



T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Si IX İYONU İÇİN GEÇİŞ OLASILIKLARI, OSİLATÖR ŞİDDETLERİ VE UYARILMIŞ SEVİYELERİN YAŞAM SÜRELERİNİN HESAPLANMASI

Yasin GÖKÇE

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK Anabilim Dalını

Aralık-2013
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Si IX İYONU İÇİN GEÇİŞ OLASILIKLARI, OSİLATÖR ŞİDDETLERİ VE UYARILMIŞ SEVİYELERİN YAŞAM SÜRELERİNİN HESAPLANMASI

Yasin GÖKÇE

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Murat YILDIZ

2013, 84 Sayfa

Jüri
Doç. Dr. Erhan AKIN
Yrd. Doç. Dr. Murat YILDIZ
Yrd. Doç. Dr. Mehmet TAŞER

Bu tez çalışmasında astrofiziksel öneme sahip olan Si IX iyonu için geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri, uyarılmış seviyelerin hayat süreleri ve çarpışma şiddetleri hesaplanmıştır. İlk aşamada, Si IX iyonu için geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri hem 'En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) ile hem de 'SuperStructure' (SS) metodu kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar kendi aralarında ve daha önce yapılmış deneysel ve teorik çalışmalardan elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. İkinci aşamada ise elektron iyon çarpışma süreçleri R-matrix metodu kullanılarak hesaplanmıştır. Bu çalışmadan elde edilen sonuçların literatürle uyum içinde olduğu görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Çarpışma şiddeti, En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, geçiş olasılığı, hayat süresi, osilatör şiddeti, R-matrix metodu, Si IX iyonu, SuperStructure metodu.

ABSTRACT

MS THESIS

CALCULATION OF TRANSITION PROBABILITIES, OSCILLATOR STRENGTHS AND LIFETIMES FOR EXCITED LEVELS OF Si IX ION

Yasin GÖKÇE

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

Advisor: Asst. Prof. Dr. Murat YILDIZ

2013, 84

Jury
Assoc. Dr. Erhan AKIN
Asst. Prof. Dr. Murat YILDIZ
Asst. Prof. Dr. Mehmet TAŞER

In this thesis, transition probabilities, oscillator strengths, lifetimes for excited levels and collision strengths have been calculated for astrophysically important Si IX ion. For the first stage, transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes for excited levels for Si IX ion have been calculated using both Weakest bound electron potantial model theory (WBEPMT) and SuperStructure (SS) method. Obtained results have been compared with each other and obtained results from previously theoretical calculations and experimental results. For the second stage, electron-ion collision processes have been done using R-matrix method. The results obtained from this study have been seen in aggreament with literature.

.

Keywords: Collision strengths, electron-impact excitation, life time, oscillator strength, R-matrix, Si IX ion, SuperStructure method, transition probability, Weakest bound electron potantial model theory.

ÖNSÖZ

Si IX iyonu, çok yüksek seviyede uyarılmış bir iyon olması sebebiyle gözlemlenebildiği astrofiziksel çevreler genellikle yoğunluğu fazla olan ve bu sebeple de çalışılması çok zor ve aynı zamanda hem deneysel hem de teorik çalışmaların çok zorlukla yapılabildiği bir iyondur. Bu çalışma sırasında yapılan hesaplamalar çok hassas bir şekilde gerçekleştirilmiş ve aynı ölçüde çok değerli sonuçlar elde edilmiştir.

Bu tez çalışması sırasında, bana elinden gelen gayreti gösteren, bilgi ve tecrübelerini benden esirgemeyen danışman hocam Yrd. Doç. Dr. Murat YILDIZ'a ilgi ve alakalarından dolayı teşekkürü bir borç bilir, minnetlerimi sunarım.

Selçuk üniversitesinde gerçekleştirdiğim çalışmalarımın en büyük destekçilerinden ve tezimin sonuçlanmasında büyük yardımları olan Sayın Doç. Dr. Gültekin ÇELİK'e ve Dr. Şule ATEŞ'e teşekkürü bir borç bilir, minnetlerimi sunarım.

Tez çalışmalarıma maddi kaynak sağlayarak tez çalışmalarımın Ohio State Üniversitesinde gerçekleşmesine imkan tanıyan T. C. Yüksek Öğretim Kurumuna verdiği destekten ötürü teşekkürü bir borç bilirim.

Tez çalışmalarımın önemli bir kısmını gerçekleştirdiğim Ohio State Üniversitesinde çalışmakta olan Dr. Sultana Nurun NAHAR'a ve Prof. Dr. Anil K. PRADHAN'a tez çalışmalarımdaki yardımlarından, sağladıkları olanaklardan ve tezimin çok daha zengin bir hale gelmesinde büyük emeklerinden dolayı sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Son olarak, bu tez çalışması süresince benden manevi desteklerini esirgemeyen ve beni sabırla sürekli destekleyen tüm aileme şükranlarımı sunarım.

Yasin GÖKÇE
KONYA-2013

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **i**

ABSTRACT ..... **ii**

ÖNSÖZ ..... **iii**

İÇİNDEKİLER ..... **iv**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **vi**

1. GİRİŞ VE KAYNAK ARAŞTIRMASI **1**

2.TEORİK BİLGİ **3**

2.1. Spektroskopinin Temel Nicelikleri 3
2.1.1. Frekans, dalga sayısı, dalga boyu 3
2.1.2. Atomik seviyeler, kabuklar ve konfigürasyonlar 3
2.2. LS Çiftleniminde Atomik Yapı 5
2.2.1. Özdeş elektronlar için izinli terimler 6
2.2.2. Çiftlenim şemaları ve terim sembolleri 11
2.2.3. Spektral çizgiler: seçim kuralları, geçiş olasılıkları ve çizgi şiddetleri 13
2.3. Atomik Yapı 18
2.3.1. Hidrojen atomu 20
2.3.2. Merkezi-alan yaklaşımı 20
2.4. Atomik Süreçler 24
2.5. Işımalı Geçişler 25
2.5.1. Einstein A ve B katsayıları 27
2.5.2. Işımalı geçiş olasılığı 32
2.6. Elektron-İyon Çarpışmaları 43
2.6.1. Elektron-etkisi ile uyarma 44

3. MATERYAL VE YÖNTEM **47**

3.1. R-Matrix Kodları 47
3.1.1. Ful Breit–Pauli R-matrix (BPRM) metot 49
3.1.2. R-matrix II metodu 49
3.1.3. Dirac R-matrix (DARC) metodu 49
3.2. En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori 50

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA **56**

4.1. Si IX İyonu İçin Enerji Seviyeleri 56
4.2. Si IX İyonu İçin Geçiş Olasılığı, Osilatör Şiddeti ve Uyarılmış Seviyelerin Yaşam Süreleri Hesaplamaları 58
4.3. Si IX İyonu İçin Elektron-İyon Çarpışma Süreçleri 58

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER 67

5.1. Sonuçlar 67

KAYNAKLAR 69

ÖZGEÇMİŞ 73

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler	Açıklamaları
A	Einstein A katsayısı (Geçiş olasılığı)
Å	Angström
c	Işık hızı
λ	Dalga boyu
D	Dipol moment operatörü
E1	Elektrik dipol
E2	Elektrik kuadropol
f	Osilatör şiddeti
g	Lande çarpanı
$\mathbf{g_i}$	Alt seviyenin istatistiksel ağırlığı
$\mathbf{g_j}$	Üst seviyenin istatistiksel ağırlığı
J	Toplam açısal momentum kuantum sayısı
υ	Frekans
l	Yörünge açısal momentum kuantum sayısı
m	Manyetik moment
n	Baş kuantum sayısı
Ψ	Dalga fonksiyonu
Ω	Çarpışma şiddeti
σ	Dalga sayısı
ρ	Yoğunluk
ħ	İndirgenmiş Plank sabiti (h/2π)
γ	Etkin çarpışma şiddeti
K	Kelvin
M1	Manyetik Dipol
$\mathbf{m_e^*}$	Elektronun etkin kütlesi
$\mathbf{m_o}$	Serbest elektron kütlesi
N	Elektron sayısı
$\mathbf{R_\infty}$	Rydberg sabiti
R	Uzaklık
Si	Silisyum
S	Çizgi şiddeti

s	Spin açısal momentum kuantum sayısı
SS	SuperStructure
WBEPMT	En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori
Γ	Yaşam süresi
π	Pi sayısı
MCDF	Multi-Konfigürasyon Dirac-Fock
MCHF	Multi-Konfigürasyon Hartree-Fock

1. GİRİŞ VE KAYNAK ARAŞTIRMASI

Güneş, yıldızlar ve diğer astrofiziksel kaynaklar için SOHO, Chandra ve XMM-Newton gibi birçok uzay araçları sayesinde UV, EUV ve X-ışınları bölgelerinde yüksek çözünürlüklü spektrumlar elde edilmeye başlandı. Gözlemlenen birçok salınım çizgilerinin silikon iyonunun yüksek uyarılmış seviyelerine ait olduğu saptanmıştır (Si VII–Si XIV). Gözlemlenen çizgilerin belirlenmesinde ve spektral analizlerde silikon iyonunun yüksek uyarılmış seviyelerinin hem emisyon hem de soğurma çizgileri için teorik olarak hesaplanan geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti gibi atomik veriler oldukça önemlidir. Ancak silikon, sülfür, argon ve kalsiyum gibi elementler için literatürde ulaşılabilecek veriler oldukça sınırlıdır. Dahası, L-kabuğu iyonları için astrofiziksel spektrumların kötü modellemesinden dolayı elde edilebilen verilerin doğruluğu tartışılmaktadır. Bununla beraber elde edilmiş çalışmalar genellikle düşük uyarılmış seviye çalışmalarıyla sınırlıdır.

Karbon-benzeri iyonlar mümkün olan astrofiziksel plazma diagnostik uygulamaları üzerinde çok önemli bir yer tutmaktadır. Özellikle Havacılık ve Uzay Dairesi (NASA) astrofiziksel cisimler üzerinde hassas-çözünürlüklü spektrumlar elde edebilmek için oldukça önemli deneyler geliştirmektedir. Bu amaç doğrultusunda birçok kozmiksel bolluğa sahip iyonlar için çarpışma şiddeti ve geçiş olasılığı gibi doğru şekilde hesaplanmış atomik verilerin elde edilmesi büyük önem arz etmektedir.

Ayrıca elektron-iyon uyarma oranları üzerine elde edilecek veriler astronomide gözlemlenen ve astronomik cisimlerin sıcaklık ve yoğunluk gibi fiziksel durumları belirlemede önemli yer tutan çeşitli salınım çizgi spektrumlarının anlaşılmasında çok büyük bir öneme sahiptir. Literatüre bakıldığında uzun yıllar boyunca karbon-benzeri elektron dizilimine sahip iyonların çalışılmış olduğunu görmekteyiz ve halen bu iyonlarla ilgili temel spektroskopik veriler için literatürde bazı eksiklikler bulunmaktadır. Bu eksikliğe rağmen şimdiye kadar birçok çalışma yapılmıştır. Davis ve ark. (1977), Si iyonları için çizgi şiddeti, çarpışma şiddeti ve uyarılma oranlarını distorted wave yaklaşımını kullanarak hesaplamışlardır. Cheng ve Kim (1979), Multi-konfigürasyon Dirac-Fock (MCDF) yöntemini kullanarak elektrik dipol, kuadropol ve manyetik dipol geçişler için geçiş olasılığı hesaplamalarını Lityum iyonundan Flor iyonuna kadar tüm seriler için hesaplamışlardır. Aggarwal ve ark. (1983), relativistik etkileşimlerin hesaba katıldığı Breit-Pauli yaklaşımından konfigürasyon etkileşim dalga fonksiyonlarını kullanarak Si IX iyonu için osilatör şiddeti hesaplamalarını

gerçekleştirmişlerdir. Aggarwal ve ark. (1986), R-matrix metodunu kullanarak $1s^22s^22p^2$, $1s^22s2p^3$ ve $1s^22p^4$ konfigürasyonları arasında optiksel izinli geçişler (E1) için çarpışma şiddetlerini hesaplamışlardır. Luo ve Pradhan (1989), R-matrix hesaplamalarıyla ışımalı geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve tesir kesiti gibi hesaplamaları hem nötr karbon hem de iyonları için gerçekleştirmişleridir. Bhatia (1993), karbon-benzeri Si IX iyonu için çarpışma şiddeti ve geçiş olasılığı hesaplamasını Superstructure programını kullanarak yapmıştır. Ray ve Mukherjee (1995), zamana bağlı çiftlenmiş Hartree-Fock (TDCHF) metodunu kullanarak karbon-benzeri iyonlar için osilatör şiddetlerini hesaplamışlardır. Brage ve ark. (2000), Si IX iyonu için hem izinli hem de yasaklı (E2, M1) geçişler için geçiş olasılıklarını MCDF metodunu kullanarak hesaplamıştır. Liang ve ark. (2007), Si IX, Si X ve Si XI iyonları için çarpışma şiddetlerini M.F. Gu tarafından hazırlanan ayarlanabilir atomik kodu kullanarak hesapladılar. Jönsson ve ark. (2011), Multi konfigürasyon Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) metodunu kullanarak enerjileri ve E1, E2, M1 geçişleri için geçiş olasılıklarını hesaplamışlardır (Jönsson, 2011).

Bu açıdan bakıldığında Karbon-benzeri iyonlar için elde edilecek veriler büyük bir önem arz etmektedir. Bu tür iyonlar için hassas hesaplanmış veriler spektral çizgilerin yorumlanmasının astronomi bilimi için büyük kolaylıklar sağlayacağı aşikardır.

Bu tez çalışmasında Si IX iyonu için elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri, uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori (WBEPMT) ve SuperStructure (SS) yöntemleri kullanılarak hesaplanmıştır. Bu hesaplamalara ek olarak Si IX iyonu için çarpışma şiddetleri R-Matrix yöntemi kullanarak belirlenmiştir.

Çalışmanın 1. bölümünü oluşturan giriş ve 2. bölümünü oluşturan kaynak araştırması kısımlarından sonra 3. bölümünde hesaplamalarda kullanılan yöntemlere ayrıntılı olarak değinilmiştir. Araştırma sonuçlarının yer aldığı 4. bölümde WBEPM teori ve SuperStructure metodu ile hesaplanan elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri, uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri ve R-Matrix yöntemiyle belirlenen çarpışma şiddetleri sonuçları literatürdeki diğer deneysel ve teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırmalı olarak tablolar halinde sunulmuştur. 5. bölümde ise elde edilen sonuçların değerlendirilmesi ve geleceğe yönelik planlar yer almaktadır.

2.TEORİK BİLGİ

2.1. Spektroskopinin Temel Nicelikleri

2.1.1. Frekans, dalga sayısı, dalga boyu

Herhangi bir atomda veya iyonda bulunan elektronun, k üst enerji seviyesinden (E_k enerjili seviye), i alt enerji seviyesine (E_i enerjili seviye) geçişi ile yayımlanan fotonun enerjisi

$$\Delta E = E_k - E_i = h\upsilon = hc\sigma = hc/\lambda_{bosluk} \quad (1)$$

şeklinde verilir. Burada υ frekans, σ dalga sayısı ve $\lambda_{boşluk}$ ise boşluktaki dalga boyudur. Spektroskobik ölçüm birimi olarak Hertz saniyedeki devir sayısı olarak tanımlanmasına rağmen uygulamada cm^{-1} olup 2.99792458 x 10^4 MHz' ye karşılık gelir.

Atomik birim (a.u.) sisteminde enerji birimi olarak, genellikle teorik hesaplamalarda kullanılan, Hartree kullanılır ve bu değer iki Rydberg olarak tanımlanır.

$$1Ry = R_M = M(M+m_e)^{-1}R_\infty \quad (2)$$

$$R_\infty = m_e c\alpha^2/(2h) = 10973731.56862(9)m^{-1} \quad (3)$$

Bu değer ayrıca 13.605 698(4) eV değerine karşılık gelir. Rydberg sabiti R_∞, sonsuz nükleer kütle için limit değeridir (Martin, 1999).

2.1.2. Atomik seviyeler, kabuklar ve konfigürasyonlar

Bir elektronlu atomun fiziksel durumu kuantum sayıları olan nlm_lm_s veya $nljm_j$ ile belirtilir. Burada *n* ve *l* atomların baş kuantum sayılarını ve yörünge açısal momentum sayılarını temsil etmektedir. Burada *n* baş kuantum sayısının izinli değerleri pozitif tamsayılardır ve buna göre de yörünge açısal momentum kuantum sayısının alabileceği değerler *l* = 0,1 , ... , *n*-1 şeklindedir. Elektronun spin ve açısal momentumu arasında bağlantı kurularak elde edilen *j* kuantum sayısı, açısal momentumun yerini alır. $\boldsymbol{j = l + s}$ dir ve bu yüzden $j = l \pm 1/2$. Manyetik kuantum sayıları m_l, m_s ve m_j özel bir yön boyunca ilgili açısal momentum yönelimlerini temsil eder; bu yüzden, sırasıyla

manyetik kuantum sayısı ve spin kuantum sayısı m_l = -*l*, -*l*+1 ... *l* ve $m_s = \pm ½$ şeklinde ifade edilir.

Çok elektronlu bir atom için merkezi alan yaklaşımı dalga fonksiyonunun tek elektron durumlarının çarpımı şeklinde ifade edilmesine olanak sağlar. *n* aynı baş kuantum sayısına sahip olan bu elektronlar bu *n* baş kuantum sayısı için kabuğa ait olur. Aynı *n* baş kuantum sayısı ve aynı *l* yörünge açısal momentum kuantum sayısı değerlerine sahip olan elektrolar bir alt kabuğa aittir. Belirli bir alt kabuktaki elektronlar özdeş olurlar. *N* tane özdeş elektrona sahip bir konfigürasyon için gösterim nl^N şeklindedir, *N*=1 için üst simge genellikle ihmal edilir. Bir konfigürasyon yazılırken *l* nin sayısal değerleri harfler tarafından temsil edilir, *l*= 0,1,2 için s,p,d kodları ve *l* = 3,4,5 için f,g,h …, j harfi bu gösterimde ihmal edilir. Pauli dışarlama ilkesine göre dört kuantum sayısı aynı olan iki elektronlu atomik durumları yasaklıdır. Bu yüzden özdeş elektronların maksimum sayısı 2(2*l*+1) dir. Bu elektron sayısına sahip olan bir alt kabuk doludur, tamamlanmıştır veya kapalıdır. Bu elektron sayısından daha az sayıya sahip olan bir alt kabuk ise dolmamıştır, tamamlanmamıştır veya açıktır. Bu yüzden $3p^6$ konfigürasyonu tam dolu bir alt kabuğu temsil eder ve aynı şekilde $3s^23p^63d^{10}$ konfigürasyonları da *n*=3 için tam dolu kabuğu temsil eder. $\sum_i l_i$ nin tek ya da çift olmasına göre konfigürasyonun paritesi tek yada çifttir. Örneğin karbon benzeri Si IX iyonunun temel durum ve uyarılmış bir durumunun konfigürasyonlarını göz önüne alalım. $1s^22s^22p^2$ temel durum konfigürasyonunun paritesi, *s* kabuklarını *l*=0 ve p kabuğu *l* =1 ile temsil edildiğinden ve *l* kabuğunda iki elektron bulunmasından dolayı $\sum_i l_i$ = 2.0+2.0+2.2=4 yani parite çift (even) ve benzer şekilde $1s^22s^22p3d$ uyarılmış durumun için $\sum_i l_i$= 2.0+2.0+ 1.1+1.2=3 yani paritesi tek (odd) olarak belirlenir.

Özel bir seviye, L=*l* ve J=*j* olması kaydı ile ya nl_j ya da $nl\ ^2L_j$ ile gösterilir. L değerleri büyük roman harfleri kullanmak kaydıyla, *l* değerleri için kullanılan aynı harf kodlarıyla yazılırlar. L teriminin çokluğu 2S+1' e eşittir (2S+1=2*s*+1=2). Üst simge olarak yazılan terim, yapının doublet karakteristiğini temsil eder: her L≥1 terimi iki seviyeye sahiptir ve bu da $J=L \pm ½$ olarak gösterilir.

Çekirdekle tek elektron arasındaki Coulomb etkileşimi baskın olmasından dolayı en büyük enerji yarılmaları farklı n seviyeleri arasında gerçekleşir. Aynı *n* değerlerine sahip 2*n*-1 in uyarılmış seviyeleri relativistik yaklaşımlarla ve spin-yörünge etkileşimleriyle büyük ölçüde hesaplanmıştır, bunun sonucu olarak aynı *j* değerine sahip olan seviyelerin *n*-1 seviyelerinin her biri hemen-hemen dejeneredir; her çift içinde iki seviyenin yarılmaları nispeten küçük Lamb kayması ile gerçekleşir (Martin, 1999).

Merkezi alan yaklaşımında kapalı alt kabuk ve alt kabuk dışındaki elektron arasında açısal momentum çiftlenimi oluşmaz, çünkü toplam spin ve alt kabuğun yörünge açısal momentumunun toplam spinleri sıfırdır. Spin-ince-yapı yarılmalarında $j=l\pm1/2$ olan nl ($l > 0$) seviyeleri arasında yarılma nispeten küçüktür.

Hafif elementlerden helyum ve helyuma benzer iyonlarda aynı n değerine sahip ve $l = s$, p veya d olan seviyelerin yarılmaları elektronlar-spin-yörünge, spin-diğer yörünge ve diğer relativistik etkileşimlerin daha küçük olduğu durumlar arasında direk olarak ve elektrostatik etkileşimi tarafından büyük ölçüde hesaplanmıştır. Bu *LS* çiftlenimi için şarttır ve burada,

Açısal momentumun toplamını elde etmek için elektronların yörünge açısal momentumları toplanır. $L=\sum_i l_i$.

Toplam bir spin oluşturmak için de elektronların spinleri toplanır. $S=\sum_i s_i$.

s değerleri ile l değerlerinin kombinasyonu bir spektroskobik terim oluşturur. Bunun için gösterim $^{2s+1}$L şeklindedir. $2s+1$ kuantum sayısı, terimin üst simgesidir. **S** ve **L** vektörleri $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{S}+\boldsymbol{L}$ toplam açısal momentumu elde etmek için toplanmıştır, terimin bir üst seviyesi için; $^{2s+1}L_j$ olarak gösterilir (Martin, 1999).

2.2. LS Çiftleniminde Atomik Yapı

Atomik spektrumun teorik yorumları ve analizdeki *LS* çiftleniminin merkezi, spektrum ve özel yapıların tartışmaları, uygun terminoloji ve gösterimlerin kabulüne izin vermektedir. Terminolojinin ana elementleri aşağıdaki tabloda gösterilmiştir. Tablodaki kuantum sayıları karmaşık konfigürasyonlar için tüm tanımlamaları sunmaktadır ve yapısal elementler arasındaki geçişlerin isimleri ayrıca belirtilmiştir.

Tablo 2.2. LS çiftlenimindeki atomik yapısal hiyerarşi ve yapısal karakterler arasındaki tüm geçiş gruplarının isimleri.

Yapısal varlık	Kuantum sayıları[a]	Tüm geçiş grupları
Konfigürasyon	$(n_i l_i)^{N_i}$	Geçiş dizisi
Terim	$(n_i l_i)^{N_i}\ \gamma\ S\ L$	Multiplet
Seviye	$(n_i l_i)^{N_i}\ \gamma\ S\ L\ J$	Çizgi
Durum	$(n_i l_i)^{N_i}\ \gamma\ S\ L\ J\ M$	Çizgi bileşeni

a) i indisiyle de belirtildiği gibi konfigürasyon bir çok açık kabuk içerebilir. γ simgesi ise özel bir terimi belirtmek için gerekli olan ek kuantum sayılarını gösterir.

Örnek olarak, Ca I 3d4p $3D_2^0$ seviyesi $^3D_0$ terimine aittir, ve sırasıyla bu da 3d4p $^3(P_0\ D_0\ F_0)$ üçlü gruba aittir. Ayrıca 3d4p konfigürasyonu bir $^1(P^o\ D^o\ F^o)$ tekli gruba sahiptir. 3d4s konfigürasyonu sadece bir ^1D ve bir ^3D tekli terimlere sahiptir. 3d4s $^3D_2$ – 3d4p $3D^0_3$ çizgisi ilgili ^3D - $^3D_0$ üçlü çokluğuna aittir. 3d4s – 3d4p geçiş dizisi hem tekli hem de üçlü süper multipletleri içerir, hem de her bir interkombinasyon (LS-yasaklı) veya ara sistem çizgileri, tekli sistemin seviyeleri ve bunların üçlü sistemleri arasındaki geçişlerden kaynaklanır.

2.2.1. Özdeş elektronlar için izinli terimler

Özdeş olmayan iki grup elektronlarının oluşturduğu konfigürasyonun izinli *LS* terimleri tüm mümkün şekillerin ***S*** ve ***L*** vektörlerinin çiftlenimi ile elde edilir ve bu durum daha çok sayıda gruplara genişletilebilir. Bu yüzden herhangi bir konfigürasyon için izinli terimler özdeş elektron grupları için izinli terimlerin bulunduğu bir tablodan gösterilebilir.

l^N konfigürasyonu $l > 1$ ve $2l < N < 4l$ olması durumunda birçok *LS* çiftlenim tipleri birden fazla izinli terimlere sahiptir (d^3- d^7, f^3- f^{11} gibi).

Üst sayılarının gerçek değerlerinin kullanımının çoğu zaman gerekli olmamasına rağmen *d*N ve *f*N konfigürasyonları için gösterimin bu şekliyle yapılması çok daha uygundur. $l \leq 3$ için *lN* elektronlarının izinli *LS* terimlerinin seviyelerini gösteren tablo tam sayılar üzerinde tanımlıdır. Bu yüzden 3 mertebesine sahip olan d^3 ^2D terimi $_2{}^3D$ yerine $^2D_2$ şekliyle gösterilmiştir ve $J=3/_2$ ye sahip olan seviye $^2D_{3/2}2$ şeklinde gösterilmiştir.

lj^N durumunda aynı *j* değerlerine sahip *N* özdeş elektronlu bir grup için izinli *J* değerleri *j* =1/2, 3/2, 5/2 ve 7/2 için ($l \leq 3$ için yeterli) aşağıdaki tabloda gösterilmiştir. *J* değerinin 2 ve 4 değerlerinin her biri için $l\ ^4{}_{7/2}$ grubu iki izinli seviyeye sahiptir. Her bir seviyeyi birbirinden ayıran indisler mertebe sayılarıdır.

Tablo 2.2.1. l_j^N özdeş elektronları için izinli *J* değerleri (jj çiftlenimi)

l_j^N	İzinli J değerleri
$l_{1/2}$	1/2
$l_{1/2}$	0
$l_{3/2}$ $ve l_{3/2}^3$	3/2
$l_{3/2}^2$	0, 2
$l_{3/2}^4$	0
$l_{5/2}$ $ve l_{5/2}^5$	5/2
$l_{5/2}^2$ ve $l_{5/2}^4$	0, 2, 4
$l_{5/2}^3$	3/2, 5/2, 9/2
$l_{5/2}^6$	0
$l_{7/2}$ ve $l_{7/2}^7$	7/2
$l_{7/2}^2$ ve $l_{7/2}^6$	0, 2, 4, 6
$l_{7/2}^3$ ve $l_{7/2}^5$	3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2, 15/2
$l_{7/2}^4$	0, 22, 42, 24, 44, 5, 6, 8
$l_{7/2}^8$	0

l^N konfigürasyonunun izinli seviyeleri $\mathrm{nl}_{\mathrm{l}+1/2}^{\mathrm{Q}}\ \mathrm{nl}_{\mathrm{l}-1/2}^{\mathrm{R}}$ burada Q + R = N olmak üzere elektronları iki grup setine bölerek elde edilebilir. Q ve R sıfır olmadığı bir set için seviyeler (dejenere) sırasıyla Q ve R gruplarından türetilen J_1 ve J_2 kuantum sayıları (αJ_1, βJ_2) ile tanımlanan dalga fonksiyonlarına sahiptir. α ve β sembolleri seviyeleri tanımlamak için gerekli ek kuantum sayılarını temsil eder. Her bir (αJ_1 ,βJ_2) altkümesi için izinli seviyelerin J değerleri J_1 ve J_2 nin alabileceği değerlerin toplamı ile elde edilir.

Aşağıdaki örnekler farklı çiftlenim-şemaları için gösterimlerin anlamını daha açık bir şekilde ortaya koyacaktır. Örneklerdeki bütün konfigürasyonların deneysel olarak tanımlanması mümkün değildir.

Aşağıda *LS* çiftlenimine örnek teşkil eden bazı konfigürasyonlar gösterilmektedir.

Tablo 2.2.1.1. LS çiftlenim şekline örnekler.

1. $3d^7\ {}^4F_{7/2}$
2. $3d^7\ ({}^4F)4s4p({}^3P^o)\ {}^6F^o_{9/2}$
3. $4f^7({}^8S^o)6s6p^2({}^4P)\ {}^{11}P^o_5$
4. $3p^5\ ({}^2P^o)3d^2({}^1G)\ {}^2F^o_{7/2}$
5. $4f^{10}({}^3K2)6s6p({}^1P^o)\ {}^3L^o_6$
6. $4f^7({}^8S^o)5d\ ({}^7D^o)6p\ {}^8F^o_{13/2}$
7. $4f^7({}^8S^o)5d\ ({}^9D^o)6s({}^8D^o_{13/2})\ 7s\ {}^9D^o_5$
8. $4f^7({}^8S^o)5d\ ({}^9D^o)6s6p({}^3P^o)\ {}^{11}F_8$
9. $4f^7({}^8S^o)5d^2\ ({}^1G)\ ({}^8G^o)\ 6p\ {}^7F_0$
10. $4f({}^2F^o)5d^2\ ({}^1G)6s\ ({}^2G)\ {}^1P^o_1$

İkinci örnekte, 3d elektron çiftlerinin 7 si ^{4}F terimini oluşturmak için ve 4s ve 4p elektron çiftleri $^3P_0$ terimini oluşturmak için; 9 mümkün terimden biri olan sonuncu $^6F_0$ terimi ^{4}F ve $^3P_0$ terimlerinin çiftlenimi tarafından elde edilir. Sonraki üç örnek de ikinci ile benzerdir.

Örnek 6'daki çiftlenim, 5*d* ve 4*f* elektronlarının etkileşimi, 5*d*–6*p* elektronlarının etkileşiminden yeterince kuvvetli ise mümkündür. $^7D^o$ terimi 5d elektronu ile çiftlenerek $^8S^o$ terimi ile sonuçlanır. Örnek 7 daha sonraki aşamalarda devam eden benzer bir birleşim sırası gösterir. $^8D^o$ terimi ile 6*s* elektron çiftinden $^9D^o$ terimi elde edilir.

Örnek 8'de 2 ve 5 örneklerine benzer bir durum söz konusudur, fakat 8 deki ^{11}F terimini oluşturan çift, iki terimden ilki örneğin $^9D^o$ terimi 5*d* elektronlarının $^8S^o$ çekirdek terimine çiftlenimiyle kendi kendine oluşturulur. Örnek 9' da ise $^8S^o$ ve ^{1}G terimlerinin çiftlenimiyle oluşan $^8G^o$ terimini göstermektedir.

Son örnekte çiftlenimin farklı bir sırası gösterilmiştir, doğrudan 4*f* çekirdek elektronunun yerine 6s dış elektronuna 5*d* ^{2} ^{1}G terimi bağlanmıştır. 4*f* (^{2}F°) çekirdek terimi, çiftlenmiş diğer elektronlardan sonra (5*d* ^{2} (^{1}G) 6*s* ^{2}G terimine) çiftlendiğini belirtmek için bir boşluk tarafından izole edilmiştir. ^{2}G teriminden sonra 4*f* elektronlarını yazarak bu özel durumdaki gösterim daha da basitleştirilebilir. İlk

konfigürasyonun verilen çekirdek kısmının düzenini kaybetmemek daha önemli görünmektedir (Martin, 1999).

En genel şema özel bir LS tipinin düşük terimlerini a,b,c, … ile z, y, x, … ile de yüksek terimlerini ayırt edecek şekildedir.

Küçük harfle *j* nin kullanımı bir elektronun açısal momentumunu belirtir ($j = l \mp 1/2$) veya bir *l*jN grubundaki her bir elektronu gösterir.

Tablo 2.2.1.2. jj çiftlenim durumu

1. $(6p^2_{1/2})_0$
2. $(6p^2_{1/2}\ 6p_{3/2})^o_{3/2}$
3. $(6p^2_{1/2}\ 6p^2_{3/2})_2$
4. $4d^3_{5/2}\ 4d^2_{3/2}\ (9/2, 2)_{11/2}$

6p elektronlarının oldukça büyük spin–yörünge etkileşimi $6p^2$, $6p^3$ ve $6p^4$ için nötr Pb, Bi ve Po nun temel konfigürasyonlarının *jj*–çiftlenim yapılarını üretir; bu atomların temel seviyeleri için gösterimleri ilk örnekte verilmiştir. İlk örnekteki konfigürasyon *l*j*N* aynı *j* değerine sahip özdeş elektronların konfigürasyonunu gösterir, bu durumda iki 6*p* elektronlarının her biri $j = ½$ değerine sahiptir. Ayrıca böyle bir grubun özel bir seviye için uygun şekliyle gösterilmiştir (**J**=0). İkinci örnek bu gösterimi iki uygun *j* değerlerine göre iki gruba ayırarak genişletir. Benzer bir gösterim $6p^4$ seviyesi için üçüncü örnekte gösterilmiştir; bu seviye $(6p^{-2}{}_{3/2})_2$ şekliyle belirtilmiş olabilir, negatif indis iki 6p boşluklarını belirtmektedir. Dördüncü örneğin sağ tarafında gösterilen (J_1, J_2) terimi ve seviye gösterimleri uygundur çünkü $4d^3{}_{5/2}$ ve $4d^2{}_{3/2}$ iki elektron gruplarından her biri birden fazla izinli toplam J_i değerlerine sahiptir. Bahsedilen düzen ile J_1, soldaki grupları ($4d^3{}_{5/2}$ grubu için $J_1 = 9/2$) ve J_2, sağdaki grupları gösterir.

Tablo 2.2.1.3. J_1 j çiftlenimi için örnekler.

1. $3d^9(^2D_{5/2})4p_{3/2}\ (5/2,\ 3/2)^o_3$
2. $4df^{11}\ (^2H^o_{9/2}\ 2)6s6p(^3P^o_1)\ (9/2,\ 1)_{7/2}$
3. $4f^9(^6H^o)5d\ (^7H^o_8)6s6p(^3P^o_0\ (8,0)_8$
4. $4f^{12}\ (^3H_6)\ \ 5d(^2D)6s6p(^3P^o)\ \ (^4F^o_{3/2})\ \ (6,\ 3/2)^o_{13/2}$
5. $5f^4(^5I_4)6d_{3/2}\ \ (4,\ 3/2)_{11/2}7s7p(^1P^o_1)\ \ (11/2,\ 1)^o_{9/2}$
6. $5f^4_{7/2}5f^5_{5/2}\ (8,\ 5/2)^o_{21/2}7p_{3/2}\ \ (21/2,\ 3/2)_{10}$
7. $5f^3_{7/2}5f^3_{5/2}\ (9/2,\ 9/2)_9 7s7p\ (^3P^o_2)\ \ (9,\ 2)^o_7$

İlk beş örnek LS çiftleniminde çekirdek elektronlarına sahiptir, jj çiftlenimi ise 5f çekirdek elektronları için son iki örnekte gösterilmiştir. Son terimdeki J_1 ve J_2 değerleri konfigürasyonda indis olarak verildiği için, (J_1, J_2) terim gösterimleri bütün bu örneklerde gereksizdir. Konfigürasyon ayrılmaları tüm konfigürasyon için çok daha kısa bir gösterim ile parantez içinde ve J değeri de indis olarak eklenerek ifade edilebilir. Bu yüzden ilk örnekteki seviye $[3d^9:(^2D_{5/2})4p^{3/2}]^o_3$ şeklinde gösterilmiştir. Konfigürasyon ve çiftlenim düzeni bilinen formatlarda belirtilirse yine bu durumlarda da kısa gösterim şekilleri kullanılabilir; bunun için $[(^3H_6)\ (^4F^o_{3/2})]_{13/2}$ veya $(^3H_6,\ ^3P^o,\ ^4F^o_{3/2})_{13/2}$ dördüncü örneği gösterilebilir (Martin, 1999).

Tablo 2.2.1.4. J_1l çiftlenimi için örnekler

1. $3p^5\ (^2P^o_{1/2})5g\ \ ^2[9/2]^o_5$
2. $4f^2(^3H_4)5g\ \ ^2[3]_{5/2}$
3. $4f^{13}(^2F^o_{7/2})5d^2(^1D)\ \ ^1[7/2]^o_{7/2}$
4. $4f^{13}(^2F^o_{5/2})5d6s(^3D)\ \ \ ^3[9/2]^o_{11/2}$

İlk iki örnekteki son terimler J_1 in büyük seviyelerinin 5g elektronunun yörünge açısal momentumu ile çiftlenimlerinden meydana gelmiştir ve böylelikle de $\vec{K}$ sonucu elde edilmiştir, **K** değeri kapalı parantez içindedir. Dış elektronun spini bir çift J değeri oluşturmak için **K** açısal momentumu ile çiftlenir, J = K ± ½ (K ≠ 0 için). Bunun gibi

çiftli terimlerin çokluğu genellikle terim sembolünden ayrılır, fakat diğer çokluklar daha genel J_1L_2 çiftlenimlerinde gösterilirler (3 ve 4 örnekleri). Son iki örnek dış terimin *l* ve *s* momentumları yerine L_2 ve S_2 momentumları ile J_1l çiftleniminin kısa uzatmalarıdır (3 ve 4 örneklerindeki ^{1}D ve ^{3}D terimleri).

2.2.2. Çiftlenim şemaları ve terim sembolleri

Çiftlenim şemaları atomik yapı hesaplamalarında en çok kullanılan halleriyle aşağıda özetlenmiştir. Her terim iki açısal momentumun değerini verir ve bunlar bir seviyenin toplam elektronik açısal momentumunu oluşturmak için çiftlenebilirler (J) toplam açısal momentum kuantum sayısı değerleri ile gösterildiği gibi). Tam dolmayan birden fazla alt kabukların konfigürasyonu için, son çiftlenimde bulunan açısal moment elektronların iki grubundan türer (her iki grup sadece bir elektrondan oluşabilir). Bunlar genellikle çiftlenmiş elektronların iç ve dış gruplarıdır. Herhangi bir durumda iki grup için kuantum sayıları 1 ve 2 alt indisleriyle ayırt edilebilir, bu yüzden alt indis olmadan büyük harflerle ifade edilen kuantum sayıları her iki grup için toplam kuantum sayılarıdır. Bu yüzden son J değeri için çiftlenmiş iki vektör için kuantum sayıları aşağıdaki terim sembolleriyle gösterilir:

Tablo 2.2.2. Çiftlenim şeması

Çiftlenim türü	Kuantum sayıları	Terim sembolleri
LS	L, S	2S+1L
J_1J_2	J_1, J_2	(J_1, J_2)
$J_1L_2(\rightarrow K)$	K, S_2	$2S_2$+1 [K]
$LS_1(\rightarrow K)$	K, S_2	$2S_2$+1 [K]

Tek elektrona sahip hidrojen ve hidrojene benzer iyonlar için Bohr enerji seviyesi uygun çekirdek kütlesi için Rydberg, R_m birim sisteminde verilir,

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \tag{4}$$

Çok elektronlu bir atom için, hidrojenik E_n değerlerinden (çekirdek)*nl* serisinin bir seviyesinin sapmaları başlıca nedeni *nl* elektronlarının çekirdek nüfuzudur (düşük *l*-

değer serileri) veya *nl* elektronlarının çekirdek nüfuzu (yüksek *l*-değerleri serisi) veya bu iki etkinin kombinasyonudur. Her iki durumda da bu sapmalar yaklaşık olarak kuantum kusurları sabiti δ_l, Rydberg formülü ile gösterilebilir,

$$E_{nl} = -\frac{Z^2}{(n-\delta_l)^2} = -\frac{Z_c^{\,2}}{(n^*)^2} \tag{5}$$

Burada Z_c çekirdeğin yüküdür ve n* = n – δ etkin baş kuantum sayısıdır. Çekirdek sadece kapalı alt kabuklardan oluşuyorsa, E_{nl} değerleri $^1S_0$ (çekirdek) seviyesi için sıfır olacaktır, örneğin $^1S_0$ seviyesi n*l* (çekirdek) serisinin limitidir. Eşitlik 5' de değerler pozitif olarak alınırsa bu ifadeler terim değerlerini veya iyonlaşma enerjilerini gösterirler; bu yüzden daha üst seviyedeki bir iyonun temel seviyesine göre bir atom veya bir iyonun temel seviyesinin terim değeri temel iyonlaşma enerjisidir.

Çekirdeğin bir veya daha fazla alt kabukları varsa, seri limiti tüm çekirdek konfigürasyonunun ağırlık merkezi veya çekirdeğin uygun herhangi bir alt yapısı olabilir. İlgili (çekirdek) *nl* yapılarının serilerine göre belirlenen E_{nl} değerleri özel bir limit yapı üzerinden yapılandırılır.

Serinin düşük seviyeleri eşitlik 5' de doğru bir şekilde ifade edildiği takdirde kuantum kusurları enerjiye de bağlı olacağından bu durum da ayrıca hesaba katılmalıdır. Perturbe olmayan bir seri için bu bağlılık genişletilmiş Ritz formülü ile belirtilebilir.

$$\delta = n - n^* = \delta_0 + \frac{a}{(n-\delta_0)^2} \tag{6}$$

δ_0,a,b... serinin sabitleridir (δ_0 yüksek seviye üyeleri için kuantum kusurlarının limit değeridir). Burada a sabitinin değeri genellikle çekirdek-nüfuzu için pozitif ve çekirdek-polarizasyonu için negatiftir.

Bir spektral çizgi dizisi sadece n değerleriyle farklılık gösteren *nl* (çekirdek) üst seviyelerinin bir serisini veya yaygın olan daha düşük seviyeleri içeren ya salma yada soğurma geçişlerinden ortaya çıkmaktadır. Na I in temel seviyesi 3s $^2S_{1/2}$ – np $^2P^o_{1/2,\ 3/2}$ ($n \geq 3$ için) bir örnektir. Üst üste artan *n* değerlerinin düzenliliği çizgi serilerinde gözlemlenir; üst üste çizgilerin aralıkları dalga sayısı arttıkça düzenli bir şekilde azalır ve artan dalga sayılarının serileri düşük seviyelerin terim değerine doğru bir limit olarak yakınsar.

Optiksel atomik spektroskopinin en çok ilgi çeken aralıkları:

Tablo 2.2.2.1. Atomik spektroskopide dalga boyu aralıkları.

2-20 μm	Orta-kızılötesi (IR)
700-2000 nm	Yakın kızılötesi
400-700 nm	Görünür
200-400 nm	Yakın morötesi
100-200 nm	Vakum morötesi veya uzak morötesi
10-100 nm	Aşırı uzak morötesi
<10 nm	Yumuşak x-ray, x-ray

Yukarıda yazılan aralıklar için ifadeler kesin değildir. Standart hava ortamında dalga boyu genellikle 200 nm den daha uzun bölgeler için tablo haline getirilmiştir. Bu dalga boyları, ilgili dalga sayısı veya frekans dönüşümlerine göre enerji seviyesi farklılıkları ile bağlantılıdır (Martin, 1999).

2.2.3. Spektral çizgiler: seçim kuralları, geçiş olasılıkları ve çizgi şiddetleri

Tablo 2.2.3. İzinli ve yasaklı geçişler için seçim kuralları

Kural	Elektrik dipol (E1) (izinli)	Manyetik dipol (M1) (yasaklı)	Elektrik kuadropol (E2) (yasaklı)
1.	$\Delta J = 0, \pm 1$ $(0 \to 0 \ yasaklı)$	$\Delta J = 0, \pm 1$ $(0 \to 0 \ yasaklı)$	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ $(0 \to 0, \frac{1}{2} \to \frac{1}{2}, 0 \to 1 \ yasaklı)$
2.	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$
3.	Parite değişir	Parite değişmez	Parite değişmez
4.	Tek elektron sıçraması $\Delta l = \pm 1$	Elektron sıçraması olmaz $\Delta l = 0, \ \Delta n = 0$	Bir elektron veya hiç elektron sıçraması olmaz $\Delta l = 0, \pm 2$
5.	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$
6.	$\Delta L = 0, \pm 1$ $(0 \to 0 \ yasaklı)$	$\Delta L = 0$	$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ $(0 \to 0, 0 \to 1 \ yasaklı)$

Birim kaynak hacim başına ve birim katı açı başına frekansın bir spektral çizgisinden yayılan toplam güç

$$\varepsilon_{çizgi} = (4\pi) - lh\upsilon A_{ki} N_k \tag{7}$$

burada A_{ki} atomik geçiş olasılığı, υ Hertz biriminde frekans ve N_k birim hacim başına k üst seviyesindeki uyarılmış atomların sayısıdır. *l* uzunluğunda homojen bir ışık kaynağı için ve optiksel ince bir durumda, parlaklık ifadesi uluslar arası birim sisteminde (SI birim sistemi) aşağıdaki şekliyle ifade edilir;

$$I_{çizgi} = \varepsilon_{çizgi} l = \int_0^{\infty} I(\lambda) d\lambda$$

$$= (4\pi) - l(hc/\lambda_0) A_{ki} N_{kl} \tag{8}$$

burada I(λ), λ dalga boyunda yoğunluk ve λ_0 çizgi merkezindeki dalga boyudur.
İndirgenmiş absorbsiyon ifadesi için aşağıdaki bağıntı kullanılır,

$$W(\lambda) = [I(\lambda) - P(\lambda)] / I(\lambda) \tag{9}$$

burada I(λ), λ dalga boyunda olay şiddetidir. P(λ) ise elektronun emici ortamdan geçtikten sonraki şiddeti olarak tanımlanır. *l* uzunluğunda homojen ve optiksel ince emici ortamda indirgenmiş çizgi şiddeti aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$W_{ik} = \int_0^{+\infty} W(\lambda)\, d\lambda = \frac{e^2}{4\varepsilon_0 m_e c^2} \lambda_0^2 N_i\ f_{ik} l \tag{10}$$

Burada f_{ik} atomik (soğurma) osilatör şiddetidir (birimsiz).

A_{ki} ve f_{ik}, çizgi yoğunlukları ile ilgili olan atomik parametrelerdir. Teorik çalışmalarda, çizgi şiddeti, S, geniş bir kullanım alanına sahiptir.

$$S = S(i,k) = S(k,i) = \left|R_{ik}\right|^2 \tag{11}$$

$$R_{ik} = \left\langle \psi_k \left| P \right| \psi_i \right\rangle \tag{12}$$

burada ψ_i ve ψ_k başlangıç ve bitiş durumunu gösteren dalga fonksiyonlarıdır ve R_{ik}, P yaklaşık multipol operatörünün geçiş matris elemanıdır (R_{ik} bir atom veya iyonun tüm *N* elektronlarının uzaysal ve spin koordinatları üzerinden bir integrasyon içerir).

SI birim sisteminde (Geçiş olasılığı *A*: s^{-1}, dalga boyu λ: m ve çizgi şiddeti *S*: m^2C^2 biriminde) Elektrik dipol (E1 veya izinli) geçişler için Geçiş olasılığı, *f* osilatör şiddeti ve *S* çizgi şiddeti arasındaki bağıntı (Martin, 1999)

$$A_{ki} = \frac{2\pi e^2}{m_e c \varepsilon_0 \lambda^2} \frac{g_i}{g_k} f_{ik} = \frac{16\pi^3}{3h\varepsilon_0 \lambda^3 g_k} S \tag{13}$$

şeklinde verilir. Sayısal olarak bilinen birimlerde (A: s^{-1}, λ: Å ve S: atomik birimde),

$$A_{ki} = \frac{6.6702\times10^{15}}{\lambda^2} \frac{g_i}{g_k} f_{ik} = \frac{2.0261\times10^{18}}{\lambda^3 g_k} S \tag{14}$$

Burada S ve ΔE atomik birimde,

$$f_{ik} = \frac{2}{3}(\Delta E / g_i) S \tag{15}$$

g_i ve g_k istatistiksel ağırlıklarıdır ve bunlar uygun açısal momentum kuantum sayılarından elde edilirler. Bu yüzden bir spektrum çizgisinin alt (üst) seviyesi için $g_{i(k)} = 2J_{i(k)} + 1$ şeklindedir ve multipletin alt (üst) terimleri için ifade ise;

$$\bar{g}_{i\,(k)} = \sum_{i(k)} (2J_{i\,(k)} + 1)$$

$$= (2L_{i\,(k)} + 1)(2S_{i\,(k)} + 1) \tag{16}$$

şeklinde ifade edilir. En yaygın yasaklı geçişler için *S* ve A_{ki} arasındaki dönüşüm bağıntısı,

Tablo 2.2.3.1. Çizgi şiddeti ve geçiş olasılığı arasındaki bağıntı.

	SI biriminde	Sayısal olarak bilinen birimde
Elektrik Kuadropol (*E2*)	$A_{ki} = \frac{16\pi^5}{15h\varepsilon_0 \lambda^5 g_k} S$	$A_{ki} = \frac{1.1199\times10^{18}}{g_k \lambda^5} S$
Manyetik Dipol (*M1*)	$A_{ki} = \frac{16\pi^3 \mu_0}{3h\lambda^3 g_k} S$	$A_{ki} = \frac{2.697\times10^{13}}{g_k \lambda^3} S$

a) Geçiş olasılığı s^{-1} biriminde, ise m birimindedir. Elektrik kuadropol ve manyetik dipol durumlarında çizgi şiddetinin birimleri ise sırasıyla: m^4 C^2 ve J^2 T^{-2} birimindedir.

b) Geçiş olasılığı s^{-1} biriminde, dalga boyu Å birimindedir. Çizgi şiddetleri ise atomik birimde: a_0 $4e^2$ = 2.013 x 10^{-79} m^4 C^2 (elektrik kuadropol), $e^2h^2/16\pi^2$ me^2 = μB^2 = 8.601 x 10^{-47} J^2 T^{-2} (manyetik dipol). μB^2 ifadesi ise Bohr magnetonudur.
f osilatör şiddeti manyetik dipol (*M1)* ve elektrik kuadropol (*E2*) gibi yasak geçişler için kullanılmaz.

Bir multipletin (M) *f* osilatör şiddeti değeri ve toplam şiddeti arasındaki bağıntı ve mutipletin (izinli geçişleri) çizgileri için ilgili bağıntıları (Martin, 1999):

$$S_M = \sum S_{çizgi} \tag{17}$$

$$f_M = (\bar{\lambda}\bar{g}_i)^{-1} \sum_{J_k,\, J_i} g_i \lambda(J_i,\, J_k)\, f\,(J_i,\, J_k) \tag{18}$$

olarak verilir. λ burada vakumdaki ağırlıklı (‘multiplet’) dalga boyudur:

$$\bar{\lambda} = n\bar{\lambda}_{hava} = hc / \Delta\bar{E} \tag{19}$$

$$\Delta\bar{E} = \bar{E}_k - \bar{E}_i = (\bar{g}_k)^{-1} \sum_{J_k} g_k\, E_k - (\bar{g}_i)^{-1} \sum_{J_i} g_i\, E_i \tag{20}$$

ve burada n, standart havanın kırılma indisidir.

Bir atomik k seviyenin r_k ışınımsal yaşam süresi k enerji seviyesinden daha küçük tüm i seviyelerinin geçiş olasılıkları toplamı ile bağlantılıdır:

$$\tau_k = \left(\sum_i A_{ki} \right)^{-1} \tag{21}$$

Özel bir geçişin dallanma oranı şu şekilde tanımlanır;

$$A_{ki'} / \sum_i A_{ki} \quad = A.\tau_k \tag{22}$$

Sadece bir dallanma (i) gerçekleşirse (veya diğer tüm dallanmalar göz ardı edilirse),

$$A_{ki}.\,\tau_k = 1$$

ve

$$\tau_k = 1/A_{ki'} \tag{23}$$

Hidrojenik geçişlerin enerjileri [eşitlik 1 ve 10 dan] ;

$$(\Delta E)_Z = (E_k - E_i)_Z = R_M hc\, Z^2 (1/n_i^2 - 1/n_k^2) \tag{24}$$

şeklinde yazılır. Z çekirdek yüküne sahip bir hidrojenik iyon için spektroskobik miktarları aşağıda belirtildiği gibi hidrojendeki (Z = 1) özdeş miktarlarla bağlantılıdır (R_M değerindeki küçük farklılıklar göz ardı edilmiştir) (Martin, 1999),

$$(\Delta E)_Z = Z^2 (\Delta E)_H \tag{25}$$

$$(\lambda_{vac})_Z = Z^{-2} (\lambda_{vac})_H \tag{26}$$

$$S_Z = Z^{-2}\, S_H \tag{27}$$

$$f_Z = f_H \tag{28}$$

$$A_Z = Z^4\, A_H \tag{29}$$

Z nin büyük değerleri için, kabaca $Z > 20$, relativistik düzeltmeler ortaya çıkacaktır ve hesaba katılmalıdır. Hidrojenik iyonların yüksek seri sayıları (büyük n değerleri) için f değerleri aşağıdaki bağlantıya göre azalır (Martin, 1999),

$$f(n, l \to n', l \pm 1) \propto (n')^{-3} \tag{30}$$

Tablo 2.2.3.2. Hidrojenin ana spektral serilerinin bazı geçişleri

Geçiş	Bilinen adı	λ (Å)	g_i	g_k	A_{ki} (10^8 s^{-1})
1-2	(Lα)	1215.67	2	8	4.699
1-3	(Lβ)	1025.73	2	18	5.575(-1)d
1-4	(Lγ)	972.537	2	32	1.278(-1)
1-5	(L^{δ})	949.743	2	50	4.125(-2)
1-6	(Lϵ)	937.80	2	72	1.644(-2)
2-3	(Hα)	6562.80	8	18	4.410(-1)
2-4	(Hβ)	4861.32	8	32	8.419(-2)
2-5	(Hγ)	4340.46	8	50	2.530(-2)
2-6	(H^{δ})	4101.73	8	72	9.732(-3)
2-7	(Hϵ)	3970.07	8	98	4.389(-3)
3-4	(Pα)	18751.0	18	32	8.986(-2)
3-5	(Pβ)	12818.1	18	50	2.201(-2)
3-6	(Pγ)	10938.1	18	72	7.783(-3)
3-7	(P^{δ})	10049.4	18	98	3.358(-3)
3-8	(Pϵ)	9545.97	18	128	1.651(-3)

a) Lα genellikle Lyman α, Hα Balmer α, Pα Paschen α olarak kullanılır.

b) 2000Å aşağısındaki dalga boyları boşluktaki dalga boylarıdır; 2000 Å üzerindeki ise havadaki dalga boylarıdır.

c) Hidrojendeki geçişler için, $g_{i(k)} = 2(n_{i(k)})^2$ burada $n_{i(k)}$ alt (üst) elektron kabuğunun baş kuantum sayısıdır.

d) Parantez içindeki sayılar ilgili sayının 10 un hangi kuvveti ile çarpılması gerektiğini ifade etmektedir (Martin, 1999).

2.3. Atomik Yapı

Bilindiği üzere astrofiziksel uygulamalar atomik fiziğin gelişiminde oldukça önemlidir. Russell ve Saunders 1925 yılında yayımladıkları çalışmalarında, tüm elektronların toplam L içinde yörünge açısal momentumlarının çiftlenimi ve tüm spin momentumlarının toplam S içinde çiftlenimi üzerine dayanarak LS çifftlenim şeması olarak bilinen birçok atomik durum için spektroskopik gösterimleri tanımladılar. Bu yüzden her bir atomik durum toplam L ve S göz önüne alınarak etiketlenir.

Atomik yapı, elektronların çeşitli kabuk ve alt kabuklardaki organizasyonu olarak adlandırılabilir. Teorik olarak bunun anlamı, atom, iyon veya atomik sistemde (elektron-iyon gibi) tüm elektronların bağlı durumlarının elektron enerjilerinin ve dalga fonksiyonlarının hesaplanmasıdır. Bozonların aksine, fermiyonlarda olduğu gibi elektronlar çekirdeğin etkin potansiyeli altında yapısal düzenlerini kurarlar. Birbirinden farklı atomik durumlar hareketin kuantizasyonu ve tüm elektronların yörünge ve spin açısal momentumundan dolayı meydana gelirler. Bütün bu durumlar arasındaki geçişler fotonları da içerir ve gözlemlenebilen spektrumlarda çizgiler olarak görünürler.

Çok elektronlu atomlar için *l* ve *s* nin kombinasyonu toplam açısal momentumu elde edebilmek için, atomik seviyelerin simetrisini tanımlayan katı çiftlenim kurallarını takip eder. Verilen bir atomda veya iyonda, kurallar herhangi bir etkin atomik potansiyel içinde dinamik değişkenlerin bağımsızca hesaplanabileceği tüm izinli atomik durumlar için açısal cebir oluşturur. Yörünge spini ve dinamik kısım birbirinden farklı olarak kuantize oldukları için Hamiltonian içinde de ayrılırlar. Verilen bir *nl* spin-yörünge ile dinamik nicelikler, sabit durumu ve her bir yörüngenin ortalama yarıçapı $\langle r_{nl} \rangle$ gibi beklenen değeri hesaplar.

Çok elektronlu sistemlerde hesaplamalara geçişlerde He atomundan farklı olarak elektron-elektron korelasyon etkileşmeleri hesaba katılmalıdır. Çok elektronlu atomlarda yaklaşım durumu merkezi bir potansiyel altındaki H atomunda olduğu gibi merkezi –alan yaklaşımını içine almaktadır. En yaygın ve tam yaklaşım durumu Hartee-Fock-denklemi içerisinde Schrödinger eşitliğinin genelleştirilmesidir.

Bunlara ek olarak, yüksek uyarılmış iyonlarda ve ağır atomlarda olduğu gibi atom içersindeki elektronların hızı c ışık hızı ile kıyaslanabilir bir büyüklüğü sahipse relativistik etkiler işin içine girer. İlk etki LS durumlarının veya terimlerinin J seviyelerine yarılmasına neden olan ince-yapı (fine-structure) etkisidir. Bu durum itibariyle atomik seviyeler LSJ olarak gösterilmelidir. Bir elektronun hareketinin tamamen relativistik versiyonu Dirac eşitliği kullanılarak gösterilir. Relativistik etkiler kompleks yaklaşımlarda çekirdek yüküne veya atomik sayılara bağlı olarak ardışık biçimde dahil edilebilir olmasına rağmen Dirac eşitliği ve Schrödinger eşitliği arasında ara-sistem durumu söz konusudur. Breit-Pauli yaklaşımlarının benzeri olan ara-sistem metotlar demir grubu elementlerine kadar astrofiziksel öneme sahip olan atomik sistemler için en uygun olan yöntemdir.

Sonuç olarak, enerji seviyelerinin izo elektronik diziler (aynı elektron sayısı fakat çekirdeğinde farklı sayıda protonlar bulunduran iyonlar) boyunca davranışları atomik spektroskopide oldukça kullanışlı özellikler sergilediği söylenebilir. (Pradhan, 2011).

2.3.1. Hidrojen atomu

Hidrojen atomunu çalışmaları atomik spektroskopinin temelini oluşturur. Bu yüzden hidrojen atomunun kuantum mekaniksel davranışı büyük bir öneme sahiptir. Z çekirdek yüküne sahip ağır bir çekirdeğin m kütlesine sahip merkezi alanda hareketini devam ettiren elektronunun hareket denklemi;

$$\frac{p^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r}=\frac{p_r{}^2+p_\perp{}^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r}=E \tag{2.1}$$

şeklinde verilir. Kuantum mekaniksel olarak ise bu ifadede momentum ve enerji ifadeleri için p= $-i\hbar\nabla$ ve E= $-i\hbar\partial/\partial t$ ifadeleri kullanılarak Schrödinger eşitliği elde edilebilir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2)+V(r)\right]\psi=E\psi \tag{2.2}$$

Burada

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}=\frac{2Z}{r/a_0}Ry \tag{2.3}$$

şeklinde ifade edilir (Pradhan, 2011).

2.3.2. Merkezcil alan yaklaşımı

Kompleks atomlar için en uygun tanımlama, sistemi hidrojen durumuna benzetmektir. Pertürbe olarak çok büyük bir yapıya sahip olan itici elektron-elektron Coulomb terimleri tanımlaması yapılmadan çok-elektron Hamiltonyeni çok daha basit bir şekilde elde edilebilir. Çok elektronlu Hamiltonyeni tanımlayacak olursak,

$$H = H_o + H_1$$

$$H_o = \sum_{i=1}^{N} \left[-\nabla_i^2 - \frac{2Z}{r_i} \right]$$

$$H_1 = \sum_{j<i} \frac{2}{r_{ij}}$$

Burada H_1, açısal olmayan hareketten dolayı elektronlar arasında merkezi olmayan kuvvetlerden oluşur. Ancak elektronlar arası itme geniş bir küresel simetri bileşeni oluşturur. Bu durum ise etkin bir potansiyel durumunu gerektirir.

Her bir elektronun diğer bütün elektronlar üzerinde ortalama bir yük yoğunluğu ile etkili olduğu ve tek-elektron operatörüne sahip bir potansiyel enerji $V(r_i)$ fonksiyonuna sahip olduğu varsayımı yapılır ve bu yaklaşım çekirdek ve diğer N-1 elektronun oluşturduğu alan içersinde i. elektronun potansiyelini tanımlayan iyi bir yaklaşımdır. Atom içersindeki tüm elektronlar üzerinden toplam alındığında bu yük dağılımı küresel simetrik bir yapıya sahiptir.

H_0 ve H_1 içersinde tanımlanan elektron-çekirdek etkileşimi ve elektron-elektron itmesinden kaynaklanan her bir elektronun sahip olduğu etkin potansiyel sırasıyla açısal ve açısal olmayan kısımlara sahiptir. Şimdi elektron-çekirdek terimi Ze^2/r_i ile elektron-elektron ortalama açısal bileşenini toplanarak elde edebilen U(r) potansiyeline bakabiliriz. Böylelikle N-elektron Hamiltonyen yaklaşımı şu şekilde ifade edilebilir (Pradhan, 2011),

$$H = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(r) \tag{2.4}$$

$$U(r) = -\sum_{i=1}^{N} \frac{e^2 Z}{r_i} + \left\langle \sum_{i \neq j}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} \right\rangle \tag{2.5}$$

Burada U(r) merkezi alan potansiyelidir ve iki-elektron operatörüne herhangi bir bağımlılığı yoktur. Bu eşitlik ilk bakışta sert bir yaklaşım olarak görünmesine rağmen, bilinmesi gerekir ki Z büyüklüğü ile artış gösteren elektron-çekirdek potansiyel terimine Z /r ye sahiptir. Böylelikle her bir elektronun dalga fonksiyonu U(r) etkin potansiyelinin bilinmesi takdirde açısal eşitliği kullanılarak hesaplanabilir.

Açısal eşitliği atomik birimler kullanılarak ($e=m_e=a_0=\hbar=1$)

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}+E\right]P(r)=0 \tag{2.6}$$

Öncelikle bilinmesi gereken U(r) üzerindeki sınır şartları, atomik birimlerde (Pradhan, 2011),

$$U(r)/(2Ryd)=\begin{cases}-\dfrac{Z}{r} & r\to 0\\ -\dfrac{Z}{r} & r\to\infty\end{cases} \tag{2.7}$$

şeklinde ifade edilir.

Eşitlik (2.7) göz önüne alındığında U(r) potansiyeli seçimi için birçok farklı seçenek vardır. Yük dağılımının küresel simetrik olduğu varsayımına sahip olan oldukça kullanışlı olan Thomas-Fermi_Dirac-Amaldi (TFDA) bu yöntemlerden bir tanesidir. Elektronlar her bir hücreye iki elektron olacak şekilde biri spin yukarı ve diğeri spin aşağı olacak şekilde h^3 hacminin faz uzayında hücrelere yerleşecekleri söylenir. Bu hücreler maksimum ρF Fermi momentumuna kadar tamamen yerleştirilirler. Böylelikle elektronların uzaysal yoğunlukları

$$\rho=\frac{4/3\pi\rho_F^3}{h^3 2} \tag{2.8}$$

şeklinde tanımlanır.

Kuantum istatistiğine bağlı olarak TFDA modeli ϕ(x) sürekli fonksiyonunu şu şekilde tanımlar (Pradhan, 2011),

$$U(r)=\frac{Z_{eff}(\lambda_{nl},r)}{r}=-\frac{Z}{r}\phi(x) \tag{2.9}$$

Burada

$$\phi(x) = e^{-Zr/2} + \lambda_{nl}(1 - e^{-Zr/2}), \quad x = \frac{r}{\mu} \tag{2.10}$$

ve μ sabittir.

$$\mu = 0.8853\left(\frac{N}{N-1}\right)^{2/3} Z^{-1/3} \tag{2.11}$$

ϕ(x) fonksiyonu potansiyel eşitliğin çözümüdür.

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{x}}\phi(x)^{3/2} \tag{2.12}$$

Eşitlik (2.7) ϕ(x) üzerindeki sınır şartları ile,

$$\phi(0) = 1, \qquad \phi(\infty) = -\frac{Z - N + 1}{Z} \tag{2.13}$$

elde edilir. U(r) merkezi potansiyeli hesaplanarak, örneğin TFDA modeli kullanılarak, dalga fonksiyonu çözülerek $P_{nl}(r)$ tek-elektron yörüngeleri hesaplanabilir (Pradhan, 2011),

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2U(r) + \varepsilon_{nl}\right] P_{nl}(r) = 0 \tag{2.14}$$

Bu ifade hidrojenik durumlar için aynı sınır şartları durumunda r→0 ve r→∞ ve ($n - l + 1$) düğümleri için P_{nl} (r) açısal eşitliği ile benzerdir. İkinci dereceden açısal diferansiyel eşitliği sayısal olarak çözülebilmesine rağmen hidrojen durumunun aksine analitik olarak çözülemez. (2.14) eşitliği hem içten hem de dıştan integrasyonla iki çözümü uygun bir noktada eşitleyerek çözülebilir. **r**→0 olduğu için, dıştan çözümü bir seri açılımının ilk bir kaç kuvvetleri ile verilir. İçten çözüm r→∞ olduğundan dolayı asimtotik bölgeden başlar, bağlı bir durum için uygun olan Whittaker normalize fonksiyonları gibi üstel olarak dağılan fonksiyon kullanılarak P_{nl}(r) elde edilir (Pradhan, 2011),

$$W(r) = e^{-zr/\nu}\left(\frac{2zr}{\nu}\right)\left(1 + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{a_k}{r^k}\right)\mathrm{N} \tag{2.15}$$

Burada $v = z/\sqrt{\varepsilon}$ etkin kuantum sayısı ve ε öz değerdir. Katsayılar;

a_1= v $\{l(l+1) - v(v-1)\}1/2z$ (2.16)

a_k=a_k-1v $\{l(l+1) – (v-k)\ (v-k+1)\}1/2kz$ (2.17)

ve normalizasyon çarpanı,

$$N = \left\{ \frac{v^2}{z} \Gamma(v+l+1)\Gamma(v-1) \right\}^{-1/2} \quad ..(2.18)$$

Böylelikle tek-elektron spin-yörünge fonksiyonları hidrojenik forma benzer olarak düşünülebilir.

$$\begin{aligned} \psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\theta,\phi,m_s) &= \phi(r,\theta,\phi)\zeta m_s \\ &= R_{nl}(r)Y_{l,m_l}(\theta,\phi)\zeta m_s \\ &= \frac{P_{nl}(r)}{r} Y_{l,m_l}\zeta m_s \end{aligned} \quad (2.19)$$

P_{nl}(r) setlerinin sayısal olarak elde edilmesi durumunda spektroskopik durumlar için öz fonksiyonlar ve öz enerjiler elde edilebilir. Ancak burada Hartree-Fock yaklaşımı ve TFDA arasındaki ve ayrıca diğer merkezi-alan potansiyelleri arasındaki farkın vurgulanması önemlidir. Tek-elektron TFDA yörüngeleri serbest-elektron gazının istatistiksel davranışı kullanılarak türetilir ve böylece de Hartree-Fock metodunda bulunan kabuk-yapı durumunu göz ardı edilmiş olur. Yani: TFDA 1s yörüngeleri $1s^2$ veya 1s(1)2p(1) konfigürasyonunda aynı olarak değişmeden kalır. Ancak Hartree-Fock durumunda her bir konfigürasyon için farklıdır.

2.4. Atomik Süreçler

Spektral formalizm genel olarak atom-foton etkileşimlerine bağlıdır. Bununla beraber sıcaklık, yoğunluk ve elementlerin çokluğu gibi dış fiziksel şartlar gözlemlenen spektrumların hesaplanmasında büyük öneme sahiptir. Bu yüzden spektral analiz

oldukça karmaşıktır ve fiziksel etkilerin nasıl bir rol oynadığını anlamak zordur. Kuantum mekaniksel yaklaşım ilgili etkin faktörleri hesaba katmayı gerektirir.

Örneğin, düşük sıcaklık ve yoğunlukta sadece alçak seviyelerin uyarılabileceğini bekleriz ve bu durum genellikle kızıl ötesi (IR) ve optiksel yasaklı salınım çizgilerine neden olur.

Atomik süreçlerle ilgili olan temel atomik parametreler büyük bir çoğunlukla teorik olarak ve çok daha az ölçüde deneysel olarak hesaplanırlar. Atomik parametreler geçiş matris elemanından elde edilirler, geçiş matris elemanının genel formu şu şekildedir.

$$\left\langle \psi_f \left| H_{etk} \right| \psi_i \right\rangle \tag{2.20}$$

Eşitlikte ψ_i ve ψ_f sistemi tanımlayan başlangıç ve son kuantum mekaniksel dalga fonksiyonlarıdır. H_{etk} ise verilen süreç ile ilgili olarak etkileşim operatörünü temsil etmektedir. Serbest bir elektrona sahip olan bir süreç (e+iyon) sisteminin sürekli durumlarını kapsar. Sistem birçok başlangıç ve son durumuna sahipse geçiş matrisi ayrıca uygun dalga fonksiyonlarından da elde edilebilir.

2.5. Işımalı Geçişler

Bir atomun bağlı durumları arasında ışımalı bir geçiş foton soğrulması sayesinde (photo-excitation) elektron bir üst seviyeye veya uyarılmış seviyeye veya foton salınımı ile (de-excitation veya radiative decay) elektronun daha düşük bir seviyeye geçmesiyle gerçekleşir. Herhangi bir X atomu için bu süreç şu şekilde ifade edilebilir (Pradhan, 2011);

$$X + h\upsilon \Leftrightarrow X^* \tag{2.21}$$

Burada * üst simgesi uyarılmış seviyeyi göstermektedir. Uyarılmış seviye sonlu bir yaşam süresine sahiptir. Işımalı süreçler spektrumlarda özel bir enerjide soğurma ve salınım çizgilerini gösterirler. Gözlemlenen bir salınım veya soğurma çizgi şiddeti hem atomun sahip olduğu iç özelliklere hem de atomik sistemin bulunduğu ortamdaki dış şartlara bağlıdır. Bir spektrumu analiz edebilmek için gözlemlenen özelliklerin niteliksel doğasını ve aynı zamanda bunların ölçülen nicel şiddetlerini anlamamız gerekir. Bu özelliklerden ilkinin fiziği sıcaklık veya yoğunluk gibi dış faktörlerle birlikte düşünüldüğünde ikinci durumu hesaplamamıza olanak sağlar. Laboratuar şartlarındaki spektral oluşum astrofiziksel şartlarda karşılaşılan durumdan genellikle farklıdır.

Astrofiziksel veya spektroskopik dilde geçişler genellikle ‘izinli’, ‘yasaklı’ veya ‘ara sistem’ geçişleri olarak sınıflandırılırlar. Örneğin, birçok astrofiziksel kaynakta gözlemlenen bazı çizgilerden en önemlileri ‘yasaklı’ olarak belirtilir. Ancak bunun anlamının tam olarak bilinmesi gerekir. Bunun için ise fizik temelinin yanında kuantum mekaniksel kuralların bilinmesi çok önemlidir. Bu kurallar kullanılarak her bir geçiş türü için şiddet hesaplamaları yapılabilir. ‘Yasaklı’ demek bu tür geçişlerin gerçekleşmediği anlamından tamamen uzaktadır; bu çizgilerin gözlemlenmesinden ötürü bu geçişler kesinlikle gerçekleşmektedir. Daha doğrusu bu tür geçişlerin büyüklük derecesi izinli çizgilerle kıyaslandığında çok küçük kalmaktadır bu yüzden yasaklı çizgiler laboratuar koşullarında gözlemlenen izinli çizgiler ile kıyaslandığında oldukça zayıf karakteristiğe sahiptir. Fakat birçok astrofiziksel kaynakta, özelliklede H II bölgesinde (bulutsu gaz, süpernova kalıntıları, yıldızlar arası ortam) düşük olasılığa sahip olmalarına rağmen yasaklı geçişler baskın karakteristiğe sahip olan geçişlerdir. Bu tür kaynaklarda elektron sıcaklıkları 10.000 K (≈1 eV) veya daha düşüktür ve yoğunluklar laboratuar şartlarında oluşturulan yoğunluklardan genellikle daha azdır değeri ise 103 – 106 cm^{-3} civarındadır. Fiziksel şartlara bağlı olarak yasaklı çizgilerin nasıl izinli çizgiler kadar kolaylıkla oluşturulabildiğini görebiliriz.

Işımalı geçişlerin sınıflandırılması, sadece atomik özelliklere bağlı olan Einstein’ın çok iyi bilinen A ve B katsayıları ile tanımlanan geçiş oranına dayanmaktadır. Bu katsayılar kuantum mekaniksel olarak hesaplanmakta veya laboratuar koşullarında ölçülmektedir. Bununla beraber çizgilerin yoğunluğunun dış fiziksel şartlara bağlı olduğu unutulmamalıdır. Einstein geçiş olasılığı veya oranı kaynaktaki sıcaklık veya yoğunluk gibi dış etkilerden bağımsızdır.

Radyasyon alanındaki fotonlar atomda çeşitli geçişlere neden olabilirler. Kuantum mekaniksel olarak bu geçiş olasılıkları geçiş matris elemanı kullanılarak hesaplanır. Bu hesaplama geçiş matris elemanındaki başlangıç ve son durum dalga fonksiyonlarına ve ayrıca ışımalı alanın ortamına uygun olan moment operatörüne bağlıdır. Bu momentler genellikle izinli geçişlerle ilgili olan dipol momentler veya dipol olmayan veya yasaklı geçişlerle ilgili olan yüksek-dereceli multipoller olarak ifade edilir. Bunlara ek olarak, ışımalı geçişler başlangıç ve son durumların kuantize açısal ve spin momentumlarında belirtildiği gibi ilgili atomik durumların simetrileri ile şekillendirilir. Verilen geçiş türüne göre bu simetrilerin belirlenmesi seçim kuralları olarak adlandırılır (Pradhan, 2011).

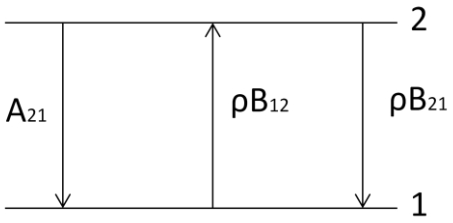
2.5.1. Einstein' ın A ve B katsayıları

Elektromanyetik ışımanın atomlarla etkileşimi ilk kuantizasyon olarak bilinen durum şeklinde düşünülebilir: enerji seviyeleri kuantizedir (ayrık), fakat ışıma alanı süreklidir. Yine ışımalı alanın kuantize olduğu ikinci kuantizasyon, QED (Kuantum Elektro Dinamiği) temsil eden, yüksek hassasiyet sağlar ancak çok daha ayrıntılı hesaplamalar gerektirir. QED seviyede doğruluk oranı birçok astrofiziksel durumlarda gerekli değildir.

$E_2 > E_1$ gibi iki atomik seviyenin basit bir hali ile başlanacak olursa geçiş enerjisi ayrık kuantum enerji ile verilir,

$$E_{21} = E_2 - E_1 = h\upsilon \tag{2.22}$$

Eski kuantum teoriye göre iki seviyeyle ilgili olarak Einstein üç farklı ışımalı süreç tanımlamıştır. Bu durum şekil 2.4.1 de gösterilmiştir (Pradhan, 2011).



Şekil 2.5.1. İki seviye arasında gerçekleşen üç ışımalı süreç.

(i) A_{21} katsayı olasılığı ile seviye 2 den 1 e kendiliğinden geçiş, (ii) ρ yoğunluğunda radyasyon alanından foton soğurma ve B_{12} geçiş katsayısı ile 1 seviyesinden 2'ye geçiş ve (iii) ise (ii) nin tersi yani B_{21} geçiş katsayısı ile uyarılmış salınım olarak tanımlanır. Burada seviyelerin g_1 ve g_2 ağırlığınca dejenere olduğu varsayılır. Yani g_i tane aynı enerjiye sahip durum vardır.

Denge durumunda, zamana-bağlı seviye nüfusu oran eşitliğini sağlar.

$$-\frac{dN_2}{dt} = \frac{dN_1}{dt} A_{21}N_2 - B_{12}\rho_{12}N_1 + B_{21}\rho_{21}N_2 \tag{2.23}$$

Yani seviye 2 deki nüfus kaybı seviye 1 deki kazanca eşittir. Sabit bir durum için

$$\frac{dN_2}{dt} = \frac{dN_1}{dt} = 0$$

olur. Böyle bir durumda

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}\rho(\upsilon)}{A_{21} + B_{21}\rho(\upsilon)} \tag{2.24}$$

Eşitliğini elde ederiz. Dış radyasyon alanının olmadığı bir durumda eşitlik;

$$\frac{dN_2}{N_2} = -A_{21}dt \tag{..(2.25)}$$

şeklini alacaktır ve bu eşitlikte aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$N_2(t) = N_2(0)e^{-A_{21}t} \tag{2.26}$$

Bu eşitlik uyarılmış seviye popülasyonunun zamanla üstel olarak bozunacağını göstermektedir. Bu oran seviye 2'nin yaşam süresini hesaplar (Pradhan, 2011).

$$A_{21} \equiv \frac{1}{\tau_2} \tag{2.27}$$

Bu yüzden Einstein A katsayısı zamanın tersi birimindedir, hidrojenik Lyα çizgisi için saniye başına 109 geçiş derecesinde bozunma oranı $A_{2p\text{-}1s} = 6.25.10^8\ s^{-1}$ dir. Bu değeri eşitlik (2.27) de kullanarak yaşam süresini yaklaşık olarak 1.6 *ns* olarak bulunur (Pradhan, 2011).

Şimdi birim zamanda atom başına salınım ve soğurma P_{21} ve P_{12} olasılıklarını için ifadeleri tanımlayalım.

$$-\frac{dN_2}{dt} = P_{21}N_2 - P_{12}N_1 \tag{2.28}$$

ve bu ifadeden yararlanarak

$$P_{sal} = A_{21} + B_{21}\rho(\upsilon) \; ve \; P_{eml} = B_{12}\rho(\upsilon) \tag{2.29}$$

ifadeleri elde edilir. Sabit-durum şartları altında $dN_2/dt = 0$ dır. Böylece

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}\rho(\upsilon_{21})}{A_{21} + B_{21}\rho(\upsilon_{21})} \tag{2.30}$$

ifadesi elde edilmiş olur.

Bu ifadeyi iki seviyeden daha fazla durum için genelleştirecek olursak detaylı denge kuramı her bir i seviyesi için $dN_i/dt = 0$ olmasını gerektirir. Bu durumda ifade,

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{B_{ij}\rho(\upsilon_{ij})}{A_{ji} + B_{ji}\rho(\upsilon_{ij})} \tag{2.31}$$

Herhangi bir ışıma alanı bulunmuyorsa, bu durumda (2.25) ve (2.26) eşitlikleri $i < j$ tüm seviyeler için şu şekilde genelleştirilebilir.

$$-\frac{dN_j}{dt} = \sum_{i<j} A_{ji} N_j \tag{2.32}$$

$$N_j(t) = N_j(0) e^{-\sum_i A_{ji} t} \tag{2.33}$$

Şimdi j seviyesinin her bir i seviyesine karşı yaşam süresi ifade edilebilir.

$$\tau_j = \left(\sum_i A_{ji} \right)^{-1} \tag{2.34}$$

Hidrojen için, *nl* durumunun yaşam süresi $\tau_{nl} \propto n^5$ şeklinde değişir ve *l*-ortalama yaşam süresi şu şekilde verilir (Pradhan, 2011).

$$\tau_n = \left(\frac{1}{n^2} \sum_l \frac{2l+1}{\tau_{nl}} \right)^{-1} \propto n^5 \tag{2.35}$$

Özel bir υ_{ij} frekansta $i \to j$ geçişi için katsayılar uyarılmış salınım olarak elde edilir.

$$B_{ji} = \left(\frac{c^3}{8\pi h \upsilon^3} \right) A_{ji} \tag{2.36}$$

Bu ifadelerden yola çıkarak

$$B_{ji} = \frac{\lambda_{ij}^{\ 3}}{8\pi h} A_{ji} = \frac{8.833 \times 10^{38} a_0^{\ 3}}{Ry.s} \left(\frac{\lambda_{ij}}{cm} \right)^3 A_{ij} \tag{2.37}$$

$$= 6.0048 \times 10^{24} A_{ji} \lambda_{ij}^{\ 3} \tag{2.38}$$

$$= 4.54161 \times 10^{9} \frac{A_{ji}}{\Delta E_{ij}^{\ 3}} \tag{2.39}$$

ifadeleri elde edilebilir (Pradhan, 2011).

Radyasyon alanının madde ile etkileşiminin yarı-klasik pertürbatif davranışı zamana-bağlı Schrödinger eşitliği kullanılarak aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\psi \tag{2.40}$$

Zaman ve uzaysal bağlılıklar ayrılabilir olduğu sürece, dalga fonksiyonu sabit durumlar veya atomun zamandan-bağımsız öz durumları yardımıyla yazılabilir. Atomun alanın durumlarından ziyade zamanla değişen durumlarıyla ilgilendiğimiz için eşitliği şu şekilde ifade edebiliriz;

$$\psi = \sum_n a_n(t) \psi_n e^{-iE_n t/\hbar} \tag{2.41}$$

Zamana bağlı $a_n(t)$ katsayılarıyla uzaya bağlı dalga fonksiyonu üzerinden sağlanarak;

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V \right] \psi_n = E_n \psi_n, \qquad \langle \psi_j | \psi_i \rangle = \delta_{ij} \tag{2.42}$$

ve diğer tüm durumlar için $a_n \neq i(0)=0$ iken t=0 da özel bir i durumu için $a_n(0)=1$ seçilir. Böylelikle $\left|a_j(t)\right|^2$ ifadesi atomun bir t zaman sonrasında j uyarılmış durumunda bulunma olasılığını ifade edecektir.

Etkileşim Hamiltonyeni uygulanan bazı radyasyon veya elektromanyetik alanlarında (B, E), v hızı ile hareket eden *–e* elektron yükünü de içinde barındırır.

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{B} = \nabla \times \vec{A} \tag{2.43}$$

Burada **A** vektör potansiyeli ve ϕ ise skaler potansiyeldir. Bu durumda Lorentz kuvveti ise;

$$\vec{F} = -e\left[E + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{B}\right] \tag{2.44}$$

şeklinde verilir. Radyasyon alanı zaman içinde periyodik düzlem dalgaların süper pozisyonu olarak düşünülebilir.

$$\vec{A} = \vec{A}_0[e^{i(wt-k.r)} + e^{-i(wt-k.r)}] \tag{2.45}$$

Burada w açısal frekans ve *k* ise dalga vektörüdür, bu yüzden;

$$E = -\nabla\phi + \frac{2w}{c}A_0 \sin(wt - \vec{k}.\vec{r}) \tag{2.46}$$

B manyetik alanı genellikle *E* elektrik alanından çok daha zayıftır ve böylelikle Lorentz kuvveti aşağıdaki şekliyle yazılabilir.

$$\vec{F} = -e\vec{E} = -e\nabla\phi - \frac{e}{c}\frac{\partial A}{\partial t} = -e\nabla\phi - \frac{\partial p_E}{\partial t} \tag{2.47}$$

Bu ifadeden yola çıkarak ışınımsal pertürbetif Hamiltonyen şu şekilde yazılabilir (Pradhan, 2011).

$$H = \frac{1}{2m}\left(p + \frac{eA}{c} \right)^2 + e\phi + V \tag{2.48}$$

Bu eşitliği Schrödinger eşitliğinde yerine yazacak olursak;

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e}{2mc} p.A + A.p + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 + e\phi + V \right] \psi \tag{2.49}$$

$\left[f(x), p_x \right]\psi = i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}\psi$ eşitliğini kullanarak $\vec{A}.p - p.\vec{A} = i\hbar \nabla.\vec{A}$ olduğu gösterilebilir. $\nabla.\vec{A} = 0$ seçimi ile yukarıdaki (2.49) eşitliği aşağıdaki şekline indirgenebilir.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{i\hbar e}{mc} A\nabla + A.p + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 + e\phi + V \right] \psi \tag{2.50}$$

Herhangi bir ek yükün olmadığını düşünelim, ϕ=0. A_2 ifadesi iki-foton sürecini tanımlamaktadır, ancak şuan elde edilen ifade için bu terimden gelen katkı göz ardı edilebilir. Böylelikle (2.40) eşitliğinde gösterilen elektromanyetik alanda Schrödinger eşitliği aşağıda gösterildiği şekliyle tekrardan yazılabilir.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e}{mc} A.p + V \right] \psi \tag{2.51}$$

Ancak burada unutulmaması gereken önemli bir nokta dış elektromanyetik alan güçlü olduğu durumlarda A_2 ifadesi büyük önem taşıyacaktır (Pradhan, 2011).

2.5.2. Işımalı geçiş olasılığı

Hamiltonyen ifadesini;

$$H = H_0 + H' \tag{2.52}$$

$$H_0 = p^2/2m + V \tag{2.53}$$

$$H' = e/mc\ (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) \tag{2.54}$$

şeklinde tanımlayabiliriz. Birinci-derece pertürbativ Hamiltonyen H' ile dalga fonksiyonu ifadesi $\psi = \sum_n a_n(t)\psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$ (2.40)' daki Schrödinger eşitliğinde yerlerine yazılırsa toplam Hamiltonyen aşağıdaki eşitlikteki gibi tanımlanır.

$$\sum_n \left[i\hbar \frac{da_n}{dt} + E_n a_n \right] \psi_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar} \right) = (H_0 + H') \sum_n a_n \psi_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar} \right) \tag{2.55}$$

Pertürbe olmayan Hamiltonyen $H_0\psi_n = E_n\psi_n$ eşitliğini sağladığından dolayı,

$$\sum_n \left(i\hbar \frac{da_n}{dt} \right) \psi_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar} \right) = \sum_n a_n H' \psi_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar} \right) \tag{2.56}$$

şeklinde yazabiliriz. H' ifadesinin çok küçük olduğunu varsayarsak $a_n(0)=1$ başlangıcı zamanla çok değişmeyecektir. Bu yüzden eşitliğin sağ tarafında a_n ($a_n(0)=1$, $a_n(\neq 0)=0$) yaklaşımını kullanabiliriz.

$$\sum_n i\hbar \frac{da_n}{dt} \psi_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar} \right) = H' \psi_i \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar} \right) \tag{2.57}$$

Burada $a_i(0)=1$. Ψj^* ile eşitliğin sol tarafı çarpılır ve uzay koordinatları üzerinden toplam alınırsa (Pradhan, 2011);

$$i\hbar \frac{da_j}{dt} \langle j | H' | i \rangle \exp\left[-\frac{i(E_j - E_i t)}{\hbar} \right] \tag{2.58}$$

Eşitliği elde edilir. Şimdi $(E_j - E_i) = \hbar w_{ji}$ yazılarak ve (2.45) eşitliğinde **A** sağlanarak

$$i\hbar \frac{da_j}{dt} = \left\langle j \left| \frac{e}{mc} A_0 . p e^{-i k.r} \right| i \right\rangle e^{-i(\omega_{ji}+\omega)t} + \left\langle j \left| \frac{e}{mc} A_0 . p e^{-i k.r} \right| i \right\rangle e^{-i(\omega_{ji}+\omega)t} \tag{2.59}$$

t=0 dan başlayarak t üzerinden toplam alınırsa;

$$a_j(t) = \left\langle j \left| \frac{e}{mc} A_0 . p e^{-i k.r} \right| i \right\rangle \left[\frac{1 - e^{-i(\omega_{ji}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{ji}+\omega)} \right] + \left\langle j \left| \frac{e}{mc} A_0 . p e^{-i k.r} \right| i \right\rangle \left[\frac{1 - e^{-i(\omega_{ji}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{ji}-\omega)} \right] \tag{2.60}$$

ifadesini elde ederiz. Ej > Ei olduğunu düşünürsek bu durumda $i \to j$ geçişi soğurma sürecini gösterecektir. Birinci terim ikinci terim ile kıyaslandığında küçük kaldığından dolayı ihmal edilebilir wji ≈ w. Böylelikle t zamanında geçiş olasılığı (Pradhan, 2011);

$$\left|a_j(t)\right|^2 = \left|\left\langle \frac{e}{mc} A_0 . p e^{ik.r} i \right\rangle\right|^2 \frac{\sin^2\left[\left\{(\omega_{ji} - \omega)/2\right\} t\right]}{\hbar^2 \left\{(\omega_{ji} - \omega)/2\right\}^2} \tag{2.61}$$

A_0 = eA_0 da E veya A_0 yönü boyunca polarizasyonun *e* birim vektörü ile birim zaman başına geçiş olasılığı şu şekilde yazılabilir.

$$\frac{\left|a_j(t)\right|^2}{t} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} A_0{}^2 \left|\left\langle j \left| \frac{\hat{e}.p}{mc} e^{i\,k.r} \right| i \right\rangle\right|^2 \delta(E_{ij} - \hbar\omega) \tag{2.62}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left|\langle j|H'|i\rangle\right|^2 \delta(E_j - E_i) \tag{2.63}$$

Birinci derecede, bu ifade H' pertürbe potansiyeli altında keyfi bir <i| durumundan <j| durumuna geçiş için birim zaman başına olasılık ifadesidir. Bu ifadeyi Fermi altın kuralını (Fermi's golden rule) kullanarak ifade etmek mümkündür.

$$T_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} \left|\langle j|H'|i\rangle\right|^2 n_j \tag{2.64}$$

Burada n_j, j son seviyenin yoğunluğu veya birim enerji başına durumların sayısıdır. Belirsizlik ilkesi sonrasında durumların enerji 'genişliği'

$$\Gamma_j = \hbar T_{ji} \tag{2.65}$$

Oto-iyonizasyon genişliği olarak tanımlanır.

Geçiş olasılığı için elde edilen ifade tek bir frekans üzerinden elde edildi. Alan enerjisi,

$$\mathrm{W} = \frac{1}{8\pi} \int_{\mathrm{V}} \left(\mathrm{E}^*.\mathrm{E} + \mathrm{B}^*.\mathrm{B}\right) d\mathrm{V} \tag{2.66}$$

şeklinde verilir. Burada A ifadesi tanımlanarak ve bazı bilinen kurallar kullanılarak,

$$W = \left(V / 2\pi c^2\right)\sum_k \sum_j \omega_k{}^2 \left|A_{kj}\right|^2 \tag{2.67}$$

ifadesi elde edilir. Burada k üzerinden toplam, tüm frekanslar üzerindendir ve j üzerinden toplam ise ışımanın tüm mümkün polarizasyonunu yansıtır. Bu bize ışıma enerji yoğunluğunu $\rho = W/V = (1/2\pi c^2)\omega^2 |A|^2$ şeklinde verir. ρ ifadesini olasılık eşitlik (2.62) ifadesinde kullanılarak,

$$\frac{\left|a_j(t)^2\right|}{t} = \frac{4\pi^2 c^2 e^2}{\hbar\omega^2}\left|\left\langle j\left|\frac{\hat{e}.p}{mc}e^{ik.r}\right|i\right\rangle\right|^2 \times \rho(\upsilon)\delta(E_{ij} - \hbar\omega) \tag{2.68}$$

elde edilebilir.

Frekansların dağılımı üzerinden toplam geçiş olasılığı şu şekilde yazılabilir,

$$P_{ij} = \int \frac{\left|a_j(t)\right|^2}{t} d\upsilon = \frac{4\pi^2 c^2 e^2}{\hbar^2}\left|\left\langle j\left|\frac{\hat{e}.p}{mc}e^{ik.r}\right|i\right\rangle\right|^2 \times \int \frac{\rho(\upsilon)}{\omega^2}\delta(\omega_{ij} - \omega)\frac{d\omega}{2\pi} \tag{2.69}$$

Soğurma sürecinde toplama gelen en önemli katkı $w=w_{ij}$ olduğu dar bölgeden gelmektedir. Bu yüzden yoğunluğun bu bölgede çok fazla değişmeyeceği varsayımı ile $w^2 = w_{ji}{}^2$ alınabilir yani $\rho(\upsilon) = \rho(\upsilon_{ji})$. Böylelikle geçiş olasılığı,

$$P_{ij} = 2\pi \frac{c^2 e^2}{h^2 \upsilon_{ji}{}^2}\left|\left\langle j\left|\frac{\hat{e}.p}{mc}e^{ik.r}\right|i\right\rangle\right|^2 \rho(\upsilon_{ji}) \tag{2.70}$$

şeklinde elde edilmiş olur. Bu ifade birim zaman başına birim atomda *i* ve *j* iki seviye arasında geçiş olasılığını belirtir. Görüldüğü gibi geçiş olasılığı ifadesi zamandan bağımsızdır.

Eşitlik (2.29) ile verilen B_{ij} soğurma katsayısı, bu durumda şu şekilde ifade edilebilir.

$$B_{ij} = P_{ij} / \rho(\upsilon) = 2\pi \frac{c^2 e^2}{h^2 \upsilon_{ji}{}^2}\left|\left\langle j\left|\frac{\hat{e}.p}{mc}e^{ik.r}\right|i\right\rangle\right|^2 \tag{2.71}$$

Bu ifade kutuplanmamış ışıma için ise şu şekilde ifade edilebilir.

$$B_{ij} = \frac{2\pi}{3}\frac{c^2e^2}{h^2\upsilon_{ji}^{\ 2}}\left|\left\langle j\left|\frac{p}{mc}e^{ik.r}\right|i\right\rangle\right|^2 \tag{2.72}$$

Dejenere olmayan seviyeler için $B_{ij} = B_{ji}$. A ve B katsayıları birbirleriyle orantılıdır bu yüzden herhangi birinin hesaplanması durumunda diğeri de hesaplanmış demektir.

Dipol ve dipol-olmayan geçişler genellikle sırasıyla izinli ve yasaklı geçişler olarak adlandırılırlar. Bu geçişler arasındaki en belirgin özellik geçiş oranlarındaki büyük mertebe farkıdır. Geçiş matris elemanları göz önüne alınırken uygun moment operatörünün seçimi gereklidir.

Elektrik dipol geçiş matris elemanı $e^{ik.r}$ üstel çarpanın ilk terimi olarak tanımlanmıştır. Bu yaklaşımın fiziksel konsepti basit düşünceler ışığında ortaya çıkmıştır. Işımanın meydana geldiği optiksel-UV bölgesinde dalga boyları yaklaşık olarak $\lambda\approx$103-104 Å değeri atomun Z/a_0 genişliği ile kıyaslandığında çok büyük kalmaktadır. Işıma dalga vektörünün $k = 2\pi/\lambda$ büyüklüğüne sahip olduğunu da göz önüne alarak,

$$ka \approx \frac{2\pi}{\lambda}\frac{a_0}{Z} = \frac{a_0}{Zhc}(E_j - E_i) < \frac{a_0}{Zhc}\frac{Z^2e^2}{a_0} = Z\alpha \approx \frac{Z}{137} \tag{2.73}$$

ifadesini elde edebiliriz. Burada Z^2e^2/a_0 ifadesi hidrojen-benzeri temel durum elektronun bağlanma enerjisidir. Şimdi B-katsayısı eşitlik (2.29) soğurma geçiş olasılığı için kuantum mekaniksel olarak tekrar yazılabilir;

$$P_{ij} = \frac{2\pi c^2e^2}{h^2\upsilon_{ij}^{\ 2}}\left|\left\langle j\left|m\frac{e.p}{mc}\right|i\right\rangle\right|^2 \rho(\upsilon_{ij}) \tag{2.74}$$

Elektrik vektörünün x-ekseni boyunca kutuplu olduğunu düşünelim. Bu durumda pertürbe olmayan atom için, moment operatörü Hamiltonyen H_0 yardımıyla yazılabilir.

$$\langle j|p_x|i\rangle = \left\langle j\left|m\frac{dx}{dt}\right|i\right\rangle = \frac{im}{\hbar}\langle j|H_0 x - xH_0|i\rangle \tag{2.75}$$

Komitasyon bağıntısı ile

$$[x_i, p_j]_\psi = x_i p_j\psi - (p_j x_i)\psi - (p_j\psi)x_i = -i\hbar\delta_{ij}\psi$$
$$\left[r, p^2\right] = p.[r, p] + [r, p].p = 2i\hbar p \tag{2.76}$$

$p^2 = 2m\,(H_0 - V)$, $[r, H_0] = i\hbar p/m$ değerlerini yerlerine yazabiliriz ve H_0 Hermityen bir operatör olduğundan;

$$\left\langle j\left|\frac{p_x}{mc}\right|i\right\rangle = \frac{i}{\hbar c}(E_j - E_i)\langle j|x|i\rangle = \frac{2\pi i}{c}\upsilon ji\langle j|x|i\rangle \tag{2.77}$$

ifadesi elde edilir. Burada $h\upsilon_{ji} = (E_j - E_i)$ dir. (x, y, z) için r yazarak;

$$\frac{e}{mc}\langle j|p|i\rangle = \frac{2\pi ie}{c}\upsilon_{ji}\langle j|r|i\rangle = \frac{2\pi i}{c}\upsilon_{ji}\langle j|D|i\rangle \tag{2.78}$$

Burada **D**=e**r** dipol moment operatörüdür. Şimdi birim zaman başına E_1 soğurma geçiş olasılığını tekrar yazabiliriz.

$$P_{ij}\,\frac{2\pi c^2}{h^2\upsilon_{ji}^2}\left|\left\langle j\left|\frac{e}{mc}\hat{e}.p\right|i\right\rangle\right|^2\rho(\upsilon_{ji}) = \frac{2\pi}{\hbar^2}\left|\langle j|\hat{e}.r|i\rangle\right|^2\rho_{ji} \tag{2.79}$$

ve soğurma B katsayısı ise

$$B_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\left|\langle j|\hat{e}.r|i\rangle\right|^2 = \frac{2\pi\, e^2}{h^2 m^2\upsilon_{ji}^2}\left|\langle j|\hat{e}.p|i\rangle\right|^2 \tag{2.80}$$

şeklinde ifade edilir. E_1 geçişler izinli geçişler olarak adlandırılmasına rağmen aslında gerçek anlamı radyasyon alanının multipol ifadesinde baskın olan ilk terimle ilgili olarak elektromanyetik geçişlerinden en güçlüsüdür. Ancak burada dikkat edilmesi gereken nokta unutulmamalıdır ki başlangıç ve son durumlar ancak ve ancak geçiş

matris elemanı ile bağlantılı olduğu sürece geçişler izinlidir. Buda durumların açısal ve spin simetrilerine ve seçim kuralarına bağlıdır. Geçiş matris elemanı fiziksel olarak özdeş ancak birçok farklı uygulamalarda kullanışlı olan nicelikleri elde etmemize olanak sağlar. Dipol yaklaşımına göre birim frekans başına ρ(υ) enerji yoğunluğunun elektrik dipol ışıma soğurma ile gerçekleşen, -x ekseni boyunca kutuplu olan birim zamanda i durumundan j durumuna geçiş olasılığı;

$$P_{ij} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2}\left|\langle j|x|i\rangle\right|^2 \rho(\upsilon_{ij}) \tag{2.81}$$

ve kutuplu olmayan ışıma için,

$$P_{ij} = \frac{2\pi e^2}{3\hbar^2}\left|\langle j|r|i\rangle\right|^2 \rho(\upsilon_{ij}) \tag{2.82}$$

şeklinde yazılır. Burada

$$\left|\langle j|r|i\rangle\right|^2 = \left|\langle j|x|i\rangle\right|^2 + \left|\langle j|y|i\rangle\right|^2 + \left|\langle j|z|i\rangle\right|^2 \tag{2.83}$$

şeklinde tanımlanır. Yarı-klasik yaklaşıma göre elektrik dipol ışıma ile gerçekleşen kendiliğinden salınım için birim zaman başına A_{ji} geçiş olasılığı şu şekilde elde edilebilir.

$$B_{ij} = \frac{Pij}{\rho(\upsilon)} = \frac{8\pi^3 e^2}{3h^2}\left|\langle j|r|i\rangle\right|^2 \tag{2.84}$$

Böylelikle Einstein A katsayısı olan ışımalı bozunma oranı (radiative decay rate) (Pradhan, 2011);

$$A_{ji} = \frac{8\pi\upsilon_{ji}^2}{c^3} h\upsilon_{ji} B_{ij} \frac{g_i}{g_j} = \frac{64\pi^4 e^2}{3hc^3}\upsilon_{ji}^3 \frac{g_i}{g_j}\left|\langle j|r|i\rangle\right|^2 \tag{2.85}$$

$$= \frac{4e^2}{3hc^3}\omega_{ji}^3 \frac{g_i}{g_j}\left|\langle j|r|i\rangle\right|^2 \tag{2.86}$$

kutuplu olmayan ışıma için $\omega_{ji} = 2\pi\upsilon_{ji}$. A_{ji} ayrıca geçiş olasılığı olarak isimlendirilir (birim zaman başına 'geçiş oranı' daha doğru bir tabir olmasına rağmen).
Optiksel dalga boylarında A için büyüklük tahmininde bulunabilmek için elektrik dipol ışımalarda izinli geçişler için $\left|\langle j|r|i\rangle\right|^2 \approx a_0^2$ yaklaşık değerini kullanabiliriz. Bu durumda A değeri şu şekilde ifade edilebilir (Pradhan, 2011).

$$A \approx \frac{w^3}{\hbar c^3}(ea_0)^2 \approx \alpha\omega^3\left(\frac{a_0}{c}\right) \propto 10^8 s^{-1} \tag{2.87}$$

$$\approx \alpha^3\omega^3\tau_0^2 \propto 10^8 s^{-1} \tag{2.88}$$

Hidrojen atomunun temel durumu karşısında ışığın seyahat süresi $2a_0/c$ dir. Buna karşın αc hızı ile hareket eden elektronun Rydberg süresi $\tau_0 \approx 50$ atto saniyedir (10^{-18} s). Atomik birimden cgs birim sistemine dönüşüm çarpanları:

$$A_{ji} = A_{ji}(au)/\tau_0 \ \ saniye^{-1}$$
$$\tau_0 = 2.419\times10^{-17} \ \ saniye \tag{2.89}$$

şeklinde verilir. Burada τ_0 ayrıca zamanın atomik birimi olarak bilinir. Geçiş matris elemanı polarizasyonun oryantasyonuna ve yönelimine ve bu yüzden de başlangıç ve bitiş durumlarının m_i, m_j manyetik kuantum sayılarına bağlıdır. Genel durumlar için alt seviyenin m_i de g_i-kez, üst seviyenin de m_j de g_j-kez dejenere olduğunu düşünürsek bu durumda her j durumundan bozunma oranı aynı olacaktır.

$$\sum_{m_i}\left|\langle jm_j|r|im_i\rangle\right|^2 = \sum_{m_i}\left|\langle j|r|i\rangle\langle jm_j|C^{[1]}_{m_j-m_i}|im_i\rangle\right|^2 \tag{2.90}$$

$C^{[1]}$ ifadesi bir cebirsel Clebsch-Gordon katsayısıdır. Her bir j değeri için A katsayısı i seviyesinin dejenere son seviyeleri üzerinden bir toplam ifade eder. Bu yüzden (Pradhan, 2011);

$$A_{ji} = \frac{4}{3}\frac{\omega_{ji}^3 e^2}{\hbar c^3}\sum_{m_i}\left|\left\langle jm_j\left|r\right|im_i\right\rangle\right|^2$$

$$= \frac{4e^2}{3m^2}\frac{\omega_{ji}}{\hbar c^3}\sum_{m_i}\left|\left\langle jm_j\left|p\right|im_i\right\rangle\right|^2 \qquad (2.91)$$

Böylelikle A_{ji} ifadesi hem uzunluk hem de hız formunda elde edilmiş olur.

Bir m_i dejenere alt seviyenin m_i durumuna ait olan g_i değerlerini ve aynı şekilde bir üst dejenere seviyenin m_j durumuna ait olan g_j değerlerini göz önünde bulunduralım. (2.78) eşitliğini kullanarak çizgi şiddeti ifadesini etkin alan veya 'çarpışma kesiti' (cross section) olarak tanımlayabiliriz (Pradhan, 2011).

$$S_{ji} = \sum_{m_j}\sum_{m_i}\left|\left\langle jm_j\left|r\right|im_i\right\rangle\right|^2 \qquad (2.92)$$

$$= \frac{1}{m^2\omega_{ji}^2}\sum_{m_j}\sum_{m_i}\left|\left\langle jm_j\left|p\right|im_i\right\rangle\right|^2 \qquad (2.93)$$

Çizgi şiddeti ifadesi indislerin değişmesi ile değişmeden kalır, yani simetriktir: Sji = Sij. Eşitlik (2.78) de olduğu gibi uzunluk ve hız formları **p** = i ħ∇ belirleyici operatöründen dolayı birbiri ile bağlantılıdır. Çizgi şiddeti ve A katsayısı arasında aşağıda gösterildiği gibi bir bağıntı vardır (Pradhan, 2011).

$$A_{ji} = \frac{4}{3}\frac{\omega_{ji}^3 e^2}{\hbar c^3}\frac{S_{ji}}{g_j} = \frac{2\alpha\omega_{ji}^3}{3\pi c^2}\frac{S_{ji}}{g_j} \qquad (2.94)$$

Osilatör şiddeti oldukça kullanışlı birimsiz, elektrik dipol geçişlere iki yerde uygulanabilen bir tepki fonksiyonudur. Osilatör şiddeti genellikle salınım şiddeti ile bağlantılı olan ışımalı soğurma şiddeti (absorption strengths) tanımlamada kullanılır.

$f_{ij} = -g_j / g_i\, f_{ji}$ (veya 'gf-değerleri' olarak $g_i\, f_{ij} = -g_j\, f_{ji}$)

Herhangi bir atomik sistemde, *i* atomik sistemin temel durumunu temsil etmek üzere soğurma osilatör şiddeti f_{ij} tanım olarak normalizedir ve toplam kuralını sağlar.

$$\sum_j f_{ij} = 1 \qquad (2.95)$$

Uyarılmış bir j durumu için, i düşük seviyelerine salınım ve aynı zamanda k yüksek seviyelerine soğurma tek-elektron toplam kuralı sağlandığında gerçekleşir.

$$\sum_{i,k}(f_{ji}+f_{jk})=1 \tag{2.96}$$

Bu ifadede f_{ji} negatif bir kesri ifade etmektedir. Genellikle, N elektronlarının hepsi foton-uyarma sürecinde bulunursa böylelikle toplam N e eşit olur ve aşağıdaki bağıntı elde edilebilir (Pradhan, 2011).

$$\sum_{i,k}(f_{ji}+f_{jk})=1 \tag{2.97}$$

Ortalama osilatör şiddeti tüm başlangıç dejenere durumlar ve tüm son durumlar üzerinden ortalama alınarak ifade edilebilir.

$$\bar{f}_{j,i}=\frac{1}{2l_i+1}\sum_{m_i}\sum_{m_j}f_{ij}(m_i,m_j)=\frac{2m}{3\hbar}\omega_{ij}\sum_{m_j}\left|\langle j|r|i\rangle\right|^2 \tag{2.98}$$

Genellikle yaygın olan gösterim şekli f üzerindeki çizginin ihmal edildiği durumlardır. Osilatör şiddeti ifadesini çizgi şiddeti ifadesi ile şu şekilde ifade edebiliriz (Pradhan, 2011),

$$f_{ij}=\frac{2m}{\hbar}\frac{\omega_{ij}}{3g_i}S_{ij}=\frac{1}{3g_i}\frac{E_j-E_i}{Ry}\frac{S_{ij}}{a_0^2} \tag{2.99}$$

$Ry=e^2/(2a_0), a_0=\hbar^2/(me^2)$ eşitliğinden yararlanarak boyutsuz f niceliği ve soğurma için B katsayısı arasında aşağıdaki gibi bir bağıntı yazılabilir;

$$B_{ij}=\frac{8\pi^3}{3h^3}\left|\langle j|D|i\rangle\right|^2=\frac{4\pi^2e^2}{h\upsilon_{ji}m}f_{ij} \tag{2.100}$$

Benzer olarak *i* atomik durumundan *j* atomik durumuna soğurma için A katsayısı ise,

$$A_{ji} = \frac{\alpha^3}{\tau_0}\frac{g_i}{g_j}\frac{(E_j - E_i)^2}{Ry^2} f_{ij} = 8.032\times10^9 \frac{g_i}{g_j}\left(\frac{E_{ji}}{Ry}\right)^2 f_{ij}\ s^{-1} \quad (2.101)$$

şeklinde elde edilebilir.

Hem M1 hem de E2 dipol-olmayan geçişler ışımalı alan operatöründe ikinci derece terimlerle ifade edildiği için yaklaşık olarak α^2Z^2 çarpanı kadar izinli E1 geçişlerinden daha küçüktür. Z artıkça yüksek-derecede geçişler daha olası hale gelir.

Bireysel geçiş oranları sadece Z durumuna göre değil aynı zamanda her bir geçişin özelliğine bağlı olarak çok büyük değişiklik gösterir. Olası bir geçiş mümkün olsun ya da olmasın bu durum daha çok başlangıç ve bitiş durumlarının açısal ve spin simetrilerine bağlıdır. Bu tür bağlantılar sırasıyla dipol ve dipol-olmayan geçişler için seçim kuralları ile yönetilir.

Tablo 2.5.2. Çok kutuplu λ derecelerinin ışımalı geçişleri için seçim kuralları: İzinli E1 dipol ve interkombinasyon E1 geçişleri sadece ΔS ile farklılık gösterir.

Tür	$\Delta\pi(E\lambda, M\lambda)$ $(-1)^{\lambda}, -(-1)^{\lambda}$	Δl	ΔS	$\Delta L(E\lambda, M\lambda)$ $\leq\pm\lambda, \leq\pm(\lambda-1)$	$L \neq L'$	$\Delta J(\Delta M)$ $\leq\pm\lambda(\leq\lambda)$	$J \neq J'$
İzinli Dipol (E1)	Evet	±1	0	$\leq\pm 1$	$0 \neq 0$	$\leq\pm 1$	$0 \neq 0$
İnterkombinasyon (E1)	Evet	±1	1	$\leq\pm 1$	$0 \neq 0$	$\leq\pm 1$	$0 \neq 0$
Yasaklı (M1)	Hayır	0	0	0		$\leq\pm 1$	$0 \neq 0$
Yasaklı (E2)	Hayır	0,±2	0	$\leq\pm 2$	$0 \neq 0, 1$	$\leq\pm 2$	$0 \neq 0, 1,$ $½ \neq ½$

Sonunda, kendiliğinden bozunma için elektrik kuadropol E2 ve manyetik dipol M1 A-katsayılarını tanımlayabiliriz;

$$g_j A_{ji}^{E2} = 2.6733\times10^3 s^{-1}(E_j - E_i)^5 S^{E2}(i, j) \quad (2.102)$$

$$g_j A_{ji}^{M1} = 3.5644\times10^4 s^{-1}(E_j - E_i)^3 S^{M1}(i, j); \quad (2.103)$$

ve elektrik oktupol E3 ve manyetik kuadropol M2 geçişleri için aşağıdaki bağıntılar kullanılır.

$$g_j A_{ji}^{E3} = 1.2050\times10^{-3} s^{-1}(E_j - E_i)^7 S^{E3}(i, j) \quad (2.104)$$

$$g_j A_{ji}^{M2} = 2.3727\times10^{-2} s^{-1}(E_j - E_i)^5 S^{M2}(i, j). \quad (2.105)$$

E2 ve M1 geçişlerinde olduğu gibi elektrik oktupol ve manyetik kuadropol geçişler çok-kutuplu eşitliğindeki aynı terimden ortaya çıkar. Ayrıca, geçiş olasılıkları *Z* iyon yükü ile değişiklikler gösterir. İzinli geçişlerin yasaklılara göre çok daha güçlü olmasına rağmen yasaklı geçişler Z nin artışı ile çok daha hızlı artar, $A_{E1} \sim Z^4$ ve $A_{M1} \sim Z^{10}$, $A_{E2} \sim Z^8$. Bu bağıntılardan da anlaşılabileceği gibi başta çok daha baskın olan E1 geçişler artan Z ile baskınlığını kaybeder ve yasaklı geçişler çok daha uygun hale gelir (Pradhan, 2011).

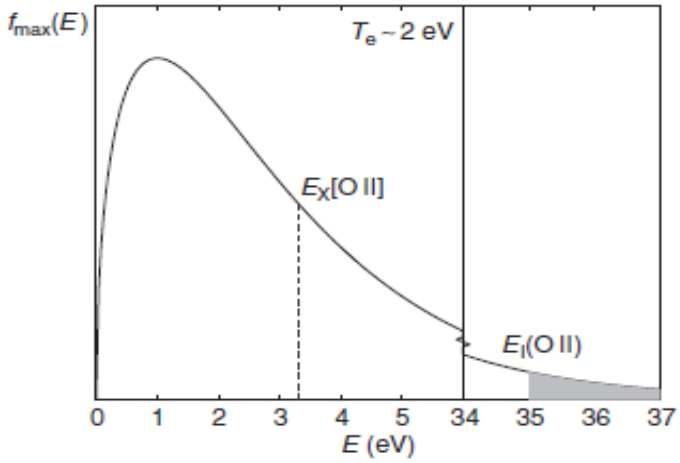
2.6. Elektron-İyon Çarpışmaları

İyonize plazmalarda spektral gösterim parçacık çarpışmaları veya ışımalı uyarmalardan kaynaklanır. Astrofiziksel durumlarda nükleer reaksiyon gibi her zaman bir enerji kaynağı vardır.

Elektronların iyonlarla çarpışmaları uyarılma veya iyonizasyon olarak sonuçlanır. İlk durum iyon içersindeki ayrık seviyeler arasındaki elektronun uyarılmasıdır, ikinci durum ise Şekil 2.5 de gösterildiği gibi elektronun sürekli seviyelere veya iyonize durumuna geçmesidir. Pratik olarak (e+iyon) uyarma süreçlerinin tam tanımlaması iyonlar üzerinde çarpışma bilgilerini gerektirir. Uyarma enerjisi temel seviyeden yüksek seviyelere doğru gidildikçe arttığı için E1 iyonizasyon enerjisi yaklaşır. Uyarılmış seviyenin negatif bağlanma enerjisi kabaca $E \sim -z^2/n^2$ olacak şekilde artar, burada z iyon yüküdür. $n \rightarrow \infty$, $E \rightarrow 0$, olduğu için elektron serbest hale gelir. Bu yüzden ilk bakışta verilen bir atomik sistem için spektrumlarının tam olarak yorumlarının yapılabilmesi için oldukça çok sayıda seviyeleri göz önüne alınılması gerektiği düşünülür. Prensipte bunun doğru olmasına rağmen, pratikte ise göz önüne alınan seviyeler öncelikle geçiş yada geçişlerin türüne daha sonra da gözlemlenen çizgilerin plazma çevresindeki fiziksel şartlara bağlıdır. Bu yüzden herhangi bir atomik modelde çarpışma süreçleri belirli seviyeler göz önüne alınarak tanımlanır. Işımalı geçişlerin aksine çarpışmalı geçişler parite kuralları ile sınırlandırılmazlar. Bu yüzden elektron-iyon çarpışmaları aynı pariteye sahip temel konfigürasyonların seviyeleri arasındaki düşük-seviye geçişlerinin uyarılması için birincil mekanizmadır, böyle bir durumda ışımalı geçişler iyonize gaz bulutlarında olduğu gibi oldukça küçük olasılık değerine sahiptir.

Çarpışma eşitliğinde iyonizasyon dengesini hesaplayabilmek için genellikle sadece iyonların temel durum toplam tesir kesitlerine ihtiyaç vardır (low-lying

metastable durumlar bazen çok önemli olabilir). Hem uyarma hem de iyonizasyon süreçleri spektral yorumlamada temel durumlar olmasına karşın, elektron-etkisi ile uyarma astrofiziksel olarak öneme sahip iyonlarda birçok özel seviyelerin uyarılma durumları için çok daha detaylı tesir kesitlerine ihtiyaç duymaktadır (Pradhan, 2011).



Şekil 2.6. Te = 2 eV veya 23.200 K kinetik sıcaklıkta elektron enerjilerinin Maxwellian dağılımı. O II nin uyarılma ve iyonizasyon enerjileri gösterilmektedir. [O II] 3726, 3729 yasaklı çizgilerine neden olan düşük seviyelerin uyarılma enerjileri iyonizasyon enerjilerinden çok daha düşüktür.

2.6.1. Elektron-etkisi ile uyarma

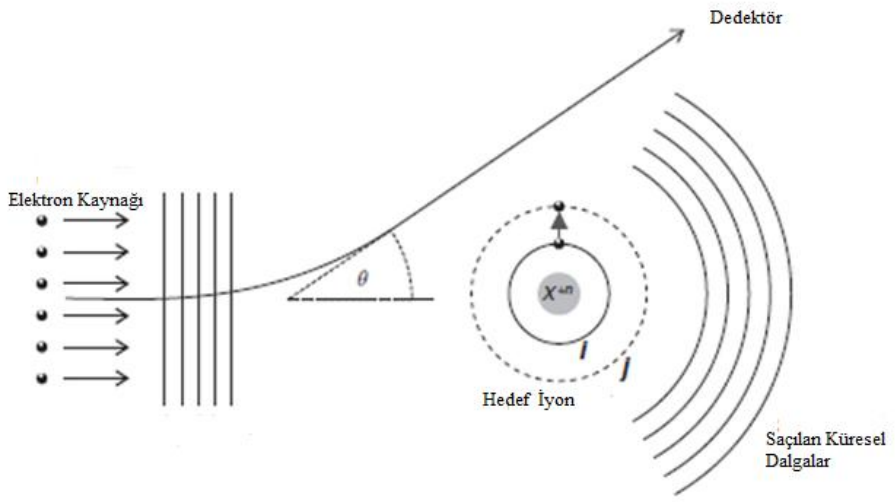
Hem (e+iyon) uyarmadan hem de (e+iyon) rekombinasyondan kaynaklanan spektral çizgiler yayımlanan spektrumlarda gözlenmektedir. Bu gözlemlenen çizgiler sıcaklık, yoğunluk, çokluk, hız ve astrofiziksel cisimlerin yapıları gibi özelliklerin göstergeleridir. Elektronlar tarafından seviyelerin uyarılması ışımalı bozunma ile takip edilir; bu iki süreç elektron-etkisi ile uyarma ve ışımalı geçişler fotonların önemli bir soğurma veya saçılma olmadan kurtulduğu optiksel olarak ince plazmalarda çarpışma sonucu gerçekleşen yayılım çizgilerinden sorumludur. Düşük seviyelerin uyarılması göz önüne alınıyorsa genellikle iyonda oldukça az sayıda seviyelerin göz önüne alınması yeterlidir. Ancak, bu seviyeler için EIE oran katsayılarının hesaplanmasında uyarılma tesir kesitlerinin, temel seviyeden ve aynı zamanda uyarılmış seviyeler arasında, tam olarak bilinmesi gerekir. Bu tesir kesitlerinin hesaplanmasında genel olarak teorik metotlar kullanılır. Deneysel ölçümler sadece bazı geçişler için belirle enerji aralığında yapılabilmesine rağmen, teorik hesaplamaların doğruluğuna ışık tutmasından dolayı oldukça önemlidir.

Elektronun iyon ile çarpışması (i) elastik saçılma – tüm enerji değişimi olmayan ya da (ii) elastik olmayan saçılma – elektron ve iyon arasında enerji değişimi, başlangıç seviyesinden enerji olarak farklı herhangi bir seviyeye uyarılma olarak tanımlanır. Spektral oluşumlar için veya (de-) uyarılma için iyonun seviyeleri arasında inelastik tesir kesiti hesaplamalarında genellikle (ii). durum göz önüne alınır. Şekil 2.6.1 şematik olarak elektron-iyon saçılmasını göstermektedir. Elektron, iyonik seviyeleri uyarmak için yeterince enerjiye sahipse, iyonun i seviyesinden j seviyesine uyarılmasından dolayı ΔE_{ij} gibi bir enerji transferi gerçekleşebilir. Gerçek bir durumda, laboratuar deneylerinde veya astrofiziksel ortamlarda elektronların sadece çok küçük bölümü inelastik saçılma gösterirken büyük bir bölümü iyondan elastik olarak saçılma gösterir. İsminden de anlaşılacağı gibi, tesir kesiti alan birimine sahiptir. En basit tanımlaması ise (Pradhan, 2011);

$$Q(E)=\frac{\text{Saçılan parçacık sayısı}}{\text{Birim alan başına olay içersindeki parçacık sayısı}}\,cm^2 \tag{2.106}$$

şeklinde tanımlanır. Laboratuar deneylerinde, kuantum mekaniksel etkiler saçılan elektronların sayısı veya akısı Şekil 5.2.1.1 de de gösterildiği gibi ölçümlerin yapıldığı andaki açıya bağlı olduğunu iddia eder. Elektronlar θ saçılma açısı yakınlarında w katı açısı ile saçılırlar, böyle bir durumda katı açı dw=sinθdθdϕ (burada ϕ azimuthal açı) şeklindedir. Böyle bir durumda kısmi diferansiyel tesir kesiti dQ, f(θ) saçılma genliği ile gösterilir.

$$\frac{dQ(E,\theta)}{d\omega}=\left|f(\theta)\right|^2 \tag{2.107}$$



Şekil 2.6.1. Pozitif bir iyonun i → j seviyeleri arasındaki elektron etkisi ile uyarılması.

EIE etkisi sonucunda çizgi oluşumu ile sonuçlanan çarpışma ve ışımalı süreçler boyutsuz nicelik olarak bilinen çarpışma şiddeti (ilk olarak D. M. Menzel tarafından tanımlanmış ve M. J. Seaton tarafından çarpışma şiddeti olarak isimlendirilmiştir Pradhan, 2011) gibi benzer durumlarda gözlemlenebilir, ışımalı geçişlerde görülen çizgi şiddeti gibi. Herhangi bir i seviyesinin j seviyesine uyarılmasında inelastik EIE tesir kesiti, ilk Bohr yarıçapında hidrojen atomu tesir kesiti biriminde, şu şekilde ifade edilir (Pradhan, 2011).

$$Q_{ij}(E) = \frac{\Omega_{ij}}{g_i k_i^2}(\pi a_0^2) \qquad (2.108)$$

Burada Ω_{ij} çarpışma şiddeti, gi=(2Si+1)(2Li+1) başlangıç seviyesinin istatistiksel ağırlığıdır, πa_0^2=8.797x10-17 cm^2 ve E=ki^2 Rydberg biriminde elektronun enerjisidir (1Ryd=13.61 eV). Ω_{ij} ayrıca i ve j durumuna göre çizgi şiddetinde olduğu gibi simetriktir. Elektron enerjisi E(Ryd)=k^2 bölünmesinden dolayı (relativistik olmayan limitlerde), çarpışma şiddeti enerji ile çok yavaş değişir. Böyle olduğu içinde sayısal değerleri tesir kesitine nazaran çok yavaş değişir ve bu da iyon içinde veya farklı iyonlar için farklı geçişlerin kıyaslanmasını çok daha kolay hale getirir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

Hesaplama kısmında kullanılan R-matrix ve WBEPM teori yöntemleri aşağıdaki şekilleriyle açıklanmıştır.

3.1. R-Matrix Kodları

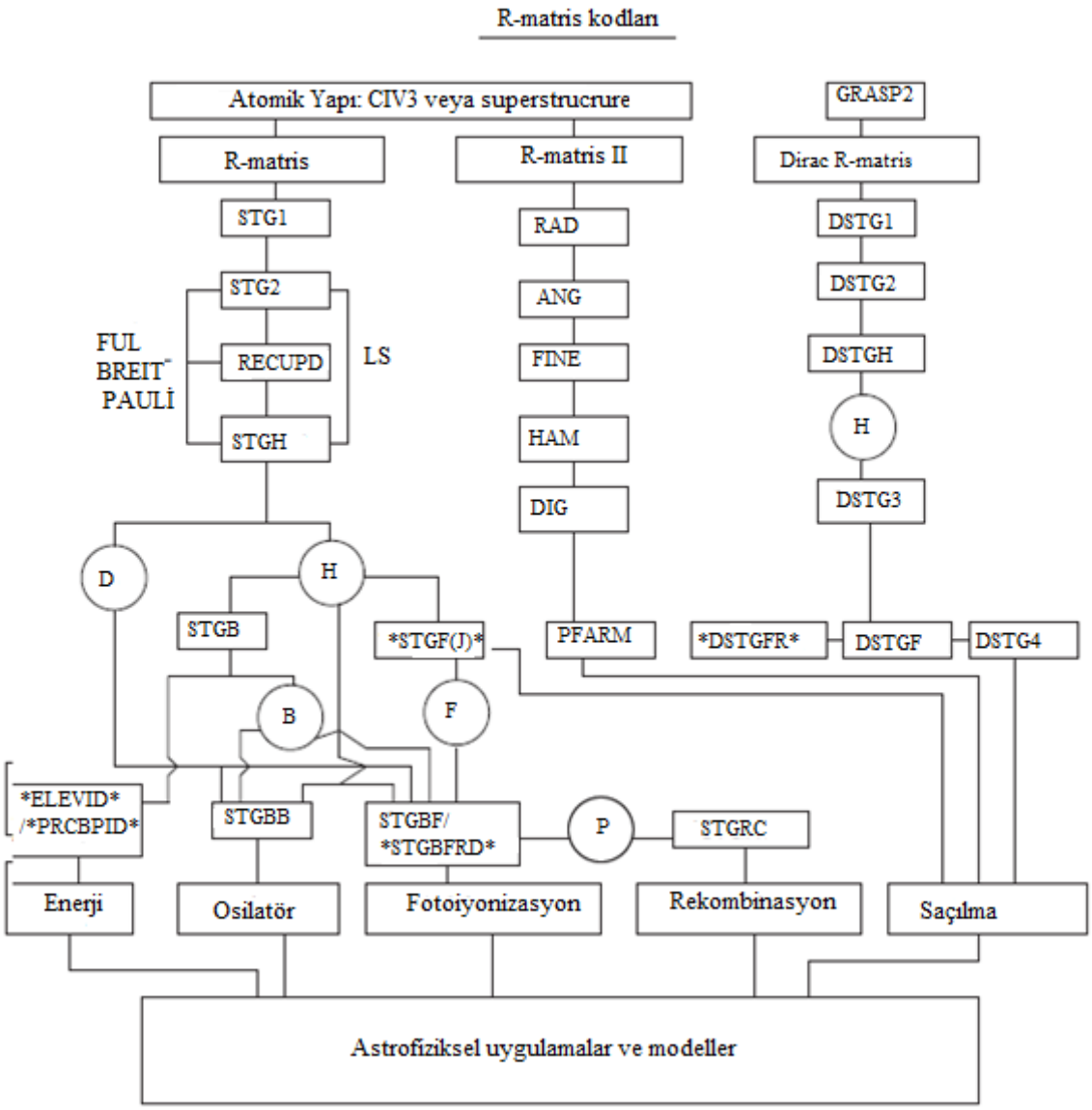
R-Matrix kodu bağlı ve serbest atomik dalgafonksiyonlarını ve (i) saçılma matrisi ve (ii) dipol (veya multipol) matris elemanları gibi temel nicelikleri hesaplamamıza olanak sağlar.

Diğer birçok bilgisayar programları da Close-Coupling uygulaması olarak geliştirilmesine rağmen R-matrix kodunun özelliklede geniş aralıkta en etkin metot olduğu ispatlanmıştır. R-matrix kodu Opacity ve Iron projelerinde neredeyse bütün atomik sistemler için ışımalı ve çarpışma CC (Close-Coupling) hesaplamalarında kullanılmıştır.

R-matrix hesaplamasında kullanılan dallarını ise (i) saf LS çiftlenimi, (ii) cebirsel dönüşümü ve limitli relativistik etkileşimleri barındıran LS çiftlenimi, (iii) relativistik etkileşimleri içeren Breit-Pauli R-matrix yöntemi (a) (e + iyon) Homiltonyen'inde sadece tek-cisim terimlerini içeren (b) 'ful' Breit-Pauli hesaplamalarında Breit etkileşiminin neredeyse bütün terimlerini içeren, (iv) R-matrix II kodunun cebirsel uygulamasında tüm LS terimlerinin göz önüne alınarak geliştirildiği yeni versiyonu, (v) dört-bileşenli dalga fonksiyonlu Dirac R-matrix (DARC) şeklinde sınıflandırabiliriz.

R-matrix ile elde edilebilen (N+1)-elektron Homiltonyen'inin matris köşegenleştirmesi uyarma ve fotoiyonizasyon tesir kesiti ve ışımalı geçiş olasılıkları gibi değerlerin elde edildiği atomik parametrelerle yakından ilişkilidir. $\psi_f(SL\pi;E)$ *ve* $\psi_{\mathbf{B}}(SL\pi;E')$ (e + iyon) dalga fonksiyonları hem E > 0 hem de E < 0 durumları için hesaplanabilir; ilk durum sürekli durumlarla ilgili olan elektron-saçılmasını, ikinci durum ise sisteme bağlı durumları göstermektedir. Z < 30 gibi orta dereceli yüklü durumlar için, Breit-Pauli R-matrix (BPRM) metodu bir çift-çiftlenim gösterimli $S_iL_l(J_i)l_i(K_i)s_i(J\pi)$ ara-sistem çiftlenim gerektirir. Her bir durumu temsil eden S_iL_l durumları J_i ince yapı seviyelerine yarıldığı için kanalların sayıları LS çiftlenimi durumunda olduğundan çok daha fazla sayıda artar fakat hesaplama sorunu da bekleneceği gibi daha da zorlaşabilir.

Şekil 3.9 da LS veya BP (ara-sistem çiftlenim) hesaplamaları, iki atomik yapı hesaplama kodları olan SUPERSTRUCTURE ve CIV3 ile ifade edilen N-elektron hedef durumlarının doğru konfigürasyon etkileşim gösterimine bağlıdır. Daha sonrasında STG1 ve STG2 ilk iki R-matrix kodu multipol integralleri ve cebirsel katsayıları üretmede ve (N + 1)-elektron Hamiltonyenini kurmada kullanılır. Hamiltonyen STGH kodu kullanılarak köşegenleştirilir; BP hesaplamalarında köşegenleştirme LSJ çiftlenimi kullanılarak RECUPD kodu ile gerçekleştirilir. R-matrix fonksiyon baz setleri ve dipol matris elemanları elde edildikten sonra bunlar bağlı durum dalga fonksiyonlarının elde edilebilmesi için STGB de, sürekli durum dalga fonksiyonları STGF, ışımalı geçiş olasılıkları STGBB ve STGBF de foto iyonizasyon tesir kesiti hesaplamalarında giriş dosyası olarak kullanılırlar.



Şekil 3.1. Şekilde görülen üç ana kol close-coupling kodunun farklı R-matrix versiyonları.

3.1.1. Ful Breit–Pauli R-matrix (BPRM) metot

Son zamanlara kadar R-matrix kodunun Breit-Pauli versiyonu sadece tek-cisim operatörlerini içermekteydi ve sonrasında kütle-hız, Darwin, ve spin-yörünge etkileşimleri dahil edilmiştir. Bu durum düşük –Z iyonları için bile yeterli değildir ve yüksek doğruluklar elde edebilmek için iki-cisim 'manyetik' terimleri dahil edilmelidir. Şimdi ise yapılması gereken bu tüm sekiz operatörün Breit-Pauli eşitliğine dahil edilmesidir.

$$H_{N+1}^{BP} = H_{N+1} + H_{N+1}^{mass} + H_{N+1}^{Dar} + H_{N+1}^{SO} + H_{OO} + H_{SSC} + H_{SS} + H_{SOO} \tag{3.1}$$

3.1.2. R-matrix II metodu

R-matrix formülasyonunda elektron-kolerasyon davranışını gösterebilmek için Burke ve arkadaşları N- ve (N+1)-elektron konfigürasyonlarının tam setlerini elde edilmek için yeni bir cebirsel algoritma geliştirdiler. R-matrix II kodu birçok iç bölgede atomik yarıçapın alt bölgeleri boyunca R-matrix yayıcısı tekniğini kullanılır. Bu alt bölgeler R-matrix sınırları ile sınırlandırılmış alt bölgelerdir. R-matrix bölgeleri uygun bir şekilde blok yayıcı matrislerine bölünmüştür. Şemasal olarak, s ve s-1 bölgeleri iki komşu bölgeyi gösterecek olursa böylelikle ilgili matrisler şu şekilde gösterilebilirler.

$$R_s = r_{ss} r_{ss-1} [r_{s-1s-1} R_{s-1}]^{-1} r_{s-1s}. \tag{3.2}$$

3.1.3. Dirac R-matrix (DARC) metodu

Ağır atomik sistemlerde BPRM ara-sistem çiftlenim yerine tam relativistik Dirac jj-çiftlenimini kullanmak çok daha doğrudur. Dört bileşen spinörleri yörünge dalga fonksiyonlarını tanımlamada kullanılırlar:

$$\psi_{n\kappa m_j} = \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_S \end{pmatrix} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \chi_{Km_j} P_{n\kappa}(r) \\ i_{\chi-\kappa m_j} Q_{n\kappa}(r) \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

Süreklilikteki elektronun geniş açısal bileşeni, P_i, sınır durumunda R-matrix yoluyla ifade edilebilir.

$$P_i(a) = \sum_j R_{ij}[2acQ_j(a) - (b + \kappa_j)P_j(a)]. \quad (3.4)$$

Tam relativistik Dirac R-matrix kodlarını (DARC) kullanarak hedef iyon öz fonksiyonlarını elde edilmek için GRASP2 olarak da bilinen Dirac formülasyonuna sahip relativistik bir atomik yapı kodu kullanılır. İç bölgede asimtotik BPRM kodları ile ara yüzeyleri kolaylaştırmak için DARC hesaplamaları bazen dört-bileşen spinörleri kullanır ancak dış bölgede iki-bileşen spinörleri büyük bileşenli PnK ile birlikte kullanılırlar. Bu durum bazı yüksek yüklü iyonlarda veya ağır elementlerde bazı yanlışlıklara neden olabilir. Q_nK küçük yarıçap bileşeninin etkisi birçok geçişte ve enerji bölgelerinde çok büyük bir öneme sahip olabilir.

3.2. En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori

Atomik ya da moleküler yapıların uyarılma ve iyonlaşma verileri bu yapılara ait birçok fiziksel özellik hakkında doğru bilgiler vermektedir. Serbest bir parçacığın iyonlaşma potansiyelinin tanımlanmasıyla birlikte En zayıf bağlı elektronun kabulü başlamaktadır (Thewlis, 1961). Zheng tarafından bu durum ilk defa, En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile ortaya atılmıştır (Zheng 1986, Zheng ve ark 2001-a,b,c). Çok elektronlu sistemlerde çeşitli atomik özelliklerin hesaplanması En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile hesaplanmaya başlamıştır (Zheng ve ark. 2000-b, Zheng ve Wang 2003, Ma ve ark. 2005, Zhang ve ark. 2009). Bu teori dinamik ardışık iyonlaşma, kuantum mekaniğinde sıfır enerji seçimi ve çok elektronlu bir sistemdeki elektronları en zayıf bağlı elektron ve en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak ayırma düşüncesi üzerine kurulmuştur (Zheng ve ark. 2004-c). Bir sistemde bulunan en zayıf bağlı olan elektronu uyarmak ve iyonlaştırmak en kolaydır. Bir atomun toplam dalga fonksiyonu, toplam enerjisi ve atomik enerji seviyeleri arasındaki geçişler gibi birçok özellik, sisteme en zayıf bağlı elektronun davranışıyla ilgilidir. Bununla birlikte karmaşık çok elektron problemi sisteme en zayıf bağlı olan tek bir elektronun basit analitik tek elektron problemine indirgenebilmektedir (Zheng ve ark. 2004-b,c).

Birinci iyonlaşma işleminde sistemden sadece tek bir elektron yani sisteme en zayıf bağlı bir elektron koparılabilir. Sistemdeki diğer elektronlar sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak adlandırılırlar. Bu yüzden iyonlaşma sürecine katılan sisteme en zayıf bağlı elektronun davranışı diğerlerinden farklı olacaktır. Bunun için sistemdeki tüm elektronları sisteme en zayıf bağlı bir elektron ve sisteme en zayıf bağlı

olmayan elektronlar olarak ayırmak anlamlıdır. En zayıf bağlı olmayan elektronlardan oluşan iyon çekirdeği ile çekirdek bir bütün olarak davranır ve en zayıf bağlı elektron iki çekirdek etkisinden kaynaklanan ortalama küresel simetrik bir potansiyelde hareket etmektedir. Dolayısıyla çok sayıda değerlik elektrona sahip sistemler tek elektronlu sistemler gibi göz önüne alınabilmektedir. Benzer kabuller çift uyarılma işleminde ya da alt kabuklardan olan geçişlerde de yapılabilir (Çelik 2005).

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

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{\beta}{r_i^2} \tag{3.5}$$

şeklinde verilen bir potansiyel alanda hareket eder. Bu potansiyelin ilk kısmı Coulomb potansiyelidir. Sisteme en zayıf bağlı elektronun dışındaki diğer elektronların perdelemesi en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisinden dolayı tam değildir. Bu sebeple, bu yöntemde potansiyel fonksiyonunun Coulomb teriminde bir etkin çekirdek yükü, Z^* kullanılır. Potansiyel alanın ikinci kısmı dipol potansiyelidir. En zayıf bağlı elektron atomik çekirdeği kutupladığından bir elektrik dipol moment oluşur. Oluşan bu elektrik dipol moment en zayıf bağlı elektronun davranışını etkiler.

Schrödinger denkleminde en zayıf bağlı elektronun toplam potansiyeli kullanılarak,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r_i)\right]\psi_i = \varepsilon_i \psi_i \tag{3.6}$$

ve gerekli dönüşümler yapılarak radyal denklem çözülüp β parametresi,

$$\beta = \frac{\left[d(d+1) + 2dl\right]}{2} \tag{3.7}$$

şeklinde türetilebilir. Bu durumda potansiyel,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{\left[d(d+1) + 2dl\right]}{2r_i^2} \tag{3.8}$$

olacak şekilde yeniden yazılır. Bu potansiyel Denk.(3.6)'da kullanılarak Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{-Z^*}{r_i} + \frac{d(d+1)+2dl}{2r_i^2} \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \tag{3.9}$$

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

En zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonu genel olarak,

$$\psi_i(r_i,\theta_i,\varphi_i) = R_{n^*l^*}(r_i)\ Y_{l,m}(\theta_i,\varphi_i) \tag{3.10}$$

şeklinde yazılır. Radyal denklemin çözümü sürecinde Denk.(3.6)'daki $\frac{l(l+1)}{2r^2}$ merkezcil potansiyelinin yerine $\frac{l^*(l^*+1)}{2r^2}$ ifadesi yazılmaktadır ve *d*' ye bağlı terim Denk.(3.11)'deki ikinci terimle gösterilmektedir. Hidrojen atomu problemine benzer olarak en zayıf bağlı elektron için tek elektron Schrödinger denkleminin çözümü,

$$\psi = N \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n-l-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right)\ Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{3.11}$$

şeklinde verilir. Burada N normalizasyon katsayısı olup,

$$N = \left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!}\Gamma(n^*-l^*+1)\right]^{-1/2} \tag{3.12}$$

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

$$l^* = l + d \tag{3.13}$$

$$n^* = n + d \tag{3.14}$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \tag{3.15}$$

şeklinde tanımlanmaktadır (Zheng 1977, 1986, 1987, Zheng ve Xin 1991, Zheng ve Li 1994, Zheng ve ark. 2000-a,d, 2001-a,b,c). Denk. (3.15) ile tanımlanan ε, en zayıf bağlı elektronun enerjisi olup buradaki $n*$ ise en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisinden kaynaklanan etkin baş kuantum sayısını göstermektedir. Atomik hacim arttıkça zayıf bağlı olmayan elektronlar çok daha kolay bozunur ve en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisi artar (Zheng ve ark. 2000-c). Sonuç olarak WBEPM teoriye göre, yarıçapın beklenen değerleri ve deneysel enerji verileri kullanılarak belirlenen bazı parametrelere göre Laguerre polinomunun bir fonksiyonu olarak ifade edilen elektronik radyal dalga fonksiyonu

$$R = \left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!}\Gamma(n^*-l^*+1)\right]^{-1/2} \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n-l-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right) \tag{3.16}$$

ifadesi ile verilir. Radyal fonksiyon için,

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 \, dr = 1 \tag{3.17}$$

normalizasyon şartı kullanılarak ve iki Laguerre polinomunun integral formülünden,

$$\int_0^\infty t^\lambda e^{-t} L_m^\mu(t) L_{m'}^{\mu'}(t) \, dt = (-1)^{m+m'} \Gamma(\lambda+1) \times \sum_k \binom{\lambda-\mu}{m-k} \binom{\lambda-\mu'}{m'-k} \binom{\lambda+k}{k} \tag{3.18}$$

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

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

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

$$\left[\frac{n_i^{*4}\,\Gamma(n_i^*+l_i^*+1)}{4Z_i^{*3}(n_i-l_i-1)!}\right]^{-1/2} \times \sum_{m_1=0}^{n_f-l_f-1} \sum_{m_2=0}^{n_i-l_i-1} \frac{(-1)^{m_2}}{m_1!m_2!} \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{m_1+m_2} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} + \frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{-m_1-m_2} x \quad (3.19)$$

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

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

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

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

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^*+1)}{2Z^*} \quad (3.20)$$

olarak bulunur. Denk. (3.15)'da verilen en zayıf bağlı elektronun ε enerjisinin negatifi, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisine eşit olup

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (3.21)$$

olarak tanımlanır. Denk. (3.19) radyal geçiş integrali ile atomik sistemlere ait osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve hayat süreleri gibi fiziksel özellikler hesaplanabilir. Radyal geçiş integralinin hesaplanmasında Z^*, n^* ve l^* parametrelerini belirlemek yeterlidir. Bu parametrelerin doğrudan teoriden hesaplanmasında bazı zorluklarla karşılaşıldığı bilinmektedir (Zheng ve ark.1999). Bunun için Zheng enerji değerleri için literatürdeki deneysel enerji verilerini kullanmayı ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin de literatürdeki teorik yöntemler kullanılarak belirlenebileceğini

önermiştir. Deneysel enerji değerleri günümüzde modern tekniklerle ölçülebildiğinden, literatürdeki değerler arasında önemli farklılıklar bulunmamaktadır. Seviyelerin yarıçaplarının beklenen değerleri ise NCA, Roothann-Hartree-Fock yöntemi "RHF", Multikonfigürasyonel Hartree-Fock yöntemi, Hartree-Slater yöntemi "HS", Hartree-Kohn-Sham yöntemi "HKS" ve Zamana bağlı Hartree-Fock "TDHF" yöntemi gibi birçok teorik yöntemle belirlenebilir (Desclaux 1969, Lindgard ve Nielsen 1975, 1977, Kundu ve Mukherje 1984, Theodosiou 1984, Viswanath ve Sen 1989, King 1991).

Z^*, n^* ve l^* parametrelerini En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride elde edebilmek için Denk. (3.20) ve Denk.(3.21) birlikte çözülür. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, hem düşük hem de yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçişler için etkili bir metottur. Bu metot ile geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve hayat süreleri gibi spektroskopik veriler diğer yöntemlere nazaran daha kısa zamanda ve karmaşık hesaplamalara girmeden kolaylıkla elde edilebilmektedir (Zheng ve ark. 2000, Fan ve Zheng 2004, Zheng ve Wang 2004-a, Zheng ve ark. 2004-b,c, Çelik 2005, Çelik ve ark. 2012-a,b, Çelik ve ark. 2013, Ateş 2010, Ateş ve ark. 2012-a,b, Yıldız ve ark., 2013).

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

4.1. Si IX İyonu İçin Enerji Seviyeleri

Hesaplamalarda başlangıç olarak Si IX iyonu için enerji seviyeleri relativistik Breit-Pauli yaklaşımını kullanan SUPERSTRUCTURE programı ile hesaplanmıştır. Tablo 4.1' de bu iyona ait hesaplanan enerji seviyeleri **National Institute of Standards and Technology (NIST)** den alınan deneysel enerji değerleri [Ralchenko, 2008] ile karşılaştırılmıştır. Tablo 4.1' den görüleceği gibi deneysel enerji değerlerine yakın sonuçlar elde edilmiştir, deneysel sonuçlarla bizim hesapladığımız değerler arasındaki ortalama uyum yaklaşık olarak ± %2,75 dir.

Hesaplanan enerji seviyelerinin doğruluğu, çalışmanın devamında hesaplanan diğer atomik yapı parametreleri ile doğrudan alakalı olduğu için, SUPERSTRUCTURE programından elde edilen çıkış dosyasını giriş dosyası olarak kullanan R-matrix metodu ile elde edilen sonuçların hassasiyetine ışık tutmaktadır.

Tablo 4.1. SUPERSTRUCTURE programı ile hesaplanan Si IX enerji değerleri (Ryd.)

Konfigürasyon	Terim	j	NIST	Super Structure
$2s^2 2p^2$	^3P	0	0.0000E+00	0.00000E+00
$2s^2 2p^2$	^3P	1	2.3192E-02	2.41229E-02
$2s^2 2p^2$	^3P	2	5.8449E-02	6.34389E-02
$2s^2 2p^2$	^1D	2	4.8230E-01	5.15065E-01
$2s^2 2p^2$	^1S	0	9.8234E-01	9.97213E-01
$2s2p^3$	^5S	2	1.3739E+00	1.32247E+00
$2s2p^3$	^3D	3	2.6630E+00	2.72141E+00
$2s2p^3$	^3D	2	2.6636E+00	2.71868E+00
$2s2p^3$	^3D	1	2.6649E+00	2.71840E+00
$2s2p^3$	^3P	2	3.1358E+00	3.19681E+00
$2s2p^3$	^3P	1	3.1348E+00	3.19455E+00
$2s2p^3$	^3P	0	3.1354E+00	3.19338E+00
$2s2p^3$	^1D	2	4.0132E+00	4.15468E+00
$2s2p^3$	^3S	1	4.0728E+00	4.19142E+00
$2s2p^3$	^1P	1	4.4903E+00	4.63289E+00
$2p^4$	^3P	2	6.1489E+00	6.29676E+00
$2p^4$	^3P	1	6.1902E+00	6.33867E+00
$2p^4$	^3P	0	6.2064E+00	6.35620E+00
$2p^4$	^1D	2	6.5566E+00	6.75750E+00
$2p^4$	^1S	0	7.4696E+00	7.70280E+00
$2s^2 2p3s$	^3P	2	1.4840E+01	1.48365E+01
$2s^2 2p3s$	^3P	1	1.4793E+01	1.47893E+01
$2s^2 2p3s$	^1P	1	1.4953E+01	1.49682E+01
$2s2p^2(4P)3s$	^5P	3	1.6315E+01	1.62637E+01
$2s2p^2(4P)3s$	^5P	2	1.6315E+01	1.62323E+01
$2s2p^2(4P)3s$	^5P	1	1.6266E+01	1.62105E+01
$2s^2 2p3d$	^1D	2	1.6349E+01	1.64035E+01
$2s^2 2p3d$	^3D	3	1.6507E+01	1.65469E+01
$2s^2 2p3d$	^3D	2	1.6485E+01	1.65258E+01
$2s^2 2p3d$	^3D	1	1.6477E+01	1.65171E+01
$2s^2 2p3d$	^3P	1	1.6557E+01	1.65964E+01
$2s^2 2p3d$	^3P	0	1.6563E+01	1.66019E+01
$2s^2 2p3d$	^1F	3	1.6747E+01	1.67964E+01
$2s^2 2p3d$	^1P	1	1.6754E+01	1.67842E+01
$2s2p^2(4P)3p$	^3S	1	1.6936E+01	1.68966E+01
$2s2p^2(4P)3p$	^3D	3	1.7305E+01	1.72972E+01
$2s2p^2(4P)3p$	^3D	2	1.7279E+01	1.72707E+01
$2s2p^2(2D)3s$	^3D	3	1.7470E+01	1.75016E+01
$2s2p^2(2D)3s$	^3D	1	1.7470E+01	1.75001E+01
$2s2p^2(4P)3d$	^5P	3	1.7970E+01	1.79362E+01
$2s2p^2(4P)3d$	^5P	2	1.7982E+01	1.79487E+01
$2s2p^2(4P)3d$	^5P	1	1.7990E+01	1.79564E+01
$2s2p^2(4P)3d$	^3P	2	1.7988E+01	1.8090E+01
$2s2p^2(4P)3d$	^3F	4	1.8133E+01	1.81424E+00
$2s2p^2(4P)3d$	^3F	3	1.8108E+01	1.81161E+01
$2s2p^2(4P)3d$	^3F	2	1.8090E+01	1.80970E+01
$2s2p^2(2D)3p$	^1F	3	1.8224E+01	1.83590E+01
$2s2p^2(2D)3p$	^1D	2	1.8311E+01	1.83918E+01
$2s2p^2(2D)3d$	^3D	3	1.9079E+01	1.91347E+01
$2s2p^2(2D)3d$	^3D	2	1.9079E+01	1.91324E+01
$2s2p^2(2D)3d$	^3D	1	1.9079E+01	1.91308E+01
$2s2p^2(2D)3d$	^3F	4	1.9965E+01	2.00105E+01
$2s2p^2(2D)3d$	^3F	3	1.9965E+01	1.99915E+01
$2s2p^2(2D)3d$	^3F	2	1.9965E+01	1.99448E+01
$2s^2 2p4d$	^3D	3	2.0653E+01	2.03438E+01
$2s^2 2p4d$	^3D	2	2.0633E+01	2.03406E+01

4.2. Si IX İyonu İçin Geçiş Olasılığı, Osilatör Şiddeti ve Uyarılmış Seviyelerin Yaşam Süreleri Hesaplamaları

Si IX iyonunda izinli elektrik dipol (E1) geçişler için geçiş olasılığı (Einstein A katsayısı), osilatör şiddetleri ve yaşam süreleri gibi bir çok atomik yapı parametresi hem SUPERSTRUCTURE hem de WBEPMT kullanılarak hesaplanmış, geçiş olasılıkları ile uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri literatürdeki deneysel ve teorik çalışmalardan elde edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Elde edilen sonuçlar Tablo 4.2.1 ve Tablo 4.2.2. de verilmiştir. Bu çalışmadan elde edilen sonuçların literatüdeki sonuçlarla iyi bir uyum içersinde olduğunu söyleyebiliriz.

4.3. Si IX İyonu İçin Elektron-İyon Çarpışma Süreçleri

Bu aşamada Si IX iyonu için elektron-iyon çarpışma durumları göz önüne alınarak daha önceki bölümlerde bahsedilen ve astrofiziksel olarak teorik çalışmalarda büyük bir öneme sahip olan çarpışma şiddetleri (collision strengths) ve etkin çarpışma şiddetleri (effective collision strengths) veya Maxwelllian ortalama çarpışma şiddetleri (Maxwellian averaged collision strengths) hesaplamaları R-matrix metodu kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

Bu bölümdeki çalışmada elektron enerjisi ile değişiklik gösteren çarpışma şiddeti ve sıcaklığa bağlı olan etkin çarpışma şiddeti hesaplamalarında daha önceki çalışmalar göz önüne alınarak çok daha hassas enerji aralıkları seçilerek elektron-iyon çarpışma durumları çok hassas bir şekilde ele alındığı için daha önce yapılan çalışmalardan daha iyi sonuçlar elde edildiği düşünülmektedir.

Si IX iyonu oldukça fazla uyarılmış bir duruma sahip olduğu için çalışmalar 100 Ryd enerji seviyesine kadar sürdürülmüştür. Ancak belirli bir enerji değerinden sonra katkıların neredeyse olmadığı saptanmıştır. Bu bölümde çarpışma şiddetleri ve etkin çarpışma şiddetleri hesaplamaları temel seviye arasındaki geçişler (Elektrik Kuadropol (E2) ve Manyetik Dipol (M1) yasak geçişler) ve temel seviye ve diğer yüksek uyarılmış seviyeler (yine yasaklı geçişler) arasındaki geçişlerde gerçekleştirilmiştir. İlgili tablolarda karşılaştırmaların daha rahat bir şekilde yapılabilmesi için daha önceki sonuçlar bu çalışma sonuçları ile birlikte şekil 4.3.1 – 4.3.8 ile verilmiştir.

Tablo 4.2.1. Si IX iyonunun izinli geçişleri (E1) için osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları (Hz).

Konfigürasyonlar			Terimler	g_i	g_k	Bu Çalışma			Ralchenko (2008)	Aggarwal (1986)	Jönsson (2011)
						S Structure (f)	S Structure (A)	WBEPMT (A)			
$2s^22p^2$	-	$2s2p^3$	^{3}P - ^{5}S°	9	5				2.05e+05		
				3	5	6.91E-06	5.44e+04		6.19e+04	6.64e+04	6.33e+04
				5	5	1.10E-05	1.36e+05		1.43e+05	1.54e+05	1.46e+05
			^{3}P - ^{3}D°	9	1				2.31e+09		
				5	3	4.13E-04	3.82e+07		3.69e+07	3.92e+07	3.64e+07
				1	3	8.38E-02	1.62e+09		1.49e+09	1.62e+09	1.49e+09
				3	3	1.65E-02	9.47e+08		8.77e+08	9.48e+08	8.76e+08
				5	5	7.64E-03	4.24e+08		4.00e+08	4.27e+08	3.92e+08
				3	5	6.19E-03	2.11e+09		1.94e+09	2.11e+09	1.94e+09
				5	7	6.13E-02	2.43e+09		2.24e+09	2.41e+09	2.24e+09
			^{3}P - ^{3}P°	9	9				5.99e+09		
				1	3	7.85E-02	2.10e+09		1.94e+09	2.10e+09	1.91e+09
				5	3	1.94E-02	2.50e+09		2.28e+09	2.43e+09	2.26e+09
				3	5	2.81E-02	1.34e+09		1.23e+09	1.33e+09	1.21e+09
				3	1	2.81E-02	6.68e+09		6.07e+09	6.60e+09	6.08e+09
				3	3	2.54E-02	2.01e+09		1.84e+09	2.00e+09	1.83e+09
				5	5	6.66E-02	5.16e+09		4.71e+09	5.07e+09	4.69e+09
			^{3}P - ^{1}D°	9	5				5.75e+07		
				5	5	4.31E-04	5.69e+07		5.46e+07	5.51e+07	5.91e+07
				3	5	3.99E-05	3.22e+06		2.88e+06	2.95e+06	2.96e+06
			^{3}P - ^{3}S°	9	3				3.68e+10		
				1	3	9.44E-02	4.35e+09		4.04e+09	4.25e+09	4.01e+09
				3	3	9.56E-03	1.30e+10		1.21e+10	1.27e+10	1.20e+10
				5	3	9.96E-02	2.23e+10		2.07e+10	2.17e+10	2.05e+10
			^{3}P - ^{1}P°	9	3				6.94e+07		
				1	3	5.86E-06	3.31e+05		3.52e+05	1.61e+02	3.94e+05
				5	3	1.38E-05	3.79e+06		2.06e+06	9.64e+04	2.64e+06
				3	3	4.45E-06	7.47e+07		6.70e+07	5.76e+07	7.29e+07
$2s^22p^2$	-	$2s^22p3s$	^{3}P - ^{3}P°								
				1	3	6.04E-02	3.61e+10	3.45E+10	3.84e+10		
				5	5	4.60E-02	8.22e+10	7.41E+10	8.75e+10		
				3	3	1.49E-02	2.66e+10	2.58E+10	2.81e+10		
				5	3	1.56E-02	4.64e+10	4.28E+10	4.89e+10		
				3	5	2.55E-02	2.75e+10	2.48E+10	2.94e+10		
			^{3}P - ^{1}P°	9	3				1.61e+09		
				5	3	3.43E-05	1.04e+08		2.11e+08		
				3	3	3.25E-04	5.96e+08		8.79e+08		
				1	3	4.87E-04	2.98e+08		5.21e+08		
$2s^22p^2$	-	$2s^22p3d$	^{3}P - ^{1}D°	9	5				2.08e+10		
				3	5	1.36E-02	1.79e+10		1.88e+10		
				5	5	1.14E-03	2.48e+09		2.04e+09		
			^{3}P - ^{3}D°	9	15		1.21e+09		1.06e+12		
				5	3	3.28E-04	2.95e+11	2.91E+09	1.27e+09		
				3	3	3.36E-01	1.06e+12	4.40E+11	3.03e+11		
				5	7	7.26E-01	3.59e+10	1.04E+12	1.09e+12		
				5	5	1.62E-01	7.51e+11	2.62E+11	3.64e+10		
				1	3	1.01E+00	9.43e+11	5.88E+11	7.68e+11		
				3	5	7.05E-01	1.13e+09	7.91E+11	9.64e+11		

Tablo 4.2.1. Devamı

Konfigürasyonlar			Terimler	g_i	g_k	Bu Çalışma S Structure (f)	Bu Çalışma S Structure (A)	Bu Çalışma WBEPMT (A)	Ralchenko (2008)	Aggarwal (1986)	Jönsson (2011)
			^{3}P - ^{3}P°	9	9				6.78e+11		
				3	5	8.36E-04	1.12E+09	1.45E+09	1.70e+09		
				5	3	7.5E-02	2.80E+11	2.41E+11	2.88e+11		
				5	5	5.08E-01	6.81e+11	4.34E+11	6.98e+11		
				3	1	9.06E-02	6.11E+11	5.81E+11	6.26e+11		
				3	3	1.13E-01	3.09E+11	1.45E+11	3.16e+11		
				1	3	7.07E-02	5.31E+08	1.94E+011	5.42e+10		
			^{3}P - ^{1}F°	9	7				1.12e+08		
				5	7	2.36e+09	2.30e+08		1.12e+08		
			^{3}P - ^{1}P°	9	3				3.44e+09		
				3	3	1.02E-03	2.36e+09		1.26e+09		
				5	3	1.60E-04	6.11e+08		4.71e+07		
				1	3	1.16E-03	8.98e+08		2.13e+09		
$2s^22p^2$	-	$2s2p^2(^4P)3p$	^{3}P - ^{3}S°	9	3				2.62e+11		
				5	3	3.55E-02	1.36e+11		1.45e+11		
				1	3	4.40E-02	3.40e+10		2.93e+10		
				3	3	3.97E-02	9.22e+11		8.73e+10		
			^{3}P - ^{3}D°								
				5	7	1.36E-01	2.35e+11		2.24e+11		
				5	5	1.76E-02	4.23e+10		5.57e+10		
				3	5	1.33E-01	1.923+11		1.68e+11		
$2s^22p^2$	-	$2s^22p4d$	^{3}P - ^{3}D°								
				5	5	6.77E-02	2.39e+11	9.71E+10	9.45e+10		
				3	5	7.20E-03	1.53e+10	2.93E+11	2.85e+11		
				5	7	1.37E-01	3.46e+11	3.91E+11	3.80e+11		
$2s^22p^2$	-	$2s2p^3$	^{1}D - ^{3}D°	5	15				2.89e+06		
				5	7	1.87E-04	5.11e+06		5.19e+06	5.55e+06	5.49e+06
				5	3	1.27E-05	8.10e+05		7.11e+05	8.79e+05	7.15e+05
				5	5	2.76E-05	1.05e+06		9.82e+05	1.04e+06	1.05e+06
			^{1}D - ^{3}P°	5	9				2.38e+06		
				5	5	1.64E-05	9.27e+05		8.27e+05	6.01e+05	9.85e+05
				5	3	6.19E-05	5.82e+06		5.76e+06	6.38e+06	6.10e+06
			^{1}D - ^{1}D°	5	5	1.86E-01	1.94e+10		1.77e+10	1.90e+10	1.77e+10
			^{1}D - ^{3}S°	5	3				3.30e+06		
				5	3	4.14E-05	5.87e+06		3.30e+06	9.90e+05	3.79e+06
			^{1}D - ^{1}P°	5	3	1.13E-01	2.53e+10		2.31e+10	2.50e+10	2.28e+10
$2s^22p^2$	-	$2s^22p3d$	^{1}D - ^{1}D°	5	5	1.39E-01	2.88E+11		2.76e+11		
			^{1}D - ^{3}D°	5	15				1.20e+09		
				5	5	1.52E-03	3.21E+09		3.28e+09		
				5	3	1.40E-04	4.92E+08		4.97e+08		
				5	7	6.27E-6	9.43E+06		1.04e+07		
			^{1}D - ^{3}P°	5	9				5.52e+09		
				5	5	4.40E-03	9.31E+09		9.54e+09		
				5	3	1.75E-04	6.20E+08		6.62e+08		
			^{1}D - ^{1}F°	5	7	8.74E-01	1.35E+12		1.34e+12		
			^{1}D - ^{1}P°	5	3	1.06E-01	3.84E+10		3.84e+10		

Tablo 4.2.1. Devamı

Konfigürasyonlar			Terimler	g_i	g_k	Bu Çalışma			Ralchenko (2008)	Aggarwal (1986)	Jönsson (2011)
						S Structure (f)	S Structure (A)	WBEPMT (A)			
$2s^22p^2$	-	$2s2p^2(^2D)3p$	^1D - $^1F°$	5	7	1.41E-01	2.61E+11		2.85e+11		
			^1D - $^1D°$	5	5	9.53E-02	2.43E+11		3.32e+11		
$2s^22p^2$	-	$2s2p^3$	^1S - $^3D°$	1	1				7.28e+04		
				1	3	6.00E-05	4.59e+05		3.64e+05	4.09e+05	4.02e+05
			^1S - $^3P°$	1	9				6.23e+05		
				1	3	1.76E-04	2.21e+06		1.87e+06	2.15e+06	2.00e+06
			^1S - $^3S°$	1	3				5.15e+06		
				1	3	2.10E-04	5.60e+06		5.15e+06	3.84e+06	5.82e+06
			^1S - $^1P°$	1	3	1.84E-01	6.38e+09		5.80e+09	6.71e+09	5.82e+09
$2s^22p^2$	-	$2s^22p3s$	^1S - $^3P°$	1	9				2.04e+08		
				1	3	7.09E-04	3.69e+08		6.11e+08		
			^1S - $^1P°$	1	3	7.83E-02	4.18e+10		4.20e+10		
$2s2p^3$	-	$2p^4$	$^5S°$ - ^3P	5	9				3.92e+06		
				5	3	9.67E-06	3.19e+06		2.39e+06	2.88e+06	2.85e+06
				5	5	3.32E-05	6.47e+06		5.62e+06	6.64e+06	6.58e+06
$2s2p^3$	-	$2s2p^2(^4P)3s$	$^5S°$ - ^5P	5	15				9.18e+10		
				5	3	2.79E-02	8.42E+10		9.12e+10		
				5	5	4.66E-02	8.46E+10		9.16e+10		
				5	7	6.55E-02	8.51E+10		9.21e+10		
$2s2p^3$	-	$2s2p^2(^4P)3d$	$^5S°$ - ^5P	5	15				1.21e+12		
				5	7	7.36E-01	1.18E+12		1.20e+12		
				5	3	3.23E-01	1.21E+12		1.21e+12		
				5	5	5.23E-01	1.18E+12		1.21e+12		
$2s2p^3$	-	$2p^4$	$^3D°$ - ^3P	15	9				1.49e+10		
				3	5	2.29e+08	2.29e+08		2.05e+08	2.49e+08	2.04e+08
				3	3	4.48e+09	4.48e+09		4.04e+09	4.91e+09	3.99e+09
				5	5	2.95e+09	2.95e+09		2.65e+09	3.21e+09	2.62e+09
				3	1	1.60e+10	1.60e+10		1.45e+10	1.76e+10	1.42e+10
				5	3	1.18e+10	1.18e+10		1.07e+10	1.29e+10	1.05e+10
				7	5	1.36e+10	1.36e+10		1.23e+10	1.49e+10	1.21e+10
			$^3D°$ - ^1D	15	5				8.23e+07		
				3	5	5.53e+05	5.53e+05		3.96e+05	8.94e+05	5.20e+05
				7	5	7.19e+07	7.19e+07		6.86e+07	6.22e+07	7.12e+07
				5	5	1.31e+07	1.31e+07		1.33e+07	1.25e+07	1.39e+07
			$^3D°$ - ^1S	15	1				3.07e+06		
				3	1	3.77e+06	3.77e+06		3.07e+06	7.20e+06	3.46e+06
$2s2p^3$	-	$2s2p^2(^2D)3s$	$^3D°$ - ^3D	15	5				1.28e+11		
				3	3		8.71E+10		9.60e+10		
				3	5		2.17E+10		1.92e+10		
				5	5		8.02E+10		8.89e+10		
				5	3		2.90E+10		3.20e+10		
				5	7		1.80E+10		1.42e+10		
				7	5		1.84E+10		1.99e+10		
				7	7		1.09E+11		1.14e+11		

Tablo 4.2.2. Si IX için uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri (sn)

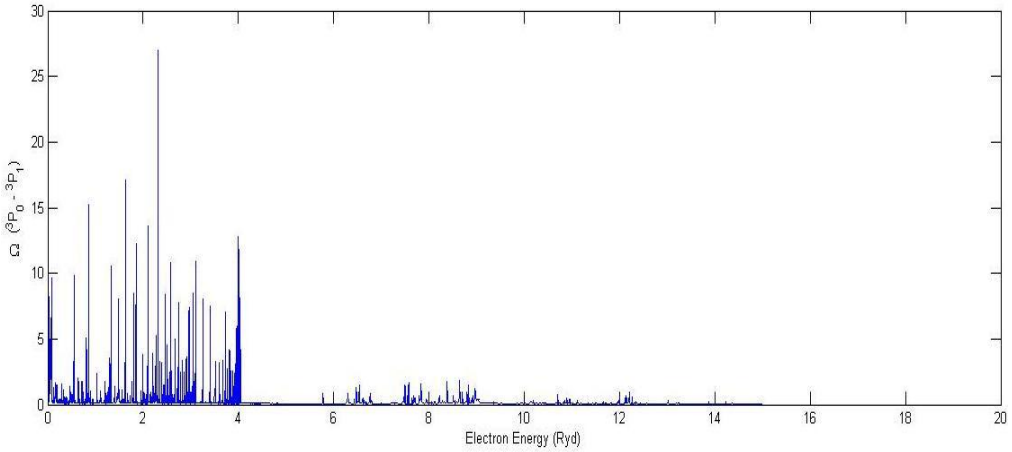
Konfigürasyon	Terim	J	Bu Çalışma		Tashiev (2001)	Trabert (1988)	Mendoza (1999)
			SuperStructure	WBEPMT			
1s(2)2s(2)2p(2)	^{1}S	0	4.64E-03				
1s(2)2s2p(3)	$^{5}S^{o}$	2	4.40E-06		4.36E-06	5.88E-06	4.76E-06
1s(2)2s2p(3)	$^{3}D^{o}$	3	4.21E-10		4.274e−10		
1s(2)2s2p(3)	$^{3}D^{o}$	2	4.04E-10		4.096e−10		
1s(2)2s2p(3)	$^{3}D^{o}$	1	3.94E-10		3.990e−10		
1s(2)2s2p(3)	$^{3}P^{o}$	1	1.55E-10		1.396e−10		
1s(2)2s2p(3)	$^{3}P^{o}$	0	1.54E-10		1.446e−10		
1s(2)2s2p(3)	$^{3}P^{o}$	2	1.58E-10		1.409e−10		
1s(2)2s2p(3)	$^{1}D^{o}$	2	5.45E-11		5.461e−11		
1s(2)2s2p(3)	$^{3}S^{o}$	1	2.66E-11		2.654e−11		
1s(2)2s2p(3)	$^{1}P^{o}$	1	3.33E-11		3.383e−11		
1s(2)2s(2)2p3s	$^{3}P^{o}$	0	9.09E-12	9.67E-12	8.614e−12		
1s(2)2s(2)2p3s	$^{3}P^{o}$	1	9.23E-12	6.68E-12	8.385e−12		
1s(2)2s(2)2p3s	$^{3}P^{o}$	2	9.33E-12	1.01E-11	8.430e−12		
1s(2)2s(2)2p3s	$^{1}P^{o}$	1	5.73E-12	5.68E-12	5.306e−12		
1s(2)2s(2)2p3d	$^{3}F^{o}$	2					
1s(2)2s(2)2p3d	$^{3}F^{o}$	3					
1s(2)2s(2)2p3d	$^{3}F^{o}$	4					
1s(2)2s(2)2p3p	^{3}D	1	2.21E-10		2.840e−10		
1s(2)2s(2)2p3p	^{3}D	2	2.25E-10		2.831e−10		
1s(2)2s(2)2p3p	^{3}D	3	2.28E-10		2.873e−10		
1s(2)2s(2)2p3p	^{3}P	0	3.44E-11		5.580e−11		
1s(2)2s(2)2p3p	^{3}P	1	3.56E-11		5.780e−11		
1s(2)2s(2)2p3p	^{3}P	2	3.48E-11		5.638e−11		
1s(2)2s(2)2p3p	^{1}P	1	2.31E-10		3.169e−10		
1s(2)2s(2)2p3p	^{1}S	0	6.38E-11		7.780e−11		
1s(2)2s(2)2p3p	^{1}D	2	1.36E-10		1.907e−10		
1s(2)2s(2)2p3p	^{3}S	1	6.89E-11		9.137e−11		
1s(2)2s(2)2p(2P)3d	$^{3}P^{o}$	2	1.49E-12		1.437e−12		
1s(2)2s(2)2p(2P)3d	$^{3}P^{o}$	1	1.61E-12		1.534e−12		
1s(2)2s(2)2p(2P)3d	$^{3}P^{o}$	0	1.69E-12		1.612e−12		
1s(2)2s(2)2p(2P)3d	$^{1}F^{o}$	3	7.63E-12		7.617e−13		
1s(2)2s(2)2p(2P)3d	$^{1}P^{o}$	1	1.20E-12		1.239e−12		

Etkin çarpışma şiddeti hesaplaması çarpışma şiddeti hesaplamasından yararlanılarak Maxwellian dağılım fonksiyonu kullanılarak hesaplanmıştır (Pradhan, 2011).

$$\gamma = \int_0^\infty \Omega_{ij}(\varepsilon_j) e^{-\varepsilon_j / kT} d(\varepsilon_j / kT) \tag{4.1}$$

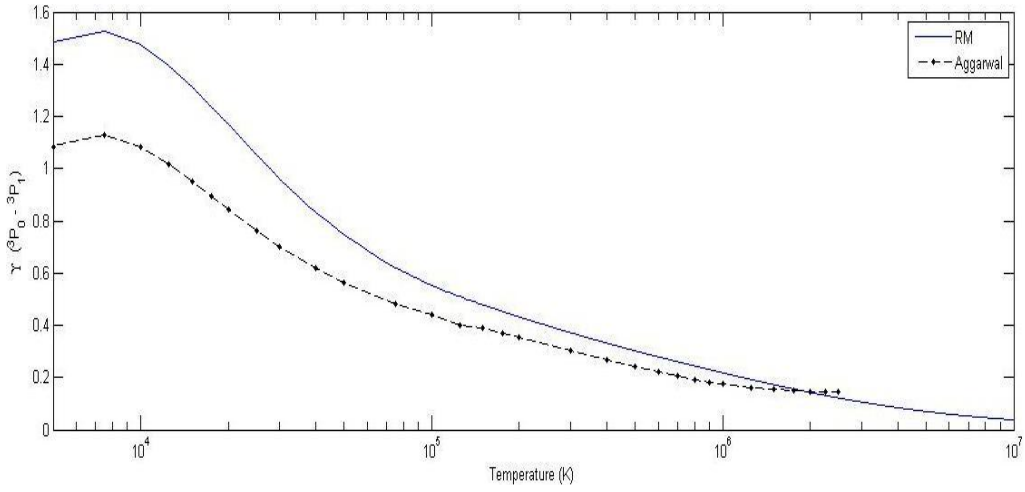
Burada Ω elektronun i seviyesinden j seviyesine geçerken görülen çarpışma şiddeti, ε_j üst seviyenin enerjisi, k Boltzman sabiti ve T, Kelvin birimi cinsinden sıcaklıktır.

Bu çalışmadan elde edilen bulgular şu şekildedir.



Şekil 4.3.1. Si IX iyon hedefinin elektron ile çarpışması sonucu kızıl ötesi bölgesinde görülen yasaklı $^3P_0$ - $^3P_1$ geçişinin karakteristiği.

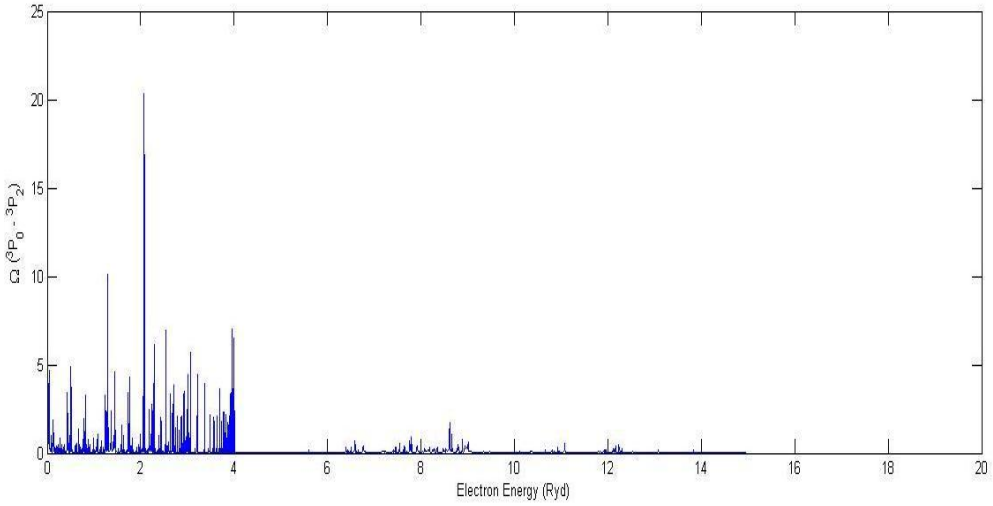
Yine bu geçiş için etkin çarpışma şiddeti ise şu şekildedir.



Şekil 4.3.2 Si IX iyonunun sıcaklığa bağlı etkin çarpışma şiddetinin değişim grafiği.

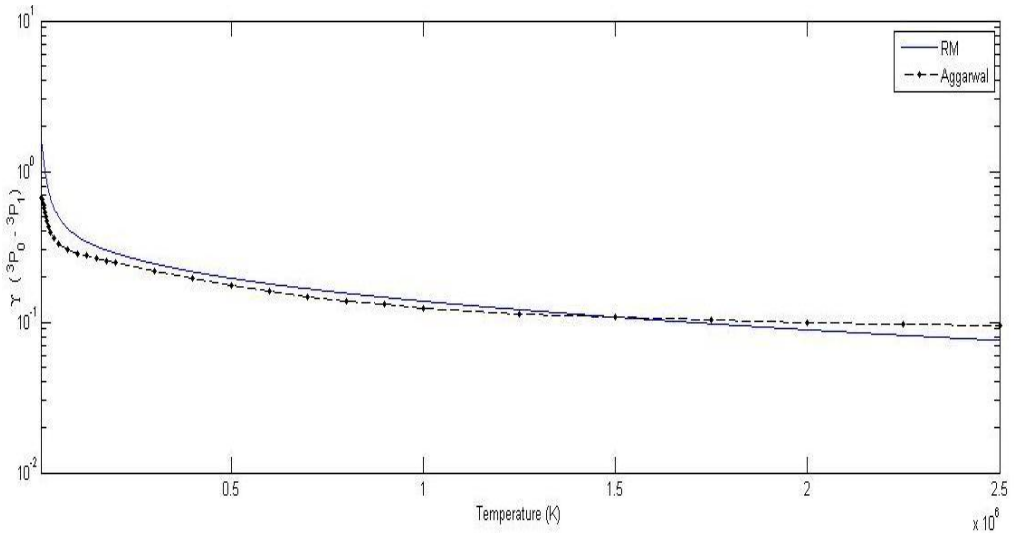
Şekil 4.3.2. deki grafik' den görüldüğü gibi ilgili geçiş için elde edilen sonuç daha önce (Aggarwal ve ark. 1983) tarafından elde edilen sonuçla uyum içersindedir. İyonun yüksek uyarılmış durumundan dolayı şekilden de anlaşılacağı gibi Si IX iyonunun çarpışma şiddetlerinin oldukça yüksek sıcaklıktaki plazmalarda görülebileceği tahmin edilebilir.

Diğer bir temel seviyeler arasındaki geçiş olan $^3P_0$ - $^3P_2$ yasaklı geçişi için ise durum aşağıdaki şekil 4.3.3. de gösterilmiştir.



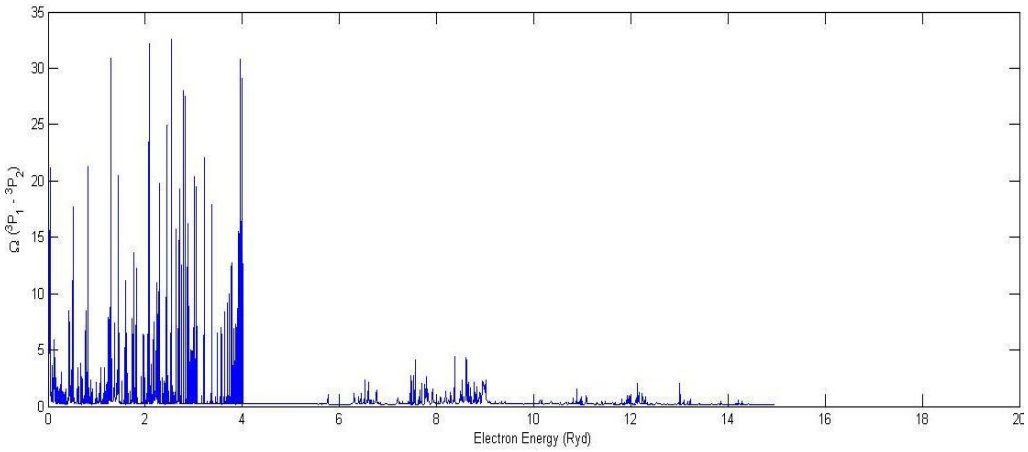
Şekil 4.3.3 Si IX iyon hedefinin elektron ile çarpışması sonucu kızıl ötesi bölgesinde görülen yasaklı $^3P_0$ - $^3P_1$ yasaklı geçişinin karakteristiği.

Aynı geçiş durumu için etkin çarpışma şiddeti,



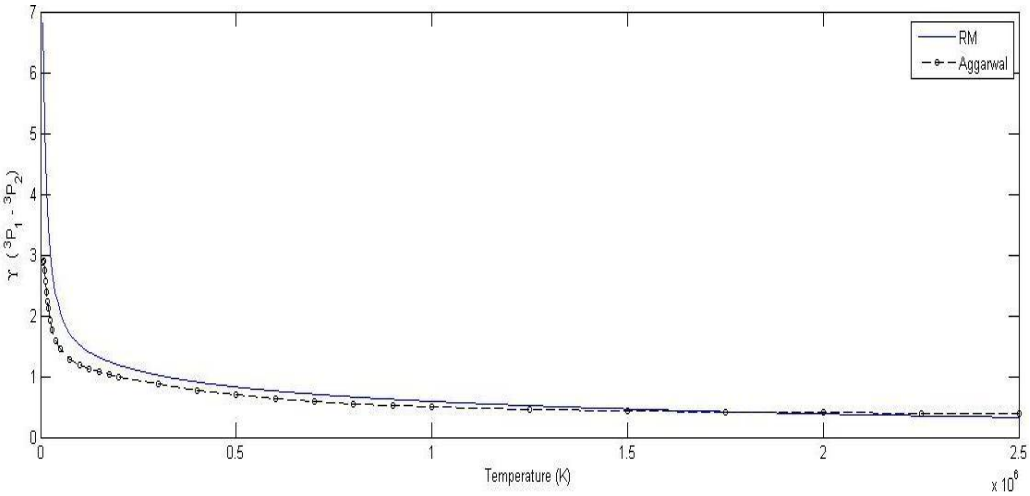
Şekil 4.3.4. Si IX iyonunun sıcaklığa bağlı etkin çarpışma şiddetinin değişim grafiği.

Diğer bir temel seviye arasındaki geçiş olan $^3P_1$ - $^3P_2$ geçişi için elde edilen durumlar,



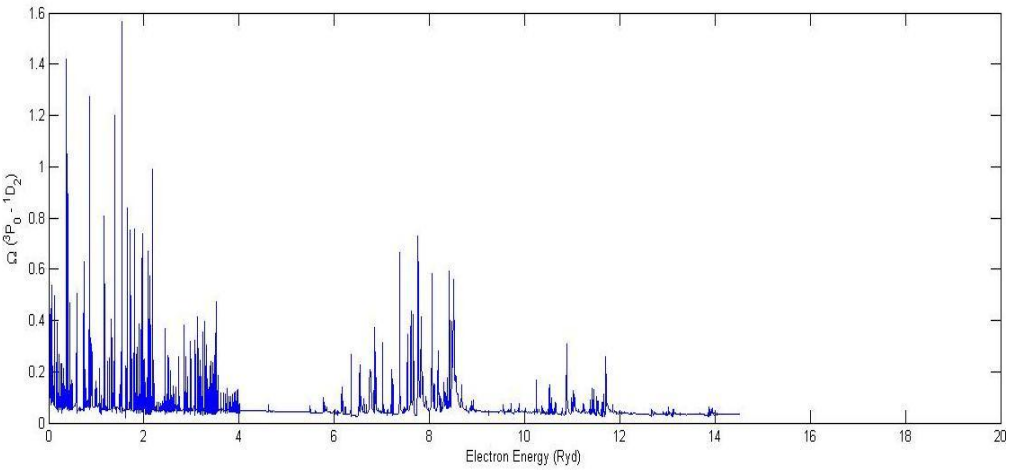
Şekil 4.3.5 Si IX iyon hedefinin elektron ile çarpışması sonucu kızıl ötesi bölgesinde görülen yasaklı $^3P_1$ - $^3P_2$ geçişinin karakteristiği.

Bu geçiş için elde edilen etkin çarpışma şiddeti sonucu ise aşağıdaki gibi elde edilmiştir.



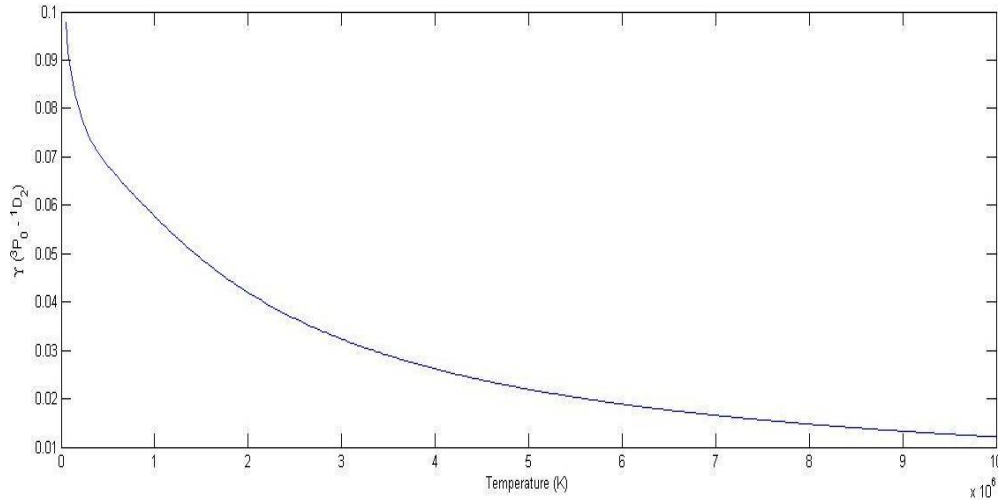
Şekil 4.3.6 Si IX iyonunun sıcaklığa bağlı etkin çarpışma şiddetinin değişim grafiği.

Yine diğer bir yasaklı geçiş durumunu gösteren $^3P_0 - {}^1D_2$ geçişi için elde edilen bulgular Şekil 4.3.7'deki gibi elde edilmiştir.



Şekil 4.3.7. Si IX iyon hedefinin elektron ile çarpışması sonucu kızıl ötesi bölgesinde görülen yasaklı $^3P_1 - {}^1D_2$ geçişinin karakteristiği.

Yine bu durum için elde edile etkin çarpışma şiddetinin sıcaklığa bağlı olarak değişim grafiği şu şekildedir.



Şekil 4.3.8. Si IX iyonunun sıcaklığa bağlı etkin çarpışma şiddetinin değişim grafiği.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

5.1. Sonuçlar

Bu çalışmada, elektron konfigürasyonu itibariyle Karbon-benzeri yapıya sahip olan sekiz kez iyonlaşmış Si IX iyonu için geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi atomik yapı parametreleri hem SuperStructure yöntemi hem de yarı deneysel bir yöntem olan WBEPMT kullanılarak hesaplanmıştır.

Karbon-benzeri yapıya sahip olması itibariyle astrofiziksel olarak büyük bir öneme sahip olan Si IX iyonu için ayrıca elektron-iyon çarpışma süreçleri üzerinde R-matrix metodu kullanılarak bazı öngörülerde bulunulmuştur. Elde edilen sonuçların literatürle uyumlu olması bu çalışmadan elde edilen verilerin astrofiziksel gözlemlere ve çalışmalara katkı sağlayacağı beklenmektedir.

Çalışmanın ikinci kısmında elektron-etkisi ile uyarma sürecinde Karbon-benzeri Si iyonu için sadece yasaklı geçişlere neden olan durumlar üzerinde çalışmalar yapılmıştır. Bundan sonraki sürecin yine Si IX iyonuna ait izinli geçişlere neden olacak çarpışmalar göz önüne alınarak bu çalışmanın genişletilmesi büyük bir önem arz etmektedir. Aynı zamanda diğer Karbon-benzeri seriler için gelecekte bu tür çalışmaların yapılması astrofiziksel yorumlamalara ve diğer birçok çalışma alanına olumlu katkılar sağlayabilir.

Bu tez çalışmasında geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve yaşam süresi hesaplamalarında kullanılan SuperStructure yöntemi relativistik etkileri hesaba katan güçlü bir yöntemdir. Özellikle relativistik ve kolerasyon etkilerinin önemli olduğu alt kabuktan geçişlerde ve düşük uyarılmış seviyeler arasındaki geçişlerde oldukça iyi sonuçlar verebilmektedir. Aynı şekilde yine bu çalışmada hesaplamalarda kullanılan yarı deneysel bir yöntem olan WBEPMT, diğer yöntemler kadar karmaşık bir hesaplama sürecine girmeden gerekli parametreleri kolaylıkla belirleyebilmektedir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriyle yapılan hesaplamaların hassasiyeti ilgili parametrelerin belirlenmesinde kullanılan deneysel enerji değerlerine ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerine bağlıdır. Deneysel enerjiler için literatürdeki değerler birbirine çok yakındır. Bu nedenle en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride sonuçları etkileyen seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleridir. Dolayısıyla yarıçapların beklenen değerlerinin doğru olarak belirlenmesi geçiş olasılıklarının ve

osilatör şiddetlerinin hesaplanma sürecinin hassasiyeti açısından büyük önem taşımaktadır.

Özellikle alt kabuklardaki ve düşük uyarılmış seviyelerin tanımlanmasında relativistik ve kolerasyon etkileri oldukça önemlidir. Bu tür seviyeler arasındaki geçişlerin çalışılmasında yarı deneysel yöntemlerin kullanılmasında bir çok zorlukla karşılaşılmaktadır. Böyle durumlarda atomik yapı hesaplamaları için relativistik ve kolerasyon etkilerini hesaba katan Superstructure ve R-matrix gibi güçlü metotlarının kullanılması daha uygundur. Bundan sonraki çalışmalarda gerek Superstructure ve R-matrix gibi saf teorik yöntemler kullanılarak gerekse en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori gibi yarı deneysel yöntemler kullanılarak çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde hem izinli hem de yasak geçişler için hesaplamalara devam edilecektir.

KAYNAKLAR

Aggarwal, K. M., Baluja, K. L., 1983, Electron impact excitation of forbidden transitions in Si IX, *J. Phys. B: At. Mol. Phys*. 16: 107-120.

Aggarwal, K. M., Kingston, A. E., 1986, Excitation rate coefficients for optically allowed transitions in Si IX, *Astron. Astrophys.*, 162: 333-339.

Ateş, Ş., 2010, Çok elektronlu sistemlerde atomik yapı hesaplamaları, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.

Ateş, Ş., Özarslan, S., Çelik, G., Taşer, M., 2012-a, Oscillator strengths for Be I, *Atomic Data And Nuclear Data Tables* 98: 832-851.

Ateş, Ş., Çelik, G., Tekeli, G., Taşer, M., 2012-b, Oscillator strengths of allowed transitions for O III, *Atomic Data And Nuclear Data Tables*, 98: 1-18.

Bhatia, A. K., Doschek, G. A., 1993, Atomic data and spectral line intensities for C-like Si IX, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 55: 281-314.

Brage, T., Judge, P. G., Jönsson, P., Edwards, D. P., 2000, Spectral lines for polarization measurements of the coronal magnetic field. III. Atomic data for Si IX, *The Astrophysical Journal*, 540: 1114-1118.

Cheng, K. T., Kim, Y. K., Desclaux, J. P., 1979, Electric Dipole, quadrupole, and magnetic dipole transition probabilities of ions isoelectronic to the first-row atoms, Li through F, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 24, 111-189.

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

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

Çelik, G., Erol, E., Taşer, M., 2013, Transition probabilities, oscillator strengths and radiative lifetimes for Zn II, J*ournal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 129: 263-271.

Çelik, G., Doğan, D., Ateş, Ş., Taşer, M., 2012-a, Transition probabilities and radiative lifetimes of levels in F I, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 98: 566-588.

Çelik, G., Doğan, D., Ateş, Ş., Taşer, M., 2012-b, Electric quadrupole transition probabilities for singly ionized magnesium, *Journal of Quantitative Spectroscopy& Radiative Transfer*, 113: 1601–1605.

Davis, J., Kepple, P. C., Blaha, M., 1977, Flow Line strengths, collision strengths and excitation rates for multiply-charged Silicon ions, *J. Quant. Spectrusc. Radiat. Transfer*, 18: 535-540.

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

Jönsson, P., Rynkun, P., Gaigalas, Energies, 2011, E1, M1, and E2 transition rates, hyperfine structures, and Lande g_j factors for states of the $2s^22p^2$, $2s2p^3$, and $2p^4$ configurations in C-like ions between F IV and Ni XXIII, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 97: 648-691.

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

Kramida, A., Ralchenko, Yu., Reader, J., and NIST ASD Team (2013). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.1), [Online]. Available: http://physics.nist.gov/asd [2013, December 12]. *National Institute of Standards and Technology*, Gaithersburg, MD.

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

Liang, G., Zhao, G., Zeng, J., 2007, Electron impact collision strengths in Si IX, Si X, and Si XI, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 93: 375-536.

Lindgrad, A. and Neilsen, S.E. 1975 Numerical Approach to Transition Probabilities in the Coulomb Approximation: Be II and Mg II. Rydberg *Series Journal Physics B 8*: 1183.

Lindgrad, A. and Neilsen, S.E. 1977 Transition Probabilities for the Alkali Isoelectronic Sequences Li I, Na I, K I, Rb I,Cs I, Fr I Sequences. *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 19: 6, 533-633.

Luo, D., Pradhan, A. K., 1989, Atomic data for opacity calculations: XI. The carbon isoelectronic sequence, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 22: 3377-3395.

Martin, W. C., Wiese, W. L., 1999, Atomic Spectoscopy, *National Institute of Standards and Technology*, Maryland.

Pradhan, A. K., Nahar, S. N., 2011, Atomic Astrophysics and Spectroscopy, 978-0-521-82536-8, *Cambridge University Press*, New York, 97-140.

Ralchenko, Yu., Kramida, A.E., Reader, J., and NIST ASD Team, 2008, NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5), [Online]. Available: http://physics.nist.gov/asd3 National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

Ray, D., Mukherjee, P. K., 1995, Radiative transitions in highly-stripped C-like ions, *Physica Scripta*, 51: 81-85.

Tachiev, G., Fischer, C. F., 2001, Breit–Pauli energy levels and transition rates for the carbonlike sequence, *Can. J. Physc*. 79: 955-976.

Trabert, E., Calamai, A. G., Gillaspy, J. D., Gwinner, G., Tordoir, X., Wolf, A., 2000, Intercombination and forbidden transition rates in C- and N-like ions (O^{2+}, F^{3+}, and S^{9+}) measured at a heavy-ion storage ring, *Physical Review A*, 62: 022507.

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

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

Yıldız, M., Gokce, Y., Çelik, G., 2013, Electric dipole radiative lifetimes for neutral boron atom, *Indian Journal of Physics*, 87(11): 1069–1073.

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

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

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

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

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

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

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

Zheng, N.W., Sun, Y.J., Wang. T., Ma, D.X., Zhang, Y. and Su, W. 2000-b Transition Probability of Lithium Atom and Lithiumlike Ions With Weakest Bound Electron Wave Functions and Coupled Equations, *International Journal of Quantum Chemistry*, 76: 51-61.

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

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

Zheng, N.W., Wang, T., Yang, R., Wu, Y.G. 2000-e Theoretical Calculation of Transition Probability for N Atom and Ions. *J. Chem. Phys*.112: 16, 7042.

Zheng, N.W., Sun, Y.J., Ma, D.X., Yang, R., Zhou, T. and Wang. T. 2001-a Theoretical Study on Regularity of Changes in Quantum Defects in Rydberg State Series of Many-Valence Electron Atoms within WBEPM Theory, *International Journal of Quantum Chemistry*, 81: 232-237.

Zheng N.W., Wang T., Yang R., Zhou T., Ma D.X., Wu, Y.G. and Xu H.T. 2001-b Transition Probabilities For Be I, Be Ii, Mg I, and Mg II, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 79: 109-141(33).

Zheng N.W., Wang T., Ma D.X. and Zhou T. 2001-c Calculation of Transition Probability for C (I-IV), J. *Opt. Soc. Am. B*, 18: 1395-1409.

Zheng, N. W., Wang, T.,Yang, R. Y., Zhou, T., Ma, D.X.,Wu, Y. G., Xu, H. T. 2001-d Transition Probabilities Be I, Be II, Mg I, and Mg II. *At. Data and Nucl. Data Tabl.* 79: 1, 109.

Zheng, N.W., Wang, T. 2002-a Theoretical Resonance Transition Probabilities and Lifetimes for Atomic Hydrogen. *Chem. Phys*. 282: 1, 31.

Zheng, N.W., Wang, T., Zhou, T., Ma, D.X. 2002-b, Theoretical Study of Transition Probability for Oxygen Atom and Ions. *J. Phys. Soc. Jpn* 71: 1672.

Zheng, N.W., Wang. T. 2003 Transition Probabilities for Ne II, *Spectrochimica Acta Part B*, 58: 1319-1324.

Zheng, N.W. and Wang, T. 2004-a Calculation of Excited-State Ionization Potential for Boron-Like Sequence, *Int. J. Quant. Chem*. 98: 495.

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

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

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Yasin GÖKÇE
Uyruğu : T. C.
Doğum Yeri ve Tarihi: KARABÜK 03.03.1986

Telefon: 05302238278
Faks :
e-mail : ygokce58@gmail.com

EĞİTİM

Derece	Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise :	Argıncık Lisesi Kocasinan/KAYSERİ	2004
Üniversite :	Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi/ISPARTA	2010
Yüksek Lisans:	Selçuk Üniversitesi/KONYA	2013
Doktora :		

UZMANLIK ALANI
Fizik, Astrofizik

YABANCI DİLLER
İngilizce

BELİRTMEK İSTEĞİNİZ DİĞER ÖZELLİKLER

YAYINLAR

Yıldız, M., Gokce, Y., Celik¸ G., 2013, Electric dipole radiative lifetimes for neutral boron atom, *Indian J. Phys*., 32: 1069-1073.

Yıldız, M., Gokce, Y., 2013, Lifetimes for singly ionized nitrogen, Can. J. Phys., 91: 1-4.

Çelik, G., Gokce, Y., Yıldız M., Taşer, M., 2013, Electric quadrupole transition probabilities for atomic lithium, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, Basım aşamasında.

Gokce, Y., Çelik G., Yıldız M., (2013), Electric quadrupole transition probabilities and line strengths of Ti^{+11}, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, Basım aşamasında.

Ates S., Gokce, Y., Celik G., Yıldız, M.,(2013), Oscillator strengths and transition probabilities for singly ionized terbium, *Can J. Phys*, Kabul Edildi.

Gokce, Y., Nahar, S. N., Pradhan, A. K., Celik, G., Yıldız, M., E, (2013), Relativistic configuration interaction calculations of lifetimes and transition rates for allowed and forbidden transitions of C-like Si IX, başlıklı bir makale çalışması hazırlanmaktadır.

Gokce, Y., Yıldız, M., Celik, G., (2012), Electronic structure and spectral calculations on 6,7-dihydroxy-4-methylcoumarin using dft method, *30. Uluslararası Fizik Kongresi*, İstanbul, TÜRKİYE.

Gokce, Y., Yıldız, M., Celik, G., (2012), Electric dipole transition probabilıties and lifetimes for singly ionized carbon (C II) , 30. Uluslararası Fizik Kongresi, İstanbul, TÜRKİYE.

Gokce, Y., Yıldız, M., Celik, G., (2012), Elektric quadrupole transition probabilities for Ti XII, *29. Uluslararası Fizik Kongresi*, Bodrum, TÜRKİYE (Sözlü sunum).

Gokce, Y., Yıldız, M., Celik, G., (2012), Radiative lifetimes of excited levels in boron atom, *29. Uluslararası Fizik Kongresi*, Bodrum, TÜRKİYE.

Gokce, Y., Yıldız, M., Celik, G., (2012), Electric dipole transition probabilities and oscillator strengths in Pb I, *29. Uluslararası Fizik Kongresi*, Bodrum, TÜRKİYE.

Celik, G., Gokce, Y., Yıldız, M., Taşer, M., (2012), Calculation of electric quadrupole oscillator strengths for Li I, *29. Uluslararası Fizik Kongresi*, Bodrum, TÜRKİYE.

Gokce, Y., Yıldız, M., Celik, G., (2012), Lifetimes for singly ionized nitrogen, *28. Uluslararası Fizik Kongresi*, Bodrum, TÜRKİYE.

Gokce, Y., Yıldız, M., Celik, G., (2012), Oksijen-benzeri serilerin bazı uyarılmış seviyeleri için iyonlaşma potansiyellerinin hesaplanması, *28. Uluslararası Fizik Kongresi*, Bodrum, TÜRKİYE.