

T.C. İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



YÜKSEK LİSANS TEZİ

VANADYUM ELEMENTİNİN AŞIRI İNCE YAPISININ İNCELENMESİ

Gözde DEMİR

Fizik Anabilim Dalı

Atom ve Molekül Fiziği Programı

Danışman

Prof. Dr. Gönül BAŞAR

Mayıs, 2015

İSTANBUL

Bu çalışma 29/05/2015 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı Atom ve Molekül Fiziği programında Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi:

Prof. Dr. Gönül BAŞAR İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi

Prof. Dr. Ayşe EROL İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi

M

Doç. Dr. İpek KANAT ÖZTÜRK İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi

ym

Doç. Dr. Yasemin AKKAYA İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi

Doç. Dr. F. Gülay ACAR İstanbul Teknik Üniversitesi Fen-Edebiyet Fakültesi

Bu çalışma İstanbul Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Yürütücü Sekreterliğinin 19316 numaralı projesi ile desteklenmiştir

ÖNSÖZ

Vanadyum elementinin aşırı ince yapısının incelenmesi isimli tez çalışmam süresince, her konuda yardımlarını ve bilgisini esirgemeyen değerli danışman hocam Prof. Dr. Gönül Başar'a çok teşekkür ederim.

Yüksek lisans tezimde verdiği destekten dolayı İstanbul Üniversitesi öğretim görevlilerinden Doç. Dr. İpek Kanat Öztürk, Yard. Doç. Dr. Feyza Güzelçimen ve Yard. Doç. Dr. Alev Er'e teşekkür ederim.

Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile yapılan çalışmalarda gösterdikleri her türlü ilgi ve destek için Letonya Üniversitesi Atom ve Molekül Fiziği ve Spektroskopisi Enstitüsü Fizik Bölümü öğretim üyelerinden Prof. Dr. Ruvin Ferber, Dr. Andrey Jarmola ve Dr. Maris Tamanis'e, Uygulamalı Bilimler Üniversitesi öğretim üyelerinden Prof. Dr. Sophie Kröger'e ve İstanbul Teknik Üniversitesi öğretim üyelerinden Prof. Dr. Günay Başar'a teşekkür ederim.

Bu çalışmayı destekleyen İstanbul Üniversitesi'ne, deneysel kısmı destekleyen Letonya Üniversitesi Atom ve Molekül Fiziği ve Spektroskopisi Enstitüsü ve Fizik Bölümü'ne teşekkürü bir borç bilirim.

Son olarak yaşamım boyunca sürekli yanımda olan ve her türlü desteğini benden esirgemeyen kıymetli aileme sonsuz teşekkür ederim.

Mayıs, 2015

Gözde DEMİR

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	i
İÇİNDEKİLER	ii
ŞEKİL LİSTESİ	iv
TABLO LİSTESİ	vii
SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ	viii
ÖZET	ix
SUMMARY	X
1. GİRİŞ	1
2. GENEL KISIMLAR	4
3. MALZEME VE YÖNTEM	
3.1. ATOMUN KUANTUMLU YAPISI	17
3.1.1. Manyetik Momentler	
3.2. ÇOK ELEKTRONLU ATOMLAR	
3.2.1. Merkezi Alan Yaklaşıklığı	
3.2.2. Hartree – Fock Yöntemi	
3.3. İNCE YAPI (FINE STRUCTURE)	
3.3.1. İnce Yapı Yarılmaları	
3.4. AŞIRI İNCE YAPI (HYPERFINE STRUCTURE)	
3.4.1. Aşırı İnce Yapı Yarılmaları	
3.4.2. Aşırı İnce Yapı Parametreleri	
3.5. SPEKTRAL ÇİZGİ GENİŞLEMELERİ	
3.5.1. Doğal Çizgi Genişlemesi	41
3.5.2. Doppler Genişlemesi	
3.5.3. Çarpışma ve Basınç Genişlemesi	47
3.5.4. Saturasyon Çizgi Genişlemesi	
3.5.5. Birleşik Çizgi Genişlemeleri ve Voigt Profili	
3.6. VANADYUM ELEMENTİ	
3.6.1. Vanadyum Elementinin Astrofiziksel Önemi	

3.7. DENEYSEL YÖNTEMLER	55
3.7.1. Fourier Transform (FT) Spektroskopisi	55
3.7.1.1. Michelson İnterferometresi	56
3.7.1.2. Silindir Katot	61
3.7.1.3. Filtreler	62
3.7.1.4. Fourier Transform Spektroskopisinin Avantajları ve Dezavantaj	<i>ları</i> 63
3.7.1.5. Deney Düzeneği	63
3.8. SPEKTRAL DATA ANALİZİ	66
3.8.1. Fitter Programı	66
3.8.1.1. Fitter Programının Giriş ve Çıkış Dataları	68
3.8.2. Klasifikasyon Program1	74
4. BULGULAR	80
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	
KAYNAKLAR	
EKLER	
ÖZGEÇMİŞ	

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa No

Şekil 3.1: $s = 1/2$ ve $\ell = 1$ kuantum sayılarına sahip olan ² <i>P</i> terimli bir enerji seviyesinin ince yapı yarılmaları
Şekil 3.2 : Atoma ait vektör modeli
Şekil 3.3 : Bir spektral çizginin çizgi profili ve yarı genişliği40
Şekil 3.4 : a) Sönümlü titreşimin zamana bağlı olarak yer değişim dağılımı b) $x(t)$ 'nin sağladığı $I(\omega - \omega_0) \propto A(\omega) ^2$ şiddet profilinin Fourier dönüşümü ile elde edilen, $A(\omega)$ genliklerinin frekans dağılımı
Şekil 3.5 : Belirsizlik İlkesi ile tanımlanan alt ve üst enerji seviyelerindeki belirsizliğin, doğal çizgi genişlemesi ile ilişkisi
Şekil 3.6 : a) Monokromatik emisyon çizgisinin Doppler kayması b) Absorbsiyon çizgisi45
Şekil 3.7 : Eşit yarı genişlikler ile verilen Gauss ve Lorentz profillerinin karşılaştırılması50
Şekil 3.8 : Vanadyum elementinin periyodik tablodaki yeri
Şekil 3.9 : Michelson İnterferometresi. E ₁ gelen ışının genliği, M ₁ sabit ayna, M ₂ hareketli ayna, BS ışın ayırıcı, s ₁ ve s ₂ farklı optik ışın yolları ve B gözlem düzlemidir. Dedektör gözlem düzlemindedir
Şekil 3.10 : Hareketli aynaya sahip bir Michelson İnterferometresinden geçen normalize ışık şiddeti I_t / I_0 , a) Monokromatik ışık için b) $I_{01(\omega_1)}$ ve $I_{02(\omega_2)}$ şiddetlerinin süperpozisyonu için, yol farkı Δs 'e bağlı olarak gösterilmiştir
Şekil 3.11 : Fourier Transform Spektroskopisi deney düzeneğinde kullanılan silindir katot lambasının şematik gösterilişi
Şekil 3.12 : Letonya Üniversitesi Laser Merkezi'nde kurulan FTS yöntemi deney düzeneği65
Şekil 3.13 : $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboylu 2 153.221 cm ⁻¹ \rightarrow 26 397.633 cm ⁻¹ spektral geçişinin Fitter programına ait ein dosyası
Şekil 3.14 : $\lambda = 412.3498 \text{ nm}$ dalgaboylu 2 153.221 cm ⁻¹ \rightarrow 26 397.633 cm ⁻¹ spektral geçişinin Fitter programı ile lineerize edilmiş hali
Şekil 3.15 : $\lambda = 412.3498 \text{ nm}$ dalgaboylu 2 153.221 cm ⁻¹ \rightarrow 26 397.633 cm ⁻¹ spektral geçişinin Fitter programı ile elde edilen aus çıktı dosyasının bir kısmı
Şekil 3.16 : $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboylu 2 153.221 cm ⁻¹ \rightarrow 26 397.633 cm ⁻¹ spektral geçişinin Fitter programı ile fit edilmiş hali

Şekil 3.17 : Klasifikasyon programının giriş dosyası örneği, V I elementinin Level_Va giriş dosyası
Şekil 3.18 : Klasifikasyon programında, V I elementinin dalgaboyu giriş dosyasını (wVa) bir kesiti
Şekil 3.19 : $\lambda = 541.8087$ nm dalgaboylu spektral geçiş için Klasifikasyon programının ana menüsü
Şekil 4.1 : a) Spektrumun 18 261 – 18 660 cm ⁻¹ aralığından bir kesiti b) Spektrumun 18 453 – 18 470 cm ⁻¹ aralığından bir kesiti c) $\lambda = 541.5250$ nm dalgaboyuna ve $\sigma = 18 461.233$ cm ⁻¹ dalgasayısına sahip (37 606.365 cm ⁻¹ , J = 13/2 \rightarrow 19 145.148 cm ⁻¹ , J = 11/2) spektral geçişi
Şekil 4.2 : Dalgaboyu $\lambda = 541.5250$ ve dalgasayısı $\sigma = 18\ 461.233\ \text{cm}^{-1}$ olan (37 606.365 cm ⁻¹ , $J = 13/2 \rightarrow 19\ 145.148\ \text{cm}^{-1}$, $J = 11/2$) spektral geçişinin lineerize edilen spektrumu.
Şekil 4.3 : Dalgaboyu $\lambda = 541.5250$ ve dalgasayısı $\sigma = 18461.233$ cm ⁻¹ olan (37606.365 cm ⁻¹ , $J = 13/2 \rightarrow 19145.148$ cm ⁻¹ , $J = 11/2$), spektral geçişinin Fitter programı ile elde edilen spektrumu. Mor spektrum teorik, gri spektrum deneysel ve "0" ekseninin altındaki koyu gri spektrum deneysel ve teorik spektrumlar arasındaki farkı göstermektedir
Şekil 4.4 : Şekil 4.4 : Ar asal gazının ve V elementinin FTS yontemi ile ölçülen ve fit edilen dalga sayısı $\sigma = 23\ 259.963\ cm-1$, dalgaboyu λ hava = 429.8024 nm olan (40 314.882 cm-1, J = 7/2 \rightarrow 17 054.924 cm-1, J = 5/2) spektral geçişine ait spektrumu.
Şekil 4.5 : Spektral çizginin genişliği W nın nasıl belirlendiğinin gösterimi. W_1 ; aşırı ince yapı yarılmasının tüm genişliği, W_2 ; En şiddetli aşırı ince yapı bileşenlerinin dağılımının genişliği, W_3 ; Spektral çizginin sağ ve sol tarafında şiddetin $1/e^2$ orandaki yerlerin arasındaki fark
Şekil 4.6 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı $\sigma = 17\ 706.409\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 564.6105\ \text{nm}$ olan (26 182.637 cm ⁻¹ , $J = 1/2 \rightarrow 8\ 476.234\ \text{cm}^{-1}$, $J = 3/2$) spektral geçişine ait bir spektrum
Şekil 4.7 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı $\sigma = 17769.633 \text{ cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 562.6016 \text{ nm}$ olan (26 182.637 cm ⁻¹), $J = 1/2 \rightarrow 8413.009 \text{ cm}^{-1}$, $J = 1/2$) spektral geçişine ait bir spektrum
Şekil 4.8 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı $\sigma = 18\ 431.255\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 542.4059\ \text{nm}$ olan (37 457.576 cm ⁻¹ , $J = 3/2 \rightarrow 19\ 026.326\ \text{cm}^{-1}$, $J = 5/2$) spektral geçişine ait bir spektrum
Şekil 4.9 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı dalga sayısı $\sigma = 24\ 285.353\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 411.6547\ \text{nm}$ olan (26 397.633 cm ⁻¹ $J = 1/2 \rightarrow 2\ 111.282\ \text{cm}^{-1}$, $J = 1/2$) spektral geçişine ve dalga sayısı $\sigma = 24\ 285.798\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 411.6471\ \text{nm}$ olan (26 505.953 cm ⁻¹ , $J = 5/2 \rightarrow 2\ 220.156\ \text{cm}^{-1}$, $J = 5/2$) spektral geçişine ait spektrum

TABLO LÍSTESÍ

Tablo 2. be elo	.1 : ⁵¹ V elementinin çift pariteli enerji seviyelerine ait daha önceki çalışmalarda elirlenen konfigürasyon, terim ve J değerleri ile bilinen A manyetik dipol ve B ektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri
Tablo 2. be ele	.2: ⁵¹ V elementinin tek pariteli enerji seviyelerine ait daha önceki çalışmalarda elirlenen konfigürasyon, terim ve <i>J</i> değerleri ile bilinen <i>A</i> manyetik dipol ve <i>B</i> ektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri
Tablo 3.	.1 : ⁵¹ V elementinin temel fiziksel ve kimyasal özellikleri
Tablo 3. en ve	 .2: Yakın - mor ötesi bölgesindeki Vanadyum elementi çizgilerinin bilinen alt ve üst nerji seviyeleri ile birlikte güneş spektrumundaki yaklaşık ölçekli şiddet değişimi <i>dI/I</i> e belirlenen çizgi çakışmaları.
Tablo 4. lit se	.1 : V elementinin Fourier Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen spektral geçişlerinin teratürden bilinen ve fit işlemi süresince sabit tutulan çift pariteli alt enerji eviyelerinin <i>A</i> manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri
Tablo 4.	.2: V elementinin Fourier Spektroskopisi yöntemi ile incelenen spektral geçişleri89
Tablo 4. bi	.3 : Vanadyum elementinin, bu çalışmada belirlenen deneysel $A_{ort.}$ İle literatürden ilinen A_{ref} manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerleri
Tablo 5. ka	.1 : Dalga sayısının fonksiyonu olarak verilen Voigt profilinin Lorentz ve Gauss atkılarının ölçülen lineer fit sonuçları

SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ

Simgeler Açı	klama
--------------	-------

: Manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A : Elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B F : Atomun toplam açısal momentum kuantum sayısı : Landé g çarpanı g Ι : Çekirdek spini J : Elektronun toplam açısal momentum kuantum sayısı : Çekirdeğin spin açısal manyetik dipol momenti μ_I : Elektronun toplam açısal manyetik moment μ_J : Çekirdek manyetonu μ_N : Bohr manyetonu μ_B : Elektrik kuadropol momenti Q $\tilde{\Psi}$: Dalga fonksiyonu : Planck sabiti ħ : Çizgisel frekans v : Dalgaboyu λ : Serbest uzayın elektriksel geçirgenliği 80 : Spin yörünge etkileşme parametresi ξ : Açısal frekans ω

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

VANADYUM ELEMENTİNİN AŞIRI İNCE YAPISININ İNCELENMESİ

Gözde DEMİR

İstanbul Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Gönül BAŞAR

Bu çalışmada nötr Vanadyum elementinin (VI) aşırı ince yapısının incelenmesi amaçlandı. V I elementinin aşırı ince yapısı deneysel spektrumu, yüksek çözünürlüklü Fourier transform spektroskopisi yöntemi ile alındı. Spektrum, 360 nm - 670 nm dalgaboyu aralığında bir Bruker IFS 125HR Fourier transform spektroskopisi ile kaydedildi. Deneyler sırasında sinyal/gürültü oranını arttırmak için, 370 ± 5 nm, 400 ± 20 nm, 420 ± 35 nm, 456 ± 1 nm, 476 ± 7 nm, 550 ± 10 nm, 600 ± 20 nm ve 650 ± 20 nm dalgaboylarında filtreler kullanıldı. Bu filtreler kullanılarak 15 000 – 27 400 cm⁻¹ dalga sayısı aralığında spektrumlar kaydedildi. V I elementinin $3d^{3} 4s4p$ ve $3d^{4} 4p$ konfigürasyonlarına ait tek pariteli enerji seviyelerinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitlerinin belirlenmesi amaçlandı. V I üst enerji seviyelerinin $3d^{3} 4s4p$ ve $3d^{4} 4p$ konfigürasyonlarına ait geçişleri içeren 56 spektral geçişinin analizi sonucunda 41 tek pariteli üst enerji seviyelerinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri belirlendi. 35 tek pariteli üst enerji seviyelerinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabit değerleri ilk kez bu çalışmada bulundu. 7 tek pariteli üst enerji seviyelerinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerleri literatürden bilinen değerleri ile karşılaştırıldı ve sonuçlarını uyumlu olduğu gözlendi.

Mayıs, 2015, 130 sayfa.

Anahtar kelimeler : atomik data – çizgi profilleri – spektroskopik teknikler

SUMMARY

M.Sc. THESIS

INVESTIGATION OF HYPERFINE STRUCTURE OF VANADIUM ELEMENT Gözde DEMİR

İstanbul University

Institute of Graduate Studies in Science and Engineering

Department of Physics

Supervisor : Prof. Dr. Gönül BAŞAR

In this study, it is mainly aimed to experimentally investigate the hyperfine structure (hfs) of neutral Vanadium (VI) element. The experimental spectra of VI were examined by using high resolution Fourier Transform Spectroscopy. The spectra of V I were recorded in the wavelength range between 360 nm - 670 nm by a Bruker IFS 125HR Fourier transform spectrometer. During the experimental setup, optic filters were used in the wavelength range of 370 ± 5 nm, 400 ± 20 nm, 420 ± 35 nm, 456 ± 1 nm, 476 ± 7 nm, 550 ± 10 nm, 600 ± 20 nm ve 650 ± 20 nm in the order to increase the signal/noise ratio. The spectra of V I were recorded by using optic filters in the range of 15 000 – 27 400 cm⁻¹. It is mainly aimed to determine the magnetic dipole hyperfine structure constants A of odd parity levels of configurations of $3d^{3} 4s4p$ and $3d^{4}4p$ of VI. 41 magnetic dipole hyperfine structure constants A of upper energy levels with odd parity were determined by analysis of 56 spectral transitions belong to upper energy configurations of $3d^{-3} 4s4p$ and $3d^{-4} 4p$. In this study, 35 A magnetic dipole hyperfine structure constants of upper energy levels with odd parity were obtained for the first time. The result of 7 magnetic dipole hyperfine structure constants A of upper energy levels with odd parity were compared with known values and found to be compatible with the literature.

May, 2015, 130 pages.

Keywords : atomik data – line profiles - spectroscopic techniques

1. GİRİŞ

Atom fiziği, atomların yapısını, birbirleriyle ve elektrik ve manyetik alanlarla olan etkileşimlerini inceler.

Optik spektrumların araştırılmasından elde edilen sonuçlarla atomun yapısı hakkında bilgi edinilmiştir. Spektroskopinin ortaya çıkışı, Isaac Newton'un birçok renkten oluşan güneş ışığını bir prizmanın içinden geçirerek, ışığı renklerine ayrıştırılabileceğini göstermesi ile başlar. 1835 yılında Charles Wheatstone'un araştırmasına göre; farklı metallerin uyarılması ile oluşan emisyon spektrum tayflarının birbirinden farklı olduğu ve bu sebeple metallerin birbirinden kolaylıkla ayırt edilebileceği görülmüştür. Bu çalışma spektrum analizi incelemelerine yön vermiştir. Optik spektrumların araştırılması sonucu 1860 yılında Kirchoff ve Bunsen'in optik spektrumların ışığı soğuran veya salan elementlerin bir karakteristiği olduğunu göstermesiyle, atomların yapısı ile ilgili bilgiler elde edilmeye başlanmıştır. 1885 yılında Balmer, kendi adını taşıyan, Hidrojen atomlarından yayınlanan spektral çizgileri tanımlamıştır [1].

Atomlar ve moleküller maddenin yapısını oluşturdukları için, fizikte atom fiziğinin önemi öne çıkmaktadır. Atom ve molekül yapıları onların saldığı veya soğurduğu ışımaları inceleyerek anlaşılabilir. Bu da, atom ve moleküllerin incelendiği spektroskopik yöntemlerle önem kazanır. Işık – madde (atom) etkileşmesi sonucu ortaya çıkan soğurma ve emisyon spektrumları yardımı ile atom ve molekül yapıları anlaşılmaya çalışılır. Bu spektrumlarda, spektral çizgilerin şiddetleri incelenerek seviyeler arasındaki geçiş olasılıkları hakkında bilgi elde edilir. Bu değerler bize, enerji seviyelerinin dalga fonksiyonları, dolayısıyla sistemin enerjisi hakkında bilgi verir [2].

Atomların dalga fonksiyonları ve enerji ifadeleri Hamiltonian denklemi ile hesaplanır. Çok elektronlu atomlarda Hamiltonian denklemine, kinetik ve potansiyel enerji terimlerine ek olarak spin – yörünge etkileşme terimi, çekirdek elektron etkileşme terimi ve elektronlar arası etkileşme terimleri ilave edilir. Burada spin – yörünge etkileşmesi sonucu ince yapı yarılmaları ve çekirdek – elektron etkileşmesi sonucunda da aşırı ince yapı yarılmaları gözlenir [1].

Serbest atomların aşırı ince yapısı incelemeleri ile elektron kabuklarının yapısı hakkında detaylı bilgi elde edilir. Aşırı ince yapının incelenmesi ile elde edilen sonuçlar, atomun nükleer özellikleri, atomun çekirdek ve elektronları arasında meydana gelen etkileşmeler, konfigürasyon etkileşmeleri ve relativistik etki hakkında bilgi vermesi açısından önemlidir. Atomların parmak izi sayılabilecek aşırı ince yapı incelemeleri, spektral çizgilerin sınıflandırılmasında mutlaka göz önüne alınmalıdır [3,4,5].

Aşırı ince yapı çalışmaları astrofizik için de önem taşımaktadır. Aşırı ince yapı çalışmalarının sonuçları astrofizikte yıldızların bolluk analizinde, yıldız atmosferlerinin bileşiklerinin tam olarak anlaşılması için fiziksel parametrelerin belirlenmesinde kullanılır.

Bu çalışmada nötr Vanadyum elementinin (V I) aşırı ince yapısı Fourier transform spektroskopisi yöntemi kullanılarak deneysel olarak incelendi. Çalışmanın deneysel kısmı Letonya Üniversitesi Laser Merkezi'nde gerçekleştirildi. Bu çalışmada sadece *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri deneysel olarak belirlenebildi.

Atom numarası 23 olan Vanadyum elementi demir grubunun üçüncü üyesidir. Vanadyum elementinin, yüksek yıldız bolluğuna ve zengin çizgi spektrumuna sahip olmasından dolayı astrofizik araştırmaları açısından önemli bir yere sahiptir [6]. Yıldızların izotop bolluğunu daha iyi açıklayabilmek için aşırı ince yapı ve izotop kayması etkilerinin bilinmesi gerekir [7].

Vanadyum elementinin % 99.75 yoğunluğa sahip ve çekirdek spini I = 7/2 olan ⁵¹V kararlı izotopu vardır. ⁵¹V izotopunun çekirdek manyetik momenti $\mu_I = 5.1514 \ \mu_N$ 'dır. Elektrik kuadropol momentinin, Q = -0.052 barn [8] çok küçük olması sebebi ile elektrik kuadropol etkisini Doppler genişlemesine sahip metotlarla gözlemek mümkün değildir.

Bu çalışmada Vanadyum elementinin spektrumu $360 - 670 \text{ nm} (15\ 000 - 27\ 400 \text{ cm}^{-1})$ dalga boyu aralığında Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçüldü. Vanadyum atomları silindirik bir katot lambası içerisinde uyarıldı. Deney sırasında kullanılan yöntem sebebi ile oluşan gürültüyü ortadan kaldırmak amacıyla dalgaboyu aralığı $370 \pm 5 \text{ nm}$, $400 \pm 20 \text{ nm}$, $420 \pm 35 \text{ nm}$, $456 \pm 1 \text{ nm}$, $476 \pm 7 \text{ nm}$, $550 \pm 10 \text{ nm}$, $600 \pm 20 \text{ nm}$ ve $650 \pm 20 \text{ nm}$ olan optik band filtreler kullanıldı.

Toplamda 56 spektral geçiş incelendi. Bazı seviyelerin A sabitleri birden fazla spektral çizgiden bulundu. Bu spektral geçişlere ait toplam 41 tek pariteli $3d^3 4s4p$ ve $3d^4 4p$ konfigürasyonlarına ait üst enerji seviyelerinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri belirlendi. Bu değerlerden tek pariteli üst enerji seviyelerinin 35 tane A manyetik dipol aşırı ince yapı değerleri ilk kez bu çalışmada bulundu. Bu spektral çizgilerin fit edilmesinde Fitter [9] programı kullanıldı. Fourier Transform spektroskopisi Doppler genişlemeli bir metod olması ve spektral çizgilerin şiddetlerinin az olması sebebi ile ölçülen çizgilerin aşırı ince yapıları tamamen ayrışmadığından tüm spektral çizgilerin çift pariteye sahip alt enerji seviyelerinin literatürden bilinen manyetik dipol aşırı ince yapı A sabitleri daha doğru olarak belirlendi. Vanadyum elementinin aşırı ince yapısı hakkında yapılmış olan tüm çalışmalar incelendi, bu çalışmalarda kullanılan yöntemler ve elde edilen bulgular Genel Kısımlar'da anlatıldı.

Bu çalışmanın konusu, kullanılan deneysel yöntemler, incelenen Vanadyum elementine ait genel özellikler ve fit işleminde kullanılan Fitter [9] programı, Malzeme ve Yöntem kısmında anlatıldı.

Vanadyum elementine ait bulgular Genel Kısımlar'da yer alan literatür değerleri ile karşılaştırıldı, Fitter [9] programının sonuçları ve sonuç tabloları Tartışma ve Sonuç kısmında açıklandı.

2. GENEL KISIMLAR

Son yıllarda, alkali metal ve geçiş elementlerinin enerji seviyelerinin aşırı ince yapısı, hem deneysel hem de teorik olarak çok sayıda araştırmacı tarafından incelendi.

Bir geçiş elementi olan Vanadyum (V I) elementinin atom numarası 23'dür. Vanadyum elementinin % 99.75 yoğunluğa sahip ve çekirdek spini I = 7/2 olan ⁵¹V kararlı izotopu vardır. ⁵¹V izotopunun çekirdek manyetik momenti $\mu_{I} = 5.1514 \,\mu_{N}$ olarak bilinir. Elektrik kuadropol momentinin, Q = -0.052 barn [8] çok küçük olması sebebi ile elektrik kuadropol etkisini Doppler genişlemesine sahip metotlarla gözlemek mümkün değildir. Fourier transform spektrumundan elektrik kuadrapol aşırı ince yapı sabiti *B* hakkında elde edilen bilgi yoktur. Bu çalışmada kullanılan deneysel yöntemlerle ⁵⁰V uzun ömürlü izotopunun gözlenmesi olanaksızdır.

Vanadyum elementi mineralog Andrės Manuel del Rio tarafından 1801 yılında keşfedilmiştir. Del Rio, sonraki ismi vanadinite olacak "kahverengi kurşun" adını verdiği yeni bir minerali analiz ederken Vanadyum bileşenlerini keşfetmiştir. 1831 yılında, İsveçli kimyager olan Nils Gabriel Sefström Vanadyum'un keşfedilmemiş bir element olduğunu ispatladı. Elemente İskandinav güzellik ve bereket tanrıçası Vanadis'in (Freyja olarak da bilinir) adını verdi [10].

⁵¹V elementine ait aşırı ince yapısı 1930 yılından itibaren incelenmiş ve hala bu konudaki çalışmalar devam etmektedir. Yapılan ilk çalışmada, Kopfermann ve Rasmussen [11] $3d^3 4s^2 a^4 F$ ile $3d^3 4s4p^3 - z^4D^0$, z^4F^0 , z^4G^0 enerji seviyeleri arasındaki geçişleri gözlemlem*i*ş ve bu spektral geçişlerin alt ve üst seviyeleri için manyetik dipol aşırı ince yapı sabitlerini elde etmiştir. Murakawa aynı geçişler için 1956 [12] ve 1966 [13] yıllarında iki çalışma yapmıştır. 1966 yılında Childs ve Goodman [14] $3d^3 4s^2 a^4F_{3/2.9/2}$ ve $3d^4 4s a^6D_{1/2.9/2}$ seviyelerinin aşırı ince yapı sabit değerlerini bulmak için Atomik Işın Manyetik Rezonans tekniğini kullanmışlardır. 1979 yılında Childs ve diğerleri [15] aynı seviyelerin aşırı ince yapı sabit değerlerini bulmak için Laser - Radyo Frekans Spektroskopisi yöntemini kullanarak daha kesin sonuçlar elde etmişlerdir. 1985 yılında Gough ve diğerleri [16], 1989 yılında Unkel ve diğerleri [17] ve 1992 yılında El Kashef ve Ludwig [18] atomik Vanadyum elementinin cok sayıda seviyesine ait A manyetik dipol asırı ince yapı sabit değerlerini bulmuslardır. Vanadyum elementinin aşırı ince yapı incelemeleri son yıllarda görünür kırmızı ve yakın kırmızı-altı bölgede Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile pek çok calışmada incelenmiştir. 1995 [19] ve 1997 [20] yıllarında Palmeri ve diğerleri ve 2002 yılında Lefebvre ve diğerleri [21] tarafından Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile araştırılmıştır. 1998 yılında Cochrane ve diğerleri [22] tarafından yüksek çözünürlüklü Atomik Işın Spektroskopisi ile birçok geçişin aşırı ince yapısı gözlemlenmiştir. Atomik Vanadyum elementinin teorik analizi (terim analizi, parametrik analizi) Rosen [23,24], Bouche-Amoult [25,26], Olssen ve Rosen [27], Thorne ve diğerleri [28] tarafından incelendi. 2011 yılında Thorne ve diğerleri [28] tarafından UV-IR dalgaboyu aralığında 89 yeni seviye bulunmuştur. 2011 yılında Güzelçimen ve diğerleri [29] tarafından yüksek çözünürlüklü Fourier Transform çalışmada $3d^{3}4s4p$ ve $3d^{3}4s4d$ Spektroskopisi kullanılarak yapılan konfigürasyonlarına ait enerji seviyelerinin aşırı ince yapıları gözlenmiş ve analiz edilmiştir.

Tablo 2.1 ve Tablo 2.2'de yapılan literatür taraması sonucunda şu ana kadar aşırı ince yapı ile ilgili yapılmış çalışmalarda Vanadyum elementinin sırasıyla çift ve tek pariteli aşırı ince yapı enerji seviyelerinin *A* manyatik dipol ve *B* elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerinin değerleri verildi. Tablo 2.1 ve Tablo 2.2'de birinci kolonda verilen enerji değerleri ve bunların ait olduğu konfigürasyonlar Thorne ve Diğ. [28]'den alındı.

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
0.000	$3d^3 4s^2$	${}^{4}F$	3/2	629.56	-	10
				584.59	-	11
				560.0482	4.264	13
				560.068	3.987(25)	14
				560.062	-	19
137.383	$3d^3 4s^2$	${}^{4}F$	5/2	269.81	-	10
				308.78	-	11
				321.2265(12)	3.384(25)	13
				321.251(3)	3.955(45)	14
				321.238	-	19
323.432	$3d^3 4s^2$	${}^{4}F$	7/2	179.87	-	10
				221.84	-	11
				249.7398(7)	5.081(20)	13
				249.752(2)	5.587(25)	14
				249.748	-	19
552.955	$3d^3 4s^2$	${}^{4}F$	9/2	149.9	-	10
				191.87	-	11
				227.1324(6)	7.822(15)	13
				227.135(1)	8.243(30)	14
				227.133	-	19
2 112.282	$3d^4 4s$	a ⁶ D	1/2	751.4778(28)	0	13
				751.529(7)	0	14
				751.4(5)	0	15
				751.789	-	19
2 153.221	$3d^4 4s$	a ⁶ D	3/2	405.6038(12)	-8.107(12)	13
				405.642(4)	-6.985(15)	14
				405.7(4)	-13(4)	15
				405.605	-	19
				405.57(15)	-8.1(11)	21

Tablo 2.1 : 51 V elementinin çift pariteli enerji seviyelerine ait daha önceki çalışmalardabelirlenen konfigürasyon, terim ve J değerleri ile bilinen A manyetik dipol ve B elektrikkuadropol aşırı ince yapı sabitleri.

Tablo 2.1 : (devam)

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
2 220.156	$3d^4 4s$	a ⁶ D	5/2	373.518(10)	-5.459(25)	13
				373.526(2)	-5.004(30)	14
				373.7(4)	-10(7)	15
				373.595	-	19
				373.47(9)	-5.5(14)	21
2 311.369	$3d^4 4s$	$a^{6}D$	7/2	382.367(10)	2.268(29)	13
				382.367(2)	2.293(30)	14
				382.4(3)	6(12)	15
				382.368(11)	-	19
				382.34(8)	1.9(17)	21
2 424.809	$3d^4 4s$	a ⁶ D	9/2	406.8513(16)	14.324(65)	13
				406.848(4)	14.041(65)	14
				406.854	-	19
				406.83(5)	14.4(17)	21
8 413.009	$3d^4 4s$	^{4}D	1/2	1277.2(4)	0	14
				1277.2	-	19
8 476.234	$3d^4$ 4s	^{4}D	3/2	7.465(5)	-0.010(6)	14
				7.558	-	17
8 578.542	$3d^4 4s$	${}^{4}D$	5/2	-143.256(2)	5.145(20)	14
				-143.367	-	17
8 715.747	$3d^4 4s$	${}^{4}D$	7/2	-160.187(2)	13.874(25)	14
				-160.172	-	19
9 544.635	$3d^{3}4s^{2}$	${}^{4}P$	1/2	-353.735	-	17
9 637.039	$3d^{3}4s^{2}$	${}^{4}P$	3/2	183.94	-	19
9 824.626	$3d^{3}4s^{2}$	${}^{4}P$	5/2	112.834	-	19
10 892.520	$3d^{3}4s^{2}$	^{2}G	7/2	398.000	-	19
11 100.596	$3d^{3}4s^{2}$	^{2}G	9/2	298.59(90)	-	20
13 801.551	$3d^{3}4s^{2}$	^{2}P	3/2	333.37(90)	-	20
13 810.910	$3d^{3}4s^{2}$	^{2}P	1/2	143.90(30)	-	20
14 514.756	$3d^{3} 4s^{2}$	^{2}D	3/2	341.534	-	19
14 548.816	$3d^{3} 4s^{2}$	^{2}D	5/2	259.482	-	19
14 909.958	$3d^4 4s$	${}^{4}H$	7/2	328.8427	-	16
				31.48 (30)	-	18
				328.85	-	19

Tablo 2.1 : (devam)

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
14 949.359	$3d^4 4s$	${}^{4}H$	9/2	262.44756	-	16
				260.49 (90)	-	18
				262.453	-	19
15 000.937	$3d^4 4s$	${}^{4}H$	11/2	374.64427	-	16
				373.54 (30)	-	18
				374.652	-	19
15 062.959	$3d^4 4s$	${}^{4}H$	13/2	445.1198	-	16
				444.92 (30)	-	18
				445.129	-	19
15 078.387	$3d^4 4s$	${}^{4}P$	1/2	1445.25761	-	16
				1441.39 (60)	-	18
				364.54(90)	-	19
15 264.832	$3d^{4}4s^{2}$	^{2}H	11/2	297.69(15)	-	18
15 270.582	$3d^4 4s$	${}^{4}P$	3/2	806.01839	-	16
				804.04 (60)	-	18
				347.76(60)	-	19
15 572.035	$3d^4 4s$	${}^{4}P$	5/2	680.958	-	16
				682.32 (60)	-	18
				361.76(12)	-	19
15 664.801	$3d^4 4s$	${}^{4}F$	3/2	-114.88(15)	-	18
				-114.96	-	19
15 688.862	$3d^4 4s$	${}^{4}F$	5/2	305.94169	-	16
				305.85(18)	-	18
				305.948	-	19
15 724.229	$3d^4 4s$	${}^{4}F$	7/2	446.04776	-	16
				445.58(18)	-	18
				446.047	-	19
15 770.789	$3d^4 4s$	${}^{4}F$	9/2	511.47562	-	16
				512.64(60)	-	18
				511.486	-	19
17 054.924	$3d^4 4s$	${}^{4}G$	5/2	0.80943	-	16
				0.63(12)	-	18
				0.8	-	19

Tablo 2.1 : (devam)

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
17 116.947	$3d^4 4s$	${}^{4}G$	7/2	276.0005	-	16
				276.32(90)	-	18
				276.006	-	19
17 182.073	$3d^4 4s$	${}^{4}G$	9/2	398.79385	-	16
				397.82(15)	-	18
				398.802	-	19
17 242.070	$3d^4 4s$	${}^{4}G$	11/2	463.72057	-	16
				463.03(12)	-	18
				463.73	-	19
19 026.326	$3d^4 4s$	^{2}F	5/2	471.50132	-	16
				471.27(30)	-	18
				471.511	-	19
19 078.112	$3d^4 4s$	^{2}F	7/2	93.96318	-	16
				93.54(60)	-	18
				93.965	-	19
19 145.148	$3d^4 4s$	^{2}H	11/2	160.983	-	19
19 189.283	$3d^4 4s$	^{2}P	3/2	-224.5595	-	16
				-225.74(15)	-	18
				-224.564	-	19
20 202.551	$3d^4 4s$	⁶ S	5/2	-297.99(60)	-	18
				-298.2	-	19
20 767.609	$3d^4 4s$	^{4}D	7/2	590.29(30)	-	18
				590.7	-	19
20 789.112	$3d^4 4s$	^{4}D	5/2	534.62(24)	-	18
				534.99	-	19
20 813.108	$3d^4 4s$	^{4}D	3/2	404.72(60)	-	18
				405	-	19
20 830.344	$3d^4 4s$	^{4}D	1/2	-416.11(60)	-	18
				416.4	-	19
21 101.589	$3d^4 4s$	^{2}G	7/2	422.40(60)	-	18
				442.7	-	19
21 275.652	$3d^4 4s$	^{2}G	9/2	120.13(18)	-	18
				120.21	-	19
21 603.259	$3d^4$ 4s	^{2}G	9/2	597.75(90)	-	18
				598.17	-	19

Tablo 2.1 : (devam)

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
21 646.420	$3d^4 4s$	^{2}G	7/2	-7.26(15)	-	18
				-7.26	-	19
24 630.567	$3d^4 4s$	^{2}D	5/2	-8.18(12)	-	19
24 643.528	$3d^4 4s$	^{2}D	3/2	591.49(60)	-	19
31 334.104	$3d^4 4s$	${}^{4}F$	3/2	102.83(15)	-	19
31 355.710	$3d^4 4s$	${}^{4}F$	9/2	515.97(15)	-	19
31 357.439	$3d^4 4s$	${}^{4}F$	5/2	318.98(12)	-	19
31 371.087	$3d^4 4s$	${}^{4}F$	7/2	468.57(60)	-	19
31 624.805	$3d^4 4s$	${}^{4}P$	5/2	361.76(12)	-	19
31 717.485	$3d^4 4s$	${}^{4}P$	3/2	347.76(60)	-	19
31 764.979	$3d^4 4s$	${}^{4}P$	1/2	364.54(90)	-	19
32 352.337	$3d^{5}$	${}^{4}G$	5/2	386.46(18)	-	19
32 371.662	$3d^5$	${}^{4}G$	7/2	191(12)	-	19
32 393.954	$3d^{5}$	${}^{4}G$	9/2	122.82(12)	-	19
32 417.169	$3d^5$	${}^{4}G$	11/2	98.36(30)	-	19
33 310.629	$3d^5$	${}^{4}P$	5/2	208.395(90)	-	19
33 412.584	$3d^5$	${}^{4}P$	3/2	256.62(21)	-	19
36 983.603	$3d^5$	${}^{4}F$	3/2	482.96(18)	-	18
				483.3	-	19
36 989.185	3 <i>d</i> ⁵	${}^{4}F$	5/2	188.27(12)	-	18
				188.4	-	19
37 025.579	3 <i>d</i> ⁵	${}^{4}F$	7/2	92.64(60)	-	18
				92.7	-	19
37 075.563	3 <i>d</i> ⁵	${}^{4}F$	9/2	53.66(60)	-	18
				53.7	-	19
37 116.769	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>s</i>	^{6}D	1/2	-637.05(18)	-	19
37 158.582	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>s</i>	^{6}D	3/2	-104.93(12)	-	19
37 227.489	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>s</i>	^{6}D	5/2	-15.29(30)	-	19
37 322.170	$3d^4 5s$	^{6}D	7/2	42.36(18)	-	19
37 375.172	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>s</i> 5 <i>s</i>	^{6}F	1/2	-696.71(15)	-	19
37 423.212	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>s</i> 5 <i>s</i>	^{6}F	3/2	383.73(90)	-	19
37 440.777	$3d^4 5s$	^{6}D	9/2	83.64(30)	-	19
37 503.240	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>s</i> 5 <i>s</i>	^{6}F	5/2	540.82(60)	-	19
37 615.057	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>s</i> 5 <i>s</i>	^{6}F	7/2	591.19(12)	-	19
37 758.146	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>s</i> 5 <i>s</i>	^{6}F	9/2	613.67(90)	-	19

Tablo 2.1 : (devam)

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
37 931.460	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>s</i> 5 <i>s</i>	^{6}F	11/2	629.26(60)	-	19
37 940.211	$3d^4 5s$	^{4}D	1/2	888.28(24)	-	18
38 004 041	$3d^4 5s$	^{4}D	3/2	69.55(12)	-	18
38 106.385	$3d^{4}5s$	^{4}D	5/2	-10.49(60)	-	18
38 242.535	$3d^{4}5s$	^{4}D	7/2	-3.6(30)	-	18
39 127.228	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>s</i> 5 <i>s</i>	${}^{4}F$	3/2	-196.96(15)	-	18
39 241.384	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>s</i> 5 <i>s</i>	${}^{4}F$	5/2	384.03(60)	-	18
39 398.893	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>s</i> 5 <i>s</i>	${}^{4}F$	7/2	569.60(60)	-	18
39 596.988	$3d^4 4s 5s$	${}^{4}F$	9/2	649.32(24)	-	18
43 649.336	$3d^4 4s4d$	^{6}H	5/2	200(5)	-	28
43 706.874	$3d^4 4s4d$	^{6}H	7/2	42(9)	-	28
43 787.604	$3d^4 4s4d$	^{6}H	9/2	685(6)	-	28
43 894.149	$3d^4 4s4d$	^{6}H	11/2	298(6)	-	28
44 028.264	$3d^4 4s4d$	^{6}H	13/2	366(5)	-	28
44 189.954	$3d^4 4s4d$	^{6}H	15/2	433(11)	-	28
44 327.214	$3d^4 4s4d$	^{6}G	13/2	503(9)	-	28
45 747.235	$3d^4 5d$	^{6}D	1/2	-512.34(24)	-	19
45 788.691	$3d^4 5d$	^{6}D	3/2	-47.97(15)	-	19
45 858.647	$3d^4 5d$	^{6}D	5/2	34.48(18)	-	19
45 924.360	$3d^4 5d$	^{4}D	1/2	783.05(21)	-	19
45 956.173	$3d^4 5d$	^{6}D	7/2	80.64(60)	-	19
45 990.235	$3d^4 5d$	^{4}D	3/2	82.74(90)	-	19
46 078.826	$3d^4 5d$	^{6}D	9/2	110.92(60)	-	19
46 094.037	$3d^4 5d$	^{4}D	5/2	26.08(12)	-	19
46 230.130	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>d</i>	^{4}D	7/2	41.07(60)	-	19

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
16 631.489	$3d^3 4s4p$	^{6}G	3/2	-27(2)	-	28
16 449.875	$3d^3 4s4p$	^{6}G	5/2	289(6)	-	28
16 572.638	$3d^3 4s4p$	^{6}G	7/2	390(4)	-	28
16 728.803	$3d^3 4s4p$	^{6}G	9/2	432(2)	-	28
16 917.210	$3d^3 4s4p$	^{6}G	11/2	455(2)	-	28
17 136.538	$3d^3 4s4p$	^{6}G	13/2	466(2)	-	28
18 085.952	$3d^3 4s4p$	^{6}D	1/2	938.5(4)	0	15
				939.94(25)	0	21
18 120.104	$3d^3 4s4p$	⁶ F	1/2	-351.14(24)	0	21
18 126.250	$3d^3 4s4p$	⁶ D	3/2	595.9(5)	-2(5)	15
				594.69(13)	-4.4(11)	21
18 174.074	$3d^3 4s4p$	^{6}F	3/2	286.44(11)	-4.4(9)	21
18 198.091	$3d^3 4s4p$	^{6}D	5/2	537.8(4)	-15(7)	15
				537.44(99)	-4(14)	21
18 258.855	$3d^3 4s4p$	^{6}F	5/2	390.18(11)	-0.6(15)	21
18 302.280	$3d^3 4s4p$	^{6}D	7/2	514.5(3)	3(12)	15
				514.35(7)	-1.2(15)	21
18 372.462	$3d^3 4s4p$	^{6}F	7/2	435.95(7)	4.3(16)	21
18 438.044	$3d^3 4s4p$	^{6}D	9/2	503.5(2)	6(15)	15
				503.46(5)	3.3(17)	21
18 513.403	3 <i>d</i> ³ 4 <i>s</i> 4 <i>p</i>	^{6}F	9/2	467.33(8)	10.9(20)	21
18 680.070	3 <i>d</i> ³ 4 <i>s</i> 4 <i>p</i>	^{6}F	11/2	495.53(5)	18.1(17)	21
20 606.467	$3d^3 4s4p$	^{4}D	1/2	-179.874	-	12
				-185.86(150)	-	18
20 687.769	3 <i>d</i> ³ 4 <i>s</i> 4 <i>p</i>	^{4}D	3/2	599.58	-	10
				544.81(18)	-	18
20 828.481	3 <i>d</i> ³ 4 <i>s</i> 4 <i>p</i>	^{4}D	5/2	611.06(60)	-	18
				599.58	-	11
21 032.503	3 <i>d</i> ³ 4 <i>s</i> 4 <i>p</i>	^{4}D	7/2	606.15(21)	-	18
				599.58	-	11
21 841.421	3 <i>d</i> ³ 4 <i>s</i> 4 <i>p</i>	${}^{4}G$	5/2	209.85	-	10
				133.50(27)	-	18
21 963.437	$3d^3 4s4p$	${}^{4}G$	7/2	299.79	-	10
				326.77(21)	-	18

Tablo 2.2 : 51 V elementinin tek pariteli enerji seviyelerine ait daha önceki çalışmalarda
belirlenen konfigürasyon, terim ve J değerleri ile bilinen A manyetik dipol ve B elektrik
kuadropol aşırı ince yapı sabitleri.

Tablo 2.2 : (devam)

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
22 121.079	$3d^3 4s4p$	${}^{4}G$	9/2	359.75	-	10
				408.19(27)	-	18
22 313.832	$3d^3 4s4p$	${}^{4}G$	11/2	425.7	-	11
				448.67(12)	-	18
				446.69(30)	-	21
23 088.074	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	3/2	44.07(90)	-	18
23 210.560	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	5/2	329.77	-	10
				358.73(150)	-	18
23 353.135	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	7/2	419.71	-	10
				482.36(60)	-	18
23 519.872	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	9/2	449.69	-	10
				524.63(60)	-	18
23 608.765	$3d^3 4s4p$	^{2}D	3/2	626.23(90)	-	10
23 935.112	$3d^3 4s4p$	^{2}D	5/2	-27.16(15)	-	18
24 648.114	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>p</i>	^{6}P	3/2	-100.13(30)	-	18
24 727.841	$3d^4 4p$	⁶ P	5/2	29.02(12)	-	18
24 838.578	$3d^4 4p$	⁶ P	7/2	106.37(60)	-	18
25 930.544	$3d^4 4p$	${}^{4}F$	3/2	634.35(12)	-	18
26 004.234	$3d^4 4p$	${}^{4}F$	5/2	215.85(60)	-	20
26 021.907	$3d^3 4s4p$	^{2}G	7/2	431.55(60)	-	18
26 122.094	$3d^4 4p$	${}^{4}F$	7/2	174.78(60)	-	18
26 171.918	$3d^4 4p$	${}^{4}F$	9/2	89.04(12)	-	18
				85.14(21)	-	16
26 182.637	$3d^4 4p$	^{4}D	1/2	1100.23(30)	-	18
26 249.476	$3d^4 4p$	^{4}D	3/2	141.20(21)	-	18
26 344.902	$3d^3 4s4p$	^{2}G	9/2	94.64(15)	-	18
26 352.634	$3d^4 4p$	^{4}D	5/2	15.29(90)	-	18
26 480.286	$3d^4 4p$	^{4}D	7/2	-17.09(60)	-	18
27 187.747	$3d^3 4s4p$	^{2}F	5/2	586.72(60)	-	18
27 470.790	$3d^3 4s4p$	^{2}F	7/2	62.81(30)	-	18
30 021.627	$3d^3 4s4p$	${}^{4}P$	1/2	1394.7(14.2)	-	11
30 094.585	$3d^3 4s4p$	${}^{4}P$	3/2	686.52(40)	-	20
31 200.152	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	3/2	-53.96(60)	-	20
31 229.014	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	5/2	416.71(30)	-	16
				411.31(90)	-	18

Tablo 2.2 : (devam)

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
31 268.091	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	7/2	560.61(60)	-	16
				562.41(90)	-	18
31 317.440	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	9/2	609.38(18)	-	18
31 786.207	$3d^3 4s4p$	^{4}P	1/2	1022.28(60)	-	20
31 962.265	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>p</i>	^{2}S	1/2	863.40(60)	-	20
32 660.416	$3d^3 4s4p$	^{4}D	5/2	512.64(90)	-	20
32 692.042	$3d^3 4s4p$	${}^{4}H$	7/2	107.92(60)	-	20
32 724.801	$3d^3 4s4p$	^{2}P	1/2	536.62(90)	-	20
32 767.911	$3d^3 4s4p$	^{2}P	3/2	-20.99(90)	-	20
32 788.180	$3d^3 4s4p$	${}^{4}H$	9/2	347.76(30)	-	20
33 306.943	$3d^3 4s4p$	^{2}G	9/2	573.80(12)	-	20
33 360.280	$3d^3 4s4p$	^{2}G	7/2	203.56(15)	-	20
33 481.426	$3d^3 4s4p$	^{2}F	7/2	518.04(15)	-	20
33 527.589	$3d^3 4s4p$	^{2}F	5/2	-6(30)	-	20
33 640.280	$3d^3 4s4p$	^{2}H	9/2	99.53(12)	-	20
33 966.834	$3d^3 4s4p$	^{4}D	1/2	653.86(24)	-	18
33 976.069	$3d^3 4s4p$	^{4}D	3/2	9.29(12)	-	18
34 065.731	$3d^3 4s4p$	^{4}D	5/2	360.35(30)	-	18
34 127.931	$3d^3 4s4p$	^{4}D	7/2	456.28(30)	-	18
34 167.882	$3d^3 4s4p$	^{2}D	5/2	512.64(21)	-	20
34 374.872	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	7/2	477.57(18)	-	20
34 428.773	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	3/2	-137.90(12)	-	20
34 486.787	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	5/2	638.85(21)	-	20
34 529.821	$3d^3 4s4p$	${}^{4}F$	7/2	600.48(60)	-	20
34 537.299	$3d^3 4s4p$	^{4}D	3/2	311.48(15)	-	18
34 619.598	$3d^3 4s4p$	^{4}D	5/2	309.08(30)	-	18
34 747.128	$3d^3 4s4p$	^{4}D	7/2	195.46(12)	-	18
37 174.691	$3d^4 4p$	^{2}G	7/2	449.69(60)	-	20
41 429.042	$3d^4 4p$	${}^{4}F$	5/2	296.49(12)	-	18
41 492.385	$3d^4 4p$	${}^{4}F$	7/2	262.92(60)	-	18
41 599.436	$3d^4 4p$	${}^{4}F$	9/2	253.32(60)	-	18
41 654.726	$3d^4 4p$	${}^{4}G$	5/2	300.69(90)	-	18
41 751.931	$3d^3 4s4p$	${}^{4}P$	1/2	-805.54(18)	-	18
41 758.357	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>p</i>	${}^{4}G$	7/2	275.21(24)	-	18
41 848.708	$3d^3 4s4p$	${}^{4}P$	3/2	-203.56(60)	-	18

Tablo 2.2 : (devam)

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
41 860.647	$3d^4 4p$	${}^{4}G$	9/2	266.21(30)	-	18
41 918.255	$3d^4 4p$	${}^{4}G$	11/2	262.32(30)	-	18
42 009.918	$3d^3 4s4p$	${}^{4}P$	5/2	21.46(15)	-	18
42 090.740	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}F	1/2	855.00(18)	-	19
42 120.696	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}F	3/2	126.21(60)	-	19
42 172.123	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}F	5/2	29.59(27)	-	19
42 236.621	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}F	7/2	12.53(18)	-	19
42.330.730	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}F	9/2	7.67(21)	-	19
42 404.289	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}D	3/2	-512.64(90)	-	19
42 440.633	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}F	11/2	21.70(18)	-	19
42 442.521	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}D	1/2	-849.01(24)	-	19
42 480.002	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}D	5/2	-214.05(90)	-	19
42 495.742	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	⁶ P	3/2	-180.47(90)	-	19
42 577.351	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	⁶ P	5/2	-44.67(30)	-	19
42.587.041	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}D	7/2	-91.50(21)	-	19
42 680.399	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	⁶ P	7/2	22.01(15)	-	19
42 724.909	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{6}D	9/2	4.20(27)	-	19
42 981.696	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	${}^{4}F$	3/2	423(90)	-	18
43 051.577	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	${}^{4}F$	5/2	197.80(21)	-	18
43 147.306	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	${}^{4}F$	7/2	134.61(24)	-	18
43 249.527	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{4}D	1/2	494.95(24)	-	18
43 266.336	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	${}^{4}F$	9/2	118(27)	-	18
43 309.081	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{4}D	3/2	187.37(15)	-	18
43 331.784	$3d^{3} 4s 5p$	^{6}G	3/2	315.98(60)	-	19
43 393.955	$3d^{3} 4s 5p$	^{6}G	5/2	184.37(60)	-	19
43 410.983	$3d^4 5p$	^{4}D	5/2	159.19(60)	-	18
43 443.562	3 <i>d</i> ⁴ 5 <i>p</i>	^{4}P	1/2	-947.34(30)	-	18
43 483.426	$3d^{3} 4s 5p$	^{6}G	7/2	355.25(30)	-	19
43 504.252	$3d^4 5p$	${}^{4}P$	3/2	195.16(15)	-	18
43 555.331	$3d^4 5p$	^{4}D	7/2	171.78(90)	-	18
43 585.786	$3d^4 5p$	${}^{4}P$	5/2	45.57(60)	-	18
43 598.530	$3d^{3} 4s 5p$	^{6}G	9/2	432.09(21)	-	19
43 637.752	$3d^{3} 4s 5p$	^{6}F	1/2	-599.58(15)	-	19
43 674.287	$3d^{3} 4s 5p$	^{6}F	3/2	327.67(90)	-	19
43 708.411	$3d^{3} 4s 5p$	^{6}D	1/2	1407.36(21)	-	19

Tablo 2.2 : (devam)

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A(MHz)	B(MHz)	Ref. No
43 739.743	$3d^3 4s 5p$	${}^{6}G$	11/2	472.89(15)	-	19
43 744.445	3d ³ 4s 5p	${}^{6}F$	5/2	471.27(18)	-	19
43 779.227	3d ³ 4s 5p	^{6}D	3/2	818.73(90)	-	19
43 849.242	3d ³ 4s 5p	${}^{6}F$	7/2	518.34(30)	-	19
43 886.617	3d ³ 4s 5p	^{6}D	5/2	692.51(60)	-	19
43 906.772	3d ³ 4s 5p	${}^{6}G$	13/2	500.38(90)	-	19
43 988.360	3d ³ 4s 5p	${}^{6}F$	9/2	542.32(60)	-	19
44 026.568	3d ³ 4s 5p	^{6}D	7/2	682.62(30)	-	19
44 164.337	3d ³ 4s 5p	${}^{6}F$	11/2	571.82(18)	-	19
44 202.759	3d ³ 4s 5p	^{6}D	9/2	587.29(60)	-	19
44 554.607	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>p</i>	^{4}D	3/2	331.57(18)	-	18
44 616.946	3 <i>d</i> ⁴ 4 <i>p</i>	^{4}D	5/2	332.17(90)	-	18

3. MALZEME VE YÖNTEM

3.1. ATOMUN KUANTUMLU YAPISI

Atomların yapılarının kuantumlu olduğu (atomun enerji seviyelerinin kuantumlu olduğu) 1914 yılında Frank ve Hertz tarafından yapılan deneyde gösterilmiştir.

1925 yılında Schrödinger dalga teorisi ortaya çıkınca atomik yapı da bu teori ile açıklanmak istendi. Bu yeni model Z > 1 olanları da kapsar. Hidrojen atomu en basit atom ve hidrojen atomunun Coulomb potansiyeli küresel simetrik olduğu için dalga modelinin en basit uygulamasını oluşturur [3].

Hidrojen atomunun dalga fonksiyonu, keyfi küresel potansiyelleri içeren radyal fonksiyonu R(r) olan radyal kısma ve radyal koordinatlara bağlı olmayan küresel fonksiyonu Y^m₁ olan açısal kısma bağlıdır [30].

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \tag{3.1}$$

Küresel harmonikler, yani açılara bağlı Y_{lm} fonksiyonları açısal momentum operatörlerinin özfonksiyonları olup özdeğer denklemleri

$$LY_{lm} = \sqrt{l(l+1)}\hbar Y_{lm} \tag{3.2}$$

$$L_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm} \tag{3.3}$$

şeklinde yazılabilir [2].

Atom yapısını açıklayabilmek için kuantum sayıları tanımlanmıştır.

Baş kuantum sayısı $n = 1, 2, 3, ..., \infty$ Yörünge açısal momentum kuantum sayısı l = 0, 1, 2, ..., (n - 1) Yörünge manyetik kuantum sayısı $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$

Burada $m_1 \rightarrow (2l+1)$ farklı değer alır. Bütün bu kuantum sayıları merkezcil alan probleminin çözümünde dalga fonksiyonunun (ya da onun R, Θ ve Φ kısımlarının) sağlaması gereken sınır şartlarından kaynaklanır [2].

3.1.1. Manyetik Momentler

Her açısal momentuma bir dipol momenti eşlik edeceğine göre atomlarda yörünge dipol momenti, spin dipol momenti, toplam dipol momenti ve çekirdek dipol momentlerinden söz etmek mümkündür.

Bohr yörüngesinde dolanan elektron bir i akımı oluşturur. İçinde i akımı taşıyan r yarıçaplı bir halkanın dipol momenti

$$\mu_{\ell} = iA = i\pi r^2 \tag{3.4}$$

olup, akım değeri de

$$i = -\frac{\mathrm{ev}}{2\pi r} \tag{3.5}$$

ve yörünge açısal momentumu

$$L = mvr = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar \tag{3.6}$$

formülleri birleştirildiğinde, elektronun yörünge dipol momenti

$$\mu_{\ell} = -\frac{e\hbar}{2m}\sqrt{\ell(\ell+1)} \tag{3.7}$$

olarak bulunur.

 $\mu_{\scriptscriptstyle B}$ = - $e\hbar$ / 2m = 0.927 x $10^{\text{-}23}$ J/T $\,$ Bohr manyetonu adını alır.

Atom yörüngesindeki elektronun yörünge manyetik dipol momenti Bohr manyetonu cinsinden

$$\mu_{\ell} = -\mu_B \sqrt{\ell(\ell+1)} \tag{3.8}$$

şekline dönüşür. Yörünge dipol momenti aynı zamanda vektörel olarak

$$\vec{\mu}_{\ell} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L} \tag{3.9}$$

şeklinde yazılır. Denklem (3.9)'dan

$$g_{\ell} = \frac{\vec{\mu}_{\ell}/\mu_B}{\vec{L}/\hbar} = 1 \tag{3.10}$$

şeklinde bir yörünge Landé çarpanı tanımlanır.

Bu tanım ile yörünge dipol momenti,

$$\vec{\mu}_L = \frac{g_\ell \mu_B}{\hbar} \vec{L} \tag{3.11}$$

olur. Yörünge dipol momenti skaler olarak yazılırsa

$$\mu_{\ell} = g_{\ell} \mu_B \sqrt{\ell(\ell+1)} \tag{3.12}$$

elde edilir.

Elektronlar atomun çekirdeği etrafında yörüngelerde dolanırken aynı zamanda kendi eksenleri etrafında da dönmektedirler. Bu spin hareketinden kaynaklanan bir spin dipol momentleri olduğu deneysel olarak gözlenmiştir. Elektronların spin dipol momenti kendi içindeki yük dağılımından kaynaklanır. Ancak elektronların iç yapısında yük dağılımının şekli bilinmediği için spin dipol momentini hesaplamak pek kolay olmaz. Elektronların spin kuantum sayısı s = 1/2 olduğu bilindiğinden spin açısal momentumu,

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \tag{3.13}$$

olarak yazılır. Deneysel gözlemlerden de yararlanarak, spin Landé çarpanı

$$g_s = \frac{\mu_s/\mu_B}{\vec{S}/\hbar} = 2 \tag{3.14}$$

olarak bulunur. Buna göre elektronun spin dipol momenti

$$\mu_s = \frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S} \tag{3.15}$$

olur. Spin dipol momenti skaler olarak

$$\mu_s = g_s \mu_B \sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}\mu_B \tag{3.16}$$

şeklinde yazılır.

Lande çarpanlarının (3.10) ve (3.14) denklemlerindeki değerlerine Dirac değerleri denir.

Atoma bağlı bir elektronun hem yörünge hem de spin dipol momenti olacağına göre bu iki küçük mıknatıs etkileşecek ve bir bileşke dipol mıknatısı yani bir toplam dipol momenti oluşturacaktır. Bu oluşum açısal momentum operatörleri (vektörleri) cinsinden

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \tag{3.17}$$

şeklinde yazılır. Burada \vec{J} 'ye toplam açısal momentum vektörü denir. Dipol moment cinsinden de yazıldığında

$$\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_\ell + \vec{\mu}_s = \left(\mu_\ell \cos\theta_{LJ} + \mu_s \cos\theta_{SJ}\right).\hat{n}$$
(3.18)

elde edilir.

Toplam Landé çarpanı,

$$g_j = \frac{\vec{\mu}_j / \mu_B}{\vec{J} / \hbar} \tag{3.19}$$

şeklindedir. Elektronun toplam dipol momenti vektörel olarak

$$\vec{\mu}_j = \frac{g_j \mu_B}{\hbar} \vec{J} \tag{3.20}$$

ve skaler olarak

$$\mu_{j} = g_{I} \mu_{B} \sqrt{j(j+1)} \tag{3.21}$$

yazılır. Burada g_i Landé çarpanı,

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)}$$
(3.22)

ile elde edilir.

Toplam açısal kuantum sayısı j, $| \ell - s | \leq j \leq (\ell + s)$ aralığında değerler alır

Elektronun toplam dipol momenti içinde spin bileşenin de olması atomik spektroskopide yeni spektral çizgilerin ortaya çıkmasına yani spektral yarılmalara sebep olur.

Atomun çekirdeğinde bulunan parçacıklara nükleon denir. Nükleonlar nötron ve protonlardan ibarettir. Çekirdek içindeki çok sayıda nötron ve protonun, kütle merkezi etrafında bir dönme hareketi yapması çekirdeğin çok yoğun bir ortam olması sebebiyle zordur. Ancak nötron ve protonlar spin hareketlerini kolaylıkla sürdürürler. Yani çekirdek içinde çok sayıda, proton ve nötron spin dipol momentleri vardır. Ancak bunlar birbirlerinin etkisi altındadırlar ve nötron dipol momentleri kendi aralarında ikişer ikişer çiftlenirler. Sonuçta çiftlenmemiş protonun, ya da nötronun veya her ikisinin birden dipol momentleri kalır ve bu dipol momenti o çekirdeğin dipol momentini oluşturur.

Çekirdek spini kuantum sayısı i = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3,... olmak üzere, çekirdek spini açısal momentumu

$$I = \sqrt{i(i+1)}\hbar\tag{3.23}$$

ile verilir. Çekirdek spin dipol momenti

$$\vec{\mu}_I = \frac{g_j \mu_N}{\hbar} \vec{I} \tag{3.24}$$

şeklinde yazılır. Burada μ_N nükleer manyeton olup,

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = \frac{\mu_B}{1836} = 0.5x10^{-26} J/T \tag{3.25}$$

değerindedir.

Atomun elektronlarından kaynaklanan $\vec{\mu}_j$, çekirdeğinden kaynaklanan $\vec{\mu}_I$ dipol momentleri birbiriyle etkileşir. Bu etkileşim sonunda atom için bir toplam dipol moment (3.26)'daki gibi tanımlanır.

$$\vec{\mu}_F = \vec{\mu}_j + \vec{\mu}_I \tag{3.26}$$

Atomun toplam açısal momentumu da

$$F = \sqrt{f(f+1)}\hbar\tag{3.27}$$

olur.

Burada f, atomun toplam açısal momentum kuantum sayısıdır ve $|j-i| \le f \le (j+i)$ aralığında değerler alır ve birer birer artar ya da azalır. Atomun toplam dipol momenti vektörel olarak,

$$\vec{\mu}_F = \frac{g_f \mu_B}{\hbar} \vec{F} \tag{3.28}$$

ve skaler olarak

$$\mu_F = g_F \mu_B \sqrt{f(f+1)}$$
(3.29)

ifadesi ilverilir. Burada Landé çarpanı $g_{\rm F}$,

$$g_F = g_I \frac{f(f+1) + j(j+1) + i(i+1)}{2f(f+1)} - \frac{g_J}{1836} \frac{f(f+1) + i(i+1) - j(j+1)}{2f(f+1)}$$
(3.30)

olarak türetilebilir [2].

3.2. ÇOK ELEKTRONLU ATOMLAR

3.2.1. Merkezi Alan Yaklaşıklığı

Schrödinger denklemi iki elektronlu atomlar veya iyonlar için tam olarak çözülememekte, yaklaşık yöntemlerin kullanılması gerekmektedir. Bu nedenle çok elektronlu atomların ve iyonların yapısını incelemek için bazı genel yöntemler geliştirilmiştir.

Çok elektronlu atomlar üzerindeki tüm hesaplamaların başlangıç noktası iki elektronlu atomlar için ele aldığımız merkezcil alan yaklaşımıdır. Bu yaklaşıklıktaki temel düşünce, atomik elektronların, çekirdek ve diğer tüm elektronların oluşturdukları etkin ve küresel olarak simetrik $U(\vec{r})$ potansiyelinde, diğer elektronlardan bağımsız olarak hareket etmeleridir [31].

Sadece elektronlarla çekirdek arasındaki çekici Coulomb etkileşmelerini ve elektronlar arasındaki Coulomb itmelerini göz önünde bulundurarak, dış alan yokken *N* elektronlu atomun Hamiltonian'i

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r_i} \right) + \sum_{i>j=1}^{N} \frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)r_{ij}}$$
(3.31)

olarak yazılabilir.
Hamiltonian'deki terimler,

$$\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_i}^2\right)$$
: Elektronun kinetik enerjisini

$$\left(-\sum_{i=1}^{N} \frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r_i}\right)$$
: Elektronla çekirdek arasındaki Coulomb etkileşmesini,

$$\left(\sum_{i>j=1}^{N} \frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)r_{ij}}\right)$$
: Elektronlar arası Coulomb etkileşmesini

ifade etmektedir [32].

Her elektronun bağımsız olması durumunda çekirdek kuvveti ve durgun sayılan diğer (N-1) elektronun ortalama kuvveti etkisiyle hareket ettiği varsayımı altında elektron U(r) bağımsız parçacık potansiyel enerjisine sahiptir. Verilen U(r) potansiyel enerjisiyle Shrödinger Denklemi çözülüp her elektronun enerji ve dalga fonksiyonları bulunabilir [31].

Bu yaklaşımı uygulayabilmek için bir dizi yaklaşıklık daha gereklidir. Bu çözüm Hartree – Fock yöntemiyle yapılır.

U(r) potansiyel enerjisi küresel simetrik olup, açılardan bağımsızdır. Dolayısıyla, bu merkezi bir alan oluşmasını sağlar ve bu durumda Schrödinger denklemi değişkenlerine ayırma yöntemi ile çözümlenebilir. Bu ayırma, açısal ve radyal olmak üzere iki kısımdan oluşmaktadır [2].

3.2.2. Hartree – Fock Yöntemi

1928'de Hartree tarafından formüle edilen bu yaklaşımın başlangıç noktası zamandan bağımsız parçacık modelidir. Bu modele göre her elektron çekirdeğin çekici alanı ve diğer elektronlardan dolayı itme etkileşiminin ortalama etkisini dikkate alan etkin bir potansiyelde hareket eder. Her elektron çok elektronlu sistemlerde kendi dalga fonksiyonu ile tanımlanır.

Hartree bireysel elektron için dalga fonksiyonunun denklemini yazdı. Bu denklemi çözebilmek için öz uyumun gerekliliğini temel alan bir tekrarlama sürecini önerdi. Hartree metodunda her atom için toplam dalga fonksiyonu elektron koordinatlarında antisimetrik değildir. Hartree yönteminin genelleştirilmesi Pauli dışarlama ilkesine dayanan antisimetri gerekliliğini dikkate alarak 1930'da Fock ve Slater tarafından gerçekleştirilmiştir. Hartree – Fock olarak bilinen bu yöntem Hartree kuramının genellemesidir.

Hartree – Fock yaklaşımında bağımsız atom yaklaşıklığı ve Pauli dışarlama ilkelerine uyan N elektronlu dalga fonksiyonunun bir ϕ Slater determinantı olduğu varsayılır. Bu yöntem, atomsal dalga fonksiyonlarının ve enerjilerinin belirlenmesinde ilk adım olarak göz önüne alınabilir [33].

Elektronlar arasında etkileşimin olmaması durumunda Hamiltonian tek elektron Hamiltonian'lerinin toplamıdır.

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N} H_i \tag{3.32}$$

Elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesini dikkate alarak *i*, *k* elektron çifti arasındaki Coulomb etkileşme enerjisi $e^2/4\pi\epsilon_0 r_{ik}$ ile verilir. r_{ik} iki elektron arasındaki uzaklıktır.

Böylece ' ifadesi

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N} H_{i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0} r_{ik}}$$
(3.33)

olarak yazılabilir. Bu Hamiltonian için Schrödinger eşitliğini çözmek gerekir.

$$\widehat{H}\Psi = E_t \Psi \tag{3.34}$$

Tek elektron problemi çözüldüğünden ferdi elektronların dalga fonksiyonları $\Psi_Q(R_i)$ formunda bilinmektedir. Bu dalga fonksiyonuyla ilişkili bir yük dağılımı belirlenir.

$$\rho(r_i) = e \left| \Psi_Q(R_i) \right|^2 \tag{3.35}$$

R konumundaki bir yük ile yük dağılımı arasında bir etkileşme enerjisi vardır. Bu enerji, yükle elektrostatik potansiyelin çarpımı olarak verilir. Coulomb etkileşme enerjisi,

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{e\rho(r_i)}{|r-r_i|} d\tau_i = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{e^2 |\Psi_Q(R_i)|^2}{|r-r_i|} d\tau_i$$
(3.36)

ile elde edilir.

Seçilen bir elektronun dalga fonksiyonunu hesaplamak için, hem çekirdeğin Coulomb potansiyelinin ve hem de diğer tüm elektronların etkileşme enerjilerinin dikkate alındığı bir Schrödinger eşitliği çözülmelidir.

Seçilen bir elektron k indisine sahipse ve R_k koordinatlı ise, ferdi dalga fonksiyonları için Schrödinger eşitliği,

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r_k} + U_k^0(r) \right] \Psi_k^{(1)}(\vec{R}_k) = E\Psi_k^{(1)}$$
(3.37)

şeklindedir.

 $U_k(\vec{r}_k)$:Diğer tüm elekronları içeren Coulomb etkileşme enerjisidir ve ifadesi,

$$U_{k}(r) = \sum_{\substack{i \neq k}}^{N} \int_{\substack{B\"{u}\"{t}\"{u}n\\Hacim}} \frac{e^{2} \left| \Psi_{Qi}(\vec{R}_{i}) \right|^{2}}{4\pi\varepsilon_{0} |\vec{r} - \vec{r}_{i}|} d\tau_{i}$$
(3.38)

şeklindedir.

İlk yaklaşıklık Coulomb etkileşme enerjisinde Ψ_{Qi} için, $\Psi_{Qi}^{(0)}$ dalga fonksiyonunun yerine konulması ile elde edilir. (0) üst indisi tüm işlemi başlatmak için verilen tahmini bir dalga fonksiyonu kullanıldığını gösterir. (1) üst indisi de aynı şekilde bu dalga fonksiyonunun k elektronu için bir tekrarlı işlemin ilk basamağında elde edildiğini gösterir. Ψ_{Qi} yerine $\Psi_{Qi}^{(0)}$ deneme fonksiyonu yazıldığında $\Psi_k^{(0)}(\vec{R}_k)$ potansiyeli elde edilmiş olur. Bu potansiyel Schrödinger denkleminde yerine yazıldığında $\Psi_k^{(1)}(\vec{R}_k)$ dalga fonksiyonu bulunur. İşlem $\Psi_k^{(0)}(\vec{R}_k)$ dalga fonksiyonunda önemli bir değişim olmayana kadar, yani metot yakınsayana kadar tekrarlanır.

Öncelikle bağımsız elektron dalga fonksiyonu için bir tahmin yapılır, yaklaşık bir dalga fonksiyonu seçilir ve bu her bir elektronu tanımlar. Bu dalga fonksiyonları yük dağılımlarında kullanılarak, atomlardaki ortalama yük dağılımı bu fonksiyonlar için hesaplanır ve ortalama merkezi alan potansiyelini bulmak için kullanılır. Bu potansiyel enerji Schrödinger denklemi çözüldüğünde elektronun daha gerçeğe yakın dalga fonksiyonları bulunmuş olur [1].

Bu yeni dalga fonksiyonları ile yeniden U(r) potansiyeli hesaplanır. Dalga fonksiyonları ile potansiyel uyumlu olana kadar bu işlem devam eder. Bu nedenle bu öz uyumlu alan metodu olarak da bilinmektedir [34].

Bu iterasyon tekniğine Hartree – Fock yöntemi denir. Çözümler sonunda atomik yapı oldukça doğru bir şekilde açıklanabilmektedir [31].

3.3. İNCE YAPI (FINE STRUCTURE)

3.3.1. İnce Yapı Yarılmaları

Birçok atomda, yüklerin yörünge hareketinden kaynaklanan bir iç manyetik alan oluşur. Dış manyetik alan yokluğunda, bu iç manyetik alandan dolayı enerji düzeylerinde ve dolayısıyla spektrumlarında küçük bir yarılma olur. İç manyetik alandan kaynaklanan bu yarılmalara ince yapı yarılması denir [31].

İnce yapı yarılmaları, yörünge manyetik momentiyle, spin manyetik momenti arasındaki etkileşimden kaynaklanır.

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S \tag{3.39}$$

Elektronun *L* yörünge açısal momentumuyla birlikte ortaya çıkan bir μ_L yörünge manyetik momenti ve *S* spin açısal momentumuyla birlikte açığa çıkan bir μ_s spin manyetik momenti vardır. Manyetik momentler etkileşerek elektronun toplam manyetik momenti μ_j 'yi oluşturur [33].

Elektronun toplam açısal momentumu J,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \tag{3.40}$$

ile verilir. Toplam açısal momentum,

$$|L - S| \le J \le L + S \tag{3.41}$$

aralığında değerler alır.

Bir elektronun etkileşmesinde manyetik momentler hesaba katıldığında Hamiltonian yeni terimler kazanır. Spin – yörünge etkileşmesi denilen bu ek enerji V_{L-S} , iki manyetik momentin etkileşmesi,

$$V_{L-S} = \xi(r)\vec{\mu}_L \cdot \vec{\mu}_S = \xi(r)\left(-\frac{\vec{\mu}_B}{\hbar}\right)\vec{L} \cdot \vec{S}$$
(3.42)

şeklinde verilir [35].

 $\xi(r)$: Sadece radyal koordinata bağlı spin-dipol ve yörüngesel-dipol momentlerinin etkileşme sabitidir.

İnce yapının hesaplanmasında kullanılan Hamilton operatörü denklem (3.43)'deki şekilde verilmiştir.

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^{N} \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j=1}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^{N} \xi(r_i) \vec{s}_i. \vec{\ell}_i$$
(3.43)

 $\sum_{i=1}^{N} \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{\ell}_i$: Spin-yörünge etkileşme terimidir.

Merkezi alan yaklaşıklığında atomun dalga fonksiyonu, tek elektron dalga fonksiyonlarının lineer kombinasyonu olarak verilir. Bu dalga fonksiyonları radyal, açısal ve spin ile ifade edilen üç kısımdan oluşur. Farklı konfigürasyonların her biri $(n_1\ell_1, n_2\ell_2, ...)$ kuantum sayıları ile belirtilen farklı enerjilere sahiptir. Ama manyetik kuantum sayıları m_ℓ ve m_s için dejenerelik söz konusudur. Başka bir deyişle $(n_1\ell_1 m_{\ell_1}m_{s_1}, n_2\ell_2 m_{\ell_2}m_{s_2}, ...)$ ile verilen birçok durum aynı $(E_{n_1\ell_1,n_2\ell_2})$ enerjisine sahiptir. Bu durum enerjideki ince yapı yarılmaları olarak ifade edilir.

Şekil 3.1'de s = 1/2 ve $\ell = 1$ kuantum sayılarına sahip olan ²*P* terimli bir enerji seviyesinin ince yapı yarılmaları verilmiştir. [36].



Şekil 3.1: s = 1/2 ve $\ell = 1$ kuantum sayılarına sahip olan ²*P* terimli bir enerji seviyesinin ince yapı yarılmaları

3.4. AŞIRI İNCE YAPI (HYPERFINE STRUCTURE)

Aşırı ince yapı incelemeleri spektrumlarda ilk olarak A. Michelson, C. Fabry ve A. Perot tarafından yapılmıştır [37].

Elektronun spin ve yörünge hareketinden dolayı çekirdek üzerinde meydana getirdiği manyetik alan ve çekirdeğin manyetik dipol momenti, elektrik alan ile de çekirdeğin elektrik kuadropol momenti etkileşir. Bunun sonucunda, çekirdek spini enerjide yeni yarılmalara sebep olur. Bu yarılmalar aşırı ince yapı yarılmaları olarak bilinir.

Elektron dönme hareketi hesaba katıldığında, elektronun spini ile yörüngesi arasındaki etkileşim sonucu ince yapı otaya çıkar. Eğer atomik çekirdek çekirdek spini *I*'ye sahip ise, aşırı ince yapı seviyelerine bölünürler.

Çekirdeği, bir nokta manyetik (mıknatıs) olarak kabul ettiğimizde etkileşim enerjisi

$$V_{mag} = -\vec{\mu}_I \cdot \vec{H}(o) = -\mu_I \cdot H(o) \cos\left(\mu_I \cdot \vec{H}(0)\right)$$
(3.44)

şeklinde oluşur [30].

Çekirdeğin manyetik momenti μ_I , çekirdeğin spin hareketi ile proton ve nötronların spin hareketlerinin toplam açısal momentumu olarak düşünülmelidir.

Pertürbasyon teorisine göre, V_{mag} etkileşim enerjisinden ΔW_{mag} enerjisine geçmek için pertürbasyon olmayan enerji seviyeleri üzerinden zamana göre ortalama alınır; böylece, ek manyetik enerji için denklem (3.45)'deki ifadesi elde edilir.

$$\Delta W_{mag} = -\mu_I \cdot \overline{H(o)} \cos(\mu_I \cdot H(0))$$
(3.45)

H(o): H(0)'ın ortalamasıdır.

Elektronun yörünge hareketi, bir yörünge açısal momentum ℓ 'yi doğurur. Bu ise, elektron yükünün negatif işareti nedeniyle, çekirdekte üretilen H(0) manyetik alanınkine zıt bir doğrultudadır. Elektronun gerçek manyetik momenti μ_s , *S* spin hareketi nedeniyle, *S* ve orbital açısal momentumu ℓ 'nin paralel mi yoksa antiparalel mi olduklarına bağlı olarak çekirdekteki manyetik alanı azaltan veya arttıran, yörünge üzerinde lokalize olmuş bir manyetik moment olarak düşünülebilir.

L ve *S* sonucunda, *J* oluşur. Hesaplamalar çekirdekteki manyetik alana, bir tek elektronun orbital hareketinin, spin manyetik momentinden daha büyük bir katkıda bulunduğunu göstermiştir. Bu nedenle, H(0) ve *J*, gerçekte, bu durumda antiparaleldir (Bu yalnızca, elektronun dönüş hareketi mevcut ise doğrudur). Burada kullanılan modelde, elektronun bu durumda, çekirdekte olduğu varsayımı yapılmalıdır; böylece, H(0), μ_s ile aynı doğrultudadır. Bu, bazı elektronlar için her zaman geçerli olmaz ancak

durumların büyük çoğunluğunda doğrudur. Bu sebeple, H(0) ve J'nin normal olarak antiparalel oldukları var sayımı doğrulanmıştır.

Diğer yandan, μ_I ve *I*, eğer nükleer moment, bir pozitif yük (protonlardan kaynaklanan) tarafından üretiliyorsa, paraleldir (pozitif nükleer moment ve pozitif (*g*) faktörü).

Çekirdekte hiçbir negatif yük bulunmamaktadır, yine de bir grup çekirdek içerisinde μ_I ve *I*'nin antiparalel oldukları bulunmuştur. Bu, negatif nötron momentinin etkisinden kaynaklanmaktadır. Bu durumda, μ_I ve *I*'ye negatif işaret verilir.

H(0,) J'ni antiparalel ve nükleer manyetik momentin pozitif olduğu normal durumda, μ_I , en kararlı konumuna, H(0)'a paralel doğrultuda sahip olur; böylece, cos(I,J) ifadesi (-1) değerine sahiptir ve denklem (3.45),

$$\Delta W_{mag} = -\mu_I \cdot \overline{H(o)} \cos(\mu_I \cdot H(0)) = \Delta W_{I,J} = A I J \cos(I,J)$$
(3.46)

şeklini alır.

A : Manyetik dipol aşırı ince yapı sabitidir.

I ve *J* açısal momentum vektörleri, manyetik etkileşim yoluyla çiftleştirilmişlerdir; böylece, sonuç olarak, atoma ait toplam açısal momentum vektörünü (\vec{F}) meydana getirmişlerdir. Denklem (3.46)'den yararlanarak, $cos(\vec{l}, \vec{J})$ ifadesi, Şekil 3.2'deki vektör diyagramından denklem (3.47) elde edilir.



Şekil 3.2 : Atoma ait vektör modeli

$$\cos(I,J) = \frac{F^2 - I^2 - J^2}{2IJ}$$
(3.47)

Çekirdek ve yörünge elektronları arasındaki manyetik etkileşim, kuantum mekaniksel olarak açıklanmıştır. Bu görüşe göre,

$$F^{2} \rightarrow f(f+1)$$

$$I^{2} \rightarrow i(i+1)$$

$$J^{2} \rightarrow j(j+1)$$

olarak yer değiştirir. Bu durumda cos(I,J) ifadesi,

$$cos(I,J) = \frac{f(f+1) - i(i+1) - j(j+1)}{2IJ}$$
(3.48)

şeklinde oluşur.

F'in alabileceği mümkün değerler,

$$\vec{F} = \left(\vec{I} + \vec{J}\right), \dots \dots, \left|\vec{I} - \vec{J}\right|$$
(3.49)

şeklindedir.

$$C = [f(f+1) - i(i+1) - j(j+1)]$$
(3.50)

olmak üzere, denklem (3.46) son olarak denklem (3.51) verildiği gibi olmaktadır:

$$\Delta W_{I,J} = A \frac{C}{2} \tag{3.51}$$

A aşırı ince yapı sabitinin değeri de,

$$A = \frac{\mu_I \overline{H(o)}}{IJ} = \frac{\mu_n g_I \overline{H(o)}}{J}$$
(3.52)

olmaktadır.

Denklem (3.51) *A* değerinin bir çoklu seviyeden diğer bir çoklu seviyeye göre değiştiğini ifade eder. Elektronların çekirdekte oluşturdukları manyetik alan arttıkça, *A* değeri de artar. Kapalı bir elektronik kabuk, sıfır akım yoğunluğuna sahiptir ve bu nedenle, çekirdekte hiçbir manyetik alan üretmez. Aynı şey, kapalı alt kabuklar için geçerlidir.

En büyük nükleer manyetik alan ve aynı şekilde en büyük hfs bölünmesi, çekirdeğe en fazla yaklaşan çifti olmayan elektronlar tarafından üretilmektedir. Bu nedenle, en büyük *A* faktörünün, çift olmayan bir *s* elektronu içeren elektron konfigürasyonuna sahip multiplet seviyeler için olması beklenir.

Elektrik kuadropol etkileşimleri de yarılmalara katkıda bulunur. Fakat manyetik dipol etkileşmesine göre katkısı daha azdır.

Elektrik kuadropol enerjisi denklem (3.53) verildiği gibidir.

$$\Delta W_{el} = \frac{eQ'\overline{\varphi_{ZZ}(0)}}{4} \tag{3.53}$$

Q': Q tensörünün z bileşenidir.

Q: Kuadropol moment tensörüdür.

e Q: Kuadropol momentidir.

 $\overline{\varphi_{JJ}(0)}$: *J* ekseni etrafında silindirik simetriye sahip yörünge elektronların oluşturduğu elektrik alanın vektör gradyentidir.

Çekirdeğin yük dağılımının küresel simetrik olabilmesi için,

$$Q' = Q\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right) \tag{3.54}$$

olmalıdır.

Serbest atomdaki kuadropol etkileşimini incelediğimiz için, \vec{I} çekirdek spin açısal momentum vektörü ile \vec{j} elektronun toplam açısal momentum vektörü arasındaki açı sabittir ve bu açı θ olarak verilir. Bu durumda elektrik kuadropol etkileşim enerjisi,

$$\Delta W_{Q} = \frac{B}{4} \left[\frac{3}{2} \cos^{2}(I, J) - \frac{1}{2} \right]$$
(3.55)

ile belirtilir.

B : Elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitidir ve,

$$B = eQ\overline{\varphi_{JJ}(0)} \tag{3.56}$$

şeklinde verilir.

I,J,F'lerin küçük değerleri için, Casimir tarafından verilen elektrik kuadropol etkileşimleri sonucunda meydana gelen ek enerji ifadesi,

$$\Delta W_{Q} = \frac{B}{4} \frac{\frac{3}{2} [c(c+1) - 2i(i+1)j(j+1)]}{I(2I-1)J(2J-1)}$$
(3.57)

olarak belirtilir.

Elektrik kuadropol etkileşmesi, elektronik açısal momentumla ilişkili olan çekirdek spininin yönelimine bağlıdır. Dolayısıyla her aşırı ince yapı seviyesi için kuadropol

etkileşmesi farklı değerler alır. Bu yaklaşıma göre, çok elektronlu atomlarda küresel simetrik yük dağılımı, Denklem (3.57)'de belirtilen ifadeye katkıda bulunmaz.

Çekirdek spininin I = 0, 1/2 olduğu durumda yük dağılımı küresel simetriktir. ΔW_Q elektrostatik etkileşme ek enerjisinin sıfırdan farklı olabilmesi için, çekirdek spininin 1/2'den büyük olması gerekir [37].

3.4.1. Aşırı İnce Yapı Yarılmaları

Kütle numarası tek olan bir izotop için, F kuantum sayısına sahip bir aşırı ince yapı (hfs) seviyesinin toplam enerjisini saptamak için, yarılma seviyenin W_J enerjisine, iki ek enerjiyi eklemek gerekir.

$$W_F = W_J + A\frac{C}{2} + B\frac{\frac{3}{4}c(c+1) - i(i+1)j(j+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)}$$
(3.58)

Denkleme göre, çekirdek ile çekirdeğin yörünge elektronları arasındaki manyetik ve elektrik etkileşimi, *J* kuantum sayısına sahip bir ince yapı yarılması seviyesini, aşırı ince yapı seviyelerine böler. Seviyelerin sayısı, açısal momentum vektörleri *I* ve *J*'nin mümkün olan durumlarının sayısına eşittir. Eğer $J \ge I$ ise, *F* kuantum sayısı (2I + 1) tane ve eğer $I \ge J$ ise *F* kuantum sayısı (2J + 1) tane değer alır.

$$J \ge I \quad \to F, \quad 2I+1 \tag{3.59}$$

$$I \ge J \quad \rightarrow F, \quad 2J+1 \tag{3.60}$$

Elektrik kuadropol etkileşim sabiti *B* genelde, manyetik dipol terimi *A* ile karşılaştırıldığında daha küçüktür. Bunun nedeni, çekirdek elektrik kuadropol momentinin çok küçük olmasıdır. Deneysel olarak Doppler genişlemeli yapılan deneylerde manyetik dipol aşırı ince yapı etkileşmesini dikkate almak yeterlidir. Bu durumda denklem (3.58)'yi

$$W_F \approx W_J + \frac{A}{2} [f(f+1) - i(i+1) - j(j+1)]$$
(3.61)

şeklinde yazabiliriz.

Manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti olarak tanımladığımız *A*, aynı zamanda aralık faktörü olarak da adlandırılır. Bunun nedeni, manyetik etkileşme sebebiyle enerjide meydana gelen yarılmalarla oluşan seviyeler arasındaki enerji aralığının bu değere bağlı olmasıdır.

Her bir aşırı ince yapı geçişinin şiddeti denklem (3.62) ile hesaplanır.

$$H_{(F_o \to F_U)} \cong (2F_o + 1)(2F_u + 1) \begin{cases} I & F_o & J_o \\ 1 & J_U & F_U \end{cases}^2$$
(3.62)

 $H_{(F_o \rightarrow F_U)}$: Herhangi bir geçişin şiddeti,

 F_0 : Üst seviyenin F kuantum sayısı,

Fu : Alt seviyenin F kuantum sayısı,

I: Çekirdek spini,

 J_0 : Üst seviyenin J kuantum sayısı,

 J_u : Alt seviyenin J kuantum sayısıdır.

Denklem (3.62)deki $\begin{cases} I & F_0 & J_0 \\ 1 & J_U & F_U \end{cases}$ ifadesi $\Delta J = 0, \pm 1$ ve $\Delta F = 0, \pm 1$ durumlarına karşılık gelen (3.63), (3.64), (3.65), (3.66) denklemleriyle hesaplanır. Bu denklemden birine uyan *F* ve *J* değerlerine aşırı ince yapı geçişinin şiddeti hesaplanır.

$$\begin{cases} a & b & c \\ 1 & c-1 & b-1 \end{cases} = (1)^{s} \left[\frac{s(s+1)(s-2a-1)(s-2a)}{(2b-1)2b(2b+1)(2c-1)2c(2c+1)} \right]^{1/2}$$
(3.63)

$$\begin{cases} a & b & c \\ 1 & c-1 & b \end{cases} = (1)^{s} \left[\frac{s(s+1)(s-2a)(s-2b)(s-2c+1)}{2b(2b+1)(2b+2)(2c-1)2c(2c+1)} \right]^{1/2}$$
(3.64)

$$\begin{cases} a & b & c \\ 1 & c-1 & b+1 \end{cases} = \\ = (1)^{s} \left[\frac{(s-2b-1)(s-2b)(s-2c-1)(s-2c+2)}{(2b+1)(2b+2)(2b+3)(2c-1)2c(2c+1)} \right]^{1/2}$$
(3.65)

$$\begin{cases} a & b & c \\ 1 & c & b \end{cases} = (1)^{s+1} \left[\frac{2[b(b+1) + c(c+1) - a(a+1)]}{2b(2b+1)(2b+2)2c(2c+1)(2c+2)} \right]^{1/2}$$
(3.66)

Yukarıdaki dört denklemde,

- s = a + b + c,
- a : Çekirdek spini I,
- b: Üst seviyenin F kuantum sayısı F_0 ,
- *c* : Üst seviyenin *J* kuantum sayısı *J*₀'dır [37].

3.4.2. Aşırı İnce Yapı Parametreleri

Hfs etkileşmelerinin, özellikle ağır atomlarda, tam olarak tanımlanabilmesi relativistik etkinin gözönüne alınması ile mümkündür. Bu tanımlamada aşırı ince yapı (hfs) operatörlerinin matris elemanları relativistik dalga fonksiyonu ile oluşturulur. Bu operatörler relativitik olmayan *LS* seviyelerinde, relativistik seviyelerde olduğu gibi aynı beklenen değeri sağlayacak şekilde oluşturuldu. Bu efektif operatörler aşağıdaki formdadır.

$$\begin{aligned} \widehat{H}_{hfs}^{eff}(MI) &= 2\mu_B \frac{\mu_I}{I} I \sum_{n\ell} \left[\langle r^{-3} \rangle^{01} \ell - \sqrt{10} \langle r^{-3} \rangle^{12} \left[s \times C^{(2)} \right]^{(1)} \\ &+ \frac{2}{3} \langle r^{-3} \rangle^{10} s \right] \end{aligned} (3.67)$$

$$\hat{H}_{hfs}^{eff}(E2) = e \sum_{n\ell} \left[-C^{(2)} \langle r^{-3} \rangle_{n\ell}^{02} + (s \times \ell)^{(2)} \langle r^{-3} \rangle_{n\ell}^{11} + \left[s \times \left(C^{(4)} \ell \right)^{(3)} \right]^{(2)} \langle r^{-3} \rangle_{n\ell}^{13} \right] \quad (3.68)$$

 $\langle r^{-3} \rangle_{n\ell}^{k_s k_\ell}$; relativistik tek elektron – radyal integrallerinin lineer kombinasyonudur.

 ℓ : yörüngesel dönme momenti,

s : spin operatörü,

 $C^{(k)}$: k. mertebenin motife olmuş küresel harmoniğidir.

Denklemlerdeki tek elektron radyal integrallerinin, $\langle r^{-3} \rangle_{n\ell}^{k_s k_\ell}$ ifadelerinin fiziksel anlamları,

 $\langle r^{-3} \rangle^{10}$: Fermi kontak etkileşmesi,

 $\langle r^{-3} \rangle^{01}$: Elektronun yörüngesel dönme momentinin çekirdek üzerinde meydana getirdiği manyetik alanla çekirdeğin manyetik dipol etkileşmesi,

 $\langle r^{-3} \rangle^{12}$: Çekirdeğin, elektronun spininin manyetik momenti ile manyetik dipol etkileşmesi,

 $\langle r^{-3} \rangle^{02}$: Elekrik kuadropol etkileşim radyal integralidir.

 $\langle r^{-3} \rangle^{11}$: Relativistik bir terimdir ve klasik karşılığı yoktur.

 $\langle r^{-3} \rangle^{13}$: Relativistik bir trimdir ve klasik karşılığı yoktur.

Radyal integraller, çekirdek momenti etkileşimlerini içine alan $a_{n\ell}^{k_s k_\ell}$ ve $b_{n\ell}^{k_s k_\ell}$ tek elektron ayrışma parametreleri ile tanımlanır ve denklem (3.70), (3.71) ifadeleri ile verilen lineer denklem sistemleri gibidir.

$$a_{n\ell}^{10} = \frac{4}{3} \mu_B \frac{\mu_I}{I} \langle r^{-3} \rangle^{10}$$
(3.69)

$$a_{n\ell}^{k_{s}k_{\ell}} = 2\mu_{B}\frac{\mu_{I}}{I}\langle r^{-3}\rangle^{k_{s}k_{\ell}} \qquad k_{s}k_{\ell}:01,12$$
(3.70)

$$b_{n\ell}^{k_{s}k_{\ell}} = e^{2}Q\langle r^{-3}\rangle^{k_{s}k_{\ell}} \qquad k_{s}k_{\ell}:02,13,11$$
(3.71)

 $a_{n\ell}^{k_sk_\ell}$ ve $b_{n\ell}^{k_sk_\ell}$: Tek elektron ayrışma parametreleridir.

Relativistik olmayan yaklaşımda her bir açık yörünge için tek bir $a_{n\ell}^{k_sk_\ell}$ ve $b_{n\ell}^{k_sk_\ell}$ parametresi olmasına karşılık, relativistik durumda her bir açık yörünge için üç ayrışma parametresi söz konusudur.

Radyal integralin teorik olarak hesaplanması son derece zor olmakla birlikte, deneysel olarak elde edilen aşırı ince yapı sabitleri A ve B yardımı ile yarı – ampirik elde edilebilirler.

Hfs faktörleri *A* ve *B*, tek elektron radyal elektron parametreleri $a_{n\ell}^{k_s k_\ell}$ ve $b_{n\ell}^{k_s k_\ell}$ ile $\alpha_{n\ell}^{k_s k_\ell}$ ve $\beta_{n\ell}^{k_s k_\ell}$ açısal katsayılarının lineer kombinasyonu olarak verilir. Deneysel olarak elde edilen aşırı ince yapı sabitleri *A* ve *B*,

$$A = \sum_{n\ell} \left[\alpha_{n\ell}^{10} a_{n\ell}^{10} + \alpha_{n\ell}^{12} a_{n\ell}^{12} + \alpha_{n\ell}^{01} a_{n\ell}^{01} \right]$$
(3.72)

$$B = \sum_{n\ell} \left[\beta_{n\ell}^{02} \mathbf{b}_{n\ell}^{02} + \beta_{n\ell}^{13} \mathbf{b}_{n\ell}^{13} + \beta_{n\ell}^{11} \mathbf{b}_{n\ell}^{11} \right]$$
(3.73)

lineer denklem sistemleri şeklinde verilir. Toplama işlemi tüm açık elektron kabukları üzerinden yapılmıştır [37].

3.5. SPEKTRAL ÇİZGİ GENİŞLEMELERİ

Atomik geçişlerde, ışığın soğurma ve yayınlamasındaki spektral çizgiler tam olarak monokromatik değildir. Yüksek çözünürlüklü interferometrelerde bile, üst ve alt enerji seviyeleri arasında,

$$\Delta E = E_i - E_k = h \nu_{ik} \tag{3.74}$$

enerji farkına sahip bir geçişe karşılık gelen merkez frekansı v_0 etrafında soğurulan ya da yayınlanan şiddetin spektral bir dağılımı vardır. Bu dağılım, I(v) çizgi profili olarak adlandırılır.

Şekil 3.3'de bir spektral çizginin çizgi profili ve yarı genişliği gösterilmiştir.



Şekil 3.3 : Bir spektral çizginin çizgi profili ve yarı genişliği [30].

Spektral çizgi profili,

$$I(v_1) = I(v_2) = \frac{1}{2}I(v_0)$$
(3.75)

değerlerine sahip v_1 ve v_2 frekanslarının arasındaki frekans aralığı,

$$\delta v = v_2 - v_1 \tag{3.76}$$

"yarı maksimumdaki tam genişlik (FWHM)" olarak adlandırılır. Yarı genişlik açısal frekans cinsinden $\omega = 2\pi r$, $\delta \omega = 2\pi r$, $\delta \omega = 2\pi \delta v$ veya dalga boyu cinsinden $\delta \lambda = \lfloor \lambda_2 - \lambda_1 \rfloor$ şeklinde yazılır.

Genişleme mekanizmaları homojen ve homojen olmayan olmak üzere ikiye ayrılır. Bir örnekteki yayılma ve soğurma olasılığı tüm atomlar için aynıysa spektral çizgi profili homojen olarak genişler, olasılık tüm atomlar için farklıysa homojen olmayan çizgi genişlemesi gerçekleşir.

Spektral çizgilerin sınırlı çizgi genişlikleri için; doğal, Doppler ve çarpışma-basınç çizgi genişlemesi gibi çeşitli nedenler vardır [30].

3.5.1. Doğal Çizgi Genişlemesi

Uyarılmış bir atom doğal radyasyon olarak adlandırılan uyarılma enerjisi yayınlayabilir. Bu uyarılmış atomun $E_i \rightarrow E_k$ geçişine karşılık gelen bu doğal emisyonun spektral dağılımını incelemek için bu atomun elektronu, ω frekansına, *m* kütlesine ve *k* yay sabitine sahip olan klasik harmonik titreşici modeli ile tanımlanır. Sönümleme oldukça küçüktür ve sönümleme sabiti γ olmak üzere, $\gamma \ll \omega$ olarak ifade edilir. Titreşim genliği *x* (*t*), yavaş yavaş azalmasıyla yayınlanan radyasyonun frekansı sabit genliğe sahip bir titreşim gibi monokromatik değildir.



Şekil 3.4 : a) Sönümlü titreşimin zamana bağlı olarak yer değişim dağılımı **b**) x(t)'nin sağladığı $I(\omega - \omega_0) \propto |A(\omega)|^2$ şiddet profilinin Fourier dönüşümü ile elde edilen, $A(\omega)$ genliklerinin frekans dağılımı [38].

x(t) titreşimi, $A(\omega)$ genliklerine sahip $e^{(i\omega t)}$ monokromatik titreşimlerin bir süperpozisyonu olarak tanımlanabilir.

$$x(t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int_{0}^{\infty} A(\omega) e^{(i\omega t)} d\omega$$
(3.77)

Fourier dönüşümüyle,

$$A(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x(t) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{0}^{\infty} x_0 e^{-(\gamma/2)t} \cos(\omega_0 t) e^{-i\omega t} dt$$
(3.78)

elde edilir. Gerçek şiddet $I(\omega) \propto A(\omega) A^*(\omega)$ ile ifade edilir. Atomik bir geçişin ω_0 merkez frekansı civarında, $(\omega - \omega_0)^2 \ll \omega_0^2$ olmak üzere, $\omega + \omega_0$ terimleri ihmal edilebilir ve spektral çizginin şiddet profili,

$$I(\omega - \omega_0) = \frac{C}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}$$
(3.79)

olacaktır. Bu integralin normalizasyonu ile C sabiti,

$$C = I_0 \frac{\gamma}{2\pi} \tag{3.80}$$

olarak bulunur. Buna göre spektral çizginin şiddet dağılımı normalize olmuş Lorentz profili olarak adlandırılır. Lorentz dağılımı,

$$L(\omega - \omega_0) = \frac{\frac{\gamma}{2\pi}}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}$$
(3.81)

şeklindedir. Bu dağılım için yarı genişlik,

$$\delta\omega = \gamma \tag{3.82}$$

ya da

$$\delta v = \frac{\gamma}{2\pi} \tag{3.83}$$

ile verilir.

Lorentz profilinin yarı genişliği doğal çizgi genişlemesine karşılık gelir. Doğal çizgi genişlemesi Lorentz profiline uyar.

Atom E_i enerji seviyesinden E_i enerji seviyesin kendiliğinden emisyon yaptığında buna karşılık gelen Einstein katsayısı A_i 'dir. Klasik olarak alınan sönüm sabiti γ , kendiliğinden geçiş Einstein katsayısı A_i yerine geçmektedir. Bu durumda,

$$\delta\omega = A_i = \frac{1}{\tau_i} \tag{3.84}$$

ya da

$$\delta \nu = \frac{A_i}{2\pi} = \frac{1}{2\pi\tau_i} \tag{3.85}$$

olarak bulunur. Denklem (3.84) Heisenberg belirsizlik ilkesinden bulunabilir. τ_i yaşam ömrüne sahip, E_i uyarılmış enerji seviyesinin enerjisi, $\Delta E \cong \hbar/\tau$ belirsizliği ile belirlenir. Böylece E_k taban seviyesine geçiş frekansı $\omega_{ik} = (E_i - E_k) / \hbar$ değerinin $\delta \omega$ belirsizliği,

$$\delta\omega = \Delta E_i / \hbar = 1/\tau_i \tag{3.86}$$

olur.

Eğer E_k temel seviye değil de τ_k yaşam ömrüne sahip uyarılmış bir seviye ise ΔE_i ve ΔE_k belirsizliklerinin her ikisi de çizgi genişlemesine katkıda bulunur. Toplam doğal çizgi genişlemesi,

$$\Delta E = \Delta E_i + \Delta E_k \to \delta \omega_n = (1/\tau_i + 1/\tau_k) \tag{3.87}$$

olarak ifade edilir [38].



Şekil 3.5 : Belirsizlik İlkesi ile tanımlanan alt ve üst enerji seviyelerindeki belirsizliğin, doğal çizgi genişlemesi ile ilişkisi [38].

3.5.2. Doppler Genişlemesi

Çizgi genişlemelerinin en önemlisi düşük basınçtaki gazların yayınlanma ve soğurma sırasında atomlarının termal hareketleri sebebiyle hızlı bir şekilde hareket etmesiyle oluşan Doppler çizgi genişlemesidir.

Durağan bir gözlemci $\vec{v}(v_x, v_y, v_z)$ hızı ile hareket eden uyarılmış bir atomun \vec{k} dalga vektörü yönünde yayınladığı ω_0 frekansını Doppler olayı nedeniyle kaymış olarak görür (Şekil 3.6). Gözlemcinin gördüğü yayınlama frekansı,

$$\omega_e = \omega_0 + \vec{k}.\vec{v} \tag{3.88}$$

olarak verilir. Benzer şekilde gözlemcinin gördüğü soğurma frekansı,

$$\omega' = \omega - \vec{k}.\vec{\nu} \tag{3.89}$$

olur. Sadece ω' frekansı kendi ω_o özfrekansıyla çakıştığı zaman soğurma gözlenir. Soğurma frekansı $\omega = \omega_o$ ise,

$$\omega_a = \omega_0 + \vec{k}.\vec{v} \tag{3.90}$$

ve eğer dalga yayılım doğrultusu olarak z doğrultusu seçilirse, $k = \{0, 0, k_z\}$ ve $|k| = 2\pi/\lambda$ olur. Buradan

$$\omega_a = \omega_0 + \left(1 + \frac{\nu_z}{c}\right) \tag{3.91}$$

olur.



Şekil 3.6 : a) Monokromatik emisyon çizgisinin Doppler kayması b) Absorbsiyon çizgisi [38].

Atom foton yayınlama veya soğurma sırasında, gözlemciye doğru hareket ediyorsa $\vec{k} \cdot \vec{v} > 0$ görünen frekans artar ve gözlemciden uzaklaşıyorsa görünen frekans $\vec{k} \cdot \vec{v} < 0$ azalır.

 ω frekansına ve \vec{k} dalga vektörüne sahip olan bir düzlem dalga hareket eden bir atomla etkileşir ve ω frekans atomun hareke eden kısmında kaymış olarak görünür.

Doppler kaymasına sahip çizginin şiddet profili,

$$I(\omega) = I_0 e^{\left[-\left(\frac{c(\omega-\omega_0)}{\omega_0 v_p}\right)^2\right]}$$
(3.92)

olarak tanımlanan bu denklem Gauss profili olarak adlandırılır. Bu profil için yarı genişlik,

$$\delta\omega_D = 2\sqrt{\ln 2} \frac{\omega_0 v_p}{c} = \left(\frac{\omega_0}{c}\right) \sqrt{\frac{8kt \ln 2}{m}}$$
(3.93)

şeklindedir ve bu da Doppler genişliği olarak adlandırılır. Denklem (3.93), Denklem (3.92)'da yerine yazılırsa 1/(4In2) = 0.36 olmak koşuluyla,

$$I(\omega) = I_0 e^{-\left(\frac{(\omega - \omega_0)^2}{0.36\delta\omega_D^2}\right)}$$
(3.94)

olarak elde edilir.

Doppler çizgi genişlemesi temel olarak şu sebeplere bağlıdır:

- Doppler çizgi genişlemesinde yarı genişlik $\delta \omega_D$, ω_0 frekansı ile orantılı olarak lineer bir şekilde artar.
- Doppler çizgi genişlemesi sıcaklığın karekökü ile orantılı olacak şekilde artar.
 Sıcaklık azaldıkça Doppler genişlemesi azalır.

Doppler çizgi genişlemesi atomik kütlenin M^{1/2} oranında artmasıyla azalır.
 Kütlesi büyük olan atomlar, Doppler genişlemesinden daha fazla etkilenirler
 [38].

3.5.3. Çarpışma ve Basınç Genişlemesi

Gaz fazındaki atomlar arasında çarpışmalar olduğu zaman enerji aktarımı söz konusudur. Bu aktarım enerji seviyelerinin büyük ölçüde genişlemesine yol açar.

Çarpışmalar arasındaki ortalama zaman τ olarak alınırsa ve her çarpışma iki enerji seviyesi arasındaki spektral geçişte gerçekleşiyorsa, geçişin frekansında Δv kadarlık bir çizgi genişlemesi oluşur. Bu genişleme, Heisenberg'in belirsizlik ilkesinden türetilerek,

$$\delta \nu = (2\pi\tau)^{-1} \tag{3.95}$$

ifadesi ile verilir [34].

Uyarılmış seviyelerdeki atomun diğer atomlarla çarpışması sonucu spektral çizgi genişler ve uyarılmış seviyenin yaşam ömrü azalır. Bundan dolayı, basınç artışıyla birlikte atomlar daha net çarpışmalar yaparlar. Çarpışmaların sayısı sistemin basıncına da bağlı olduğu için, bu tip genişlemeler çarpışma genişlemesi veya basınç genişlemesi olarak bilinir.

Çarpışma ve basınç genişlemesi, farklı çeşit atomlar arasındaki çarpışmalara bağlı olan Lorentz genişlemesi olarak ve aynı çeşit atomların arasındaki çarpışmalara bağlı olan Holtsmark genişlemesi olarak da adlandırılabilir.

Çarpışma ve basınç genişlemesi, atomlar arasındaki esnek olmayan çarpışmaların bir sonucu olarak oluşur. Gaz ve plazma boşalım sistemlerinde yüklü parçacıklar arasında uzun menzilli Coulomb etkileşmesi olduğundan basınç genişlemesi bu sistemlerde önemli ölçüde daha büyüktür.

Basınç genişlemesini azaltmak için, spektral kaynaktaki basınç düşük tutulmalıdır. Basıncı değiştirerek ve çizgi genişliğinde karşılık gelen değişimi gözlemleyerek gaz içerisinde oluşan çarpışmalar hakkında bilgi elde edebiliriz. Büyük çarpışma parametresine sahip çarpışmalar fark edilebilir ölçüde çizgi genişlemesine sebep olur ve aynı zamanda çizgi merkezi kayabilir [30].

3.5.4. Saturasyon Çizgi Genişlemesi

Atomik bir sistem yüksek şiddetli bir laserle uyarılırsa, bir spektral geçişin rezonans frekansı yakınlarında uyarılmış soğurma veya salınım yoluyla sistemin enerji seviyelerinin nüfus yoğunlukları önemli ölçüde değişebilir. Nüfus yoğunluklarındaki bu saturasyon ek bir çizgi genişlemesine yol açar ve bu genişleme "saturasyon genişlemesi" ya da "güç genişlemesi" olarak bilinir.

Saturasyon genişlemesinden kaynaklanan spektral çizgi profili, homojen olan ve homojen olmayan çizgiler için farklı olup, homojen çizgiler için Lorentz homojen olmayan çizgiler için Gauss profilindedir [30].

3.5.5. Birleşik Çizgi Genişlemeleri ve Voigt Profili

Yapılan deneylerde, farklı çizgi genişleme mekanizmaları salınan ya da soğurulan spektral çizginin toplam çizgi genişliğine katkıda bulunur. Deneysel parametreleri değiştirerek, çizgi genişleme katkılarını azaltabiliriz.

Bir atomik sistemde Doppler genişlemesinden gelen katkının azalması için sıcaklık düşürülebilir, çarpışma ve basınç genişlemesinden gelen katkının azalması için basınç azaltılabilir, saturasyon genişlemesinden gelen katkının azalması için lazer ışığının şiddeti zayıflatılabilir.

Bir spektral çizgi profili $I(\omega)$, tüm genişleme mekanizmalarından gelen toplam dağılım katkılarını içeren Denklem (3.96)'deki gibi elde edilebilir.

$$I(\omega) = I_D(\omega).I_{D_0}(\omega).I_B(\omega).I_s(\omega)$$
(3.96)

 $I_D(\omega) = \text{Doğal Çizgi Profili},$

 $I_{D_0}(\omega) =$ Doppler Çizgi Profili,

 $I_B(\omega) =$ Çarpışma ve Basınç Çizgi Profili,

 $I_S(\omega)$ = Saturasyon Çizgi Profilidir [30].

Homojen genişlemeye sahip spektral çizgiler Lorentz çizgi profiline, homejen olmayan spektral çizgiler ise Gauss çizgi profiline sahiptir. Buna göre, Doğal çizgi genişlemesi, çarpışma, basınç genişlemesi ve saturasyon genişlemeleri Lorentz çizgi profiline sahiptir. Çizgi profillerine bağlı olarak tüm genişleme mekanizmaları Lorentz ve Gauss profili katkısına sahiptir. Böylece, bir spektral çizginin birleşik çizgi profili Lorentz ve Gauss çizgi profillerinin birleşimi olan Voigt profili ile tanımlanır;

$$I_{Voigt}(\nu) = I_{Lorentz}(\nu).I_{Gauss}(\nu)$$
(3.97)

$$I_{Voigt}(\nu) = I_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{4In2}{\pi}} \cdot \frac{1}{\delta \nu_G} e^{-4In2 \cdot \left(\frac{\nu_0 - \nu_G}{\delta \nu_G}\right)^2}$$

$$\cdot \frac{1}{2\pi} \frac{\delta \nu_L}{(\nu - \nu_0)^2 + \left(\frac{\delta \nu_L}{2}\right)^2} d\nu \quad (3.98)$$



Şekil 3.7 : Eşit yarı genişlikler ile verilen Gauss ve Lorentz profillerinin karşılaştırılması [38].

Şekil 3.7'de, eşit yarı genişlikler ile verilen Gauss ve Lorentz profillerinin karşılaştırılması gösterilmiştir [38].

3.6. VANADYUM ELEMENTİ

Vanadyum, atom numarası 23 sembolü V olan kimyasal bir elementtir. 3d kabuğu geçiş metallerinden olan Vanadyum elementi periyodik tabloda 5B grubunda yer alır. Gümüşümsü gri renkte, sert bükülebilir ancak kırılgan olmayan bir metaldir.

Vanadyum elementi mineralog Andrès Manuel del Rio tarafından 1801 yılında keşfedilmiştir. Del Rio, sonraki ismi vanadinite olacak "kahverengi kurşun" adını verdiği yeni bir minerali analiz ederken vanadyum bileşenlerini keşfetmiştir. Bu mineralin tuzlarının renginin, ısıtma işlemi sırasında kırmızıya dönmesi sebebiyle elemente Yunanca'da kırmızı anlamına gelen eritronyum adını vermiştir. 1805 yılında, bilim adamları del Rio'nun bulduğu yeni elementin krom elementiyle aynı element olduğu görüşünde birleşmişlerdir. 1831 yılında, İsveçli kimyager olan Nils Gabriel Sefström vanadyumun keşfedilmemiş bir element olduğunu ispatladı. Elemente İskandinav güzellik ve bereket tanrıçası Vanadis'in (Freyja olarak da bilinir) adını vermiştir.

Vanadyum doğada 65 değişik mineralin içinde ve fosil yakıt rezervlerinde bulunmaktadır. Vanadyum iyonlarının büyük miktarı bazı organizmalarda toksin olarak bulunur. Farklı ortamlarda Vanadyum elementi; yer kabuğunda % 0.019, güneşte % 0.00004, meteroitlerde % 0.0061, okyanuslarda % 1.5 x 10⁻⁷ ve insanlarda % 3 x 10⁻⁶ oranında bulunurlar. Vanadyum iyonlarının büyük bir miktarı, bazı organizmalarda bir toksin olarak bulunur. Okyanuslarda bazı yaşam formları tarafından, aktif enzim olarak kullanılırlar. Memelilerde ise mikro besin olarak kullanıldığı düşünülmektedir, yüksek miktarı zehirlenmeye sebep olur.

Vanadyum doğal halinde, bir kararlı ⁵¹V izotopuna ve bir de radyoaktif ⁵⁰V izotopuna sahiptir. Bu izotopların yoğunlukları sırasıyla % 99.75 ve % 0.25'dir. ⁵⁰V radyoaktif izotopu en uzun ömürlü izotopu olup, yarı ömrü % 1.5 x 10^{-7} yıldır. Nükleer spini 7/2 olan ⁵¹V izotopu NMR spektroskopisi için elverişlidir. Diğer 24 izotopunun atom ağırlıkları 40 – 65 *u* aralığındadır. ⁵⁰V'den sonraki en kararlı ⁴⁹V ve ⁴⁸V izotoplarının yarı ömrü sırasıyla 330 saat ve 16 gündür. Geriye kalan tüm izotopların yarı ömrü bir saatten daha kısa olmakla beraber, çoğunun yarı ömrü 10 saniyeden daha kısadır [10,39,40].

Özellikler	⁵¹ V
Atom Numarası	23
Atom Ağırlığı	50.9415 (1) u
Element Kategorisi	Geçiş Elementi
Grup,Periyod, Blok	Grup-5, Periyod-4, d-Blok
Elektronik Konfigürasyonu	$[Ar]3d^{3}4s^{2}$
Faz	Katı
Erime Noktası	2183 ^o K (1910 ^o C, 3470 ^o F)
Kaynama Noktası	3680 °K (3470 °C, 6165 °F)
Yoğunluk	$6 \mathrm{g}/\mathrm{cm}^3$
Elektronegatiflik	1.63 (Pauling)
1.İyonlaşma Enerjisi	650.9 kJ / mol
Atom Yarıçapı	134 pm
Çekirdek Spini (1)	7/2

Tablo 3.1 : ⁵¹V elementinin temel fiziksel ve kimyasal özellikleri [41].

1 IA 1A					1/	7												18 VIIIA 8A
1 H Hydrogen 1.008	2 IIA 2A				V	23							13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	² He Helium 4.003
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012				50.	942							5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 Oxygen 15,999	9 F Fluorine 18.998	10 Neon 20,180
11 Na Sodium 22.990	12 Mg Magnesium 24.305	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8	9 VIII - 8	10	1 	1 B B	12 IIB 2B	13 Aluminum 26.982	14 Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S <u>Sulfur</u> 32.066	17 Cl Chlorine 35.453	18 Argon 39.948
19 K Potassium 39.098	20 Ca calcium 40.078	21 Scandium 44.956	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.942	Chromium 51.996	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe	27 Co cobalt 58.933	28 Ni Nickel 58.693	29 C 63	Der 546	30 Zn Zinc 65.39	31 Gallium 69.732	32 Germanium 72.61	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.09	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 84.80
37 Rb Rubidium 84.468	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906	40 Zr ^{Zirconium} 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium 98.907	44 Ru Rutheniur 101.07	45 Rh 800 102.900	46 Pd Palladiu 106.42	47 M Sil 107	g ver .868	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn 118.71	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.904	54 Xe Xenon 131.29
55 Cs Cesium 132.905	56 Ba Barium 137.327	57-71	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.948	74 W Tungsten 183.85	75 Re Rhenium 186.207	76 Os ^{Osmium} 190.23	77 Ir Iridium 192.22	78 Pt Platinur 195.08	79 A 196	U 01d .967	80 Hg Mercury 200.59	81 TI Thallium 204.383	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.980	84 Polonium [208.982]	85 At Astatine 209.987	86 Rn Radon 222.018
87 Fr Francium 223.020	88 Ra Radium 226.025	89-103	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh ^{Bohrium} [264]	108 Hs Hassium [269]	109 Mt Meitneriu [268]	110 Darmstadt [269]	ium Roent	g genium 72]	112 Copernicium [277]	113 Ununtrium unknown	114 Fl Flerovium [289]	115 Unupentium unknown	116 LV Livermorium [298]	117 Uus Ununseptium unknown	118 Ununoctium unknown
	Lantha Seri	anide ies Lant	La C	e Frase	Pr N	Id Prom	ethium 5	Sm amarium	Eu uropium G	Gd adolinium	65 TI Terbiu	b C Dyspi	by Fosium		Er T	m Y	rbium 71	-U
	Actir Seri	hide ies Act 22	8.906 140 90 T tinium 7.028 232	140 Ch Frium 2.038 Prota 23	2.908 14 92 Calinium 1.036 23	44.24 144 93 93 Nept 8.029 237	94 94 94 94 94 94 94 94 94 94 94 94	Pu Iutonium 244.064	Am mericium 243.061	Curium 247.070	158.9 97 Berkel 247.0	925 16 98 98 Califo 251	2.50 16 99 Cf Eins 1.080 [2	4.930 10 ES Fer 254] 25	57.26 163 101 101 Mend 7.095 25	102 102 102 102 Not 58.1	3.04 174 103 103 103 Lawr 2.101 [2	_ ľ encium 262]

Şekil 3.8 : Vanadyum elementinin periyodik tablodaki yeri [42].

3.6.1. Vanadyum Elementinin Astrofiziksel Önemi

Atomik seviyelerin aşırı ince yapı sabitlerinin bilinmesi, spektral çizgi şekillerinin modellenmesinde önemlidir. Yıldızların bolluk analizlerini belirlerken atomik Vanadyumun sık olan spektrumu ve diğer element çizgileri ile de üst üste binmeleri göz önüne alındığında aşırı ince yapı bilgilerine ihtiyaç vardır. Bu uygulamaya bir örnek olarak, Galaksilerin yaşını belirlemede kullanılan galaktik kronometrik metod için önemli olan Th II'ye ait 4019.13 Å dalgaboylu çizginin Co I ve V I çizgileriyle üst üste binmelerinden dolayı bu elementlerin bu dalgaboyunda çizgilerin üst üste binmelerinden dolayı, galaksi yaşının doğru hesaplanması için bu elementlerin aşırı ince yapı gibi atomik datalarının bilinmesine ihtiyaç vardır [43].

Vanadyum spektrumuna bakacak olursak, optik çizgilerinin aşırı ince yapı datalarının yayınlanmaması durumunda yıldızlardan alınan yüksek çözünürlükteki spektrumların spektral analizlerinin yorumunu yapmak zor ve güvenilmezdir. Bu çalışmadaki aşırı ince yapı dataları bolluk analizinde sıkça kullanılan 4000 – 5000 Å optik bölgedeki en güçlü VI çizgilerinin yapısını açıklar [44,45]. Bu bilgiler bolluk analizinde kullanılabilecek VI çizgilerinin çizgi listesini genişletir.

Vanadyumla ilgili önceki çalışmalarda Cohen [45] Vanadyum elementinin yalnız bir çizgisini (4111.77 Å) bolluk analizinde kullanmıştır. Klochkova [46] yıldızlardaki Vanadyum yoğunluğunu belirlemek için en iyi aralık olan 4000 – 5000 Å dalga sayısı bölgesinde 20 Vanadyumun çizgisi ile bolluk analizini belirlemiştir. Son güneş sistemi haritasında Wallace [47] tarafından bu çizgilerin bir kaçının güneş spektrumunda diğer çizgilerle üst üste geldiği saptanmıştır.

Bu çalışmada görünür ve yakın UV bölgede (3000 – 7000 Å) güneş spektrumunda güçlü olarak gözlenen V I çizgileri verilmiştir. Wallace [47] çalışmasında bu çizgilerden sadece bir kaçında çakışma vardır. Tablo 3.2'de optik ve yakın - mor ötesi bölgede alt ve üst seviyelerinin aşırı ince yapıları bilinen en güçlü Vanadyum çizgileri, güneş spektrumundaki yaklaşık ölçekli şiddet değişimi *dI/I* ve diğer elementlerle tanımlanmış çakışmalar verildi. Bu tablodaki pek çok çizginin alt ve üst aşırı ince yapıları bu çalışmada elde edildi (Tablo 4.1, Tablo 4.3).

	j	3 [].		
λ_{hava}	E _{alt}	E _{üst}	dI/I	Çakışan
(nm)	(cm^{-1})	(cm^{-1})		Çizgiler
653.1418	9 824.626	25 131.002	0.07	
611.9526	8 578.542	24 915.151	0.2	Ni I
611.1649	8 413.009	24 770.673	0.08	Mn I
609.0207	8 715.757	25 131.002	0.3	
608.1441	8 476.234	24 915.151	0.12	
603.9724	8 578.542	25 131.002	0.12	
575.7655 ⁺	8 476.234	25 930.544	0.06	
572.7045+	8 715.757	26 171.918	0.32	
488.1557	552.955	21 032.503	0.5	Fe I, Y II
487.5486^{+}	323.432	20 828.481	0.5	
486.4731	137.383	20 687.769	0.4	H_{β} wing
485.1491	0.000	20 606.467	0.4	Cr I
483.2424	0.000	20 687.769	0.15	
483.1646	137.383	20 828.481	0.15	
482.7453	323.432	21 032.503	0.12	Ti I
473.0613 ⁺	2 220.156	23 353.135	0.11	
461.9777^{+}	323.432	21 963.437	0.06	Cr I
459.4116	552.955	22 313.832	0.45	Ce II
458.6367	323.432	22 121.079	0.45	Fe I
458.0397	137.383	21 863.437	0.45	Fe I
457.7175	0.000	21 841.421	0.25	
445.2004	15 062.959	37 518.445	0.25	
443.7830	2 311.369	24 838.578	0.3	Fe I wing
443.6132	2 112.282	24 648.114	0.2	Mn I wing
440.8514 ^{+b}	2 153.221	24 830.221	0.4	Fe I
440.8492† ^b	2 112.282	24 789.401	0.4	Fe I
440.8196	2 220.156	24 898.804	0.6	
440.7633	2 311.369	24 992.909	0.6	Fe I
440.6638	2 424.809	25 111.473	0.6	?
440.0571	2 112.282	24 830.221	0.5	?
439.5223	2 153.221	24 898.804	0.5	?
439.2066+	2 153.221	24 915.151	0.4	CH A. ?
437.9230	2 424.809	25 253.457	0.8	
412.8064	2 220.156	26 437.754	0.75	

Tablo 3.2 : Yakın - mor ötesi bölgesindeki Vanadyum elementi çizgilerinin bilinen alt ve üst enerji seviyeleri ile birlikte güneş spektrumundaki yaklaşık ölçekli şiddet değişimi *dI/I* ve belirlenen çizgi çakışmaları [47].

Tablo 3.2 : (devam)

λ_{hava}	E _{alt}	E _{üst}	dI/I	Çakışan
(nm)	(cm^{-1})	(cm^{-1})		Çizgiler
412.3498	2 153.221	26 397.633	0.5	
411.6547 ^b	2 112.282	26 397.633	0.3	?
411.6471 ^b	2 220.156	26 505.953	0.5	?
411.5176	2 311.369	26 604.807	0.75	
411.1776	2 424.809	26 738.323	0.8	
410.5157	2 153.221	26 505.953	0.7	H_{δ} wing
409.9783	2 220.156	26 604.807	0.7	H_{δ} wing
409.2683	2 311.369	26 738.323	0.8	Ca I
390.2253+	552.955	26 171.918	0.7	
380.8519^+	0.000	26 249.476	0.4	Fe I wing
370.4700	2 311.369	29 296.430	0.6	
369.5865	2 153.221	29 202.790	0.6	
369.2221	2 220.156	29 296.430	0.6	
369.0279	2 112.282	29 202.790	0.5	
307.3817+	323.432	32 846.822	0.6	?
306.0652^+	323.432	32 988.845	0.5	Fe I?
305.6333+	137.383	32 846.822	0.8	Fe I

⁺ : Thorne [28], [†]: enerji seviyelerinden hesaplanan dalga boyları, çalışmasından alınan dalga boylarını, ^b: çakışan çizgileri, ?: tanımlanamamış ya da kesin olmayan çakışmaları [47] ifade etmektedir.

3.7. DENEYSEL YÖNTEMLER

Bu çalışmada V I elementinin aşırı ince yapısı Fourier Transform (FT) Spektroskopisi metodu kullanılarak incelendi.

3.7.1. Fourier Transform (FT) Spektroskopisi

Fourier Transform Spektroskopisi (FTS) metodunda, Vanadyum içeren silindir katot lambasında çıkan emisyon spektrumu, içinde Michelson İnterferometresinin bulunduğu Fourier Transform Spektrometresi ile ölçüldü. Fourier Transform spektrometresinde detektöre ulaşan ışınların şiddeti dispersif elemanların kullanıldığı spektrometrelere oranla daha büyüktür. Böylece daha büyük sinyal gürültü oranı gözlenebilmektedir. Spektrumun tümü kısa bir süre içerisinde kaydedilir. Fourier Transform Spektrometresinin spektral ayrım güçleri yüksektir ve dalgaboyu tekrarlanabilirliği iyidir. Tüm spektral ayrışım elemanlarının gürültü ortalamaları alınır. Bu da her sinyalin eşit oranda gürültü ile karışımı demektir. Gürültü, sinyal kalitesini etkiler. Sinyal gürültü oranları pik şiddetine bağlı olacağı için şiddetli piklerin kalitesi iyileşir, zayıf pikler de iyice gürültüye karışır.

Kırınım ağı veya prizma gibi dispersif eleman içeren spektrometrelerde detektöre ulaşan sinyal, ışık şiddetinin dalgaboyu veya frekansa bağlı fonksiyonu olarak kaydedilir. İncelenen spektrumun belirli bir spektral bölgesini kaydetmek için ışığın belirli dalgaboyu veya frekansa göre fitrelenmesi gerekir. Bu izolasyonun sağlanmasında filtre veya monokromatör gibi aletler kullanılır [30].

3.7.1.1. Michelson İnterferometresi

Vanadyum elementinin aşırı ince yapısını incelemek için kullanılan Fourier Transform Spektroskopisi, Michelson İnterferometresi içermektedir. Michelson interferometresi, yüksek frekanslı optik ışınımların modüle edilerek ölçülebilir bir frekansa dönüştürülmesinde kullanılır.

Yüksek frekanslara sahip optik salınımlar dedektör tarafından izlenemez. Optik salınımı ölçebilmek için sinyalin zamana bağlı modüle edilmesi ve ölçülebilir bir frekansa dönüştürülmesi, modüle edilen sinyalin frekansının orijinal ışınımın frekansı ile doğru orantılı olması gerekir. Michelson interferometresi optik bölgedeki ışınımların modüle edilmesinde kullanılır. Şekil 3.9'da Michelson interferometresinin temel yapısı gösterilmiştir.



Şekil 3.9 : Michelson İnterferometresi. E₁ gelen ışının genliği, M₁ sabit ayna, M₂ hareketli ayna, BS ışın ayırıcı, s₁ ve s₂ farklı optik ışın yolları ve B gözlem düzlemidir. Dedektör gözlem düzlemindedir.

Michelson İnterferometresi ışın demetlerini ışın bölücü ayna (BS) ile yaklaşık olarak eşit güçte iki demete ayırır. Sonrasında bu iki demetin ışık yolları farkının fonksiyonu olarak demetin şiddet değişimlerini ölçer.

Işın bölücü ayna (BS) yardımıyla, ışın demetlerinin yarısı geçer ve yarısı yansıtılır. Oluşan demetlerden biri sabit (M_1), diğeri hareketli (M_2) aynalarına gönderilir. (M_1) ve (M_2) aynalarından yansıyan ışın bölücü aynada bir araya gelerek B ekranı üzerinde gözlenir. Hareketli (M_2) aynasının yatay hareketi, detektöre ulaşan ışınların gücünde değişimlere yol açmaktadır. Eğer her iki ayna, ışın bölücüden eşit uzaklıkta olursa ayrılan demet birleştirildiğinde tam olarak aynı fazda olduklarından ışının gücü maksimum olur.

Michelson interferometresindeki kollardan biri (L₂) yol uzunluğu, (M₂) aynasının v sabit hızı ile hareket etmesi ile sürekli ve aynı şekilde değişir. Işık kaynağı, genliği

$$E = A_0 \cos \omega_0 t \tag{3.99}$$

ve şiddeti

$$I(\omega) = c\varepsilon_0 E^2 = c\varepsilon_0 A_0^2 \cos^2 \omega_0 t = I_0 \cos^2 \omega_0 t$$
(3.100)

şeklinde olan monokromatik bir dalga yayınlaması varsayımı altında girişen iki ışın,

$$A_i = \sqrt{RT} A_0 \tag{3.101}$$

genliklerine sahiptir. (R: reflectivity (yansıtıcılık), T: transmittance (geçirgenlik))

 s_1 ve s_2 farklı optik yol uzunlukları sebebiyle dedektör düzlemindeki girişim şiddeti $\Delta s = s_1 - s_2$ yol farkına bağlıdır. Girişim şiddeti,

$$I_{t} = c\varepsilon_{0}RTA_{0}^{2} \times [\cos(\omega_{0}t + ks_{1}) + \cos(\omega_{0}t + ks_{2})]^{2}$$
$$= RTI_{0} [\cos(\omega_{0}t + ks_{1}) + \cos(\omega_{0}t + ks_{2}) + \cos(2\omega_{0}t + k(s_{1} + s_{2}))]$$

$$+\cos(k(s_1 - s_2))$$
] (3.102)

ifadesi ile verilir.

Dedektör ω_0 frekansına sahip hızlı optik salınımı takip edemez. Dedektör sinyali (S(t)), ortalama zamanla ($\langle I(t) \rangle$) orantılıdır.

$$s_2 = s_1 + \nu t$$
 (3.103)

$$k = \omega_0 / c \tag{3.104}$$

olarak alındığında sinyal,

$$S(t) \propto \langle I(t) \rangle = RTI_0 \left[1 + \cos\left(\omega_0 \frac{v}{c} t\right) \right]$$
 (3.105)

elde edilir.

Dedektör, ω_o frekansı yerine dedektör zaman sabiti τ üzerinden ortalama geçen şiddet için daha düşük frekans değerini,

$$\Omega = \omega_0 \nu / c \tag{3.106}$$

ölçer.

Düzgün hareket eden bir aynaya sahip Michelson interferometresinde, ışık kaynağının optik frekansı ω_0 , çıkış sinyalinin $\omega_0 v / c$ düşük frekansına dönüştürülür. Monokromatik ışık için sinyal $\langle I(t) \rangle$, faz farkı $\delta = \omega_0 (v / c) t'$ nın v.t çarpımına bağlı bir fonksiyonudur. Maksimum yol farkı $\Delta s = vt'$ in, dalgaboyu λ 'nın tam katları olduğunda oluşabilir.

Eğer ışık kaynağı ω_1 ve ω_2 frekanslarını yayarsa, ω_1 ve ω_2 frekanslı iki ışın bağımsız olarak birbiriyle girişim oluşturur. ω_1 ve ω_2 frekanşlarının arasındaki girişim sıfırdır. Çünkü farklı frekanslara sahip iki ışın arasındaki faz farkı 0 ve 2π arasında periyodik olarak değişir. Eğer dedektör zaman sabiti $2\pi / (\omega_1 - \omega_2)$ ifadesinden daha büyükse bu hızlı değişimi takip edemez. Bir zaman periyodu üzerinde ölçülen ortalama şiddet,

$$\langle I_t(t) \rangle = \langle I_1 \rangle + \langle I_2 \rangle \tag{3.107}$$

şeklindedir.

İnterferogram, frekansları ω_1 ve ω_2 olan monokromatik iki dalganın interferogramlarının süpepozisyonudur. Eşit genliğe sahip iki dalganın durumu için gösterimi Şekil 3.10b'de gösterilmiştir. $I_0 = I_1 \cos(\omega_1 t) + I_2 \cos(\omega_2 t)$ eşitliği Denklem (3.105)'de yerine yerleştirilirse,

$$S(t) \propto \langle I_t(t) \rangle = RT \bar{I}_0 \left[1 + \cos\left(\omega_1 \frac{\nu}{c} t\right) + \cos\left(\omega_2 \frac{\nu}{c} t\right) \right]$$
(3.108)

şeklinde olur. Burada ω_1 ve ω_2 frekanslarını,

$$\omega_1 = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} + \frac{\omega_1 - \omega_2}{2}$$
(3.109)

$$\omega_2 = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} - \frac{\omega_1 - \omega_2}{2}$$
(3.110)
ile ifade edilebilir. Denklem (3.109) ve Denklem (3.110) , Denklem (3.108)'deki ifadede yerine yazılacak olursa, sinyal,

$$S(t) \propto RT\bar{I_0} \left[1 + 2\cos\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2}\frac{\nu}{c}t\right) \times \cos\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}\frac{\nu}{c}t\right) \right]$$
 (3.111)

şeklinde yazılır.



Şekil 3.10 : Hareketli aynaya sahip bir Michelson İnterferometresinden geçen normalize ışık şiddeti I_t / I_0 , a) Monokromatik ışık için b) $I_{01(\omega_1)}$ ve $I_{02(\omega_2)}$ şiddetlerinin süperpozisyonu için, yol farkı Δ s'e bağlı olarak gösterilmiştir [30].

Şekil 3.10.b'den Fourier spektroskopisinin spektral çözünürlük gücünün sade gösterimini elde edebiliriz. Bu ölçüm için minimum frekans aralığı $\delta \omega = (\omega_1 - \omega_2)$, minimum zamana $\Delta t = \Delta s / v$ bağlıdır.

$$\frac{\nu}{t}\delta\omega \ge \frac{2\pi}{\Delta t} \to \delta\omega \ge \frac{2\pi c}{\Delta s}$$
(3.112)

İnterferometrenin çözünürlük gücü $\omega / \delta \omega$, gelen iki dalga arasındaki minimum yok farkına ve dalgaboyu λ 'ya bağlıdır.

$$\frac{\omega}{\delta\omega} = \frac{2\pi\nu}{\delta\omega} = \frac{2\pi c\Delta s}{\lambda \cdot 2\pi c} = \frac{\Delta s}{\lambda}$$
(3.113)

Eğer ışık kaynağı çok frekanslı ışık yayarsa, dedektör sinyali S(t) daha karmaşık olur. Buna göre $\Delta t = t$ zaman aralığı boyunca ölçülen dedektör sinyali S(t)'nin Fourier dönüşümü,

$$S(t) = a \int_0^\infty \bar{I}_0(\omega) \left[1 + \cos\left(\omega - \frac{\nu}{c}t\right) \right] d\omega$$
(3.114)

ışık kaynağının spektral şiddet spektrumunu,

$$\bar{I}_0(\omega) = \lim_{t \to \infty} \frac{b}{\tau} \int_{t=0}^{\tau} S(t) \cos\left(\omega \frac{v}{c}t\right) dt$$
(3.115)

şeklinde oluşturur [30].

3.7.1.2. Silindir Katot

Fourier Transform Spektroskopisi yönteminde ışık kaynağı Vanadyum elementini içeren silindir katot lambasıdır. Silindir katot lambaları, atomların spektral çizgilerinin incelenmesinde en çok kullanılan ışık kaynağıdır.

Deneyde kullanılan silindir katot lambasının içerisinde Vanadyum elementi metal plaka halinde silindir katotun içine yerleştirilmiştir, dış kısmı ise bakırdan oluşmuş bir silindir şeklindedir. Silindir katot lambası iç deliğin çapı ≈ 3 mm ve dış çapı ≈ 19 mm genişliğindedir. Katotun her ki tarafına simetrik iki anot yerleştirilmiştir. Anot ve katot arasındaki ayrım ≈ 0.75 mm civarındadır. Deneylerde kullanılan silindir katot lambası Şekil 3.11'de gösterilmiştir. Silindir katot boşalımı DC güç kaynağı ile 25 – 50 mA arasında akım uygulanarak gerçekleştirildi.



Şekil 3.11 : Fourier Transform Spektroskopisi deney düzeneğinde kullanılan silindir katot lambasının şematik gösterilişi.

Silindir katot lambası $\approx 10^{-7}$ mbar mertebesinde vakumlanır. Daha sonra içi 1.5 mbar basınç altında Argon gazı ile dolduruldu. Deneyler sırasında taşıyıcı gaz olarak Argon gazı kullanıldı. Silindir katot içinde belli bir basınçta bulunan asal gaz atomlarının bazıları çarpıştırılarak iyonlaşır. Asal gaz iyonları silindir katoda uygulanan gerilim sebebi ile yüksek hızlara ulaşırlar ve bu hızla sahip oldukları kinetik enerjiyle katot yüzeyine çarparak yüzeydeki metal atomlarını kopararak uyarırlar. Silindir katot içerisinde yüksek enerji düzeylerine uyarılmış atomlar bulunur. Bu uyarılmış durumda olan atomlar temel durumlarına geri dönerken ışık yayınlarlar. Yüksek potansiyel uygulanması daha yüksek şiddette ışımaya yol açar. Bu avantaja karşılık spektral çizgilerin Doppler genişlemesi artar. Silindir katot içerisindeki atom ve iyonların şarpışmalarından dolayı spektral çizgilerdeki Doppler genişlemesini azaltmak, ortamın sıcaklığını düşürmek ve atom buharının silindir katot içinde kalmasını sağlamak için silindir katodun çelik haznesine sıvı azot konularak soğutulur [38].

3.7.1.3. Filtreler

Filtreler deneylerde oluşan gürültüyü azaltmanın yöntemlerinden birisidir. Gürültünün büyüklüğü, optik sinyalin frekans bant genişliğinin karekökü ile orantılıdır. Bu sebeple sinyali dar bir frekans bandında tutmak gerekir. Bu sayede gürültünün önemli ölçüde azalması sağlanır. Bu şekilde spektral aralık sınıflandırılmış olur [34].

Deney sırasında optik bant filtreleri silindir katot lambası ile Fourier transform spektrometresi arasındaki optik yola yerleştirildi. Bant filtreleri yardımıyla incelenmek istenen spektrum dışında kalan gürültü şiddeti filtrelenmiş olur. Böylece gürültüden kaynaklanan çizgiler elenir. Böylece foton çoğaltıcının (PMT) voltajı arttırılmasına olanak sağlanarak, filtrenin frekans bandındaki çizgiler şiddetlendirilmiş olur.

Deneyler sırasında sinyal /gürültü oranını arttırmak için, 370 ± 5 nm, 400 ± 20 nm, 420 ± 35 nm, 456 ± 1 nm, 476 ± 7 nm, 550 ± 10 nm, 600 ± 20 nm ve 650 ± 20 nm dalgaboyu bandındaki filtreler kullanıldı. Bu filtreler kullanılarak $15\ 000 - 27\ 400\ \text{cm}^{-1}$ dalga sayısı aralığında spektrumlar kaydedildi.

3.7.1.4. Fourier Transform Spektroskopisinin Avantajları ve Dezavantajları

- Geniş bir spektral bölgeyi kapsar. Bu bölgenin spektrumunu eş zamanlı olarak kaydedebilir. İncelenen elementten gelen tüm emisyon çizgileri aynı anda detektöre ulaşır. Bir şekilde tüm spektrumu inceleme olanağı sağlanır.
- Spektral ayrışma gücü yüksektir. Spektral çizgiler kısmen ayrışabildiği için aşırı ince yapı spektrumu incelenebilir.
- FT spektrumu gözlenen çizgilerin dalga sayılarını kesin olarak belirleyebilmek için kullanılır.

FT spektrumunun dezavantajı ise şiddeti küçük olan çizgilerin ayrıştırılamamasıdır. Kaydedilen spektrumlardaki çizgi genişliği, Doppler genişliği ve spektrometrenin kendinden kaynaklanan genişlemesidir. Bu nedenle çözünürlüğü Laser Spektroskopik yöntemlere göre daha azdır.

3.7.1.5. Deney Düzeneği

Bu çalışmada, atomik Vanadyum elementinin 370 – 670 nm (15 000 – 27 400 cm⁻¹) dalgaboyu aralığındaki spektrumu yüksek çözünürlüklü Fourier Transform Spektrometresi kullanılarak Letonya Üniversitesi Laser Merkezi'nde kaydedildi. Deneyde çözünürlüğü 0.025 cm⁻¹ olan Bruker IFS 125HR Fourier Transform Spektrometresi kullanıldı. Spektrumun kaydedilmesinde kuvars bir ışın bölücü ve Hamamatsu R928 fotoçoğaltıcı tüp (PMT) dedektör olarak kullanıldı. Deneylerde giriş aralığı 1nm olarak seçildi. Her bir spektrum 20 taramanın ortalaması olarak alındı. Aşırı ince yapı incelemelerinde her bir spektral çizgiyi incelerken standart sapmayı oluşturabilmek için her bir çizginin en az beş kez ölçülmesi gerektiğinden, spektrum beş kez kaydedildi.

Spektral çizgilerin aşırı ince yapı analizi için tüm spektrum içinden her spektral çizgi ayrı ayrı kesildi. Her bir çizginin genişliği 20 - 30 GHz arası değişim göstermektedir.

Deneyde, bakırdan yapılmış silindir katodun içi Vanadyum elementi ile kaplandı. Daha sonra alüminyumdan yapılan iki anot arasına silindir katot yerleştirildi. Silindir katot lambası 10⁻⁷ mbar değerinde vakumlandıktan sonra 1.5 mbar basıncında argon gazı ile dolduruldu. Akım boşalımının sağlanmasında argon gazı kullanıldı. Silindir katot lambasına, yüksek güce sahip DC güç kaynağı yardımıyla 25 - 50 mA akım uygulandı. Uygulanan akım nedeniyle katot içindeki plazmanın sıcaklığı artmakta ve bu da Doppler genişlemesinin artmasına sebep olmaktadır. Bu nedenle deneyde silindir katot lambası, Doppler çizgi genişlemesini indirgemek ve metal atomlarının lamba içerisinde kalmalarını sağlamak için deney süresince sıvı azot ile soğutuldu.

Deney sırasında, istenilen spektral bölgeler dışındaki emisyonların şiddetini izole etmek için farklı dalgaboylarındaki optik filtreler kullanıldı. Optik filtreler silindir katot lambası ve Fourier Transform Spektrometresi arasındaki optik yola yerleştirildi. Silindir katotun boşalımı sırasında yayılan ışık, aynalar ve lensler yardımıyla Fourier Transform Spektrometresine gönderildi. Bu şekilde Vanadyum elementinin 360 – 670 nm dalgaboyu aralığındaki tüm spektral geçişler incelendi. Deney düzeneğine ait fotoğraflar Şekil 3.12'da verildi.



Şekil 3.12 : Letonya Üniversitesi Laser Merkezi'nde kurulan FTS yöntemi deney düzeneği.

3.8. SPEKTRAL DATA ANALİZİ

Elementlerin atomlarının enerji seviyeleri arasında meydana gelen geçişlerde bir çizgi spektrumu oluşur. Bu çizgi spektrumunun şiddeti I(v), frekansa bağlı olacak şekilde bir dağılım göstermektedir. Bu dağılım, fit işlemi sırasında Fitter [9] programı yardımı ile en uygun dağılım fonksiyonu ile analiz edilir.

Bu çalışmada elde edilen Vanadyum spektrumları, Hamburg Askeri Üniversitesi'nde geliştirilmiş olan Fitter [9] programı yardımıyla incelendi. Bu sayede spektral geçişlerin alt ve üst enerji seviyelerinin *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri belirlendi.

3.8.1. Fitter Programi

Vanadyum elementine ait Fourier Transform Spektroskopisi ile alınan çizgi spektrumları dijital ortamda spektral geçişlerin şiddet dağılımı dalga sayısının bir fonksiyonu olarak kaydedilmiştir.

Fitter [9] programı şiddet dağılımlarının en iyi fit değerlerini verecek matematiksel şiddet dağılımlarını bir modelle hesaplar. Bu fonksiyonlar Gauss, Lorenz ve Voigt fonksiyonlarıdır. Program her bir aşırı ince yapı bileşeninin pozisyonunu ve aşırı ince yapı sabitlerini Denklem (3.116) ifadesi ile hesaplar.

$$\nu = \nu_c + \alpha_0 A_0 + \beta_0 B_0 - \alpha_u A_u - \beta_u B_u$$
(3.116)

 v_c : İncelenen spektral geçişin frekansı

 α_o , β_o , α_u , β_u : Katsayıları spektral geçişin sırasıyla üst ve alt ince yapı enerji seviyelerinin Casimir faktörleri

Her bir seviye için Casimir faktörleri Denklem (3.117) ve (3.118) ifadeleri ile hesaplanır.

$$\alpha = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)]$$
(3.117)

$$\beta = \frac{\frac{3}{4}C(C+1) - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)}$$
(3.118)

Her bir aşırı ince yapı bileşeni için Denklem (3.116) oluşturulur. Giriş parametreleri olarak spektral çizgi ile ilgili fiziksel başlangıç durumları alınır. Fitter [9] programı fit işlemini en küçük kareler yöntemini kullanarak yapar.

En küçük kareler yöntemi için aranan fonksiyon;

2

$$\sum_{k=1}^{n} [I_k(k) - I_k(\nu_k, \vec{a})]^2$$
(3.119)

İfadesini minimum yapacak şekilde belirlenir.

 $I_k(k) : v_k$ frekans noktasında ölçülen şiddet $I_k(v_k, \vec{a})$: Fit parametrelerinin seti olan \vec{a} vektörü ve bu durma karşılık hesaplanan şiddet

İfadedeki her bir hata ifadesinin minimum olması ile kareler toplamının minimum olması sağlanacaktır. Bu sebeple yönteme *en küçük kareler yöntemi* denir.

Denklem (3.119) Taylor serisine açıldığında, lineer olmayan ve homojen denklemler elde edilir. Bu oluşan denklemlerin sayısı \vec{a} vektöründeki parametrelerin sayısına bağlıdır. Denklemin çözümü, \vec{a} vektöründeki parametrelerin yeni bir setini verir. Bu yeni vektör seti bir sonraki iterasyon için başlangıç değeri olarak kullanılır. Bu işlem en iyi sonucu verene kadar bu şekilde devam eder [48].

Fitter [9] programında fit işleminde kullanılan parametreler sabit ve değişken olmak üzere iki kısma ayrılır. Sabit parametreler; incelenen izotopun çekirdek spini, spektral geçişin alt ve üst seviyelerinin J değerleridir. Değişken parametreler ise üst ve alt seviyelerinin A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri; aşırı ince yapı bileşenlerinin frekans eksenindeki yerleri; aşırı ince yapı bileşenlerinin yarı genişlikleri ve aşırı ince yapı bileşenlerinin şiddetleri, seçilen fonksiyon Gauss, Lorentz ya da Voigt için yarı genişliktir.

Değişken parametrelerden herhangi biri ve ya bir kaçı sabit tutularak parametre sayısı azaltılabilir. Bu çalışmada, deneysel olarak elde edilen spektral geçişlerin üst enerji seviyelerinin *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri belirlenirken, alt seviyelere ait *A* manyetik dipol ve *B* elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri, yüksek çözünürlüklü spektroskopik deneylerle belirlenmiş literatürdeki değerlerinde sabit tutuldu ve parametre sayısı azaltıldı. Ayrıca ayrışmamış spektral çizgilerde aşırı ince yapı geçişlerinin şiddetleri belirli kurallar içinde birbirleri ile kuplaj yapıldı. Vanadyum spektrumdaki çizgiler yeterince ayrışmadığından, elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti *B*'ler belirlenemeyeceği için fit işlemi sırasında sıfır alındı.

Şiddet dağılımı verilen her bir deneysel spektrum, teorik spektrum ve bu iki spektrum arasındaki fark, frekans cinsinden ayar maksimumlarına bağlı olarak hesaplanır. Programın amacı deneysel spektrum ile teorik spektrum arasındaki farkı minimuma indirgemek ve bu sayede aşırı ince yapı sabitleri olan A ve B değerlerini belirlemektir. Bununla birlikte bu program yardımıyla incelenen spektral çizginin ve bu çizgiye ait her bir aşırı ince yapı geçişinin ağırlık merkezleri, çizgi profilinin yarı genişliği, her bir aşırı ince yapı bileşeninin yeri, şiddeti ve F kuantum sayıları da elde edilir.

3.8.1.1. Fitter Programının Giriş ve Çıkış Dataları

Fitter [9] programının çalışabilmesi için giriş datalarının hazırlanması gereklidir. Ayrıca giriş ve çıkış dosyalarını kaydedileceği klasörler oluşturulmalıdır. Bunlar; mes, lin, ein ve par isimli klasörlerdir. Her bir klasör her bir spektral çizgi için ayrı ayrı oluşturulmalıdır.

Mes dosyası, x eksenindeki dalga sayısının y eksenindeki şiddetin bulunduğu çizgi spektrumlarından oluşur. Her bir spektral çizgi için en az beş tane mes datası mes klasöründe oluşturulmalıdır.

Lin klasörü içinde "lin" ve "par" dosyaları bulunmaktadır. Lin dosyası, spektrumun sadece dalga sayısının olduğu dosyadır. Par dosyası, spektrumun başlangıç dalgaboyunu, spektrumdaki data sayısını ve birbirini takip eden her iki data arasındaki frekans cinsinden fark değerini içerir.

Ein dosyasında her spektral geçişe ait sabit ve değişken parametreler girilir. Tüm spektral çizgiler için ayrı ein dosyaları oluşturulmalıdır. Ein dosyasındaki sabit parametreler; fit işleminde kullanılacak çizgi profili (Gauss, Lorentz, Voigt profillerinden biri) incelenen elementin izotop sayısı, izotopların katkı oranları, çekirdek spini, fit edilecek spektral çizginin alt ve üst enerji seviyelerinin J değerleridir. Bu parametreler fit işlemi boyunca sabit tutulurlar. Ein dosyasındaki değişken parametreler; spektral çizginin ağırlık merkezi, spektral çizginin alt ve üst ince yapı enerji seviyelerinin manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B değerleri, spektrumun düşey eksendeki gürültü başlangıç ve bitiş yerleri, çizginin yarı genişliği, Voigt profilindeki Gauss ve Lorentz katkılarının yarı genişlikleridir.

Giriş datasında sabit olarak belirlenen değerler için "0", değiştirilecek olan parametreler için "1" yazılmalıdır. Eğer incelenen spektral geçiş için alt veya üst aşırı ince yapı sabitleri, literatürden biliniyorsa bu değerler fit süresince sabit tutulur. Bu durumda geçişin diğer enerji seviyesinin *A* ve *B* aşırı ince yapı sabit değerleri daha doğru olarak bulunabilir. Şekil 3.13'da $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboyundaki spektral geçişin ein dosyasının bir kısmı gösterilmiştir.

Fitter 98 - V2424401 Editor: C:\fitprog\V24244\ein\V2424401.ein
Datei Bearbeiten Suchen Ansicht Rechnen Grafik Optionen Zusatz ?
91 0.001 10 // Fitverfahren (klassisch 1, Einzellinien 2)
1 // İzotop Sayısı
0.5 // Ust Enerji Seviyesinin J değeri (Jo)
1.5 // Alt Energi Seviyesinin J değeri (Ju)
3.5 // Çekirdek Spini I
1 // Izotop Katkı Oranı
0.0 // x Eksenindeki Değişim
19//2.7 // En şiddetli Pikin x Eksenindeki Konumu
-507.1 0.0 405.6 -8.1 // Ust Energi Seviyesinin A (Ao) ve B (Bo) ve Alt Energi Seviyesinin A (Au) ve B (Bu) Degen
0.0 0.0 // y Eksenindeki Degişim
107 0 (Vizg) Profili, 1=Gauss, 7=Voigt
0.30 // meta (Sauss/Voigt Orani)
1 1 1 // AO, BO, AU, BU, Tan Genişink, Gauss ve Lorentz Degenen Katki Parametreleri
IL // Kloss-Over Resolutingen : evet icin " IA" have icin "NE"
A 1 // Tüm nikler en siddeli nik ile kunlai venur
// function groups on groups in no kuping yapin.
21//
5.1 //
31//
61//
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
Zeile: 32 Spalte:1 geändert

Şekil 3.13 : $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboylu 2 153.221 cm⁻¹ \rightarrow 26 397.633 cm⁻¹ spektral geçişinin Fitter [9] programına ait ein dosyası.

Fourier Transform Spektroskopisi (FTS) yöntemi ile yapılan deneylerde, spektrumların belli bir değerde Doppler genişlemesine sahiptir. Vanadyumun elektrik kuadropol momentinin küçük olması sebebi ile elektrik kuadropol momentlerin oluşturduğu etkileşmeler sonucunda meydana gelen aşırı ince yapı yarılmalarını bu Doppler genişlemesi altında gözlemek mümkün değildir. Bu nedenle, fit işlemi sırasında değeri literatürden bilinmeyen *B* elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri, sıfır değerinde sabit tutuldu. Değeri bilinen *B* elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri literatürden bilinme değerlerinin *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri literatürden bilinen değerlerinde sabit tutuldu. Bu sayede üst enerji seviyelerinin *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri elde edildi. Eğer alt ve üst enerji seviyeleri arasındaki mümkün geçişleri gösteren aşırı ince yapı bileşenleri ayrışmamışsa bunların fit işlemi yapılması esnasında Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile alınan tüm spektrumlarda aşırı ince yapı geçişlerinin tamamının şiddetleri en şiddetli bileşenle kuplaj yapılır. Bu şekilde her bir aşırı ince yapı geçişinin şiddetinin teorik değerlerle uyumlu bir şekilde değişmesi sağlanmış olur.

Fitter [9] programı, deneysel spektrumu fit işleminden önce lineerize edilir. Bu lineerize işlemi için lin ve mes dosyalarına bakılır. Sonrasında par dosyasına, spektrumun başlangıç dalgaboyu, spektrumda ardarda gelen datalar arasındaki frekans cinsinden farkı ve spektrumdaki data sayılarının girilmesi ile gerçekleştirilir. Bu şekilde lineerize işlemi gerçekleştirilmiş olur ve fit işlemine başlanır. Şekil 3.14'de $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboyundaki spektral geçişin par ve lin datalarının oluşturulması ile lineerize edilen spektruma bir örnek gösterildi.



Şekil 3.14 : $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboylu 2 153.221 cm⁻¹ \rightarrow 26 397.633 cm⁻¹ spektral geçişinin Fitter [9] programı ile lineerize edilmiş hali.

Arb klasörü içinde aus, bf, bw ve stw çıkış dosyaları bulunur. Arb klasörü spektral çizgi fit edildikten sonra program tarafından oluşturulur. Aus dosyası programın çıktı dosyasıdır. Çizginin ağırlık merkezi, spektrumun aşırı ince yapı bileşenlerinin *F* kuantum sayıları, bileşenlerinin şiddetleri ve yerleri, alt ve üst enerji seviyelerinin aşırı ince yapı sabit değerleri, çizginin yarı genişliği, Voigt fonksiyonundaki Gauss profil fonksiyonunun yarı genişliğinin Lorentz profil fonksiyonunun yarı genişliğinin oranını veren theta, Voigt profil fonksiyonunun yarı genişliği aus dosyasında çıktı olarak alınır. Spektral çizgi fit edilirken Voigt profili kullanıldı. Voigt profilinde Gauss/Lorentz yarı genişlik oranı olan theta 0 ile 1 arasında değerler alır.

Şekil 3.15'de $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboylu spektral çizginin fit edilme işleminden sonra elde edilen "aus" çıkış dosyasının bir kısmı gösterildi. Rel. Schwerpunkt ve abs. Scwerpunkt ağırlık merkezlerini gösterir. Vakumwellenlange vakumdaki, Luftwellenlange havadaki incelenen çizginin dalgaboyunu verir. HWB incelenen çizginin yarı genişliğini verir. Theta ise Gauss/Lorentz yarı genişlik oranıdır. A_o ve B_o değerleri üst enerji seviyelerinin manyetik dipol ve elektrik kuapropol aşırı ince yapı sabitleridir. A_u ve B_u değerleri ise alt enerji seviyelerinin manyetik dipol ve elektrik kuapropol aşırı ince yapı sabitleridir. Guete deneysel spektrum ile teorik spektrum arasında ne kadar uyum olduğunu gösterir.

Fitter 98 - V2424401 Editor: C:\fitprog\V24244\arb\V2424401.aus Datei Bearbeiten Suchen Ansicht Rechnen Grafik Optionen Zusatz ? 🗠 🏘 🐰 🖻 🛍 뙵 👄 🖵 🚭 **1** Endergebnis (5.te Iteration) Fitverfahren 1 Startwellenlänge in A : 4124.73 Başlangıç Dalgaboyu Startwellenzahl in 1/cm : 24243.988 Başlangıç Dalgasayısı Fluoreszenzwellenlänge in A : 0.00 Fluoreszenzwellenzahl in 1/cm : inf Anzahl der Datenpunkte 441 Data sayısı Anzahl der Isotope/Einzellinien : 1 Izotop Sayısı Anzahl der Parameter : 6 Parametre Sayısı Eichfaktor : 56.458600000 MHz Ayar Faktörü Alle Isotope: Lagen und Häufigkeiten (errechnet aus den Intens.) Iso | Lage/MHz | abs.Lage*cm | Intensitaet | Hfk.th. | Hfk.fit | Hfit/Hth. 1 | 12812.01 | 24244.416 | 99.85 | 100.00 | 100.00 | 1.000 Isotope mit Kernspin : Isotop 1: I = 7/2 Jo = 1/2 Ju = 3/2 Nr | Fo -> Fu | Lage/MHz |Intensitaet |rel. Int. |Ifit/Ith.| Flaeche 1 4 -> 5 9788.04 34.32 1.000000 1.00 7.373e+04 2 | 4 -> 4 |11810.25 | 16.38 | 0.477273 | 1.00 |3.519e+04 3 | 4 -> 3 |13434.97 | 5.46 | 0.159091 | 1.00 |1.173e+04 4 3 -> 4 13859.61 11.70 0.340909 1.00 2.513e+04 5 3 -> 3 15484.33 16.38 0.477273 1.00 3.519e+04 6 3 -> 2 16706.91 15.60 0.454545 1.00 3.351e+04 Summe der Intens. = 99.847 rel. Schwerpunkt = 12812.009 MHz Relatif Ağırlık Merkezi abs. Schwerpunkt = 24244.416 1/cm Kesin Agırlık Merkezi Vakuumwellenlänge = 4124.661 A Vakum Dalgaboyu Luftwellenlänge = 4123.498 A Havadaki Dalgaboyu Profilfunktion: Voigtfunktion Zeile: 45 Spalte:1 geändert

Şekil 3.15 : $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboylu 2 153.221 cm⁻¹ \rightarrow 26 397.633 cm⁻¹ spektral geçişinin Fitter [9] programı ile elde edilen aus çıktı dosyasının bir kısmı.

Bu çalışmada, Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile elde edilen her spektral çizgi, elde edilen spektrumdan kesildi. Spektrumun dalga sayısına ve şiddete bağlı olan Mes dosyası oluşturuldu. Spektrumun sadece dalga sayılarını içeren lin dosyası mes dosyasından oluşturuldu. İncelenen her spektral çizgi için par dosyasına spektrumun ardışık iki dalgasayısı arasındaki fark MHz cinsinden yazıldı. Spektral çizgilerin lineerize işlemi yapıldıktan sonra fit işlemi gerçekleştirildi. Şekil 3.16'de fit edilmiş spektruma örnek olarak $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboyundaki Vanadyum çizgisi programda elde edilen haliyle verildi. Şeklin alt kısmında teorik spektrumla deneysel spektrum arasındaki fark grafiği görülmektedir. Buradan fit işleminin doğru olarak yapıldığını değerlendirebiliriz. Bu fark grafiğinde sıra dışı bir maksimum ya da minimum gözlenirse bu fit işleminin doğru gerçekleştirilmediği ya da çizginin başka bir çizgi ile karışmış olduğu anlaşılır.



Şekil 3.16 : $\lambda = 412.3498$ nm dalgaboylu 2 153.221 cm⁻¹ \rightarrow 26 397.633 cm⁻¹ spektral geçişinin Fitter [9] programı ile fit edilmiş hali.

3.8.2. Klasifikasyon Programi

Bu çalışmada $\lambda = 541.8087$ çizgisi kaynaklarda sınıflandırılmamıştır. Bu çizgi Klasifikasyon [49] programı kullanılarak sınıflandırılmıştır. Klasifikasyon [49] programı Prof. Dr. Laurentius Windholz (Avusturya Graz Teknik Üniversitesi, Deneysel Fizik Enstitüsü) tarafından yazılmıştır.

Klasifikasyon [49] programının çalışabilmesi için, bazı giriş dosyaları oluşturmak gerekir. "w" dosyası incelenecek olan elementin literatürde bilinen ve/veya bilinmeyen tüm spektral çizgilerin dalgaboyu tablosunu içerir. "Level" dosyası incelenecek olan

elementin literatürde bilinen tüm enerji seviyelerinin bulunduğu dosyadır. Bu dosyaya enerji seviyelerine ait J kuantum sayıları, pariteleri, eğer biliniyorsa A ve B aşırı ince yapı sabitleri yazılır.

Vanadyum elementine ait tüm enerji seviyeleri ve bu seviyelere ait fiziksel parametrelerin bulunduğu "Level_Va" adlı dosyanın bir kesiti Şekil 3.17'de gösterildi. Birinci kolon, V I elementinin enerji seviyelerinin J toplam açısal momentu değerlerini; ikinci kolon, pariteleri; üçüncü kolonda enerji değerleri cm⁻¹ cinsinden; dördüncü kolonda bu enerji seviyelerine ait literatürden bilinen *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerleri standart sapmalarıyla beraber MHz cinsinden; beşinci kolonda bu enerji seviyelerine ait literatürden bilinen *B* elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti değerleri standart sapmalarıyla beraber MHz cinsinden; altıncı kolonda referans bilgileri yer almaktadır.

🗅 Level	va	.dat	t									
1.5	,	e	,	0.00	,	560.05	,	4.26	,	THORNE	A/B	CG67
2.5	,	e	,	137.383	,	321.23	,	3.38	,	THORNE	A/B	CG67
3.5	,	e	,	323.432	,	249.74	,	5.08	,	THORNE	A/B	CG67
4.5	,	e	,	552.955	,	227.13	,	7.82	,	THORNE	A/B	CG67
0.5	,	e	,	2112.282	,	751.48	,		,	THORNE	A/B	CG67
1.5	,	e	,	2153.221	,	405.60	,	-8.11	,	THORNE	A/B	CG67
2.5	,	e	,	2220.156	,	373.52	,	-5.46	,	THORNE	A/B	CG67
3.5	,	e	,	2311.369	,	382.37	,	2.27	,	THORNE	A/B	CG67
4.5	,	e	,	2424.809	,	406.85	,	14.32	,	THORNE	A/B	CG67
0.5	,	e	,	8413.009	,	1277.2	,	0.0	,	THORNE	A/B	CPGC79
1.5	,	e	,	8476.234	,	7.47	,	-0.01	,	THORNE	A/B	CPGC79
2.5	,	e	,	8578.542	,	-143.26	,	5.15	,	THORNE	A/B	CPGC79
3.5	,	e	,	8715.747	,	-160.19	,	13.87	,	THORNE	A/B	CPGC79
0.5	,	e	,	9544.635	,	-353.74	,		,	THORNE	A/B	PBQDS97
1.5	,	e	,	9637.039	,	183.94	,		,	THORNE	A/B	PBQDS97
2.5	,	e	,	9824.626	,	112.83	,		,	THORNE	A/B	PBQDS97
3.5	,	e	,	10892.520	,	398.0	,		,	THORNE	A/B	PBQDS97
4.5	,	e	,	11100.596	,	298.59	,		,	THORNE	A/B	LGB02
1.5	,	e	,	13801.551	,	333.37	,		,	THORNE	A/B	LGB02
0.5	,	e	,	13810.910	,	143.90	,		,	THORNE	A/B	LGB02
1.5	,	e	,	14514.756	,	341.53	,		,	THORNE	A/B	PBQDS97
2.5	,	e	,	14548.816	,	259.48	,		,	THORNE	A/B	PBQDS97
3.5	,	e	,	14909.958	,	31.48	,		,	THORNE	A/B	PBAG95
4.5	,	e	,	14949.359	,	260.49	,		,	THORNE	A/B	PBAG95
5.5	,	e	,	15000.937	,	373.54	,		,	THORNE	A/B	PBAG95

Şekil 3.17 : Klasifikasyon [49] programının giriş dosyası örneği, V I elementinin Level_Va giriş dosyası.

Nötr Vanadyum elementine ait literatürden bilinen tüm spektral çizgilerin dalgaboyları, ölçtüğümüz FT spektrumunda gözlenen fakat daha önceden bilinmeyen spektral çizgilerin tanımlandığı "wVa" adlı dosyanın bir kesiti Şekil 3.17'de gösterildi. Şekil 3.17'de birinci kolonda spektral geçişin dalgaboyu Å cinsinden, ikinci kolonda spektral çizginin FT spektrumunda gözlenen sinyal/gürültü oranı (SNR), üçüncü, dördüncü ve beşinci kolonlarda spektral çizginin eğer varsa literatürden bilinen şiddet değerleri görülmektedir. Diğer kolonlarda sırasıyla spektral geçişin üst enerji seviyesine ait enerji değeri cm⁻¹ cinsinden, *J* değerleri, pariteleri, bu enerji seviyelerine ait literatürden bilinen *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerleri standart sapmalarıyla birlikte MHz cinsinden, literatürden bilinen *B* elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti değerleri standart sapmalarıyla birlikte MHz cinsinden.

Programın esas amacı, incelenen elemente ait yeni spektral çizgilerinin tanımlanması ve spektral geçişlerin yeni alt ve/veya üst ince yapı enerji seviyelerinin bulunmasıdır.

🗅 Wva.dat										
5328.8039 ,	,	, 4.23	,	, 37440.777	, , 83	, 64	, ,	, ,, 0	, 495	,53(5),, ,
5329.2836 ,	,	, 4.22	,	, 34529.821	, , , 60	0 , 48 (60)	, ,	, ,,e	, 512	,64(60),,
5329.4475 ,		, 3.78		, 43529.134		,	, , 24770.673		,	, , Thorne
5330.4164 ,		, 4.54		, 27470.79	, , , 62	, 81(30)	1 1	, ,,e	, -160	,187(2),, ,
5335.5633 ,	,	, 3.67	,	, 43867.926			, , 25131.002		,	, ,Thorne
5338.6073 ,	,	, 3.89	,	, 37752.595	, , ,	,	, , 19026.326	, , , 471	, 27(30)	, ,, Thorne
5353.4118 ,		, 5.1	,	, 37752.595	,2.5 ,0, 11	.7.1 ,	,THORNE, 19078.112	,3.5 ,e, 93.54	,	,THORNE,; Thorne
5360.2599 ,	,	, 3.79	,	, 34374.872	, , , 47	7 , 57 (18)	, ,	, ,,e	, 445	,58(18),, ,
5361.6912 ,		, 3.42		, 32456.581		,	, , 13810.91	, , , 143	, 90(30)	, ,, Thorne
5363.5466 ,	,	, 3.66		, 43770.21		,	, , 25131.002		,	, , Thorne
5383.4135 ,		, 4.54		, 39398.893	, , , 56	9 , 60(60)	, ,	, , , 0	, 611	,06(60),, ,
5385.1317 ,	,	, 4.68	,	, 39596.988	, , , 64	9 , 32(24)	, ,	, , , 0	, 606	,15(21),, ,
5388.2861 ,	,	, 4.4	,	, 39241.384	, ,, 38	4 , 03(60)		, , , 0	, 544	,81(18),, ,
5392.7981 ,		, 3.08	,	, 32348.987	, , ,	,	, , 13810.91	, , , 143	, 90(30)	, ,, Thorne
5393.2645 ,		, 4.16	,	, 33640.28	, , , 99	, 53(12)	, ,	, ,,e		, ,, Thorne
5397.8435 ,		, 4.22	,	, 39127.228	, , , -1	.96 , 96(15)	, ,	, ,,0	, -185	,86(150,, ,
5401.9224 ,		, 5.37		, 37530.314	,5.5 ,0, 21	.0.2 ,	,THORNE, 19023.531	,4.5 ,e, 398.89	,	, THORNE, Thorne
5415.2508 ,		, 5.44		, 37606.365	,6.5 ,0, 37	5.9 ,	,THORNE, 19145.148	,5.5 ,e, 160.98	,	, THORNE, Thorne
5418.087 , 34		,		, 37475.102	,3.5 ,0, 45	6(7) ,	,THORNE, 19023.531	,4.5 ,e, 398.89	,	, THORNE,
5421.350 , nl 16	,	,	,	1	, ,,	,	, ,	, , ,		, ,
5421.6432 ,	,	, 3.85	,	, 34127.931	,3.5 ,0, 45	6.28 ,	,THORNE, 15688.862	,2.5 ,e, 305.94		, THORNE, ; ;;
5424.0603 ,		, 4.98	,	, 37457.576	,1.5 ,0, 52	8.2 ,	,THORNE, 19026.326	,2.5 ,e, 471.27	1	,THORNE,; Thorne
5424.2822 ,		, 4.23	,	, 33695.327	, , , 58	1 , 89(90)		, ,,e	,	, ,, Thorne
5429.4655 ,	,	, 3.97	,	, 39241.384	, ,, 38	4 , 03(60)	, ,	, ,, 0	, 611	,06(60),, ,
5434.179 , nl 14		,	,	,		,	, ,		,	, ,
5437.6567 ,	,	, 4.32		, 37530.314	,5.5 ,0, 21	0.2 ,	,THORNE, 19145.148	,5.5 ,e, 160.98	,	, THORNE, Thorne
5443.2163 ,		, 3.87	,	, 39398.893	, , , 56	i9 , 60(60)	, ,	, , , 0	, 606	,15(21),, ,
5454.7892 ,	,	, 3.8	,	, 44499.334		,	, 26171.918	, , , 85	, 14(21)	, ,, Thorne
5458.1234 ,	,	, 4.57	,	, 37342.555	,2.5 ,0, 61	.7 ,	,THORNE, 19026.326	,2.5 ,e, 471.27	,	,THORNE,; Thorne
5467.7941 ,		, 4	,	, 37361.951	, ,,	,	, , 19078.112	, , , 93	, 54(60)	, ,, Thorne
5473.6018 ,		, 3.68	,	, 37342.555	, , ,	1	, , 19078.112	, , , 93	, 54(60)	, ,, Thorne
5487.2251 ,		, 4.62	,	, 32767.911	,1.5 ,0, -2	0.99 ,	,THORNE, 14548.816	,2.5 ,e, 259.48	,	,THORNE,; Thorne
5487.913 ,		, 5.17		, 37361.951	,4.5 ,0, 73	.4 ,	,THORNE, 19145.148	,5.5 ,e, 160.98	,	, THORNE, Thorne
5489.948 ,		, 4.82		, 32724.801	, , , 53	6 , 62 (90)		, ,,e	, 341.5336	, ,, Thorne
5491.565 ,		, 3.5		, 44326.784		,	, , 26122.094	, , , 174	, 78(60)	, ,, Thorne
5495.6511 ,	,	, 3.39	,	, 44195.39		,	, , 26004.234	, , , 215	, 85(60)	, ,, Thorne
5496.0093 ,	,	, 4.28	,	, 18513.403	, , , 46	, 33(8)		, ,,e	, 249	,7398(7,, ,

Şekil 3.18 : Klasifikasyon [49] programında, V I elementinin dalgaboyu giriş dosyasını (wVa) bir kesiti.

Klasifikasyon [49] programının ana menüsü dört kısımda oluşur:

- 1. Alttaki pencerede FT Spektroskopisi ile alınmış Vanadyum elementinin spektrumundan bir kesiti göstermektedir.
- Üst orta pencere alt pencerede gözlenen ve seçilerek ağırlık merkezi dalgaboyu olarak belirlenen spektral çizginin program tarafından seçim kuralları dikkate alınarak hesaplanan ve tüm mümkün olan tüm spektral çizgi önerilerinin bir listesini içerir.
- 3. Sağ üst köşedeki pencere, önerilen tüm çizgilerin alt ve üst enerji seviyelerini ve bunlara ait J değerlerini verir. Burada verilen tanımlamalar programda Ritz kombinasyon prensibi ve elektrik kuadropol radyasyonu için seçim kurallarını kullanılarak belirlenir. Ayrıca bu pencerede çizginin eğer alt ve üst enerji seviyelerinin A ve B değerleri biliniyorsa program tarafından simülasyon yöntemi ile belirlenmiş teorik spektrumda verilir.

Eğer orta pencerede mümkün olan bir geçişin alt ve üst enerji seviyelerine ait *A* ve *B* değerleri bilinmiyorsa sağdaki simülasyon penceresi o çizgi için boş kalır. Simülasyon şeklinin sol üst köşesindeki rakamlar da, FT'de bulunan çizgi ile simüle edilen çizginin ağırlık merkezleri arasındaki farkı verir. Bu fark ne kadar küçükse tanımlanan çizginin doğru olma olasılığı o kadar yüksektir.

FT programında gözlenen bir spektral geçişin ağırlık merkezinin dalgaboyu eğer literatürden biliniyorsa, programın "w" giriş dosyasında vardır ve geçişin dalgaboyu değeri programın ana sayfasında "Go to Lambda" seçeneğine Å cinsinden yazılır. Eğer incelenen spektral çizgi literatürde bilinmiyorsa, programın "w" giriş dosyasında yoktur ve geçişin dalgaboyu değeri programın ana sayfasında "Insert Line" seçeneğine Å cinsinden yazılır. Program öncelikle incelenen elemente ait tüm bilinen enerjilerinin yazıldığı giriş dosyasını kullanır ve seçim kurallarını göz önüne alarak, enerji çiftleri aralarındaki farkla spektral geçişlerin dalgaboylarını karşılaştırır. Geçişlerin dalgaboylarına karşılık gelebilecek tüm mümkün geçişleri hesaplar.



Programın ana menüsü Şekil 3.19'da gösterildi.

Şekil 3.19 : $\lambda = 541.8087$ nm dalgaboylu spektral geçiş için Klasifikasyon [49] programının ana menüsü.

4. BULGULAR

Bu tez çalışmasında, Vanadyum elementinin aşırı ince yapısı incelendi. Genel Kısımlar'da referans verilen daha önceki yapılan çalışmaların incelenmesiyle, atomik Vanadyum elementinin $3d^{-3} 4s4p$ ve $3d^{-4} 4p$ konfigürasyonlarına ait bazı enerji seviyelerinin aşırı ince yapı sabitlerinin bilinmediği tespit edildi.

Vanadyum elementinin $3d^3 4s4p$ ve $3d^4 4p$ konfigürasyonlarına ait enerji seviyelerinin aşırı ince yapılarını incelemek amacıyla Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi kullanılarak Vanadyum spektrumu ölçüldü.

Vanadyum elementi spektrumu, 15 000 – 27 400 cm⁻¹ dalga sayısı aralığında, Litvanya Üniversitesi Laser Merkezi'nde, Bruker IFS Fourier transform spektrometresi kullanılarak kaydedilmiştir. Spektrometrenin giriş aralığı 1 mm ve çözünürlüğü 0.025 cm⁻¹ değerinde sabitlenmiştir. Her bir spektrum 20 taramadan elde edilmiş olup beş kez tekrarlanmıştır. Spektrumu dedekte etmek için bir Kuartz ışın bölücü ve bir Hamamatsu R928 foton çoğaltıcı kullanılmıştır.

Vanadyum plazması, dış materyali silindir bakır olan silindir katodun içi % 99.7 saflıkta Vanadyum levha ile kaplarak silindir katot lambası içinde 1.5 mbar basınçta argon taşıyıcı gazı ile 20 – 50 mA akım verilerek oluşturuldu.

Spektrumda düşük şiddetli Vanadyum çizgilerinin incelenebilmesi için FT spektrometresi ile silindir katot arasındaki optik ışın yoluna farklı dalga boylarındaki optik girişim filtreleri yerleştirilerek spektrumlar kaydedildi. Bu filtreleri kullanarak, spektrumun filtrelerin bant aralığındaki sinyal/gürültü oranı önemli ölçüde iyileştirildi.



Şekil 4.1 : a) Spektrumun 18 261 – 18 660 cm⁻¹ aralığından bir kesiti b) Spektrumun 18 453 – 18 470 cm⁻¹ aralığından bir kesiti c) $\lambda = 541.5250$ nm dalgaboyuna ve $\sigma = 18$ 461.233 cm⁻¹ dalgasayısına sahip (37 606.365 cm⁻¹, J = 13/2 \rightarrow 19 145.148 cm⁻¹, J = 11/2) spektral geçişi.

Deneyler sırasında kullanılan filtreler 370 ± 5 nm, 400 ± 20 nm, 420 ± 35 nm, 456 ± 1 nm, 476 ± 7 nm, 550 ± 10 nm, 600 ± 20 nm ve 650 ± 20 nm dalgaboylarındadır. Bu filtreler kullanılarak $15\ 000 - 27\ 400\ \text{cm}^{-1}$ dalga sayısı aralığında spektrumlar kaydedildi.

Çizgilerin aşırı ince yapısını incelemek için tüm spektrumdan incelenen her bir spektral çizgi tek tek kesildi. Her spektrum 5 kez arasında kaydedildi. Kesilen her çizginin genişliği, her çizginin aşırı ince yapı dağılımının toplam genişliklerine bağlı olarak 20 - 30 GHz aralığında alındı. Şekil 4.1(a)'da alınan Fourier Transform Spektrumunun 18 261 – 18 660 cm⁻¹aralığındaki kesiti ve (b)'de 18 453 – 18 470 cm⁻¹aralığındaki kesiti (c)'de dalgaboyu $\lambda = 541.5250$ ve dalgasayısı $\sigma = 18 461.233$ cm⁻¹ olan (37 606.365 cm⁻¹, $J = 13/2 \rightarrow 19 145.148$ cm⁻¹ J = 11/2) spektral geçişine ait Vanadyum çizgisi gösterildi.

Spektrumdan kesilen ve Fourier dönüşümü yapılmış olan spektrumların x ekseni cm⁻¹ cinsinden dalga sayısını, y ekseni ise şiddeti verir. Bu spektrumun lineerize edilerek x ekseninin frekansa dönüştürülmesi gerekmektedir. Şekil 4.2'de dalgaboyu $\lambda = 541.5250$ ve dalgasayısı $\sigma = 18\ 461.233\ \text{cm}^{-1}$ olan (37 606.365 cm⁻¹, $J = 13/2 \rightarrow 19\ 145.148\ \text{cm}^{-1}$, J = 11/2) spektral geçişine ait parametre (par) dataları Fitter [9] programı ile oluşturularak lineerize edilen spektrumuma bir örnek olarak gösterilmiştir.



Şekil 4.2 : Dalgaboyu $\lambda = 541.5250$ ve dalgasayısı $\sigma = 18\ 461.233\ \text{cm}^{-1}$ olan (37 606.365 cm⁻¹, $J = 13/2 \rightarrow 19\ 145.148\ \text{cm}^{-1}$, J = 11/2) spektral geçişinin lineerize edilen spektrumu.

Şekil 4.3'te ise bu geçişin Fitter [9] programı ile fit edilmiş teorik ve deneysel spektrumu gösterildi. Bu spektrumun altında deneysel spektrum ile fit edilen teorik spektrum arasındaki fark görülmektedir.



Şekil 4.3 : Dalgaboyu $\lambda = 541.5250$ ve dalgasayısı $\sigma = 18\ 461.233\ \text{cm}^{-1}$ olan (37 606.365 cm⁻¹, $J = 13/2 \rightarrow 19\ 145.148\ \text{cm}^{-1}$, J = 11/2), spektral geçişinin Fitter [9] programı ile elde edilen spektrumu. Mor spektrum teorik, gri spektrum deneysel ve "0" ekseninin altındaki koyu gri spektrum deneysel ve teorik spektrumlar arasındaki farkı göstermektedir.

Vanadyum elementinin incelenen spektral bölgelerdeki spektral çizgilerinin sınıflandırılmasında Vanadyum elementine ait Thorne ve diğ. [28] tarafında verilen deneysel spektral geçiş tabloları referans olarak kullanıldı. Deneyde taşıyıcı gaz olarak kullanılan Argon gazı sebebiyle spektrumlarda Argon (Ar) çizgileri de gözlenmektedir. Argon asal gazına ait spektral geçişleri ayırt edebilmek için NIST [50] tabloları referans olarak kullanıldı. Dalgaboyu $\lambda = 429.8024$ ve dalgasayısı $\sigma = 23 259.963$ cm⁻¹ olan spektral geçişi ile Ar II'ye ait bir çizginin yan yana olduğu fit işlemi yapılmış bir örnek spektrumu Şekil 4.4'te görülmektedir. Çizgilerin birbirine çok yakın olmasından ve yarı genişliklerinin birbirinden etkilenmesinden dolayı birlikte analiz edildi.



Şekil 4.4 : Ar asal gazının ve V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen dalga sayısı $\sigma = 23\ 259.963\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 429.8024\ \text{nm}$ olan (40 314.882 cm⁻¹, $J = 7/2 \rightarrow 17\ 054.924\ \text{cm}^{-1}$, J = 5/2) spektral geçişine ait spektrumu.

Spektrumdan kesilen her bir çizgi için Fitter programının çalışması için kullanılan mes, lin ve ein uzantılı dosyalar oluşturuldu. Bu dosyalar yardımıyla her bir çizginin aşırı ince yapısı fit edildi. Spektral geçişin üst enerji seviyesine ait manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti *A* değerleri elde edildi.

Ölçülen tüm spektrumların hemen hemen tamamı az ayrışmış çizgiler olduğundan, elde edilen aşırı ince yapı sabitlerinin doğruluğunu arttırabilmek için incelenen bütün spektral çizgilerde alt enerji seviyelerine ait *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti ve elektrik kuadropol *B* sabitleri literatürde var olan ve doğruluğu yüksek değerlerde sabit tutuldu. Literatürden alınarak sabit tutulan bu aşırı ince yapı sabitleri ait oldukları enerji, konfigürasyon ve spektral terimleriyle birlikte elde edildikleri deneysel metodlar ve referansları Tablo 4.1'de listelendi.

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon	Terim	J	A (MHz)	B (MHz)	Ref. No
552.955	$3d^3 4s^2$	${}^{4}F$	9/2	227.1324 (6)	7.822 (15)	13
2 112.282	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	1/2	751.4778 (28)	-	13
2 153.221	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	3/2	405.6038 (12)	-8.107 (12)	13
2 220.156	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	5/2	373.5180 (10)	-5.459 (25)	13
2 311.369	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	7/2	382.3670 (10)	2.268 (29)	13
2 424.809	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	9/2	406.8513 (16)	14.324 (65)	13
8 413.009	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	1/2	1 276 (5)	-	14
8 476.234	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	3/2	6.9658	-108.535	14
8 578.542	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	5/2	-143.4320	-11.959	14
8 715.747	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	7/2	-160.2192	102.287	14
11 100.596	$3d^{3}4s^{2}$	^{2}G	9/2	298.6 (9)	-	20
13 801.551	$3d^{3}4s^{2}$	^{2}P	3/2	333.4 (9)	-	20
14 909.958	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	7/2	31.48 (30)	-	18
14 949.359	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	9/2	260.49 (90)	-	18
15 000.937	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	11/2	374.64427	-	16
15 062.959	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	13/2	445.1198	-	16
15 688.862	$3d^{4}(^{3}F_{2}) 4s$	${}^{4}F$	5/2	305.94169	-	16
15 724.229	$3d^{4}(^{3}F_{2})$ 4s	${}^{4}F$	7/2	446.04776	-	16
15 770.789	$3d^{4}(^{3}F_{2})$ 4s	${}^{4}F$	9/2	511.47562	-	16
17 054.924	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	5/2	0.63 (12)	-	18
17 116.947	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	7/2	276.3 (9)	-	18
17 182.073	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	9/2	397.8 (2)	-	18
17 242.070	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	11/2	463.03 (12)	-	18
18 805.048	$3d^{4}(^{3}P_{2}) 4s$	^{2}P	1/2	690.1 (3)	-	18
19 023.531	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	^{2}H	9/2	398.8739	-28.402	17
19 026.326	$3d^{4}(^{3}F_{2})4s$	^{2}F	5/2	471.3 (3)	-	18
19 078.112	$3d^{4}(^{3}F_{2}) 4s$	^{2}F	7/2	93.5 (6)	-	18
19 145.148	$3d^{4}(^{3}H)$ 4s	^{2}H	11/2	160.9550	-173.358	17
19 189.283	$3d^{4}(^{3}P_{2}) 4s$	^{2}P	3/2	-225.74 (15)	-	18
21 101 589	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	^{2}G	7/2	422.4 (6)	_	18
21 275.652	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	^{2}G	9/2	120.13 (18)	_	18

Tablo 4.1 : V elementinin Fourier Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen spektral geçişlerinin literatürden bilinen ve fit işlemi süresince sabit tutulan çift pariteli alt enerji seviyelerinin *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri.

Spektrumların analizi sonucunda $15\ 000 - 27\ 400\ \text{cm}^{-1}$ dalga sayısı, $360 - 670\ \text{nm}$ dalgaboyu aralığındaki 56 farklı spektral çizgi incelendi. Thorne ve diğ [28]'den yararlanarak bu spektral geçişlerin dalgaboyları, dalga sayıları, şiddetleri, alt ve üst enerji seviyeleri ve bu seviyelerin konfigürasyonları, spektral terimleri ve *J* değerleri Tablo 4.2'de verildi. Bu tabloda Thorne'da [28] yer almayan fakat National Bureau of Sandarts'nın dalgaboyu tablosunda [51] tanımlanmanış olarak verilen sadece bir çizgi bulunmaktadır. Her bir spektral çizgi için tekrarlanan beş ölçümün fit işlemi sonucunda elde edilen ağırlık merkezleri σ_{fit} değerinden, spektral çizginin alt ve üst enerji seviyelerinin farkları çıkarılarak (Denklem 4.1) elde edilen $\Delta\sigma$ üçüncü kolonda verildi.

$$\Delta \sigma = \sigma_{fit} - (E_o - E_e) \tag{4.1}$$

Yapılan fitlerde en büyük $\Delta \sigma$ değeri 0.020 olmakla birlikte ortalama $\Delta \sigma$ değeri 0.004 cm⁻¹ olup, spektrumda ölçülen dalgasayılarının doğruluk oranları ile uyum içindedir. Yukarıda bahsedilen bir çizgi dışındaki bütün çizgiler için Thorne'da [28] verilen sınıflandırmalar onaylandı.

Tablo 4.2'de verilen spektral çizgilerin astrofiziksel uygulamalar için çizgi genişliği *W* dördüncü kolonda verildi. Aşırı ince yapı yarılmalarının çizgi genişliği ile ilgili üç özellik vardır ve bunlar şekil 4.5'de gösterilmiştir.

- 1. Aşırı ince yapı yarılmasının tüm genişliği (W_1) ,
- 2. En şiddetli aşırı ince yapı bileşenlerinin dağılımının genişliği (W_2), ki bu $\Delta J = \Delta F$ olan aşırı ince yapı bileşenleridir.
- 3. Spektral çizginin sağ ve sol tarafında şiddetin $1/e^2$ orandaki yerlerin arasındaki fark (W_3)



Şekil 4.5 : Spektral çizginin genişliği Wnın nasıl belirlendiğinin gösterimi. W_1 ; aşırı ince yapı yarılmasının tüm genişliği, W_2 ; En şiddetli aşırı ince yapı bileşenlerinin dağılımının genişliği, W_3 ; Spektral çizginin sağ ve sol tarafında şiddetin $1/e^2$ orandaki yerlerin arasındaki fark.

Birinci durumda (W_1) küçük şiddete sahip hfs bileşenleri çizgininn kanatlarında kaybolduğundan bazen çizgi genişliği spketrumda göründüğünden, daha geniştir. İkinci durumda (W_2) çizgi olduğundan daha dar görünür. Bu nedenle biz üçüncü seçeneği (W_3) tabloya koyduk. Çünkü şiddet aralığını seçtiğimiz $1/e^2$ kullanılan alet fonksiyonuna deneysel şartlara ilgili olan Doppler genişliğine bağlıdır.

İncelenen çizgilerin kalitesi hakkında bilgi vermek için her bir spektral çizginin S/N (sinyal gürültü oranı) oranı Tablo 4.2'de beşinci kolonda verildi. S/N oranı deney sırasında kullanılan filtrelerin geçişrgenlik eğrisine bağlı olduğundan çizgilerin gerçek şiddetlerini tanımlamaz. Tablo 4.2'de altıncı kolonda verilen spektral çizgilerin şiddetleri Thorne'dan [28] alındı.

							Alt Seviye				Üst Seviye		
$\lambda_{ m hava}$	σ	Δσ	W	S/N	Şiddet	E _e	Konf.	Terim	J	Eo	Konf.	Terim	J
(nm)	(cm ⁻¹)	(cm ⁻¹)				(cm ⁻¹)				(cm ⁻¹)			
572.5639	17 460.457	0.000	253	21	5.12	19 078.112	$3d^{4}(^{3}F) 4s$	^{2}F	7/2	36 538.569	$3d^{4}(^{3}F)4p$	^{2}G	9/2
566.8361	17 636.890	0.003	224	74	5.14	8 715.747	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	7/2	26 352.634	$3d^{4}(^{5}D)4p$	^{4}D	5/2
565.7438	17 670.941	0.007	219	82	5.16	8 578.542	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	5/2	26 249.476	$3d^{4}(^{5}D)4p$	^{4}D	3/2
564.6105	17 706.409	0.006	226	100	4.96	8 476.234	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	3/2	26 182.637	$3d^{4}(^{5}D)4p$	^{4}D	1/2
562.6016	17 769.633	0.005	398	56	5.02	8 413.009	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	1/2	26 182.637	$3d^{4}(^{5}D)4p$	^{4}D	1/2
562.4872	17 773.248	0.006	180	162	4.99	8 476.234	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	3/2	26 249.476	$3d^{4}(^{5}D)4p$	^{4}D	3/2
562.4604	17 774.096	0.004	171	227	5.32	8 578.542	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	5/2	26 352.634	$3d^{4}(^{5}D)4p$	^{4}D	5/2
560.4933	17 836.473	0.006	239	71	4.88	8 413.009	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{4}D	1/2	26 249.476	$3d^{4}(^{5}D)4p$	^{4}D	3/2
551.1175	18 139.913	0.004	122	31	4.5	19 145.148	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	^{2}H	11/2	37 285.057	$3d^{4}(^{3}H)4p$	^{4}I	9/2
548.7912	18 216.805	0.002	193	66	5.17	19 145.148	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	^{2}H	11/2	37 361.951	$3d^{4}(^{3}H)4p$	^{2}G	9/2
543.7655	18 385.170	0.004	169	14	4.32	19 145.148	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	^{2}H	11/2	37 530.314	$3d^{4}(^{3}H)4p$	^{2}I	11/2
542.4059	18 431.255	0.005	180	54	4.98	19 026.326	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	^{2}F	5/2	37 457.576	$3d^{4}(^{3}F) 4p$	^{2}D	3/2
541.8087	18 451.574	-0.001	150	34	*#	19 023.531	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	^{2}H	9/2	37 475.102	$3d^{3}(^{2}D) 4s4p(^{3}P)$	^{2}F	7/2
541.5250	18 461.237	0.020	470	54	5.44	19 145.148	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	^{2}H	11/2	37 606.365	$3d^{4}(^{3}H)4p$	^{2}I	13/2
540.1921	18 506.787	0.004	254	66	5.37	19 023.531	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	^{2}H	9/2	37 530.314	$3d^{4}(^{3}H)4p$	^{2}I	11/2
535.3410	18 674.487	0.004	94	158	5.1	19 078.112	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	^{2}F	7/2	37 752.595	$3d^{4}(a^{3}F) 4p$	^{2}D	5/2
490.4434	20 384.022	0.002	290	28	5.23	21 275.652	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	^{2}G	9/2	41 659.672	$3d^{4}(^{3}G)4p$	^{2}H	11/2
490.0625	20 399.865	0.005	158	42	5.04	21 101.589	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	^{2}G	7/2	41 501.449	$3d^{4}(^{3}G)4p$	^{2}H	9/2
477.6511	20 929.933	-0.002	420	17	4.86	19 189.283	$3d^{4}(^{3}P^{2}) 4s$	^{2}P	3/2	40 119.218	$3d^{4}(a^{3}P) 4p$	^{2}D	5/2

Tablo 4.2 : V elementinin Fourier Spektroskopisi yöntemi ile incelenen spektral geçişleri.

						Alt Seviye			Üst Seviye				
λ _{hava} (nm)	σ (cm ⁻¹)	$\Delta\sigma$ (cm ⁻¹)	W	S/N	Şiddet	E _e (cm ⁻¹)	Konf.	Terim	J	E _o (cm ⁻¹)	Konf.	Terim	J
474.2619	21 079.500	0.008	200	33	4.54	18 805.048	$3d^{4}(^{3}P) 4s$	^{2}P	1/2	39 884.540	$3d^{4}(a^{3}P) 4p$	^{2}D	3/2
471.7687	21 190.901	-0.005	386	16	4.73	17 054.924	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	5/2	38 245.829	$3d^{4}(^{3}H) 4p$	${}^{4}H$	7/2
470.7438	21 237.034	0.003	167	23	4.55	15 688.862	$3d^{4}(^{3}F) 4s$	${}^{4}F$	5/2	36 925.893	$3d^{4}(a^{3}F) 4p$	^{2}F	7/2
457.1784	21 867.172	0.000	180	11	5.36	15 688.862	$3d^{4}(^{3}F^{2}) 4s$	${}^{4}F$	5/2	37 556.034	$3d^{4}(a^{3}F)4p$	${}^{4}G$	7/2
454.5391	21 994.140	0.006	350	10	5.59	15 770.789	$3d^{4}(^{3}F^{2}) 4s$	${}^{4}F$	9/2	37 764.923	$3d^{4}(a^{3}F)4p$	${}^{4}G$	11/2
446.9702	22 366.578	0.005	230	11	5.69	14 949.359	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	9/2	37 315.932	$3d^{4}(^{3}H)4p$	^{4}I	11/2
446.2357	22 403.395	0.003	251	11	5.76	15 000.937	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	11/2	37 404.329	$3d^{4}(^{3}H)4p$	^{4}I	13/2
445.2004	22 455.490	0.004	460	33	5.83	15 062.959	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	13/2	37 518.445	$3d^{4}(^{3}H)4p$	^{4}I	15/2
429.8024	23 259.963	0.005	410	12	5.08	17 054.924	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	5/2	40 314.882	$3d^{4}(^{3}G)4p$	${}^{4}H$	7/2
429.7671	23 261.872	0.007	160	39	5.13	17 116.947	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	7/2	40 378.812	$3d^{4}(^{3}G)4p$	${}^{4}H$	9/2
429.6096	23 270.399	0.006	240	15	5.22	17 182.073	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	9/2	40 452.466	$3d^{4}(^{3}G)4p$	${}^{4}H$	11/2
429.1805	23 293.665	0.006	430	20	5.32	17 242.070	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	11/2	40 535.729	$3d^{4}(^{3}G)4p$	${}^{4}H$	13/2
428.4043	23 335.871	0.011	330	23	5.44	14 909.958	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	7/2	38 245.829	$3d^{4}(^{3}H)4p$	${}^{4}H$	7/2
427.6950	23 374.569	0.004	153	22	5.46	14 949.359	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	9/2	38 323.924	$3d^{4}(^{3}H)4p$	${}^{4}H$	9/2
427.1548	23 404.131	0.001	273	1	5.54	15 000.937	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	11/2	38 405.067	$3d^{4}(^{3}H)4p$	${}^{4}H$	11/2
426.8637	23 420.091	0.005	406	10	5.65	15 062.959	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	13/2	38 483.045	$3d^{4}(^{3}H)4p$	${}^{4}H$	13/2
423.2945	23 617.561	0.006	255	7	5.09	15 724.229	$3d^{4}(^{3}F^{2}) 4s$	${}^{4}F$	7/2	39 341.784	$3d^{4}(a^{3}F)4p$	${}^{4}F$	7/2
423.2456	23 620.294	0.004	330	5	5.26	15 770.789	$3d^{4}(^{3}F^{2}) 4s$	${}^{4}F$	9/2	39 391.079	$3d^{4}(a^{3}F)4p$	${}^{4}F$	9/2
417.4006	23 951.048	0.004	143	16	4.69	13 801.551	$3d^{3}4s^{2}$	^{2}P	3/2	37 752.595	$3d^{4}(a^{3}F) 4p$	^{2}D	5/2
413.4483	24 180.000	0.002	439	95	5.91	2 424.809	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	9/2	26 604.807	$3d^{4}(^{5}D)4p$	^{6}D	7/2

Tablo 4.2 : (devam)

					_	Alt Seviye				Üst Seviye				
λ _{hava} (nm)	σ (cm ⁻¹)	$\Delta\sigma$ (cm ⁻¹)	W	S/N	Şiddet	E _e (cm ⁻¹)	Konf.	Terim	J	E _o (cm ⁻¹)	Konf.	Terim	J	
413.1990	24 194.587	0.002	369	152	6.05	2 311.369	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	7/2	26 505.953	$3d^{4}(^{5}D) 4p$	^{6}D	5/2	
412.8064	24 217.601	0.003	299	176	6.03	2 220.156	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	5/2	26 437.754	$3d^{4}(^{5}D) 4p$	^{6}D	3/2	
412.3498	24 244.415	0.003	340	145	5.85	2 153.221	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	3/2	26 397.633	$3d^{4}(^{5}D) 4p$	^{6}D	1/2	
411.6547	24 285.353	0.002	242	67	5.32	2 112.282	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	1/2	26 397.633	$3d^{4}(^{5}D) 4p$	^{6}D	1/2	
411.6471	24 285.798	0.001	342	75	5.69	2 220.156	3d 4 (5D) 4s	6D	5/2	26 505.953	3d4(5D)4p	^{6}D	5/2	
411.5176	24 293.440	0.002	396	195	6.17	2 311.369	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	7/2	26 604.807	$3d^4(^5D)4p$	^{6}D	7/2	
411.1776	24 313.528	0.014	467	345	6.47	2 424.809	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	9/2	26 738.323	$3d^4(^5D)4p$	^{6}D	9/2	
410.5157	24 352.733	0.001	261	209	6.01	2 153.221	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	3/2	26 505.953	$3d^4(^5D)4p$	^{6}D	5/2	
409.9783	24 384.652	0.003	297	172	6.02	2 220.156	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	5/2	26 604.807	$3d^4(^5D)4p$	^{6}D	7/2	
409.2683	24 426.956	0.002	340	100	5.97	2 311.369	$3d^{4}(^{5}D) 4s$	^{6}D	7/2	26 738.323	$3d^4(^5D)4p$	^{6}D	9/2	
405.1345	24 676.188	0.003	378	9	5.09	17 242.070	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	11/2	41 918.255	$3d^4(^3G)4p$	${}^{4}G$	11/2	
405.0953	24 678.577	0.003	298	11	4.91	17 182.073	$3d^{4}(^{3}G) 4s$	${}^{4}G$	9/2	41 860.647	$3d^4(^3G)4p$	${}^{4}G$	9/2	
399.8723	25 000.916	0.001	506	13	5.29	15 062.959	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	13/2	40 063.874	$3d^4(^{3}H)4p$	${}^{4}G$	11/2	
399.2794	25 038.037	0.004	326	16	5.19	15 000.937	$3d^{4}(^{3}H) 4s$	${}^{4}H$	11/2	40 038.970	$3d^4(^{3}H)4p$	${}^{4}G$	9/2	
393.0018	25 437.972	-0.001	194	40	5.45	11 100.596	$3d^{3}4s^{2}$	^{2}G	9/2	36 538.569	$3d^4(a^3F)4p$	^{2}G	9/2	
385.5839	25 927.337	0.006	376	23	6.44	552.955	$3d^{3}4s^{2}$	${}^{4}F$	9/2	26 480.286	$3d^4(^5D)4p$	${}^{4}D$	7/2	
368.6257	27 120.067	0.000	206	105	5.09	11 100.596	$3d^{3}4s^{2}$	^{2}G	9/2	38 220.663	$3d^4(^{3}H)4p$	^{2}H	11/2	

Tablo 4.2 : (devam)

*: Thorne'dan [28] listelenmedi. Meggers'den [51] alınmıştır ve #: sınıflandırılmadı.

Tablo 4.3'te 56 spektral geçişe ait dalgaboyları, tek pariteli üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ve *J* değerleri verilmiştir. Tablo 4.3'ün beşinci sütununda, *A* aşırı ince yapı sabitinin elde edildiği spektral çizginin dalgaboyu λ_{hava} ile verildi. Altıncı sütunda, fit işlemi sonucunda elde edilen tek pariteli üst enerji seviyelerinin *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabitlerinin deneysel değerleri,yedinci sütunda aynı enerji seviyesi için birden fazla spektral geçişten elde edilen *A* değerlerinin, *A*_{ort}. ağırlıklı ortalama değerleri verilmiştir ve ölçüm belirsizliğini ifade eden standart sapmaları parantez içinde belirtilmiştir. Tablo 4.3'ün sekizinci kolonunda ise eğer biliniyorsa daha önceki çalışmalardan elde edilen *A*_{ref}. değerleri referansları ile birlikte verilerek karşılaştırıldı ve sonuçların bu çalışmada bulunan değerler ile uyumlu olduğu görüldü.

Konf.	Terim	E (cm ⁻¹)	J	$\lambda_{ m hava}$ (nm)	A _{den.} (MHz)	A _{ort.} (MHz)	A _{ref.} (MHz)
$3d^{4}(^{5}D) 4p$	^{4}D	26 182.637	1/2	564.6105 562.6016	1 105 (4) 1 103 (6)*	1 104 (3)	1 100 (3)
		26 249.476	3/2	565.7438 562.4872 560.4933	137.0 (8) 136.1 (14) 138 (5)*	136.8 (7)	141 (2)
		26 352.634	5/2	562.4606 566.8361	15.0 (2) 14.7 (12)	15.0 (2)	15.3 (9)
		26 480.286	7/2	385.5839	-19 (3)		- 17.1 (6)
	^{6}D	26 397.633	1/2	412.3498 411.6547	-508 (5) -508 (14)	-508 (5)	
		26 437.754	3/2	412.8064 410.9757	-57 (2) -58 (3)	-57.3 (17)	
		26 505.953	5/2	413.1990 411.6471 410.5157	18.8 (4) 20 (2) 18 (3)	18.8 (4)	
		26 604.807	7/2	413.4483 411.5176 409.9783	59.3 (18) 57.4 (12) 58 (2)	58.0 (9)	
		26 738.323	9/2	411.1776 409.2683	95.7 (12) 96.4 (6)	96.3 (5)	
$3d^{4}(^{3}F) 4p$	^{2}G	36 538.569	9/2	572.5639 393.0018	231 (2) 233 (8)	231.1 (19)	
$3d^4(a^3F) 4p$	^{2}F	36 925.893	7/2	470.7438	275 (10)		
$3d^{4}(^{3}H) 4p$	^{4}I	37 285.057	9/2	551.1175	229 (14)		
		37 315.932	11/2	446.9702	118 (4)		
		37 404.329	13/2	446.2357	218 (5)		
		37 518.445	15/2	445.2004	184 (3)		
$3d^{4}(^{3}H) 4p$	^{2}G	37 361.951	9/2	548.7912	73 (30)		
$3d^{4}(^{3}F) 4p$	^{2}D	37 457.576	3/2	542.4059	528 (10)		
$3d^{3}(^{2}D) 4s4p(^{3}P)$	^{2}F	37 475.102	7/2	541.8087	456 (7)		
$3d^{4}(^{3}H) 4p$	^{2}I	37 530.314	11/2	543.7655 540.1921	211 (6) 210.2 (12)	210.2 (12)	
$3d^{4}(a^{3}F) 4p$	${}^{4}G$	37 556.034	7/2	457.1784	322 (20)		
$3d^{4}(^{3}H) 4p$	^{2}I	37 606.365	13/2	541.5250	375.9 (6)		

Tablo 4.3 : V elementinin, bu çalışmada belirlenen deneysel A_{ort} . İle literatürden bilinen A_{ref} manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerleri.

Tablo 4.3 : (devam)

Konf.	Ter.	E (cm ⁻¹)	J	$\lambda_{ m hava}$ (nm)	A _{den.} (MHz)	A _{ort.} (MHz)	A _{ref.} (MHz)
$3d^4(a^3F) 4p$	^{2}D	37 752.595	5/2	417.4006 535.3410	120 (15) 100 (30)	116 (13)	
$3d^{4}(a^{3}F)4p$	${}^{4}G$	37 764.923	11/2	454.5391	246 (45)		
$3d^{4}(^{3}H) 4p$	^{2}H	38 220.663	11/2	368.6257	304 (2)		
3 <i>d</i> ⁴ (3 <i>H</i>) 4 <i>p</i>	${}^{4}H$	38 245.829	7/2	428.4043 471.7687	309 (10) 312 (3)	312 (3)	
		38 323.924	9/2	427.6950	257 (3)		
		38 405.067	11/2	427.1548	254 (14)		
		38 483.045	13/2	426.8637	268 (14)		
$3d^{4}(a^{3}F)4p$	${}^{4}F$	39 341.784	7/2	423.2945	273 (12)		
		39 391.079	9/2	423.2456	351 (8)		
$3d^{4}(^{3}H) 4p$	${}^{4}G$	40 038.970	9/2	399.2794	253 (2)		
		40 063.874	11/2	399.8723	248 (6)		
$3d^{4}(a^{3}P) 4p$	^{2}D	40 119.218	5/2	477.6511	387 (8)		
$3d^{4}(^{3}G) 4p$	${}^{4}H$	40 314.882	7/2	429.8024	372 (10)		
		40 378.812	9/2	429.7671	267 (6)		
		40 452.466	11/2	429.6096	216 (25)		
		40 535.729	13/2	429.1805	185 (16)		
	^{2}H	41 501.449	9/2	490.0625	287 (3)		
		41 659.672	11/2	490.4434	-51.1 (8)		
$3d^{4}(^{3}G) 4p$	${}^{4}G$	41 860.647	9/2	405.0953	264 (2)		266.2 (3)
		41 918.255	11/2	405.1345	264 (2)		262.3 (3)

* : Spektral geçişlerin alt enerji seviyelerine ait A manyetik dipol momenti aşırı ince yapı sabiti Palmeri'den [19] alınmıştır.

V I üst enerji seviyelerinin $3d^4 4p$ ve $3d^3 4s4p$ konfigürasyonlarına ait geçişleri içeren 56 spektral geçişinin analizi sonucunda 41 tek pariteli enerji seviyelerinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri belirlendi. 35 tek pariteli enerji seviyesinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabit değerleri *ilk kez* bu çalışmada bulundu. Elde edilen diğer A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerleri değerlerinin de literatürden bilinen değerler ile (A_{ref}) uyum içinde olduğu gözlendi.

Bu çalışmada incelenen Vanadyum elementine ait 56 spektral çizginin en iyi fit sonuçlarını veren spektrumlar dalga sayısına göre sıralanarak EK – 1'de sunuldu. Bu grafiklerde siyah spektrum deneysel, kırmızı spektrum teorik spektrumu ve şeklin en altındaki yeşil renkli spektrum ise deneysel ve teorik spektrumlar arasındaki farkı göstermektedir.
Şekil 4.6'da çok iyi ayrışmış gibi görünen fakat her bir maksimum birden fazla bileşen içeren dalgaboyu $\lambda_{hava} = 564.6105$ nm çizgisi örnek olarak verildi.



Şekil 4.6 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı $\sigma = 17\ 706.409\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 564.6105\ \text{nm}$ olan (26 182.637 cm⁻¹, $J = 1/2 \rightarrow 8\ 476.234\ \text{cm}^{-1}$, J = 3/2) spektral geçişine ait bir spektrum.

Alt ve üst enerji seviyelerinin sahip olduğu J değerleri sebebi ile çok az aşırı ince yapı geçişi olan ve iyi ayrışmış bir spektruma örnek olarak $\lambda_{hava} = 562.6016$ nm çizgisi Şekil 4.7'de verildi.



Şekil 4.7 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı $\sigma = 17\ 769.633\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 562.6016\ \text{nm}$ olan (26 182.637 cm⁻¹, $J = 1/2 \rightarrow 8\ 413.009\ \text{cm}^{-1}$, J = 1/2) spektral geçişine ait bir spektrum.

Sadece iki maksimum olmasına rağmen çok fazla aşırı ince yapı geçişini içeren ve şiddetlerin teorik değerlerinde kuplaj yapılmasının önemli olduğunu vurgulayan bir spektruma $\lambda_{hava} = 542.4059$ nm çizgisi örnek olarak Şekil 4.8'de verildi.



Şekil 4.8 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı $\sigma = 18\ 431.255\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 542.4059\ \text{nm}$ olan (37 457.576 cm⁻¹, $J = 3/2 \rightarrow 19\ 026.326\ \text{cm}^{-1}$, J = 5/2) spektral geçişine ait bir spektrum.

Birbirine çok yakın olmaları sebebi ile her iki çizginin birlikte fit edilmesinin zorunlu olduğu bir spektruma örnek Şekil 4.9'de verildi.



Şekil 4.9 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı dalga sayısı $\sigma = 24\ 285.353\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 411.6547\ \text{nm}$ olan (26 397.633 cm⁻¹ $J = 1/2 \rightarrow 2\ 111.282\ \text{cm}^{-1}$, J = 1/2) spektral geçişine ve dalga sayısı $\sigma = 24\ 285.798\ \text{cm}^{-1}$, dalgaboyu $\lambda_{\text{hava}} = 411.6471\ \text{nm}$ olan (26 505.953 cm⁻¹, $J = 5/2 \rightarrow 2\ 220.156\ \text{cm}^{-1}$, J = 5/2) spektral geçişine ait spektrum. Yine iyi ayrışmış gibi görünen fakat her bir maksimum altında birde fazla aşırı ince yapı geçişinin maksimumlarını içeren spektrumlara örnek Şekil 4.10 ve Şekil 4.11'da verildi.



Şekil 4.10 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı $\sigma = 24$ 180.000 cm⁻¹, dalgaboyu $\lambda_{hava} = 413.4483$ nm olan (26 604.807 cm⁻¹, $J = 7/2 \rightarrow 2$ 424.809 cm⁻¹ J = 9/2) spektral geçişine ait bir spektrum.



Şekil 4.11 : V elementinin Fourier Transform Spektroskopisi yöntemi ile ölçülen ve fit edilen, dalga sayısı $\sigma = 22\ 455.490\ \text{cm}^{-1}$, $\lambda_{\text{hava}} = 445.2004\ \text{nm}$ olan (37 518.445 cm⁻¹ $J = 15/2 \rightarrow 15\ 062.959\ \text{cm}^{-1}\ J = 13/2$) spektral geçişine ait bir spektrum.

Her bir spektral geçişe ait alt ve üst enerji seviyeleri arasındaki aşırı ince yapı bileşenleri F toplam açısal momentum kuantum sayılarına bağlıdır. Aşırı ince yapı geçişlerinde her bir enerji seviyesi için $\Delta F = 0, \pm 1$ kuralı geçerlidir. Bu grafiklerde, dikey renkli çizgiler ile izinli aşırı ince yapı geçişleri gösterildi. $\Delta F = -1$ geçişleri yeşil, $\Delta F = 0$ geçişleri kırmızı, $\Delta F = +1$ geçişleri de mavi renkle tanımlandı.

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmada nötr Vanadyum elementinin aşırı ince yapısı deneysel spektrumu, yüksek çözünürlüklü Fourier transform spektroskopisi yöntemi ile alındı. Spektrum, 360 nm – 670 nm dalgaboyu aralığında bir Bruker IFS 125HR Fourier transform spektroskopisi ile Litvanya Üniversitesi Laser Merkezi'nde kaydedildi.

Deneyler sırasında sinyal /gürültü oranını arttırmak için, 370 ± 5 nm, 400 ± 20 nm, 420 ± 35 nm, 456 ± 1 nm, 476 ± 7 nm, 550 ± 10 nm, 600 ± 20 nm ve 650 ± 20 nm dalgaboylarında filtreler kullanıldı.

FTS metodu ile Vanadyum elementinin üst enerji seviyelerinin $3d^4 4p$ ve $3d^3 4s4p$ konfigürasyonlarına ait geçişleri içeren 56 spektral geçişinin analizi sonucunda 41 tek pariteli enerji seviyelerinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri belirlendi. Bunlardan 35 tek pariteli enerji seviyesinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabit değerleri *ilk kez* bu çalışmada bulundu. Elde edilen diğer A manyetik dipol aşırı ince yapı sabit değerleri *ilk kez* bu çalışmada bulundu. Elde edilen diğer A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerlerinin de literatürden bilinen değerleri ile $(A_{ref.})$ uyum içinde olduğu gözlendi.

FTS metodu ile incelenen spektral çizgilerin Fitter [9] programının çıkış datasından elde edilen Voigt profil fonksiyonunun ve bu fonksiyona ait Gauss ve Lorentz katkılarının yarı genişlik – dalga sayısı değişimi Şekil 5.1'de verilmiştir. Gauss, Lorentz ve Voigt datalarının her biri lineer olarak artmaktadır ve bu lineer fitlerin sonuçları Tablo 5.1'de gösterilmiştir. Yarı genişliğin Gauss katkısının Voigt profili katkısıyla hemen hemen aynı eğime sahiplerdir. Tablo 5.1'de beklendiği gibi Lorentz katkısının spektral geçişlerin dalga sayısından bağımsız olduğu görülmektedir.

Profil	Eğim (MHz/cm ⁻¹)	Eğim Kesme Noktası (cm ⁻¹)
Voigt	0.08102	21 994.140
Gauss	0.07288	21 994.140
Lorentz	0.01470	21 994.140

Tablo 5.1 : Dalga sayısının fonksiyonu olarak verilen Voigt profilinin Lorentzve Gauss katkılarının ölçülen lineer fit sonuçları.



Şekil 5.1 : Filtresiz ölçümlerle belirlenen spektral geçişlerin dalga sayıları ile yarı genişlikleri arasındaki ilişki.

Doppler genişlemeli Fourier Transform Spektroskopi metod ile atomik Vanadyumun 56 spektral geçişinin aşırı ince yapı analizi yapıldı. İncelenen tüm çizgiler çok az ya da hiç ayrışmamış durumdadır ve yarı genişlikleri 1250 ile 2300 MHz arasındadır. Bu çalışmada tek pariteli yüksek enerjilere sahip üst enerji seviyelerinin *A* manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri belirlendi. Bunu yaparken yüksek doğrulukla belli olan alt seviyelerin *A* manytik dipol aşırı ince yapı sabitleri fit sırasında kullanıldı.

Doppler genişliğinin etkisini azaltmak için, düşük sinyal şiddeti olmasına rağmen 50 mA altında akım kullanıldı. Filtrelerle kaydedilen sinyallerin hassaslığı arttırıldı ve böylece 56 spektral çizgiyi analiz etmemiz mümkün oldu.

KAYNAKLAR

- Haken, H., Wolf, H.C., 2000 The Physicsof Atoms and Quanta, Introduction to Experiments and Theory, Springer-Verlag, Berlin, Heideberg, NewYork, 3-540-67274-5.
- [2]. Aygün, E., Zengin, D.M., 1988, Atom Ve Molekül Fiziği, Bilim Yayınları, Ankara, 975-556-017-3.
- [3]. Booth, A.J., Blackwell, D.E., 1983, The Effect of Hyperfine Structure on Stellar Abundance Analysis, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 204, 777.
- [4]. Livingston, W., Wallace, L., 1991, An Atlas of the Solar Spectrum in the Infrared (1.1 to 5.4 mm), *National Solar Observatory Technical Report*, 91-001, Tucson, Az.
- [5]. Brodzinski, T., Kronfeldt, H., -D., Kropp, J.-R. And Winkler, R.,1987, Hyperfine Structure-Investigations in the Mangan I 3d⁵4s4p Nd 4s5s*, Zeitschrift für Physik, D7,161.
- [6]. Kurucz, R. L. 1993, Atomic Data for Interpreting Stellar Spectra: Isotopic and Hyperfine Data, *Physica Scripta*, 47, 110
- [7]. Pickering, J. C., & Semeniuk, J. I. 1995, New Atomic Data for the Thorium-Neodymum Stellar Chronometer, *Monthly Notices of The Royal Astronomical Society*, 274, L37
- [8]. Emsley, J., 1995, *The Elements (Oxfod Chemistry Guide)*, Oxford University Press, New York.
- [9]. Guthöhrlein, G., 2004, Fitter, University Of Bundeswehr Hamburg, Unpublished.
- [10]. Cintas, Pedro 2004, *The Road to Chemical Names and Eponyms: Discovery, Priority, and Credit*, Angewandte Chemie International Edition 43 (44): 5888–94.
- [11]. Kopfermann, H., Rasmussen, E., 1936, Über die Hyperfein Structur Einiger Vanadiummultiplette, *Zeitschrift für Physik*, 98, 624-637.
- [12]. Murakawa, K., 1956, The Quadrupole Moment of ⁵¹V, Journal of the Physical Society of Japan, 11, 422-425.
- [13]. Murakawa, K., 1966, Quadrupole Moment of ⁵¹V, *Journal of the Physical Society of Japan*, 21, 1466-1466.

- [14]. Childs, W. J., Goodman, L.S., 1966, Hyperfinestructure of Nine Levels in Two Configuration of ⁵¹V, I.Experimental, *Physical Review*, 156, 64-70.
- [15]. Childs, W. J., Poulsen, O., Goodman, L.S., Crosswhite, H., 1979, Laser-Rf Double-Resonance Studies of the Hyperfinestructure of ⁵¹V, *Physical Review*, A, Vol.19, 168-176.
- [16]. Gough, D.S., Hannaford, P., Lowe, R.M., Willis, A.P., 1985, Hyperfine Structure in ⁵¹V Using Laser Saturation Spectroscopy in a Hollow-Cathode Discharge, *Journal* of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 18, 3895-3900.
- [17]. Unkel, P., Buch, P., Dembczynski, J., Ertmer, W., Johann, U., 1989, Sternheimer Free Determination of the ⁵¹V Nuclear Quadrupole Moment from Hyperfine Structure Measurements, *Zeitschrift für Physik D.*, 11, 259-271.
- [18]. El-Kashef, H., Ludwig, N., 1992, High Precision Laser-RF Spectroscopic Measurements Hyperfine Structure of Vanadium-51, *Physica. Scripta B*, 179, 103.
- [19]. Palmeri, P., Biemont, B., Aboussaid, A., Godefroid, M., 1995, Hyperfine Structure of Infrared Vanadium Lines, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 28, 3741-3752
- [20]. Palmeri, P., Biemont, E., Quinet, P., Dembczynski, J., Szawiola,G., 1997, Term Analysis and Hyperfine Structure in Neutral Vanadium, *Physica. Scripta*, 55, 586-598.
- [21]. Lefebvre, P.H., Garnir, H. P., Biemont, E., 2002, Hyperfine Structure of Neutral Vanadium Lines and Levels, *Physica. Scripta*, Vol. 66, 363-366.
- [22]. Cochrane, A.C.E., Benton, D.M., Forest, D.H., Griffith, J.A.R., 1998, Hyperfine Structure and Isotope Shifts in Natural Vanadium, *Journal of Physics B: Atomic*, *Molecular and Optical Physics*, 31, 2203
- [23]. Rosen, A., 1973, Relativistic Effects in the Magnetic Hyperfine Structure of the $3d^{N}4s^{2}$ Atoms, *Physica. Scripta*, 8, 154.
- [24]. Rosen, A., 1973, On the Evaluation of Electric Quadrupole Moments from Experimental Hyperfine Interaction Constants, *Physica. Scripta*, 8, 159.
- [25]. Bauche-Amoult, C., 1971, Effects of Configuration Interaction on Atomic Hyperfine Structure, *Proceedings of the Royal Society A*, 322, 361.
- [26]. Bauche-Amoult, C., 1973, Effects of Configuration Interaction on Atomic Hyperfine Structure in IN I' Configurations, *Journal de Physique*, 34, 301.
- [27]. Ollsen, G., Rosen, A., 1982, Relativistic Self-Consistent-Field Calculations of the Hyperfine Structure in the 3d-Shell Atoms, *Physical Review A*, 25, 658.

- [28]. Thorne, A.P., Pickering, J.C., Semeniuk, J., 2011, The Spectrum and Term Analysis of VI Astrophysical Journal Supplement, 192, 11.
- [29]. Güzelçimen, F., Başar, G., Öztürk, İ.K., Kröger, S., 2011, Hyperfine Structure of the 3d³4s4p ⁶G Multiplet of Atomic Vanadium, *Journal of Physics B: Atomic*, *Molecular and Optical Physics*, 44, 215001.
- [30]. Demtröder, W., 2006, Atoms, Molecules and Photons, an Introduction to Atomic, Molecular and Quantum Physics, Springer, Verlag Berlin Heidelberg, 13 978-3-540-20631-6.
- [31]. Taylor, J. R., Zafaritos, C., 1996, *Fizik ve Mühendislikte Modern Fizik*, Güven Yayınları, İstanbul.
- [32]. Woodgate, G. K., 1970, *Elementary Atomic Structure*, Mcgraw-Hill Publishing Company Limited, England, 07-094137-8.
- [33]. Bransden, B. H., Joachain, C. J., 1999, Atom ve Molekül Fiziği, Bilim Yayınları, Ankara, 975-7636-03-7.
- [34]. Thorne, A., Litzen, U., Johansson, 1999, *Spectrophysics*, Springer, Verlag Berlin, 3-540-65117-9.
- [35]. Karaoglu, B., 1997, Kuantum Mekaniğine Giriş, Bilgitek Yayıncılık, İstanbul.
- [36]. Svanberg, S., 1991, *Atomic and Molecular Spectroscopy*, Basic Aspectsand Practical Applcations, Springer Verlag, Berlin, 0-387-52594-7.
- [37]. Kopfermann, H., Schneider, E.E., 1958, *Nuclear Moments*, Academic Press Inc, Catalog Number 56-6607.
- [38]. Demtröder, W., 1998, Laser Spectroscopy Basic Concepts and Instrumentation, Springer, Germany, 3-540-57171-X.
- [39]. Sefström, N. G. 1831, Ueber Das Vanadin, Ein Neues Metall, Gefunden Im Stangeneisen Von Eckersholm, Einer Eisenhütte, Die İhr Erz Von Taberg In Småland Bezieht, Annalen Der Physik Und Chemie 97: 43
- [40]. Georges, A.; Bersillon, O.; Blachot, J.; Wapstra, A.H. 2003, The Nubase Evaluation of Nuclear and Decay Properties, *Nuclear Physics A* (Atomic Mass Data Center)729: 3–128.
- [41]. Ptable : http://www.ptable.com/ [Ziyaret Tarihi : 05.Aralık.2014]
- [42]. Sciencenotes : http://sciencenotes.org/printable-periodic-table [Ziyaret Tarihi : 05.Aralık.2014]

- [43]. Pickering, J.C., & Semeniuk, J.I. 1995, New Atomic Data for the Thorium-Neodymium Stellar Chronometer, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 274, L37
- [44]. Allen D. M., Ryan S. G., Rossi, S., Beers, T.C., & Tsangarides, S. A. 2012, Elemental Abundances and Classification of Carbon-Enhanced Metal-Poor Stars Astronomy & Astrophysics, 548, A34
- [45]. Cohen, J.G., Christlieb, N., McWilliam, A., Et Al. 2008, New Extremely Metal-Poor Stars in the Galactic Halo, *The Astrophysical Journal*, 672, 320
- [46]. Klochkova, V.G., Zhao, G., Ermakov, S. V., & Panchuk, V. E. 2006, High Resolution Spectroscopy of Halo Stars in the Near UV and Blue Region I. Spectra in the Wavelength Region 3550–5000Å, *Chinese Journal of Astronomy and Astrophysics*, 6, 579
- [47]. Wallace, L., Hinkle, K. H., Livingston, W.C. & Davis, S. P. 2011, An Optical and Near-Infrared (2958–9250 Å) Solar Flux Atlas, *The Astrophysical Journal Supplement*, 195,6
- [48]. Siddiqui, I., 2010, *Hyperfine Structure Studies Of Praseodymium Atoms And I Ons*, Doktora Tezi, Avusturya Graz Teknik Üniversitesi Deneysel Fizik Enstitüsü.
- [49]. Windholz, L., Guthöhrlein, G.H., 2003, Classification of Spectral Lines by Means of their Hyperfine Structure. Application to Ta I and Ta II Levels, *Physica. Scripta T*, 105, 55.
- [50]. Nist Atomic Spectra Database : http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm [Ziyaret Tarihi : 24.Ekim.2014]
- [51]. Meggers, W. F., Corliss, C. H., &Scribner, B. F. 1975, *Tables of Spektral-Line Intensities, Part I –* Arranged By Elements (Natl. Bur. Stand. Monograph 145; Washington, Dc : Nat. Bur. Stand.)

EKLER

EK 1. Fourier transform spektroskopi yöntemi ile ölçülen her bir spektral geçişe ait en iyi fit sonuçlarını veren spektrumlar dalga sayısına göre sıralanarak gösterildi.



ŞekilEk.1.1 : $\lambda = 572.5639 \text{ nm } \sigma = 17 \ 460.457 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.2 : $\lambda = 566.8361 \text{ nm } \sigma = 17\ 636.890 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.3 : $\lambda = 565.7438 \text{ nm } \sigma = 17 670.941 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.4: λ =564.6105nm σ = 17 706.409 cm⁻¹



ŞekilEk.1.5 : $\lambda = 562.6016 \text{ nm } \sigma = 17 \ 769.633 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.6 : $\lambda = 562.4872 \text{ nm } \sigma = 17 \ 773.248 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.7 : $\lambda = 562.4604 \text{ nm } \sigma = 17 \ 774.6096 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.8 : $\lambda = 560.4933 \text{ nm } \sigma = 17 \ 836.473 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.9 : $\lambda = 551.1175 \text{ nm } \sigma = 18 \text{ } 139.913 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.10 : $\lambda = 548.7912 \text{ nm } \sigma = 18\ 216.805 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.11 : $\lambda = 543.7655 \text{ nm } \sigma = 18 \ 385.170 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.12 : $\lambda = 542.4059 \text{ nm } \sigma = 18 \text{ } 431.255 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.13 : $\lambda = 541.8087 \text{ nm } \sigma = 18 \ 451.574 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.14 : $\lambda = 541.5250 \text{ nm } \sigma = 18\ 461.237 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.15 : $\lambda = 540.1921 \text{ nm } \sigma = 18 506.787 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.16 : $\lambda = 535.3410 \text{ nm } \sigma = 18674.487 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.17 : $\lambda = 490.4434 \text{ nm } \sigma = 20 \ 384.022 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.18 : $\lambda = 490.0625 \text{ nm } \sigma = 20 \ 399.865 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.19 : $\lambda = 477.6511 \text{ nm } \sigma = 20\ 929.933 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.20 : $\lambda = 474.26194 \text{ nm } \sigma = 21 \text{ } 079.500 \text{ cm}^{-1}$



1.0 deneysel fit $\Delta F = 1$ $\Delta F = 0$ $\Delta F = -1$ 0.4 $\Delta F = -1$ $\Delta F =$

ŞekilEk.1.21 : $\lambda = 471.7687 \text{ nm } \sigma = 21 \ 190.901 \text{ cm}^{-1}$

1.0

0.8

Siddet (arb. units) 0.4 0.2



ŞekilEk.1.23 : $\lambda = 457.1784 \text{ nm } \sigma = 21 867.172 \text{ cm}^{-1}$

ŞekilEk.1.22 : $\lambda = 470.7438 \text{ nm } \sigma = 21\ 237.034 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.24 : $\lambda = 454.5391 \text{ nm } \sigma = 21 994.140 \text{ cm}^{-1}$



1.0 AF = 1 AF = 0 AF = -1AF = -

ŞekilEk.1.25 : $\lambda = 446.9702 \text{ nm } \sigma = 22 \ 366.578 \text{ cm}^{-1}$







ŞekilEk.1.28 : $\lambda = 429.8024 \text{ nm } \sigma = 23 \ 259.963 \text{ cm}^{-1}$

ŞekilEk.1.27 : $\lambda = 445.2004 \text{ nm } \sigma = 22 \ 455.490 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.29 : $\lambda = 429.7671 \text{ nm } \sigma = 23 \ 261.872 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.30: $\lambda = 429.6096 \text{ nm } \sigma = 23\ 270.399 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.31 : $\lambda = 429.1805$ nm $\sigma = 23293.665$ cm⁻¹

Dalgasayısı (cm⁻¹)



ŞekilEk.1.32 : $\lambda = 428.4043$ nm $\sigma = 23$ 335.871 cm⁻¹

deneysel

fit

1.0



ŞekilEk.1.33 : $\lambda = 427.6950 \text{ nm } \sigma = 23 \text{ } 374.569 \text{ cm}^{-1}$



1.0 deneysel fit * $\Delta F = \mathsf{1}$ 0.8 ۸ $\Delta F = 0$ 9.0 Siddet (arb. units) 7.0 Siddet (arb. units) $\Delta F = -1$



ŞekilEk.1.36 : $\lambda = 423.2945 \text{ nm } \sigma = 23.617.561 \text{ cm}^{-1}$



0.0 -Diff.x0.5 23419.8 23420.0 23420.2 23420.4 Dalgasayısı (cm⁻¹)

ŞekilEk.1.35 : λ = 426.8637 nm σ = 23 420.091 cm⁻¹



ŞekilEk.1.37 : λ = 426.2456 nm σ = 23 620.294 cm⁻¹



ŞekilEk.1.38 : λ = 417.4006 nm σ = 23 951.046 cm⁻¹



Şiddet (arb. units) 0.4 0.2 0.0 Diff 24194.2 24194.4 24194.6 24194.8 Dalgasayısı (cm⁻¹)

deneysel

 $\Delta F = 1$

 $\Delta F = 0$

 $\Delta F = -1$

fit

*

1.0

0.8

ŞekilEk.1.39 : $\lambda = 413.4483 \text{ nm } \sigma = 24 \ 180.000 \text{ cm}^{-1}$

ŞekilEk.1.40 : $\lambda = 413.1990 \text{ nm } \sigma = 24.194.587 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.41 : $\lambda = 412.8064 \text{ nm } \sigma = 24.217.601 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.42 : $\lambda = 412.3498 \text{ nm } \sigma = 24.244.415 \text{ cm}^{-1}$



1.0



ŞekilEk.1.43 : $\lambda = 411.6547$ nm $\sigma = 24$ 285.353 cm⁻¹



ŞekilEk.1.44 : $\lambda = 411.6471 \text{ nm } \sigma = 24.285.798 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.45 : $\lambda = 411.5176 \text{ nm } \sigma = 24.293.440 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.46 : $\lambda = 411.1776 \text{ nm } \sigma = 24 \text{ } 313.528 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.47 : $\lambda = 410.5157 \text{ nm } \sigma = 24 \ 352.733 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.48 : $\lambda = 409.9783 \text{ nm } \sigma = 24 \ 384.652 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.49 : $\lambda = 409.2683 \text{ nm } \sigma = 24 \ 426.956 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.50 : $\lambda = 405.1345 \text{ nm } \sigma = 24.676.188 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.51 : $\lambda = 405.0953 \text{ nm } \sigma = 24 \text{ } 678.577 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.53 : λ = 399.2794 nm σ = 25 038.037 cm⁻¹



ŞekilEk.1.52 : $\lambda = 399.8723$ nm $\sigma = 25\ 000.916$ cm⁻¹



ŞekilEk.1.54 : $\lambda = 393.0018 \text{ nm } \sigma = 25 \ 437.972 \text{ cm}^{-1}$



ŞekilEk.1.55 : λ = 385.5839 nm σ = 25 927.337 cm⁻¹



ŞekilEk.1.56 : $\lambda = 368.6557 \text{ nm } \sigma = 27 \ 120.067 \text{ cm}^{-1}$

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı	Gözde DEMİR
Uyruğu	T.C.
Doğum Yılı, Yeri	1985, İstanbul
Telefon	0546 949 28 59
E – Mail	gozde_dmr21@hotmail.com

Eğitim

Derece	Kurum / Anabilim Dalı / Programı	
Lisans	Fizik Bölümü	2008
Lise	Dede Korkut Anadolu Lisesi	2003

Makaleler / Bildiriler

- Güzelçimen F., Yapıcı B., Demir G., Er A., Kanat Öztürk İ., Başar G., Kröger S., Tamanis M., Ferber R., Docenko D., Başar G., "Hyperfine Structure Constants Of Energetically High-Lying Levels Of Odd Parity Of Atomic Vanadium", ASTROPHYSICAL JOURNAL SUPPLEMENT SERIES, vol.214, pp.0-0, 2014
- Güzelçimen F., Demir G., Başar G., Öztürk İ., Kröger S., Ferber R., Jarmola A., Tamanis M., Başar G., "Evaluation Of Magnetic Dipole Hyperfine Structure Interaction Constants For ⁵¹V Energy Levels", Türk Fizik Derneği 29. Uluslararası Fizik Kongresi, TÜRKİYE, 05-08 Eylül 2012