



T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI AÇIK KABUKLU ATOMİK VE İYONİK SİSTEMLERDE ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

Mesut TOKGÖZ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Haziran-2013
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

BAZI AÇIK KABUKLU ATOMİK VE İYONİK SİSTEMLERDE ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

Mesut TOKGÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Erhan AKIN

2013, 80 Sayfa

Jüri
Doç. Dr. Erhan AKIN
Doç. Dr. Gültekin ÇELİK
Yrd. Doç. Dr. Murat YILDIZ

Bu tez çalışmasında, Cl I atom ve Cl II ve Cl III iyonlarında elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi spektroskopik parametreler en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori "WBEPMT" kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar literatürden elde edilebilen değerlerle karşılaştırılmış ve iyi bir uyum gözlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Elektrik dipol geçişler, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, geçiş olasılığı, Klor atomu, Klor iyonları, osilatör şiddeti, yaşam süresi

ABSTRACT

MS THESIS

ATOMIC STRUCTURE CALCULATIONS IN SOME OPEN SHELL ATOMIC AND IONIC SYSTEMS

Mesut TOKGÖZ

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

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Erhan AKIN

2013, 80 Pages

Jury
Assoc. Prof. Dr. Erhan AKIN
Assoc. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK
Asst. Prof. Dr. Murat YILDIZ

In this study, the spectroscopic parameters such as electric dipol transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes of excited levels have been calculated using the weakest bound electron potential model theory "WBEPMT" for Cl I atom and Cl II, Cl III ions. The obtained results are compared to the available values from literature and a good agreement has been observed.

Keywords: Chlorine atom, Chlorine ions, electric dipole transitions, lifetime, oscillator strength, transition probability, weakest bound electron potential model theory

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Doç. Dr. Erhan AKIN yönetiminde hazırlanarak, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur. Cl I, Cl II ve Cl III gibi açık kabuklu atomik ve iyonik sistemlerde elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) kullanılarak hesaplanmıştır.

Eğitim hayatım boyunca benden yardımını ve ilgisini eksik etmeyen sevgili anneme ve aileme, tez çalışmalarım boyunca bana anlayış gösteren ve yardımcı olan danışman hocam Sayın Doç. Dr. Erhan AKIN'a ve fizik bölümü Öğretim Üyesi Sayın Doç. Dr. Gültekin ÇELİK'e çok teşekkür ediyorum.

Mesut TOKGÖZ

KONYA-2013

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **ix**

1. GİRİŞ **1**

1.1. Kaynak Araştırması 2

2. ATOMİK YAPIYA GENEL BİR BAKIŞ **4**

2.1. Bir Elektronlu Atom (Hidrojen Atomu) için Schrödinger Denklemi 4
2.2. Schrödinger Denkleminin Değişkenlere Ayrılması 7
2.3. Elektron Katları ve Alt Katları 15

3. SPEKTROSKOPİNİN TEMEL PRENSİPLERİ **20**

3.1. Hidrojen Atomunun Spektrumu 21
3.2. Spektral Çizgilerin Şiddeti 28
3.2.1. Şiddetin Yoğunluğa Bağlılığı 29
3.2.2. Spektral Çizgilerin Bağıl Şiddetlerine Göre Osilatör Şiddetinin Tayini 32
3.3. Atomların İyonlaşma Derecesi 33
3.4. Şiddetler Kuralı 36

4. ELEKTRİK DİPOL GEÇİŞLER **42**

4.1. Işımalı Geçişler 42
4.2. Elektrik Dipol Yayınlaması 42
4.2.1. Elektrik Dipol Geçiş Olasılığı 51
4.2.2. Elektrik Dipol Osilatör Şiddeti 52
4.2.3. Uyarılmış Seviyelerin Yaşam Süresi 52
4.2.4. Elektrik Dipol Çizgi Şiddeti 53

5. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA **56**

5.1. Araştırma Sonuçları 56
5.2. Tartışma 74

6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER **76**

6.1 Sonuçlar 76
6.2 Öneriler 76

KAYNAKLAR **77**

ÖZGEÇMİŞ **80**

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

$A_{JJ'}$: Geçiş olasılığı

D : Elektrik dipol moment

$E_{J'}$-E_J : Geçiş enerjisi farkı

ε_{ki} : Birim hacimde radyasyon yayınlama gücü

$f_{JJ'}$: Osilatör şiddeti

g_J : İstatistiksel ağırlık

$\hbar$: 1.054×10^{-34}J.s (Planck sabiti)

J_{ki} : Spektral çizgi şiddeti

l : Yörünge açısal kuantum sayısı

m : Manyetik açısal kuantum sayısı

μ : İndirgenmiş kütle

n : Baş kuantum sayısı

N_k : Birim hacimdeki uyarılmış atom sayısı

$P^{(k)}_{l_i l_f}$: Radyal geçiş integrali

$R_{nl}(r)$: Radyal dalga fonksiyonu

$S_{JJ'}$: Çizgi şiddeti

τ_J : Uyarılmış seviyelerin yaşam süresi

U : Coulomb elektrik potansiyeli

ψ : Dalga fonksiyonu

Z : Atom numarası

Kısaltmalar

WBEPMT : En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori

MCHF : Multiconfiguration Hartree-Fock

NIST : National Institute of Standards and Technology

Mlt. : Multiplet

1. GİRİŞ

Spektroskopi, madde biliminin temelini oluşturan uzmanlık alanı olup, enerji-madde etkileşmesini esas almaktadır. Doğada bulunan maddelerin atomik boyutta iyi anlaşılması ve bu maddelerin diğer maddelerle etkileşimlerinin belirlenmesinin yanı sıra bu doğal maddeler yardımıyla yeni madde üretimi ve üretilen bu maddelerin özelliklerinin de çok iyi anlaşılmasına ihtiyaç duyulmaktadır. Geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi temel spektroskopik niceliklerin hesaplanmasından elde edilen sonuçlar astrofizik, plazma fiziği, termonükleer fisyon araştırmaları, lazerlerle izotop ayırma ve lazer sistemlerinin geliştirilmesi gibi birçok alanda kullanılmaktadır. Ayrıca uzak gezegenlerden dünyaya ulaşan spektrumların analiz edilmesinde belirlenecek geçiş olasılıkları, ulaşılamayan uzak gezegenlerde bulunan madde miktarları hakkında önemli bilgiler verir. Atomik yapı hesaplamaları, ışık-madde etkileşmesinde ışıkla etkileşen atomik veya iyonik sistemlerin elektron konfigürasyonlarındaki elektronların geçişleriyle karakterize edilir. Bu geçişleri tanımlayan geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetlerini içeren veriler spektroskopik analiz için kullanılacak geçişlerin seçimini, sıcaklık gibi birçok kritik ölçümün doğruluğunun ve atomik konsantrasyonun belirlenmesinde önemli rol oynamaktadırlar.

Bu çalışmada en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak Klor atomu ve bazı iyonlarında, elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri belirlenmiştir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori için gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde seviyelerin yarıçaplarının beklenen değer hesaplamaları için Nümerik Coulomb Yaklaşımı "NCA" (Lindgrad ve Neilsen, 1975-1977) ve Nümerik Non-Relativistik Hartree-Fock "NRHF" yöntemi kullanılmıştır (Gaigalas ve Fischer, 1996). Bu çalışmadan elde edilen sonuçlar literatürdeki değerlerle karşılaştırılmış ve oldukça iyi bir uyum gözlenmiştir.

Çalışmanın 1. bölümünde giriş ve kaynak araştırması kısımları verilmiştir. 2. bölümde atomik yapıya genel bir bakış yapıldıktan sonra, 3. bölümde spektroskopinin temel prensiplerine değinilmiştir. 4. bölümde ışımalı geçişler ile ilgili bilgiler verilerek elektrik dipol geçişler incelenmiş, elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri ile ilgili bağıntılar verilmiş ve hesaplamaların temelini oluşturan çizgi şiddeti ifadesine değinilmiştir. 5. bölümde araştırma sonuçları verilip sonuçlarla ilgili tartışma yapılmış, 6. bölümde çalışmanın sonuçları hakkında genel değerlendirme verilmiş, önerilerde bulunulmuştur.

1.1. Kaynak Araştırması

Bu bölümde daha önce çeşitli bilim insanları tarafından çeşitli atom ve iyonlar için hesaplanan geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süresi gibi parametrelerin sonuçları hakkında genel bilgiler verilecektir.

Çelik ve ark. (2006), en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriyi kullanarak Azot atomunda bazı p-d geçişlerinde ve Flor atomunda geçiş olasılıklarını hesapladılar. Çelik ve ark. (2007), Azot atomunda en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi kullanılarak yapılan hesaplamalarda gerekli parametreleri farklı yöntemlerle hesaplayarak bu farklı yöntemlerin p-d ve d-p geçişleri üzerindeki etkilerini incelediler. Çelik (2007), Lityum atomunda hem bireysel hem de multiplet çizgiler için elektrik dipol geçiş olasılıklarını en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriyi kullanarak hesapladı. Söz konusu çalışmalarda elde edilen sonuçların literatürdeki deneysel ve teorik verilerle iyi bir uyum içinde olduğu belirtilmiştir.

Lindgard ve Nielsen (1977), dipol geçiş olasılıklarını, yaşam sürelerini ve dallanma oranlarını Nümerik Coulomb Yaklaşımı'ndan göstererek deneysel sonuçları elde ettiler. Anderson ve Schwab (1981), Klor atomunda $^2D_1$-$^2P_1$ soğurma geçişi için deneysel osilatör şiddetlerini kimyasal titrasyon yöntemi kullanarak ölçtüler. Erman, Kallne ve Zastrow (1990), Cl I de 4s-np ve 4p-nd geçişi için görünür bölgedeki geçişlerini ve ışımalı yaşam sürelerini ilk kez doğrudan ölçtüler. Sonuçlar, geçiş olasılıklarının derlemeleri ve ışıma deneyleri ile karşılaştırılmıştır. M. Fabry (1976), Sezyum atomunun benzer dalga fonksiyonlarını çeşitli enerji değerleri için teorik çalışmalar yapmıştır. Osilatör şiddetleri durgun akış halindeki plazma ve spektroskopik analizlerden deneysel verilerden elde etti. Glowacki ve Migdalek (2003), *ab initio* model potansiyel dalga fonksiyonları kullanılarak üretilen Numerical Dirac–Fock dalga fonksiyonları ile Relativistic Configuration-interaction (CI) metodunu, iki valans elektronları ile bazı sistemlerde $ns^2\ ^1S_0$–$nsnp\ ^1P_1$, $^3P_1$ geçişleri için osilatör şiddetlerini hesaplamak için kullandılar. Sonuçlarını daha önce core-valance correlation hesaplamalarından elde edilen sonuçlar ile karşılaştırdılar. Oliver ve Hibbert (2007), Cl I de birçok tek pariteli konfigürasyon $3s^23p^5$, $3p^4(^1D)4p$, $3p^4(^3P)np$ ($4\leq n\leq 5$) ve birçok çift pariteli konfigürasyon $3s3p^6$, $3p^4(^3P,^1D,^1S)ns$ ($4\leq n\leq 5$), $3p^4(^3P)6s$, $3p^4(^3P,^1D)3d$, $3p^4(^3P)4d$ için Breit-Pauli yaklaşımında konfigürasyon etkileşmesi (CI) yöntemini kullanarak osilatör şiddetlerini hesapladılar. Jha ve ark. (2006), $3s^23p^5$, $3s^23p^43d$,

$3s^2 3p^4 4s$ ve $3s^2 3p^4 4p$ ince yapı seviyeleri arasındaki tüm geçişler için geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini ve Breit-Pauli enerji seviyeleri konfigürasyon etkileşmesini Cl dalga fonksiyonlarını kullanarak hesapladılar. Ayrıca $3s^2 3p^4 3d$, $3s^2 3p^4 4s$ ve $3s^2 3p^4 4p$ seviyeleri için yaşam sürelerini belirlediler. Kulaga-Egger ve Migdalek (2009), bir kez iyonlaşmış Lantanda yaşam sürelerini Cowan'ın Hartree–Fock ve Relativistic Corrections (HFR) metodu ile hesapladılar. Sonuçları diğer deneysel ve teorik sonuçlar ile karşılaştırdılar. Lavin ve ark. (1977), Relativistic Quantum Defect Orbital (RQDO) metodunu kullanarak Cl I de ince yapı geçişlerinin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Zheng ve arkadaşları, bir kez iyonlaşmış Alüminyum atomunun geçiş olasılıkları ve enerji seviyelerini en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriyi (WBEPMT) kullanarak hesapladılar. Bu hesaplamadaki enerji seviyelerinin belirlenmesinde pertürbasyon teorisinden faydalandılar. Elde ettikleri sonuçlar WBEPM teorisinin iyonik sistemlere de başarılı bir şekilde uygulanabileceğini gösterdi. Wang ve Zheng (2002), Oksijen atomunda geçiş olasılıklarını ve bazı uyarılmış seviyelerin yaşam sürelerini WBEPM teorisini kullanarak hesapladılar. Hesaplamaları hem bireysel çizgiler hem de multiplet çizgiler için yaptılar. Elde ettikleri sonuçların literatürle çok iyi uyumlu olduğu görüldü.

2. ATOMİK YAPIYA GENEL BİR BAKIŞ

Hidrojen Yunanca su yapan, element sembolü H olan, 1 atom sayılı ametal bir elementtir. 1.00794 g/mol lük atomik kütlesi ile tüm elementler arasında en hafif elementtir. Bir proton ve bir elektrondan oluşan Hidrojen atomu, basit atomik yapısı, ışık emilim ve yayma spektrumu sayesinde atomik yapının gelişmesinde önemli rol oynamıştır. Schrödinger denkleminin analitik olarak çözülebildiği tek nötral molekül Hidrojen olduğu için, Hidrojen atomunun enerji basamakları ve bağ özellikleri kuantum mekaniğinin gelişmesinde önemli rol oynamıştır (Kurucu ve Şahin, 2005).

2.1. Bir Elektronlu Atom (Hidrojen Atomu) için Schrödinger Denklemi

Bir Hidrojen atomu, +Z*e* elektrik yüklü bir parçacık olan bir protonla, protondan 1836 kez daha hafif, -*e* yüklü bir parçacık olan bir elektrondan oluşan ancak hareketlilikten dolayı üç boyutlu olan bir sistemdir. Elektron, çekirdekle karşılıklı Coulomb etkileşmesi ile çekirdeğe bağlı olarak hareket etmektedir (Önengüt, 2008).

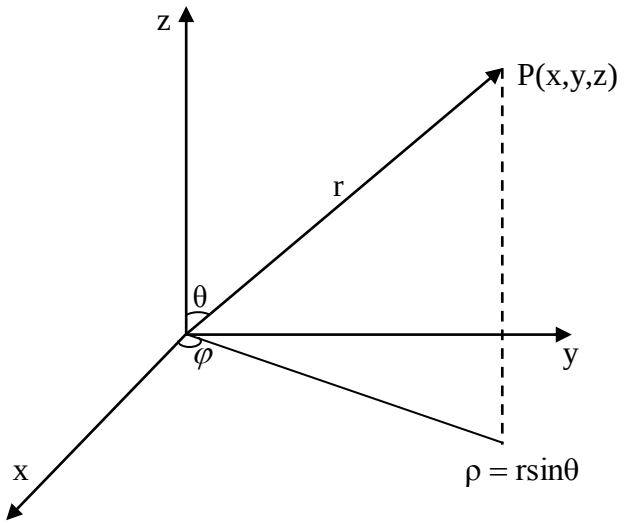
Hidrojen atomunda kullanmamız gereken, üç boyuttaki elektron için Schrödinger denklemi şu şekilde yazılır:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial \mathrm{x}^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial \mathrm{y}^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial \mathrm{z}^2}+\frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}(E-U)\Psi=0 \qquad (2.1)$$

Buradaki *U* potansiyel enerjisi, kütlesi m_1 ve yükü +*Ze* olan çekirdek ile kütlesi m_2 ve yükü –*e* olan elektronun oluşturduğu enerji olup şu şekilde yazılır:

$$U(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z})=U(\mathrm{r})=-\frac{\mathrm{Ze}^2}{(4\pi\varepsilon_0)\mathrm{r}} \qquad (2.2)$$

Burada Schrödinger denklemini yazmak için önce kartezyen koordinatları şekildeki gibi tanımlanan r, θ, φ küresel kutupsal koordinatlar cinsinden yazmak uygun olacaktır.



Şekil 2.1. Küresel kutupsal koordinatlar

r = O orijininden P noktasına çizilen yarıçap vektörünün uzunluğu

$$= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

θ = Yarıçap vektörü ile +z ekseni arasındaki açı (kutup açısı)

$$= \cos^{-1} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

φ = Yarıçap vektörünün *xy* düzlemindeki izdüşümü ile +*x* ekseni arasındaki ölçülen açı (azimut açısı)

$$= tg^{-1} \frac{y}{x}$$

dönüşümleri kullanılırsa küresel koordinatlarda Schrödinger denklemi

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\{r^2\frac{\partial}{\partial r}\} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\}\right]\Psi(r,\theta,\varphi) + U(r,\theta,\varphi)\Psi(r,\theta,\varphi) = E\Psi(r,\theta,\varphi) \quad (2.3)$$

şeklinde bulunur (Kurucu ve Şahin, 2005).

Denk.(2.3)'teki

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{2.4}$$

ifadesine " indirgenmiş kütle " adı verilir. Köşeli parantez içindeki terimler, ∇^2 küresel koordinatlarda Laplace operatörü olmak üzere, $\nabla^2\psi$'ye eşittir. Bu eşitlik, elektronun çekirdeğe göre hareketini tanımlayan zamandan bağımsız Schrödinger denklemidir. Zamandan bağımsız Shrödinger denkleminin önemli bir özelliği şudur: Verilmiş bir sistem için, bir veya daha fazla çözüm varsa, fonksiyonlarının her birisi, enerjinin belli bir *E* değerine karşılık gelir. Dolayısı ile dalga mekaniğinde enerji kuantalaşması, kuramın doğal bir elemanı olarak ortaya çıkar ve fiziksel dünyadaki enerji kuantalaşması, bütün kararlı sistemlerin karakteristiği olan evrensel bir olay olarak belirir (Önengüt, 2008).

Merkezi O'da olan bir kürenin yüzeyinde, sabit θ kutup açılı çizgiler, yer küresi üzerindeki enlem daireleri gibidir. Sabit φ azimut açılı çizgiler, yer küresi üzerindeki boylam daireleri gibidir.

Küresel kutupsal koordinatlarda Schrödinger denklemi şöyle yazılır:

$$\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{\partial}{\partial \mathrm{r}}\{\mathrm{r}^2\frac{\partial\psi}{\partial \mathrm{r}}\} + \frac{1}{\mathrm{r}^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{\mathrm{r}^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\} + \frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}(E-U)\Psi = 0 \tag{2.5}$$

U potansiyel enerjisi yerine Denk.(2.2)'yi yerleştirir ve bütün denklemi $\mathrm{r}^2\sin^2\theta$ ile çarparsak şunu buluruz:

$$\sin^2\theta\frac{\partial}{\partial \mathrm{r}}\{\mathrm{r}^2\frac{\partial\psi}{\partial \mathrm{r}}\} + \sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\} + \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2\mathrm{m}\mathrm{r}^2\sin^2\theta}{\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E)\Psi = 0 \tag{2.6}$$

Bu denklem, ψ nin uyması gereken koşullarla (ψ normlanabilmeli ve ψ ile türevleri, her r, θ, φ noktasında sürekli ve tek değerli olmalıdır) birlikte elektronun davranışını

tamamen belirler. Bu davranışın ne olduğunu tam olarak görmek için Denk.(2.6)'yı ψ için çözmeliyiz. Denk.(2.6) çözüldüğünde, bir Hidrojen atomundaki elektronu betimlemek için Bohr kuramındaki gibi tek bir kuantum sayısının yetmediği, üç kuantum sayısına gerek olduğu ortaya çıkar.

Bohr modelinde, elektronun hareketi esasta bir boyutludur; çünkü hareket ettikçe değişen tek büyüklük, belli bir yörüngedeki konumudur. Bir boyutlu bir kutudaki bir parçacığın durumunu belirlemek için tek kuantum sayısının yeterli olduğu gibi, üç boyutlu bir kutudaki bir parçacığın betimlenmesi için, üç kuantum sayısı gereklidir; çünkü şimdi; parçacığın ψ dalga fonksiyonunun uyması gereken üç tane sınır koşulu vardır: ψ, kutunun *x*, *y*, *z* doğrultularındaki duvarlarında ayrı ayrı 0 olmalıdır (Önengüt, 2008).

2.2. Schrödinger Denkleminin Değişkenlere Ayrılması

Hidrojen atomu probleminde, Schrödinger denklemini küresel kutupsal koordinatlarda yazmanın yararı, bu haldeyken her biri tek bir koordinat içeren üç bağımsız denkleme ayrılabilmesidir. Burada böyle bir ayrılma mümkündür; çünkü $\psi(r,\theta,\varphi)$ dalga fonksiyonu, üç ayrı fonksiyonun çarpımı şeklindedir: sadece r ye bağlı olan R(r), sadece θ ye bağlı olan Θ(θ) ve sadece φ ye bağlı olan $\Phi(\varphi)$.

ψ dalga fonksiyonu,

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \qquad (2.7)$$

biçiminde yazılabilir (Gedikoğlu, 1991). Burada R(r) fonksiyonu, elektronun ψ dalga fonksiyonunun çekirdekte başlayıp bir yarıçap vektörü boyunca θ ve φ sabitken nasıl değiştiğini betimler. Θ(θ) fonksiyonu, ψ nin, merkezi çekirdekte olan bir kürenin boylam dairesi boyunca, r ve φ sabitken, kutup açısı θ ile nasıl değiştiğini betimler. Φ(φ) fonksiyonu, ψ nin, azimut açısı φ ile nasıl değiştiğini betimler.

Daha basit olarak ψ=RΘΦ şeklinde yazabileceğimiz Denk.(2.7)'den şunları buluruz:

i) $\frac{\partial \psi}{\partial r} = \Theta\Phi\frac{\partial R}{\partial r} = \Theta\Phi\frac{dR}{dr}$

ii) $\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = R\Phi\frac{\partial \Theta}{\partial \theta} = R\Phi\frac{d\Theta}{d\theta}$

iii) $\frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = R\Theta\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = R\Theta\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}$

Burada kısmi türevlerden normal türevlere geçilmiştir; çünkü R, Θ, Φ fonksiyonlarından her birisi sırasıyla r, θ, φ değişkenlerinden yalnız birisine bağlıdır (Önengüt, 2008).

Hidrojen atomunun Schrödinger denkleminde ψ yerine RΘΦ yerleştirir ve bütün denklemi RΘΦ ile bölersek şunu elde ederiz:

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+\frac{2mr^2\sin^2\theta}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+E\right)=0 \qquad (2.8)$$

(2.8) denklemindeki son terim sadece azimut φ nin, diğerleri ise sadece r ve θ nın fonksiyonudurlar. Denk.(2.8)'i yeniden düzenleyelim:

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{2mr^2\sin^2\theta}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+E\right)=-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \qquad (2.9)$$

Bu denklem, sadece her iki tarafı da aynı sabite eşitse doğru olabilir; çünkü taraflar farklı değişkenlerin fonksiyonudurlar. Göreceğimiz gibi bu sabiti m_l^2 olarak adlandırmak uygundur.

Demek ki, Φ fonksiyonu için diferansiyel denklem şöyledir:

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2} = m_l^2 \tag{2.10}$$

Şimdi de Denk.(2.9)'un sağ tarafına m_l^2 yi koyalım, bütün denklemi $\sin^2\theta$ ile bölelim ve değişik terimleri yeniden düzenleyelim:

$$\frac{1}{\mathrm{R}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dr}}\left(\mathrm{r}^2\frac{\mathrm{dR}}{\mathrm{dr}}\right)+\frac{2\mathrm{mr}^2}{\hbar^2}\left(\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0\mathrm{r}}+E\right)=\frac{\mathrm{m_l^2}}{\sin^2\theta}-\frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right) \tag{2.11}$$

Yine, her iki tarafta farklı değişkenlerin bulunduğu bir denklemimiz var, dolayısıyla her iki tarafın aynı sabite eşit olması gerekir. Bu sabit, yine daha sonra açıklığa kavuşacak sebeplerden ötürü $l(l+1)$ olarak adlandırılacaktır. Dolayısıyla Θ ve R fonksiyonları için denklemler şöyledir (Önengüt, 2008):

$$\frac{\mathrm{m_l^2}}{\sin^2\theta}-\frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)=l(l+1) \tag{2.12}$$

$$\frac{1}{\mathrm{R}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dr}}\left(\mathrm{r}^2\frac{\mathrm{dR}}{\mathrm{dr}}\right)+\frac{2\mathrm{mr}^2}{\hbar^2}\left(\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0\mathrm{r}}+E\right)=l(l+1) \tag{2.13}$$

(2.10), (2.12) ve (2.13) denklemleri genellikle şöyle yazılır:

Φ için denklem: $$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2} = \varphi\mathrm{m_l^2} \tag{2.14}$$

Θ için denklem: $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)+\left[l(l+1)-\frac{\mathrm{m_l^2}}{\sin^2\theta}\right]\Theta=0 \tag{2.15}$$

R için denklem: $$\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dr}}\left(\mathrm{r}^2\frac{\mathrm{dR}}{\mathrm{dr}}\right)+\left[\frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}\left(\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0\mathrm{r}}+E\right)-l(l+1)\right]\mathrm{R}=0 \tag{2.16}$$

Bunların her birisi, tek değişkenli tek bir fonksiyon için bir adi diferansiyel denklemdir. Sadece R için olan denklem, $U(r)$ potansiyel enerjisine bağlıdır. Böylece, başlangıçta üç değişkenli ψ fonksiyonu için bir kısmi diferansiyel denklem olan, Hidrojen atomu için Schrödinger denklemini basitleştirme işimizi başarıyla tamamladık (Önengüt, 2008).

Yukarıdaki denklemlerden birincisi, Denk.(2.14) kolayca çözülür. Sonuç şöyledir:

$$\Phi(\varphi) = Ae^{im_l\varphi} \tag{2.17}$$

Bildiğimiz gibi, bir dalga fonksiyonunun, dolayısıyla tam dalga fonksiyonu ψ nin bir bileşeni olan Φ nin uyması gereken koşullardan birisi, uzayda verilen bir noktada, tek bir değerinin olmasıdır. Dolayısıyla,

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$$

veya

$$e^{im_l 0} = e^{im_l 2\pi} = 1$$

veya

$$1 = \cos m_l 2\pi + i \sin m_l 2\pi$$

olmalıdır. Bu, sadece m_l, 0 veya pozitif veya negatif bir tamsayı ($\pm 1, \pm 2, \pm 3, ...,$) ise mümkündür. m_l sabiti Hidrojen atomunun manyetik kuantum sayısı olarak bilinir. $\Theta(\theta)$ için olan diferansiyel denklem, Denk.(2.15), l sabiti, m_l nin mutlak değeri $|m_l|$ ye eşit veya büyük bir tamsayı ise bir çözüme sahiptir. Bu koşul, m_l nin üzerinde bir koşul olarak şu şekilde ifade edilebilir:

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ..., \pm l \tag{2.18}$$

Burada, l sabiti yörünge kuantum sayısı olarak bilinir.

Hidrojen atomu dalga fonksiyonu ψ nin R(r) radyal kısmı için son denklem, Denk.(2.16)'da belli bir koşula uyulmasını gerektirir. Bu koşul, *E* nin ya pozitif olması veya

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right) = \frac{E_1}{n^2} \qquad n= 1, 2, 3,\ldots \tag{2.19}$$

ile belirlenen negatif E_n değerlerinden birisine (elektronun atoma bağlı olduğu durumlarda) sahip olmasıdır. Bunun Hidrojen atomu için Bohr'un bulduğu bağıntı ile aynı olduğunu görüyoruz (Önengüt, 2008). Denk.(2.16)'yı çözebilmemiz için uyulması gereken bir diğer koşul, baş kuantum sayısı olarak bilinen *n* nin *l*+1 e eşit veya ondan büyük olmasıdır. Bu, verilen bir *n* için *l* üzerinde şu şekilde bir koşul olarak ifade edilebilir:

$$l = 0,1,2,3,...(n-1) \tag{2.20}$$

Burada *l* sabiti yörünge kuantum sayısı olarak bilinir. Dolayısıyla üç kuantum sayısı *n*, *l*, *m* yi izin verilen değerleriyle birlikte şu şekilde yazabiliriz:

$$\begin{aligned} &\text{Baş kuantum sayısı} && : \ n = 1,2,3,... \\ &\text{Yörünge kuantum sayısı} && : \ l = 0,1,2,3,...(n-1) \\ &\text{Manyetik kuantum sayısı} && : \ m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ..., \pm l \end{aligned} \tag{2.21}$$

Kuantum sayılarının, uzayın belli bir yörüngesinde hapsolmuş parçacıkların kuantum mekaniksel kuramlarından doğal bir biçimde çıktığını tekrar hatırlatmakta yarar vardır.

R, Θ ve Φ nin *n, l, m* kuantum sayılarına olan bağlılığını ortaya çıkarmak için Hidrojen atomunun elektron dalga fonksiyonlarını şöyle yazabiliriz (Önengüt, 2008):

$$\Psi = R_{nl}\Theta_{lm_l}\Phi_{m_l} \tag{2.22}$$

i) Baş Kuantum Sayısı: Hidrojen atomunun kuantum kuramında elektronun enerjisi bilindiği gibi sabittir; fakat herhangi bir pozitif değeri (iyonlaşmış bir atoma karşılık gelen) alabilmekle birlikte, elektronun sahip olabileceği negatif değerler, $E_n = E_1/n^2$

bağıntısı ile belirlenenlerdir. Dolayısıyla Hidrojen atomunda elektron enerjisinin kuantumlanması *n* baş kuantum sayısı ile betimlenir.

ii) Yörünge Kuantum Sayısı: ψ dalga fonksiyonunun radyal kısmı R(r) için olan (2.16) diferansiyel denkleme bakalım:

$$\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dr}}\left(\mathrm{r}^2\frac{\mathrm{dR}}{\mathrm{dr}}\right)+\left[\frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}\left(\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0\mathrm{r}}+E\right)-l(l+1)\right]\mathrm{R}=0$$

Bu denklem, elektronun hareketinin sadece radyal yanı ile yani çekirdeğe veya ondan öteye doğru hareketiyle ilgilidir. Ancak, denklemde *E* toplam enerjisinin bulunduğunu da görüyoruz. *E* toplam enerjisi, elektronun radyal hareketiyle hiçbir ilişkisi olmaması gereken yörünge hareketinin kinetik enerjisini de içerir. Bu çelişki şu varsayım ile kaldırılabilir: Elektronun KE kinetik enerjisinin iki kısmı vardır: çekirdeğe veya ondan öteye doğru olan hareketinden ileri gelen $\mathrm{KE}_{\mathrm{radyal}}$ ve çekirdeğin etrafındaki hareketinden ileri gelen $\mathrm{KE}_{\mathrm{yörünge}}$.

Elektronun *U* potansiyel enerjisi Denk.(2.2) elektrikseldir:

$$U(r)=-\frac{\mathrm{e}^2}{(4\pi\varepsilon_0)\mathrm{r}}$$

Dolayısıyla elektronun toplam enerjisi şöyledir:

$$E=\mathrm{KE}_{\mathrm{radyal}}+\mathrm{KE}_{\mathrm{yörünge}}+U=\mathrm{KE}_{\mathrm{radyal}}+\mathrm{KE}_{\mathrm{yörünge}}-\frac{\mathrm{e}^2}{(4\pi\varepsilon_0)\mathrm{r}}$$

E nin bu ifadesini Denk.(2.16)'ya yerleştirirsek küçük bir düzenlemeden sonra şunu elde ederiz:

$$\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dr}}\left(\mathrm{r}^2\frac{\mathrm{dR}}{\mathrm{dr}}\right)+\frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}\left[\mathrm{KE}_{\mathrm{radyal}}+\mathrm{KE}_{\mathrm{yörünge}}-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mathrm{mr}^2}\right]\mathrm{R}=0 \qquad (2.23)$$

Denk.(2.23)'te köşeli parantezin içindeki son iki terim birbirini götürürse istediğimizi elde edeceğiz. Dolayısıyla şu bağıntının sağlanmasını isteyelim:

$$\mathrm{KE}_{\text{yörünge}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mathrm{mr}^2} \tag{2.24}$$

Elektronun yörünge kinetik enerjisi ve açısal momentumu sırasıyla

$$\mathrm{KE}_{\text{yörünge}} = \frac{1}{2}\mathrm{m}v^2_{\text{yörünge}} \qquad \mathrm{L} = \mathrm{m}v_{yörünge}\mathrm{r}$$

olduğundan, yörünge kinetik enerjisi için şu bağıntıyı yazabiliriz:

$$\mathrm{KE}_{\text{yörünge}} = \frac{\mathrm{L}^2}{2\mathrm{mr}^2}$$

Dolayısıyla Denk.(2.24)'ten

$$\frac{\mathrm{L}^2}{2\mathrm{mr}^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mathrm{mr}^2}$$

olduğunda elektronun açısal momentumu için,

$$\mathrm{L} = \sqrt{l(l+1)}\hbar \tag{2.25}$$

elde ederiz. Yörünge kuantum sayısı l

$$l = 0,1,2,3,...(n-1)$$

değerlerine kısıtlanmış olduğundan, elektron sadece Denk.(2.25)'in belirlediği belli açısal momentum değerlerine sahip olabilir. E toplam enerjisi gibi açısal momentum da hem korunur hem de kuantumlanmıştır. Dolayısıyla, $\hbar$=1.054x10^{-34} J.s niceliği açısal momentumun doğal birimidir.

Elektronun açısal momentum durumları, aşağıda verildiği gibi harflerle gösterilir.

$l = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \ldots$

$\quad s \quad p \quad d \quad f \quad g \quad h \quad i \ldots$

Bu kodlama atom kuramı geliştirilmeden, deneysel tayf sınıflandırmasındaki serilerin isimlerinin ilk harflerinden (sharp-keskin, principal-ana, diffuse-dağınık ve fundamental-temel) kaynaklanmıştır. Yani, bir *s* durumu açısal momentumu olmayan bir durumdur; bir *p* durumu $\sqrt{2}\hbar$ kadar bir açısal momentuma sahiptir (Önengüt, 2008).

Toplam kuantum sayısı ile yörünge açısal momentumu temsil eden harfin birleştirilmesi, atom elektronlarının durumlarının gösterilmesinde kolaylık sağlar ve yaygın olarak kullanılır. Bu gösterimde, örneğin n=2, l=0 a sahip bir durum bir 2*s* durumunu, n=4, l=2 ye sahip bir durum ise bir 4*d* durumudur. Çizelge 2.1'de bir atomdaki elektron durumları n=6, l=5 e kadar verilmiştir.

Çizelge 2.1. Atomlarda elektron durumları

	***l*= 0**	***l*= 1**	***l*= 2**	***l*= 3**	***l*= 4**	***l*= 5**
n=1	1*s*					
n=2	2*s*	2*p*				
n=3	3*s*	3*p*	3*d*			
n=4	4*s*	4*p*	4*d*	4*f*		
n=5	5*s*	5*p*	5*d*	5*f*	5*g*	
n=6	6*s*	6*p*	6*d*	6*f*	6*g*	6*h*

iii) Manyetik Kuantum Sayısı: Yörünge kuantum sayısı *l*, elektronun L açısal momentumunun L büyüklüğünü belirler. Açısal momentumu olan bir atom elektronu, bir B dış manyetik alanı ile etkileşir. Manyetik kuantum sayısı m_l, L nin alan yönündeki bileşenini belirleyerek L nin yönünü verir. Bu, çoğu zaman **uzay kuantumlanması** olarak adlandırılır.

Manyetik alanın yönünü *z*-eksenine paralel olarak alırsak, L nin bu yöndeki bileşeni şöyle verilir:

$$L_z = m_l \hbar \qquad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ..., \pm l \tag{2.26}$$

l nin belli bir değeri için m_l nin alabileceği değerler +*l* den 0 a ve oradan –*l* ye uzanır.

Dolayısıyla, L açısal momentum vektörünün bir manyetik alanda alabileceği yönelimlerinin sayısı $2l+1$ dir. l=0 ise L_z sadece 0 değerini alabilir, l=1 ise L_z ħ, 0 veya –ħ olabilir, l=2 ise L_z 2ħ, ħ, 0, -ħ veya -2ħ olabilir. Belli bir m_l değerine sahip olan bir atom, kendisini bir dış manyetik alanda bulursa, L açısal momentumu bu alana göre m_l değerlerine karşılık gelecek bir biçimde yönelecektir. Burada dikkat edilmesi gereken nokta, L nin hiçbir zaman B ye tam olarak paralel veya anti paralel olamayacağıdır; çünkü L_z her zaman toplam açısal momentumun $\sqrt{l(l+1)}$ büyüklüğünden küçüktür. Bir dış manyetik alan yoksa z-ekseninin yönü rastgele seçilebilir. Doğru olması gereken, L nin seçeceğimiz herhangi bir yöndeki bileşeninin $m_l\hbar$ olmasıdır (Önengüt, 2008).

2.3. Elektron Katları ve Alt Katları

Çok elektronlu atomlarda asal kuantum sayısı aynı olan elektronlar atomun elektron katlarını meydana getirirler. Asal kuantum sayısının belli bir değerinde elektron katındaki elektronların maksimum sayısı $2n^2$ dir. Spektroskopide asal kuantum sayısının n=1, 2, 3, 4,… değerlerine karşılık gelen elektron katları sırasıyla *K, L, M, N*,… diye adlandırılır. *K* (n=1) katındaki elektronların maksimum sayısı 2, *L* (n=2) katındakiler 8, *M* (n=3) katındakilerin 18, *N* (n=4) katındakilerin ki 32 v.s. dir (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995).

Asal kuantum sayısı n nin verilen bir değerinde aynı kuantum sayısı l ye karşılık gelen elektronlar, verilen katın alt katlarını meydana getirirler. Bilindiği gibi, asal kuantum sayısı n nin verilen bir değerinde yörüngesel kuantum sayısı l, 0 ile (n-1) arasındaki tüm değerleri alabilir. Buna göre, atomun *K* katı yalnız bir alt kattan (1*s*); *L* katı iki alt kattan (2*s*, 2*p*); *M* katı üç alt kattan (3*s*, 3*p*, 3*d*); *N* katı dört alt kattan (4*s*, 4*p*, 4*d*, 4*f*) ibaret olacaktır. Böylece asal kuantum sayısı n nin verilen bir değerinde atomun her bir elektron katı, n sayıda alt elektron katına ayrılır.

Çizelge 2.2'de n nin çeşitli değerleri için atomun elektron ve alt elektron katları verilmiştir.

Çizelge 2.2. Atomun elektron katları ve alt katları

n	**Atomun elektron katları**	***l***	**Atomun elektron alt katları**
1	*K*	0	1*s*
2	*L*	0 1	2*s* 2*p*
3	*M*	0 1 2	3*s* 3*p* 3*d*
4	*N*	0 1 2 3	4*s* 4*p* 4*d* 4*f*
5	*O*	0 1 2 3 4	5*s* 5*p* 5*d* 5*f* 5*g*
…	…	……..	……...

Bir elektronlu atom ve iyonların tek bir elektronu, kuantum sayılarının $n = 1, 2, 3, \ldots$; $l = 0, 1, 2, 3, \ldots (n-1)$; $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots, \pm l$ ve $m_s = \pm 1/2$ değerleriyle belirlenen kuantum hallerinin her birinde olabilir.

Çok elektronlu atomlarda da her bir elektronun hali bu kuantum sayıları ile belirlenir. Fakat atomda aynı anda aynı kuantum halinde olabilen elektronların sayısı **Pauli prensibi**ne uymak zorundadır. Pauli prensibine göre atomda aynı bir kuantum halinde iki elektron bulunamaz. Başka bir deyişle, atomda aynı kuantum sayıları takımı ile karakterize olunan iki elektron bulunamaz. Atomun herhangi iki elektronu için *n, l,* m_l ve m_s kuantum sayılarının en azından biri farklı olmalıdır. Örneğin *s, p, d,*… alt katlarında Pauli prensibine göre elektronların maksimum sayısını bulalım. *s* alt katı için *l*=0, m_l=0 olduğundan bu alt kat m_l=0 a karşılık gelen tek bir yuva ile gösterilebilir. Bu *s* alt katında birbirinden yalnız m_s kuantum sayısı ile farklı olan ($m_{s_1} = +1/2, m_{s_2} = -1/2$) iki elektron olabilir (m_s=1/2 olduğunda elektronun spini ↑ şeklinde, m_s=-1/2 olduğunda ise ↓ şeklinde gösterelim). Şimdi de *p* alt katındaki elektronların maksimum sayısına bakalım. Bu alt katı için *l*=1 ve m_l=1, 0, -1 dir. Buna göre, *p* alt katını m_l nin bu değerlerine karşılık gelen üç yuva ile gösterebiliriz. Bunların her birinde Pauli prensibine göre, yalnız m_s kuantum sayıları ile farklı olan iki elektron olabilir. O halde *p* alt katındaki elektronların maksimum sayısı 6 olarak bulunur. Çizelge 2.3'te *p* alt katlarında elektronların Pauli prensibine göre nasıl yerleştikleri gösterilmiştir.

Çizelge 2.3. Pauli prensibine göre elektronların p alt katında yerleşmesi

m_l	1	0	-1
	↑↓	↑↓	↑↓

Aynı kural ile *d* alt katındaki elektronların maksimum sayısı 10, *f* alt katında 14, *g* alt katında 18,… olarak bulunur. Başka bir deyişle Pauli prensibine göre asal kuantum sayısının verilen bir değerinde atomda 2 tane *s*-elektron (s^2), 6 tane *p*-elektron (p^6), 10 tane *d*-elektron (d^{10}), 14 tane *f*-elektron (f^{14}), 18 tane *g*-elektron (g^{18}),… olabilir.

Çok elektronlu atomlarda, elektronlar enerjinin en küçük değerine karşılık gelen elektron katlarını doldurmaya çalışırlar. Buna göre atomda önce *K* katı (*n*=1), sonra ise *L* (*n*=2), *M* (*n*=3), *N* (*n*=4),… katları dolmaya başlar. Daha önce de söylendiği gibi, çok elektronlu atomlarda, asal kuantum sayısının verilen bir değerinde, elektronun enerjisi *l* ye de bağlıdır. Verilen bir elektron katında *l* büyüdükçe, elektronun enerjisi de büyür. Buna göre verilen bir elektron katında önce *ns* alt katı, sonra sırasıyla *np*, *nd*,… alt katları dolmaya başlar.

Çok elektronlu atomların elektron alt katlarının dolma sırası **Hund kuralı** ile bulunur. Bu kurala göre elektronlar alt katlara öyle yerleşmelidirler ki, alt katın tüm elektronlarının spin manyetik kuantum sayılarının toplamı $\sum_i m_{s_i}$ maksimum olsun. Bu koşul yerine getirildiğinde ise, alt kattaki bütün elektronların yörüngesel manyetik kuantum sayılarının toplamı $\sum_i m_{l_i}$ maksimum olmalıdır. Bu kurala göre elektron alt katında önce m_s=1/2 ve $m_l = l$ ye karşılık gelen yuva dolar, bunun ardından da m_s=-1/2 ve $m_l = l$-1, m_s=1/2 ve $m_l = l$-2,… lere uygun gelen yuvalar dolar. En sonunda da m_s=1/2 ve $m_l = -l$ ye uygun gelen yuva dolar (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995).

Enerjinin yörüngesel kuantum sayısına bağlı olması ile ilgili olarak $n \geq 4$'ten itibaren *n* nin büyük *l* nin küçük değerlerine karşılık gelen seviyenin enerjisi *n* nin küçük ve *l* nin büyük değerlerine karşılık gelen seviyenin enerjisinden küçük olur. Buna göre 3*d* alt katı tamamen dolmadan 4*s* alt katı dolmaya başlar; 4*d* ve 4*f* alt katları tamamen dolmadan 5*s* alt katı dolmaya başlar; 4*f*, 5*d*, 5*f* ve 5*g* alt katları tamamen dolmadan 6*s* alt katı dolmaya başlar v.s. $n \geq 4$'ten itibaren alt katların dolma sırası **Kleckovski kuralı** ile belirlenir. Bu kurala göre, çok elektronlu atomlarda önce *n* ve *l* kuantum sayılarının toplamı küçük olan alt katlar dolar. Örneğin, 4*s* hali için $n+l = 4$, 3*d* hali için ise $n+l = 5$ tir. Buna göre önce 4*s* alt katı, sonra ise 3*d* alt katı dolar.

Atomun bütün elektronlarının *n* ve *l* kuantum sayılarına göre paylaşılması elektron konfigürasyonlarını meydana getirir. Örneğin, Na I atomunun (Z=11) normal elektron konfigürasyonu $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$ şeklinde yazılır. Eğer verilen bir elektron

konfigürasyonunda bütün elektronların yörüngesel kuantum sayılarının toplamı $\sum_i l_i$ çift olursa konfigürasyon çift, tek olursa konfigürasyon tek diye adlandırılır. Örneğin Na I'nın normal elektron konfigürasyonu çifttir; çünkü bütün elektronları için $\sum_i l_i$ çifttir. P I (Z=15)'nin normal konfigürasyonu $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^3$ dir. Görüldüğü gibi bütün elektronlar için $\sum_i l_i$ tek olduğundan, konfigürasyon tektir. Eğer konfigürasyon çift sayıda tek l li elektronlardan ibaretse, terimler çift; tek sayıda tek l li elektronlardan ibaretse, terimler tektir. Çift elektronlardan ibaret olan (l=0, 2, 4,…) konfigürasyonların tüm terimleri ise çift olur.

Tam dolmuş alt katlarda bütün l lere karşılık gelen elektronlar çift çift yerleştiklerinden, onların elektron konfigürasyonları hep çift olur. Tam dolmamış elektron konfigürasyonları ise, hem çift hem de tek olabilir. Böylece verilen bir elektron konfigürasyonunun çiftliğini tam dolmamış alt katlardaki elektronlar belirler. Dipol elektromanyetik radyasyonu için yalnız çiftliği farklı olan terimler arasında geçişler olabilir. Manyetik dipol ve elektrik kuadrupol radyasyonu için ise çiftliği aynı olan konfigürasyonların terimleri arasında da geçişler olabilir. Atomların tam dolmuş alt katlarındaki elektronlarının toplam momentleri sıfır olduğundan, bunların optik spektrumları tam dolmamış alt kattaki elektronların (dış elektronların) uyarılması ile meydana gelir.

Tek elektronlu konfigürasyonlara örnek olarak Na I (Z=11) atomunun konfigürasyonu verilebilir. Bunun normal elektron konfigürasyonu $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$ dir. Görüldüğü gibi dış alt katta tek bir 3s elektronu vardır. Bu elektronun uyarılmasıyla aşağıda verilen bir elektronlu uyarılmış konfigürasyonlar (normal konfigürasyonlar bolt ve altı çizili şekilde gösterilmiştir) elde edilir:

$\underline{\mathbf{1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s}}$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 4s$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 5s$,…
$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3p$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 4p$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 5p$,…
$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3d$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 4d$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 5d$,…
	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 4f$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 5f$,…
		$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 5g$,…

İki elektronlu konfigürasyonlara örnek olarak Mg I (Z=12) atomunun konfigürasyonu verilebilir. Bunun normal elektron konfigürasyonu $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$ dir. Görüldüğü gibi

bu konfigürasyonun dış alt katında iki tane 3*s* elektron vardır. Bu elektronlardan birinin uyarılmasıyla aşağıda verilen iki elektronlu konfigürasyonlar elde edilir:

$\underline{1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2}$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 4s$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 5s$,…
$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 3p$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 4p$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 5p$,…
$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 3d$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 4d$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 5d$,…
	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 4f$,	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 5f$,…
		$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s\ 5g$,…

Dört elektronlu konfigürasyonlara örnek olarak C I (Z=6)'in konfigürasyonu verilebilir. C I atomunun normal konfigürasyonu $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ dir. Yani dış alt katta dört tane elektron (iki tane *s*, iki tane *p*) vardır. Dış 2*s* elektronlarından birinin uyarılmasıyla aşağıda verilen dört elektronlu konfigürasyonlar elde edilir:

$\underline{1s^2\ 2s^2\ 2p^2}$,	$1s^2\ 2s\ 2p^2\ 3s$,	$1s^2\ 2s\ 2p^2\ 4s$,…
$1s^2\ 2s\ 2p^3$,	$1s^2\ 2s\ 2p^2\ 3p$,	$1s^2\ 2s\ 2p^2\ 4p$,…
	$1s^2\ 2s\ 2p^2\ 3d$,	$1s^2\ 2s\ 2p^2\ 4d$,…
		$1s^2\ 2s\ 2p^2\ 4f$,…

Dikkat edilirse bu incelemede, elektronun spin özelliği göz önünde tutulmamıştır. Tek elektronlu atomda spinin göz ardı edildiği bu incelemeye çoğu kez, **Schrödinger Kuramı** adı verilir (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995).

3. SPEKTROSKOPİNİN TEMEL PRENSİPLERİ

Optik spektrumlar çizgi, bant ve sürekli spektrumlar olarak sınıflandırılabilir. Sürekli spektrumlar radyan (yayıcı) katılar veya yüksek yoğunluklu gazlar tarafından salınırlar. Bant spektrumları, biri diğerine oldukça yakın olan çok sayıda spektrum çizgileri veya grupları içerirler. Bunlar genelde moleküllere aittirler ve karakteristik seriler olarak düzenlenebilen tekli çizgiler içerirler (Okur, 2001).

Optik spektrumlar salınma veya soğurmayla gözlenebilir. Bu, atoma enerjinin ışık, elektron çarpmaları, *X-ışını* uyarması veya başka işlemlerle aktarılmasıyla başarılır. Eğer bir madde soğurduğu enerjiyi salarsa bu işlem rezonans floresans olarak adlandırılır. Spektrumlar geleneksel olarak farklı birçok birimlerde ölçülürler. Bunun bazı sebepleri şöyledir (Okur, 2001):

a) ***Dalga boyu*** birimlerinde. Bunlar bir kırınım ızgarasıyla kesin bir şekilde tespit edilebilir. Bununla birlikte, genelde daha yüksek doğruluk sağlayan bir *ayarlı karşılaştırma* spektrumu kullanılır. Dalga boyu standartlarının birisi $^{86}_{36}\mathrm{Kr}$ sarı çizgisidir; bu $^{86}_{36}\mathrm{Kr}$ atomunun spektrumundaki sarı çizgiye karşılık gelir. Bu çizgi için

$$\lambda_{vakum} = 6057.80211\text{Å} \equiv \bar{\nu} = 16507.6373\ \mathrm{cm}^{-1} \tag{3.1}$$

dir. Genelde dalga boyları vakuma göre belirlenir. Havada karşılık gelen dalga boyu, havanın kırılma indisi "1" den bir miktar büyük ve böylece ışığın hızı vakumdakinden daha düşük olması sebebiyle bir miktar daha küçüktür. Havada ölçülen dalga boylarını çevirmek için,

$$\lambda_{hava} = \lambda_{vakum}/n \tag{3.2}$$

formülü kullanılmaktadır. Havanın kırılma indisi dalga boyuna bağlıdır. 6000Å da n=1.0002762 dir.

b) ***Frekansı*** belirleme, ortama bağlı olmaması sebebiyle daha geneldir. Burada

$$\nu = c/\lambda_{vakum} = ci(n\lambda_{hava}) \tag{3.3}$$

ifadesine de sahibiz.

c) Sıkça bahsedilen bir nicelik de ***dalga sayısı***dır:

$$\bar{\nu} = \nu / c = 1/\lambda_{vakum} = 1/(n\lambda_{hava}) \tag{3.4}$$

Frekans gibi dalga sayısı da enerjiyle orantılı bir niceliktir. Dönüşüm,

$$E = \bar{\nu} hc \tag{3.5}$$

eşitliğine göre yapılır.

d) Son olarak *e*V birimi sıkça enerjinin bir ölçüsü olarak kullanılır. Dönüşüm faktörleriyle beraber atom fiziğinde önemli ve pratik birçok birim Çizelge 3.1'de düzenlenmiştir (Okur, 2001).

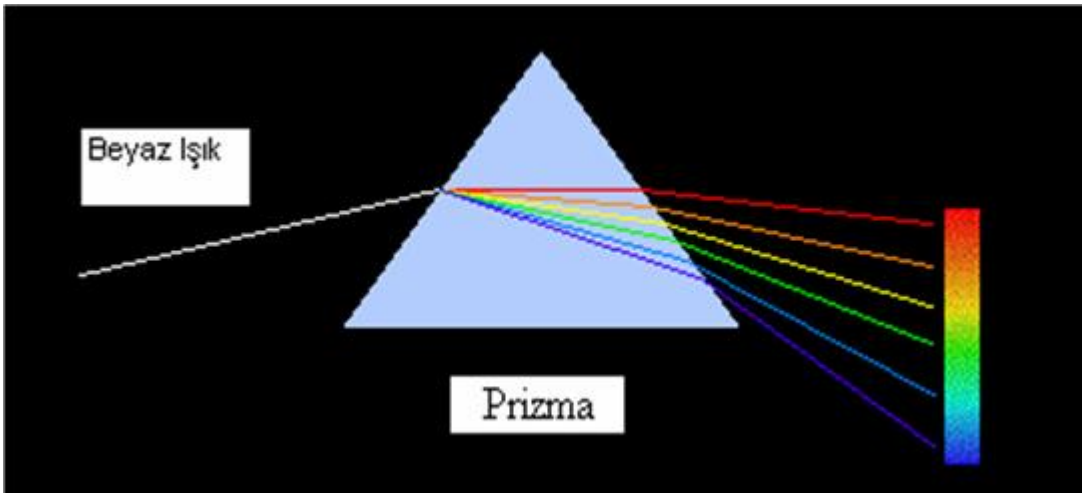
Çizelge 3.1. Sık kullanılan birimler ve dönüşüm katsayısı

Nicelik	**Birim ve çevirme katsayısı**
Dalga boyu λ	1Å = 10^{-10} *m* = 0.1*nm*
Dalga sayısı	1cm^{-1} (=1 kayser)
$\bar{\nu} = 1/\lambda$	$\bar{\nu}$ = 8066 *E* (*e*V) cm^{-1}
Enerji *E*	1 elektronvolt = 1.602x10^{-19} J = 1.96x10^{-6} mc^2
	$E = h\nu = hc/\lambda = hc\bar{\nu}$
	1 *e*V = 2.418x10^{14} Hz ≡ 8066 cm^{-1}
	E (*e*V) = 1.24x10^{-4} $\bar{\nu}$ /*cm*
Kütle m_0	1 elektronun kütlesi = 9.11x10^{-31} kg = 511k*e*V/c^2
Yük *e*	1 temel yük = 1.6x10^{-19} C
Planck sabiti *h*	*h* = 4.14x10^{-15} *e*V.s; ħ = *h* / 2π = 6.58x10^{-16} *e*V.s

3.1. Hidrojen Atomunun Spektrumu

Spektrumlar arasında en bilineni 1666 yılında Newton tarafından bulunmuştur. Newton bir prizma üstüne düşen beyaz ışığın gökkuşağındaki renklere ayrıldığını göstermiştir (Anonim, 2011).

Beyaz ışık prizmadan geçirildiğinde dalga boylarına göre kırılarak bileşenlerine ayrılır (Şekil 3.1). Buna görünür ışığın **spektrumu** denir. Renkler arasında kesin bir sınır olmaması nedeniyle bu tür spektrumlara **sürekli spektrum** denir (Kartal, 2012).



Şekil 3.1. Görünür ışığın spektrumu

Eğer bir atomdan yayılan ışın prizmadan geçirilecek olursa sürekli spektrum veya kesikli spektrum elde edilir (Şekil 3.2, Şekil 3.3).



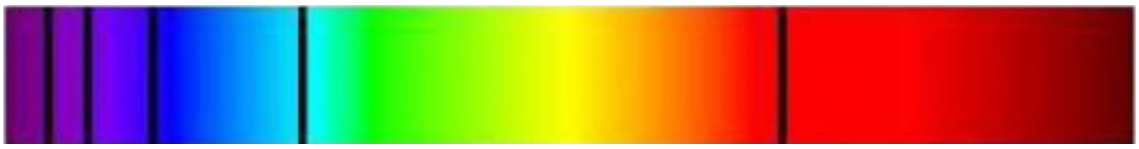
Şekil 3.2. Prizmadan geçirilen atomun ışığının sürekli (çizgi) spektrumu



Şekil 3.3. Prizmadan geçirilen atomun ışığının kesikli spektrumu

19.Yy'ın ortalarında tüm gazların ışığı soğurduğu, bu soğurmanın da atom ve moleküllerin cinsine bağlı özel dalga boylarında olduğu biliniyordu. Örneğin tek bir atom türünden oluşan gaz içinden beyaz ışık geçirilirse, gaz atomlarının karakteristiği olan bazı dalga boylarındaki ışık soğrulacaktır. Bu gazı geçen ışık bir prizmadan geçirilirse, **soğurma (adsorbsiyon) spektrumu** denilen gökkuşağının renklerinin

arasında karanlık soğrulma çizgileri olan bir spektrum Şekil 3.4'teki gibi elde edilir (Anonim, 2011).



Şekil 3.4. Hidrojen elementinin adsorbsiyon spektrumu

Ayrıca gaz yeterince ısıtıldığında ışık salar. Yayınlanan bu ışığı oluşturan dalga boyları beyaz ışığın bu gaz tarafından soğrulan dalga boylarına eşit olur. Yayınlanan bu ışık prizmadan geçirilirse, karanlık bir zeminde parlak renkli çizgiler gözlenir ki; buna **ışıma (emisyon) spektrumu** denir.

En basit çizgi spektrumu, atom halindeki Hidrojende gözlenmiştir. Cıva, Neon gibi diğer atomlar tamamen farklı çizgi spektrumları yayınlarlar (Şekil 3.5). İki element aynı çizgi spektrumunu yayınlamadıkları için bu olay bize bilinmeyen elementleri tanımamıza olanak sağlar (Anonim, 2011).



Şekil 3.5. Hidrojen elementinin emisyon spektrumu

Spektroskopik analizin kâşifleri Kirchhoff ve Bunsen, 19.Yy'ın ortalarında her bir elementin kendine has karakteristik spektruma sahip olduklarını ilk olarak açığa çıkarmışlardır.

Bir proton ve bir elektron içeren Hidrojen atomunun spektrumları, atom yapısı ile ilgili kanunları ve madde yapısını anlamada son 90 yıl içinde oldukça önemli rol oynamıştır. Hidrojen atomunun emisyon (salma) spektrumu görünür bölgede üç karakteristik çizgi gösterir: 6563Å=656.3 nm'lik en uzun dalga boylu çizgi H_α, 4861Å=486.1 nm'lik dalga boylu çizgi H_β ve 4340 Å=434.0 nm'lik dalga boylu çizgi ise H_γ ya karşılık gelir. Bunların en düşük şiddetlisi 1853'te Angstrom tarafında

keşfedilmiştir ve H_α çizgisi olarak adlandırılır. Yakın mor altı bölgesinde bu üç çizgi bir dizi başka çizgiyle izlenir. Bunlar bir düşük-dalga boyu limitine (H_∞) yaklaştıkça düzenli bir şekilde birbirlerine yaklaşırlar (Okur, 2001).

Balmer 1885 yılında bu çizgilerin dalga boylarının,

$$\lambda = \left(\frac{n_1^2}{n_1^2 - 4} \right) \mathrm{G} \tag{3.6}$$

şeklinde bir bağıntıyla elde edebileceğini bulmuştur. Burada n_1=3, 4, 5,… olan bir tamsayı ve G bir deneysel sabittir. Günümüzde Balmer formülünü biraz daha farklı yazıyoruz:

Balmer $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ *n* bir tamsayı >2 (3.7)

Denk.(3.7)'deki R_H = 109677.5810 cm^{-1} niceliği Rydberg sabiti olarak bilinir.

Hidrojenin spektrumunun daha ileri incelenmesi için astrofizik gözlemler oldukça önemli roller üstlenmişlerdir. Yıldızların spektrumlarında, Huggins tarafından 1881 yılı kadar eski bir zamanda (fotoğraf olarak) kaydedilmiş Hidrojen spektrumunda çok sayıda çizgi görülür. Radyo-astronomiksel tekniklerin kullanımıyla oldukça büyük *n* değerleri arasında geçişler bulunmuştur. *n* si 90 ve 350 olan seviyeler belirlenebilmiştir. Astrofizik gözlemlerde birçok çizginin gözlenip bunların yeryüzündeki deneylerde gözlenememesinin sebebi laboratuarda saf Hidrojen atomunun hazırlanmasındaki zorlukla ilgilidir.

Hidrojen gazının Hidrojen atomuna ayrılıp, floresans yapmaya uyarıldığı gaz boşalmalarda daima spektrumu Hidrojen atomu spektrumuyla çakışan Hidrojen molekülleri de bulunur. Seri limiti üzerinde seri-limit sürekliliği olarak adlandırılan bir bölge gözleriz. Bu bölgede spektrum artık çizgi göstermez ve süreklilik arz eder. (3.7) Balmer formülüyle hesapladığımız spektral çizgilerle gözlenen çizgilerin (Çizelge 3.2) karşılaştırması formülün sadece iyi bir yaklaşıklık olmayıp, serinin bu formülle oldukça hassas bir şekilde tanımlandığını gösterir (Okur, 2001).

Çizelge 3.2. Hidrojenin Balmer serisinin ilk 16 çizgisi

	n	λ	$\bar{\nu}_{vakum}(cm^{-1})$	$R_H(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2})$
H_α	3	6562.79	15233.21	15233.00
H_α	4	4861.33	20564.77	20564.55
H_α	5	4340.46	23032.54	23032.29
H_α	6	4101.73	24373.07	24372.80
H_α	7	3970.07	25181.33	25181.08
H_α	8	3889.06	25705.84	25705.68
H_α	9	3835.40	26065.53	26065.35
H_α	10	3797.91	26322.80	26322.62
H_α	11	3770.63	26513.22	26512.97
H_α	12	3750.15	26658.01	26657.75
H_α	13	3734.37	26770.65	26770.42
H_α	14	3721.95	26860.01	26859.82
H_α	15	3711.98	26932.14	26931.94
H_α	16	3703.86	26991.18	26990.97

Hidrojen atomunun bütün spektrumu şu eşitlikteki gibi temsil edilir:

$$\bar{\nu} = R_H\left(\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right) \qquad n' < n \text{ tamsayılar} \tag{3.8}$$

Denk.(3.8)'deki n ve n' sayıları baş kuantum sayıları olarak adlandırılırlar.

Balmer serisi, Hidrojen tayfının görünür dalga boylarını içerir. Hidrojenin morötesi ve kızılaltı bölgelerindeki tayf çizgileri, başka çeşitli serilerin içindedir.

Morötesi bölgede, Lyman serisi şu bağıntı ile verilen dalga boylarını içerir:

Lyman $$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 2, 3, 4,\ldots \tag{3.9}$$

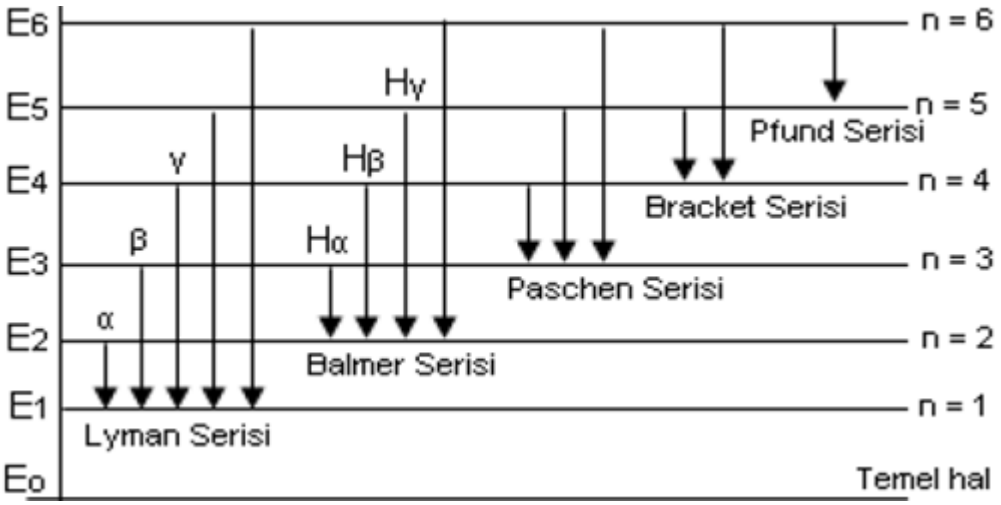
Kızılaltı bölgede, çizgilerinin dalga boyları aşağıdaki bağıntılarla belirlenen üç tayf serisi bulunmuştur:

Paschen $$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{3^2}-\frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 4, 5, 6,\ldots \tag{3.10}$$

Brackett $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n = 5,6,7,\ldots$ (3.11)

Pfund $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ $n = 6, 7, 8,\ldots$ (3.12)

Hidrojen atomunun spektrumu için gözlenen bu seriler Şekil (3.6)'da gösterilmiştir.



Şekil 3.6. Hidrojen atomu için enerji seviyeleri

(3.8) formülü 1889'da Rydberg tarafından formül haline getirilmiştir. Hesaplamalarına göre (3.6) Balmer formülü (3.8) Rydberg formülünün özel bir durumu olduğunu bulmuştur.

Çizelge 3.3, ilk dört seriden gelen çizgilerin bazılarını göstermektedir. Bu çizelge aynı zamanda 1898 yılında deneysel olarak bulunan **Ritz'in kombinasyon prensibi**ni de içerir. Bu ilke şunu söyler: Spektral serilerdeki iki çizginin frekans farkları, aynı zamanda atom spektrumundan kaynaklanan bir başka seride oluşan bir spektral çizginin frekansına eşittir. Örneğin, Lyman serisindeki ilk iki terimin frekans farkı Balmer serisinin birinci çizgisinin frekansına eşittir; bu (3.3) çizelgesindeki dalga sayıları değerlerinden de görülebilir (Okur, 2001).

Çizelge 3.3. Hidrojenin spektrum çizgilerinin bazıları

n' / n	**1 Lyman**	**2 Balmer**	**3 Paschen**	**4 Brackett**
2	1216 Å ≡ 82257 cm^{-1}			
3	1026 Å ≡ 97466 cm^{-1}	6563 Å ≡ 15233 cm^{-1}		
4	973 Å ≡ 102807 cm^{-1}	4861 Å ≡ 20565 cm^{-1}	18751 Å ≡ 5333 cm^{-1}	
5	950 Å ≡ 105263 cm^{-1}	4340 Å ≡ 23033 cm^{-1}	12818 Å ≡ 7801 cm^{-1}	40500 Å ≡ 2467 cm^{-1}
keşif yılı	1906	1885	1908	1922

Gözlemlerden ve bunlara bağlı sebeplerden bütün spektral çizgilerin frekanslarının (veya dalga sayısının) R/n^2 şeklinde iki terimin farkı olarak temsil edilebilecekleri sonucuna varabiliriz (Okur, 2001).

Bilindiği gibi iki değişik sistem Hidrojen benzeri spektrum oluşturur. Bunlardan birincisi Hidrojen benzeri iyonlar (örneğin bir kez iyonlaşmış Helyum, iki kez iyonlaşmış Lityum gibi), ikincisi ise Hidrojen benzeri atomlardır. Bu atomların spektrumları Rydberg formülüne küçük bir deformasyon teriminin katılmasıyla açıklanabilir. Bu atomlar kimyasal reaksiyonlarında yalnız bir değerlikli olarak görülürler ve alkali atomlar olarak bilinirler. Bu atomların yalnızca bir tek valans elektronları olmasından dolayı Hidrojen atomuna benzerler.

Bir Hidrojen-Helyum karışımının emisyon (yayınlama) spektrumunda Balmer serisinin yanında bir de Fowler serisi denilen ikinci bir spektrum görülür. Bazı yıldızların spektrumlarında Pickering serisi denilen başka bir seriye de rastlanır (Gedikoğlu, 1991). Buna göre adı geçen bu iki seri şu şekilde ifade edilirler:

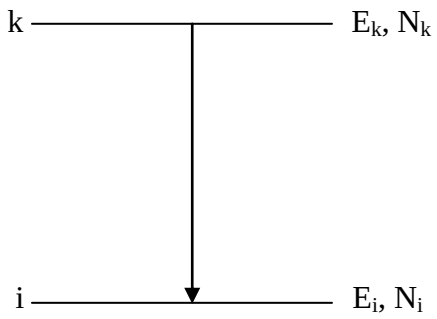
Fowler $$\bar{\nu} = 4R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 4, 5, 6, \ldots \tag{3.13}$$

Pickering $$\bar{\nu} = 4R\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 5, 6, 7, \ldots \tag{3.14}$$

Bu çizgilerle beraber olan çizgilerin (Hidrojen çizgilerinden başka olan çizgilerin) saf Helyum spektrumunda da görülmeleri bunların Helyum iyonlarına ait oldukları sonucunu doğurur (Gedikoğlu, 1991).

3.2. Spektral Çizgilerin Şiddeti

Monokromatik spektral çizginin şiddeti, aynı çizgi frekansında birim hacmin radyasyon yayınlama gücü ile orantılı olan fiziksel bir niceliktir. Bütün spektral çizgiler belli nedenlerden dolayı belirli genişliklere sahip olurlar. Buna göre gerçek bir spektral çizginin şiddeti, bu çizgi içindeki tüm frekanslarda birim hacmin radyasyon yayınlama gücü ile orantılı bir niceliktir. Atomun Şekil 3.7'de gösterilen rastgele *k* ve *i* ayrık enerji seviyeleri arasındaki $k \to i$ geçişine karşılık gelen spektral çizginin şiddetine bakalım (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995).



Şekil 3.7. Spektral çizgilerin şiddeti

Bu seviyelerin enerjisi E_k, E_i ve birim hacimde bu seviyedeki atomların sayısı ise sırasıyla N_k ve N_i olsun. *k* seviyesinden *i* seviyesine yalnız kendiliğinden ve mecburi geçişlerin olabildiğini varsayalım. O zaman $k \to i$ geçişine karşılık gelen ν_{ki} frekansında birim hacmin radyasyon yayınlama gücü,

$$\varepsilon_{ki} = N_k[A_{ki}+B_{ki}.\rho_{ki}\,]h\nu_{ki} \qquad (3.15)$$

olur. Buna göre $k \to i$ geçişine karşılık gelen spektral çizginin şiddeti,

$$J_{ki} \approx N_k[A_{ki}+B_{ki}.\,\rho_{ki}\,]h\nu_{ki} \qquad (3.16)$$

şeklinde yazılabilir. Genel olarak spektral çizgilerin bağıl şiddeti kullanılır. Buna göre J_{ki} ve ε_{ki} arasındaki orantı katsayısını bir olarak alırsak, Denk.(3.16)'da spektral çizginin şiddeti aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$J_{ki} = N_k[A_{ki}+B_{ki}.\rho_{ki}\ ]h\nu_{ki} \qquad (3.17)$$

Eğer dış radyasyon alanı olmazsa veya çok zayıf olursa $\rho_{ki}=0$ olur ve Denk.(3.17)'den

$$J_{ki} = N_k A_{ki} h\nu_{ki} \qquad (3.18)$$

elde edilir.

Böylece, en basit halde $k \to i$ kendiliğinden geçişe karşılık gelen spektral çizginin şiddeti, A_{ki} olasılığı ve birim hacimdeki *k* uyarılmış halindeki atomların sayısı N_k ile belirlenir.

3.2.1. Şiddetin Yoğunluğa Bağlılığı

Bir önceki paragrafta gördüğümüz gibi $k \to i$ geçişine karşılık gelen spektral çizginin şiddeti birim hacimde *k* uyarılmış halinde olan atomların sayısı N_k ile orantılıdır. Fakat spektral çizginin şiddetini veren bir uyarılmış haldeki atomların sayısı ile değil, birim hacimde verilen aynı tür atomların toplam sayısıyla, başka bir deyişle bu atomların yoğunluğu ile ifade etmek daha uygundur.

Birim hacimde verilen aynı tür atomların toplam sayısının N olduğunu varsayalım (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995). O zaman,

$$N = N_1 + N_2 + N_3 + ... + N_\infty \qquad (3.19)$$

yazılabilir. Burada N_1 birim hacimde temel seviyedeki atomların sayısı, N_2, N_3,…ise birim hacimde uygun uyarılmış seviyelerdeki atomların sayısıdır. Termodinamik denge halinde atomların uyarılmış hallere göre dağılımı Boltzman formülü ile verilir:

$$N_2 = N_1 \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right)$$

$$N_3 = N_1 \frac{g_3}{g_1} \exp\left(-\frac{E_3 - E_1}{kT}\right) \qquad (3.20)$$

$$N_n = N_1 \frac{g_n}{g_1} \exp\left(-\frac{E_n - E_1}{kT}\right)$$

Burada g_1, g_2, g_3,… ve E_1, E_2, E_3,… sırasıyla seviyelerin istatistik ağırlıkları ve enerjileri, *k* Boltzman sabiti, T ise uyarılma sıcaklığıdır.

Bilindiği gibi rastgele bir *k* seviyesinin uyarılma enerjisi,

$$\varepsilon_k = E_k - E_i = h\nu_{ki} \qquad (3.21)$$

olur. Buna göre Denk.(3.20) ve Denk.(3.21)'i Denk.(3.19)'da yerine koyarsak,

$$N = \frac{N_1}{g_1}\left[g_1 + g_2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_2}{kT}\right) + g_3 \exp\left(-\frac{\varepsilon_3}{kT}\right) + \ldots\right] \qquad (3.22a)$$

veya

$$N = N_1 \frac{U(T)}{g_1} \qquad (3.22b)$$

elde edilir. Burada,

$$U(T) = \sum_{i=1}^{\infty} g_i \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right) \approx g_i \qquad (3.23)$$

hallere göre toplam veya dağılım fonksiyonu diye adlandırılır.

Boltzman kanununa göre *k* ve *i* seviyesindeki atomların sayısı için aşağıdaki gibi eşitlik yazılabilir:

$$N_k = N_1 \frac{g_k}{g_1} \exp\left(-\frac{\varepsilon_k}{kT}\right) \tag{3.24}$$

Eğer Denk.(3.22b)'yi Denk.(3.23)'te yerine koyarsak,

$$N_k = N_1 \frac{g_k}{U(T)} \exp\left(-\frac{\varepsilon_k}{kT}\right) \tag{3.25}$$

elde edilir.

Sonuncu ifade birim hacimde *k* seviyesindeki atomların N_k ile birim hacimdeki atomların toplam sayısı N arasındaki ilişkiyi gösterir. Fakat bu ifadenin yalnız termodinamik denge koşulunda geçerli olduğunu unutmamak gerekir.

Nihayet Denk.(3.25)'i Denk.(3.18)'de yerine koyarsak, spektral çizginin şiddeti için aşağıdaki formülü elde ederiz:

$$J_{ki} = N \frac{g_k}{U(T)} A_{ki} h\nu_{ki} \exp\left(-\frac{\varepsilon_k}{kT}\right) \tag{3.26}$$

Bu ifade spektral çizgilerin şiddetinin yoğunluğa bağlılığını göstermektedir.

Sonuncu formülden görüldüğü gibi $\varepsilon_k \approx kT$ olduğunda spektral çizgilerin şiddeti sıcaklığa bağlıdır. $\varepsilon_k >> kT$ olduğunda çizginin şiddeti sıfıra yaklaşır ve nihayet $\varepsilon_k << kT$ olduğunda çizgilerin şiddeti sıcaklığa bağlı değildir. Bu fiziksel olarak açık bir durumdur. Sıcaklık çok küçük olduğunda atomların hemen hemen hepsi temel halde bulunur. Buna göre atomların uyarılmış hallerine karşılık gelen enerji seviyeleri arasındaki geçişlerin, böylece de uyarılmış hallerden temel hale olan geçişlerin olasılığı sıfıra yakın olur ve sonuçta spektral çizgilerin şiddeti sıfıra yakın olur. Sıcaklık arttıkça uyarılmış haldeki atomların sayısı ve buna uygun olarak ta spektral çizgilerin şiddeti

artar. Nihayet sıcaklığın $kT>>\varepsilon_k$ ya karşılık gelen değerlerinde spektral çizgilerin şiddeti sıcaklıktan bağımsızdır. Çünkü belli bir sıcaklıktan sonra uyarılmış haldeki atomların sayısı artmaz. Kabaca, uyarılmada doyma baş gösterir. Buna göre sıcaklık uyarılmasında sıcaklığın istenilen bir değerinde verilen bir uyarılmış haldeki atomların sayısı temel haldeki, böylece de kendiliğinden aşağıya yerleşen uyarılmış hallerdeki atomların sayısından küçük olmalıdır.

3.2.2. Spektral Çizgilerin Bağıl Şiddetlerine Göre Osilatör Şiddetinin Tayini

Spektral çizgilerin şiddetini tayin eden Denk.(3.26)'dan aşağıdaki ifadeyi yazabiliriz (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995):

$$\frac{J_{ki}}{g_k A_{ki}} = \frac{h\nu_{ki}}{U(T)} N \exp\left(-\frac{\varepsilon_k}{kT}\right) \tag{3.27}$$

Bu formülde frekanstan dalga boyuna geçersek,

$$\frac{J_{ki}}{g_k A_{ki}} = \frac{hc}{\lambda_{ki} U(T)} N \exp\left(-\frac{\varepsilon_k}{kT}\right) \tag{3.28}$$

yazabiliriz. Bu ifadenin logaritmasını alıp $\frac{\log e}{k} = 5040$ olduğunu da dikkate alarak, aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\log \frac{J_{ki}}{g_k A_{ki}} = \log\left(\frac{hc}{U(T)} N\right) - \frac{5040}{T} \varepsilon_k \tag{3.29}$$

Buradaki A_{ki} daha sonraki bölümlerde detaylı olarak açıklanacak olan geçiş olasılığı olup, şu şekilde gösterilmektedir:

$$A_{ki} = \frac{g_i}{g_k} \frac{8\pi^2 e^2 \nu_{ki}^2}{m_0 c^3} f_{ik} = \frac{g_i}{g_k} \frac{8\pi^2 e^2}{m_0 c} \frac{1}{\lambda_{ik}^2} f_{ik} \tag{3.30}$$

Burada f_{ik}, $k \to i$ geçişine karşılık gelen osilatör şiddetidir. Eğer Denk.(3.30)'u Denk.(3.29)'da yerine koyarsak, aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\log \frac{J_{ki}\lambda_{ki}^3}{g_{ki}f_{ik}} = \log\left(\frac{8\pi^2 e^2}{m_0}\frac{N}{U(T)}h\right) - \frac{5040}{T}\varepsilon_k \tag{3.31}$$

Parantez içindeki niceliklerin hiçbiri dalga boyuna bağlı olmadığı için Denk.(3.31)'i aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\log \frac{J_{ki}\lambda_{ki}^3}{g_{ki}f_{ik}} = \text{sabit} - \frac{5040}{T}\varepsilon_k \tag{3.32}$$

Eğer kaynağın uyarılma sıcaklığı bilinirse, Denk.(3.32)'den spektral çizgilerin bağıl şiddetlerine göre onlara karşılık gelen bağıl osilatör şiddetleri hesaplanabilir. Spektral çizgilerin bağıl şiddetlerine göre kaynağın uyarılma sıcaklığını da tayin etmek mümkündür.

3.3. Atomların İyonlaşma Derecesi

Sıcaklık yeteri kadar büyük olduğunda atomların sıcaklık iyonlaşması artar. Buna göre sıcaklık arttıkça birim hacimdeki nötral atomların sayısı azalır, iyonların sayısı ise artar.

Termodinamik denge halinde atomların iyonlaşma derecesine bakılırsa, bir kez iyonlaşma için şu denklem yazılabilir (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995):

$$\frac{N_1^+}{N_1}N_e = \frac{g_1^+}{g_1}\frac{2(2\pi m_0 kT)^{3/2}}{h^3}\exp\left(-\frac{\chi_1^+}{kT}\right) \tag{3.33}$$

Burada N_1 ve N_1^+ sırasıyla birim hacimde temel haldeki nötral ve bir kez iyonlaşmış atomların sayısı, N_e birim hacimdeki serbest elektronların sayısı (elektron yoğunluğu), g_1 ve g_1^+ sırasıyla nötral ve bir kez iyonlaşmış atomların temel seviyelerinin istatistik ağırlığı, χ_1^+ ise temel seviyeden bir kez iyonlaşma potansiyelidir.

Rastgele bir uyarılmış seviyeden bir kez iyonlaşma için Denk.(3.33)'e benzer olarak aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\frac{N_1^+}{N_k} N_e = \frac{g_1^+}{g_k} \frac{2(2\pi m_0 kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{\chi_k^+}{kT}\right) \tag{3.34}$$

Benzer olarak *k* seviyesinden (*i*+1) kez iyonlaşma için aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\frac{N_k^{i+1}}{N_k^i} N_e = \frac{g_k^{i+1}}{g_k} \frac{2(2\pi m_0 kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{\chi_k^{i+1}}{kT}\right) \tag{3.35}$$

Gazların kinetik teorisinden bilindiği gibi,

$$\mathrm{P_e} = \mathrm{N_e} k\mathrm{T} \tag{3.36}$$

dir. Burada P_e elektron basıncıdır. Eğer Denk.(3.36)'yı Denk.(3.35)'te yerine koyarsak aşağıdaki formülü elde ederiz:

$$\frac{N_k^{i+1}}{N_k^i} P_e = \frac{g_k^{i+1}}{g_k} \frac{2(2\pi m_0)^{3/2}(kT)^{5/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{\chi_k^{i+1}}{kT}\right) \tag{3.37}$$

Bu denklem, birim hacimdeki atomların toplam sayısı için de doğrudur. Örneğin Denk.(3.37)'ye benzer olarak birim hacimdeki atomların toplam sayısı için (*i* +1) kez iyonlaşma derecesi aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\frac{N^{i+1}}{N^i} P_e = \frac{U^{i+1}(T)}{U^i(T)} \frac{2(2\pi m_0)^{3/2}(kT)^{5/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{\chi_k^{i+1}}{kT}\right) \tag{3.38}$$

Burada $U^i(T)$ ve $U^{i+1}(T)$ sırasıyla *i* ve (*i*+1) kez iyonlaşmış atomlar için hallere göre dağılım fonksiyonlarıdır. Sonuncu ifadeyi logaritmik olarak yazmak daha elverişlidir:

$$\log\frac{\mathrm{N}^{i+1}}{\mathrm{N}^i} = -\frac{5040}{\mathrm{T}}\chi^i + 2.5\log\mathrm{T} - 0.48 + \log\frac{2\mathrm{U}^{i+1}(\mathrm{T})}{\mathrm{U}^i(\mathrm{T})} - \log\mathrm{P_e} \tag{3.39}$$

Termodinamik denge halinde birim hacimde rastgele bir *i* uyarılmış seviyedeki nötral atomların sayısı N_i ile birim hacimdeki atomların toplam sayısı N Boltzman formülü ile ifade edilir:

$$N_i = N \frac{g_i}{U(T)} \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right) \tag{3.40}$$

Diğer taraftan birim hacimdeki atomların toplam sayısı için bir kez iyonlaşma derecesi aşağıdaki formülle verilir:

$$\frac{N^+}{N_i} N_e = \frac{U^+(T)}{U(T)} \frac{2(2\pi m_0 kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{\chi^+}{kT}\right) \tag{3.41}$$

Eğer Denk.(3.41)'i Denk.(3.40)'a bölersek,

$$\frac{N^+}{N_i} N_e = \frac{U^+(T)}{g_i} \frac{2(2\pi m_0 kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{\chi^+ - \varepsilon_i}{kT}\right) \tag{3.42}$$

formülünü elde ederiz. Eğer Denk.(3.36)'yı Denk.(3.42)'de yerine koyarsak aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\frac{N^+ P_e}{N^i} = \frac{U^+(T)}{g_i} \frac{2(2\pi m_0)^{3/2}(kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{\chi^+ - \varepsilon_i}{kT}\right) \tag{3.43}$$

Nihayet Denk.(3.43)'ü logaritmik şekilde ifade edersek,

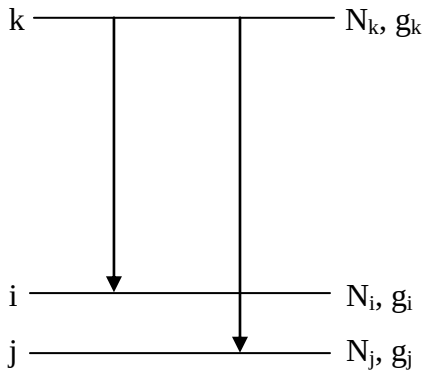
$$\log \frac{N^+}{N_i} = -\frac{5040}{T}(\chi - \varepsilon_i) + 2.5\log T - 0.48 + \log \frac{2U^+(T)}{g} - \log P_e \tag{3.44}$$

formülü elde edilir. Bu ifade birim hacimdeki bir kez iyonlaşmış atomların toplam sayısının *k* uyarılmış seviyedeki nötral atomların sayısına oranını verir.

3.4. Şiddetler Kuralı

1) Yukarı seviyeleri aynı olan dar dubletler (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995):

Şekil 3.8'de gösterildiği gibi yukarı seviyeleri aynı, aşağı seviyeleri ise dar dublet terim olan $k \to i$ ve $k \to j$ geçişlerine karşılık gelen spektral çizgilerin şiddetlerine bakalım (mecburi geçişler dikkate alınmamaktadır).



Şekil 3.8. Yukarı seviyeleri aynı olan dublet

Eğer mecburi geçişleri dikkate almazsak, bu çizgilerin şiddetleri aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$J_{ki} = N_k A_{ki} h\nu_{ki} \qquad (3.45a)$$

$$J_{kj} = N_k A_{kj} h\nu_{kj} \qquad (3.45b)$$

Buradan,

$$\frac{J_{ki}}{J_{kj}} = \frac{A_{ki}}{A_{kj}} \frac{\nu_{ki}}{\nu_{kj}} \qquad (3.46)$$

elde edilir.

Bilindiği gibi $k \to i$ ve $k \to j$ kendiliğinden geçişleri için Einstein katsayıları aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$A_{ki} = \frac{g_i}{g_k} \frac{8\pi^2 e^2 \nu_{ki}^2}{m_0 c^3} f_{ik} \tag{3.47a}$$

$$A_{kj} = \frac{g_j}{g_k} \frac{8\pi^2 e^2 \nu_{kj}^2}{m_0 c^3} f_{jk} \tag{3.47b}$$

Buradan,

$$\frac{A_{ki}}{A_{kj}} = \frac{g_i}{g_j} \frac{f_{ik}}{f_{jk}} \left(\frac{\nu_{ki}}{\nu_{kj}} \right)^2 \tag{3.48}$$

elde edilir. Eğer Denk.(3.48)'i Denk.(3.46)'da yerine koyarsak,

$$\frac{J_{ki}}{J_{kj}} = \frac{g_i}{g_j} \frac{f_{ik}}{f_{jk}} \left(\frac{\nu_{ki}}{\nu_{kj}} \right)^3 \tag{3.49}$$

olur.

Aşağı terim dar dublet terim olduğundan $\nu_{ki} \approx \nu_{kj}$ ve $f_{ki} \approx f_{kj}$ olur.

Buna göre Denk.(3.49)'dan $k \to i$ ve $k \to j$ geçişlerine karşılık gelen spektral çizgilerin şiddetlerinin oranı için,

$$\frac{J_{ki}}{J_{kj}} \approx \frac{g_i}{g_j} \tag{3.50}$$

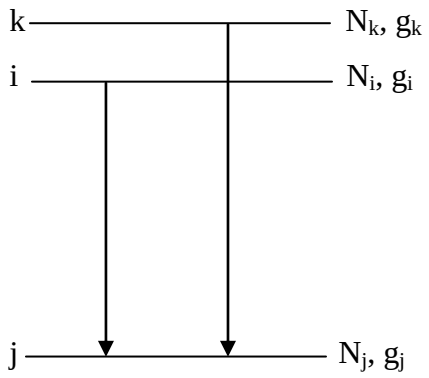
yazılabilir.

Bu ifade, yukarı seviyeleri aynı olan dar dubletler için şiddetler kuralını ifade eder:

Yukarı seviyeleri aynı olan dar dubletlerde bileşenlerin şiddetlerinin oranı, aşağı dublet terimin seviyelerinin istatistik ağırlıklarının oranı gibidir.

2) Aşağı seviyeleri aynı olan dar dubletler (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995):

Şekil 3.9'da gösterildiği gibi aşağı seviyeleri aynı, yukarı seviyeleri ise dar dublet terim olan $i \to j$ ve $k \to j$ geçişlerine karşılık gelen spektral çizgilerin şiddetlerine bakalım (mecburi geçişler dikkate alınmamaktadır).



Şekil 3.9. Aşağı seviyeleri aynı olan dublet

$$J_{kj} = N_k A_{kj} h\nu_{kj} \tag{3.51a}$$

$$J_{ij} = N_k A_{ij} h\nu_{ij} \tag{3.51b}$$

Buradan şiddetlerin oranı için aşağıdaki ifadeyi elde ederiz:

$$\frac{J_{kj}}{J_{ij}} = \frac{N_k}{N_i} \frac{A_{kj}}{A_{ij}} \frac{\nu_{kj}}{\nu_{ij}} \tag{3.52}$$

Açık ki Denk.(3.48)'e benzer olarak,

$$\frac{A_{kj}}{A_{ij}} = \frac{g_i}{g_k} \frac{f_{jk}}{f_{ji}} \left(\frac{\nu_{kj}}{\nu_{ij}} \right)^2 \tag{3.53}$$

yazılabilir.

Buna göre Denk.(3.53)'ü Denk.(3.52)'de yerine koyarsak,

$$\frac{J_{kj}}{J_{ij}}=\frac{N_k}{N_i}\frac{f_{jk}}{f_{ji}}\frac{g_i}{g_k}\left(\frac{\nu_{kj}}{\nu_{ij}}\right)^3 \tag{3.54}$$

elde edilir.

Sonuncu ifadeden görüldüğü gibi aşağı seviyeleri aynı, yukarı seviyeleri farklı olan dar dubletlerin bağıl şiddetleri yukarı seviyelerin uyarılma durumuna bağlıdır ve genel halde onların bağıl şiddetleri hakkında bir şey söylenemez. O halde özel hale (termodinamik denge haline) bakalım. Bu halde Boltzman kanununa göre aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\frac{N_k}{N_i}=\frac{g_i}{g_k}\exp\left(-\frac{E_k-E_i}{kT}\right) \tag{3.55}$$

Buna göre Denk.(3.55)'i Denk.(3.54)'te yerine koyarsak,

$$\frac{J_{kj}}{J_{ij}}=\frac{f_{jk}}{f_{ji}}\left(\frac{\nu_{kj}}{\nu_{ij}}\right)^3\exp\left(-\frac{E_k-E_i}{kT}\right) \tag{3.56}$$

elde edilir.

Dar dubletlerle ilgilendiğimizden $\nu_{kj}\approx\nu_{ij}$ ve $\exp\left(-\frac{E_k-E_i}{kT}\right)\approx 1$ olur. Buna göre Denk.(3.56)'dan,

$$\frac{J_{kj}}{J_{ij}}\approx\frac{f_{jk}}{f_{ji}} \tag{3.57}$$

elde edilir. Diğer taraftan dar dubletler için,

$$\frac{f_{jk}}{f_{ji}}\approx\frac{g_k}{g_i} \tag{4.58}$$

Buna göre Denk.(3.58)'i Denk.(3.57)'de yerine koyarak aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\frac{J_{jk}}{J_{ji}} \approx \frac{g_k}{g_i} \tag{3.59}$$

bulunur.

Bu ifade, aşağı seviyeleri aynı olan dar dubletler için şiddetler kuralını ifade eder:

Aşağı seviyeleri aynı olan dar dubletlerde termodinamik denge halinde bileşenlerin şiddetlerinin oranı, yukarı dublet terimin seviyelerinin istatistik ağırlıklarının oranı gibidir.

Belirtmek gerekir ki, yukarıda elde edilen Denk.(3.50) ve Denk.(3.59) şiddetler kuralı yalnızca dış radyasyon alanının ve kendi kendini absorblamanın olmadığı hallerde geçerlidir. Aslında, kendi kendini absorblama sonucunda spektral çizgilerin şiddetleri değişir ve şiddetler kuralı bozulur. Nihayet yukarı ve aşağı seviyeleri aynı olan dar dubletler için önemli olan bir konuya işaret edelim. Yukarı seviyeleri aynı olan dar dubletler için $\nu_{ki} \approx \nu_{kj}$ olduğundan Denk.(3.46)'dan

$$\frac{J_{ki}}{J_{kj}} \approx \frac{A_{ki}}{A_{kj}} \tag{3.60}$$

elde edilir ve Denk.(3.50) ile Denk.(3.60)'ın karşılaştırılmasından aşağıdaki bağıntı yazılabilir:

$$\frac{A_{ki}}{A_{kj}} \approx \frac{g_i}{g_j} \tag{3.61}$$

Başka bir deyişle: Yukarı seviyesi aynı olan dar dubletler için kendiliğinden geçişlerin Einstein katsayılarının oranı, aşağı dublet terimin seviyelerinin istatistik ağırlıklarının oranı gibidir.

Aşağı seviyesi aynı olan $k \to j$ ve $i \to j$ dar dubleti için $\nu_{kj} \approx \nu_{ij}$ olduğundan Denk.(3.53)'ten,

$$\frac{A_{kj}}{A_{ij}} = \frac{g_i}{g_j} \frac{f_{jk}}{f_{ji}} \tag{3.62}$$

yazılabilir. Eğer Denk.(3.58)'i Denk.(3.62)'de yerine koyarsak,

$$A_{kj} \approx A_{ij} \tag{3.63}$$

olmaktadır.

Bu ifadenin anlamı şudur: Aşağı seviyesi aynı olan dar dubletler için yukarı seviyelerden kendiliğinden geçişlerin Einstein katsayıları aynıdır.

4. ELEKTRİK DİPOL GEÇİŞLER

Bu bölümde özellikle elektrik dipol geçişlerin kuralları açıklanacaktır. Atomların kuantum seviyeleri arasındaki geçişlerde elektrik dipol geçişlerin dışında manyetik dipol, elektrik kuadrupol,… ve hatta ışımasız (çarpışmalı) geçişler de vardır.

4.1. Işımalı Geçişler

Foton soğurarak ya da foton salarak meydana gelen geçişlere **Işımalı geçişler** denir. Klasik elektrodinamik kanunlarına göre ivmeli hareket eden serbest elektrik yük sistemi, sürekli olarak enerji yayınlar. Buna göre sistemin birim zamanda bütün yönlere yayınladığı enerji (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995),

$$\varepsilon_f = \frac{2}{3c^2}\left|\frac{d^2D}{dt^2}\right| + \frac{2}{3c^3}\left|\frac{d^2\mu}{dt^2}\right| + \frac{1}{180c^5}\left|\frac{d^3Q}{dt^3}\right| + \ldots \qquad (4.1)$$

şeklinde verilmektedir. Burada, D sistemin elektrik dipol momenti, μ manyetik momenti ve Q kuadrupol momentidir. Buna göre sistemin yayınladığı enerji birbirinden bağımsız üç terimden ibarettir.

4.2. Elektrik Dipol Yayınlaması

Dipol yayınlaması sistemin elektrik dipol momentinin zamana göre değişimi ile ilgilidir. Kütlesi elektronun kütlesine göre çok büyük olan pozitif çekirdeği durgun kabul edersek ve negatif yüklü elektronları ise çekirdek etrafında kapalı yörüngelerde hareket ettiğini düşünürsek, bu sisteme doğrusal harmonik osilatör gibi bakılabilir. Bu durumda osilatörün birim zamanda yayınladığı enerji (4.1) denkleminden (Kuli-Zade ve Tektunalı, 1995),

$$\varepsilon_f = \frac{2}{3c^2}\left|\frac{d^2D}{dt^2}\right| \qquad (4.2)$$

şeklinde verilir.

Atomlar elektronik enerji seviyelerine sahiptir. Atomların bir dış alanla etkileşmesi elektronik enerji seviyelerindeki elektronların atomun diğer enerji seviyeleri arasında geçiş yapmasına sebep olur. Einstein'a göre atomdaki soğurma ve salma süreçleri ani süreçler olup birbirlerinden bağımsız olarak gerçekleşirler.

Atomdaki soğurma ve salma olayları elektron geçişleriyle karakterize edilir. Elektron geçişleri, göz önüne alınan iki seviye arasında geçiş hızları, geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri, uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri ve çizgi şiddeti gibi fiziksel niceliklerle tanımlanırlar. Bu fiziksel niceliklerin belirlenebilmesi için söz konusu iki seviyeyi doğru tanımlayan dalga fonksiyonlarına ihtiyaç duyulur. Eğer bir atom herhangi bir anda tamamen bir tek enerji kuantum seviyesinde değil de, çeşitli seviyeler arasında geçiş durumunda ise atomun enerji seviyelerindeki elektronların dalga fonksiyonları zamana bağlı olup (Aygün ve Zengin, 1995),

$$\Psi_{\gamma JM}(r,\theta,\varphi,t) = \sum_{j=1}^{N} a_{ji}\psi_{\gamma JM}(r,\theta,\varphi)T_0 e^{i\omega_j t} \tag{4.3}$$

olarak verilir. Bu dalga fonksiyonu

$$\Psi(r,\theta,\varphi,t) = \sum_{j} a_j(t)\psi_{\gamma JM}(r,\theta,\varphi) \tag{4.4}$$

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

$$a_j^*(t)\, a_j(t) = \left|a_j(t)\right|^2 \tag{4.5}$$

ile belirlidir. Burada söz konusu geçişler, pertürbe olmamış seviyeler arasında düşünülmektedir. Bu geçişlere atom üzerine uygulanan dış elektromanyetik ışıma $\varepsilon(rf)$ radyasyon alanı sebep olmaktadır.

Farklı kuantum sayılarıyla tanımlanan herhangi i ve j seviyeleri arasındaki bir geçişi göz önüne alalım. Kuantum mekaniksel teoriye göre böyle bir geçişin olasılığı (Aygün ve Zengin, 1995),

$$P_{j\to i} = \int_{\substack{\text{tüm}\\ \text{enerjiler}}} \left|a_i(t)\right|^2 \rho(E_i)\, dE_i \tag{4.6}$$

olarak verilir. Denk.(4.6)'daki $\rho(E_i)$, i seviyesinin birim enerji aralığındaki yoğunluğudur.

Bir atomun elektrik dipol momenti,

$$\vec{D} = -e\vec{r} \tag{4.7}$$

olarak verilir. Bu dipolün ε (rf) elektrik alanı ile etkileşme enerjisi,

$$H_{(0)}^{(1)} = \Delta E = -D.\varepsilon_{rf}(t) = er.\varepsilon_1.\cos\omega t \tag{4.8}$$

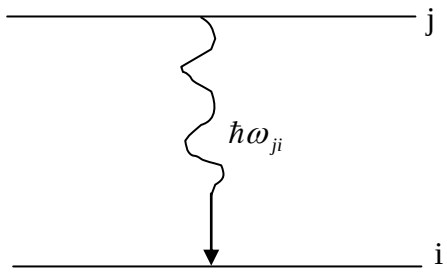
şeklinde verilir. Buradaki ε_1, ε (rf) radyasyon alanının maksimum değeridir. Bu ifadeyi geçiş olasılığı formülünde kullanırsak

$$P_{i\to j} = \frac{e^2\varepsilon_1^2}{\hbar^2}\left|\langle r\rangle_{ji}\right|^2 f(\omega_{ji}, t) \tag{4.9}$$

elde edilir. Buradaki ω_{ji}, söz konusu seviyeler arasındaki geçiş frekansı olup,

$$\omega_{ji} = \frac{(E_i - E_j)}{\hbar} \tag{4.10}$$

şeklinde tanımlıdır. Söz konusu uyarmalı geçişler Şekil 4.1'de gösterilmiştir.



Şekil 4.1. Harmonik uyarmalı bir elektrik dipol geçiş

Dikkat edilirse, Denk.(4.9) ile verilen geçiş olasılığı, uyarılan elektrik dipol momentin ilgili seviyeler arasındaki beklenen değerine bağlıdır. Bu nedenle dipol geçişler için seçim kuralları, dipolün ilgili seviyeler arasındaki beklenen değerini sıfır yapmayan değerlere göre belirlenebilir (Aygün ve Zengin, 1995).

Herhangi iki i ve j seviyeleri için matris elemanı,

$$\langle D \rangle_{ji} = \langle j | D | i \rangle = 0 \qquad (4.11a)$$

ise o seviyeler arasında elektrik dipol geçişi söz konusu olamaz. Çünkü olasılık sıfır çıkar. Bu tür geçişler elektrik dipole yasaktır. Böyle geçişlere **yasaklanmış geçişler** ya da **izinsiz geçişler** denir.

Bu iki seviye için

$$\langle D \rangle_{ji} = \langle j | D | i \rangle \neq 0 \qquad (4.11b)$$

ise o seviyeler arasında elektrik dipol geçiş olabilir (olasılık daima ≥ 0 olan bir kavramdır). Böyle geçişlere de elektrik dipole **yasak olmayan geçişler** ya da **izinli geçişler** denir. Bu yasaklama ya da izinli olmanın nereden kaynaklandığı, dipol momentin beklenen değerinin çözümünden anlaşılabilir.

Kuantum mekaniğine göre *nlm* seviyesinden $n'l'm'$ seviyesine geçiş için dipolün beklenen değeri, söz konusu iki seviyeyi tanımlayan dalga fonksiyonlarına bağlı olarak (Aygün ve Zengin, 1995),

$$\langle D \rangle_{n\ell m \to n'\ell'm'} = e \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \psi^*_{n'\ell'm'}(r,\theta,\varphi)\, r\, \psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)\, dV \qquad (4.12)$$

ile belirlidir. Burada pertürbe olmamış seviyeler arasında geçiş ya da geçişler söz konusudur. Yukarıda verilen integralin değeri ise fonksiyonların paritesine bağlıdır.

Dalga fonksiyonları genel olarak $\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi)$ şeklinde yazılır. $\vec{r} \to -\vec{r}$ yansıması için bu ifade $\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)(-1)^l Y(\theta,\varphi)$ şeklinde yazılır. Yani $\psi^*_{n'l'm'}$ ve ψ_{nlm} fonksiyonlarının paritelerini sırasıyla $(-1)^{l'}$ ve $(-1)^l$ belirler. Ayrıca integral önündeki r nin tek pariteli bir fonksiyon olduğu açıktır. Sonuçta integraldeki çarpım fonksiyonu tek pariteli ya da çift pariteli olabilir.

Matematikten bilinen genel kural (Aygün ve Zengin, 1995),

$$\int (\text{tek pariteli}) = 0 \qquad (4.13a)$$

ve

$$\int (\text{çift pariteli}) \neq 0 \qquad (4.13b)$$

olduğunu göz önüne alınarak Denk.(4.12)'nin ancak $\text{tek} \leftrightarrow \text{çift}$ geçişlerinde sıfırdan farklı olacağı (**izinli**), $\text{tek} \leftrightarrow \text{tek}$ ve $\text{çift} \leftrightarrow \text{çift}$ geçişleri için ise sıfır olacağı (**yasaklı**) sonucuna varılır (Laporte Kuralı).

Demek ki elektrik dipol geçişler ancak farklı pariteli seviyeler arasında olabilmektedir. Yani $\psi^{*}_{n'\ell'm'}$ ile $\psi_{n\ell m}$ farklı pariteli fonksiyonlar olmak durumundadır. O halde atomlarda, elektrik dipol geçiş olabilmesi için, ilgili iki seviyenin yörünge açısal kuantum sayıları (pariteyi belirleyen kuantum sayıları) farkı,

$\Delta l = l - l' = \pm 1, \pm 3, \pm \ldots$ (tek sayı)

$$\Delta l = \pm 1 \qquad (4.14)$$

alınarak elektrik dipol seçim kuralı elde edilmiş olur. Ancak tüm kural bundan ibaret değildir. Yörünge kuantum sayısının dış alan (manyetik veya elektrik) üzerindeki izdüşümü olan *m* deki değişim de belirlenebilir (Aygün ve Zengin, 1995).

l ve *m* deki değişimler, Hidrojen dalga fonksiyonlarını **BRA** ve **KET**'ler ile temsil edilerek dik koordinat sisteminde incelenip belirlenebilir. Bunun için küresel koordinatlardan faydalanarak,

$x = r\sin\theta\cos\varphi$, $y = r\sin\theta\sin\varphi$ ve $z = r\cos\theta$

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

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \tag{4.15}$$

olduğundan bir $i \rightarrow j$ geçişi için,

$$|\langle j|r|i\rangle|^2 = |\langle j|x|i\rangle|^2 + |\langle j|y|i\rangle|^2 + |\langle j|z|i\rangle|^2 \tag{4.16a}$$

veya

$$|\langle j|er|i\rangle|^2 = |\langle j|ex|i\rangle|^2 + |\langle j|ey|i\rangle|^2 + |\langle j|ez|i\rangle|^2 \tag{4.16b}$$

olmaktadır. Bu da dipol momentin bileşenleri cinsinden yazılacağı anlamına gelir:

$$|\langle j|D|i\rangle|^2 = |\langle j|D_x|i\rangle|^2 + |\langle j|D_y|i\rangle|^2 + |\langle j|D_z|i\rangle|^2 \tag{4.17}$$

Uyarıcı elektrik alan (pertürbasyon alanı) $\varepsilon(t)$ ise, kutuplanmamış bir $\varepsilon(t)$ alanı için Pertürbasyon Hamiltoniyeni,

$$H^{(1)} = -\vec{\varepsilon}(t)\vec{D} = -(\varepsilon_x(t)D_x + \varepsilon_y(t)D_y + \varepsilon_z(t)D_z) \tag{4.18}$$

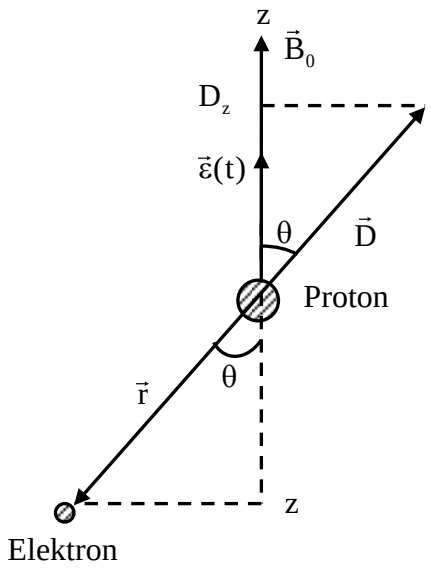
olarak verilir.

Ancak uygulanan pertürbasyon alanı Şekil 4.2'de gösterildiği gibi polarize olmuş bir alan ise (yani $\varepsilon(t) = \varepsilon_z(t)$, $\varepsilon_x = 0$, $\varepsilon_y = 0$ ise) Denk.(4.18)'de ilk iki terim sıfır olup, $D_z = -ez$ olduğundan Hamiltoniyen,

$$H^{(1)} = -\varepsilon_z(t)D_z = +ez\varepsilon(t) \tag{4.19}$$

şeklinde verilir.

Bir elektron ve bir protondan oluşan sistem bir dipol meydana getirir. Bu dipolü Şekil 4.2'deki gibi gösterebiliriz (Aygün ve Zengin, 1995).



Şekil 4.2. Hidrojen atomu dipol momenti $\vec{D}$, dış manyetik alan $\vec{B}_0$ ve z-yönünde polarize olmuş uyarıcı olan $\vec{\varepsilon}(t)$ 'nin yönelmeleri

Bu açıklamalardan da görüldüğü gibi z-yönünde polarize olmuş alan için Denk.(4.17)'de sadece son terim kalmakta, diğer iki terimin değeri sıfır olmaktadır. O halde konu D_z nin matris elemanının bulunmasına indirgenmiş olmaktadır. D_z nin matris elemanı,

$$\left\langle n'l'm' \left| ez \right| nlm \right\rangle = \int_{\substack{\text{tüm} \\ \text{uzay}}} \psi_{n'l'm'} ez \psi_{nlm} dV \tag{4.20}$$

olup, bu denklemde $z = r\cos\theta$ ve $dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$ kullanıldığında,

$$\left\langle ez \right\rangle_{nlm} = \int_0^{\infty} R^* r^3 R dr \int_0^{\pi} \Theta^* \cos\theta \Theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\varphi \tag{4.21}$$

olarak verilir. Burada,

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \tag{4.22a}$$

$$\Phi^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im'\varphi} \tag{4.22b}$$

olduklarından, Denk.(4.21)'in φ ye bağlı kısmı için,

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi}d\varphi = \delta_{m'm} = \begin{cases} 1, & m' = m \\ 0, & m' \neq m \end{cases} \tag{4.23}$$

bulunur. Bu bağıntıdan yararlanarak Denk.(4.21)'de r ve θ ya bağlı kısımlar ne olursa olsun, $\vec{\varepsilon}(t)$ kutuplanma vektörü z-yönünde olduğu zaman denklemin sıfırdan farklı olabilmesi için $m' = m$ olmalıdır. Yani,

$$\Delta m = 0 (\pi - polarizasyonu) \tag{4.24}$$

olmaktadır (Aygün ve Zengin, 1995).

Burada söz edilmesi gereken diğer bir konu da matris elemanlarının değerinin, pertürbasyon alanının yönelmesine olan bağlılığıdır. Elektrik alan $\varepsilon(rf)$ polarize (yönelme) değilse pertürbasyonun Denk.(4.17)'de gösterilen her üç bileşeni için matris elemanları hesaplanmalıdır (Aygün ve Zengin, 1995). Şimdi de D_z gibi D_x bileşenini inceleyelim:

$$D_x = -ex = -e(r\sin\theta\cos\varphi) \tag{4.25}$$

olup, son denklemde ve $dV=r^2 dr\sin\theta d\theta d\varphi$ ifadelerinde, r ve θ ya bağımlılık ve normalizasyon ihmal edilerek,

$$\left\langle n'l'm' \middle| D_x \middle| nlm \right\rangle = \int_0^{2\pi} e^{-im'\varphi}\cos\varphi\, e^{im\varphi} d\varphi \tag{4.26}$$

olup buradaki cosφ yerine,

$$\cos\varphi = \frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \tag{4.27}$$

matematiksel ifadesi Denk.(4.26)'da tekrar yazıldığında,

$$\langle D_x \rangle = \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \left[e^{i(m-m'+1)\varphi} + e^{i(m-m'-1)\varphi} \right] d\varphi \qquad (4.28)$$

sonucu elde edilir. Bu integralde,

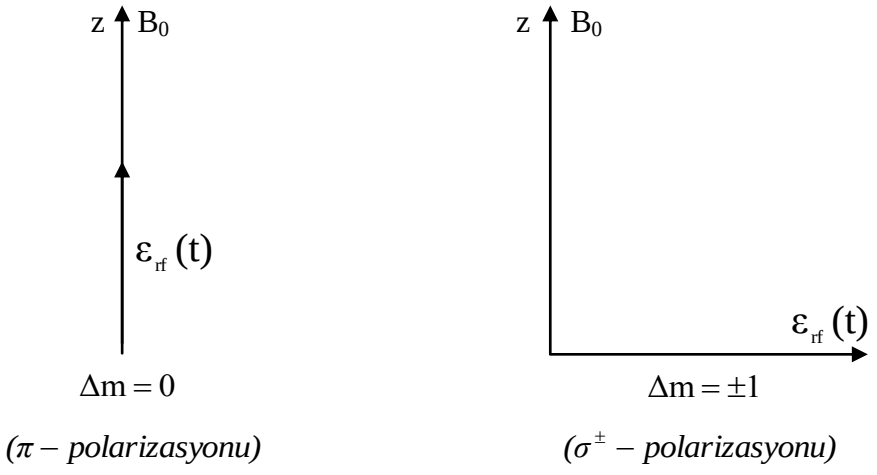
$$(m - m' \pm 1) = 0 \qquad (4.29)$$

ise integralin sonucu sıfırdan farklıdır. Bu koşullar altında integralin sonucu 2π olur.

Böylece $\langle D_x \rangle$ matris elemanının sıfırdan farklı olabilmesi için, Denk.(4.29)'dan $m - m' = \pm 1$ olmalıdır. Yani,

$$\Delta m = \pm 1 (\sigma^{\pm} - polarizasyonu) \qquad (4.30)$$

olmaktadır. D_x matris elemanı için yapılan bu irdeleme D_y matris elemanı için de yapılacak olursa benzer sonuç bulunur.



Şekil 4.3. Stark seviyeleri arasında elektrik dipol geçişlerinde uyarıcı elektrik alanın polarizasyonları

Şekil 4.3'te dikkat edilirse elektrik dipolün $\sigma^{\pm}$ geçişlerinde $\varepsilon(rf)$ elektrik alanı $\vec{B}_o$ dış manyetik alana dik yönde, π geçişlerinde ise aynı yönde polarize olmaktadır.

Buna göre polarize olmamış bir elektrik ε(rf) pertürbasyonu için elektrik dipol seçim kuralları özetlenecek olursa şu şekilde yazılabilir:

$$\begin{bmatrix} \Delta l = \pm 1 \\ \Delta m = 0\,(\pi - polarizasyonu) \\ \Delta m = \pm 1(\sigma^{\pm} - polarizasyonu) \end{bmatrix}$$

Sonuç olarak elektrik dipol 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 kuadrupol geçiş, manyetik oktupole geçiş,… olabilir. Elektrik dipol geçişler 10^{-8} s gibi birim zamanda oluşurken diğer geçişler daha uzun zamanda oluşur. Bu geçişlerde kuantum sistemi dışarıya bir ışınım salar veya dışarıdan ışınım soğurur (Aygün ve Zengin, 1995).

4.2.1. Elektrik Dipol Geçiş Olasılığı

Geçiş olasılığı, verilen bir atomun herhangi bir üst seviyesinde bulunan elektronun başka bir alt seviyeye geçişini karakterize eden geçiş hızı ile ilgili bir nicelik olarak tanımlanmaktadır ve birimi s^{-1} (Hz) dir.

J enerji seviyeli g_J=2J+1 durumlarının herhangi birine bir geçiş yapan J' durumundaki bir atomun birim zamanda toplam geçiş olasılığı, S çizgi şiddetine bağlı olarak (Cowan, 1981),

$$A_{JJ'} = \frac{64\pi^4 e^2 {a_0}^2 (E_{J'} - E_J)^3}{3h(2J'+1)} S_{JJ'} = \frac{2{,}0261.10^{-6} (E_{J'} - E_J)^3}{(2J'+1)} S_{JJ'} \qquad (4.31)$$

şeklinde yazılır. Burada $(E_{J'} - E_J)$ geçiş enerjisidir ve birimi Kayser (cm^{-1}) dir.

Denklemlerden de görüldüğü gibi soğurmaya ve salmaya karşılık gelen geçiş olasılıklarının değerleri aynı olup, her ikisi de aynı işaretlidir ve pozitiftir.

4.2.2. Elektrik Dipol Osilatör Şiddeti

Kuantum mekaniğinde J kuantum halinde olan atom çok sayıda başka kuantum hallerine geçebilir. Bu geçişlerin her biri bir osilatör şiddeti olarak karakterize edilir. Osilatör şiddeti, verilen bir spektroskopik geçiş için soğurmaya karşılık gelen atom başına elektronların sayısı olarak da tanımlanabilir. Osilatör şiddeti aynı zamanda geçiş şiddetini ifade eden birimsiz bir niceliktir.

$J \rightarrow J'$ geçişi için osilatör şiddeti, S çizgi şiddetine bağlı olarak (Cowan, 1981),

$$f_{JJ'} = \frac{8\pi^2 mca_0{}^2 (E_{J'} - E_J)}{3h(2J+1)} S_{JJ'} = \frac{(E_{J'} - E_J)}{3h(2J+1)} S_{JJ'} \tag{4.32}$$

şeklinde verilir ve buradaki g_J=2J+1, alt seviyenin istatistiksel ağırlığıdır.

$J' \rightarrow J$ geçişi için osilatör şiddeti ise,

$$f_{J'J} = -\frac{8\pi^2 mca_0{}^2 \sigma}{3h(2J'+1)} S = \frac{(E_J - E_{J'})}{3h(2J'+1)} S_{J'J} \tag{4.33}$$

biçiminde verilmektedir ve burada yine $(E_J - E_{J'})$ geçiş enerjisidir. Denk.(4.32) ile verilen ve soğurmaya karşılık gelen osilatör şiddetinin değeri pozitif, Denk.(4.33) ile verilen ve salmaya karşılık gelen osilatör şiddetinin değeri ise negatiftir.

4.2.3. Uyarılmış Seviyelerin Yaşam Süresi

Bir atomun uyarılmış durumu (Cowan, 1981),

$$-\left(\frac{dN_j}{dt}\right) = N_j \sum_{(i<j)} A_{ji} \tag{4.34}$$

ile verilen bozunma sebebiyle ayırt edici bir yaşam süresine sahip olacaktır. Burada N_j, j uyarılmış durumdaki nüfus yoğunluğudur ve A_{ji}'ler, j seviyesinden kaynaklanan tüm

ışımalı geçişler için Einstein kendiliğinden yayınlama katsayılarıdır. Oranın zamanla azalması sebebiyle negatif işaret ortaya çıkar. Bu bağıntının integrali alınarak,

$$N_j(t) = N_j(0).e^{-t/\tau_J} \tag{4.35}$$

ifadesi elde edilir. Burada $N_j(t)$, herhangi bir t anındaki uyarılmış durum nüfus yoğunluğu, $N_j(0)$ ise t=0 daki başlangıç uyarılmış durum nüfus yoğunluğudur. τ_J ise,

$$\tau_J = \frac{1}{\sum_{(i<j)} A_{ji}} \tag{4.36}$$

şeklinde tanımlanan yaşam süresidir ve birimi saniyedir. Güçlü atomik geçişlerde A_{ji}, 10^8 s^{-1} ile 10^9 s^{-1} dir ve böylece yaşam süreleri 1 ns ile 10 ns arasındadır. Yaşam süreleri çarpışmalar veya etkilemeli yayınlama ile kısaltılabilir.

Görüldüğü gibi geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süresi gibi fiziksel parametrelerin belirlenmesinde temel problem S çizgi şiddetinin belirlenmesidir. Bu aşamada S çizgi şiddetinin nasıl belirlendiğini inceleyelim.

4.2.4. Elektrik Dipol Çizgi Şiddeti

Çizgi şiddeti S, hesaplamalarda göz önüne alınan atomik ya da iyonik sistemde geçerli olan çiftlenim durumuna, geçiş yapan elektron sayısına ve elektronun geçiş tipine göre tanımlanır. S çizgi şiddeti niceliği, mümkün olan tüm geçişleri içeren spektrum çizgisinin toplam şiddetinin bir ölçüsüdür.

Elektrik dipol geçişler için S çizgi şiddeti (Cowan, 1981),

$$S_{JJ'} = S_{J'J} = \sum_{MM'} \left| \left\langle \gamma JM \left| P^{(1)} \right| \gamma' J' M' \right\rangle \right|^2 = \left| \left\langle \gamma J \left\| P^{(1)} \right\| \gamma' J' \right\rangle \right|^2 \tag{4.37}$$

biçiminde verilmektedir.

LS çiftleniminde (kuplajında) iki uyarılmış seviye arasındaki tek elektron geçişi için S çizgi şiddeti,

$$
\begin{aligned}
S_{LS} &\equiv \left\langle \left[\left(\ldots \alpha_1 L_1, l_2 \right) L \left(\ldots S_1 s_2 \right) S \right] J \left\| \mathbf{r}_N^{(1)} \right\| \left[\left(\ldots \alpha_1' L_1', l_2' \right) L' \left(\ldots S_1' s_2 \right) S' \right] J' \right\rangle \\
&= \delta_{S_1 S_1'} \delta_{ss'} (-1)^{L+S+J'+1} \left[j, j' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \left\langle \left(\ldots \alpha_1 L_1, l_2 \right) L \left\| \mathbf{r}_N^{(1)} \right\| \left(\ldots \alpha_1' L_1', l_2' \right) L' \right\rangle \qquad (4.38) \\
&= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_1' L_1' S_1'} \delta_{ss'} (-1)^{S+J'+L_1+l_2'} \left[J, J', L, L' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l_2' \end{Bmatrix} P_{l_i l_f}^{(1)}
\end{aligned}
$$

şeklinde yazılır. Burada, son ifadedeki süslü parantez içerisinde verilen terim, iki ya da daha fazla açısal momentumun çiftleniminde kullanılan Racah katsayısı veya Wigner'in 6-J katsayısı olarak bilinir. İfadedeki $P_{l_i l_f}^{(1)}$ niceliği ise, elektrik dipol geçiş için radyal geçiş integrali (veya geçiş matris elemanı) olup,

$$P_{l_i l_f}^{(1)} = (-1)^{l_i l_f} P_{l_i l_f}^{(1)} = -P_{l_f l_i}^{(1)} \qquad (4.39)$$

olmak üzere radyal geçiş integrali (Cowan, 1981),

$$P_{l_i l_f}^{(k)} = l_> \left\langle n_i, l_i \left| r^k \right| n_f, l_f \right\rangle = l_> \int_0^\infty r^{k+2} R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) \, dr \qquad (4.40)$$

olarak yazılır. Buradaki $l_>$ ifadesi, l_i ve l_f niceliklerinden büyük olanını ifade etmektedir.

Elektrik dipol geçişler için Denk.(4.40)'ta k=1 alınır:

$$P_{l_i l_f}^{(1)} = \int_0^\infty r R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) r^2 \, dr = \int_0^\infty R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) r^3 \, dr \qquad (4.41)$$

bulunur.

Bu çalışmada elektrik dipol geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin hesaplanmasında gerekli olan radyal geçiş integralinin belirlenmesinde radyal dalga fonksiyonları, En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori (WBEPMT) den elde edilmiştir. Bu teoriye göre en zayıf bağlı elektron için tek elektron Schrödinger denkleminin radyal çözümü şu şekilde verilmektedir (Zheng, 1987; Çelik ve Ateş, 2007):

$$R_{nl}(r)=\left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2}\left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!}\Gamma(n^*+l^*+1)\right]^{-1/2} x \exp\left(-\frac{Z^*r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n-l-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^*r}{n^*}\right) \tag{4.42}$$

Denk.(4.42)'deki ilk terim normalizasyon katsayısı olup,

$$\left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2}\left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!}\Gamma(n^*+l^*+1)\right]^{-1/2} \tag{4.43}$$

ile verilir.

Denk.(4.42)'deki ikinci terim ise radyal dalga fonksiyonu olup,

$$\exp\left(-\frac{Z^*r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n-l-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^*r}{n^*}\right) \tag{4.44}$$

ile verilir. Burada $n^* = n + d$ etkin baş kuantum sayısı ve $l^* = l + d$ ise etkin yörünge açısal kuantum sayısı olmak üzere, d kuantum kusuru olarak bilinir ve negatif değerlidir.

5. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

5.1. Araştırma Sonuçları

Bu çalışmada LS çiftleniminin baskın olduğu açık kabuklu sistemlere örnek teşkil eden Cl I (atomik Klor), Cl II (bir kez iyonlaşmış Klor) ve Cl III (iki kez iyonlaşmış Klor) için geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri hesaplanmıştır.

Herhangi iki seviye arasındaki elektrik dipol geçiş olasılığı,

$$A_{JJ'} = \frac{2{,}0261.10^{-6}\,(E_{J'} - E_J)^3}{(2J'+1)}\,S_{JJ'} \tag{5.1}$$

biçiminde tanımlanır. Osilatör şiddeti ise,

$$f_{JJ'} = \frac{8\pi^2\, m\, c\, a_0{}^2\,(E_{J'} - E_J)}{3h\,(2J+1)} S_{JJ'} = \frac{(E_{J'} - E_J)}{3h\,(2J+1)} S_{JJ'} \tag{5.2}$$

biçiminde tanımlanır. Uyarılmış seviyelerin yaşam süresi ise,

$$\tau_J = \frac{1}{\sum_{(i<j)} A_{ji}} \tag{5.3}$$

şeklinde geçiş olasılıklarının toplamının tersi şeklinde verilir.

Bu aşamaya kadar yapılan tüm hesaplamalarda,

$$P^{(1)}_{l_i l_f} = \left\langle R_{nl} \middle| Q(r)^{(1)} \middle| R_{n'l'} \right\rangle = l_> \left\langle n_i, l_i \middle| r^1 \middle| n_f, l_f \right\rangle = l_> \int_0^\infty r^3\, R_{n_i l_i}(r)\, R_{n_f l_f}(r)\, dr \tag{5.4}$$

elektrik dipol radyal geçiş integralinin belirlenmesinde WBEPM teori kullanılmıştır.

Elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri ile ilgili bilgiler bölüm 4.2.1., 4.2.2. ve 4.2.3.'te ayrıntılı olarak verilmiştir.

Atomik ve iyonik yapıdaki hesaplamalar için Fortran 77 programlama dilinde real*8 aritmetiğinde (çift hassasiyet) bilgisayar programı kullanılmıştır. WBEPM teoride, radyal geçiş integrallerinin hesaplanması için gerekli olan n^*, l^* ve Z^* parametrelerinin belirlenmesinde enerji değerleri için NIST'ten (National Institute of Standards and Technology) alınan deneysel enerji değerleri kullanılmıştır (Kramida ve ark., 2012). Seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri Nümerik Coulomb Yaklaşımı (Lindgrad ve Nielsen, 1977) kullanılmıştır. Bu çalışmadan elde edilen sonuçlar Çizelge 5.1-5.8'de verilmiştir.

Çizelge 5.1. Klor atomunda (Cl I) hesaplanan geçiş olasılığı sonuçları ($x10^8$ s^{-1})

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^5$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P ^{2}P	1.5	1.5	1347.24	**4.3**		4.19
[Mg] $3p^5$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P ^{2}P	0.5	0.5	1351.66	**3.67**		3.23
[Mg] $3p^5$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P ^{2}P	Mlt.	Mlt.	1348.71	**5.1**		5.0
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	2.5	9123.65	**0.219**	0.238	0.17
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	1.5	8950.52	**0.15**	0.178	0.12
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	3.5	8378.24	**0.322**	0.341	0.28
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	1.5	7982.79	**0.018**		0.016
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	2.5	9587.43	**0.068**	0.0404	0.066
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	1.5	9396.44	**0.032**	0.043	0.031
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	0.5	9194.25	**0.256**	0.25	0.21
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	2.5	8588.34	**0.216**	0.205	0.19
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	1.5	8335.6	**0.178**	0.152	0.16
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	0.5	8196.67	**0.0579**	0.036	0.05
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}S	1.5	1.5	7549.15	**0.14**	0.0998	0.12
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	1.5	9705.1	**0.092**	0.0584	0.091
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	0.5	9489.57	**0.0396**	0.0267	0.039
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	1.5	8577.6	**0.154**	0.152	0.12
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	0.5	8430.57	**0.325**	0.3	0.24
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}S	0.5	1.5	7747.1	**0.0666**	0.0621	0.063
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	Mlt.	Mlt.	9272.98	**0.298**	0.272	0.24
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	Mlt.	Mlt.	8415.14	**0.318**	0.307	0.28
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	1.5	2.5	9594.85	**0.248**	0.172	0.24
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	1.5	1.5	9291.41	**0.0451**	0.0877	0.044
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}S	1.5	0.5	8552.79	**0.284**	0.278	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	0.5	1.5	9878.68	**0.197**	0.121	0.19
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	0.5	1.5	9454.69	**0.0443**	0.0608	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	Mlt.	Mlt.	9666.38	**0.242**	0.184	0.24
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	2.5	4439.73	**0.0153**		0.014
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	3.5	4390.98	**0.017**		0.014
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	1.5	4281.67	**0.0018**		0.0016
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	1.5	4381.13	**0.0151**		0.014
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	2.5	4364.49	**0.0058**		0.0068
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{4}P ^{4}S	1.5	1.5	4324.55	**0.0118**		0.011
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	1.5	4447.07	**0.0033**		0.0023
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{4}P ^{4}S	Mlt.	Mlt.	4285.87	**0.027**		0.02
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{2}P ^{2}D	1.5	1.5	4655.34	**0.0049**		0.0049
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $5p^1$	^{2}P ^{2}S	1.5	0.5	4692.84	**0.017**		0.011

Çizelge 5.2. Klor atomunda (Cl I) hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	Lavin ve ark. (1997)	Hibbert ve ark. (2007)	Jha ve ark. (2006)
[Mg] $3p^5$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P ^{2}P	1.5	1.5	1347.24	**0.117**	0.114		0.1685
[Mg] $3p^5$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P ^{2}P	1.5	0.5	1335.73	**0.0252**	0.0249		0.035
[Mg] $3p^5$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P ^{2}D	1.5	1.5	1188.75	**0.0031**			0.005
[Mg] $3p^5$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P ^{2}P	0.5	1.5	1363.45	**0.0468**	0.0474	0.0474	0.0605
[Mg] $3p^5$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P ^{2}P	0.5	0.5	1351.66	**0.101**	0.1017	0.1051	0.1326
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	2.5	9123.65	**0.222**	0.22	0.2053	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	1.5	8950.52	**0.12**	0.1636	0.1412	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	3.5	8378.24	**0.553**	0.5392	0.5278	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	2.5	8214.3	**0.103**	0.0911	0.0477	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	1.5	7982.79	**0.0116**	0.0102		
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}S	2.5	1.5	7258.62	**0.118**	0.10		
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	2.5	9578.43	**0.141**	0.14	0.0955	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	1.5	9396.44	**0.0506**	0.042	0.0629	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	0.5	9194.25	**0.162**	0.1773	0.1578	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	2.5	8588.34	**0.358**	0.3818	0.3763	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	1.5	8335.6	**0.185**	0.1799	0.1799	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	0.5	8196.67	**0.0292**	0.0256	0.0189	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}S	1.5	1.5	7549.15	**0.119**	0.1169	0.1168	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	1.5	9705.1	**0.262**	0.26	0.2441	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	0.5	9489.57	**0.0535**	0.052	0.0401	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	1.5	8577.6	**0.339**	0.354	0.3517	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	0.5	8430.57	**0.291**	0.25	0.2959	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}S	0.5	1.5	7747.1	**0.12**	0.12	0.1424	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	1.5	2.5	9594.85	**0.514**	0.5	0.4632	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	1.5	1.5	9291.41	**0.0584**	0.057	0.052	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	1.5	0.5	9075.66	**0.0592**	0.0523	0.0523	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	1.5	1.5	8915.37	**0.094**	0.097	0.097	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}S	1.5	0.5	8552.79	**0.122**	0.12		
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	0.5	1.5	9878.68	**0.577**	0.56	0.5195	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	0.5	0.5	9635.15	**0.235**	0.2096		
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	0.5	1.5	9454.69	**0.119**	0.1053	0.3781	
[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}S	0.5	0.5	9047.92	**0.122**	0.12	0.2153	
[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	2.5	1.5	9809.75	**0.116**		0.1363	
[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}F	2.5	2.5	9070.82	**0.0284**		0.0276	
[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	1.5	9811.3	**0.0399**		0.039	
[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	0.5	9664.65	**0.0867**		0.0956	
[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^4$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}F	1.5	2.5	9072.15	**0.579**		0.5276	

Çizelge 5.3. Bir kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl II) hesaplanan geçiş olasılığı sonuçları ($x10^8$ s^{-1})

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}D	2	3	707.46	**2.07E+01**	2.81E+01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}S	2	1	663.07	**5.79E+01**	5.89E+01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}D	1	2	712.68	**1.57E+01**	1.96E+01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}S	1	1	666.15	**3.43E+01**	3.16E+01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}D	0	1	715.59	**1.17E+01**	1.37E+01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}S	0	1	667.48	**1.14E+01**	1.04E+01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}D	Mlt.	Mlt.	710.36	**2.1E+01**	2.65E+01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}S	Mlt.	Mlt.	664.58	**1.04E+01**	1.01E+01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	1	1	5100.72	**6.55E-01**	6.47E-01	6.4E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	1	2	5099.74	**1.31E-01**		1.3E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	1	2	4919.1	**7.77E-01**		7.5E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	1	2	4333.99	**1.06E-02**	1.34E-02	1.0E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	1	1	4305.25	**2.66E-01**	3.49E-01	2.5E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	1	0	4292.91	**1.07E+00**	1.38E+00	1.0E+00
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	2	1	5105.48	**2.18E-01**	2.15E-01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	2	2	5104.49	**7.17E-01**	7.24E-01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	2	3	5069.54	**9.8E-02**		9.7E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	2	2	4923.53	**1.44E-01**		1.4E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	2	3	4906.15	**8.25E-01**		8.1E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	2	2	4337.43	**1.59E-01**	2.05E-01	1.5E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	2	1	4308.63	**7.97E-01**		7.6E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	3	2	5114.78	**1.35E-01**	1.45E-01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	3	3	5079.68	**7.82E-01**		7.7E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	3	2	4933.1	**4.1E-03**		4.1E-03
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	3	3	4915.65	**1.03E-01**		1.0E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	3	4	4898.15	**1.17E+00**	1.01E+00	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	3	2	4344.85	**1.35E+00**	1.15E+00	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	Mlt.	Mlt.	4906.32	**1.16E+00**	1.01E+00	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	Mlt.	Mlt.	4325.95	**1.06E+00**	1.37E+00	1.0E+00
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{1}D ^{1}F	Mlt.	Mlt.	5393.62	**1.10E+00**		1.0E+00
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P ^{3}S	0	1	4900.28	**1.22E-01**		1.1E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P ^{3}S	1	1	4908.55	**3.66E-01**		3.2E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	1	1	4780.25	**4.5E-01**	4.1E-01	4.3E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	1	2	4769.98	**8.08E-01**	8.11E-01	7.7E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	2	1	4797.04	**2.33E-02**	2.38E-02	2.8E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	2	2	4786.7	**2.69E-01**	2.27E-01	2.6E-01

Çizelge 5.3. Bir kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl II) hesaplanan geçiş olasılığı sonuçları ($x10^8$ s^{-1})

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	2	3	4782.66	**1.07E+00**	1.03E+00	1.0E+00
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	Mlt.	Mlt.	4778.56	**1.1E+00**	1.03E+00	1.0E+00
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $4s^1$	^{3}P ^{3}S	2	1	888.03	**1.43E+01**	1.46E+01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	^{3}P ^{3}D	2	1	789.1	**3.75E-01**	3.54E-01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $4s^1$	^{3}P ^{3}S	1	1	893.55	**8.42E+00**	8.39E+00	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $4s^1$	^{3}P ^{3}S	0	1	895.95	**2.79E+00**	2.75E+00	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $4s^1$	^{3}P ^{3}S	Mlt.	Mlt.	890.74	**2.61E+01**	2.57E+01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	^{1}D ^{1}D	Mlt.	Mlt.	851.69	**2.75E+01**	2.07E+01	
[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	2	2	3669.01	**1.41E-02**	1.38E-02	
[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	2	3	3659.35	**2.18E-02**	2.65E-02	
[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	3	3	3660.81	**1.01E-02**	1.37E-02	
[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	1	2	3674.81	**2.06E-02**	2.61E-02	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	2	2	4925.62	**4.04E-02**	4.83E-02	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	3	2	4971.36	**2.65E-01**	2.03E-01	1.3E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}F	3	2	4799.55	**1.46E-02**	1.94E-02	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	4	3	4996.87	**2.72E-01**	2.18E-01	1.3E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}F	4	3	4838.05	**1.04E-02**	1.71E-02	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	Mlt.	Mlt.	4970.19	**2.99E-01**	2.53E-01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{1}G ^{1}F	4	3	7567.67	**1.67E-01**	1.11E-01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{1}G ^{1}F	Mlt.	Mlt.	7567.67	**1.66E-01**	1.11E-01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	4	3	6761.25	**1.93E-01**	1.48E-01	1.3E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	3	2	6852.06	**1.85E-01**	1.4E-01	1.2E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	3	3	6843.77	**1.65E-02**	1.21E-02	1.1E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	0	1	7380.01	**1.73E-03**	1.8E-03	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	1	2	7491.01	**2.3E-03**	2.21E-03	

Çizelge 5.4. Bir kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl II) hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}D	2	1	710.52	**2.65E-03**	2.7E-03	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}D	2	3	707.46	**2.18E-01**	2.9E-01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}S	2	1	663.07	**2.29E-01**	2.27E-01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}S	1	1	666.15	**2.28E-01**	2.05E-01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}S	0	1	667.48	**2.28E-01**	2.03E-01	
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}P ^{3}S	Mlt.	Mlt.	664.58	**2.28E-01**	2.17E-01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	1	1	5100.72	**2.55E-01**	2.41E-01	2.5E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	1	2	5099.74	**8.51E-02**		8.4E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	1	2	4919.1	**4.7E-01**	5.26E-01	4.5E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	1	2	4333.99	**4.97E-03**	5.85E-01	4.7E-03
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	1	0	4292.91	**9.81E-02**	1.18E-01	9.2E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	2	2	5104.49	**2.37E-01**	2.7E-01	2.3E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	2	3	5069.54	**5.29E-02**		5.2E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	2	2	4923.53	**5.22E-02**		5.1E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	2	3	4906.15	**4.17E-01**	4.64E-01	4.1E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	2	2	4337.43	**4.48E-02**		4.2E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	2	1	4308.63	**1.33E-01**	1.6E-01	1.3E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	3	2	5114.78	**3.79E-02**	3.89E-02	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	3	3	5079.68	**3.03E-01**	3.37E-01	3.0E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	3	2	4933.1	**1.07E-03**		1.1E-03
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	3	3	4915.65	**3.73E-02**		3.6E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	3	4	4898.15	**4.31E-01**	4.45E-01	4.1E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	3	2	4344.85	**1.8E-01**	2.15E-01	1.7E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}D	Mlt.	Mlt.	5092.13	**3.39E-01**	3.44E-01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	Mlt.	Mlt.	4906.32	**4.68E-01**	4.83E-01	4.5E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}P	Mlt.	Mlt.	4325.95	**1.79E-01**	2.14E-01	1.7E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{1}D ^{1}F	Mlt.	Mlt.	5393.62	**4.97E-01**	4.64E-01	
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}S	0	1	4900.28	**1.32E-01**		1.2E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}S	1	1	4908.55	**1.32E-01**		1.2E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	1	1	4780.25	**1.54E-01**	1.34E-01	1.5E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	1	2	4769.98	**4.59E-01**	4.4E-01	4.4E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}S	2	1	4926.25	**1.04E-01**		1.1E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	2	1	4797.04	**4.82E-03**	4.68E-03	
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	2	2	4786.7	**7.18E-02**	7.44E-02	
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	2	3	4782.66	**4.01E-01**	4.75E-01	4.8E-01
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}S	Mlt.	Mlt.	4917.44	**1.04E-01**		1.1E-01

Çizelge 5.4. Bir kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl II) hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $4s^1$	^{3}P ^{3}S	2	1	888.03	**1.01E-01**	1.05E-01
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	^{3}P ^{3}D	2	1	789.1	**2.1E-03**	2.01E-01
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	^{3}P ^{3}D	2	3	788.74	**1.77E-01**	1.26E-01
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $4s^1$	^{3}P ^{3}S	1	1	893.55	**1.01E-01**	1.02E-01
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	^{3}P ^{3}D	1	2	793.34	**1.57E-01**	1.03E-01
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $4s^1$	^{3}P ^{3}S	0	1	895.95	**1.01E-01**	1.01E-01
[Mg] $3p^4$	[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $4s^1$	^{3}P ^{3}S	Mlt.	Mlt.	890.74	**1.04E-01**	1.04E-01
[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	2	2	3669.01	**2.85E-03**	2.83E-03
[Mg] $3p^3$ (^{4}S) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D ^{3}F	3	3	3660.81	**2.03E-03**	2.80E-03
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	2	2	4925.62	**1.47E-02**	1.88E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	3	3	4938.2	**1.05E-02**	1.79E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}F	4	4	4821.1	**3.52E-02**	3.34E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	Mlt.	Mlt.	4970.19	**7.91E-02**	7.17E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F ^{3}F	Mlt.	Mlt.	4793.02	**3.74E-02**	3.43E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}F ^{3}D	2	2	6932.4	**1.65E-02**	1.36E-02
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	0	1	7380.01	**4.23E-03**	4.96E-03
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	1	1	7516.36	**7.98E-04**	7.11E-04
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	1	2	7491.01	**3.23E-03**	3.48E-03
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	2	3	7828.71	**2.76E-03**	2.12E-03
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $3d^1$	[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}P ^{3}D	Mlt.	Mlt.	7665.09	**3.3E-03**	3.17E-03

Çizelge 5.5. Bir kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl II) hesaplanan uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçları (s)

Son Seviye	Terim	j	Enerji (cm^{-1})	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}D	1	140741.8	**4.76E-10**	4.11E-10
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}D	2	141011.58	**4.79E-10**	3.88E-10
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}D	3	141351.14	**4.83E-10**	3.53E-10
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}D	Mlt.	140773.37	**4.76E-10**	4.11E-10
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}S	1	150813.12	**9.65E-11**	9.88E-11
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{3}S	Mlt.	150470.4	**9.66E-11**	9.88E-11
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $3d^1$	^{1}D	2	158270.07	**1.14E-09**	1.87E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D	1	146331.76	**6.42E-09**	7.62E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D	2	146335.55	**6.44E-09**	7.49E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P	2	149800.12	**3.58E-09**	4.58E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P	1	149954.18	**3.56E-09**	4.602E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}P	0	150020.9	**3.55E-09**	4.607E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F	2	147055.61	**7.25E-09**	7.67E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}D	3	146470.64	**6.44E-09**	7.35E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F	3	147127.57	**7.22E-09**	7.66E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{3}F	4	147200.24	**7.21E-09**	7.64E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4p^1$	^{1}F	3	147607.37	**9.5E-09**	1.09E-08
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}D	1	158725.56	**6.56E-09**	6.92E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}D	2	158770.58	**6.5E-09**	6.857E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{3}D	3	158788.25	**6.48E-09**	6.858E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}P) $4p^1$	^{1}P	1	159575.91	**8.61E-09**	7.97E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	^{3}D	1	126726.7	**2.42E-09**	1.07E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	^{3}D	2	126744.97	**2.45E-09**	1.06E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	^{3}D	3	126784.37	**2.49E-09**	1.04E-09
[Mg] $3p^3$ (^{2}D) $4s^1$	^{1}D	2	129066.96	**3.6E-10**	4.78E-10

Çizelge 5.6. İki kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl III) hesaplanan geçiş olasılığı sonuçları ($x10^8$ s^{-1})

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	0.5	3658.03	**1.37E+00**	1.36E+00	1.4E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	1.5	3623.76	**7.06E-01**	7.79E-01	7.0E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	0.5	3301.86	**3.73E-01**	2.11E-01	3.7E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	1.5	3290.69	**9.43E-01**	7.59E-01	9.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}S	0.5	1.5	3105.32	**4.46E-01**	3.15E-01	4.4E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	0.5	3706.53	**2.65E-01**	2.12E-01	2.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	1.5	3671.35	**7.55E-01**	7.54E-01	8.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	2.5	3613.91	**1.2E+00**	1.23E+00	1.2E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	0.5	3441.33	**1.81E+00**	1.31E+00	1.8E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	1.5	3329.89	**2.92E-01**		2.9E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	2.5	3284.3	**6.85E-01**		6.8E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}S	1.5	1.5	3140.21	**8.68E-01**	8.51E-01	8.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	1.5	3742.63	**7.72E-02**		7.7E-02
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	2.5	3682.96	**4.9E-01**	3.48E-01	4.8E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	3.5	3602.97	**1.74E+00**	1.58E+00	1.7E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	1.5	3388.42	**9.43E-01**		9.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	2.5	3341.22	**1.53E+00**	1.06E+00	1.5E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}S	2.5	1.5	3192.21	**1.25E+00**	2.06E+00	1.2E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	Mlt.	Mlt.	3628.91	**1.7E+00**	1.58E+00	1.7E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	Mlt.	Mlt.	3330.82	**2.2E+00**	1.46E+00	2.2E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}S	Mlt.	Mlt.	3160.03	**2.56E+00**	3.26E+00	2.5E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	0.5	1.5	3749.83	**1.36E+00**	1.03E+00	1.3E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	0.5	0.5	3260.13	**1.64E+00**	1.01E+00	1.6E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	0.5	1.5	3245.31	**4.15E-01**		4.1E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	1.5	1.5	3851.81	**2.52E-01**	1.92E-01	2.5E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	1.5	2.5	3721.39	**1.68E+00**	1.17E+00	1.7E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	1.5	0.5	3336.94	**7.73E-01**		7.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	1.5	1.5	3321.42	**1.96E+00**	1.23E+00	1.9E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}D	Mlt.	Mlt.	3739.29	**1.65E+00**	1.19E+00	1.6E+00
[Mg] $3p^2$ (^{2}P) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P ^{2}P	Mlt.	Mlt.	3300.74	**2.39E+00**	1.53E+00	2.3E+00
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}F	2.5	2.5	3554.28	**1.25E-01**		1.2E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	2.5	2.5	3394.36	**1.96E+00**	1.98E+00	1.9E+00
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	2.5	1.5	3387.12	**2.11E-01**	3.01E-01	2.1E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	2.5	1.5	2966.38	**2.61E+00**	1.59E+00	2.7E+00
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}F	1.5	2.5	3561.62	**1.74E+00**		1.7E+00
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	1.5	2.5	3401.05	**1.4E-01**		1.4E-01

Çizelge 5.6. İki kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl III) hesaplanan geçiş olasılığı sonuçları ($x10^8$ s^{-1})

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	1.5	1.5	3393.79	**1.89E+00**	1.06E+00	1.9E+00
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	0.5	2992.63	**2.84E+00**		3.0E+00
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	1.5	2971.49	**2.89E-01**		3.0E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}F	Mlt.	Mlt.	3543.83	**1.89E+00**	1.33E+00	1.8E+00
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	Mlt.	Mlt.	3394.13	**2.1E+00**	1.75E+00	2.1E+00
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	Mlt.	Mlt.	2975.42	**2.88E+00**		3.0E+00
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	0.5	623.77	**7.46E+01**	7.55E+01	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	1.5	621.03	**5.28E+00**	5.56E+00	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}D ^{2}P	Mlt.	Mlt.	622.09	**7.37E+01**	7.71E+01	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P ^{2}P	Mlt.	Mlt.	671.3	**1.06E+01**	1.2E+01	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	0.5	1.5	2601.87	**4.97E+00**		4.6E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	0.5	0.5	2469.93	**9.91E-01**		9.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	0.5	1.5	2469.14	**4.96E-01**		4.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	0.5	1.5	2380.11	**1.18E-02**		1.1E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	0.5	0.5	2373.34	**1.19E-01**		1.1E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	1.5	1.5	2619.49	**1.68E+00**		1.8E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	1.5	2.5	2604.24	**5.3E+00**		5.0E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	0.5	2485.8	**9.8E-01**		9.1E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	1.5	2485	**7.84E-01**		7.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	2.5	2479.72	**4.6E-01**		4.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	2.5	2409.84	**4.63E-03**		4.3E-03
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	1.5	2394.85	**7.49E-02**		7.0E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	0.5	2387.99	**1.18E-01**		1.1E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	2.5	1.5	2649.54	**1.36E-01**		1.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	2.5	2.5	2633.93	**1.69E+00**		1.6E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	2.5	3.5	2610.19	**5.18E+00**		5.7E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	1.5	2512.02	**6.69E-01**		6.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	2.5	2506.63	**1.11E+00**		1.0E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	3.5	2482.48	**2.82E-01**		2.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	2.5	2435.25	**3.42E-02**		3.8E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	1.5	2419.94	**1.21E-01**		1.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	3.5	2.5	2676.42	**6.29E-02**		6.0E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	3.5	3.5	2651.92	**9.71E-01**		9.2E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	3.5	4.5	2617.68	**6.03E+00**		6.6E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	3.5	2.5	2545.08	**3.5E-01**		3.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	3.5	3.5	2520.19	**1.39E+00**		1.5E+00

Çizelge 5.6. İki kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl III) hesaplanan geçiş olasılığı sonuçları ($x10^8$ s^{-1})

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	3.5	2.5	2471.52	**1.49E-01**		1.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	Mlt.	Mlt.	2614.59	**6.03E+00**		6.6E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	Mlt.	Mlt.	2503.43	**1.93E+00**		1.8E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2431.43	**2.28E-01**		2.1E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	0.5	2663.96	**4.23E+00**		4.0E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	1.5	2663.03	**2.12E+00**		2.0E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	0.5	2671.27	**8.4E-01**		8.0E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	1.5	2670.34	**2.69E+00**		2.6E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	2.5	2664.25	**3.56E+00**		3.4E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	1.5	2700.41	**2.44E-01**		2.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	2.5	2694.17	**1.47E+00**		1.4E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	3.5	2666.29	**4.4E+00**		4.8E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	Mlt.	Mlt.	2668.16	**4.39E+00**		4.8E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	2.5	2710.8	**3.75E+00**		3.5E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	1.5	2691.85	**3.22E+00**		3.5E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	0.5	2683.19	**3.24E+00**		3.5E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}S ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2699.84	**3.78E+00**		3.5E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{2}P ^{2}D	0.5	1.5	2532.5	**4.93E+00**		4.4E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{2}P ^{2}D	1.5	2.5	2533.21	**5.92E+00**		5.3E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{2}P ^{2}D	Mlt.	Mlt.	2533.52	**5.92E+00**		5.3E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	2.5	1.5	1832.04	**2.19E+00**	2.95E+00	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	2.5	3.5	1797.93	**1.41E-02**	1.51E-02	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	3.5	2.5	1828.34	**3.58E+00**	3.01E+00	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	4.5	3.5	1822.42	**3.91E+00**	3.26E+00	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	1.5	2020.83	**1.56E-01**	1.69E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	2.5	2003.31	**2.11E-01**	2.18E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	3.5	1979.41	**6.51E-02**	6.16E-02	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	1.5	1912.86	**1.48E+00**	1.64E+00	1.0E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	2.5	1897.73	**3.61E-01**		3.0E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	0.5	2032.75	**2.21E-01**	2.24E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	1.5	2022.13	**1.42E-01**	1.53E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	2.5	2004.58	**1.05E-01**	1.0E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	0.5	1917.8	**1.17E+00**	1.42E+00	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	2.5	1898.87	**4.00E-02**		3.3E-02
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	0.5	0.5	2035.5	**1.73E-01**	1.91E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	0.5	1.5	2024.85	**1.11E-01**	9.81E-02	

Çizelge 5.6. İki kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl III) hesaplanan geçiş olasılığı sonuçları ($x10^8$ s^{-1})

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	0.5	0.5	1920.24	**1.78E+00**	1.51E+00	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	0.5	1.5	1916.46	**1.78E-01**	1.57E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	3.5	2.5	2007.54	**1.28E-01**	1.11E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	3.5	2.5	1901.53	**2.87E+00**	2.25E+00	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	Mlt.	Mlt.	2002.22	**4.5E-01**	4.39E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	Mlt.	Mlt.	1908.01	**2.36E+00**	2.83E+00	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	1.5	4579.39	**3.77E-04**	3.8E-04	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	2.5	3992.5	**1.69E-01**		1.4E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	0.5	4105.24	**1.88E-01**		1.6E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	0.5	4125.34	**3.73E-02**		3.1E-02
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	1.5	4107.92	**1.03E-01**	1.15E-01	
[Mg] $3p^2$ (P3) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	Mlt.	Mlt.	4045.71	**1.32E-01**		1.9E-01
[Mg] $3p^2$ (D1) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	2.5	1.5	3684.34	**2.0E-01**	2.84E-01	3.1E-01
[Mg] $3p^2$ (D1) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	1.5	3726.76	**4.38E-02**	4.0E-02	3.4E-02
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	0.5	0.5	2278.99	**1.73E+00**		1.8E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	0.5	1.5	2256.32	**1.81E-01**		1.7E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	0.5	2292.5	**1.7E+00**		1.8E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	1.5	2269.56	**1.14E+00**		1.1E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	1.5	2292.08	**2.18E+00**		2.2E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	2.5	2253.61	**6.69E-01**		6.1E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	3.5	2.5	2284.64	**2.85E+00**		2.7E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2280.91	**3.54E+00**		3.4E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	0.5	2443.18	**3.24E-01**		3.5E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	1.5	2417.14	**8.47E-01**		8.8E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	0.5	2449.33	**1.61E+00**		1.8E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	1.5	2423.16	**2.69E-01**		2.8E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	2.5	2380.21	**6.52E-01**		6.2E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	2.5	2404.06	**1.48E+00**		1.4E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2416.86	**2.05E+00**		2.1E+00
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	0.5	2563.22	**7.12E-01**		7.0E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	1.5	2534.58	**6.27E-01**		6.9E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	2.5	2487.62	**6.13E-01**		6.8E-01
[Mg] $3p^2$ (P3) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}S ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2515.52	**6.22E-01**		6.9E-01

Çizelge 5.7. İki kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl III) hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,3d^1$	$^4S\ ^4P$	1.5	2.5	557.12	**1.37E+00**	1.11E+00	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,3d^1$	$^4S\ ^4P$	1.5	0.5	556.23	**4.55E-01**	4.08E-01	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,3d^1$	$^4S\ ^4P$	Mlt.	Mlt.	556.8	**2.73E+00**	2.3E+00	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,3d^1$	$^2D\ ^2D$	1.5	2.5	606.1	**1.98E-02**	1.64E-02	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2\,(^1D)\,3d^1$	$^2D\ ^2D$	2.5	2.5	565.48	**4.58E-01**	4.95E-01	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2\,(^1D)\,3d^1$	$^2D\ ^2D$	2.5	1.5	564.5	**3.66E-02**	3.93E-02	
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4D$	0.5	0.5	3658.03	**2.75E-01**	2.66E-01	2.8E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4D$	0.5	1.5	3623.76	**2.78E-01**	2.99E-01	2.8E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4P$	0.5	0.5	3301.86	**6.09E-02**		6.0E-02
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4P$	0.5	1.5	3290.69	**3.06E-01**	2.42E-01	3.0E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4S$	0.5	1.5	3105.32	**1.29E-01**		1.3E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4D$	1.5	0.5	3706.53	**2.73E-02**	2.13E-02	2.7E-02
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4D$	1.5	1.5	3671.35	**1.76E-01**	1.48E-01	1.7E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4D$	1.5	2.5	3613.91	**3.53E-01**	3.56E-01	3.5E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4P$	1.5	0.5	3441.33	**1.51E-01**	1.07E01	1.5E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4P$	1.5	1.5	3329.89	**4.86E-02**		4.8E-02
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4P$	1.5	2.5	3284.3	**1.66E-01**		1.6E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4S$	1.5	1.5	3140.21	**1.28E-01**	1.24E-01	1.3E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4D$	2.5	1.5	3742.63	**1.09E-02**		1.1E-02
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4D$	2.5	2.5	3682.96	**9.96E-02**		9.8E-02
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4D$	2.5	3.5	3602.97	**4.53E-01**	4.04E-01	4.4E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4P$	2.5	1.5	3388.42	**1.08E-01**		1.1E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4P$	2.5	2.5	3341.22	**2.56E-01**	1.74E-01	2.5E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4S$	2.5	1.5	3192.21	**1.27E-01**	2.08E-01	1.2E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4D$	Mlt.	Mlt.	3628.91	**5.59E-01**	5.09E-01	5.6E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4P$	Mlt.	Mlt.	3330.82	**3.65E-01**	2.39E-01	3.7E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^4P\ ^4S$	Mlt.	Mlt.	3160.03	**1.28E-01**	1.61E-01	1.2E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^2P\ ^2D$	0.5	1.5	3749.83	**5.71E-01**	4.28E-01	5.5E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^2P\ ^2P$	0.5	0.5	3260.13	**2.61E-01**	1.58E-01	2.5E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^2P\ ^2P$	0.5	1.5	3245.31	**1.31E-01**		1.3E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^2P\ ^2D$	1.5	1.5	3851.81	**5.61E-02**		5.6E-02
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^2P\ ^2D$	1.5	2.5	3721.39	**5.23E-01**		5.3E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^2P\ ^2P$	1.5	0.5	3336.94	**6.45E-02**		6.3E-02
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^2P\ ^2P$	1.5	1.5	3321.42	**3.24E-01**		3.1E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^2P\ ^2D$	Mlt.	Mlt.	3739.29	**5.77E-01**		5.6E-01
[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4s^1$	[Mg] $3p^2\,(^3P)\,4p^1$	$^2P\ ^2P$	Mlt.	Mlt.	3300.74	**3.9E-01**		3.8E-01

Çizelge 5.7. İki kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl III) hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}F	2.5	2.5	3554.28	**2.36E-02**		2.3E-02
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	2.5	2.5	3394.36	**3.39E-01**	3.32E-01	3.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	2.5	1.5	3387.12	**2.42E-02**	3.35E-02	2.4E-02
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	2.5	1.5	2966.38	**2.29E-01**	1.35E-01	2.4E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}F	1.5	2.5	3561.62	**4.96E-01**		4.8E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	1.5	2.5	3401.05	**3.63E-02**		3.6E-02
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	1.5	1.5	3393.79	**3.27E-01**		3.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	0.5	2992.63	**1.91E-01**		2.0E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	1.5	2971.49	**4.68E-02**	5.28E-02	4.0E-02
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}F	Mlt.	Mlt.	3543.83	**4.97E-01**		4.7E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}D	Mlt.	Mlt.	3394.13	**3.63E-01**	2.92E-01	3.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	Mlt.	Mlt.	2975.42	**2.29E-01**	1.24E-01	2.4E-01
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	0.5	623.77	**2.18E-01**	2.23E-01	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	1.5	621.03	**3.05E-02**	3.26E-02	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}D ^{2}P	2.5	1.5	621.28	**2.54E-01**	2.83E-01	
[Mg] $3p^3$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}D ^{2}P	Mlt.	Mlt.	622.09	**2.57E-01**	2.72E-01	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	0.5	1.5	2380.11	**2.01E-03**		1.9E-03
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	1.5	1.5	2619.49	**2.02E-01**		1.9E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	0.5	2485.8	**4.54E-02**		4.2E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	1.5	2485	**6.12E-02**		6.8E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	2.5	2479.72	**5.35E-02**		5.9E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	2.5	2409.84	**5.04E-04**		5.6E-04
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	1.5	2394.85	**6.44E-03**		6.0E-03
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	0.5	2387.99	**4.18E-03**		4.7E-03
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	2.5	1.5	2649.54	**9.54E-03**		9.1E-03
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	2.5	2.5	2633.93	**1.76E-01**		1.7E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	2.5	3.5	2610.19	**7.05E-01**		7.8E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	1.5	2512.02	**4.22E-02**		4.0E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	3.5	2482.48	**3.47E-02**		3.2E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	2.5	2435.25	**3.64E-03**		3.4E-03
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	1.5	2419.94	**7.07E-03**		7.6E-03
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}F	3.5	2.5	2676.42	**4.42E-03**		4.8E-03
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	3.5	2.5	2545.08	**2.55E-02**		2.4E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	3.5	3.5	2520.19	**1.32E-01**		1.4E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	3.5	2.5	2471.52	**1.02E-02**		1.1E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}D	Mlt.	Mlt.	2503.43	**1.82E-01**		1.7E-01

Çizelge 5.7. İki kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl III) hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}D ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2431.43	**1.01E-02**	1254.45	1.1E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	0.5	0.5	2663.96	**4.5E-01**		4.3E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	0.5	2671.27	**4.49E-02**		4.3E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	1.5	2670.34	**2.88E-01**		2.8E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	1.5	2.5	2664.25	**5.68E-01**		5.4E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	1.5	2700.41	**1.78E-02**		1.7E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	2.5	2694.17	**1.41E-01**		1.5E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}P ^{4}D	2.5	3.5	2666.29	**6.26E-01**		6.8E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	2.5	2710.8	**5.25E-01**		5.8E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	1.5	2691.85	**3.5E-01**		3.8E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	0.5	2683.19	**1.75E-01**		1.9E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4d^1$	^{4}S ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2699.84	**1.05E+00**		1.1E+00
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	1.5	2.5	1810.21	**1.94E-03**	2.31E-03	1.3E-03
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	2.5	1.5	1832.04	**1.18E-01**	1.02E-01	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	2.5	2.5	1817.62	**3.82E-02**	3.02E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	2.5	3.5	1797.93	**1.48E-03**	1.01E-03	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	3.5	2.5	1828.34	**1.35E-01**	1.16E-01	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	3.5	3.5	1808.41	**1.38E-02**	1.68E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	4.5	3.5	1822.42	**1.56E-01**	1.34E-01	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}F ^{4}D	Mlt.	Mlt.	1825.64	**1.57E-01**	1.33E-01	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	2.5	2003.31	**1.27E-02**	1.36E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	2.5	3.5	1979.41	**5.1E-03**	5.01E-03	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	2.5	1897.73	**3.5E-02**	3.02E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	1.5	2.5	2004.58	**9.48E-03**	9.37E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	0.5	1917.8	**2.66E-02**		2.3E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	2.5	1898.87	**5.83E-03**	5.83E-03	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	0.5	0.5	2035.5	**1.37E-02**	1.22E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	0.5	1.5	2024.85	**1.37E-02**	1.24E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	3.5	2.5	2007.54	**5.79E-03**	5.24E-03	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	3.5	3.5	1983.54	**2.3E-02**	2.45E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D ^{4}D	Mlt.	Mlt.	2002.22	**2.71E-02**	2.73E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	1.5	4060.08	**1.72E-02**		1.4E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	0.5	4105.24	**2.38E-02**		2.0E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	2.5	4019.49	**2.59E-02**		2.1E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	0.5	4125.34	**1.04E-02**	1.7E-02	
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}D ^{2}P	1.5	1.5	3689.08	**1.84E-02**		1.6E-02

Çizelge 5.7. İki kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl III) hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları

İlk Seviye	Son Seviye	Terimler	j1	j2	Dalga boyu (Å)	Bu Çalışma WBEPMT	NIST Kramida ve ark. (2012)
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	0.5	0.5	2278.99	**1.35E-01**	1.4E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	0.5	1.5	2256.32	**2.76E-02**	2.6E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	1.5	1.5	2269.56	**8.79E-02**	8.5E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	1.5	2292.08	**1.14E-01**	1.2E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	2.5	2.5	2253.61	**4.04E-02**	4.6E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	3.5	2.5	2284.64	**1.67E-01**	1.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}D ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2280.91	**1.66E-01**	1.6E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	0.5	1.5	2417.14	**1.48E-01**	1.5E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	1.5	1.5	2423.16	**2.37E-02**	2.5E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	1.5	2447.89	**5.27E-02**	5.6E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	2.5	2.5	2404.06	**1.28E-01**	1.2E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}P ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2416.86	**1.8E-01**	1.8E-01
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	0.5	2563.22	**3.51E-02**	3.4E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}S ^{4}P	1.5	1.5	2534.58	**6.04E-02**	6.6E-02
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $5s^1$	^{4}S ^{4}P	Mlt.	Mlt.	2515.52	**2.18E-01**	2.0E-01

Çizelge 5.8. İki kez iyonlaşmış Klor atomunda (Cl III) hesaplanan uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçları (s)

Son Seviye	Terim	j	Enerji (cm^{-1})	Bu Çalışma WBEPMT	MCHF Fischer ve ark. (2004)
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	^{4}P	2.5	179493.96	**5.11E-11**	6.16E-11
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	^{4}P	1.5	179662.15	**5.1E-11**	5.77E-11
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $3d^1$	^{4}P	0.5	179780.84	**5.09E-11**	5.58E-11
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $3d^1$	^{2}P	1.5	185837.68	**1.01E-10**	9.67E-11
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $3d^1$	^{2}P	0.5	186219.67	**1.0E-10**	9.51E-11
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $3d^1$	^{2}D	2.5	194958.79	**7.66E-11**	7.66E-11
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $3d^1$	^{2}D	1.5	195267.76	**7.48E-11**	7.33E-11
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D	1.5	201330.92	**1.54E-09**	1.74E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P	1.5	204124.04	**1.77E-09**	1.67E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}S	1.5	205938.06	**2.74E-09**	1.49E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D	2.5	201763.86	**1.53E-09**	1.73E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}P	2.5	204540.95	**1.75E-09**	1.69E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D	3.5	202366.62	**1.52E-09**	1.72E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{4}D	Mlt.	201849.23	**1.53E-09**	1.75E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P	1.5	209182.8	**2.75E-09**	2.12E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4p^1$	^{2}P	Mlt.	209136.1	**2.72E-09**	2.19E-09
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D	2.5	217850.2	**3.39E-09**	2.02E-09
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}D	1.5	217913.1	**3.39E-09**	2.27E-09
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}P	1.5	222100.7	**2.01E-09**	1.74E-09
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4p^1$	^{2}P	0.5	221862.9	**2.22E-09**	2.14E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{4}P	0.5	173735.28	**2.9E-09**	1.58E-09
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{4}P	1.5	174093.02	**2.93E-10**	1.46E-10
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{4}P	2.5	174611.76	**2.97E-10**	1.28E-10
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P	0.5	178369.14	**1.24E-10**	1.15E-10
[Mg] $3p^2$ (^{3}P) $4s^1$	^{2}P	1.5	179075.2	**1.26E-10**	1.09E-10
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	^{2}D	2.5	188389.53	**2.38E-10**	1.37E-10
[Mg] $3p^2$ (^{1}D) $4s^1$	^{2}D	1.5	188447.52	**2.39E-10**	1.1E-10

5.2. Tartışma

Geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde ilk iş; söz konusu seviyeler arasındaki çizgi şiddeti ifadesinin belirlenmesidir. Çizgi şiddeti, özellikle göz önüne alınan atomda ya da iyonda baskın olan çiftlenime göre hesaplanır. Bu çalışmada LS çiftleniminin baskın olduğu Klor atomu (Cl I) ve bazı iyonları (Cl II ve Cl III) göz önüne alınmıştır. Elde edilen geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri sonuçları Çizelge 5.1-5.8'de verilmiştir. Hesaplama sonuçları literatürden elde edilebilen değerlerle karşılaştırılmış ve iyi bir uyum gözlemlenmiştir.

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori yarı deneysel bir yöntem olmakla birlikte, hesaplama süreci zor olmayan ve çok zaman almayan bir yöntemdir. Çizgi şiddetini hesaplamak için ise radyal geçiş integrallerinin belirlenmesi gerekir. Radyal geçiş integrallerinin belirlenmesi için etkin yük Z^*, etkin baş kuantum sayısı n^* ve etkin yörünge açısal kuantum sayısı l^* parametrelerini belirlemek yeterlidir. Bu parametreler deneysel enerjiler ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri kullanılarak belirlenir. Bu nedenle bu yöntemle elde edilen sonuçların hassasiyeti, deneysel enerji değerlerine ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerine bağlıdır. Yarı deneysel yöntemlerle uyarılmış ve yüksek uyarılmış seviyeleri çalışmak saf teorik yöntemler kadar karmaşık değildir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori çok sayıda elektrona sahip açık kabuklu sistemlerde deneysel enerji değerlerini ve yarıçaplara ait beklenen değerleri kullanarak geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi spektroskopik parametreleri diğer yöntemlere göre daha basit bir hesaplama süreci içerisinde belirleyebilmektedir. Hesaplamalarda daha duyarlı enerji değerleri ve daha duyarlı seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin kullanılması en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriyle elde edilen sonuçların duyarlılığını arttırması beklenmektedir.

Çizelge 5.1'de Klor atomu (Cl I) için hesaplanan geçiş olasılığı sonuçları MCHF yöntemi ve NIST'teki değerlerle karşılaştırılmış ve literatürle uyumlu oldukları görülmüştür. Çizelge 5.2'de Klor atomu (Cl I) için hesaplanan osilatör şiddeti sonuçları ile Lavin ve ark., Hibbert ve ark. ve Jha ve ark.'nın elde ettikleri sonuçlarla uyumlu oldukları görülmüştür. Çizelge 5.3-5.4-5.5'te bir kez iyonlaşmış Klor (Cl II) için hesaplanan geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süresi

sonuçlarının MCHF yöntemi ve NIST'teki değerlerle uyumlu oldukları görülmüştür. Çizelge 5.6-5.7-5.8'de ise iki kez iyonlaşmış Klor (Cl III) için hesaplanan geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçlarının MCHF yöntemi ve NIST'teki değerlerle uyumlu oldukları görülmüştür.

6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

6.1 Sonuçlar

Tam dolmamış açık kabuğa sahip çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde özellikle yüksek uyarılmış seviyelere ait geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde literatürde önemli eksiklikler bulunmaktadır. Saf teorik yöntemlerle elde edilen sonuçların birçoğu yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçişlerden ziyade düşük uyarılmış seviyeler arasındaki geçişleri içermektedir. Bu çalışmada Klor atomu ve bazı iyonları için en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri karmaşık bir hesaplama sürecine girmeden belirlenmiştir. Bu tez çalışmasından elde edilen sonuçların literatürle uyumlu çıkması, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorinin açık kabuklu sistemlere uygulanabilirliğinin bir göstergesini oluşturmaktadır.

6.2 Öneriler

Bu tez çalışmasında kullanılan en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorinin, karmaşık elektron konfigürasyonlarına sahip çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde kullanılmasının birçok avantajlı nedeninin olduğu söylenebilir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak gerçekleştirilen hesaplamalarda seviyelere ait yarıçapların farklı yöntemlerle elde edilerek karşılaştırılması söz konusu yöntemin geçerliliği konusunda daha sağlıklı bilgiler vereceği düşülmektedir. Bununla birlikte yüksek uyarılmış seviyeler içeren geçişlerde en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorinin bir çok durumda saf teorik yöntemlere nazaran daha basit bir hesaplamasal prosedür içerdiği ve basit prosedür içermesine rağmen hassas sonuçlar verebildiği söylenebilir.

KAYNAKLAR

Akın, E., Çelik, G. ve Kılıç, H.Ş., 2006, The theoretical calculation of transition probabilities for some excited p-d transitions in atomic nitrogen, *Eur. Phys. J. D.*, 40, 325-330.

Akın, E., Çelik, G. ve Kılıç, H.Ş., 2006, The calculations of oscillator strengths and transition probabilities for atomic fluorine, *T. J. Phys.*, 30, 165.

Akın, E., Çelik, G. ve Kılıç, H.Ş., 2007, The 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.

Ateş, Ş. ve Çelik, G., 2007, The calculation of transition probabilities for atomic oxygen, *Eur. Phys. J. D.*, 44, 433.

Apaydın, F., 2004, Kuantum fiziği, *Hacettepe Üniversitesi Yayınları*, Ankara.

Anderson, J.G. and Schwab, J.J., 1981, Oscillator strengths of Cl I in the vacuum ultraviolet: The ^2D-^2P transitions, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, volume 27, 4, pp*., 445-457.

Anonim, 2011, *Atom spektrumları* [online], http://www.hmmbileydim.com.tr/Atom spektumları [Ziyaret Tarihi: 6 Mayıs 2011].

Aygün, E. ve Zengin, M., 1995, Atom ve molekül fiziği, *A.Ü. Fen Fak. Fizik Bölümü, Bilim Yayınları*, Ankara, 96, 100.

Bates, D.R. and Damgaard, A., 1949, The calculation of the absolute strengths of spectral lines, *Philo. Trans. R. Soc. London Ser. A*, 242, 101.

Başar, B., 2000, Fizikçiler ve kimyacılar için kuantum kimyası, *Birsen Yayınevi*, İstanbul.

Cowan, R.D., 1981, The Theory of atomic structure and spectra, *University of California Press Berkeley*, 412-420.

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

Delalic, Z., Erman, P., Kallne, E. and Zastrow, K-D., 1990, Experimental lifetimes of prominent visible transitions in neutral chlorine, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 23, 2727-2732.

Fabry, M., 1976, Theoretical and experimental determinations of cesium oscillator strengths, *Canadian Journal of Physics*, *volume 54*, 836-844.

Fan, J., Ma, D.X., Su, W., Wang, T. and Zheng, N.W., 2003, Theoretical study of energy levels and transition probabilities of singly ionized alimium, *J. of the Phys. S. Japan*, 72, 12.

Fan, J., Ma, D.X., Wang. T., Zheng, N.W. and Zhou, T., 2004, Weakest bound electron potential model theory international, *Journal of Quantum Chemistry*, 98, 281-290.

Fan, J., Li, Z., Ma, D.X., Zheng, N.W. and Zhou, T., 2004, Theoretical study of energy levels of atomic Ga, *Canadian Journal of Physics*, 82, 523-529.

Fischer, C.F. and Tachiev, G., 2004, *MCHF/MCDHF collection version 2*, [online], http://nlte.nist.gov/MCHF/view.html [Ziyaret Tarihi: 12 Nisan 2013].

Gedikoğlu, A., 1991, Atom ve molekül fiziği, Trabzon.

Glowacki, L. and Migdalek, J., 2003, Relativistic configuration-interaction oscillator strength calculations with *ab initio* model potential wavefunctions, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 36, 3629–3636.

Hibbert, A. and Oliver, P., 2007, Breit-Pauli oscillator strenghts for transitions among fine-structure levels of Cl I, 2863, 2864, 2847-2870.

Jha, A. K. S., Mohan, M. and Singh, N., 2006, Breit-Pauli energy levels and radiative lifetimes in neutral chlorine, 290, 285-291.

Kartal, M., 2012, *Sürekli ve kesikli spektrum* [online], http://www.deu.edu.tr/userweb/mehmet.kartal/dosyalar/Atomunyapisi1.pdf [Ziyaret Tarihi: 6 Mayıs 2011].

Kramida, A., Ralchenko, Yu., Reader, J. and NIST ASD Team, 2012, *NIST atomic spektra database version 5*, [online], http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html [Ziyaret Tarihi: 12 Nisan 2013].

Kulaga-Egger, D. and Migdalek J., 2009, Theoretical radiative lifetimes of levels in singly ionized lanthanum, *Journal Of Physıcs B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 42.

Kuli-Zade, C.M. ve Tektunalı, G., 1995, Atom spektroskopisinin temelleri, *İ.Ü. Fen Fakültesi basımevi*, İstanbul.

Kurucu, Y. ve Şahin, Y., 2005, Atom fiziği, *Pegem A Yayıncılık*, Ankara.

Lavin, C., Martin, I. and Velasco, A. M., 1997, Relativistic quantum defect orbital calculations of oscillator strenghts in neutral chlorine, 427,428, 426-430.

Lindgard, A. and Nielsen, S.E., 1977, Transition probabilities for the alkali isoelectronic sequences, *Atomic Data and Nuclear Data Tables, volume 19, Issue 6*, 533-633.

Ma, D.X., Su, W., Sun, Y., Wang, T., Zhang, Y., Zheng, N.W. and Zhou T., 1999, Study of transition probability of low states of alkali metal atoms with WBEPMT, *Journal of The Physical Society of Japan*, 68, 12.

Ma, D.X., Sun, Y.J., Yang, R., Wang. T., Zheng, N.W. and Zhou, T., 2001, Theoretical study on regularity of changes in quantum defects in Rydberg state series of many-valence electron etoms within WBEPM theory, *International Journal of Quantum Chemistry*, 81, 232-237.

Martin, W.C. and Sansonetti J.E., 2005, Handbook of basic atomic spectroscopic data, 1659, 1559-2259.

Okur, İ., 2001, Atom ve kuantum fiziği, *Değişim Yayınları*, Sakarya.

Önengüt, G., 2008, Modern fiziğin kavramları, *Akademi Yayıncılık*.

Su, Y., Sun, Y.J., Wang. T., Zhang, Y., Zheng, N.W. and Zhou, T., 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.

Wang, T. and Zheng, N.W., 2002, Radiative lifetimes and atomic transition probabilities for atomic carbon and oxygen, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 143, 231-240.

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.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Mesut TOKGÖZ
Uyruğu : T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi : Şenkaya – 15.01.1985
Telefon : 0553 319 34 37
e-mail : mesut_fizik@hotmail.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	Başkent, Mamak, Ankara	2002
Üniversite	:	Sakarya, Serdivan, Sakarya	2010
Yüksek Lisans	:	Selçuk, Selçuklu, Konya	2013

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**
2008	Kavram Eğitim Kurumları	Fizik Öğretmeni
2008-2009	Sakarya Üniversitesi	F.E.F. Dekanlık Pers.
2009-2010	Mezun Eğitim Kurumları	Fizik Öğretmeni
2012-2013	M.E.B. (ücretli)	Matematik Öğretmeni
2013	M.E.B. (ücretli)	Fizik Öğretmeni

UZMANLIK ALANI

Fizik A.B.D / Atom ve Molükül Fiziği B.D.

YABANCI DİLLER

İngilizce