{ji}$ foton enerjisi yayınlanır, $i \rightarrow j$ geçişinde ise foton enerjisi soğurulur. Einstein'e göre $j$ seviyesinden $i$ seviyesine kendiliğinden ve mecburi (uyarılmış) olmak üzere iki tür geçiş mümkündür. Ayrıca bu iki geçiş dışında bir üçüncü geçiş olarak soğurma geçişlerinden bahsedilebilir.

### 2.1.1 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 süreçler olduğundan verilen bir hacim elemanındaki çeşitli atomlar çeşitli anlarda ve birbirlerine bağlı olmayarak enerji yayınlarlar.




**Şekil 2.1:** Kendiliğinden geçişler

Kendiliğinden yayınlama her yön için aynı olasılıkla ortaya çıkar. Bu nedenle 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 durumlarına göre (uyarılmış enerji seviyelerine göre) dağılmıştır. Birim zamanda, birim hacimde $j \to i$ kendiliğinden geçişlerin sayısı $Z_{ji}$ üst $j$ seviyesinde birim hacimdeki atomların sayısı $N_j$ ile orantılı olacaktır. Yani,

$$Z_{ji}^{ken} = A_{ji} N_j \tag{2.1}$$

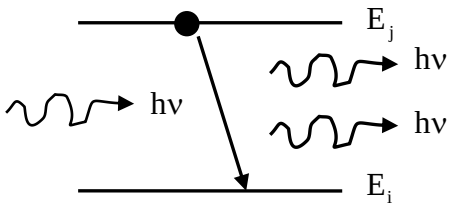
ifadesi yazılabilir. Burada orantı katsayısı olarak $A_{ji}$, $j \to i$ kendiliğinden geçişin Einstein katsayısı olarak adlandırılır. Denk. (2.1)'den kendiliğinden geçiş olasılığı,

$$A_{ji} = \frac{Z_{ji}^{ken}}{N_j} \tag{2.2}$$

şeklinde yazılabilir. Denk. (2.2)'den görüldüğü gibi $j \to i$ kendiliğinden geçiş olasılığı $A_{ji}$, birim zamanda, birim hacimde uyarılmış $j$ halin bulunan $E_j$ enerjili bir atoma karşılık gelen, kendiliğinden yayınlanan $\nu_{ji}$ frekanslı fotonların sayısıdır. Kendiliğinden geçişlerin Einstein katsayısının birimi zaman biriminin tersi $s^{-1}$ olacaktır (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995).

### 2.1.2 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 mecburi geçişlere neden olan bir dış elektromanyetik radyasyonun şiddeti, geçiş oluştuktan sonra artar.




**Şekil 2.2:** Mecburi (uyarılmış) geçişler

Yani radyasyon yayınlayan atomların enerjisi, dış elektromanyetik radyasyon ile aynı frekans, faz ve yönelimli bir fotona dönüşür. Mecburi yayınlamanın bu özelliği, elektromanyetik dalgaların şiddetlendirilmesinde kullanılır.

Doğal olarak; birim hacimde, birim zamanda $j \to i$ mecburi geçişlerinin sayısı, $j$ seviyesindeki atomların sayısı $N_j$ ve dış radyasyon alanının hacim yoğunluğu $\rho_{ji}$ ile orantılı olacaktır:

$$Z_{ji}^{mec} = B_{ji} N_j \rho_{ji} \tag{2.3}$$

Burada Denk. (2.3)'ten görüldüğü gibi $B_{ji}$, $j \to i$ mecburi geçişinin Einstein katsayısı, $B_{ji}\rho_{ji}$ ise mecburi geçiş olasılığı Denk.(2.3)'ten $j \to i$ uyarılmış geçişinin Einstein katsayısı ve mecburi geçiş olasılığı için sırasıyla,

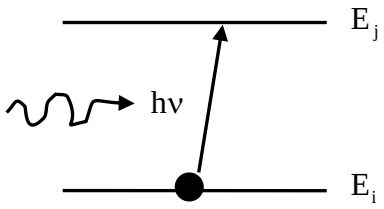
$$B_{ji} = \frac{1}{\rho_{ji}} \cdot \frac{Z_{ji}^{mec}}{N_j} \tag{2.4}$$

$$B_{ji}\rho_{ji} = \frac{Z_{ji}^{mec}}{N_j} \tag{2.5}$$

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

### 2.1.3 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 mecburi bir süreçtir. Dış radyasyon alanı olmazsa soğurma geçişleri meydana gelmez.




**Şekil 2.3:** Soğurma geçişleri

Birim hacimde, birim zamanda $i \rightarrow j$ geçişinde soğurulan fotonların sayısı, $i$ seviyesindeki atomların sayısı $N_i$ ve dış radyasyon alanının spektral yoğunluğu $\rho_{ij}$ ile orantılı olacaktır:

$$Z_{ij}^{soğ} = B_{ij} N_i \rho_{ij} \tag{2.6}$$

Burada,

$$B_{ij} = \frac{1}{\rho_{ij}} \cdot \frac{Z_{ij}^{soğ}}{N_i} \tag{2.7}$$

soğurma için Einstein katsayısı,

$$B_{ij}\rho_{ij} = \frac{Z_{ij}^{soğ}}{N_i} \tag{2.8}$$

ise $i \rightarrow j$ soğurma geçiş olasılığıdır. Görüldüğü gibi $i \rightarrow j$ soğurma geçişi için Einstein katsayısı, birim hacimde, birim zamanda $i$ uyarılmış halinde olan bir atoma ve $\nu_{ji}$ frekansında birim radyasyon yoğunluğuna karşılık gelen $i \rightarrow j$ soğurma

geçişlerinin ($\nu_{ij}$ frekanslı fotonların) sayısıdır. Aynı $i \rightarrow j$ geçişin olasılığı ise birim zamanda, birim hacimde $i$ uyarılmış halinde olan bir atoma karşılık gelen $i \rightarrow j$ geçişlerinin ($\nu_{ij}$ frekansında soğurulan fotonların) sayısıdır (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995). Denk. (2.7) ve Denk. (2.8)'den $B_{ij}$'nin birim yayınlama yoğunluğu başına soğurma olasılığı olduğunun söylenebileceği açıktır.

Soğurulmanın tersi kendiliğinden yayınlama değil, mecburi yayınlamadır. Soğurma ve mecburi yayınlama dış radyasyon alanının yoğunluğuna bağlıdır; fakat kendiliğinden yayınlama ise dış radyasyon alanının yoğunluğuna bağlı değildir. Soğurmada her bir durumda (her bir $i \rightarrow j$ geçişinde) dış radyasyon alanında $\nu_{ji}$ frekanslı fotonların sayısı bir eksilir. Mecburi yayınlamada ise ($j \rightarrow i$ geçişinde) bir artar.

## 2.2 Uyarılmış Hallerin Yaşam Süresi ve Einstein Katsayıları Arasındaki İlişki

$E_j$ enerjili uyarılmış bir $j$ seviyesindeki atom, daha düşük $E_i$ enerjili bir $i$ seviyesine enerjisi

$$h\nu_{ji} = E_j - E_i \tag{2.9}$$

olan bir foton yayarak kendiliğinden ışımalı bir geçiş yapabilir. Bu geçişe karşılık gelen dalga sayısı,

$$\sigma_{ji} = 1/\lambda_{ji} = (E_j - E_i)/hc = \frac{h\nu_{ji}}{hc} = \frac{\nu_{ji}}{c} \tag{2.10}$$

şeklinde verilir. Toplam açısal momentumu $J_i$ olan bir atomda $M_i$ manyetik kuantum sayısının $2J_i + 1$ tane olası değerine karşılık $E_i$ enerjisinin

$$g_i = 2J_i + 1 \tag{2.11}$$

tane dejenere kuantum durumu vardır. Einstein kendiliğinden yayma geçiş olasılığı oranı özel bir $J$ durumunda $i$ enerjili her $g_i$ durumuna geçiş yapan bir atomun birim zaman başına toplam geçiş olasılığı olarak tanımlanır.

$$A_{ji} = \sum_{M_i} a_{ji} \tag{2.12}$$

Burada $a_{ji}$ birim zaman başına geçiş olasılığı olarak ifade edilir. Denk. (2.12)'deki $A_{ji}$, niceliği $M_i$'den bağımsızdır. Bu durum fiziksel olarak geçiş olasılığının koordinat eksenlerinin yöneliminin keyfi seçimine bağlı olmadığını göstermektedir.

Uyarılmış haldeki atomların hangisinin ne zaman uyarıldığına bakılmaksızın hepsinin kendiliğinden yayınlama olasılığı aynıdır. Buna göre, uyarılmış haldeki atomların bu halde bulunma süresi birbirinden farklıdır. Bu nedenle verilen herhangi bir uyarılmış halin süresi denildiğinde, atomların bu kuantum halinde ortalama bulunma süresi söz konusu olur.

Birim hacimde herhangi bir uyarılmış $j$ halindeki atomların sayısının $N_j$ olduğu ve bundan sonra bu seviye için başka bir uyarılmanın söz konusu olmadığını varsayalım. O zaman birim hacimde, birim zamanda $j$ uyarılmış haldeki atomların sayısının bütün kendiliğinden geçişler nedeniyle değişmesi değerce, bu zaman süresi içinde $j$ seviyesinden kendiliğinden geçişlerin sayısına eşit olur. Yani, $j$ durumunda $t$ anında $N_j(t)$ atom varsa $j$ seviyesinden tüm $i$ durumlarına kendiliğinden geçişler için $N_j$'nin değişim hızı,

$$\frac{dN_j(t)}{dt} = -\sum_{i=j-1}^{1} Z_{ji}^{ken} \tag{2.13}$$

olarak ifade edilir. Eğer Denk. (2.1)'i Denk. (2.13)'te yerine yazarsak,

$$\frac{dN_j(t)}{dt} = -\sum_{i=j-1}^{1} A_{ji} N_j(t), \tag{2.14}$$

veya

$$\frac{dN_j(t)}{N_j(t)} = -\left(\sum_{i=j-1}^{1} A_{ji}\right)dt \tag{2.15}$$

ifadesi elde edilir. Eğer,

$$A_j = \sum_{i=j-1}^{1} A_{ji} \tag{2.16}$$

j seviyesi için kendiliğinden geçişlerin toplam olasılığı olduğunu gözönüne alınırsa, Denk. (2.15),

$$\frac{dN_j(t)}{dt} = -A_j N_j(t) \tag{2.17}$$

olarak ifade edilir. Normal uyarılma şartları altında j seviyesine ait her durumda atomların sayısı aynıdır ve bu yüzden spektrum çizgisinin şiddeti (birim zaman başına yayılan enerji)

$$I(t) = hc\sigma_{ji} g_j A_{ji} N_j(t) \tag{2.18}$$

olarak verilir. Burada,

$$g_j A_{ji} = g_j \sum_{M_j} a_{ji} = \sum_{M_j}\sum_{M_j} a_{ji} \tag{2.19}$$

niceliği kendiliğinden yayma geçiş olasılığı olarak ifade edilir. Tüm olası kendiliğinden geçişler için $N_j$'nin toplam değişim oranı

$$\frac{dN_j(t)}{dt} = -N_j(t)\sum_{i=j-1}^{1} A_{ji} \tag{2.20}$$

olarak verilir. Denk. (2.20)'deki toplam; atomun sahip olduğu $E_j$'nin daha düşük enerjili tüm durumları üzerindendir. Diğer uyarılmalar ya da geri uyarılma söz konusu değil ise

$$N_j(t) = N_j(0)e^{-t/\tau_j} \tag{2.21}$$

şeklinde yazılır. Burada $N_j(0)$ ve $N_j(t)$ sırasıyla $t = 0$ ve $t = t$ anlarında $j$ seviyesindeki atomların sayısıdır. Yukarıdaki ifade, herhangi bir $j$ seviyesindeki atomların sayısının kendiliğinden geçişler nedeniyle zamana göre değişimi kanunudur. Denk. (2.21)'de atomun uyarılmış $j$ halindeki yaşam süresi:

$$\tau_j = \frac{1}{A_j} = \frac{1}{\sum_{i=j-1}^{1} A_{ji}} = \left( \sum_{i=j-1}^{1} A_{ji} \right)^{-1} \tag{2.22}$$

olarak verilir (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995). Eğer bu yaşam süresi sonsuz değilse belirsizlik prensibi yardımıyla $j$ seviyesinin sonlu bir genişliği bulunabilir. Burada $\sigma_{ji}$ niceliği spektrum çizgisinin merkezcil dalga sayısını göstermektedir. Geçişler her zaman kendiliğinden olmayabilir. Bir radyasyonla geçiş olma ihtimali vardır. Bu radyasyon alanı izotropik ve kutuplanmamış olarak gözönüne alınır ve $d\sigma$ dalga sayısı bölgesinde birim hacimde $\rho(\sigma)d\sigma$ enerjisine sahip olduğu düşünülür. Eğer $\rho(\sigma)$ spektrum çizgisinin profili üzerinden sabit ise $j \to i$ ayrık geçişine karşılık gelen $\nu_{ji}$ frekansında kendiliğinden ve mecburi yayınlama için, birim hacmin yayınlama gücü sırası ile

$$\varepsilon_{ji}^{ken} = N_j A_{ji} h\nu_{ji} \tag{2.23}$$

$$\varepsilon_{ji}^{mec} = N_j B_{ji} h\nu_{ji} \rho_{ji} \tag{2.24}$$

şeklinde yazılabilir. Böylece, $i \to j$ geçişi için aynı frekansta birim hacmin soğurma gücü,

$$\varepsilon_{ij}^{soğ} = N_i B_{ij} h\nu_{ij} \rho_{ij} \tag{2.25}$$

olarak verilir. Kararlı durumlarda ise

$$\varepsilon_{ji}^{ken} + \varepsilon_{ji}^{mec} = \varepsilon_{ij}^{soğ} \tag{2.26}$$

olmalıdır. Buna göre Denk. (2.23), Denk (2.24) ve Denk. (2.25) Denk. (2.26)'da gözönüne alınırsa,

$$A_{ji} + B_{ji}\rho_{ji} = \frac{N_i}{N_j} B_{ij}\rho_{ij} \tag{2.27}$$

ifadesi elde edilir (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995). Termodinamik denge halinde atomların uyarılmış enerji seviyelerine göre dağılımı,

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{g_j}{g_i} \exp\left(-\frac{h\nu_{ji}}{kT}\right) \tag{2.28}$$

Maxwell-Boltzman formülü ile verilir. Radyasyon hacim yoğunluğu ise

$$\rho_{ji} = \frac{8\pi h\nu_{ji}^3}{c^3} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu_{ji}}{kT}\right) - 1} \tag{2.29}$$

Planck formülü ile verilir. Eğer, Denk. (2.28)'i Denk. (2.27)'de yerine yazarsak,

$$A_{ji} + B_{ji}\rho_{ji} = \frac{g_i}{g_j} B_{ij}\rho_{ji} \exp\left(\frac{h\nu_{ji}}{kT}\right) \tag{2.30}$$

elde edilir. Burada $g_i$ ve $g_j$ sırasıyla i ve j seviyelerinin istatistik ağırlıklarıdır. Radyasyonun hacim yoğunluğu için Denk. (2.30)'dan

$$\rho_{ji} = \frac{A_{ji}}{\frac{g_i}{g_j} B_{ij} \exp\left(\frac{h\nu_{ji}}{kT}\right) - B_{ji}} \tag{2.31}$$

elde verilir. Planck formülünden görüldüğü gibi $T \to \infty$ olduğunda $\rho \to \infty$ olması için Denk. (2.31)'den

$$\left. \frac{g_i}{g_j} B_{ij} \exp\left(\frac{h\nu_{ji}}{kT}\right) - B_{ji} \right|_{T\to\infty} = 0 \tag{2.32}$$

olmalıdır. Buradan,

$$\frac{g_i}{g_j} B_{ij} - B_{ji} = 0 \tag{2.33}$$

veya

$$\frac{B_{ji}}{B_{ij}} = \frac{g_i}{g_j} \tag{2.34}$$

ifadeleri elde edilir. Bu ifadeler, $B_{ji}$ ve $B_{ij}$ katsayıları arasındaki ilişkiyi gösterir. Eğer, Denk. (2.34), Denk. (2.31)'de dikkate alınırsa,

$$\rho_{ji} = \frac{A_{ji}}{\frac{g_i}{g_j} B_{ij} \exp\left(\frac{h\nu_{ji}}{kT}\right) - \frac{g_i}{g_j} B_{ij}} = \frac{A_{ji}}{B_{ij}} \cdot \frac{g_j}{g_i} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu_{ji}}{kT}\right) - 1} \tag{2.35}$$

elde edilir. Denk. (2.29) ile Denk. (2.34)'ün karşılaştırılmasından,

$$A_{ji} = \frac{g_i}{g_j} B_{ij} \frac{8\pi h\nu_{ji}^3}{c^3} \tag{2.36}$$

elde edilir. Denk. (2.34)'ü Denk. (2.36)'da yerine yazarak,

$$A_{ji} = \frac{8\pi h\nu_{ji}^3}{c^3} B_{ji} \tag{2.37}$$

$A_{ji}$ ile $B_{ij}$ arasındaki ilişki elde edilir (Tektunalı ve Kuli-Zade 1995). Uyarılmış durumlarda atomların dağılımı Maxwell-Boltzman dağılımına uyar. Radyasyon alanı ile atomların dengede olduğu spektroskopik kaynaklar çok azdır. Genellikle radyasyon yoğunluğu yeterince küçük olmalıdır ki uyarılmış yayınlama, kendiliğinden yayınlama ile karşılaştırıldığında önemsiz olsun. Aynı zamanda soğurmanın fark edilebilmesi için $N_i$, $N_j$'den çok büyük olmalıdır. Diğer taraftan

laserler de radyasyon yoğunluğu yüksek yansıtıcılı aynalarla arttırılır, fakat optiksel pompalama kullanılarak $N_j \gg N_i$ durumunu sağlamak için soğurma küçük tutulur.

## 2.3 Elektrik Dipol Geçişleri

Bir $\psi$ durumu için $r$'nin ortalama değerinin kuantum mekaniksel eşdeğerinin ifadesi,

$$\langle r \rangle = \langle \psi | r | \psi \rangle \tag{2.38}$$

olarak yazılabilir. Burada $\psi'$ ve $\psi$ gibi farklı iki seviye arasındaki ışımalı geçişlerle ilgilenildiğinden $\psi$'nin zamana bağlı dalga fonksiyonları olarak,

$$\psi = \psi_0 e^{-iEt/h} \tag{2.39}$$

ifadesi kullanılmalıdır. $\psi$ ve $\psi'$ durumları arasındaki geçiş de yayma zamanı boyunca $\langle r \rangle$ nin beklenen değeri,

$$\langle r \rangle = \langle \psi | r | \psi' \rangle = \langle \psi_0 | r | \psi_0' \rangle e^{i(E-E')t/h} \tag{2.40}$$

olarak verilmektedir. Eğer ışıma işlemi $|r|^2$ parametresinin tüm zaman üzerinden ortalaması,

$$|\langle \psi | r | \psi' \rangle|^2 = |\langle \psi_0 | r | \psi_0' \rangle|^2 \tag{2.41}$$

olarak yorumlanırsa, bozunma oranı,

$$a = \frac{4e^2\omega^4}{3c^3h\nu} |\langle \psi_0 | r | \psi_0' \rangle|^2 = \frac{64\pi^4 e^2 \nu^4}{3c^3 h} |\langle \psi_0 | r | \psi_0' \rangle|^2 \tag{2.42}$$

olarak tanımlanabilir. Konum vektörü $r_i$ olan, Bohr yarıçapı $a_0$, birimlerinde ölçülen rankı bir olan, tensör operatörü;

$$\left|r\right|^2 = a_0^2 \sum_q \left|r_q^{(1)}(i)\right|^2 \tag{2.43}$$

olarak yazılabilir. Böyle bir durumda birim zamanda $\gamma' J' M'$ uyarılmış durumundan daha düşük enerjili $\gamma JM$ durumuna kendiliğinden yayma geçiş olasılığı,

$$a = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} \sum_q \left|\left\langle \gamma JM \left| P_q^{(1)} \right| \gamma' J' M' \right\rangle\right|^2 \tag{2.44}$$

olarak verilir (Cowan, 1981). Burada $P_q^{(1)}$ ifadesi,

$$P_q^{(1)} \equiv \sum_{i=1}^{N} r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^{N} r_i C_q^{(1)}(1) \tag{2.45}$$

şeklinde olup, $-ea_0$ birimlerinde atomun dipol momentini ifade etmektedir.

Elektrik dipol matris elemanının en çok kullanılan üç şekli,

$$\left\langle \gamma JM \left| \sum_i r(i) \right| \gamma' J' M' \right\rangle, \tag{2.46}$$

$$2(E' - E)^{-1} \left\langle \gamma JM \left| \sum_i \nabla_i \right| \gamma' J' M' \right\rangle, \tag{2.47}$$

ve

$$2(E' - E)^{-2} \left\langle \gamma JM \left| \sum_i \nabla_i V \right| \gamma' J' M' \right\rangle \tag{2.48}$$

olarak verilir (Bethe ve Salpeter 1957). Burada $E$ ve $E'$ Rydberg birimlerinde $\gamma JM$, $\gamma' J' M'$ durumlarının enerjileridir. V, Rydberg birimlerinde merkezcil alan potansiyel enerjidir ve tüm uzaklıklar Bohr birimlerindedir. Denk. (2.46) ve (2.47)'deki operatörler sırasıyla klasik momentuma ve kuvvete karşılık gelmektedir. Bunun için bu üç farklı matris gösterimi uzunluk, hız ve ivme gösterimi olarak adlandırılmaktadır.

Tüm matris gösterim şekilleri hesaplamalarda tam dalga fonksiyonları kullanıldığı zaman özdeş sonuçlar vermektedir. Fakat genellikle birçok sebebe dayalı olarak hesaplamalarda yaklaşık dalga fonksiyonlarının kullanılması mecburiyeti nedeniyle farklı sonuçlarla karşılaşılmaktadır.

## 2.4 Elektrik Dipol Geçişleri İçin Seçim Kuralları

Bir atom herhangi bir anda tamamen bir tek kuantum enerji seviyesinde değil de; çeşitli seviyeler arasında geçiş halinde ise dalga fonksiyonu zamana bağlı olup,

$$\Psi_{\gamma JM}(r,\theta,\varphi,t)=\sum_{j=1}^{N} a_{ji}\psi_{\gamma JM}(r,\theta,\varphi)T_0 e^{i\omega_j t} \tag{2.49}$$

ile verilen ifade

$$\Psi(r,\theta,\varphi,t)=\sum_{j} a_j(t)\psi_{\gamma JM}(r,\theta,\varphi) \tag{2.50}$$

şeklinde de yazılabilir. Burada $a_j(t)$, j. seviyenin zamana bağımlılığı ile ilgili katsayı olup, sistemin o seviyede bulunma olasılığı,

$$a_j^*(t)\, a_j(t)=\left|a_j(t)\right|^2 \tag{2.51}$$

ile belirlidir. Söz konusu geçişler, pertürbe olmamış seviyeler arasında düşünülmektedir. Geçişler atom üzerine uygulanan uyarıcı elektromanyetik ışıma radyasyon alanına (rf) sebep olmaktadır (Aygün ve Zengin 1998). $\left|\gamma JM\right\rangle \rightarrow \left|\gamma' J' M'\right\rangle$ şeklinde bir elektrik dipol geçişinin olduğunu varsayalım. Kuantum mekanik teori böyle bir geçişin olasılığını,

$$P_{j\rightarrow i}=\int_{\substack{\text{tüm}\\ \text{enerjiler}}} \left|a_i(t)\right|^2 \rho(E_i)\, dE_i \tag{2.52}$$

olarak verir. Burada $\rho(E_i)$, i seviyesinin birim enerji aralığındaki yoğunluğudur. Radyasyon alanı (rf) ise

$$H^{(1)}(x,t) = H^{(1)}(x)\,\mathrm{Cos}\omega t = H^{(1)}(0)\,\mathrm{Cos}\omega t = \frac{1}{2}H^{(1)}(0)(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \qquad (2.53)$$

olarak alınarak ve

$$\left|a_j(t)\right| = \frac{1}{i\hbar}\int H_{ji}^{(1)} e^{i\omega_{ji}t}dt \qquad (2.54)$$

olduğundan; bu denklemler uygun şekilde birleştirilerek

$$P_{i\to j} \approx \left|a_j(t)\right|^2 = \frac{\left|H_{ji}^{(1)}(0)\right|^2}{\hbar^2}\,\frac{\mathrm{Sin}^2\left(\dfrac{\omega_{ji}\pm\omega}{2}\right)t}{(\omega_{ji}\pm\omega)^2} \qquad (2.55)$$

elde edilir (Aygün ve Zengin 1998). Elektrik dipol geçişler için, atomun elektrik dipol momenti,

$$\vec{D} = -e\vec{r} \qquad (2.56)$$

olmak üzere, dipolün radyasyon alanı (rf), elektrik alanı ile etkileşme enerjisi, $\varepsilon_1$, radyasyon alanının maksimum değeri olmak üzere,

$$H_{(0)}^{(1)} = \Delta E = -\vec{D}\cdot\vec{\varepsilon}_{rf}(t) = e\,r\,\varepsilon_1\mathrm{Cos}\omega t \qquad (2.57)$$

şeklinde alınır. Burada,

$$H_{(0)}^{(1)} = e\,r\,\varepsilon_1 \qquad (2.58)$$

olmak üzere, bunun matris elemanı

$$\left\langle H_{(0)}^{(1)}\right\rangle_{ji} = e\varepsilon_1\left\langle r\right\rangle_{ji} \qquad (2.59)$$

olup, bu son ifade Denk. (2.55)'te yerine yazıldığında

$$P_{i\to j} \approx \frac{e^2\varepsilon_1^2}{\hbar^2}\left|\langle r\rangle_{ji}\right|^2 \frac{\mathrm{Sin}^2\left(\frac{\omega_{ji}\pm\omega}{2}\right)t}{(\omega_{ji}\pm\omega)^2} \tag{2.60}$$

elde edilir. Şimdi $-e\vec{r}=\vec{D}$ elektrik dipol moment sembolü kullanılarak,

$$P_{i\to j} \approx \frac{\varepsilon_1^2}{\hbar^2}\left|\langle D\rangle_{ji}\right|^2 \frac{\mathrm{Sin}^2\left(\frac{\omega_{ji}\pm\omega}{2}\right)t}{(\omega_{ji}\pm\omega)^2} \tag{2.61a}$$

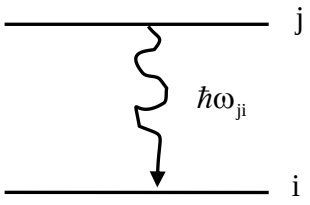
veya

$$P_{i\to j} \approx \frac{e^2\varepsilon_1^2}{\hbar^2}\left|\langle r\rangle_{ji}\right|^2 f(\omega_{ji},t) \tag{2.61b}$$

ifadeleri yazılabilir. Burada $\omega_{ji}$, söz konusu seviyeler arasındaki geçiş frekansı olup,

$$\omega_{ji}=\frac{(E_i-E_j)}{\hbar} \tag{2.62}$$

şeklinde tanımlıdır. Söz konusu uyarmalı geçiş Şekil 2.4'te gösterilmiştir (Aygün ve Zengin 1998). Dikkat edilirse, Denk. (2.61b) ile verilen geçiş olasılığı, uyarılan elektrik dipol momentin ilgili seviyeler arasındaki beklenen değerine bağlıdır. Bu sebeple elektrik dipol seçim kuralları, dipolün ilgili seviyeler arasındaki beklenen değerinden belirlenebilir.




**Şekil 2.4:** Harmonik uyarmalı bir elektrik dipol geçiş

Herhangi iki i, j seviyeleri için;

$$\langle D \rangle_{ji} = \langle j | D | i \rangle = 0 \tag{2.63a}$$

ise o seviyeler arasında elektrik dipol geçişi söz konusu olamaz demektir. Bu tür geçişler elektrik dipole yasaktır. Bu tür geçişlere ***yasaklanmış geçişler*** ya da ***izinsiz geçişler*** denir. Eğer

$$\langle D \rangle_{ji} = \langle j | D | i \rangle \neq 0 \tag{2.63b}$$

ise o seviyeler arasında elektrik dipol geçiş olabilir demektir. Bu tür geçişlere de elektrik dipole ***yasak olmayan geçişler*** ya da ***izinli geçişler*** denir.

Bu yasaklama ya da izinli olmanın nereden kaynaklandığını inceleyecek olursak, kuantum mekanik teoriye göre dipolün beklenen değeri,

$$\langle D \rangle_{n\ell m \to n'\ell'm'} = e \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \psi^*_{n'\ell'm'}(r,\theta,\varphi)\, r\, \psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)\, dV \tag{2.64}$$

ile belirlidir. Burada pertürbe olmamış seviyeler arasındaki geçiş ya da geçişler düşünülmektedir. Yukarıda verilen integralin değeri ise fonksiyonların paritesine bağlıdır. İntegral önünde $r$'nin tek pariteli bir fonksiyon olduğu açıktır. $\psi^*_{n'\ell'm'}$ ve $\psi_{n\ell m}$ fonksiyonlarının paritelerini de $\ell$ ve $\ell'$ belirler. Sonuçta integral önündeki çarpım fonksiyon ***tek pariteli*** de olabilir, ***çift pariteli*** de olabilir. Matematikten bilinen genel kural

$$\int (\text{tek pariteli}) = 0 \tag{2.65a}$$

$$\int (\text{çift pariteli}) \neq 0 \tag{2.65b}$$

genel kuralı kullanarak; ***elektrik dipol geçişlerin, ancak farklı pariteli seviyeler arasında olabileceği sonucuna varılır*** (Aygün ve Zengin 1998). Yani Denk. (2.64)'te $\psi^*_{n'\ell'm'}$ ve $\psi_{n\ell m}$ farklı pariteli fonksiyonlar olmalıdırlar ki elektrik dipol

momentin beklenen değeri sıfırdan farklı olsun. O halde atomlarda, elektrik dipol geçiş olabilmesi için, ilgili iki seviyenin yörünge açısal momentum kuantum sayıları (pariteyi belirleyen kuantum sayıları) farkı

$$\Delta\ell = \ell - \ell' = \pm 1 \text{ (tek sayı)} \tag{2.66}$$

olmalıdır. Buradan,

$$\Delta\ell = \pm 1 \tag{2.67}$$

alınarak ***elektrik dipol seçim kuralı*** elde edilmiş olur (Aygün ve Zengin 1998). Ancak tek kural bundan ibaret değildir. Yörünge kuantum sayısının dış alan (manyetik ve ya elektrik) üzerindeki izdüşümü olan $m$'deki değişimde belirlenebilir.

$\ell$ ve $m$'deki değişimler, hidrojen dalga fonksiyonlarını **BRA** ve **KET** lerle temsil edilerek dik koordinat sisteminde incelenip belirlenebilir. Bunun için küresel koordinatlardan

$$x = r\,\mathrm{Sin}\theta\,\mathrm{Cos}\varphi \tag{2.68a}$$

$$y = r\,\mathrm{Sin}\theta\,\mathrm{Sin}\varphi \tag{2.68b}$$

$$z = r\,\mathrm{Cos}\theta \tag{2.68c}$$

dönüşüm denklemleri ile dik koordinat sistemine geçilmiş olsun. Dik koordinat sisteminde,

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \tag{2.69}$$

olduğundan bir $i \to j$ geçişi için

$$\left|\langle j|r|i\rangle\right|^2 = \left|\langle j|x|i\rangle\right|^2 + \left|\langle j|y|i\rangle\right|^2 + \left|\langle j|z|i\rangle\right|^2 \tag{2.70a}$$

veya

$$\left|\langle j|er|i\rangle\right|^2 = \left|\langle j|ex|i\rangle\right|^2 + \left|\langle j|ey|i\rangle\right|^2 + \left|\langle j|ez|i\rangle\right|^2 \tag{2.70b}$$

$$\left|\langle j|D|i\rangle\right|^2 = \left|\langle j|D_x|i\rangle\right|^2 + \left|\langle j|D_y|i\rangle\right|^2 + \left|\langle j|D_z|i\rangle\right|^2 \qquad (2.70c)$$

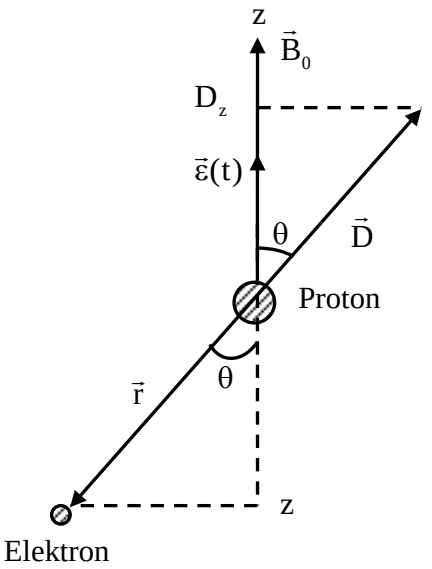
olur. Sistemi uyaran elektrik alan (pertürbasyon alanı) $\varepsilon(t)$ ise, pertürbasyon Hamiltoniyeni, polarize olmamış $\varepsilon(t)$ için,

$$H^{(1)} = -\vec{\varepsilon}(t)\cdot\vec{D} = -(\varepsilon_x(t)D_x + \varepsilon_y(t)D_y + \varepsilon_z(t)D_z) \qquad (2.71)$$

olarak yazılacağı açıktır. Ancak uygulanan pertürbasyon alanı Şekil 2.5'te gösterildiği gibi polarize olmuş bir alan ise (yani $\varepsilon(t) = \varepsilon_z(t)$, $\varepsilon_x = 0$, $\varepsilon_y = 0$ ise) Denk. (2.71)'de ilk iki terim sıfır olup, $D_z = -ez$ olduğundan,

$$H^{(1)} = -\varepsilon_z(t)D_z = +ez\varepsilon(t) \qquad (2.72)$$

şeklinde verilir. Bu açıklamalardan da görüldüğü gibi $z-$yönünde polarize olmuş alan için Denk. (2.70c)'de sadece son terim kalmaktadır.




**Şekil 2.5:** Hidrojen atomu dipol momenti, $\vec{D}$, dış manyetik alan $\vec{B}_o$ ve $z-$yönünde polarize olmuş uyarıcı olan $\vec{\varepsilon}(t)$ 'nin yönelmeleri

Diğer iki terimin değerleri sıfırdır. O halde konu sadece $D_z$'nin matris elemanının bulunmasına indirgenmiş olmaktadır. $D_z$'nin matris elemanı,

$$\langle n'\ell'm'|ez|n\ell m\rangle = \int_{\substack{\text{tüm}\\ \text{uzay}}} \psi_{n'\ell'm'}\, ez\, \psi_{n\ell m}\, dV \tag{2.73}$$

olup, $z = r\,\mathrm{Cos}\theta$ ve $dV = r^2\,dr\,\mathrm{Sin}\theta\,d\theta\,d\varphi$ kullanıldığında

$$\langle ez\rangle_{n\ell m} = \int_0^{\infty} R^* r^3 R\,dr \int_0^{\pi} \Theta^*\,\mathrm{Cos}\theta\Theta\,\mathrm{Sin}\theta\,d\theta \int_0^{2\pi} \Phi^*\Phi\,d\varphi \tag{2.74}$$

olarak verilir. Burada,

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \tag{2.75a}$$

$$\Phi^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im'\varphi} \tag{2.75b}$$

olduklarından, Denk. (2.74)'ün $\varphi$'ye bağlı kısmı için,

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = \delta_{m'm} = \begin{cases} 1, & m' = m \\ 0, & m' \neq m \end{cases} \tag{2.76}$$

olur. Buradan Denk. (2.74)'te $r$ ve $\theta$'ya bağlı kısımlar ne olursa olsun denklemin (yani o matris elemanının) sıfırdan farklı olabilmesi için $m' = m$ olmalıdır. Yani,

$$\Delta m = 0 \tag{2.77}$$

olmalıdır. Böylece elektrik dipol geçişler için seçim kuralı

$$\Delta\ell = \pm 1 \tag{2.78a}$$

$$\Delta m = 0 \qquad (\pi - \text{polarizasyonu}) \tag{2.78b}$$

olmaktadır (Aygün ve Zengin 1998). Burada söz edilmesi gereken diğer bir konuda matris elemanlarının değerinin, pertürbasyon alanının yönelmesine olan bağımlılığıdır. Yukarıda sözü edilen yönelme (yani polarizasyon) elektrik alanın $\pi-$polarizasyonu olarak adlandırılır. Elektrik alan (rf) polarize değil ise pertürbasyonun Denk. (2.71)'de gösterilen her üç bileşeni için matris elemanları hesaplanmalıdır. Bu durumda her üç doğrultuda (rf) alanı ile kuantum sisteminin etkileşimi söz konusudur. $z-$yönündeki bileşenin etkileşimi zaten incelendiği için $D_x$ ve $D_y$'nin, dalga fonksiyonunun $\varphi$'ye bağlı kısmı ile nasıl değiştiği $D_z$'de olduğu gibi irdelenmelidir.

$$D_x = -e\,x = -e(r\,\mathrm{Sin}\theta\,\mathrm{Cos}\varphi) \tag{2.79a}$$

$$dV = r^2\,dr\,\mathrm{Sin}\theta\,d\theta\,d\varphi \tag{2.79b}$$

ifadelerinde; $r$ ve $\theta$'ya bağımlılık ile normalizasyon ihmal edilerek

$$\langle n'\ell'm'|D_x|n\ell m\rangle \approx \int_0^{2\pi} e^{-im'\varphi}\,\mathrm{Cos}\varphi\,e^{im\varphi}\,d\varphi \tag{2.80}$$

olup buradaki $\mathrm{Cos}\varphi$ yerine

$$\mathrm{Cos}\varphi = \frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \tag{2.81}$$

kullanılarak Denk. (2.79) tekrar yazıldığında

$$\langle D_x\rangle \approx \frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\left[e^{i(m-m'+1)\varphi} + e^{i(m-m'-1)\varphi}\right]d\varphi \tag{2.82}$$

ifadesi elde edilir. Bu integralde

$$(m - m' \pm 1) = 0 \tag{2.83}$$

ise integralin sonucu sıfırdan farklıdır. Bu koşullar altında integralin sonucu $2\pi$ olur. Demek ki $\langle D_x\rangle$ matris elemanının sıfırdan farklı olabilmesi için, Denk. (2.83)'ten

$$m - m' = \pm 1$$

$$\Delta m = \pm 1 \qquad (\sigma - \text{polarizasyonu}) \tag{2.84}$$

olur ve buna da $\sigma -$polarizasyonu denir. $D_x$ için yapılan bu irdeleme,

$$D_y = -e\,y = -e(r\,\mathrm{Sin}\theta\,\mathrm{Sin}\varphi) \tag{2.85}$$

içinde benzer şekilde yapılabilir ve yine Denk. (2.84) elde edilir.

Dikkat edilirse elektrik dipolün $\sigma^{\pm}$ geçişlerinde $\varepsilon_{rf}$, dış manyetik alana dik yönde, $\pi$ geçişlerinde ise aynı yönde polarize olmaktadır. Elektrik dipol geçişlere ait seçim kuralları (E.D.S.K) özetlenirse,

$$\begin{bmatrix} \Delta\ell = \pm 1 \\ \Delta m = 0\ (\pi - \text{polarizasyonu}) \\ \Delta m = \pm 1 (\sigma - \text{polarizasyonu}) \end{bmatrix} \tag{2.86}$$

olur. Sonuç olarak seçim kuralları ilk ve son kuantum sayıları üzerine sınırlama getirmektedir. Elektrik dipol geçişin yasak olduğu yerlerde, diğer yüksek mertebeden geçişler söz konusu (izinli) olabilir. Örneğin manyetik dipol geçiş, elektrik kuadropol geçiş, manyetik oktupol geçiş,… vb olabilir. Elektrik dipol geçişler $10^{-8}$s gibi bir zamanda oluşurken diğer geçişler daha uzun zamanda oluşur. Bu geçişlerde kuantum sistemi dışarıya bir ışınım salar veya dışarıdan ışınım soğurur. O nedenle bunlara ***ışımalı geçişler*** denir (Aygün ve Zengin 1998).

## 2.5 Elektrik Dipol Geçiş Olasılığı ve Osilatör Şiddeti

### 2.5.1 Elektrik dipol geçiş olasılığı

$\gamma JM$ kuantum sayılarıyla tanımlı bir enerji seviyesi ile $\gamma' J' M'$ kuantum sayılarıyla tanımlı farklı bir seviye arasındaki elektrik dipol geçiş olasılığı,

$$A(\gamma JM \to \gamma' J' M') = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S \sum_q \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 \quad (2.87)$$

veya

$$A(\gamma JM \to \gamma' J' M') = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \left|(E_j - E_i)\right|^3}{3h} S \sum_q \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 \quad (2.88)$$

olarak verilir (Cowan 1981). Burada $(E_j - E_i)$ ilgili seviyeler arasındaki enerji farkı ve $S$, elektrik dipol çizgi şiddeti olarak bilinir ve

$$S \equiv \left|\left\langle \gamma J \right\| P^{(1)} \left\| \gamma' J' \right\rangle\right|^2 \quad (2.89)$$

şeklinde ifade edilir (Shortley 1935). $\gamma' J' M'$ durumundan $\gamma J$ seviyesinin tüm $M$ durumlarına geçiş göz önüne alındığında elektrik dipol geçiş olasılığı,

$$A = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h(2J'+1)} S \quad (2.90)$$

veya

$$A = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \left|(E_j - E_i)\right|^3}{3h} S \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \left|(E_j - E_i)\right|^3}{3h(2J'+1)} S \quad (2.91)$$

olarak verilmektedir (Cowan 1981).

### 2.5.2 Osilatör şiddeti

Sürekli bir spektrumda soğurma ile ilgilenildiğinde spektrum çizgilerinin şiddetleri ile ilgili uygulamalarda en çok kullanılan bir başka nicelik osilatör şiddetidir. Osilatör şiddeti elektrik dipol çizgi şiddetine bağlı olarak,

$$f_{ij} = \frac{8\pi^2 mca_0^2 \sigma}{3h(2J+1)} S = \frac{(E_j - E_i)}{3(2J+1)} S \qquad (2.92)$$

şeklinde verilir. Burada $(E_j - E_i)$, geçiş enerjisidir. Bu nicelik düşük seviyeli özel bir $i$ durumundan üst seviyedeki $j$ seviyesinin tüm $(2J'+1)$ durumlarına soğrulmanın toplam olasılığı ile ilgilidir. Yaymaya karşılık gelen $f_{ji}$ osilatör şiddeti ifadesi ise,

$$f_{ji} = -\frac{8\pi^2 mca_0^2 \sigma}{3h(2J'+1)} S = \frac{(E_i - E_j)}{3(2J'+1)} S \qquad (2.93)$$

biçiminde geçiş olasılığı ifadesine benzemektedir. Burada $f_{ji}$, $j$ üst seviyesinin özel bir durumundan düşük bir $i$ seviyesinin tüm $(2J+1)$ durumlarına yayılmanın toplam olasılılığı ile ilgilidir. Osilatör şiddetini hesaplayabilmek için öncelikle Denk. (2.91) ve Denk. (2.92)'deki elektrik dipol çizgi şiddetlerini bilmek gerekir. Elektrik dipol çizgi şiddeti göz önüne alınan atomik sistemdeki geçerli çiftlenim şekline ve geçiş tipine bağlı olarak ifade edilir.

## 2.6 Radyal Geçiş İntegrali

Geçiş olasılıklarının ya da osilatör şiddetlerinin teorik olarak hesaplanması için literatürde birçok yöntem geliştirilmiştir (Sinanoğlu 1973, Hibbert 1977). Geliştirilen bu yöntemler teorik, deneysel ya da kısmen deneyseldir. Geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin hesaplanması için Denk. (2.89) ile verilen elektrik dipol çizgi şiddetine karşılık gelen değeri ya da onun karekökü hesaplanmalıdır.

$$S^{1/2}_{\gamma\gamma'} = \left\langle \gamma J \left|\left| P^{(1)} \right|\right| \gamma' J' \right\rangle \qquad (2.94)$$

Bunun için tam olarak $|\beta J\rangle$ baz fonksiyonlarının bir setine uygun olarak $|\gamma J\rangle$ dalga fonksiyonu,

$$\left|\gamma J\right\rangle = \sum_{\beta} y_{\beta J}^{\gamma} \left|\beta J\right\rangle \tag{2.95}$$

biçiminde açılır. $\left|\gamma' J'\right\rangle$ için benzer bir ifade yazılabilir. $\left|\beta' J'\right\rangle$ baz seti $\left|\beta J\right\rangle$ ile gösterilen konfigürasyon ya da konfigürasyonlarınkiyle karşı pariteye sahip bir konfigürasyona karşılık gelecektir. Bu durumda Denk. (2.94),

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \sum_{\beta}\sum_{\beta'} y_{\beta J}^{\gamma} \left\langle \beta J \middle\| P^{(1)} \middle\| \beta' J' \right\rangle y_{\beta' J'}^{\gamma'} \tag{2.96}$$

şeklinde yazılabilir. y katsayılarının $\gamma J$ durumu için enerji özvektörlerinin bileşenleri şeklinde yazılabileceği görülebilir. Denk. (2.96)'daki çift toplam bir çift matris çarpımı olarak gözönüne alınır.

$$D_{\beta\beta'} \equiv S_{\beta\beta'}^{1/2} = \left\langle \beta J \middle\| P^{(1)} \middle\| \beta' J' \right\rangle \tag{2.97}$$

Denk. (2.97) ile verilen nicelikler $\gamma' J'$ üst durumu için sütun özvektörüyle sağdan çarpılan ve $\gamma J$ düşük durumu için satır özvektörünün transpozesiyle soldan çarpılan bir dipol-geçiş matrisinin elemanlarıdır. Bir hidrojenik (bir elektronlu) atom Denk.(2.95) ve Denk. (2.97) ifadeleri göz önüne alınarak

$$S^{1/2} \equiv D_{LS} = \left\langle nlsj \middle\| r^{(1)} \middle\| n'l's'j' \right\rangle = (-1)^{l+j'+3/2} \left[j, j'\right]^{1/2} \begin{Bmatrix} l & s & j \\ j' & 1 & l' \end{Bmatrix} \left\langle nl \middle\| r^{(1)} \middle\| n'l' \right\rangle \tag{2.98}$$

şeklinde yeniden yazılır. Denk. (2.98)'de $\left[j, j'\right]$ ifadesi $j = 2j+1$ $j' = 2j'+1$ olarak ifade edilir. Elde edilen indirgenmiş matris elemanı,

$$r^{(1)} = rC^{(1)} \tag{2.99}$$

ve

$$\left\langle l \middle\| C^{(k)} \middle\| l' \right\rangle = (-1)^{l} \left[l, l'\right]^{1/2} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.100}$$

ifadelerinin kullanılmasıyla,

$$P^{(1)}_{nl,n'l'} \equiv \langle nl \| r^{(1)} \| n'l' \rangle = \langle l \| C^{(1)} \| l' \rangle \int_0^\infty P_{nl}(r)\, r\, P_{n'l'}(r)\, dr$$

$$= (-1)^l [l,l']^{1/2} \begin{Bmatrix} l & l & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} \int_0^\infty P_{nl}(r)\, r\, P_{n'l'}(r)\, dr \qquad (2.101)$$

olarak hesaplanabilir. Burada $l+1+l'$ toplamı çift sayı olmadıkça ve üç açı bağıntısını sağlamadıkça 3-j sembolü sıfır olur. Yani,

$$l' = l \pm 1 \qquad (2.102)$$

olmadıkça $P^{(1)}_{ll'} = 0$ olur. 3-j sembolü basitleştirilerek,

$$P^{(1)}_{nl,n'l'} \equiv \delta_{l',l\pm1} (-1)^{l+l_>} (l_>)^{1/2} \int_0^\infty P_{nl}(r)\, r\, P_{n'l'}(r)\, dr = (-1)^{l-l'} P^{(1)}_{l'l} = -P^{(1)}_{l'l} \qquad (2.103)$$

biçiminde elde edilir. Burada $l_>$, $l$ ve $l'$'nün en büyük değerli olanını göstermektedir. $l' = l \pm 1$ ifadesi $|lsj\rangle$ ve $|l's'j'\rangle$ seviyelerinin zıt pariteye sahip olduklarını gösterir. Bu sonuç elektrik dipol geçişlerinin bir parite değişimi içerdiği genel sonucuyla tutarlıdır.

## 2.7 Tek Elektron Geçişleri

Bir konfigürasyonun tüm seviyeleri ve diğer konfigürasyonların tüm seviyeleri arasındaki bütün mümkün geçişlerin bir seti ***"geçiş dizisi"*** olarak adlandırılır. Elektrik dipol geçiş dizisinin en genel şeklini gözönüne almadan önce

$$\cdots l_1^{w_1} l_2 \; - \cdots l_1^{w_1} l_2' \qquad (2.104)$$

şeklinde tanımlanan geçiş durumunu gözönüne alalım. Gösterimdeki noktalı çizgiler her iki konfigürasyonda ortak olan kapalı alt kabukları ifade etmektedir. Geçiş dizisinin bu dört tipi çiftlenim şekli olan LS, LK, JK ve JJ saf çiftlenim gösterimlerinin hepsiyle ilgilidir. Bu gösterimlerin tamamında D 'yi hesaplamak için

ilk adım antisimetrikleşen koordinat permütasyon etkisini basitleştirmektir. Simetrik operatörlerin matris elemanlarının özelliklerinden Denk. (2.96) ifadesi,

$$D \equiv \left\langle \ldots l_1^{w_1} l_2 \left| \left| \sum_i \mathbf{r}_i^{(1)} \right| \right| \ldots l_1^{w_1} l_2' \right\rangle = \left\langle \ldots l_1^{w_1} l_2 \left| \left| \mathbf{r}_N^{(1)} \right| \right| \ldots l_1^{w_1} l_2' \right\rangle \tag{2.105}$$

olarak yazılabilir. Burada son matris elemanında baz fonksiyonları antisimetrikleşmemiş fonksiyonlardır. Burada $r_N$, $|l_2\rangle$ ve $|l_2'\rangle$ spin-yörüngelerin koordinatlarıdır.

### 2.7.1 LS Gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti

$r_N^{(1)}$ operatörü ya spinler üzerine ya da $\ldots l_1^{w_1}$ alt kabuklarının her kısmına etkiyeceğinden $L$ 'den $S$ 'ye geri çiftlenim için,

$$\begin{aligned}
&\left\langle \alpha_1 j_1, \alpha_2 j_2 \left| \left| O_{q_1}^{(k_1)} \right| \right| \alpha_1' j_1', \alpha_2' j_2' \right\rangle \\
&= [j, j', k]^{1/2} \left\langle \alpha_1 j_1 \left| \left| O^{(k_1)} \right| \right| \alpha_1' j_1' \right\rangle \delta_{\alpha_2 j_2, \alpha_2' j_2'} [j_2]^{1/2} \begin{Bmatrix} j & j_1 & j_2 \\ j' & j_1' & j_2' \\ k & k & 0 \end{Bmatrix} \\
&= \delta_{\alpha_2 j_2, \alpha_2' j_2'} (-1)^{j_1 + j_2 + j' + k} [j, j']^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j' & k & j_1' \end{Bmatrix} x \left\langle \alpha_1 j_1 \left| \left| O^{(k_1)} \right| \right| \alpha_1' j_1' \right\rangle
\end{aligned} \tag{2.106}$$

ve daha sonra $\ldots L_1$ 'den $l_2$ ve $l_2'$ geri çiftlenimi için,

$$\left\langle \alpha_1 j_1, \alpha_2 j_2 \left| \left| W^{(k_1)} \right| \right| \alpha_1' j_1', \alpha_2' j_2' \right\rangle = (-1)^{-j_1 - j_2 + j + j_1' + j_2' + j'} \left\langle \alpha_2 j_2, \alpha_{11} j_1 \left| \left| W^{(k_1)} \right| \right| \alpha_2' j_2', \alpha_1' j_1' \right\rangle$$

$$= \delta_{\alpha_1 j_1, \alpha_1' j_1'} (-1)^{j_1 + j_2' + j + k} [j, j']^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ k & j' & j_2' \end{Bmatrix} \left\langle \alpha_2 j_2 \left| \left| W^{(k_1)} \right| \right| \alpha_2' j_2' \right\rangle \tag{2.107}$$

ifadeleri kullanılabilir. LS çiftlenimi için elektrik dipol çizgi şiddeti ifadesi,

$$\sqrt{S_{LS}} \equiv \left\langle \left[ (...\alpha_1 L_1, l_2) L (...S_1 s_2) S \right] J \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[ (...\alpha_1' L_1', l_2') L' (...S_1' s_2) S' \right] J' \right\rangle$$

$$= \delta_{S_1 S_1'} \delta_{ss'} (-1)^{L+S+J'+1} [j, j']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \left\langle (...\alpha_1 L_1, l_2) L \left\| r_N^{(1)} \right\| (...\alpha_1' L_1', l_2') L' \right\rangle$$

$$= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_1' L_1' S_1'} \delta_{ss'} (-1)^{S+J'+L_1+l_2'} [J, J', L, L']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J' \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l_2' \end{Bmatrix} P_{l_2 l_2'}^{(1)} \quad (2.108)$$

olarak verilir (Cowan 1981, Çelik 2005).

**i) İki uyarılmış seviye arasındaki geçişler**

LS çiftlenim gösteriminde, uyarılmış seviyeler arasındaki geçişler için çizgi şiddeti,

$$\sqrt{S_{LS}} \equiv \left\langle \left[ (...\alpha_1 L_1, l_2) L (...S_1 s_2) S \right] J \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[ (...\alpha_1' L_1', l_2') L' (...S_1' s_2) S' \right] J' \right\rangle$$

$$= (-1)^{S+J'+L_1+l_2'} \left[ J, J', L, L' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l_2' \end{Bmatrix} P_{l_1 l_2}^{(1)} \quad (2.109)$$

olarak verilir (Cowan 1981, Çelik 2005).

**ii) Temel seviye ile uyarılmış seviye arasındaki geçişler**

LS çiftlenim gösteriminde, temel seviyeden uyarılmış seviyeye geçiş için çizgi şiddeti,

$$\sqrt{S_{LS}} \equiv \left\langle \alpha_1 L_1, S_1, J \left\| r^{(1)} \right\| \alpha_1' L_1', S_1', l_2) L' S' J' \right\rangle = \delta_{S_1 S'} (-1)^{L_1'+l_2+S_1+J'} \left( n. \left[ L_1, L', J, J' \right] \right)^{1/2}$$

$$\times \begin{Bmatrix} L_1 & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & L_1' & L_1 \\ L' & 1 & l_2 \end{Bmatrix} (l_1^n \alpha_1 L_1 S_1 \left\{ \left\| l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1' \right) P_{l_2 l_2}^{(1)} \right. \quad (2.110)$$

olarak verilir (Cowan 1981, Çelik 2005).

### 2.7.2 LK Gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti

Denk. (2.106) ve Denk. (2.107) kullanılarak LK gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti,

$$\sqrt{S_{LK}} \equiv \left\langle \left[ (....\alpha_1 L_1, l_2) L, S_1 \right] K, s_2 J \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[ (....\alpha_1' L_1', l_2') L', S_1' \right] K', s_2 J' \right\rangle$$

$$= (-1)^{K+s+J'+1} \left[ J, J' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K' \end{Bmatrix} \left\langle \left[ (\alpha_1 L_1, l_2) L, S_1 \right] K \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[ (\alpha_1' L_1', l_2') L', S_1' \right] K' \right\rangle$$

$$= \delta_{s_1 s_1'} (-1)^{K+s+J'+L+s_1+K'} \left[ J, J', K, K' \right]^{1/2}$$

$$\times \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} K & S_1 & K \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \left\langle (\alpha_1 L_1, l_2) L \left\| r_N^{(1)} \right\| (\alpha_1' L_1', l_2') L', \right\rangle \qquad (2.111)$$

$$= \delta_{\alpha_1 L_1 s_1, \alpha_1' L_1' s_1'} (-1)^{K+s+J'+L_1+s_1+K'+l_2'+1} \left[ J, J', K, K', L, L' \right]^{1/2}$$

$$\times \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} K & S_1 & K \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l_2' \end{Bmatrix} P_{l_2 l_2'}^{(1)}$$

olarak verilir. $J$ için verilen seçim kurallarına ek olarak burada,

$$\Delta K = 0, \pm 1 \quad (K = K' = 0 \text{ yasak}) \qquad (2.112a)$$

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (L = L' = 0 \text{ yasak}) \qquad (2.112b)$$

elde edilir. Bu tip durumlarda en güçlü çizgiler $J$ 'nin maksimum değerinde $\Delta J = \Delta K$ durumunda olur (Cowan 1981, Çelik 2005).

### 2.7.3 JK Gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti

Denk. (2.106) kullanılarak JK gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti,

$$\sqrt{S_{JK}} \equiv \left\langle \left[ (....\alpha_1 L_1 S_1) J_1, l_2 \right] K, s_2 J \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[ (....\alpha_1 L_1', S_1') J_1', l_2' \right] K', s_2 J' \right\rangle$$

$$= (-1)^{K+s+J'+1} \left[ J, J' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K' \end{Bmatrix} \left\langle \left[ (\alpha_1 L_1 S_1) J_1, l_2 \right] K \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[ (\alpha_1' L_1' S_1') J_1', l_2' \right] K' \right\rangle \qquad (2.113)$$

$$= \delta_{\alpha_1 L_1 s_1, \alpha_1' L_1' s_1'} \delta_{j_1 j_1'} (-1)^{s+J'-J_1-l_2'} \left[ J, J', K, K' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_1 & l_2 & K \\ 1 & K' & l_2' \end{Bmatrix} P_{l_2 l_2'}^{(1)}$$

olarak elde edilir. $JJ'$, $l_2 l_2'$ ve $\alpha_1 L_1 S_1$ seçim kurallarına ek olarak,

$$\Delta K = 0, \pm 1 \qquad (K = K' = 0 \text{ yasak}) \qquad (2.114a)$$

$$\Delta J_1 = 0 \qquad (2.114b)$$

seçim kuralları verilir (Cowan 1981, Çelik 2005).

### 2.7.4 JJ Gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti

Denk. (2.104) ve Denk. (2.105) kullanılarak LK gösterimi için elektrik dipol çizgi şiddeti,

$$\sqrt{S_{JJ}} \equiv \left\langle \left[ (....\alpha_1 L_1 S_1) J_1, (l_2, s_2) j_2 \right] J \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[ (....\alpha_1' L_1', S_1') J_1', (l_2' s_2) j_2' \right] J' \right\rangle$$

$$= \delta_{\alpha_1 L_1 s_1, \alpha_1' L_1' s_1'} \delta_{j_1 j_1'} (-1)^{j_1+j_2'+1} \left[ J, J' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} J_1 & j_2 & J \\ 1 & J' & j_2' \end{Bmatrix} \left\langle (l_2 s_2) j_2 K \left\| r^{(1)} \right\| (l_2' s_2) j_2' \right\rangle \qquad (2.115)$$

$$= \delta_{\alpha_1 L_1 s_1, \alpha_1' L_1' s_1'} \delta_{j_1 j_1'} (-1)^{j_1+J-l_2-s} \left[ J, J', j_2, j_2' \right]^{1/2} x \begin{Bmatrix} J_1 & j_2 & J \\ 1 & J' & j_2' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_2 & s & j_2 \\ j_2' & 1 & l_2' \end{Bmatrix} P_{l_2 l_2'}^{(1)}$$

olarak verilir. Yine daha önce verilen seçim kurallarına ek olarak,

$$\Delta j_2 = 0, \pm 1 \qquad (j_2 = j_2' = 0 \text{ yasak}) \qquad (2.116a)$$

$$\Delta J_1 = 0 \qquad (2.116b)$$

seçim kuralları verilebilir (Cowan 1981, Çelik 2005).

## 2.8 Fraksiyonel Parantez (Antisimetrikleşme) Katsayıları

LS çiftleniminde temel seviyeden uyarılmış seviyeye geçiş için çizgi şiddetinin,

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

$$= \delta_{S_1 S'} (-1)^{L_1' + l_2 + S_1 + J'} \left( n \cdot [L_1, L', J, J']^{1/2} \right) \qquad (2.117)$$

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

şeklinde verildiğini daha önce belirtmiştik. Burada $n$, kabuktaki özdeş elektron sayısı ve $(l_1^n \alpha_1 L S_1 \{ \| l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1')$ ifadesi ise ***fraksiyonel parantez (antisimetrikleşme) katsayısı*** olarak ifade edilir. $p$, $d$ ve $f$ kabuklarına ait Fraksiyonel Parantez (Antisimetrikleşme) Katsayıları literatürde birçok yerde verilmektedir (Cowan 1981, Condon ve Odabaşı 1980, Sobelman 1996).

**Çizelge 2.1:** p Kabuğunun Fraksiyonel Parantez (Antisimetrikleşme) Katsayısı Tablosu (Cowan 1981)

| | $p^2$ | | |
|---|---|---|---|
| $p^3$ | $^3P$ | $^1D$ | $^1S$ |
| $^4S$ | 1 | 0 | 0 |
| $^2D$ | $1/\sqrt{2}$ | $-1/\sqrt{2}$ | 0 |
| $^2P$ | $-3/\sqrt{18}$ | $-5/\sqrt{18}$ | $2/\sqrt{18}$ |

| | $p^3$ | | |
|---|---|---|---|
| $p^4$ | $^3P$ | $^1D$ | $^1S$ |
| $^3P$ | $-1/\sqrt{3}$ | $\sqrt{5/12}$ | $-1/2$ |
| $^1D$ | 0 | $-\sqrt{3}/2$ | $-1/2$ |
| $^1S$ | 0 | 0 | 1 |

| | $p^4$ | | |
|---|---|---|---|
| $p^5$ | $^3P$ | $^1D$ | $^1S$ |
| $^2P$ | $\sqrt{3}/5$ | $1/\sqrt{3}$ | $1/\sqrt{15}$ |

# 3. 3n-j SEMBOLLERİ

## 3.1 3-j Sembolleri

Wigner'in 3n-j sembolleri ya da Clebsch-Gordon ve Racah katsayıları ($n=1$ ve $n=2$ için) atomik yapı hesaplamaları ve nicel spektroskopik hesaplamalar için oldukça gereklidir (Wigner 1959, Wigner ve ark. 1965, Edmonds 1960). Bu katsayılar iki ya da daha fazla açısal momentumun çiftleniminde kullanılırlar.

3-j sembolü altı elemanla tanımlanan cebirsel bir fonksiyon olup,

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1+m_2+m_3,0}\,(-1)^{j_1-j_2-m_3}$$

$$x\left[\frac{(j_1+j_2-j_3)!\,(j_1-j_2+j_3)!(-j_1+j_2+j_3)!(j_1-m_1)!(j_1+m_1)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$x\left[\frac{(j_2-m_2)!(j_2+m_2)!(j_3-m_3)!(j_3+m_3)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (3.1)$$

$$x\sum_k \frac{(-1)^k}{k!(j_1+j_2-j_3-k)!(j_1-m_1-k)!(j_2+m_2-k)!(j_3-j_2+m_1+k)!(j_3-j_1-m_2+k)!}$$

olarak verilir. Bu fonksiyon ancak tüm faktöriyel ifadelerin negatif tamsayılar olmayan $j_i$ ve $m_i$ değerleri için tanımlı olup bu durum $j_i$ ve $m_i$'nin birlikte tam sayı ya da yarım tamsayı olması, $j_i \geq |m_i| \geq 0$ olması $j_1+j_2+j_3$, $m_1+m_2+m_3$ ve $j_1+j_2-m_3$'ün tamsayı olması 3-j sembolünün reel olması için şarttır. Bununla birlikte $j_i$'ler aşağıdaki üç şartı sağlamalıdır. Bu şartlar;

$$j_1+j_2 \geq j_3 \qquad (3.2a)$$

$$j_3+j_2 \geq j_1 \qquad (3.2b)$$

$$j_1+j_3 \geq j_2 \qquad (3.2c)$$

olarak verilir. Diğer sınırlamalarla birlikte bu üç nicelik ***üç açı bağıntıları*** olarak bilinir. Burada her $j_i$ açısal momentum kuantum sayısı, her $m_i$ manyetik kuantum sayısına karşılık gelmektedir. Yine her $j_i$ biri diğer ikisinin vektörel toplamı olan üç açısal momentum operatörünü göstermektedir. Göz önüne alınan tüm sınırlamalar açısal momentumların toplanmasının vektör modelinden gelmektedir. Denk. (3.1) ile verilen ifadedeki toplam $k$ 'nın aşağıdaki gibi verilen tam değerleri için sonlu olup,

$$\max(0, j_2 - j_3 - m_1, j_1 - j_3 + m_2) \le k \le \min(j_1 + j_2 - j_3, j_1 - m_1, j_2 + m_2) \qquad (3.3)$$

şeklinde yazılır.

### 3.1.1 3-j Sembolünün gösterimi

3-j sembolü ile ilişkili nicelikler için çeşitli gösterimler ortaya konmuştur. Bu gösterimler, Racah tarafından kullanılan,

$$V(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3) = (-1)^{j_1 - j_2 - j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}, \qquad (3.4)$$

ifadesi ile (Racah 1942), Fano ve Racah tarafından kullanılan,

$$\bar{V}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{2(j_2 + j_3)} V(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3)$$

$$= (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}, \qquad (3.5)$$

ifadesi (Fano ve Racah 1959) ve Condon ve Shortley tarafından kullanılan,

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j_1 j_2 j_3 m_3) = (-1)^{j_1 - j_2 + m_3} [j_3]^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix}, \qquad (3.6)$$

ifadesi ile gösterilir (Condon ve Shortley 1935).

### 3.2 6-j Sembolü

6-j sembolü altı elemanla tanımlanan bir fonksiyon olarak,

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \equiv \Delta(j_1 j_2 j_3)\,\Delta(j_1 l_2 l_3)\,\Delta(l_1 j_2 l_3)\,\Delta(l_1 l_2 j_3)$$

$$x \sum_k \frac{(-1)^k (k+1)!}{k!(k-j_1-j_2-j_3)!(k-j_1-l_2-l_3)!\,(k-l_1-j_2-l_3)!(k-l_1-l_2-j_3)!} \tag{3.7}$$

$$x\ \frac{1}{(j_1+j_2+l_1+l_2-k)!(j_2+j_3+l_2+l_3-k)!(j_3+j_1+l_3+l_1-k)!}$$

biçiminde verilir (Rotenberg ve ark.1959, Edmonds 1960, Cowan 1981). Burada,

$$\Delta(abc) \equiv \left[ \frac{(a+b+c)!(a-b+c)!(-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!} \right]^{1/2} \tag{3.8}$$

olarak verilir. 6-j sembolü, atomik yapı teorisinde dört tane 3-j sembolünün çarpımı üzerinden beş katlı bir toplam olarak;

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} = [j_3] \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ n_1 n_2 n_3}} (-1)^S \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & n_2 & -n_3 \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} l_1 & j_2 & l_3 \\ -n_1 & m_2 & n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & j_3 \\ n_1 & -n_2 & m_3 \end{pmatrix} \tag{3.9}$$

şeklinde verilir (Racah 1942). Burada,

$$S = l_1 + l_2 + l_3 + n_1 + n_2 + n_3 \tag{3.10}$$

olarak tanımlanır. Denk. (3.9) ile verilen çoklu toplamın sonucu $m_3$ 'den bağımsızdır. 6-j sembolünün her elemanı açık olarak manyetik kuantum sayısından daha çok açısal momentum kuantum sayısıyla ilgilidir.

6-j sembolünde Denk. (3.7)'de verilen her faktöriyel'in sıfırdan farklı olduğu göz önüne alınır. Denk. (3.8) ile verilen ifade negatif olmayan bir tam sayıdır.

Bu sonuç 6-j sembolünün her elemanının negatif olmayan tam ya da yarım tam sayı olması gerektiğine götürür ve üç açı bağıntıları belirleyici olmalıdır.

$$\delta(j_1 j_2 j_3), \qquad \delta(j_1 l_2 l_3), \qquad \delta(l_1 j_2 l_3), \qquad \delta(l_1 l_2 j_3), \tag{3.11}$$

Tüm bu sınırlamaların hepsi aslında Denk. (3.9)'daki bağımsız değişkenlerin üst sırasındaki sınırlamalardan ileri gelmektedir. Denk. (3.7) ile verilen toplam sabittir. Yani verilen toplam sonludur ve $k$ 'nın değer aralığı,

$$\max(j_1 + j_2 + j_3, j_1 + l_2 + l_3, l_1 + j_2 + l_3, l_1 + l_2 + j_3)$$

$$\leq k \leq \min(j_1 + j_2 + l_1 + l_2, j_2 + j_3 + l_2 + l_3, j_3 + j_1 + l_3 + l_1) \tag{3.12}$$

olarak verilir.

### 3.2.1 6-j Sembolünün gösterimi

6-j sembolüyle ile ilgili çeşitli nicelikler ve çeşitli gösterimler kullanılır. Fakat 6-j sembolü ile ilgili atomik yapı literatüründe en çok kullanılanlarından biri Racah katsayısıdır (Racah 1942). Racah tarafından kullanılan gösterim,

$$W(j_1 j_2 l_2 l_1; j_3 l_3) = (-1)^{j_1 + j_2 + l_1 + l_2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \tag{3.13}$$

olarak verilir. Yine 6-j sembolü ile ilgili atomik yapı literatüründe, Fano ve Racah tarafından kullanılan gösterim,

$$\bar{W} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \tag{3.14}$$

olarak verilir (Fano ve Racah 1959).

# 4. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLERDE ÇİFTLENİMLER

Atomlarda elektronların ve çekirdek içinde nükleonların açısal momentumlarının (ya da manyetik dipol momentlerin) çiftlenim şekillerini, çiftlenimin oluştuğu yerdeki manyetik alan şiddetleri belirler. Burada söz konusu olan manyetik alan yerel (sistemin içyapısından kaynaklanan) veya dışarıdan uygulanan bir dış alan da olabilir. Çok elektronlu bir atom içinde spin-spin, spin-yörünge, spin-diğer yörünge, dipol-dipol ve çekirdek içinde de benzer şekilde nükleonlar arasında spin-spin etkileşmeleri söz konusudur.

Atom ve atom çekirdeklerinde çiftlenim şekillerini açıklamadan önce, dışardan uygulanan dış manyetik alanın şiddetine göre bölgelere ayrılmasını bilmekte yarar vardır. Hidrojen atomunun merkezinde oluşan yerel alan değeri referans alınarak dış alan şiddetinin $0 \le B_o \le 10^4$ Gauss bölgesi ***zayıf alan*** ya da ***Zeeman bölgesi*** olarak bilinir. Dış manyetik alanın $10^4 \le B_o \le \infty$ Gauss bölgesi de ***şiddetli alan*** ya da ***Paschen-Back bölgesi*** olarak bilinir (Aygün ve Zengin 1998).

İki veya daha fazla sayıda elektronu bulunan bir atomda; elektronlardan her birisi için, yörünge ve spin açısal momentum vektörleri $\vec{\ell}_i$ ve $\vec{s}_i$ arasındaki karşılıklı etkileşmelerin dikkate alınması gerekir. Yapılan incelemeler $\vec{\ell}_i$ ve $\vec{s}_i$'ler arasındaki etkileşmelerin LS veya JJ türü çiftlenimler oluşturduğunu göstermektedir.

Çoğu atomlar LS-çiftlenim türüne, iyi ya da kötü örnek oluştururlar. Özellikle hafif atomlarda LS-çiftlenimi oluşurken, ağır atomlara doğru gidildikçe JJ-çiftlenimine az da olsa rastlanır. Öte yandan atomun çekirdeğindeki proton ve nötronlarda ise JJ-çiftlenimi olduğu görülür. Nükleer kabuk modelinde manyetik kabuklar JJ-çiftlenimi sonucu oluşur.

## 4.1 LS-Çiftlenimi

LS çiftlenimine literatürde ***Russell-Saunders çiftlenimi*** de denir ve daha çok hafif atomlarda bu çiftlenim türüne rastlanır. Atom üzerine uygulanan dış alan şiddeti Zeeman bölgesinde kaldığı sürece de bu çiftlenim şekli bozulamaz, o

bakımdan LS-çiftlenimine ***"zayıf alan çiftlenimi"*** de denir. Bu çiftlenim türünde atomun elektronlarının yörünge açısal momentumları kendi aralarında, spin açısal momentumları da kendi aralarında, ayrı ayrı birleşerek;

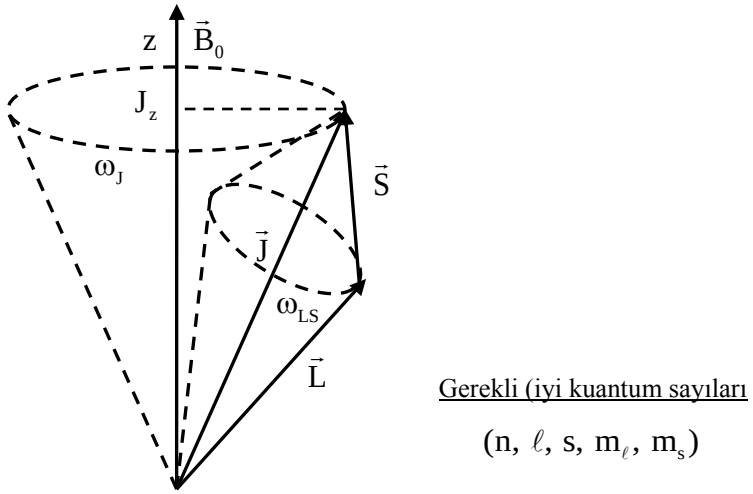
$$\vec{L} = \sum_i \vec{\ell}_i \tag{4.1}$$

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \tag{4.2}$$

atomun toplam yörünge ve toplam spin açısal momentumlarını oluştururlar. Atomun elektronlarına ait toplam açısal momentum ise

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \tag{4.3}$$

ile belirlidir (Gündüz 1999). Bu tür etkileşmeler, atomun düşük şiddetli bir manyetik alan içinde bulunması durumunda ağır atomlar hariç çoğu atom için geçerlidir. Atomun sahip olduğu yörünge açısal momentumu, her elektron için tek tek $\vec{\ell}_i$ değerlerinin, $\vec{S}$ spin açısal momentumu ise yine elektronların her biri için tek tek $\vec{s}_i$ değerlerinin bir bileşkesi olarak ortaya çıkmaktadır. LS çiftlenimi Şekil 4.1'de şematik olarak gösterilmiştir (Aygün ve Zengin 1998).




**Şekil 4.1:** LS-çiftleniminin şekli. Dış alan Zeeman bölgesindedir

Şekilde gösterildiği gibi bu çiftlenim türünde $\vec{L}$ ve $\vec{S}$ vektörleri çift oldukları $\vec{J}$ etrafında bir ortak $\omega_{LS}$ açısal frekansı ile presesyon hareketi yaparken, eğer bir dış alan uygulanmış ise $\vec{J}$ de dış alan etrafında $\omega_J$ frekansı ile presesyon hareketi yapar. Dış manyetik alan LS-çiftlenimini kıramadığına göre $\omega_{LS} > \omega_J$ olacağı açıktır. $\vec{L}$ ve $\vec{S}$'nin etkili olduğu bu çiftlenim türünde $\ell$, $m_\ell$ ve $s$, $m_s$ geçerli kuantum sayılarıdırlar. Yani kuantum sisteminin durumunu bu kuantum sayılarının değerleri belirler.

Görüldüğü gibi çiftlenim türünü, atomun içinde bulunduğu manyetik koşullar belirtmektedir. Şimdi, elektrik dipol seçim kuralları çiftlenim koşulları altında nasıl bir şekil alır sorusu akla gelebilir.

**LS-çiftleniminde elektrik dipol geçişler için:**

**a)** Parite değişir.

**b)** $\Delta\ell = \pm 1$

**c)** $\Delta m_\ell = 0, \pm 1$

**d)** $\Delta s = 0$ (kesin değil)

**e)** $\Delta j = 0; \pm 1$ (Fakat $0 \nleftrightarrow 0$)

**f)** $\Delta m_j = 0; \pm 1$ ($\Delta j = 0$ da $\Delta m_j \neq 0$)

ifadeleri yazılabilir (Aygün ve Zengin 1998).

$\vec{L} = \sum \vec{\ell}_i$ ve daha sonra LS çiftlenimlerinin oluşumunu sağlayan etkileşmeler elektriksel kökenlidir. Elektronların çekirdek etrafındaki belirli enerji durumlarında (kuantum düzeylerinde) bulunma olasılığını temsil eden $\Psi^2$ ifadesi, farklı kuantum düzeylerinde bulunan elektronlar için değişiklikler gösterir. s elektronları için $\ell = 0$ değerini aldığından, bu elektronların toplam açısal momentum vektörü olan $\vec{J}$ üzerinde herhangi bir katkısının olması söz konusu değildir. Buna karşılık; diğer elektronlar için $\Psi^2$ ifadesi küresel bir simetri göstermez. Dolayısı ile yükün asimetrik dağılımı, elektronlar arasındaki etkileşmeler sonucu $\vec{\ell}_i$ vektörlerinin

bağıl yönelimlerini etkileyecek, bu ise, yalnızca belirli yönelimlerin kararlı olduğu sonucunu doğuracaktır. Çok elektronlu atomlarda, elektronların her birisi için $\vec{\ell}_i$ açısal momentum vektörleri; $\vec{\ell}_i$'ler mümkün olan en küçük enerji düzeyinde, buna karşılık $\vec{L}$ vektörü maksimum değerini alacak tarzda bir araya gelirler. Sözgelimi, iki elektronlu bir atomda; aynı Bohr yörüngesi üzerinde hareket eden iki elektron arasındaki Coulomb türü itme kuvvetinin ortaya çıkması ile $\vec{L}$'nin maksimum değerini alması, ancak, elektronların ikisinin de aynı yörüngede ilerlemeleri durumunda mümkündür. Elektronların, aynı yörünge üzerinde birbirine karşıt dönmeleri halinde; birbirleri üzerinden daha sık olarak geçecek olmaları nedeni ile daha büyük bir enerji harcanarak, dolayısı ile de $\vec{L}$ minimum değerini alacaktır. Böyle bir durum, kuantum mekaniğin dili ile elektronların dalga fonksiyonlarının $\vec{L}$'nin maksimum değeri için, daha az üst üste binmelerine karşı gelmektedir (Gündüz 1999).

Tek sayıda elektronu olan bir atomda, $\vec{J}$'nin değeri $1/2$ veya bunun tek katlarına $(1/2,\ 3/2,\ 5/2,\ldots)$, çift sayıda elektronu olan atomlarda ise $J = 0, 1, 2, 3, \ldots$ gibi tamsayı değerlerini alabilir. $\vec{J}$'nin alabileceği değerlerin sayısı; **a)** $L > S$ olması durumunda $2S+1$, **b)** $L < S$ olması durumunda ise $2L+1$'dir. Özel olarak; $L = 0$ (s elektronları) için, $J = S$'dir. Örneğin; **a)** $L = 2$, $S = 1/2$ olması durumunda, $\vec{J}$'nin $J = 3, 2, 1$ olmak üzere üç ayrı değere sahip olabileceği, **b)** $L = 2, S = 3/2$ olması durumunda, $J = 7/2,\ 5/2,\ 3/2,\ 1/2$ olmak üzere dört ayrı değer, **c)** $L = 2$, $S = 5/2$ olması durumunda ise $J = 9/2,\ 7/2,\ 5/2,\ 3/2,\ 1/2$ olmak üzere beş ayrı değer almaktadır (Gündüz 1999).

### 4.2 JJ-Çiftlenimi

Çekirdeklerde nükleonların açısal momentumunun (spin) bağlanmalarında karşılaşılan bu çiftlenim türü özel olarak da ağır atomlarda oluşabilir. Atom numarası büyük olan bazı atomlarda; çekirdeğin elektriksel yükü, elektronların LS çiftlenimi yapmasını engelleyecek ölçüde etkin olabilir. Bu durumda LS çiftlenimleri

çözülmeye uğrar. Benzeri bir durum da, bu tür atomların şiddeti $1\mathrm{Wb}/\mathrm{m}^2$ (tesla)'dan daha büyük bir manyetik alan getirilmesi durumunda görülür. Bu olaya ***Paschen-Back*** etkisi denir. LS çiftleniminin bozulması halinde; her elektron için $\vec{\ell}_i$ ve $\vec{s}_i$ açısal momentum vektörleri için bir $\vec{j}_i$ toplam açısal momentum vektörü ortaya çıkar. Bunların bileşkesi ise atomun sahip olduğu toplam açısal momentum vektörünün değerini belirler:

$$\vec{j}_1 = \vec{\ell}_1 + \vec{s}_1 \tag{4.4a}$$

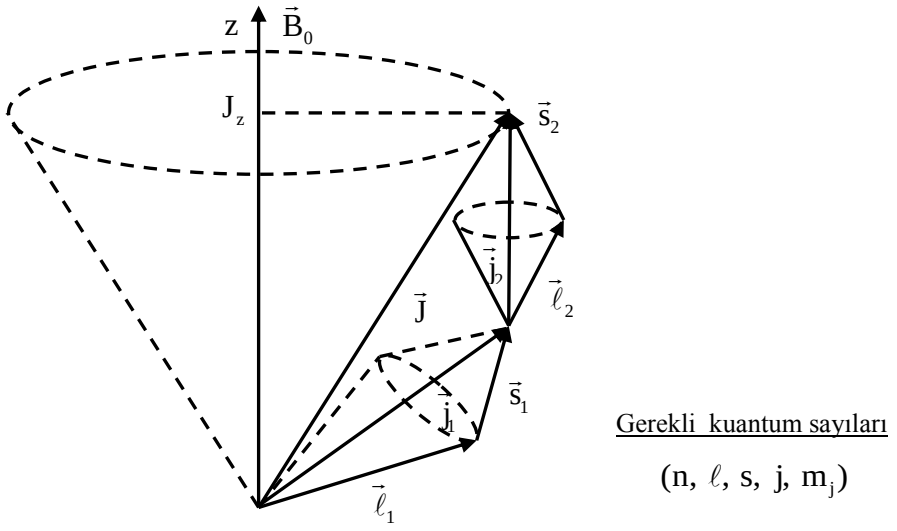
$$\vec{j}_2 = \vec{\ell}_2 + \vec{s}_2 \tag{4.4b}$$

$$\vec{j}_3 = \vec{\ell}_3 + \vec{s}_3 \tag{4.4c}$$

şeklinde bağlanırlar ve toplam açısal momentum

$$\vec{J} = \sum_i \vec{j}_i \tag{4.5}$$

olarak verilir. Bu etkileşim şekli de, oluşumdan kaynaklanan bir adlandırma ile ***JJ-çiftlenimi*** olarak bilinir. Bir JJ-çiftlenimi şematik olarak Şek. 4.2'de gösterilmiştir (Aygün ve Zengin 1998).




**Şekil 4.2:** İki elektronlu bir atomda, manyetik alanın Paschen-Back bölgesinde JJ-çiftleniminin şeması

JJ-çiftlenim türünde etkin açısal momentumlar $j_i$'ler olduğundan etkin kuantum sayıları da $j_i$ ve $m_j$'lerdir. Şimdi de burada söz konusu olan manyetik alanların yarattığı koşullar altında elektrik dipol seçim kuralları neler olabilir ona bakacak olursak:

**JJ-çiftleniminde elektrik dipol geçişler için:**

**a)** Parite değişir.

**b)** $\Delta\ell = \pm 1$ (aynı elektron için $\Delta j = \pm 1; 0$, fakat diğer elektronlar için $\Delta j = 0$)

**c)** $\Delta s = 0$ (kesin değil)

**d)** $\Delta j = \pm 1; 0$ (Fakat $0 \not\leftrightarrow 0$)

**e)** $\Delta m_j = \pm 1; 0$ ($\Delta j = 0$ da $\Delta m_j \neq 0$)

ifadeleri yazılabilir (Aygün ve Zengin 1998).

Toplam Yörünge Kuantum Sayısı : $\vec{L} = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5, \ldots$

Atomun Enerji Durumu : S, P, D, F, G, H, …

$$\vec{L} = \sum \vec{\ell}$$

Buna göre; bir s elektronu için $\vec{\ell} = 0$, p elektronu için $\vec{\ell} = 1$, d elektronu için $\vec{\ell} = 2 \ldots$ olduğu bilindiğine göre, çok elektronlu bir atomda $\vec{L} = \sum \vec{\ell}$ olmak üzere, atomun enerji durumunu belirleyen S, P, D, F, G, H, … harflerinin sol üstüne yerleştirilen sayı (örneğin $^2P$) o enerji düzeyinin çok katlılığını, yani $\vec{L}$ ve $\vec{S}$'nin mümkün olan değişik yönelimlerine bağlı olarak, $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$'nin alabileceği izinli değerlerin sayısını gösterir. $L > S$ olması halinde, $\vec{J}$'nin $\vec{L} + \vec{S}$, 0, L-S aralığında değişmesi nedeni ile çok katlılık $2S+1$'e eşittir. $S = 0$ için, söz konusu enerji düzeyi ***"tek" (singlet)*** olup, $L = S$'dir. $S = 1/2$ olması durumunda, $J = 2S+1 = 2(1/2)+1 = 2$ değerini aldığından, çok katlılık "iki" ye eşit, enerji düzeyi ise ***"çift" (dublet)*** dir.

$\vec{J}$'nin alabileceği değerler $J = L \pm 1/2$'dir. Buna karşılık, $S = 1$ olması halinde; çok katlılık "üç" e eşit olup, adı geçen enerji düzeyi ***"üçüz" (triplet)*** tir ve $J = L+1,\ L,\ L-1$ değerlerini alır. $L < S$ olması halinde; çok katlılık $2L+1$ sayıdadır. Her durumda $\vec{J}$ toplam açısal kuantum sayısının değeri, atomun enerji durumunu belirleyen harfin sağ-alt köşesine yazılır (Gündüz 1999). Örneğin $^2P_{3/2}$ enerji durumu, $S = 1/2,\ L = 1,\ J = 3/2$ durumuna karşı gelir.

### 4.3 Çiftlenim Şekilleri Arasındaki Dönüşümler

Atomik yapı hesaplamalarında en çok karşılaşılan çiftlenim şekilleri, LS, LK, JK ve JJ çiftlenimleridir. İki elektronun $l_1 s_1 l_2 s_2$ dört açısal momentumunun LS-LK dönüşümü yapılarak daha karmaşık durumlar bu dönüşüm işlemine benzer olarak ele alınabilir (Cowan 1968, Çelik 2005). Bu dönüşümler için matris elemanı:

$$\begin{aligned}\left\langle \left[ (j_1 j_2) J', j_3 \right] JM \middle| \left[ j_1, (j_2 j_3) J'' \right] JM \right\rangle &= (-1)^{j_1+j_2+j_3+J} \left[ J', J'' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} J' & j_3 & J \\ J'' & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \\ &= (-1)^{j_1+j_2+j_3+J} \left[ J', J'' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J' \\ j_3 & J & J'' \end{Bmatrix}\end{aligned} \tag{4.6}$$

olarak verilir. LS-LK çiftlenmiş fonksiyonları arasındaki matris elemanlarının dönüşümü Denk. (4.6) ifadesine benzer olarak,

$$\begin{aligned}T_{LS-L'K'} &\equiv \left\langle \left[ (l_1 l_2) L, (s_1 s_2) S \right] J \middle| \left[ (l_1 l_2) L', s_1 \right] K', s_2 J \right\rangle \\ &= \delta_{LL'} (-1)^{L+s_1+s_2+J} \left[ K', S \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & s_1 & K' \\ s_2 & J & S \end{Bmatrix}\end{aligned} \tag{4.7}$$

ile verilir. Burada sadece gösterim farklıdır. Denk. (4.7)'deki $\delta$ çarpanı kısmi çiftlenmiş $\left| (l_1 l_2) L M_L \right\rangle$ fonksiyonlarının ortonormalliğinden gelir. Gösterimde kuantum sayısı M ihmal edilebilir. Benzer olarak LK-JK ve JK-JJ dönüşüm matris elemanları,

$$\left\langle \left[ (j_1 j_2) J', j_3 \right] JM \middle| \left[ (j_1 j_3) J'', j_2 \right] JM \right\rangle$$

$$= (-1)^{J'+j_3-J-j_1-j_3+J''} \left\langle \left[ j_3, (j_1 j_2) J', j_3 \right] JM \middle| \left[ (j_3 j_1) J'', j_2 \right] JM \right\rangle$$

$$= (-1)^{J'-J-j_1+J''+j_3+j_1+j_2+J} \left[ J', J'' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_3 & j_1 & J'' \\ j_2 & J & J' \end{Bmatrix} \tag{4.8}$$

$$= (-1)^{j_2+j_3+J'+J''} \left[ J', J'' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & J' \\ j_3 & J & J'' \end{Bmatrix}$$

ve Denk. (4.6)'dan yararlanarak,

$$T_{L'K',j_1K} \equiv \left\langle \left[ (l_1 l_2) L', s_1 \right] K', s_2, J \middle| \left[ (l_1 s_1) j_1, l_2 \right] K, s_2, J \right\rangle$$

$$= \delta_{KK'} (-1)^{l_2+s_1+L'+j_1} \left[ L', j_1 \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_2 & l_1 & L' \\ s_1 & K & j_1 \end{Bmatrix} \tag{4.9}$$

$$T_{j_1K,j_1'j_2} \equiv \left\langle \left[ (l_1 s_1) j_1, l_2 \right] K, s_2, J \middle| \left[ (l_1 s_1) j_1', (l_2 s_2) j_2 \right] J \right\rangle$$

$$= \delta_{j_1 j_1'} (-1)^{l_2+l_2+s_2+J} \left[ K, j_2 \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & K \\ s_2 & J & j_2 \end{Bmatrix} \tag{4.10}$$

olarak elde edilir (Cowan 1981, Çelik 2005).

LS-JK çiftlenmiş fonksiyonlar arasındaki dönüşüm matrisi LS-LK ve LK-JK dönüşüm matrislerinin matris çarpımıyla verilir. Çarpım matrislerinin hesaplanan her elemanında ele alınan $L'K'$ üzerinden toplam Denk. (4.7) ve Denk. (4.8)'deki $\delta$ çarpanından dolayı tek bir terime indirgenir,

$$T_{LS,JK} \equiv \left\langle \left[ (l_1 l_2) L, (s_1 s_2) S \right] J \middle| \left[ (l_1 s_1) j_1, l_2 \right] K, s_2, J \right\rangle$$

$$= (-1)^{s_2+J-l_2-j_1} \left[ L, S, j_1, K \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & s_1 & K \\ s_2 & J & S \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_2 & l_1 & L \\ s_1 & K & j_1 \end{Bmatrix} \tag{4.11}$$

olarak verilir (Çelik 2005). Benzer bir şekilde LK-JJ dönüşümü için matris elemanları basit olarak hesaplanabilir. Denk. (4.8) ve Denk. (4.9)'un çarpımlarıyla verilir,

$$\begin{aligned} T_{LK,JJ} &\equiv \left\langle \left[ \left( l_1 l_2 \right) L, s_1 \right] K, s_2, J \middle| \left[ \left( l_1 s_1 \right) j_1, \left( l_2 s_2 \right) j_2 \right] J \right\rangle \\ &= (-1)^{s_1+L-s_2-J} \left[ L, K, j_1 j_2 \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_2 & l_1 & L \\ s_1 & K & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & K \\ s_2 & J & j_2 \end{Bmatrix} \end{aligned} \tag{4.12}$$

olarak verilir. LS-çiftlenmiş baz fonksiyonları arasındaki dönüşüm matrisi Denk. (4.7), Denk. (4.8) ve Denk. (4.9)'un çift matris çarpımıyla verilir. Burada matris elemanları sadece K üzerinden tek bir toplam içerir. Denk. (4.7) ve Denk. (4.12) ifadelerinden yararlanarak,

$$\begin{aligned} T_{LS,JJ} &\equiv \sum_K T_{LS,LK} . T_{LK,JK} . T_{jK,JJ} \\ &= \left[ L, S, j_1 j_2 \right]^{1/2} \sum_K (-1)^{2(L+s_1)} \left[ K \right] \begin{Bmatrix} L & s_1 & K \\ s_2 & J & S \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_2 & l_1 & L \\ s_1 & K & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & l_2 & K \\ s_2 & J & j_2 \end{Bmatrix} \end{aligned} \tag{4.13}$$

yazılabilir ve

$$\begin{aligned} T_{LS,JJ} &= \left[ L, S, j_1 j_2 \right]^{1/2} \sum_K (-1)^{2K} \left[ K \right] \begin{Bmatrix} l_2 & s_2 & j_2 \\ J & j_1 & K \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ s_2 & K & s_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & s_1 & j_1 \\ K & l_2 & L \end{Bmatrix} \\ &= \left[ L, S, j_1 j_2 \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ s_1 & s_2 & S \\ j_1 & j_2 & J \end{Bmatrix} \end{aligned} \tag{4.14}$$

olarak elde edilir.

## 5. EN ZAYIF BAĞLI ELEKTRON POTANSİYEL MODEL TEORİSİ (WBEPMT)

En zayıf bağlı elektron kabulü serbest bir parçacığın iyonlaşma potansiyelinin tanımlanmasıyla başlamaktadır (Thewlis 1961). Atomlar ve moleküller gibi kuantum sistemleri için iyonlaşma potansiyeli sisteme en zayıf bağlı elektronun, bulunduğu temel seviyeden tamamen koparılması için dışarıdan verilmesi gereken minimum enerji olarak tanımlanmaktadır. Bu durum, teori olarak ilk defa Zheng tarafından ortaya atılmıştır (Zheng 1986, Zheng ve ark 2001-a-c, Çelik 2005).

Atomik ya da moleküler yapıların uyarılma ve iyonlaşma enerjileriyle ilgili hesaplanmış bu yapılara ait birçok fiziksel özellik hakkında doğru bilgiler vermektedir. Hem uyarma hem de iyonlaşma sürecinde sistemde en aktif elektron, sisteme en zayıf bağlı olan elektrondur ve bu süreç içerisinde önemli rol oynamaktadır. Sisteme en zayıf bağlı elektronu koparmak ve iyonlaştırmak en kolaydır. Bu nedenle çok elektronlu sistemlerde en zayıf bağlı elektron sistemdeki diğer elektronlara göre kolay koparılabilecek ya da uyarılabilecek olan elektrondur.

Birçok fiziksel ve kimyasal özellik sistemdeki en zayıf bağlı elektronun davranışı içerisinde ele alınabilmektedir ve geçişler uyarılma ve iyonlaşma gibi bazı atomik ya da iyonik özellikler en zayıf bağlı elektronun davranışına göre belirlenebilmektedir. Zheng kendi teorisinde, çok elektronlu bir atomda bulunan elektronları sisteme en zayıf bağlı bir elektron ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar olarak iki kısma ayırıp seçilen sistemde en zayıf bağlı elektronun durumunu tek elektron problemine benzetmektedir (Zheng 1988-a-b, Zheng ve Xin 1991, Zheng ve Li 1994, Zheng ve Wang 2003, Çelik 2005). Böyle bir düşünceye örnek olarak $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$ elektronik konfigürasyonuna sahip Krypton atomu verilebilir. Bu konfigürasyondaki altı 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 nötral Krypton atomunun en zayıf bağlı elektronu olacaktır. $(Ar)4s^2 4p^5 ns \quad (n > 5)$ konfigürasyonunda $ns$ elektronu en zayıf bağlı elektron olarak tanımlanırken diğer $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$ ve $4p^5$ elektronları en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak göz önüne alınmaktadır.

En zayıf bağlı olmayan elektronlar ve çekirdek bir tüm iyon çekirdeği olarak davranabilir ve en zayıf bağlı elektron olan iyon çekirdeğin ortalama potansiyelinde hareket eder. Bu yüzden çok valans elektronuna sahip sistemler tek elektronlu sistemler gibi davranabilmektedir**.**

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisinin diğer yöntem veya teorilerden üstünlüğü, bu teori de sadece sisteme en zayıf bağlı elektronla ilgilenildiğinden sistemdeki diğer elektronlarla ilgili karmaşık hesaplamalardan kaçınılmaktadır. Bu yöntemde atomik özelliklerin düzenliliklerinin araştırılması daha kolaydır ve diğer teorilere göre daha doğru sonuçlar elde edilebilmektedir. Ayrıca bir atomun toplam dalga fonksiyonu, toplam enerjisi ve atomik enerji seviyeleri arasındaki geçişler gibi özellikleri sisteme en zayıf bağlı elektronun davranışı içersinde ele alınabilmektedir. Böylelikle karmaşık çok elektron problemi sisteme en zayıf bağlı olan tek bir elektronun basit analitik tek elektron problemine indirgenebilmektedir (Zheng ve ark. 2004-a,b, Çelik 2005).

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisine uygun olarak verilen bir sistemdeki 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 alan Coulomb potansiyeldir. Sisteme en zayıf bağlı elektronun dışındaki diğer elektronların perdelenmesi en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisinden dolayı tam değildir. Bunun için bu yöntemde potansiyel fonksiyonun Coulomb teriminde bir etkin çekirdek yükü, $Z^*$ kullanılır. Potansiyel alanın ikinci kısmı 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,

$$-\frac{\beta}{r_i^2} \tag{5.1}$$

şeklinde tanımlanabilir. Bu durumda toplam potansiyel fonksiyonu,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} - \frac{\beta}{r_i^2} \tag{5.2}$$

olarak verilir. Bu toplam potansiyel en zayıf bağlı elektronun Schrödinger denkleminde kullanılarak,

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r_i) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \tag{5.3}$$

ve bazı dönüşümler yapılarak, radyal denklem çözülüp $\beta$ parametresi,

$$\beta = \frac{\left[ d(d+1) + 2dl \right]}{2} \tag{5.4}$$

olarak türetilebilir. Bu durumda potansiyel,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{\left[ d(d+1) + 2dl \right]}{2 r_i^2} \tag{5.5}$$

biçiminde yeniden yazılabilir (Çelik ve ark. 2006-a-c). Bu potansiyel Denk. (5.3)'te kullanılarak Schrödinger denklemi,

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{-Z^*}{r_i} + \frac{d(d+1) + 2dl}{2r_i^2} \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \tag{5.6}$$

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. Buradaki $d$, tamsayı olmayan $n^*$ ve $l^*$ kuantum sayılarıyla tam sayı olan $n$ ve $l$ kuantum sayılarından yararlanılarak belirlenmektedir. En zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonu genel olarak,

$$\psi_i(r_i, \theta_i, \varphi_i) = R_{n^* l^*}(r_i)\ Y_{l,m}(\theta_i, \varphi_i) \tag{5.7}$$

biçiminde yazılır. Radyal denklemin çözümü sürecinde Denk. (5.3)'teki ilk operatörden gelen $\frac{l(l+1)}{2r^2}$ merkezcil potansiyelinin yerine, $\frac{l^*(l^*+1)}{2r^2}$ ifadesi

yazılmaktadır ve d'ye bağlı terim Denk. (5.5)'teki ikinci terimle gösterilmektedir. Hidrojen atomu problemine küçük bir değişiklik yaparak en zayıf bağlı elektron için tek elektron Schrödinger denkleminin çözümü,

$$\psi = C\exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n^*-l^*-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right) Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{5.8}$$

şeklinde ifade edilir. Burada $C$ normalizasyon katsayısı olup,

$$C = \left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n^*-l^*-1)!}\Gamma(n^*-l^*+1)\right]^{-1/2} \tag{5.9}$$

olarak verilir ve ifadedeki $n^*$, $l^*$ ve $\varepsilon$,

$$l^* = l + d \tag{5.10}$$

$$n^* = n + d \tag{5.11}$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \tag{5.12}$$

şeklinde tanımlanmaktadır (Zheng 1977, 1986, 1987, Zheng ve Xin 1991, Zheng ve Li 1994, Zheng ve ark. 2000-a,d, 2001-a,b,c, Çelik 2005). Denk. (5.12) ile tanımlanan $\varepsilon$, en zayıf bağlı elektronun enerjisi olup buradaki $Z^*$, sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronların perdeleme etkisi ile en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisini hesaba katan etkin çekirdek yüküdür. $n^*$ ise en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisini hesaba katan etkin başkuantum sayısını göstermektedir. Atomik hacim arttıkça zayıf bağlı olmayan elektronlar çok daha kolay bozunur ve en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisi artar (Zheng ve ark. 2000-c). Radyal fonksiyon için,

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1 \tag{5.13}$$

normalizasyon şartı kullanılarak ve iki Laguerre polinomunun integral formülünden,

$$\int_0^{\infty} t^{\lambda} e^{-t} L_m^{\mu}(t) L_{m'}^{\mu'}(t)\, dt = (-1)^{m+m'} \Gamma(\lambda+1) \times \sum_k \binom{\lambda-\mu}{m-k} \binom{\lambda-\mu'}{m'-k} \binom{\lambda+k}{k} \quad (5.14)$$

$(n_i, l_i)$ seviyesinden $(n_f, l_f)$ seviyesine geçiş için $r^k$'nın beklenen değeri ya da radyal geçiş integrali,

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

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

$$\left[\frac{n_i^{*4}\,\Gamma(n_i^*+l_i^*+1)}{4Z_i^{*3}(n_i-l_i-1)!}\right]^{-1/2} \times \sum_{m_1=0}^{n_f-l_f-1} \sum_{m_2=0}^{n_i-l_i-1} \frac{(-1)^{m_2}}{m_1!\,m_2!} \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{m_1+m_2} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} + \frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{-m_1-m_2} \text{x} \quad (5.15)$$

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

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

olarak verilir (Zheng 2000-a-d, Çelik 2005).

Burada $S = \min\left\{ n_f^*-l_f^*-1-m_1,\ n_i^*-l_i^*-1-m_2 \right\}$ dir ve $k > -l_f^*-l_i^*-3$ şartını sağlamaktadır. Elde edilen bu ifadede $i=f$ ve $k=1$ yazılarak en zayıf bağlı elektronun konumunun beklenen değer ifadesi,

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^*+1)}{2Z^*} \quad (5.16)$$

olarak bulunur. Denk. (5.12)'de en zayıf bağlı elektronun $\varepsilon$ enerjisinin negatifi, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisine eşittir. Yani,

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \tag{5.17}$$

olarak tanımlanır. Burada Denk. (5.15) kullanılarak atomik sistemlere ait osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam süreleri gibi fiziksel özellikler hesaplanabilir. Elde edilen matris elemanının hesaplanmasında $Z^*$, $n^*$ ve $l^*$ parametrelerini belirlemek yeterlidir. Bu parametrelerin teorik yöntemler kullanılarak doğrudan hesaplanmasında bazı zorluklarla karşılaşıldığı bilinmektedir (Zheng ve ark.1999). Bunun için en zayıf bağlı elektronun enerji denklemi ve radyal beklenen değer ifadesini deneysel verilere göre belirleyen,

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \tag{5.18a}$$

ve

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^*+1)}{2Z^*} \tag{5.18b}$$

denklemleri kullanılır. Burada $I$ iyonlaşma enerji değerleri birçok deneysel veriden alınabilir. $\langle r \rangle$ beklenen değerleri de Sayısal Coulomb Yaklaşımı (NCA), Roothann-Hartree-Fock yöntemi (RHF), Multikonfigürasyonel Hartree-Fock yöntemi (MCHF), Hartree-Slater yöntemi (HS), Hartree-Kohn-Sham yöntemi (HKS) ve Zamana bağlı Hartree-Fock (TDHF) yöntemi gibi birçok teorik yöntemle belirlenebilir (Desclaux 1969, Lindgard ve Nielsen 1975, 1977, Kundu ve Mukherje 1984, Theodosiou 1984, Viswanath ve Sen 1989, King 1991).

# 6. ARAŞTIRMA, SONUÇLARI VE TARTIŞMA

## 6.1 Araştırma ve Sonuçları

Elektrik dipol geçişleri Denk. (2.44)'te verilen elemanlar sıfırdan farklı olduğu durumda gerçekleşir. Herhangi bir $\gamma' J' M'$ durumundan $\gamma J$ seviyesinin tüm $M$ durumlarına geçiş göz önüne alındığında elektrik dipol geçiş olasılığı,

$$A = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h(2J'+1)} S \qquad (6.1)$$

ve osilatör şiddeti,

$$f_{ij} = \frac{8\pi^2 mca_0^2 \sigma}{3h(2J+1)} S = \frac{(E_j - E_i)}{3(2J+1)} S \qquad (6.2)$$

biçiminde tanımlanır. Denk. (6.1) ve Denk. (6.2)'de $S$, çizgi şiddetini, $\sigma$ ve $(E_j - E_i)$ ilgili iki seviye arasındaki geçiş enerjisini göstermektedir. Hem geçiş olasılığı hem de osilatör şiddetleri hesaplamalarında önemli olan çizgi şiddeti ifadesinin doğru olarak belirlenmesidir. Çizgi şiddeti, hesaplamalarda göz önüne alınan her bir çiftlenin durumuna göre farklı tanımlanır. Hafif atomlarda baskın olan çiftlenim durumu, LS çiftlenimi olduğundan bu çalışmalardaki geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleriyle ilgili hesaplamalar LS çiftleniminin baskınlığı göz önüne alınarak yapılmıştır. Bu çalışmada uyarılmış iki seviye arasındaki geçişleri sembolize eden $l_1^n l_2 \rightarrow l_1^n l_2'$ tipi geçiş ve temel seviyeden uyarılmış seviyelere geçişi sembolize eden $l_1^n \rightarrow l_1^{n-1} l_2$ tipi geçişlere ait geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri hesaplanmıştır. LS çiftleniminde; $l_1^n l_2 \rightarrow l_1^n l_2'$ şeklindeki geçişler için elektrik dipol çizgi şiddeti,

$$\sqrt{S_{LS}} \equiv \left\langle \left[ \left( ...\alpha_1 L_1, l_2 \right) L \left( ...S_1 s_2 \right) S \right] J \left\| \mathbf{r}_N^{(1)} \right\| \left[ \left( ...\alpha_1' L_1', l_2' \right) L' \left( ...S_1' s_2 \right) S' \right] J' \right\rangle$$

$$= (-1)^{S+J'+L_1+l_2'} \left[ J, J', L, L' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l_2' \end{Bmatrix} P_{l_1 l_2}^{(1)} \qquad (6.3)$$

$l_1^n \to l_1^{n-1} l_2$ şeklindeki geçişler için elektrik dipol çizgi şiddeti,

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

$$= \delta_{S_1 S'} (-1)^{L_1' + l_2 + S_1 + J'} \left( n. \left[ L_1, L', J, J' \right] \right)^{1/2} \qquad (6.4)$$

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

şeklinde tanımlanır. Denk. (6.3) ve Denk. (6.4), 6-j sembollerine ve radyal geçiş integraline bağlı olarak yazılmaktadır. 6-j sembolünün özellikleri Bölüm 3.2'de detaylı olarak verilmiştir. Matris elemanının radyal kısmı olan radyal geçiş integrali tüm çiftlenim durumlarında,

$$P_{nl,n'l'}^{(1)} \equiv \delta_{l',l\pm1} (-1)^{l+l_>} (l_>)^{1/2} \int_0^\infty P_{nl}(r)\, r\, P_{n'l'}(r)\, dr = (-1)^{l-l'} P_{l'l}^{(1)} = -P_{l'l}^{(1)} \qquad (6.5)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Temel seviyeden uyarılmış seviyeye geçişlerde $n > l$ durumunda çizgi şiddeti özdeş elektronlar içerdiğinden bu tür geçiş durumunda özdeş elektron sayısı ve fraksiyonel parantez (antisimetrikleşme) katsayısı ile çarpılmaktadır. p, d ve f kabuklarının fraksiyonel parantez katsayıları literatürde verilmektedir (Sobelman 1975, Cowan 1981). Bu çalışmada radyal geçiş integrallerinin hesaplanmasında en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi (WBEPMT) kullanılmıştır.

Geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri için Denk. (5.15)'teki verilen radyal geçiş integralleri ve bu çalışmada kullanılan tüm parametrelerin hesaplanmasında Fortran 77 programlama dilinde real*8 aritmetiğinde bilgisayar programları kullanılmıştır. Radyal geçiş integrallerinin hesaplanması için gerekli olan

parametrelerin belirlenmesinde enerji değerleri için literatürdeki deneysel enerji verileri (Ralchenko ve ark. 2009), beklenen değerlerin belirlenmesi için Sayısal Coulomb Yaklaşımı (NCA) (Lindgard ve Nielsen 1975, 1977), nümerik non-relativistik Hartree-Fock (NRHF) dalga fonksiyonları için Multikonfigürasyonel hesaplama sürecini temel alan HF96 paket programı kullanılmıştır (Gaigalas ve Fischer 1996). Deneysel enerji değerleri ve elde edilen beklenen değer sonuçları Denk. (5.18a) ve Denk. (5.18b)'de kullanılarak Bor, Berilyum, Karbon ve bir kez iyonlaşmış Oksijende radyal integrallerin belirlenmesi için gerekli olan parametreler hesaplanmıştır. Bor atomuna ait parametreler Çizelge (6.1.1)'de verilmektedir. Parametreler belirlendikten sonra Bor, Karbon ve bir kez iyonlaşmış Oksijen için hem ince yapı hem de multiplet seviyeler arasındaki elektrik dipol osilatör şiddetleri Berilyum atomunda ise elektrik dipol geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar literatürdeki teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılarak Çizelge (6.1.2-6.1.5)'te verilmiştir.

**Çizelge 6.1.1:** Bor atomunun osilatör şiddetlerinin hesaplanmasında kullanılan parametreler

| Seviyeler | n | $l$ | d | $Z^*$ | <r> (a.u.) | Enerji ($cm^{-1}$) (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $1s^2 2s^2 3s\ ^2S_{1/2}$ | 3 | 0 | -0.9826218 | 0.9986035 | 6.1218091 | 26888.450 |
| $1s^2 2s^2 3p\ ^2P_{1/2}$ | 3 | 1 | -0.7854374 | 0.9047519 | 7.9868645 | 18316.283 |
| $1s^2 2s^2 3p\ ^2P_{3/2}$ | 3 | 1 | -0.7852724 | 0.9047752 | 7.9877394 | 18314.500 |
| $1s^2 2s^2 4s\ ^2S_{1/2}$ | 4 | 0 | -0.9688863 | 0.9989076 | 13.811635 | 11917.919 |
| $1s^2 2s^2 3d\ ^2D_{3/2}$ | 3 | 2 | 0.0073581 | 1.0011131 | 10.536153 | 12160.467 |
| $1s^2 2s^2 3d\ ^2D_{5/2}$ | 3 | 2 | 0.0073968 | 1.0011190 | 10.536343 | 12160.296 |
| $1s^2 2s^2 4p\ ^2P_{1/2}$ | 4 | 1 | -0.6862802 | 0.9564289 | 17.006006 | 9141.724 |
| $1s^2 2s^2 4p\ ^2P_{3/2}$ | 4 | 1 | -0.6861299 | 0.9564390 | 17.007263 | 9141.086 |
| $1s^2 2s^2 5s\ ^2S_{1/2}$ | 5 | 0 | -0.9790742 | 0.9995779 | 24.272253 | 6781.650 |
| $1s^2 2s^2 4d\ ^2D_{3/2}$ | 4 | 2 | -0.0349615 | 0.9967445 | 20.736595 | 6934.690 |
| $1s^2 2s^2 4d\ ^2D_{5/2}$ | 4 | 2 | -0.0349159 | 0.9929741 | 20.736937 | 6934.590 |
| $1s^2 2s^2 4f\ ^2F_{5/2}$ | 4 | 3 | -0.0209694 | 0.9975452 | 17.866056 | 6897.073 |
| $1s^2 2s^2 4f\ ^2F_{7/2}$ | 4 | 3 | -0.0209694 | 0.9975452 | 17.866056 | 6897.073 |
| $1s^2 2s^2 5p\ ^2P_{1/2}$ | 5 | 1 | -0.6361346 | 0.9751794 | 29.037577 | 5480.000 |
| $1s^2 2s^2 6s\ ^2S_{1/2}$ | 6 | 0 | -1.0297493 | 1.0004136 | 37.024454 | 4445.870 |
| $1s^2 2s^2 5d\ ^2D_{3/2}$ | 5 | 2 | -0.0434012 | 0.9973078 | 34.051039 | 4442.680 |
| $1s^2 2s^2 5d\ ^2D_{5/2}$ | 5 | 2 | -0.0432719 | 0.9973158 | 34.052373 | 4442.520 |
| $1s^2 2s^2 5f\ ^2F_{5/2}$ | 5 | 3 | -0.0209726 | 0.9983079 | 31.312235 | 4411.580 |
| $1s^2 2s^2 5f\ ^2F_{7/2}$ | 5 | 3 | -0.0209726 | 0.9983079 | 31.312235 | 4411.580 |
| $1s^2 2s^2 7s\ ^2S_{1/2}$ | 7 | 0 | -0.7189562 | 0.9982958 | 59.379487 | 2772.100 |
| $1s^2 2s^2 6d\ ^2D_{3/2}$ | 6 | 2 | -0.0457250 | 0.9979878 | 50.394755 | 3082.810 |
| $1s^2 2s^2 6d\ ^2D_{5/2}$ | 6 | 2 | -0.0457250 | 0.9979878 | 50.394755 | 3082.810 |
| $1s^2 2s^2 6f\ ^2F_{5/2}$ | 6 | 3 | -0.0203907 | 0.9988081 | 47.761675 | 3061.770 |
| $1s^2 2s^2 6f\ ^2F_{7/2}$ | 6 | 3 | -0.0203907 | 0.9988081 | 47.761675 | 3061.770 |
| $1s^2 2s^2 7d\ ^2D_{3/2}$ | 7 | 2 | -0.0467341 | 0.9984698 | 69.744323 | 2262.800 |
| $1s^2 2s^2 7d\ ^2D_{5/2}$ | 7 | 2 | -0.0466545 | 0.9984724 | 69.745609 | 2262.760 |
| $1s^2 2s^2 7f\ ^2F_{5/2}$ | 7 | 3 | -0.0198720 | 0.9991238 | 67.211520 | 2248.360 |
| $1s^2 2s^2 7f\ ^2F_{7/2}$ | 7 | 3 | -0.0198720 | 0.9991238 | 67.211520 | 2248.360 |
| $1s^2 2s^2 8d\ ^2D_{3/2}$ | 8 | 2 | -0.0468248 | 0.9988167 | 92.104443 | 1730.790 |
| $1s^2 2s^2 8d\ ^2D_{5/2}$ | 8 | 2 | -0.0468823 | 0.998815 | 92.103344 | 1730.810 |
| $1s^2 2s^2 9d\ ^2D_{3/2}$ | 9 | 2 | -0.0470028 | 0.9990564 | 117.46147 | 1366.460 |
| $1s^2 2s^2 9d\ ^2D_{5/2}$ | 9 | 2 | -0.0470028 | 0.9990564 | 117.46147 | 1366.460 |

**Çizelge 6.1.2:** Bor atomunda en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile hesaplanan osilatör şiddetleri (Tekeli ve ark. 2008)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | İstatiksel Ağırlık (2j+1) | | Dalgaboyu (Å) | Bu Çalışma | Atomic Line Data Değerleri | Kritik Değerler (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^2 3s$ | $2s^2 3p$ | $^2S$ | $^2P°$ | 2 | 6 | 11664.043 | 1.06e+00 | - | 1.06e+00[C] |
| | | | | 2 | 2 | 11665.661 | 3.53e-01 | 3.53e-01 | 3.55e-01[C] |
| | | | | 2 | 4 | 11663.235 | 7.06e-01 | 7.07e-01 | 7.10e-01[C] |
| $2s^2 3s$ | $2s^2 4p$ | $^2S$ | $^2P°$ | 2 | 6 | 5634.707 | 4.41e-03 | - | - |
| | | | | 2 | 2 | 5634.842 | 1.48e-03 | 1.07e-03 | - |
| | | | | 2 | 4 | 5634.639 | 2.92e-03 | 2.14e-03 | - |
| $2s^2 3p$ | $2s^2 4s$ | $^2P°$ | $^2S$ | 6 | 2 | 15631.900 | 1.79e-01 | - | 1.80e-01[C] |
| | | | | 2 | 2 | 15628.995 | 1.79e-01 | 2.05e-01 | 1.90e-01[C] |
| | | | | 4 | 2 | 15633.351 | 1.80e-01 | 2.05e-01 | 1.89e-01[C] |
| $2s^2 3p$ | $2s^2 5s$ | $^2P°$ | $^2S$ | 6 | 2 | 8670.437 | 2.10e-02 | - | 1.83e-02[C] |
| | | | | 2 | 2 | 8669.543 | 2.10e-02 | 2.08e-02 | 1.83e-02[C] |
| | | | | 4 | 2 | 8670.883 | 2.10e-02 | 2.08e-02 | 1.83e-02[C] |
| $2s^2 3p$ | $2s^2 6s$ | $^2P°$ | $^2S$ | 6 | 2 | 7210.208 | 8.51e-03 | - | - |
| | | | | 2 | 2 | 7209.590 | 8.52e-03 | 6.87e-03 | - |
| | | | | 4 | 2 | 7210.517 | 8.51e-03 | 6.87e-03 | - |
| $2s^2 3p$ | $2s^2 3d$ | $^2P°$ | $^2D$ | 6 | 10 | 16247.666 | 8.95e-01 | - | 9.10e-01[C] |
| | | | | 2 | 4 | 16244.800 | 8.95e-01 | 8.24e-01 | 9.10e-01[C] |
| | | | | 4 | 4 | 16249.506 | 8.95e-01 | 8.24e-01 | 9.10e-01[C] |
| | | | | 4 | 6 | 16249.055 | 8.06e-01 | 7.41e-01 | 8.19e-01[C] |
| $2s^2 3p$ | $2s^2 4d$ | $^2P°$ | $^2D$ | 6 | 10 | 8786.988 | 7.47e-04 | - | - |
| | | | | 2 | 4 | 8786.039 | 7.51e-04 | - | - |
| | | | | 4 | 4 | 8787.492 | 7.44e-05 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 8787.415 | 6.71e-04 | - | - |
| $2s^2 4p$ | $2s^2 4d$ | $^2P°$ | $^2D$ | 6 | 10 | 45317.172 | 1.27e+00 | - | - |
| | | | | 2 | 4 | 45309.678 | 1.27e+00 | 1.26e+00 | - |
| | | | | 4 | 4 | 45322.779 | 1.27e+00 | 1.26e+00 | - |
| | | | | 4 | 6 | 45320.725 | 1.14e+00 | 1.26e+00 | - |
| $2s^2 4p$ | $2s^2 5s$ | $^2P°$ | $^2S$ | 6 | 2 | 42379.184 | 3.27e-01 | - | - |
| | | | | 2 | 2 | 42371.552 | 3.27e-01 | 3.35e-01 | - |
| | | | | 4 | 2 | 42383.010 | 3.27e-01 | 3.35e-01 | - |
| | | | | | | | | | - |
| $2s^2 4p$ | $2s^2 6s$ | $^2P°$ | $^2S$ | 6 | 2 | 21297.308 | 2.87e-02 | - | |
| | | | | 2 | 2 | 21295.380 | 2.87e-02 | 2.89e-02 | - |
| | | | | 4 | 2 | 21298.274 | 2.87e-02 | 2.89e-02 | - |
| | | | | | | | | | - |
| $2s^2 4p$ | $2s^2 7s$ | $^2P°$ | $^2S$ | 6 | 2 | 15700.561 | 1.12e-04 | - | - |
| | | | | 2 | 2 | 15699.513 | 1.12e-04 | 8.98e-03 | |
| | | | | 4 | 2 | 15701.086 | 1.12e-04 | 8.98e-03 | - |

**Çizelge 6.1.2:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | İstatiksel Ağırlık (2j+1) | | Dalgaboyu (Å) | Bu Çalışma | Atomic Line Data Değerleri | Kritik Değerler (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^2 3d$ | $2s^2 4f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 18999.519 | 1.02e+00 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 18999.147 | 1.02e+00 | 9.85e-01 | - |
| | | | | 6 | 6 | 18999.764 | 4.87e-02 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 18999.764 | 9.75e-01 | 9.85e-01 | - |
| $2s^2 3d$ | $2s^2 5f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 12905.250 | 1.48e-01 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 12905.079 | 1.48e-01 | 1.30e-01 | - |
| | | | | 6 | 6 | 12905.363 | 7.08e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 12905.363 | 1.41e-01 | 1.30e-01 | - |
| $2s^2 3d$ | $2s^2 6f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 10990.709 | 5.43e-02 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 10990.584 | 5.43e-02 | 4.17e-02 | - |
| | | | | 6 | 6 | 10990.791 | 2.58e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 10990.791 | 5.17e-02 | 4.17e-02 | - |
| $2s^2 3d$ | $2s^2 7f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 10088.777 | 2.74e-02 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 10088.672 | 2.73e-02 | 1.90e-02 | - |
| | | | | 6 | 6 | 10088.846 | 1.30e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 10088.846 | 2.60e-02 | 1.90e-02 | - |
| $2s^2 4f$ | $2s^2 5d$ | $^2F°$ | $^2D$ | 14 | 10 | 40741.611 | 1.13e-04 | - | - |
| | | | | 6 | 4 | 40743.271 | 1.05e-04 | 9.73e-03 | - |
| | | | | 6 | 6 | 40740.615 | 7.53e-04 | - | - |
| | | | | 8 | 6 | 40740.615 | 1.12e-04 | 9.73e-03 | - |
| $2s^2 4f$ | $2s^2 6d$ | $^2F°$ | $^2D$ | 14 | 10 | 26217.384 | 1.60e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 4 | 26217.384 | 1.89e-03 | 1.82e-03 | - |
| | | | | 6 | 6 | 26217.384 | 1.35e-04 | - | - |
| | | | | 8 | 6 | 26217.384 | 2.03e-03 | - | - |
| $2s^2 4f$ | $2s^2 7d$ | $^2F°$ | $^2D$ | 14 | 10 | 21578.264 | 9.30e-04 | - | - |
| | | | | 6 | 4 | 21578.357 | 8.68e-04 | 6.68e-04 | - |
| | | | | 6 | 6 | 21578.171 | 6.20e-05 | - | - |
| | | | | 8 | 6 | 21578.171 | 9.30e-04 | - | - |
| $2s^2 5f$ | $2s^2 6d$ | $^2F°$ | $^2D$ | 14 | 10 | 75257.569 | 2.98e-02 | - | - |
| | | | | 6 | 4 | 75257.569 | 2.78e-02 | 2.66e-02 | - |
| | | | | 6 | 6 | 75257.569 | 1.98e-03 | - | - |
| | | | | 8 | 6 | 75257.569 | 2.98e-02 | - | - |
| $2s^2 5f$ | $2s^2 7d$ | $^2F°$ | $^2D$ | 14 | 10 | 46537.602 | 5.47e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 4 | 46538.035 | 5.11e-03 | 5.13e-03 | - |
| | | | | 6 | 6 | 46537.169 | 3.64e-04 | - | - |
| | | | | 8 | 6 | 46537.169 | 5.47e-03 | 5.13e-03 | - |
| $2s^2 5f$ | $2s^2 8d$ | $^2F°$ | $^2D$ | 14 | 10 | 37302.576 | 2.51e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 4 | 37302.436 | 2.34e-03 | 1.91e-03 | - |
| | | | | 6 | 6 | 37302.715 | 1.67e-04 | - | - |
| | | | | 8 | 6 | 37302.715 | 2.51e-03 | 1.91e-03 | - |

**Çizelge 6.1.2:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | İstatiksel Ağırlık (2j+1) | | Dalgaboyu (Å) | Bu Çalışma | Atomic Line Data Değerleri | Kritik Değerler (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^2 6f$ | $2s^2 7d$ | $^2F°$ | $^2D$ | 14 | 10 | 125158.01 | 5.31e-02 | - | - |
| | | | | 6 | 4 | 125161.14 | 4.96e-02 | 4.79e-02 | - |
| | | | | 6 | 6 | 125154.87 | 3.54e-03 | - | - |
| | | | | 8 | 6 | 125154.87 | 5.31e-02 | - | - |
| $2s^2 6f$ | $2s^2 8d$ | $^2F°$ | $^2D$ | 14 | 10 | 75133.173 | 9.85e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 4 | 75132.609 | 9.19e-03 | 9.48e-03 | - |
| | | | | 6 | 6 | 75133.738 | 6.56e-04 | - | - |
| | | | | 8 | 6 | 75133.738 | 9.85e-03 | 9.48e-03 | - |
| $2s^2 6f$ | $2s^2 9d$ | $^2F°$ | $^2D$ | 14 | 10 | 58986.262 | 4.54e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 4 | 58986.262 | 4.23e-03 | 3.60e-03 | |
| | | | | 6 | 6 | 58986.262 | 3.02e-04 | - | - |
| | | | | 8 | 6 | 58986.262 | 4.54e-03 | 3.60e-03 | - |
| $2s^2 4d$ | $2s^2 4f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 2662619.4 | 1.71e-02 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 2658372.5 | 1.72e-02 | 1.68e-02 | - |
| | | | | 6 | 6 | 2665458.3 | 8.17e-04 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 2665458.3 | 1.63e-02 | 1.68e-02 | - |
| $2s^2 4d$ | $2s^2 5f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 39634.569 | 8.61e-01 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 39633.626 | 8.61e-01 | 8.92e-01 | - |
| | | | | 6 | 6 | 39635.197 | 4.10e-02 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 39635.197 | 8.20e-01 | - | - |
| $2s^2 4d$ | $2s^2 6f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 25820.711 | 1.25e-01 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 25820.311 | 1.25e-01 | 1.84e-01 | - |
| | | | | 6 | 6 | 25820.977 | 5.99e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 25820.977 | 1.19e-01 | - | - |
| $2s^2 4d$ | $2s^2 7f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 21338.932 | 8.34e-02 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 21338.659 | 8.34e-02 | 7.08e-02 | - |
| | | | | 6 | 6 | 21339.114 | 3.97e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 21339.114 | 7.94e-02 | 7.08e-02 | - |
| $2s^2 5d$ | $2s^2 5f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 3225806.4 | 5.08e-02 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 3215434.0 | 5.48e-02 | 5.02e-02 | - |
| | | | | 6 | 6 | 3232062.0 | 2.41e-03 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 3232062.0 | 4.83e-02 | - | - |
| $2s^2 5d$ | $2s^2 6f$ | $^2D$ | $^2F°$ | 10 | 14 | 72421.259 | 8.44e-01 | - | - |
| | | | | 4 | 6 | 72416.015 | 8.44e-01 | 8.26e-01 | - |
| | | | | 6 | 6 | 72424.407 | 4.02e-02 | - | - |
| | | | | 6 | 8 | 72424.407 | 8.04e-01 | 8.26e-01 | - |

Doğruluk aralıkları: $B+ \leq \%7$, $B \leq \%10$, $C+ \leq \%18$, $C \leq \%25$, $D \leq \%50$, $E > \%50$

**Çizelge 6.1.3:** Berilyum atomunda en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile hesaplanan osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | İstatiksel Ağırlık (2j+1) | | Dalgaboyu (Å) | Osilatör Şiddeti | Geçiş Olasılığı ($sn^{-1}$) | Kritik Değerler (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $1s^22s^2$ | $1s^22s2p$ | $^1S$ | $^1P°$ | 1 | 3 | 2349.329 | 1.35e+00 | 5.44e+08 | 5.56e+08 [B] |
| $1s^22s2p$ | $1s^22s3d$ | $^3P^o$ | $^3D$ | 9 | 15 | 2495.410 | 2.64e-01 | 1.69e+08 | 1.60e+08 [C] |
| | | | | 1 | 3 | 2495.294 | 2.64e-01 | 9.43e+07 | 8.90e+07 [C] |
| | | | | 5 | 7 | 2495.480 | 2.22e-01 | 1.69e+08 | 1.60e+08 [C] |
| | | | | 3 | 5 | 2495.334 | 1.98e-01 | 1.27e+08 | 1.20e+08 [C] |
| | | | | 5 | 5 | 2495.480 | 3.96e-02 | 4.24e+07 | 4.00e+07 [C] |
| | | | | 3 | 3 | 2495.334 | 6.60e-02 | 7.07e+07 | 6.70e+07 [C] |
| | | | | 5 | 3 | 2495.480 | 2.64e-03 | 4.71e+06 | 4.40e+06 [C] |
| $1s^22s3p$ | $1s^22s4s$ | $^3P^o$ | $^3S$ | 6 | 3 | 17861.002 | 2.19e-01 | 1.37e+07 | - |
| | | | | 1 | 3 | 17860.332 | 2.19e-01 | 1.53e+07 | - |
| | | | | 5 | 3 | 17861.544 | 2.19e-01 | 7.65e+06 | - |
| $1s^22s3p$ | $1s^22s5s$ | $^3P^o$ | $^3S$ | 6 | 3 | 9898.500 | 2.65e-02 | 5.41e+06 | - |
| | | | | 1 | 3 | 9898.295 | 2.65e-02 | 6.02e+05 | - |
| | | | | 5 | 3 | 9898.667 | 2.65e-02 | 3.01e+06 | - |
| $1s^22s3p$ | $1s^22s6s$ | $^3P^o$ | $^3S$ | 6 | 3 | 8161.359 | 1.08e-02 | 3.27e+06 | - |
| | | | | 1 | 3 | 8161.220 | 1.08e-02 | 3.63e+05 | - |
| | | | | 5 | 3 | 8161.473 | 1.08e-02 | 1.81e+06 | - |
| $1s^22s3p$ | $1s^22s3d$ | $^3P^o$ | $^3D$ | 6 | 15 | 31785.789 | 5.84e-01 | 2.31e+06 | - |
| | | | | 1 | 3 | 31783.670 | 5.84e-01 | 1.28e+06 | - |
| | | | | 5 | 3 | 31787.510 | 5.84e-03 | 6.42e+04 | - |
| | | | | 5 | 5 | 31787.510 | 8.76e-02 | 5.78e+05 | - |
| | | | | 5 | 7 | 31787.510 | 4.90e-01 | 2.31e+06 | - |
| $1s^22s3p$ | $1s^22s4d$ | $^3P^o$ | $^3D$ | 6 | 15 | 11069.293 | 1.03e-01 | 3.38e+06 | - |
| | | | | 1 | 3 | 11069.040 | 1.03e-01 | 1.87e+06 | - |
| | | | | 5 | 3 | 11069.500 | 1.03e-03 | 9.39e+06 | - |
| | | | | 5 | 5 | 11069.500 | 1.55e-01 | 8.45e+05 | - |
| | | | | 5 | 7 | 11069.500 | 8.69e-02 | 3.38e+06 | - |
| $1s^22s3p$ | $1s^22s5d$ | $^3P^o$ | $^3D$ | 6 | 15 | 8549.858 | 2.38e-02 | 1.30e+06 | - |
| | | | | 1 | 3 | 8549.705 | 2.38e-02 | 7.25e+05 | - |
| | | | | 5 | 3 | 8549.982 | 2.38e-04 | 3.62e+04 | - |
| | | | | 5 | 5 | 8549.982 | 3.57e-03 | 3.26e+05 | - |
| | | | | 5 | 7 | 8549.982 | 2.00e-02 | 1.30e+06 | - |

**Çizelge 6.1.3:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | İstatiksel Ağırlık (2j+1) | | Dalgaboyu (Å) | Osilatör Şiddeti | Geçiş Olasılığı ($sn^{-1}$) | Kritik Değerler (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $1s^2 2s3p$ | $1s^2 2s6d$ | $^3P^o$ | $^3D$ | 6 | 15 | 7620.882 | 1.78e-02 | 1.22e+06 | - |
| | | | | 1 | 3 | 7620.760 | 1.78e-02 | 6.81e+05 | - |
| | | | | 5 | 3 | 7620.981 | 1.77e-04 | 3.40e+04 | - |
| | | | | 5 | 5 | 7620.981 | 2.66e-03 | 3.06e+04 | - |
| | | | | 5 | 7 | 7620.981 | 1.49e-02 | 1.22e+06 | |
| $1s^2 2s3p$ | $1s^2 2s7d$ | $^3P^o$ | $^3D$ | 6 | 15 | 7156.536 | 1.56e-02 | 1.21e+06 | - |
| | | | | 1 | 3 | 7156.430 | 1.56e-02 | 6.77e+05 | - |
| | | | | 5 | 3 | 7156.620 | 1.56e-04 | 3.38e+04 | - |
| | | | | 5 | 5 | 7156.620 | 2.34e-03 | 3.04e+05 | - |
| | | | | 5 | 7 | 7156.620 | 1.31e-02 | 1.21e+06 | - |
| $1s^2 2s3d$ | $1s^2 2s6p$ | $^3D$ | $^3P^o$ | 15 | 9 | 10333.890 | 3.73e-03 | 3.89e+05 | - |
| | | | | 3 | 1 | 10333.888 | 2.07e-03 | 3.89e+05 | - |
| | | | | 3 | 3 | 10333.888 | 1.55e-03 | 9.73e+04 | - |
| | | | | 3 | 5 | 10333.888 | 2.80e-03 | 3.89e+03 | |
| | | | | 5 | 3 | 10333.888 | 9.34e-04 | 2.91e+05 | - |
| | | | | 5 | 5 | 10333.888 | 3.73e-03 | 5.38e+04 | - |
| | | | | 7 | 5 | 10333.888 | | 3.26e+05 | - |
| $1s^2 2s3d$ | $1s^2 2s7p$ | $^3D$ | $^3P^o$ | 15 | 9 | 9395.320 | 1.61e-03 | 2.03e+05 | - |
| | | | | 3 | 1 | 9395.317 | 8.97e-04 | 2.03e+05 | - |
| | | | | 3 | 3 | 9395.317 | 6.73e-04 | 5.08e+04 | - |
| | | | | 3 | 5 | 9395.317 | 4.48e-05 | 2.03e+03 | - |
| | | | | 5 | 3 | 9395.317 | 1.21e-03 | 1.52e+05 | - |
| | | | | 5 | 5 | 9395.317 | 4.03e-04 | 3.05e+04 | - |
| | | | | 7 | 5 | 9395.317 | 2.61e-03 | 1.70e+05 | - |
| $1s^2 2s3d$ | $1s^2 2s8p$ | $^3D$ | $^3P^o$ | 15 | 9 | 8884.600 | 6.87e-04 | 9.60e+04 | - |
| | | | | 3 | 1 | 8884.601 | 3.81e-04 | 9.60e+04 | - |
| | | | | 3 | 3 | 8884.601 | 2.86e-04 | 2.41e+04 | - |
| | | | | 3 | 5 | 8884.601 | 1.90e-05 | 9.67e+02 | - |
| | | | | 5 | 3 | 8884.601 | 5.15e-04 | 7.25e+04 | - |
| | | | | 5 | 5 | 8884.601 | 1.71e-04 | 1.45e+04 | - |
| | | | | 7 | 5 | 8884.601 | 6.87e-04 | 8.18e+04 | - |
| $1s^2 2s3d$ | $1s^2 2s4f$ | $^3D$ | $^3F^o$ | 15 | 21 | 16162.100 | 1.07e+00 | 1.95e+07 | - |
| | | | | 3 | 5 | 16162.130 | 1.07e+00 | 1.16e+07 | - |
| | | | | 5 | 5 | 16162.130 | 1.19e-01 | 3.04e+06 | - |
| | | | | 5 | 7 | 16162.130 | 9.53e-01 | 1.73e+07 | - |
| | | | | 7 | 5 | 16162.130 | 2.43e-03 | 8.69e+04 | - |
| | | | | 7 | 7 | 16162.130 | 8.50e-02 | 2.17e+06 | - |
| | | | | 7 | 9 | 16162.130 | 9.84e-01 | 1.95e+07 | - |

**Çizelge 6.1.3:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | İstatiksel Ağırlık (2j+1) | | Dalgaboyu (Å) | Osilatör Şiddeti | Geçiş Olasılığı ($sn^{-1}$) | Kritik Değerler (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $1s^2 2s3d$ | $1s^2 2s5f$ | $^3D$ | $^3F^o$ | 15 | 21 | 11499.500 | 1.72e-01 | 6.19e+06 | - |
| | | | | 3 | 5 | 11499.540 | 1.72e-01 | 5.20e+06 | - |
| | | | | 5 | 5 | 11499.540 | 1.91e-02 | 9.64e+05 | - |
| | | | | 5 | 7 | 11499.540 | 1.52e-01 | 5.50e+06 | - |
| | | | | 7 | 5 | 11499.540 | 3.90e-04 | 2.75e+04 | - |
| | | | | 7 | 7 | 11499.540 | 1.36e-02 | 6.88e+05 | - |
| | | | | 7 | 9 | 11499.540 | 1.57e-01 | 6.19e+06 | - |
| $1s^2 2s3d$ | $1s^2 2s6f$ | $^3D$ | $^3F^o$ | 15 | 21 | 9942.500 | 6.42e-02 | 3.09e+06 | - |
| | | | | 3 | 5 | 9942.510 | 6.42e-02 | 2.60e+06 | - |
| | | | | 5 | 5 | 9942.510 | 7.14e-03 | 4.82e+05 | - |
| | | | | 5 | 7 | 9942.510 | 5.71e-02 | 2.75e+06 | - |
| | | | | 7 | 5 | 9942.510 | 1.45e-04 | 1.37e+04 | - |
| | | | | 7 | 7 | 9942.510 | 5.10e-03 | 3.44e+05 | - |
| | | | | 7 | 9 | 9942.510 | 5.90e-02 | 3.09e+06 | - |
| $1s^2 2s3d$ | $1s^2 2s7f$ | $^3D$ | $^3F^o$ | 15 | 21 | 9193.000 | 3.27e-02 | 1.84e+06 | - |
| | | | | 3 | 5 | 9192.970 | 3.27e-02 | 1.54e+06 | - |
| | | | | 5 | 5 | 9192.970 | 3.63e-03 | 2.87e+05 | - |
| | | | | 5 | 7 | 9192.970 | 2.90e-02 | 1.64e+06 | |
| | | | | 7 | 5 | 9192.970 | 7.45e-05 | 8.20e+03 | - |
| | | | | 7 | 7 | 9192.970 | 2.59e-03 | 2.05e+04 | - |
| | | | | 7 | 9 | 9192.970 | 3.00e-02 | 1.84e+06 | - |

Doğruluk aralıkları: $B+ \leq \%7$, $B \leq \%10$, $C+ \leq \%18$, $C \leq \%25$, $D \leq \%50$, $E > \%50$

**Çizelge 6.1.4:** Karbon atomunda en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile hesaplanan geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | İstatiksel Ağırlık (2j+1) | | Bu Çalışma Geç. Ols. ($sn^{-1}$) | Bu Çalışma Osilatör Şiddeti | Kritik Değerler (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^22p(^2P^o)3p$ | $2s^22p(^2P^o)3d$ | $^3D$ | $^3D^o$ | 15 | 15 | 1.57e+07 | 7.73e-02 | 7.06e-02 [B] |
| | | | | 3 | 3 | 1.18e+07 | 4.43e-02 | 4.39e-02 [B] |
| | | | | 5 | 5 | 1.09e+07 | 5.39e-02 | 5.42e-02 [B] |
| | | | | 7 | 7 | 1.39e+07 | 6.84e-02 | 7.48e-02 [B] |
| | | | | 7 | 5 | 1.74e+06 | 1.19e-02 | 1.57e-02 [B] |
| | | | | 5 | 3 | 2.36e+06 | 1.93e-02 | 1.58e-02 [B] |
| | | | | 5 | 7 | 2.45e+06 | 5.64e-03 | 5.13e-04 [D] |
| | | | | 3 | 5 | 3.94e+06 | 1.17e-03 | 5.36e-04 [D] |
| $2s^22p(^2P^o)3p$ | $2s^22p(^2P^o)4d$ | $^3D$ | $^3D^o$ | 15 | 15 | 2.46e+05 | 6.27e-03 | 7.15e-03 [C] |
| | | | | 3 | 3 | 2.16e+05 | 5.86e-03 | 6.85e-03 [D+] |
| | | | | 5 | 5 | 1.71e+05 | 2.28e-02 | 2.98e-03 [D+] |
| | | | | 7 | 7 | 1.88e+05 | 2.51e-03 | 3.40e-03 [D+] |
| | | | | 7 | 5 | 2.72e+04 | 5.04e-04 | 5.32e-03 [D+] |
| | | | | 5 | 3 | 3.75e+04 | 8.30e-04 | 1.87e-03 [D+] |
| | | | | 5 | 7 | 3.82e+04 | 3.63e-04 | 2.72e-04 [D] |
| | | | | 3 | 5 | 6.21e+04 | 4.98e-04 | 2.26e-05 [E] |
| $2s^22p(^2P^o)3p$ | $2s^22p(^2P^o)5d$ | $^3D$ | $^3D^o$ | 15 | 15 | 5.90e+04 | 1.10e-03 | 2.02e-03 [D] |
| | | | | 3 | 3 | 6.58e+03 | 2.70e-04 | 3.14e-04 [D] |
| | | | | 5 | 5 | 5.14e+04 | 9.52e-04 | 1.79e-03 [D] |
| | | | | 7 | 7 | 4.15e+04 | 9.71e-04 | 1.41e-03 [D] |
| | | | | 7 | 5 | 4.84e+04 | 8.99e-04 | 1.52e-03 [D] |
| | | | | 5 | 3 | 9.63e+03 | 4.96e-04 | 5.04e-04 [D] |
| | | | | 5 | 7 | 9.10e+03 | 2.20e-04 | 2.26e-04 [D] |
| | | | | 3 | 5 | 1.50e+04 | 2.68e-04 | 3.05e-04 [D] |
| $2s^22p(^2P^o)3p$ | $2s^22p(^2P^o)6d$ | $^3D$ | $^3D^o$ | 15 | 15 | 1.27e+04 | 2.76e-04 | - |
| | | | | 3 | 3 | 1.36e+04 | 2.96e-04 | - |
| | | | | 5 | 5 | 8.28e+03 | 1.80e-04 | - |
| | | | | 7 | 7 | 9.96e+03 | 2.16e-04 | - |
| | | | | 7 | 5 | 1.31e+03 | 3.98e-05 | - |
| | | | | 5 | 3 | 2.71e+03 | 9.79e-05 | - |
| | | | | 5 | 7 | 1.76e+03 | 2.74e-05 | - |
| | | | | 3 | 5 | 2.98e+03 | 3.89e-05 | - |
| $2s^22p(^2P^o)3p$ | $2s^22p(^2P^o)7d$ | $^3D$ | $^3D^o$ | 15 | 15 | 3.73e+03 | 8.87e-05 | - |
| | | | | 3 | 3 | 8.10e+03 | 1.92e-04 | - |
| | | | | 5 | 5 | 1.84e+03 | 4.39e-05 | - |
| | | | | 7 | 7 | 2.13e+03 | 5.06e-05 | - |
| | | | | 7 | 5 | 2.93e+02 | 9.74e-06 | - |
| | | | | 5 | 3 | 1.61e+03 | 6.38e-05 | - |
| | | | | 5 | 7 | 3.75e+02 | 6.39e-06 | - |
| | | | | 3 | 5 | 6.67e+02 | 9.55e-06 | - |

**Çizelge 6.1.4:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | İstatiksel Ağırlık (2j+1) | | Bu Çalışma Geç. Ols. ($sn^{-1}$) | Bu Çalışma Osilatör Şiddeti | Kritik Değerler (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^22p(^2P^o)3d$ | $2s^22p(^2P^o)4p$ | $^3F^o$ | $D^3$ | 21 | 15 | 1.68e+07 | 1.00e-02 | 1.16e-02 [B] |
| | | | | 9 | 7 | 1.68e+07 | 1.00e-02 | 1.07e-02 [B] |
| | | | | 7 | 5 | 1.48e+07 | 1.00e-02 | 1.08e-02 [B] |
| | | | | 5 | 3 | 1.40e+07 | 1.00e-02 | 1.20e-02 [B] |
| | | | | 7 | 7 | 1.89e+06 | 4.60e-04 | 4.50e-04 [B] |
| | | | | 5 | 5 | 2.62e+06 | 1.18e-03 | 1.06e-03 [B] |
| | | | | 5 | 7 | 7.61e+04 | 2.52e-05 | 3.64e-06 [B] |
| $2s^22p(^2P^o)3d$ | $2s^22p(^2P^o)5p$ | $^3F^o$ | $D^3$ | 21 | 15 | 6.30e+05 | 2.68e-03 | 2.64e-03 [D] |
| | | | | 9 | 7 | 6.20e+05 | 2.40e-03 | 2.42e-03 [D] |
| | | | | 7 | 5 | 5.60e+05 | 2.30e-03 | 2.34e-03 [D] |
| | | | | 5 | 3 | 5.30e+05 | 2.69e-03 | 2.63e-03 [D] |
| | | | | 7 | 7 | 7.10e+04 | 2.17e-04 | 2.13e-04 [D] |
| | | | | 5 | 5 | 9.90e+04 | 3.01e-04 | 2.96e-04 [D] |
| | | | | 5 | 7 | 2.86e+03 | 6.28e-06 | 6.05e-06 [D] |
| $2s^22p(^2P^o)3d$ | $2s^22p(^2P^o)6p$ | $^3F^o$ | $D^3$ | 21 | 15 | 1.93e+05 | 1.38e-03 | 1.36e-03 [D] |
| | | | | 9 | 7 | 1.89e+05 | 1.24e-03 | 1.25e-03 [D] |
| | | | | 7 | 5 | 1.74e+05 | 1.25e-03 | 1.21e-03 [D] |
| | | | | 5 | 3 | 1.67e+05 | 1.42e-03 | 1.36e-03 [D] |
| | | | | 7 | 7 | 2.12e+04 | 1.09e-04 | 1.09e-04 [D] |
| | | | | 5 | 5 | 3.08e+04 | 1.57e-04 | 1.52e-04 [D] |
| | | | | 5 | 7 | 8.57e+02 | 3.16e-06 | 3.11e-06 [D] |
| $2s^22p(^2P^o)5p$ | $2s^22p(^2P^o)5d$ | $D^3$ | $^3F^o$ | 15 | 21 | 1.43e+06 | 1.30e-02 | - |
| | | | | 7 | 9 | 1.32e+06 | 1.31e-02 | - |
| | | | | 5 | 7 | 1.27e+06 | 1.14e-02 | - |
| | | | | 3 | 5 | 1.43e+06 | 1.09e-02 | - |
| | | | | 7 | 7 | 1.10e+07 | 1.33e-03 | - |
| | | | | 5 | 5 | 1.57e+07 | 1.96e-03 | - |
| | | | | 7 | 5 | 3.14e+05 | 5.21e-05 | - |
| $2s^22p(^2P^o)5p$ | $2s^22p(^2P^o)6d$ | $D^3$ | $^3F^o$ | 15 | 21 | 4.15e+06 | 1.51e-03 | - |
| | | | | 7 | 9 | 3.61e+06 | 1.44e-03 | - |
| | | | | 5 | 7 | 3.80e+06 | 1.38e-03 | - |
| | | | | 3 | 5 | 4.37e+06 | 1.34e-03 | - |
| | | | | 7 | 7 | 3.27e+05 | 1.62e-04 | - |
| | | | | 5 | 5 | 4.77e+05 | 2.42e-04 | - |
| | | | | 7 | 5 | 9.38e+03 | 6.49e-06 | - |
| $2s^22p(^2P^o)5p$ | $2s^22p(^2P^o)6s$ | $D^3$ | $^3P^o$ | 15 | 9 | 3.88e+07 | 8.32e-03 | - |
| | | | | 7 | 5 | 3.89e+07 | 6.98e-03 | - |
| | | | | 5 | 3 | 3.00e+07 | 6.73e-03 | - |
| | | | | 3 | 1 | 2.13e+07 | 8.21e-03 | - |
| | | | | 5 | 5 | 1.00e+07 | 1.34e-03 | - |
| | | | | 3 | 3 | 1.61e+07 | 2.10e-03 | - |
| | | | | 3 | 5 | 1.12e+06 | 9.28e-05 | - |

**Çizelge 6.1.4:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | İstatiksel Ağırlık (2j+1) | | Bu Çalışma Geç. Ols. ($sn^{-1}$) | Bu Çalışma Osilatör Şiddeti | Kritik Değerler (NIST) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^22p(^2P^o)5p$ | $2s^22p(^2P^o)7s$ | $D^3$ | $^3P^o$ | 15 | 9 | 4.74e+06 | 4.05e-03 | - |
| | | | | 7 | 5 | 4.78e+06 | 3.42e-03 | - |
| | | | | 5 | 3 | 3.47e+06 | 2.96e-03 | - |
| | | | | 3 | 1 | 4.64e+06 | 3.98e-03 | - |
| | | | | 5 | 5 | 4.95e+06 | 4.33e-03 | - |
| | | | | 3 | 3 | 4.71e+06 | 4.05e-03 | - |
| | | | | 3 | 5 | 5.03e+06 | 4.44e-03 | - |
| $2s^22p(^2P^o)5p$ | $2s^22p(^2P^o)8s$ | $D^3$ | $^3P^o$ | 15 | 9 | 2.14e+06 | 3.09e-03 | - |
| | | | | 7 | 5 | 2.17e+06 | 3.13e-03 | - |
| | | | | 5 | 3 | 2.08e+06 | 2.99e-03 | - |
| | | | | 3 | 1 | 2.08e+06 | 3.02e-03 | - |
| | | | | 5 | 5 | 2.24e+06 | 3.29e-03 | - |
| | | | | 3 | 3 | 2.11e+06 | 3.06e-03 | - |
| | | | | 3 | 5 | 2.27e+06 | 3.36e-03 | - |

Doğruluk aralıkları: $B+ \le 7\%,\ B \le 10\%,\ C+ \le 18\%,\ C \le 25\%,\ D \le 50\%,\ E > 50\%$

**Çizelge 6.1.5:** Bir kez iyonlaşmış oksijende en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile hesaplanan osilatör şiddetleri

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | Dalgaboyu (Å) | İstatistiksel Ağırlık (2j+1) | | Bu Çalışma | NIST Değerleri | CI Değerleri | MCHF Değerleri | R-Matrix Değerleri |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^2 2p^3$ | $2s^2 2p^2(^3P)3s$ | $^4S°$ | $^4P$ | 539.368 | 4 | 12 | 1.13e-01 | 1.28e-01[B+] | 1.39e-01 | 1.31e-01 | 1.21e-01 |
| | | | | 539.086 | 4 | 6 | 5.69e-02 | 6.42e-02[B+] | 6.34e-02 | 6.59e-02 | - |
| | | | | 539.547 | 4 | 4 | 3.78e-02 | 4.28e-02[B+] | 4.23e-02 | 4.38e-02 | - |
| | | | | 539.854 | 4 | 2 | 1.88e-02 | 2.14e-02[B+] | 2.11e-02 | 2.19e-02 | - |
| $2s^2 2p^3$ | $2s^2 2p^2(^3P)3s$ | $^2P°$ | $^2P$ | 673.220 | 6 | 6 | 3.93e-02 | 3.85e-02[B+] | 3.90e-02 | 3.79e-02 | 4.09e-02 |
| | | | | 672.945 | 4 | 4 | 3.28e-02 | 3.25e-02[B+] | 3.29e-02 | 3.20e-02 | - |
| | | | | 672.954 | 2 | 4 | 1.31e-02 | 1.31e-02[B+] | 1.33e-02 | 1.29e-02 | - |
| | | | | 673.761 | 4 | 2 | 6.53e-03 | 6.33e-03[B+] | 6.40e-03 | 6.13e-03 | - |
| | | | | 673.770 | 2 | 2 | 2.61e-02 | 2.47e-02[B+] | 2.50e-02 | 2.45e-02 | - |
| $2s^2 2p^3$ | $2s^2 2p^2(^1D)3s$ | $^2P°$ | $^2D$ | 600.588 | 6 | 10 | 5.28e-02 | 4.29e-02[B] | 4.90e-02 | - | - |
| | | | | 600.587 | 4 | 6 | 4.75e-02 | 3.82e-02[B] | 4.03e-02 | - | - |
| | | | | 600.584 | 4 | 4 | 5.28e-03 | 4.72e-03[C+] | 5.00e-03 | - | - |
| | | | | 600.591 | 2 | 4 | 5.28e-02 | 4.28e-02[B] | 4.52e-02 | - | - |
| $2s^2 2p^3$ | $2s^2 2p^2(^3P)4s$ | $^2D°$ | $^2D$ | 430.164 | 10 | 10 | 8.33e-03* | 7.60e-03[D] | - | - | - |
| | | | | 430.150 | 6 | 6 | 7.78e-03* | 7.10e-03[D] | - | - | - |
| | | | | 430.149 | 6 | 4 | 5.50e-04* | 5.07e-04[D] | - | - | - |
| | | | | 430.187 | 4 | 6 | 8.33e-03* | 7.62e-03[D] | - | - | - |
| | | | | 430.186 | 4 | 4 | 7.50e-03* | 6.85e-03[D] | - | - | - |
| $2s^2 2p^3$ | $2s^2 2p^2(^3P)3d$ | $^4S°$ | $^4P$ | 430.088 | 4 | 12 | 3.60e-01 | 3.54e-01[B+] | 3.77e-01 | 3.15e-01 | 3.69e-01 |
| | | | | 429.918 | 4 | 2 | 6.01e-02 | 5.89e-02[B+] | 5.63e-02 | 4.70e-02 | - |
| | | | | 430.041 | 4 | 4 | 1.20e-01 | 1.15e-01[B+] | 1.09e-01 | 9.99e-02 | - |
| | | | | 430.176 | 4 | 6 | 1.80e-01 | 1.81e-01[B+] | 1.73e-01 | 1.68e-01 | - |

**Çizelge 6.1.5:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | Dalgaboyu (Å) | İstatistiksel Ağırlık (2j+1) | | Bu Çalışma | NIST Değerleri | CI Değerleri | MCHF Değerleri | R-Matrix Değerleri |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^22p^3$ | $2s^22p^2(^3P)3d$ | $^4S°$ | $^4P$ | 430.088 | 4 | 12 | 3.60e-01 | 3.54e-01[B+] | 3.77e-01 | 3.15e-01 | 3.69e-01 |
| | | | | 429.918 | 4 | 2 | 6.01e-02 | 5.89e-02[B+] | 5.63e-02 | 4.70e-02 | - |
| | | | | 430.041 | 4 | 4 | 1.20e-01 | 1.15e-01[B+] | 1.09e-01 | 9.99e-02 | - |
| | | | | 430.176 | 4 | 6 | 1.80e-01 | 1.81e-01[B+] | 1.73e-01 | 1.68e-01 | - |
| $2s^22p^3$ | $2s^22p^2(^3P)3d$ | $^2D°$ | $^2D$ | 481.660 | 10 | 10 | 2.18e-02 | 2.73e-02[B] | 2.80e-02 | 2.79e-02 | 2.57e-02 |
| | | | | 481.593 | 6 | 6 | 2.03e-02 | 2.64e-02[B] | 2.79e-02 | 2.70e-02 | - |
| | | | | 481.639 | 4 | 6 | 2.18e-03 | 1.96e-03[C] | 2.10-03 | 1.99e-03 | - |
| | | | | 481.713 | 6 | 4 | 1.46e-03 | 3.83e-03[C] | 4.00e-03 | 4.00e-03 | - |
| | | | | 481.760 | 4 | 4 | 1.96e-02 | 2.09e-02[B] | 2.20e-02 | 2.13e-02 | |
| $2s^22p^3$ | $2s^22p^2(^3P)3d$ | $^2P°$ | $^2D$ | 515.556 | 6 | 10 | 1.11e-01 | 1.22e-01[B] | 1.27e-01 | 1.18e-01 | 1.13e-01 |
| | | | | 515.499 | 4 | 6 | 1.00e-01 | 1.09e-01[B] | 1.16e-01 | 1.05e-01 | - |
| | | | | 515.637 | 4 | 4 | 1.11e-02 | 2.00e-02[D] | 2.14e-02 | 1.89e-02 | - |
| | | | | 515.642 | 2 | 4 | 1.11e-02 | 1.08e-01[B] | 1.16e-01 | 1.06e-01 | - |
| $2s^22p^3$ | $2s^22p^2(^1D)3d$ | $^2D°$ | $^2D$ | 442.029 | 10 | 10 | 9.07e-02 | 8.17e-02[D] | - | - | 8.52e-02 |
| | | | | 442.012 | 6 | 6 | 8.47e-02 | 7.64e-02[D] | - | - | - |
| | | | | 442.016 | 6 | 4 | 6.05e-03 | 5.45e-03[D] | - | - | - |
| | | | | 442.055 | 4 | 4 | 8.16e-02 | 7.35e-02[D] | - | - | - |
| | | | | 442.051 | 4 | 6 | 9.07e-03 | 8.17e-03[D] | - | - | - |
| $2s^22p^3$ | $2s^22p^2(^1D)3d$ | $^2D°$ | $^2P$ | 440.581 | 10 | 6 | 2.11e-02 | 2.67e-02[D] | - | - | - |
| | | | | 440.603 | 4 | 4 | 3.52e-03 | 4.45e-03[D] | - | - | - |
| | | | | 440.607 | 4 | 2 | 1.76e-03 | 2.23e-03[D] | - | - | - |
| | | | | 440.564 | 6 | 4 | 2.11e-02 | 2.66e-02D] | - | - | - |

**Çizelge 6.1.5:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | Dalgaboyu (Å) | İstatistiksel Ağırlık (2j+1) | | Bu Çalışma | NIST Değerleri | CI Değerleri | MCHF Değerleri | R-Matrix Değerleri |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^2 2p^3$ | $2s^2 2p^2(^1D)3d$ | $^2P°$ | $^2D$ | 470.413 | 6 | 10 | 5.11e-02 | 4.46e-02[D] | - | - | 3.63e-02 |
| | | | | 470.418 | 2 | 4 | 5.11e-02 | 4.45e-02[D] | - | - | - |
| | | | | 470.409 | 4 | 6 | 4.60e-02 | 4.01e-02[D] | - | - | - |
| | | | | 470.414 | 4 | 4 | 5.11e-03 | 4.45e-03[D] | - | - | - |
| $2s^2 2p^3$ | $2s^2 2p^2(^3P)4d$ | $^4S°$ | $^4P$ | 391.961 | 4 | 12 | 1.44e-01 | 1.64e-01[C+] | - | - | 1.63e-01 |
| | | | | 391.906 | 4 | 2 | 2.41e-02 | 2.74e-02[C+] | - | - | - |
| | | | | 391.938 | 4 | 4 | 4.82e-02 | 5.48e-02[C+] | - | - | - |
| | | | | 391.995 | 4 | 6 | 7.22e-02 | 8.22e-02[C+] | - | - | - |
| $2s^2 2p^3$ | $2s^2 2p^2(^3P)4d$ | $^2D°$ | $^2D$ | 436.572 | 10 | 10 | 8.97e-03 | 8.86e-03[D] | - | - | 5.10e-03 |
| | | | | 436.515 | 6 | 6 | 8.39e-03 | 8.26e-03[D] | - | - | - |
| | | | | 436.553 | 4 | 6 | 8.99e-04 | 8.87e-04[D] | - | - | - |
| | | | | 436.619 | 6 | 4 | 5.97e-04 | 5.91e-04[D] | - | - | - |
| | | | | 436.657 | 4 | 4 | 8.06e-03 | 7.98e-03[D] | - | - | - |
| $2s^2 2p^3$ | $2s^2 2p^2(^3P)4d$ | $^2P°$ | $^2D$ | 464.237 | 6 | 10 | 4.49e-02 | 4.83e-02[D] | - | - | 5.57e-02 |
| | | | | 464.311 | 2 | 4 | 4.48e-02 | 4.83e-02[D] | - | - | - |
| | | | | 464.189 | 4 | 6 | 4.05e-02 | 4.35e-02[D] | - | - | - |
| | | | | 464.307 | 4 | 4 | 4.48e-03 | 4.82e-03[E] | - | - | - |
| $2s^2 2p^2(^3P)3p$ | $2s^2 2p^2(^3P)4s$ | $^4S°$ | $^4P$ | 3754.615 | 4 | 12 | 1.53e-01 | 1.83e-01[B] | - | 2.23e-01 | 2.35e-01 |
| | | | | 3778.493 | 4 | 2 | 2.51e-02 | 2.41e-02[B] | - | 3.53e-02 | - |
| | | | | 3763.534 | 4 | 4 | 5.07e-02 | 6.58e-02[B] | - | 7.29e-02 | - |
| | | | | 3740.824 | 4 | 6 | 7.70e-02 | 9.35e-02[B] | - | 1.15e-01 | - |

**Çizelge 6.1.5:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | Dalgaboyu (Å) | İstatistiksel Ağırlık (2j+1) | | Bu Çalışma | NIST Değerleri | CI Değerleri | MCHF Değerleri | R-Matrix Değerleri |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^2 2p^2(^3P)3p$ | $2s^2 2p^2(^3P)4s$ | $^4D°$ | $^4P$ | 3133.780 | 20 | 12 | 1.27e-01 | 1.36e-01[C] | - | 1.34e-01 | 1.30e-01 |
| | | | | 3113.617 | 4 | 6 | 6.41e-03 | 6.85e-03[C] | - | 5.39e-03 | - |
| | | | | 3122.524 | 6 | 6 | 3.84e-02 | 4.10e-02[C] | - | 3.57e-02 | - |
| | | | | 3123.910 | 2 | 4 | 2.11e-02 | 2.27e-02[C] | - | | - |
| | | | | 3129.340 | 4 | 4 | 6.76e-02 | 7.26e-02[C] | - | 6.89e-02 | - |
| | | | | 3134.213 | 2 | 2 | 1.05e-01 | 1.13e-01[C] | - | 1.14e-01 | - |
| | | | | 3134.726 | 8 | 6 | 1.27e-01 | 1.36e-01[C] | - | 1.34e-01 | - |
| | | | | 3138.337 | 6 | 4 | 8.85e-02 | 9.49e-02[C] | - | 9.88e-02 | - |
| | | | | 3139.678 | 4 | 2 | 5.24e-02 | 5.65e-02[C] | - | 6.01e-02 | - |
| $2s^2 2p^2(^3P)3p$ | $2s^2 2p^2(^3P)4s$ | $^4P^o$ | $^4P$ | 3293.240 | 12 | 12 | 1.15e-01* | 9.54e-02[B] | - | 1.16e-01 | 1.12e-01 |
| | | | | 3302.362 | 2 | 2 | 1.96e-02* | 1.73e-02[B] | - | 1.73e-02 | - |
| | | | | 3290.930 | 2 | 4 | 9.66e-02* | - | - | 9.89e-02 | - |
| | | | | 3307.403 | 4 | 2 | 4.92e-02* | 4.55e-02[B] | - | 4.65e-02 | - |
| | | | | 3295.936 | 4 | 4 | 1.55e-02* | 1.63e-02[B] | - | 1.98e-02 | - |
| | | | | 3278.506 | 4 | 6 | 5.11e-02* | 4.88e-02[B] | - | 5.04e-02 | - |
| | | | | 3305.955 | 6 | 4 | 3.51e-02* | 3.16e-02[B] | - | 3.05e-02 | - |
| | | | | 3288.418 | 6 | 6 | 8.01e-02* | 7.98e-02[B] | - | 8.62e-02 | - |
| $2s^2 2p^2(^3P)3p$ | $2s^2 2p^2(^3P)4s$ | $^4S°$ | $^4P$ | 3754.615 | 4 | 12 | 1.53e-01 | 1.83e-01[B] | - | 2.23e-01 | 2.35e-01 |
| | | | | 3778.493 | 4 | 2 | 2.51e-02 | 2.41e-02[B] | - | 3.53e-02 | - |
| | | | | 3763.534 | 4 | 4 | 5.07e-02 | 6.58e-02[B] | - | 7.29e-02 | - |
| | | | | 3740.824 | 4 | 6 | 7.70e-02 | 9.35e-02[B] | - | 1.15e-01 | - |
| $2s^2 2p^2(^3P)3p$ | $2s^2 2p^2(^3P)4s$ | $^2D°$ | $^2P$ | 3470.004 | 10 | 6 | 1.18e-01* | 1.02e-01[B] | - | 1.39e-01 | 1.29e-01 |
| | | | | 3471.666 | 6 | 4 | 1.17e-01* | 1.04e-01[B] | - | 1.39e-01 | - |
| | | | | 3471.271 | 4 | 2 | 9.94e-02* | 9.85e-02[B] | - | 1.17e-01 | - |
| | | | | 3448.843 | 4 | 4 | 1.93e-01* | | - | 2.22e-01 | - |

**Çizelge 6.1.5:** (devam)

| Alt Seviye | Üst Seviye | Terimler | | Dalgaboyu (Å) | İstatistiksel Ağırlık (2j+1) | | Bu Çalışma | NIST Değerleri | CI Değerleri | MCHF Değerleri | R-Matrix Değerleri |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2s^2 2p^2(^3P)3p$ | $2s^2 2p^2(^3P)5s$ | $^2D°$ | $^2P$ | 2131.300 | 10 | 6 | 1.77e-02* | 2.02e-02[C] | - | - | 1.89e-02 |
| | | | | 2123.182 | 4 | 4 | 2.89e-03* | 3.38e-03[C] | - | - | - |
| | | | | 2131.813 | 6 | 4 | 1.76e-02* | 2.02e-02[C] | - | - | - |
| | | | | 2132.017 | 4 | 2 | 1.54e-02* | 1.68e-02[C] | - | - | - |
| $2s^2 2p^2(^3P)3p$ | $2s^2 2p^2(^3P)5s$ | $^4P°$ | $^4P$ | 2022.222 | 12 | 12 | 1.72e-02* | 1.73e-02[C] | - | - | 1.77e-02 |
| | | | | 2016.582 | 4 | 6 | 7.54e-03* | 7.84e-03[C] | - | - | - |
| | | | | 2020.329 | 6 | 6 | 1.18e-02* | 1.22e-02[C] | - | - | - |
| | | | | 2021.436 | 2 | 4 | 1.44e-02* | 1.45e-02[C] | - | - | - |
| | | | | 2023.325 | 4 | 4 | 2.32e-03* | 2.32e-03[C] | - | - | - |
| | | | | 2025.704 | 2 | 2 | 2.95e-03* | 2.89e-03[C] | - | - | - |
| | | | | 2027.097 | 6 | 4 | 5.25e-03* | 5.22e-03[C] | - | - | - |
| | | | | 2027.601 | 4 | 2 | 7.41e-03* | 7.22e-03[C] | - | - | - |
| $2s^2 2p^2(^3P)3p$ | $2s^2 2p^2(^3P)5s$ | $^4S°$ | $^4P$ | 2187.340 | 4 | 12 | 2.29e-02 | 2.45e-02[C] | - | - | 2.33e-02 |
| | | | | 2182.569 | 4 | 6 | 1.11e-02 | 1.23e-02[C] | - | - | - |
| | | | | 2190.469 | 4 | 4 | 7.22e-03 | 8.13e-03[C] | - | - | - |
| | | | | 2195.482 | 4 | 2 | 3.54e-03 | 4.09e-03[C] | - | - | - |
| $2s^2 2p^2(^3P)3p$ | $2s^2 2p^2(^3P)5s$ | $^4D°$ | $^4P$ | 1961.920 | 20 | 12 | 2.08e-02 | 2.04e-02[C] | - | - | 1.96e-02 |
| | | | | 1953.933 | 4 | 6 | 1.06e-02 | 1.02e-02[D] | - | - | - |
| | | | | 1957.435 | 6 | 6 | 6.38e-03 | 6.15e-03[C] | - | - | - |
| | | | | 1958.128 | 2 | 4 | 3.45e-03 | 3.41e-03[C] | - | - | - |
| | | | | 1960.259 | 4 | 4 | 1.10e-02 | 1.09e-02 [C] | - | - | - |
| | | | | 1962.131 | 2 | 2 | 1.68e-02 | 1.70e-02[C] | - | - | - |
| | | | | 1962.222 | 8 | 6 | 2.11e-02 | 2.04e-02[C] | - | - | - |
| | | | | 1963.785 | 6 | 4 | 1.44e-02 | 1.43e-02[C] | - | - | - |
| | | | | 1964.271 | 4 | 2 | 8.42e-03 | 8.50e-03[C] | - | - | - |

## 6.2 Tartışma

Geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri gibi spektroskopik parametreler birkaç elektronlu basit sistemler için kolaylıkla hesaplanabilirken, çok sayıda elektrona sahip sistemlerde elektron-elektron etkileşmeleri önemli hale geldiğinden hesaplamalarda birçok zorlukla karşılaşılır. Bu zorlukların üstesinden gelebilmek için literatürde birçok yaklaşım yöntemleri geliştirilmiştir. Bu yöntemlerin birçoğu relativistik etkileri de hesapsal sürece dahil eden güçlü yöntemlerdir. Söz konusu yöntemler temel ve düşük uyarılmış seviyeler için oldukça duyarlı sonuçlar vermektedir. Fakat uyarılmış yada yüksek uyarılmış seviyelere doğru gidildikçe bu yöntemlerde çok sayıda konfigürasyon ve orbital baz fonksiyonu tanımlanıp hesaplama sürecine dahil edilmesi gerekmektedir. Çok sayıda konfigürasyon ve orbital baz fonksiyonu ile teorik hesaplamalar yapmak kolay değildir. Deneysel yöntemlerle de yüksek uyarılmış seviyelere ait spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde de hala birçok zorlukla karşılaşılmaktadır. En gelişmiş deneysel teknikler bile belirli hata aralığında sonuçlar verebilmektedir. Bu nedenle hem teorik hem de deneysel yöntemlerin birçoğu genellikle multiplet seviyelerin düşük uyarılmış seviyeleri arasındaki geçişlere ait datalar içermektedir. Yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri ile ilgili veriler oldukça azdır.

Bu çalışmada ilk önce dört elektrona sahip Berilyum atomunda temel ve uyarılmış seviyeler arasında hem multiplet hem de ince yapı çizgileri arasındaki geçişler için geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen düşük uyarılmış seviyelere ait sonuçlar NIST deki kritik değerlerle karşılaştırılmış ve % ± 25 uyumlu olduğu görülmüştür. Bu hesaplamada literatürde bilenen yöntemlerle belirlenemeyen 8p ve 7f gibi yüksek uyarılmış seviyelere ait elektrik dipol geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti değerleri elde edilmiştir. Bu sonuçlarla ilgili literatürde karşılaştırma materyali olmadığı için her hangi bir karşılaştırma yapılmamıştır. Beş elektrona sahip Bor atomunda temel ve uyarılmış seviyelere ait geçişler için hem multiplet hem de ince yapı geçişleri için osilatör şiddetleri hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar NIST deki kritik değerleri ile Atomic Line Data sonuçlarıyla karşılaştırılmış ve oldukça iyi bir

uyum elde edilmiştir. Bor atomunda da bilinen teorik yöntemlerle hesaplanamayan 7f ve 9d gibi yüksek uyarılmış seviyelere ait osilatör şiddetleri elde edilmiştir.

Altı elektrona sahip Karbon atomunda uyarılmış seviyelere ait hem multiplet hem de ince yapı seviyeleri arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar NIST deki kritik değerlerle karşılaştırılmış ve uyumlu olduğu görülmüştür. Söz konusu uyum her geçiş dizisi için farklılık göstermektedir. Uyum aralıkları her geçiş için ilave bir sütunla Çizelge 6.4'te gösterilmektedir. Karbon atomu için yine bilinen yöntemlerle hesaplanamayan 8s ve 7d gibi yüksek uyarılmış seviyelere ait geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti değerleri elde edilmiştir. Tez çalışmasının son kısmında ise bir kez iyonlaşmış Oksijende temel ve uyarılmış seviyelerin hem multiplet hem de ince yapı çizgileri için elektrik dipol osilatör şiddetleri hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar NIST deki kritik değerlerle ve literatürdeki bilinen birçok teorik yöntemle karşılaştırılmış ve oldukça iyi bir uyum elde edilmiştir.

Berilyum, Bor, Karbon ve Oksijen gibi hafif atomlar çok elektronlu sistemlerin incelenmesinde temel teşkil etmektedir. Ayrıca Bor atomu Bing-Bang modellerinin test edilmesinde, termo-nükleer füzyon araştırmalarında ve tokamaklarda önemli rol oynadığı için Bor atomuna ait datalar atomik spektroskopide önemlidir. Karbon hem dünya hem de atmosferde bolca bulunan bir elementtir ve spektroskopik özellikleri önemlidir. Bir kez iyonlaşmış Oksijen astronomi ve astrofizikte birçok uygulama alanı bulmaktadır. Teorik olarak bakıldığında Berilyum atomunun elektronik konfigürasyonunda $1s^2$ çekirdek elektronlarının dışında iki, Bor atomunda üç, Karbon atomunda dört ve bir kez iyonlaşmış Oksijende beş valans elektronu vardır ve bu elektronlar arasındaki etkileşmeler oldukça önemlidir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi, basit bir hesaplama sürecine sahip yarı deneysel bir yöntemdir. Bu yöntemle osilatör şiddetlerinin ve geçiş olasılıklarının hesaplanmasında etkin yük $Z^*$, etkin başkuantum sayısı $n^*$ ve etkin yörünge açısal momentum kuantum sayısı $l^*$ parametrelerini belirlemek yeterlidir. Bu parametreleri elde etmek için enerji ifadesi ile seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerini veren ifade birlikte çözülmelidir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi kullanılarak hem düşük hem de yüksek uyarılmış seviyelere ait spektroskopik parametreler karmaşık bir hesaplama

sürecine girmeden kolaylıkla hesaplanabilmektedir. Bu yöntemin hassasiyeti gerekli parametrelerin elde edilmesinde kullanılan deneysel enerji değerlerine ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerine bağlıdır. Literatürdeki deneysel enerji değerleri birbirine çok yakın olduğu için sonuçların hassasiyetini seviyelere ait yarıçap değerleri belirler. Seviyelere ait yarıçap değerleri ne kadar doğru olursa elde edilen sonuçlarında o kadar hassas olması beklenmektedir.

**KAYNAKLAR**


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

Atomic Line Data List v2.04, 2008 available at http://www.pa.uky.edu/~ peter/atomic

Aygün, E., Zengin, D. M. 1998 *Atom ve Molekül Fiziği* Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fzik Bölümü Ankara

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

Bell, K. L. and Hibbert, A 1990 *Oscillator strengths for allowed transitions in atomic oxygen*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23 2673-2685

Bethe, H.A. and Salpeter, E. E. 1957 *Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms* Academic Press New York

Chang, T.N. and Tang, X. 1990 *Oscıllator-Strengths for The Bound Bound Transitions in Beryllium and Magnesium* Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 43 (3): 207-216

Chen, M.K. 1994 *Accurate Oscillator Strengths for S-P Transitions in The He Atom* At. Mol. Opt. Phys. 27 865

Condon, E.U. and Shortley, G.H. 1935 *The Theory of Atomic Spectra* Cambridge University Press Cambridge

Condon, E.U. and Odabaşı, H. 1980 *Atomic Structure* Cambridge University Press, New York

Cowan, R.D. 1968 *Theoretical Calculation Of Atomic Spectra Using Digital Computers* J.Opt. Soc. Am. 58 808

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

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

Çelik, G., Ateş, Ş. ve Kılıç, H. Ş. 2006-a *Lityum Atomunda Bazı Yüksek Uyarılmış Seviyelerin Bireysel Çizgileri Arasındaki Geçiş Olasılıklarının Hesaplanması* S. Ü. Fen Ed. Fak. Fen Derg. 27, 67-72

Çelik, G., Akın, E. ve Kılıç, H. Ş. 2006-b *The Theoretical of Transition Probabilities for Some Excited p–d Transitions in Atomic Nitrogen* Eur. Phys. J. D, 40, 325-330

Çelik, G., Kılıç, H. Ş. ve Akın, E. 2006-c *The Calculations of Oscillator Strengths and Transition probabilities for Atomic Fluorine* T. J. Phys., 30, 165

Çelik, G., Akın, E. ve Kılıç, H. Ş. 2007 *Comparison of Transition Probabilities Calculated Using Different Parameters on WBEPM Theory for Some p–d and d–p Transitions in Excited Atomic Nitrogen* Int. J. Quant. Chem., 107, 495-500

Desclaux, J.P. 1969 *Hartree-Fock-Slater Self Consistent Field Calculations* Computer Physics Communications, Volume 1 216-222

Edmonds, R.A. 1960 *Angular Momentum in Quantum Mechanics* Princeton Üniversity Press N.J., 2

Fano, U. and Racah, G. 1959 *Irreducible Tensorial Sets* Academic Pres, New York

Fischer, C.F. 1975 *Theoretical Oscillator Strengths for Np to Nd Transitions in Mg* Canadian Journal of Physics 53 184

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

Gündüz, E. 1999 *Modern Fiziğe Giriş,* Ege üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, İzmir

Hibbert, A. 1975 *CIV3 – a General Program to Calculate Configuration Interaction Wave Functions and Electric-Dipole Oscillator Strengths* Computer Physics Communications, Volume 9, 3, 141-172

Hibbert, A. 1977 *Recent Advances in The Calculation of Oscillator Strengths* Physica Scripta 16, 7

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

Kostelecky, V.A. and Nieto, M.M. 1985 *Analytical Wave Functions for Atomic Quantum –Defect Theory* Physical Review A 32 3243

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

Lindgard, A. and Nielsen, S.E 1975 *Numerical Approach to Transition Probabilities in The Coulomb Approximation: Be II And Mg II Rydberg Series* Journal of Physics B 8 1183-1199

Lindgard, A. and Nielsen, 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 19 533-6333

Luken, W.L. and Sinanoğlu, O. 1976 *Oscillator Strengths for Transitions Involving Excited States Not Lowest of Their Symmetry: Carbon I and Fluorine II transitions* J. Chemical Physics 64 11 4680-83

NIST, National Institute of Standards and Technology, 2009 Gaithersburg, MD. http://physics.nist.gov/asd3

Mallow, J.V. and Bagus, P.S. 1976 *Ultraviolet Oscillator Strengths for Carbon, Nitrogen and Oxygen Ions* J. Quantum Spectrosc. Radiat Trans. 16 409

Martin, I., Lavin, C. and Barrientos, C. 1991 *Systematic Trends Along The Potassium Sequence: Study of Ns/Sup 2/S-Mp/Sup 2/P/Sup 0/ Transitions* Canadian Journal of Physics 69 1273

Martin, I., Karwowski, J., Lavin, C. and Diercksen, H.H.F. 1991 *Quantum Defect Orbital Study of The Sodium Isoelectronic Sequence* Physica Scripta 44 567

Migdalek, J. and Banasinska, E. 1988 I*mplicit and Explicit Treatment of Valence-Core Electron Exchange and Core Polarization in Model Potentials* J. Quantum Spestrosc Radiat Trans 39 409

Quinet, P. and Biemont, E. 1993 *Wavenumbers and Oscillator Strengths for N/Sup 1,3/L-N'/Sup 1,3/L'* Bull. Soc. R. Sci. Liege 62 373

Racah, G. 1942 *Theory of Complex Spectra. I* Physical Review 62 438

Ralchenko, Y., A. E. Kramida, J. Reader and NIST ASD Team 2009 *NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5),* National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

Rotenberg, M., Bivins, R., Metropolis, N. and Wooten, J.K. 1959 *The 3-j and 6-j Symbols* The Technology Press Cambridge

Sanders, F.C. and Knight, R.E. 1989 *Oscillator strengths for S-P and P-D Transitions for Singly Excited States of Two-Electron Ions Via Z-Dependent Perturbation Theory* Physical Review A 39 4387

Shortley, G.H. 1935 *Line Strengths in Intermediate Coupling* Phys. Rev. 47, 295

Simons, G. 1974 *New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals. I. Atomic Oscillator Strengths* Journal of Chemical Physics 60 645

Sinanoğlu, O. 1973 *Beam-Foil Spectroscopy And New Atomic Structure Theory with a Survey of Results Since 1970* Nucl. Instrum. Methods 110, 193

Sobelman, I.I. 1975 *Introduction to The Theory of Atomic Spectra* Pergamon Press Braunschweig

Sobelman, I.I. 1996 *Atomic Spectra and Radiative Transitions* Springer Series in Chemical Physics 1 Berlin

Tektunalı, H. G., Kuli-Zade, C. M. 1995 *Atom ve Spektroskopinin Temelleri* İstanbul Üniversitesi, Fen Fakültesi, İstanbul

Tekeli, G., Ateş, Ş., Çelik, G. 2008 *Electric Dipole Oscillator Strengths of Boron* Turk. J. Phys., 32, 331-340.

Theodosiou, C.E. 1984 *Lifetimes of Alkali-Metal–Atom Rydberg States* Physical Review A 30 2881

Thewlis, J. 1961 *Encylopedic Dictionary of Physics* Vol. 2 p. 60 Pergamon Press Oxford

Viswanath, M.B. and Sen, K.D. 1989 *Density Functional Theory Calculations of One Electron Rydberg States in Li Atom* Theor. Chim. Acta 76 373-375

Wen, G.W., Wang, L.Y. and Wang, R.D. 1991 *Calculation of Matrix Elements in The Model Potential Theory of Atomic Structure* Chinese Science Bulletin 36 547-550

Weiss, A.W. 1967 *Superposition of Configurations and Atomic Oscillator Strengths-Carbon I and II* Physical Review 162 71–80

Weiss, A.W. 1995 *Multireferent Superposition of Configurations Calculations of Core-Correlation Effects on Energy Levels and Oscillator Strengths: Be and* $B^+$ Physical Review 51 1067

Wigner, E.P. 1959 *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra* Trans. By J.J. Griffin Acedemic Press New York

Wigner, E.P., Biedenharn, L.C. and Dam, H. 1965 *Quantum Theory of Angular Momentum* Academic Press New York

Ynnerman, A. and Fischer, C.F. 1995 *Multiconfigurational-Dirac-Fock Calculation of the* $2s^2\ {}^1S_0–2s2p\ {}^3P_1$ *Spin-Forbidden Transition for the Be-like Isoelectronic Sequence* Physical Review A 51 2020

Zheng, N.W. 1977 A *New Empirical Formule About Calculation of Ionization Potential* Chinese Science Bulletin, 22 531-535

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

Zheng, N.W. 1987 A New *Theoretical Model For Many-Electron Atom and Ion Systems II* Chinese Science Bulletin, 32 1263-1267

Zheng, N.W. 1988-a *A New Outline of Atomic Theory* Jiang Su Education Press Nanjing PR China

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

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

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

Zheng, N.W., Wang. T., Zhou, T., Sun, Y.J., Su, Y. and Zhang, Y. 1999 *Study of Transition Probability of Low States of Alkali Metal Atoms with WBEPM Theory* Journal of The Physical Society of Japan 68 3859-3862

Zheng, N.W., Ma, D.X., Yang, R., Zhou, T., Wang. T. and Han, S. 2000-a *An Efficient Calculation of The Energy Levels of The Carbon Group* Journal of Chemical Physics 113 5 1681-1687

Zheng, N.W., Wang. T. and Yang, R. 2000-b *Transition Probability of Cu I, Ag I and Au I from Weakest Bound Electron Potential Model Theory* Journal of Chemical Physics 113 15 6169

Zheng, N.W., Zhou, T., Yang, R., Wang. T. and Ma, D.X. 2000-c *Analysis of Bound Odd-Parity Spectrum of Krypton by Weakest Bound Electron Potential Model Theory* Chemical Physics 258 37-46

Zheng, N.W., Ma, D.X., Yang, R.Y., Zhou, T., Wang T. and Han S 2000-d *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., Yang R.Y.I., Zhou T., Ma D.X.I.A., Wu, Y.G.A.N.G. and Xu H.T.A.O. 2001-b *Transition Probabilities For Be I, Be Ii, Mg I, and Mg II* Atomic Data and Nuclear Data Tables, vol. 79, no. 1, pp. 109-141(33)

Zheng N.W., Wang T., Ma D.X.I.A. 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. 2003 *Transition Probabilities for Ne II* Spectrochimica Acta Part B 58 1319-1324

Zheng, N.W., Li, Z., Ma, D.X., Zhou, T. and Fan, J. 2004-a *Theoretical Study of Energy Levels of Atomic Ga* Canadian Journal of Physics 82 523-529

Zheng, N.W., Wang. T., Ma, D.X., Zhou, T. and Fan, J. 2004-b *Weakest Bound Electron Potential Model Theory* International J.Quant. Chem. 98 281-290