



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



YÜKSEK LİSANS TEZİ

**NÖTRAL NİYOBYUM ATOMUNUN ÇİFT VE TEK
KONFIGÜRASYONLARININ İNCE YAPISININ
HESAPLANMASI**

Taha Yusuf KEBAPCI

**Fizik Anabilim Dalı
Atom ve Molekül Fiziği Programı**

Danışman

Danışman: Doç. Dr. İpek KANAT ÖZTÜRK

Haziran, 2014

İSTANBUL

Bu çalışma 11/06/2014 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı Atom ve Molekül Fiziği programında Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi:



İmza

Doç. Dr. İpek KANAT ÖZTÜRK (Danışman)
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi



İmza

Prof. Dr. Gönül BAŞAR
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi



İmza

Prof. Dr. Aysen E. ÖZEL
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi



İmza

Prof. Dr. Elif AKALIN
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi



İmza

Doç. Dr. Gülay ACAR
İstanbul Teknik Üniversitesi
Fen-Edebiyat Fakültesi

Bu alıřma İstanbul Üniwerstesini Bilimsel Arařtırma Projeleri Yürütücü Sekreterliđinin 38722 numaralı projesi ile desteklenmiřtir.

ÖNSÖZ

Bu çalışmada, nötral niyobyum (Nb I) elementinin ince yapısının teorik olarak incelenmesi amaçlandı.

Yüksek lisans tezimde yardımlarını gördüğüm tez danışmanım İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde öğretim üyesi olan Doç. Dr. İpek KANAT ÖZTÜRK'eve Çanakkale Onsekizmart Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü'nde öğretim üyesi olan Arş. Gör. Dr. Betül ATALAY'a çok teşekkür ederim.

Haziran, 2014

Taha Yusuf Kebapcı

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

ÖNSÖZ	i
İÇİNDEKİLER	ii
ŞEKİL LİSTESİ	iii
TABLO LİSTESİ	iv
SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ	v
1. GİRİŞ	1
2. GENEL KISIMLAR	3
3. MALZEME VE YÖNTEM	6
3.1. ATOMLARIN GENEL ÖZELLİKLERİ	6
3.2. MANYETİK MOMENTLER.....	7
3.3. PARİTE	8
3.4. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLER.....	10
3.4.1. Hartree Teorisi	10
3.4.2. Hartree-Fock Yöntemi	11
3.5. İNCE YAPI (FINE STRUCTURE (FS)).....	13
3.5.1. İnce Yapı ve Spin-Yörünge Çiftlenimi	13
3.5.2. İnce Yapı Yarılımları.....	15
3.5.3. İnce Yapı Parametreleri	17
3.5.4. İnce Yapı Programı	20
3.6. EINSTEIN GEÇİŞ OLASILIKLARI	23
4. BULGULAR	25
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	75
KAYNAKLAR	78
ÖZGEÇMİŞ	81

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa No
Şekil 3.1: Hartree-Fock yönteminin şematik olarak gösterimi.....	13
Şekil 3.2: Spin-Yörünge çiftleniminin şematik gösterimi.....	14
Şekil 3.3: İnce yapı hesaplarında kullanılan programların çalışma sırasının şematik gösterimi	21

TABLO LİSTESİ

	Sayfa No
Tablo 4.1: Niobyum (^{93}Nb) elementinin temen kimyasal özellikleri	25
Tablo 4.2: Nb I elementine ait incelenen konfigürasyonlar, pariteleri ve bu konfigürasyonların yer aldığı enerji aralıkları [NIST].....	26
Tablo 4.3: Ab initio değerleri ile birlikte çift pariteli $4d^4 5s$, $4d^3 5s^2$ ve $4d^5$ konfigürasyonlarının ince yapı parametreleri.....	32
Tablo 4.4: Nb I elementinin çift pariteli $4d^4 5s$, $4d^3 5s^2$ ve $4d^5$ konfigürasyonlarına ait Nist atomik spektra veri tablosuna göre deneysel E_{deney} ve g_{deney} değerleri ile hesaplanan E_{teorik} ve g_{teorik} değerleri, özvektör bileşenleri	33
Tablo 4.5: Ab initio değerleri ile birlikte çift pariteli $4d^4 6s$ ve $4d^3 5s6s$ konfigürasyonlarının ince yapı parametreleri.....	41
Tablo 4.6: Nb I elementinin çift pariteli $4d^4 6s$ ve $4d^3 5s6s$ konfigürasyonlarına ait Nist atomik spektra veri tablosuna göre deneysel E_{deney} ve g_{deney} değerleri ile hesaplanan E_{teorik} ve g_{teorik} değerleri, özvektör bileşenleri	42
Tablo 4.7: Ab initio değerleri ile birlikte tek pariteli $4d^3 5s5p$, $4d^4 5p$, $4d^2 5s^2 5p$ ve $4d^3 5s6p$ konfigürasyonlarının ince yapı parametreleri.....	44
Tablo 4.8: Nb I elementinin tek pariteli $4d^3 5s5p$, $4d^4 5p$, $4d^2 5s^2 5p$ ve $4d^3 5s6p$ konfigürasyonlarına ait Nist atomik spektra veri tablosuna göre deneysel E_{deney} ve g_{deney} değerleri ile hesaplanan E_{teorik} ve g_{teorik} değerleri, özvektör bileşenleri ..	46
Tablo 4.9: Nötral Nb I elementine ait Elektrik Dipol Geçiş Olasılıkları ($10^8/\text{sec}$)...	72

SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ

Simgeler	Açıklama
n	Baş kuantum sayısı
l	Yörünge açısal momentum kuantum sayısı
m_l	Yörünge manyetik kuantum sayısı
s	Spin açısal momentum kuantum sayısı
m_s	Spin manyetik kuantum sayısı
\vec{L}	Yörünge açısal momentum vektörü
L	Yörünge açısal momentum vektörü sayısı
\vec{S}	Spin açısal momentum vektörü
S	Spin açısal momentum vektörü sayısı
\vec{J}	Toplam açısal momentum vektörü
J	Toplam açısal momentum vektörü sayısı
h	Planck sabiti
\hbar	İndirgenmiş Planck sabiti
e	Elementer yük
m_e	Elektronun kütlesi
μ_B	Bohr manyetonu
g_j	Elektronun toplam Landé çarpanı
μ_L	Yörünge manyetik momenti
μ_S	Spin manyetik momenti
μ_j	Toplam manyetik moment (Toplam dipol moment)
H	Hamiltonyen operatörü
h_i	i. terimin Hamiltonyen operatörü
∇	Del operatörü
∇^2	Laplace operatörü
\square	Atom numarası
ϵ_0	Havanın elektriksel geçirgenliği
B	Manyetik alan
E_{av}	Konfigürasyon ortalama enerjisi
G^k	Radyal indirekt Coulomb etkileşme parametresi
F^k	Radyal direkt Coulomb etkileşme parametresi
ξ	Spin-yörünge etkileşme parametresi
α	Efektif Coulomb etkileşme parametresi
R^k	Konfigürasyonlar arası etkileşme parametresi

ÖZET**YÜKSEK LİSANS TEZİ****NÖTRAL NİYOPYUM ATOMUNUN ÇİFT VE TEK
KONFIGÜRASYONLARININ İNCE YAPISININ HESAPLANMASI****Taha Yusuf KEBAPCI****İstanbul Üniversitesi****Fen Bilimleri Enstitüsü****Fizik Anabilim Dalı****Danışman: Doç. Dr. İpek KANAT ÖZTÜRK**

Bu çalışmada, nötral niyobyum (Nb I) elementinin ince yapısının teorik olarak incelenmesi amaçlandı.

Nb I elementinin çift pariteye sahip $4d^45s$, $4d^35s^2$, $4d^5$, $4d^46s$ ve $4d^35s6s$ konfigürasyonları ile tek pariteye sahip $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^35s6p$, $4d^25s^25p$ konfigürasyonlarının ince yapı hesapları çok-konfigürasyonlu fit metodu ile yapıldı.

İnce yapı parametrik analizi sonucunda deneysel ve teorik enerji değerleri ve Landé g değerleri uyum içinde bulundu. Deneysel ve teorik olarak daha önce belirlenmemiş 278 seviye için teorik Landé g değeri ilk defa bu çalışmada verildi.

Elde edilen ince yapı parametre değerleri ile 3069 ile 5706 Å dalga boyu aralığında geçiş olasılıkları teorik olarak bulundu. Mevcut çalışmalarla elde edilen sonuçların uyum içinde olduğu görüldü. İncelenen aralıkta 8 geçiş olasılığı ilk defa bu çalışmada verildi.

Haziran 2014, 81 Sayfa.

Anahtar kelimeler: İnce yapı, Niyobyum, Geçiş olasılığı

SUMMARY

M.Sc. THESIS

**CALCULATION OF FINE STRUCTURE OF EVEN AND ODD
CONFIGURATIONS OF NEUTRAL NIOBIUM ATOM**

Taha Yusuf KEBAPCI

İstanbul University

Institute of Sciences

Physics Division

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. İpek KANAT ÖZTÜRK

In this study theoretical investigation of the finestructure of neutral niobium (Nb I) element was aimed.

Fine structure calculations of Nb I element with even parity $4d^45s$, $4d^35s^2$, $4d^5$, $4d^46s$ and $4d^35s6s$ configurations and with odd parity $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^35s6p$, $4d^25s^25p$ configurations have been done by using multi-configurations fit method.

As a result of the parametric analysis of the fine structure, experimental and theoretical energy levels and Landé g values are found to be coherent. The theoretical Landé g values for 278 levels which has not been determined experimentally or theoretically is given in this study for the first time.

The transition probabilities in the wavelength interval of 3069 and 5706Å are found theoretically by using the obtained fine structure parameter values. The results are in good agreement with the current studies. The 8 transition probabilities are given in this study in the examined wavelength interval for the first time.

June 2014, 81pages

Anahtar kelimeler: Finestructure, Niobium, Transitionprobability

1. GİRİŞ

Nötral niyobyum (Nb I) elementinin ince yapı hesapları tek ve çift konfigürasyonlar için ayrı ayrı çok konfigürasyonlu fit metodu ile yapıldı. Elde edilen ince yapı parametreleri kullanılarak daha önceden belirlenmemiş geçiş olasılıkları teorik olarak belirlendi. Bulunan değerler derlenerek atomik ve moleküler veri tabanlarına temel oluşturması hedeflendi. Bu veri tabanları atom fiziğinde olduğu kadar astrofizik alanında da çok önemli ve kullanışlıdır. Ayrıca elde edilen geçiş olasılıkları literatür taramasında bulunan çalışmalarla karşılaştırıldı ve sonuçların uyum içinde olduğu görüldü. Diğer yandan, ince yapının parametrik analizi ile teorik olarak elde edilen enerji seviyeleri, yapılacak deneysel çalışmaların yönünü tayin etme açısından çok önemlidir.

Atomların yapısı spektroskopik yöntemlerle anlaşılabilir. Absorpsiyon ve emisyon spektrumları incelenerek spektral çizgilerin şiddetinden farklı seviyeler arasındaki geçiş olasılıkları belirlenir. Geçiş olasılıkları ile enerji seviyelerinin dalga fonksiyonları ve sistemin enerjisi hakkında bilgi edinilir [1]. Bu çalışmada dalga fonksiyonları Hartree-Fock yaklaşıklik metodu kullanılarak hesaplandı. Hesaplarda kullanılan yaklaşıklik metodu Bölüm 3.4.2. de anlatıldı.

Nb I elementinin çift pariteye sahip konfigürasyonları kendi içerisinde enerji seviyeleri arasındaki büyük fark dikkate alınarak iki bölüme ayrılarak incelendi. Birinci bölümde yer alan Nb I elementinin çift pariteye sahip konfigürasyonları $4d^45s$, $4d^35s^2$, $4d^5$ olup ikinci bölümdeki çift pariteye sahip konfigürasyonlar ise $4d^46s$ ve $4d^35s6s$ 'dir .

Çalışmanın üçüncü bölümünde Nb I elementinin tek parametreye sahip $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^35s6p$, $4d^25s^25p$ konfigürasyonları birlikte ele alındı. Nb I atomuna ait çift ve tek pariteli konfigürasyonların tamamı dikkate alınarak çok-konfigürasyon yöntemi ile ince yapının parametrik analizi ilk kez bu çalışmada gerçekleştirilmiştir. İnce yapı Bölüm 3.5 te ve ince yapı parametreleri ise Bölüm 3.5.3 te anlatılmıştır.

İnce yapı ve bu hesaba bağılı olarak gerekleřtirilen geiř olasılıđı hesapları Fortran 77 dilinde yazılmıř Cowan yazılımı [2] ile yapıldı. Dalga fonksiyonu radyal ve aısal kısım olmak üzere ikiye ayrılarak enerji seviyeleri yarı deneysel parametrik yntemle hesaplandı. Enerji seviyelerinin hesaplanmasında, ince yapı parametreleri kullanıldı. Belirlenen ince yapı parametre deđerleri ile deneysel ve teorik enerji deđerlerinin fit iřlemi yapıldı. Bylece deneysel olarak henüz bulunmamıř enerji ve Landé g deđerleri teorik olarak tahmin edildi. Parametrik ince yapı analizi sonucunda elde edilen deđerler kullanılarak geiř olasılıkları hesaplandı. Cowan programı ve programın iřleyiři hakkında geniř bilgi Blm 3.5.4 te verildi. alıřmadan elde edilen sonular ile referanslardan alınan deđerler birlikte derlenerek Bulgular kısmında verildi.

2. GENEL KISIMLAR

Son yıllarda Niyobyum (Nb) atomu ile ilgili çok sayıda çalışmanın yapıldığı literatür taramasında görüldü. Bu çalışmaların daha çok deneysel alanda, aşırı ince yapı incelemelerini içerdiği belirlendi. Niyobyum elementine ait tek ve çift pariteli belirlenen tüm konfigürasyonlara ait ince yapı hesapları ve geçiş olasılıkları için yeterli çalışma olmadığı tespit edildi.

Niyobyum elementinin adı 1950'li yıllara kadar Kolumbiyum (Cb) idi. Nb 1934 yılında ilk kez Ballard S. S. [3], tarafından incelenmiştir. Bu çalışmayı 1947 yılında Meeks ve Fisher [4], tarafından gerçekleştirilen Kolumbiyumun aşırı ince yapı ve çekirdek momentleri izlemiştir. Sırası ile 1955 ve 1958 yıllarında Murakawa K. [5], yaptığı çalışmada elektrik kuadropol momentini bulmuştur. 1971 yılında Moore Ch. E. [6], 0.00 cm^{-1} ile 51788.30 cm^{-1} aralığındaki deneysel enerji seviyelerini hala günümüzde sıklıkla başvuru tablo halinde vermiştir. Bu çalışma sonucu belirlediği enerji seviyelerinin 62'si çift pariteli 302'si tek paritelidir.

Humphreys ve Meggers [7] 1945 yılında Nb I elementine ait 4708 \AA ve 9241 \AA aralığında bulunan 114 tane spektral geçiş incelemiştir. Bu çalışmaya rağmen A ve B aşırı ince yapı sabitleri bilinmeyen birçok spektral geçiş ve aşırı ince yapı seviyesi incelenmemiştir. Humphreys ve Meggers W. [7] tarafından niobyum (Nb I) elementinin 2160 \AA ve 10920 \AA aralığındaki spektrumunda 3313 adet spektral çizgi gözlenmiştir. Bu spektral çizgilerden 2836 tanesi sınıflandırılmıştır.

1975 yılında Büttgenbach S. ve diğerleri [8], Atomik Işın Manyetik Rezonansı (ABMR) yöntemini kullanarak Niyobyum elementinin çift pariteli konfigürasyonlarını incelemiştir. Bu çalışma ile 9 enerji seviyesinin A ve B aşırı ince yapı sabitleri deneysel olarak belirlemiş ve bu seviyelerin teorik olarak incelenmesi ile aynı yıllı ikinci bir makalesinde Dicke ile birlikte Niyobyum elementinin çekirdek elektrik kuadropol momentini üzerine teorik bir çalışma yapmıştır [9]. 1988 yılında Fraenkel L. ve diğerleri

[10], Laser ve Radyo Frekans Spektroskopisi (LRFS) yöntemini kullanarak çift pariteli 17, tek pariteli 14 enerji seviyesinin A ve B aşırı ince yapı sabitlerini tespit etmiştir.

Niyobyum elementinin deneysel olarak incelenmesinde kullanılan en önemli spektral yöntemler Atomik Işın Manyetik Rezonansı (ABMR), Laser ve Radyo Frekans Spektroskopisi (LRFS), Optogalvanik Spektroskopi (OGS), LaserInducedFloresans Spektroskopi (LIFS) ve Doymuş Soğurma Spektroskopisidir (SAS).

1989 yılında Singh R. &Rao G.N.[11], Optogalvanik Spektroskopi (OGS) yöntemini kullanarak Niyobyum elementine ait 6 aşırı ince yapı enerji geçişini incelemiştir. Bu çalışmanın sonunda 6 tek ve 6 çift pariteli enerji seviyesinin A ve B aşırı ince yapı sabitleri belirlenmiştir. 1992 yılında yine Singh R. ve diğerleri [12] OGS yöntemini kullanarak 22 spektral geçişi incelemiştir. Bu çalışmanın sonunda çift pariteli 10, tek pariteli 12 enerji seviyesine ait A ve B aşırı ince yapı sabitleri elde edilmiştir. 2003 yılında Bouzed A. ve diğerleri [13], OGS ve LIFS metodlarını kullanarak 21 spektral geçişi ve bu geçişlerin 13 tek ve 11 çift pariteli enerji seviyelerinin A ve B aşırı ince yapı sabitlerini belirlemiştir.

2004 yılında Kröger S. ve diğerleri [14] LIFS metodunu kullanarak Nb elementinin Moore tablolarında tanımlanan enerji seviyelerini incelemiştir. İncelenen bu seviyelerden 11 tanesi yeniden sınıflandırılmıştır ve Moore tablolarında yer almayan iki enerji seviyesi belirlenmiştir. 2007 yılında Kröger S. [15] OGS yöntemini kullanarak Nb I elementine ait 25 spektral geçişi incelemiştir. Bu çalışmanın sonucunda , 22 çift ve 21 tek pariteli enerji seviyesinin A ve B aşırı ince yapı sabitleri tespit edilmiştir. 2008 yılında Başar G. ve diğerleri [16] SAS yöntemini kullanarak 42 enerji seviyenin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitini ve 15 seviyenin B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitini belirlemiştir. 2013 yılında Başar G. ve diğerleri [17] tarafından 750 nm 865 nm aralığındaki bölgede A ve B aşırı ince yapı sabitleri OGS ve LIF yöntemi kullanılarak incelenmiştir.

Teorik çalışmalar çok sınırlı olup, 2003 yılında Kröger S. &Bouzed A.[18], Nb I elementinin çift pariteli 3 konfigürasyonuna ait tek elektron parametrelerini belirleyerek ince ve aşırı ince yapısını incelemiş, A ve B aşırı ince yapı sabitlerini teorik olarak

hesaplamıştır. 2006 yılında Kröger S. ve diğerleri [19] Nb I elementinin tek pariteli 3 konfigürasyonuna ait tek elektron parametrelerini belirleyerek ince ve aşırı ince yapısını incelemiş, A ve B aşırı ince yapı sabitlerini teorik olarak hesaplamıştır.

2005 yılında J. E. Sansonetti and W. C. Martin [20], Handbook of Basic Atomic Spectroscopic Data içerisinde Nb I elementine ait geçiş olasılıklarına değinmiştir. Bunu takiben Malcheva ve arkadaşları [21], 2011 yılında Nb I elementine ait geçiş olasılıklarını da içeren bir çalışma yapmıştır. Nb I elementine ait geçiş olasılığı ile ilgili çalışmalar oldukça sınırlıdır.

3. MALZEME VE YÖNTEM

3.1. ATOMLARIN GENEL ÖZELLİKLERİ

1913 yılında Bohr, hidrojen atomu ve diğer tek elektronlu iyon durumundaki atomlar için bir postüla geliştirdi. Bu postülaya göre tek elektronlu bir atomdaki elektron klasik mekanik kanunlarına uygun olarak çekirdek etrafında Coulomb çekme kuvveti etkisinde dairesel bir yörünge hareket etmektedir. [22]

Çok elektronlu atomların spektrumu özdeş parçacıklar olan elektronların sıralanış kuralları dikkate alınarak incelenmelidir. Çok elektronlu bir atomda $\psi_{n,l,m}$ dalga fonksiyonu elektronun uzaysal konumunu göstermektedir. Dalga fonksiyonu ψ 'nin alt indisleri n , l ve m_l sayıları kuantum sayıları olarak adlandırılır ve özdeş parçacıklar olan elektronların uzaysal konum itibariyle birbirlerinden ayrılmasını sağlar. n ile gösterilen baş kuantum sayısı, yörünge numarasının değerini belirler ve 1, 2, 3, 4, ... gibi sayı değerlerini alabilir. Yörünge numarası ile yörünge çekirdeğe uzaklığı doğru orantılıdır. Yörünge açısal momentum kuantum sayısı l , verilen baş kuantum sayısı n değerine göre, 0 ile $n-1$ arasında bir değer alabilir. Yörünge manyetik kuantum sayısı, m_l değerleri l kuantum sayısına bağlıdır ve kaç değer alacağı $(2l + 1)$ formülü ile hesaplanabilir. $-\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$ arası değerleri alabilir ve orbitalin yönünü belirler. Spin manyetik kuantum sayısı, elektronların çekirdek etrafında dönmesi yanı sıra kendi etrafında dönmesine göre belirlenen kuantum sayısıdır. Elektron kendi etrafında iki farklı şekilde dönme gerçekleştirebilir. Buna göre spin kuantum sayısı $+1/2$ ve $-1/2$ olmak üzere 2 farklı değer alır.

Atomlar için tasarlanan kabuk modeline göre n , l ve m_l kuantum sayıları kullanılarak kabuk ve alt kabuk terimleri tanımlanır. Baş kuantum sayısı aynı olan elektronlar bir kabuk meydana getirirler. Herhangi bir kabuk içerisinde yörünge açısal momentum kuantum sayısı aynı olan elektronlar bu kabuk içerisinde bir alt kabuk meydana getirmektedirler.

Bir alt kabuk içerisinde kaç adet elektronun yerleşebileceğini m_l yörünge manyetik kuantum sayısı, yerleşen herhangi bir elektronun spin durumunu m_s spin manyetik kuantum sayısı belirlemektedir [1].

3.2 MANYETİK MOMENTLER

Atomlarda yörünge dipol moment, spin dipol moment, çekirdek dipol moment ve toplam dipol momentinden söz etmek mümkündür. Her açısal momentuma bir dipol moment eşlik eder ve her açısal momentumun bir kuantum sayısı olur.

Yarıklasik bir modelde, dış bir manyetik alana konulan bir elektronun hareketi, açısal momentumun vektörü aşağıda verilen kuantum mekaniksel ifade kullanılarak, klasik bir dairesel yörünge ile tanımlanır.

$$|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar \quad (3.1)$$

Dairesel hareket yapan elektronun açısal momentumu aynı zamanda aşağıdaki ifade ile verilir.

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e \vec{r} \times \vec{v} \quad (3.2)$$

Elektronun r yarıçaplı bir daire üzerinde v hızı ile hareket etmesi sonucu oluşan yörünge manyetik moment yörünge açısal momentum cinsinden aşağıdaki ifade ile verilir.

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (3.3)$$

Bir sabit olan Bohr manyetonu aşağıdaki ifade ile verilir.

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (3.4)$$

Bohr manyetonunu kullanarak elektronun yörünge manyetik momentini aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\vec{\mu}_L = -\left(\frac{\mu_B}{\hbar}\right) \vec{L} \quad (3.5)$$

Elektronun spin dipol momenti Spinaçısal momentum vektörü cinsinden aşağıdaki ifade ile verilir [23].

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{S} = -\frac{2 \mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad (3.6)$$

Elektronun toplam dipol momenti μ_J , aşağıdaki şekilde gösterilir.

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = \frac{g_J \mu_B}{\hbar} \vec{J} \quad (3.7)$$

\vec{J} : Elektronun toplam açısal momentum vektörü

g_J : Elektronun Toplam Landé Çarpanının tanımı aşağıdaki şekilde verilir.

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (3.8)$$

Dış bir manyetik alanın yokluğunda elektronun yörünge hareketinden kaynaklanan bir iç manyetik alan etkisi ile atomların enerji düzeylerinde ve spektrumlarında meydana gelen küçük yarılmalara ince yapı yarılmaları denilir. Bu yarılmalar yörünge manyetik momenti ile spin manyetik momenti ya da toplam manyetik momentler arasındaki etkileşimden kaynaklanabilir.

3.3 PARİTE

Bir fonksiyonun paritesi onun tek fonksiyon mu, çift fonksiyon mu olduğunu belirler. Çift pariteli (simetrik), tek pariteli (antisimetrik) olmak üzere kesin pariteli fonksiyonlardır. Simetrik bir dalga fonksiyonu her bir x , $-x$ ile yer değiştirildiğinde kendisine dönüşür. Antisimetrik bir dalga fonksiyonunda bu işlem fonksiyonun işaretini tersine çevirir. [22]. Bir fonksiyonun tek pariteli mi yoksa çift pariteli mi olduğu parite işlemi ile belirlenir. Üç boyutlu uzayda parite işlemi (r, θ, φ) noktasının orijine göre simetriği olan $(r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \pi + \varphi)$ noktasını bulmak demektir. Dalga fonksiyonunun yarıçapa bağlı olmayan kısmını, yani sadece θ ve φ açılara bağlılığı temsil eden küresel harmonikler $\Phi_m(\varphi)$ ve $\Theta_{lm}(\theta)$ fonksiyonlarının çarpımıdır. Bu fonksiyonlara yansıtma işlemi uygulayarak parite operatörü belirlenebilir.

$$\Phi_m(\pi + \varphi) = (-1)^{|m|} \Phi_m(\varphi) \quad (3.9)$$

$$\Theta_{lm}(\pi - \theta) = (-1)^{l+|m|} \Theta_{lm}(\theta) \quad (3.10)$$

$$R_{nl}(r) = R_{nl}(r) \quad (3.11)$$

Bu ifadeler taraf tarafa birbiri ile çarpılırsa, $(-1)^{2|m|}$ her zaman çift olacağından;

$$\Psi(r, \pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.12)$$

elde edilir. Parite operatörünü genelde P ile ifade edilir.

$$P \Psi(r, \theta, \varphi) = (-1)^l \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.13)$$

Verilen son eşitlik parite operatörünün özdeğer denklemidir. Buradaki $P = (-1)^l$ ifadesi parite operatörünün özdeğeridir. Dalga fonksiyonunda (Ψ_{nlm}) l değeri çift olanlar çift pariteli yani simetrik, tek olanlar ise tek pariteli yani antisimetriktir. Merkezci alan problemi çözümünde elde edilen dalga fonksiyonları kesin pariteli fonksiyonlardır. Atom kararlı halde değil de seviyeler arasında geçiş yapma durumunda ise, ki bu ancak değişik pariteler söz konusu olduğunda geçerlidir, sistemin o andaki dalga fonksiyonu karma paritelidir [24].

Çalışmada ele alınan ^{93}Nb atomuna ait $4d^45s$ konfigürasyonunun paritesi incelenirse öncelikle toplam l değerini elde etmeliyiz. Bilindiği gibi d elektronları için $l = 2$, s elektronları içinse $l = 0$ değerini alır. Sonuçta elde edilen toplam l değeri çift olduğu görülür ve bu konfigürasyonun çift pariteli olduğu söylenir. Benzer şekilde $4d^35s^2$, $4d^5$, $4d^46s$ $4d^35s6s$ konfigürasyonları çift paritelidir ve $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^35s6p$, $4d^25s^25p$ konfigürasyonları isetek pariteye sahiptir.

3.4. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLER

3.4.1. Hartree Teorisi

Çok elektronlu bir sistemde çekirdeğin etrafında dönen bir elektron için Schrödinger denkleminin tam olarak çözümü mümkün değildir. Çok elektronlu bir sistemi ancak uygun yaklaşımlar kullanmak suretiyle incelemek ve Schrödinger denkleminin yaklaşık bir çözümünü bulmak mümkündür [22].

1928 yılında ileri sürülen Hartree teorisinde çok elektronlu bir sistem için her bir elektronun küresel simetrik net bir potansiyel içerisinde diğer elektronlardan bağımsız olarak hareket ettiği kabul edilir. Zamandan bağımsız parçacık modelini esas alan bu teoride her bir elektron kendi dalga fonksiyonu ile tanımlanır. Hartree teorisinin en belirgin dezavantajı Pauli dışarlama ilkesine uymayan deneme dalga fonksiyonları kullanılmasıdır.

Birinci yaklaşımda Z atom numarasına sahip bir sistemde Z tane $-e$ yüklü her bir elektron ile $+Ze$ yüklü çekirdek arasında meydana gelen Colomb etkileşmesi ele alınır. Tipik çok elektronlu bir atomda yer alan bütün elektronlar arasındaki Colomb etkileşimi eğer elektron çekirdeğe çok yakın değilse ihmal edilemeyecek kadar güçlüdür.

Diğer taraftan, birinci yaklaşımın Schrödinger denkleminin çözümüne imkan verecek ölçüde basit ve sade olması gerekir. Bu nedenle ikinci yaklaşımda her bir elektronun küresel simetrik net bir potansiyel $V(r)$ içerisinde diğer elektronlardan bağımsız olarak hareket ettiği kabul edilir. Küresel simetrik potansiyel $V(r)$, elektronun çekirdeğe göre hesaplanan r radyal koordinatlarına bağlıdır. Net potansiyel çekirdek nedeniyle meydana gelen Coulomb çekici potansiyel ile ele alınan elektron ile diğer $Z-1$ elektron arasındaki küresel simetrik itici potansiyeldir [25].

Net potansiyeli tespit etmek için önce doğru sayılabilen bir net potansiyel tahmini alınır ve Schrödinger denkleminde bu durum için dalga fonksiyonu bulunur. Bu dalga fonksiyonu kullanılarak elektron yük dağılımı hesaplanır. Sonra net potansiyel bu yük dağılımından bulunur. Bu işleme başlanan ve elde edilen net potansiyeller arasında fark kalmayınca kadar devam edilir. Son işlemlerde şayet doğru net potansiyeller ile

başlanmış ise sonuçta aynı net potansiyele ulaşılır. Bu şekilde bulunan net potansiyele öz-uyumlu potansiyel adı verilir [22].

3.4.2. Hartree-Fock Yöntemi

1930 yılında Fock ve Slater Pauli dışarlama ilkesinin öngördüğü toplam dalga fonksiyonun antisimetrik olması gerekliliğini dikkate alarak bir yöntem geliştirdiler. Bu yöntemde Schrödinger denkleminde Pauli'nin dışarlama ilkesine uyan determinant deneme dalga fonksiyonları kullandılar. Bağımsız parçacık yaklaşıklığı ve Pauli dışarlama ilkesine dayanan Hartree-Fock yöntemi atomlara ait dalga fonksiyonları ve enerjilerinin bulunmasında ilk yöntemdir.

Eğer elektronlar arası etkileşim olmadığı kabul edilirse çok elektronlu sistemlerde pertürbasyon teorisinin uygulanmasında kullanılan sıfıncı dereceden yaklaşım esas alınmış olur. Bu yaklaşıma göre N tane elektrona sahip bir sistem için yazılacak Hamiltonyen her bir elektron için yazılacak N adet tek elektron hamiltonyenlerinin toplamı olarak verilir.

$$H = \sum_i^N H_i = \sum_i^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) \quad (3.14)$$

Sıfıncı dereceden merkezi alan yaklaşımı dikkate alınarak yazılan bu Hamiltonyen içerisinde elektronlar arasındaki karşılıklı itmeleri bulunmamaktadır. Elektronlar arası karşılıklı itme aslında büyük bir pertürbasyon olduğu için bu ihmal gerçekçi değildir. Birinci dereceden yaklaşım kullanılarak elektronlar arasındaki Coulomb etkileşimi dikkate alındığı durum için, i ve k elektron çifti arasındaki Colomb etkileşme enerjisi

$e^2/4\pi\epsilon_0 r_{ik}$ ile verildiğinde Hamiltonyen,

$$H = \sum_i^N H_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}} \quad (3.15)$$

Formülde $\sum_i^N H_i$ terimi N adet tek elektron hamiltonyenlerinin toplamıdır.

Schrödinger denkleminde çok elektronlu bir sistemin dalga fonksiyonunu temsil eden ψ , tek-elektron fonksiyonlarının çarpımına ayrılabilir veya Slater determinanı ile yazılabilir.

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} |\phi_j(\alpha_i)| \quad (3.16)$$

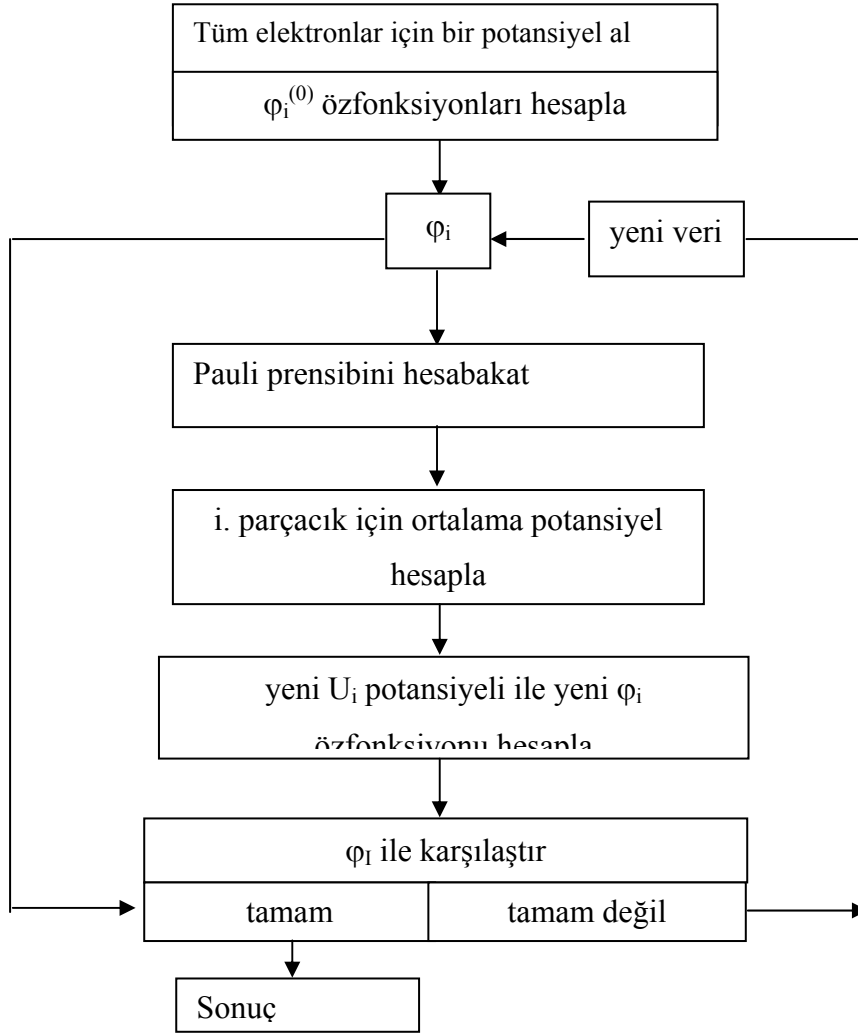
Dalga fonksiyonu radyal, açısal ve spine bağlı olmak üzere üç kısmın çarpımı şeklinde ifade edilir.

$$\phi_j(\alpha_i) = \phi_j(n_i l_i m_{li} m_{si}) = R_{n_i l_i}(r_j) Y_{l_i m_{li}}(\theta, \phi) \chi_{m_j} \quad (3.17)$$

Açıya bağlı kısım küresel harmonik olarak adlandırılır. Sonuç olarak toplam enerji n ve l kuantum sayılarına bağlı olarak tek-elektron enerjilerinin toplamı şeklinde tanımlanır.

$$E_C = \sum_{i=1}^N E_{n_i l_i} \quad (3.18)$$

Baş kuantum sayısı n_i , yörüngesel açısal momentum kuantum sayısı l_i her bir elektron için tanımlanabildiğinden, bu yaklaşımda toplam dalga fonksiyonu elektronların bir konfigürasyonunu tanımlar. Radyal denklemin çözümü için Hartree-Fock yönteminde küresel simetrik ve her elektron için aynı olan $U(r)$ potansiyelinin tespiti gereklidir. Hartree-Fock yöntemi daha karmaşık olmasına karşın Hartree yönteminden Pauli ilkesini gözönüne alması açısından daha avantajlıdır. Hartree-Fock yöntemi Şekil 3.1.'de şematik olarak verildi.



Şekil 3.1: Hartree-Fock yönteminin şematik olarak gösterimi.

3.5. İNCE YAPI (FINE STRUCTURE (FS))

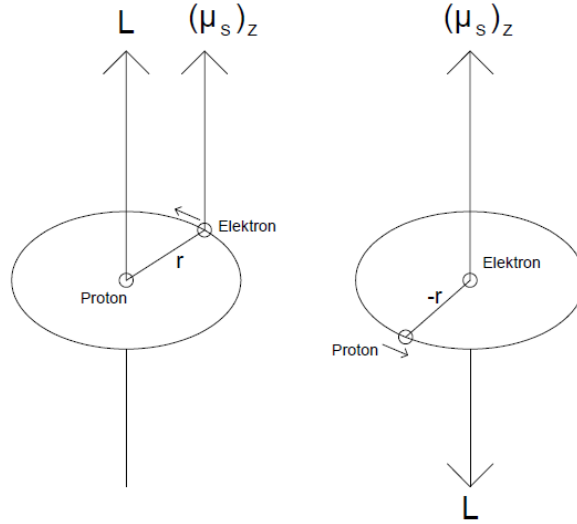
3.5.1. İnce Yapı ve Spin-Yörünge Çiftlenimi

Atomlarda, yüklerin yörünge hareketinden kaynaklanan bir iç manyetik alan oluşur. Dış manyetik alan yokluğunda, bu iç manyetik alan nedeni ile enerji düzeylerinde küçük yarılmalar olur. İç manyetik alandan kaynaklanan bu yarılmaya ince yapı denir [26].

İnce yapı çekirdek ve elektronlar arasındaki Coulomb etkileşimi ile açıklanamaz. Aksine, ince yapı spin-yörünge çiftlenimi adı verilen elektronun yörünge manyetik momenti ve spin manyetik momenti arasındaki etkileşimden kaynaklanır. Sözü edilen

iki manyetik momentin paralel veya antiparalel olmasına göre enerji terimlerinde kayma gözlemlenir. Manyetik momentlerin çiftlenimi toplam bir açısal momentum elde edilmesi için iki açısal momentumun toplamına yol açar.

Bohr modeli ve kuantum mekaniksel yöntem dikkate alınarak yörünge ve spin açısal momentumların paralel ve antiparalel yönelimleri için enerji farkları hesaplanır. Çekirdeğin etrafındaki elektronun hareketi elektron bölgesinde bir B_l manyetik alanı üretir. Bu alan elektronun manyetik momenti ile etkileşime girer. Üretilen bu manyetik alanın büyüklüğünü tespit etmek için görelilik teorisinden faydalanarak elektronun durgun ve çekirdeğin hareketli olduğu durum dikkate alınır. Dolanan elektronun r pozisyon vektörü $-r$ olarak değiştirilir.



Şekil 3.2: Spin-Yörünge çiftleniminin şematik gösterimi

Biot-Savart yasasına göre hareket ettiği kabul edilen $+Ze$ yükünün manyetik alanı aşağıdaki ifade ile verilir.

$$B_l = + \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{v} \times (-\vec{r})] \quad (3.19)$$

Açısal momentumun $\vec{l} = \vec{r} \times m_0 \vec{v}$ tanımı kullanılarak manyetik alanı açısal momentum cinsinden ifade edebiliriz.

$$B_l = \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3 m_e} l \quad (3.20)$$

Formülde m_e elektronun durgun kütesidir [27].

3.5.2. İnce Yapı Yarılımları

Elektronun yörünge manyetik momenti ile spin manyetik momenti arasındaki manyetik etkileşimden kaynaklanan yarılımlara ince yapı yarılımları denilir. Elektronun toplam manyetik momenti μ_J elektronun yörünge manyetik momenti μ_L ve elektronun spin manyetik momenti μ_S arasındaki etkileşmeden kaynaklanır.

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S \quad (3.21)$$

Her bir manyetik moment kendisinden kaynaklanan açısal momentum ile anti-paralel bir ilişkiye sahip olmakla birlikte, manyetik momentler birbirlerine paralel veya anti-paralel olabilirler.

Elektronun toplam açısal momentumu elektrona ait olan yörünge spin açısal momentumların vektörel toplamı şeklinde ifade edilir.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (3.22)$$

Toplam açısal momentum

$$|L - S| \leq J \leq L + S \quad (3.23)$$

aralığında değerler alır.

Elektrona ait iki manyetik momentin etkileşmesi dolayısıyla spin yörünge etkileşmesi denilen $V_{L,S}$ ek enerji terimi Hamiltonyen terimleri içerisine dahil edilir. Bu ek enerji değeri sadece radyal koordinata bağlı spin-dipol ve yörüngesel-dipol momentlerin etkileşme sabiti $\xi(r)$ niceliğine bağlı bir fonksiyon olarak tanımlanabilir.

$$V_{L-S} = \xi(r) \vec{\mu}_L \cdot \vec{\mu}_S = \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (3.24)$$

Serbest haldeki bir atomun mümkün olan enerji seviyeleri genel durumda sistemin Hamiltonyen operatörünün Schrödinger denkleminde hesaplanması ile elde edilir. İnce yapıya ait Hamiltonyen operatörü, spektral geçişlerin mümkün olabileceği enerji seviyelerini tanımlar. İnce yapı, en sade şekilde elektronların, atom çekirdeğinin

elektrostatik Coulomb alanı ile ve ayrıca elektronların kendi aralarındaki elektrostatik etkileşmeleri sonucu oluşur[28].

İnce yapının Hamilton operatörü üç kısımdan oluşmalıdır. İlk kısım, birden fazla elektronun merkezi alan yaklaşımı gözönüne alındığında N-elektronun sıfırıncı yaklaşımı ile verilen kısımdır. Elektronun kinetik enerjisi ile çekirdek-elektron arası Coulomb etkileşmesinden oluşur. İkinci kısım elektronların kendi aralarındaki elektrostatik etkileşme Hamilton operatörüdür. Merkezi alan yaklaşımı elektronların hareketlerini tanımlar ve elektronların enerji seviyelerini konfigürasyonlarla sınıflandırır. Her bir konfigürasyonun terimlere ayrılmasına sebep olur. Hamilton operatörünün üçüncü ve son kısmı ise elektronların spin-yörünge etkileşmesini tanımlar. Bu etkileşim, enerji seviyelerinin herbir teriminin farklı J değerlerine sahip enerji seviyelerine ayrılmasına neden olur[28]. Bu etkileşimlerin yanı sıra spin-spin, spin-diğer yörünge etkileşimleri gibi etkileşimler sözkonusudur. Ancak bunlar ihmal edilebilecek kadar küçüktürler [29].

İnce yapının hesaplanmasında kullanılan çok elektronlu bir sistem için yazılacak Hamilton operatörü aşağıdaki eşitlik ile tanımlanır.

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{l}_i \quad (3.25)$$

Sırası ile Hamiltonyen içerisinde yer alan terimler;

- elektronun kinetik enerjisi

$$\sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \quad (3.26)$$

- çekirdek-elektron arası Coulomb etkileşmesi

$$-\sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} \quad (3.27)$$

- elektronlar arası Coulomb etkileşmesi

$$\sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (3.28)$$

- spin yörünge etkileşmesidir.

$$\sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{l}_i \quad (3.29)$$

Energileri birbirine yakın olan aynı pariteye sahip farklı konfigürasyonların enerji seviyelerinin birbirleri ile etkileşmeleri söz konusudur. Bunun sebebi elektronların kendi aralarındaki elektrostatik etkileşmedir. Aynı pariteye sahip farklı konfigürasyonların enerji seviyeleri birbirleri ile karışabilirler [30].

3.5.3 İnce Yapı Parametreleri

Fortran 77 dilinde yazılan Cowan programı ince yapı hesaplarında enerji seviyelerinin yarı deneysel parametrik yöntemle hesaplanmasında kullanılır. İnce yapı hesaplarında ince yapı parametreleri tanımlanarak her bir enerji seviyesine özgü bir enerji matrisi yazılır.

$$E = 1E_{av} + gG^k + fF^k + z\xi + a\alpha + rR^k \quad (3.30)$$

Verilen eşitlikte yer alan ince yapı parametresi sırası ile; konfigürasyonun ortalama enerjisi (E_{av}), radyal indirekt Coulomb etkileşme parametresi (G^k), radyal direkt Coulomb etkileşme parametresi (F^k), spin-yörünge etkileşme parametresi (ξ), efektif Coulomb etkileşme parametresi (α), konfigürasyonlar arası etkileşme parametresi (R^k) olarak verilir. Radyal direkt ve indirekt Coulomb etkileşme parametreleri iki parçacık etkileşmesidir ve terimlere yarılımları verir. Spin-yörünge etkileşmesi tek parçacık etkileşmesidir ve enerji seviyelerinin J değerlerine yarılımlarını verir.

Yukarıda tanımlanan radyal ince yapı etkileşme parametrelerinin önündeki g,f,z,a ve r katsayıları teorik olarak hesaplanan dalga fonksiyonunun açılmalardır. Radyal ince yapı etkileşme parametreleri deneysel enerji değerleri ile fit yapılarak elde edilir.

Ayrıca β, T, T^1 ve T^2 ikinci derece Coulomb etkileşme parametreleri hesaplamalardaki sonuçların daha hassas olması için kullanılabilir.

Her enerji seviyesi $(2J + 1)$ -katlı çokluluğa sahip olduğundan ortalama enerji değeri aşağıdaki şekilde verilir. [2]

$$E_{av} = \frac{\sum_{seviye} (2J + 1) E_J}{\sum_{seviye} (2J + 1)} \quad (3.31)$$

E_{av} konfigürasyonların ortalama enerjisini temsil edecek şekilde her bir konfigürasyon için sıklıkla kullanılır. Enerji matrisini göz önüne alırsak, E_{av} enerji matrisinin köşegen elemanlarının bütün katkılarını içerir.

Radyal “direkt” Coulomb etkileşme parametresi $F^k(nl_1, nl_2)$ ve radyal “indirekt” Coulomb etkileşme parametresi $G^k(nl_1, nl_2)$ iki parçacık etkileşim parametreleridir. Radyal “direkt” Coulomb etkileşme parametresi F^k direkt Coulomb integralleri içerirler.

$$F^k(nl_1, nl_2) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} |P_{nl_1}(r_1)|^2 |P_{nl_2}(r_2)|^2 dr_1 dr_2 \quad (3.32)$$

Radyal “indirekt” Coulomb etkileşme parametresi G^k indirekt Coulomb integralleri içerirler,

$$G^k(nl_1, nl_2) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{nl_1}(r_1) P_{nl_1}(r_2) P_{nl_2}(r_1) P_{nl_2}(r_2) dr_1 dr_2 \quad (3.33)$$

F^k ve G^k radyal integralleri Slater integralleri olarak bilinir ve daima pozitif sonuç vermek zorundadır. F^k radyal “direkt” Coulomb etkileşme parametresi için sonuçlar aşağıdaki iki koşulu sağlamalıdır.

$$F^0 > F^1 > F^2 > \dots > 0, \quad (3.34)$$

$$F^k(l_1, l_2) \neq 0: k \text{ çift ve } 0 \leq k \leq \min(2l_1, 2l_2) \quad (3.35)$$

G^k radyal “indirekt” Coulomb etkileşme parametresi için sonuçlar aşağıdaki iki koşulu sağlamalıdır.

$$\frac{G^k}{[k]} > \frac{G^{k+1}}{[k+1]} > 0 \quad (3.36)$$

$$G^k(l_1, l_2) \neq 0: (k + l_1 + l_2) \text{ çift ve } l_1 - l_2 \leq k \leq l_1 + l_2 \quad (3.37)$$

R^k konfigürasyonlar arası etkileşme parametresi olarak sadece pozitif değerler almak zorunda değildir. Konfigürasyonlar etkileşme parametreleri direkt ve indirekt olmak üzere aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$R_d^k(l_i l_j, l'_i, l'_j) \equiv \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_i^*(r_1) P_j^*(r_2) P'_i(r_1) P'_j(r_2) dr_1 dr_2 \quad (3.38)$$

$$R_e^k(l_i l_j, l'_i, l'_j) \equiv R_d^k(l_i l_j, l'_j, l'_i) \quad (3.39)$$

$$R_e^k(l_i l_j, l'_i, l'_j) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_i^*(r_1) P_j^*(r_2) P'_j(r_1) P'_i(r_2) dr_1 dr_2 \quad (3.40)$$

Konfigürasyonlar arasındaki elektrostatik etkileşim R ile gösterilen ek bir radyal parametrenin ortaya çıkmasına yol açar. R^k konfigürasyonlar arası etkileşme parametresi için aşağıdaki koşul sağlanmalıdır.

$$R^k(l_i l_j, l'_i, l'_j) : (k + l_i + l'_i) \text{ çift ve } |l_i - l'_i| \leq k \leq l_i + l'_i \quad i = 1, 2 \text{ için} \quad (3.41)$$

Tek parçacık etkileşmesini veren Spin-yörünge parametresi, l yörünge açısal momentumunun sıfırdan farklı durumlarında aşağıdaki şekilde verilir:

$$\xi_{nl} = \int_0^\infty \xi(r) |P_{nl}(r)|^2 dr \quad (3.42)$$

Burada $P_{nl}(r)$ tek elektron radyal fonksiyonudur. Elektronun merkezi-alan potansiyel enerji fonksiyonu, U , ve ince yapı sabiti α kullanılarak spin-yörünge parametresinin radyal faktörü $\xi(r)$ aşağıdaki eşitlik ile hesaplanır.

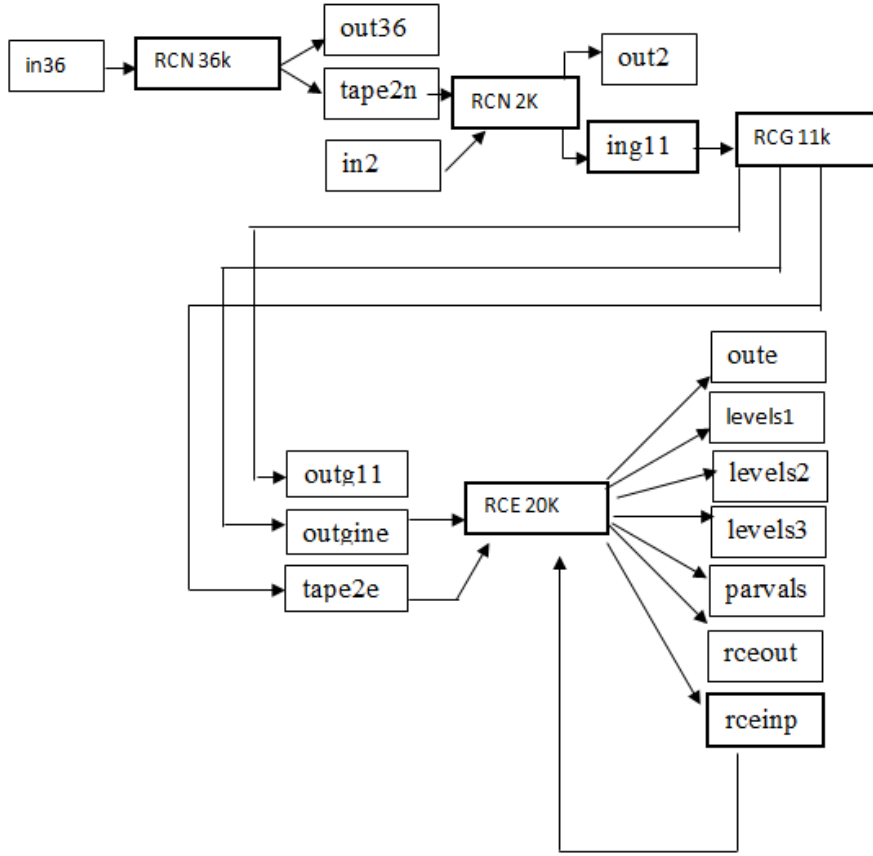
$$\xi(r) = \frac{\alpha^2}{2} \left[\frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \right] \quad (3.43)$$

3.5.4 İnce Yapı Programı

Bu çalışmada ince yapı hesapları Fortran 77 dilinde yazılmış Cowan yazılımı [2] ile yapıldı. Cowan programında, dalga fonksiyonu radyal ve açısız kısım olmak üzere ikiye ayrılarak enerji seviyeleri yarı deneysel parametrik yöntemle hesaplanır. Açısız kısım Racah-Cebri ile hesaplanır. Dalga fonksiyonunun radyal kısmı Hartree-Fock metodu (*ab-initio*) ile belirlenir.

İnce yapı hesaplarında radyal kısım serbest parametrelerle incelenir ve deneysel olarak elde edilen enerji seviyeleri ile fit yapılır. İnce yapı hesapları sırasında bütün enerji seviyelerinin operatörlerinin matris elemanı hesaplanır. Bu matrisin diyagonal hale getirilmesi ile seviyelerin enerji değerleri elde edilir. Matrisin diyagonal yapılması sırasında gerekli olan transfer matrisi açısız katsayılardan oluşur. Bu katsayılar aşırı ince yapı tanımlaması için gereklidir.

Belirlenen ince yapı parametre değerleri ile deneysel ve teorik enerji değerlerinin fit işlemi yapılır. Böylece deneysel olarak henüz bulunmamış enerji ve Landé g değerleri teorik olarak tahmin edilir. Cowan programı içerisinde 4 program yer alır. Bu programların çalışma sırası, giriş ve çıkış dosyaları Şekil 3.3'de gösterilmiştir.



Şekil 3.3:İnce yapı hesaplarında kullanılan programların çalışma sırasının şematik gösterimi.

Hesaba ince yapı hesaplarının yapılması amaçlanan elemente ait atom numarası ve o elementin incelenmesi istenen konfigürasyonlarının belirtildiği in36 giriş dosyasının oluşturulması ile başlanır. Hesaplar bir elementin tek konfigürasyonu için yapılabildiği gibi, birden çok konfigürasyonu için de yapılabilir. In36 giriş dosyasının oluşturulmasından sonra sırasıyla RCN36k ve RCN2k programları çalıştırılır.

Cowan yazılımında yer alan dört programın çalıştırılma sırası ve işlevleri şöyledir;

RCN36k; istenilen her bir konfigürasyon için konfigürasyonun merkezi gravitasyon enerjisi (E_{av}), radyal Coulomb integralleri (F^k ve G^k), spin-orbit integralleri (ζ) 'ları kullanarak belirli bir konfigürasyonun enerji seviyelerinin hesaplanmasında kullanılan bir programdır. Hartree-Fock yaklaşıklık metodu kullanarak belirli elektron konfigürasyonları için bağlı yada serbest tek elektron radyal dalga fonksiyonları hesaplanır.

RCN2k; hesaplanan dalga fonksiyonlarını kullanarak, etkileşen konfigürasyon çiftleri arasındaki konfigürasyon etkileşme Coulomb integralleri (R_k) ile elektrik dipol (E1) ve / veya elektrik kuadrapol (E2) radyal integrallerini hesaplar.

RCN2k'nin çalıştırılması sonucu meydana gelen ing11 dosyasında ince yapı parametre değerleri bulunur. İnce yapı parametre değerlerinin ing11 dosyasındaki sırası ile aynı parametre değerlerinin rceinp dosyasındaki sıralanışı aynıdır. İng11 dosyasının ilk hali çalışma süresince saklı tutulmalıdır. Bunun nedeni hesaplama sonucu bulunan ince yapı parametre değerlerinin ve kuplaj yapılan parametreler arasındaki oranın ing11'deki değerlerle aynı mertebede olması istenilir. İng11 dosyasına hesaplamalarda kullanılacak deneysel enerji değerlerinin ortalaması girilmelidir.

RCG11k; bu programın temel amacı, atomik yapı ve spektrum teorisindeki çeşitli matris elemanlarının açısal katsayılarının hesaplanmasıdır. Bu açısal katsayılar deneysel enerji seviyelerinin en küçük kareler yöntemi ile fit edilmesinde RCE programının giriş datası olarak kullanılır [2].

Outg11 ve Levels1, RCE20k programının önemli çıkış dosyalarından ikisidir. Bu iki dosyadaki bilgiler aşırı ince yapı hesaplarında kullanılır. Belirli bir konfigürasyona ait mümkün olan her bir J değeri için enerji matrisi, özdeğerleri, g değerleri, LS ve JJ gösteriminde öz vektörleri ve özvektör saflığı bu dosyalarda yer alır. Özdeğer ve özvektörleri elde edebilmek için her bir matris köşegenleştirilir ve M1 (magnetik dipol), E1 ve / veya E2 ışınım spektrumunu hesaplanır [2].

RCE20k; Teorik olarak hesaplanan parametre değerlerinin iyileştirilmesi bu program ile sağlanır. RCE20k programının çalıştırılması ile oluşan rceinp dosyasına deneysel enerji değerleri konfigürasyon ve terim dikkate alınarak yazılır. Enerjileri deneysel olarak tespit edilmemiş seviyeler gözönüne alınmadan deneysel enerji seviyeleri ile teorik olarak hesaplanan atomik enerji seviyeleri iyi bir uyum içinde oluncaya kadar parametre değerleri değiştirilir.

Parametre değerlerinin sabit tutulması ve belirli bir parametre değerinin oranını konfigürasyonlar arasında ya da birbirine benzer parametrelerin değerlerinin oranını

sabit tutmak diğer uygulanabilen yöntemlerdendir. Teorik enerji değerleri ve ince yapı parametreleri rceinp ve rceout dosyalarının içerikleri aynı olunca işleme son verilebilir.

RCE20k'nın diğer çıkış dosyaları ise aşağıda verilmiştir.

oute : Herbir döngüye ait standart sapma, ortalama sapma ve her parametrenin hataları ile birlikte verildiği değerlerini verir.

levels 1, 2, 3 : Her seviye için üç özvektör bileşeninin yüzdelerini, teorik g değerlerini, deneysel ve teorik enerjileri ve farklarını verir.

parvals : Her döngüye ait parametre değerlerini verir. Bunlardan son döngüye ait olanlar bir sonraki hesapta kullanılması açısından önemlidir.

3.6 EINSTEIN GEÇİŞ OLASILIKLARI

Çevresi ile izole olan bir atomun çeşitli muhtemel kuantum durumlarını ele almak ve o atomun tamamen durgun durumlarını incelemek faydalı olsa dahi ancak bir yaklaşıktır. Gerçekte atom zayıf bir düzeyde elektromanyetik ışığa ile etkileşime girer. Herhangi bir uyarılmış j düzeyinde E_j enerjisine sahip bir atom enerji yüklü bir foton yayınlamaya daha düşük enerjili E_i enerjisine sahip bir i düzeyine kendiliğinden ışınımsal geçiş yapabilir. Yayımlanan bu fotonun enerjisi aşağıdaki eşitlik ile verilir.

$$h\nu_{ji} = E_j - E_i \quad (3.44)$$

Bu enerjiye karşılık gelen dalgasayısının bir spektral çizgisi aşağıdaki şekilde verilir.

$$\sigma = \frac{1}{\lambda_{ji}} = \frac{(E_j - E_i)}{hc} \quad (3.45)$$

J düzeyindeki bir atomun i düzeyine geçişinin birim zaman başına düşen olasılığını a_{ji} ile tanımlanabilir.

Çevresi ile izole olan bir atom için, j_i toplam açısal momentumlu bir durumda bulunan serbest-alan atomu için E_i enerjili dejenere kuantum durumlarının sayısı aşağıdaki gibi verilir.

$$g_j = 2J_i + 1 \quad (3.46)$$

Yukarıda manyetik kuantum sayısı M_i 'nin $2J_i+1$ muhtemel değerlerine karşılık gelen bir dejenere kuantum durumları sayısı tanımlanır. Einstein kendiliğinden yayınlama olasılık oranı spesifik bir j durumu içinde enerji düzeyinin herhangi bir g_i durumuna bir geçiş yapan atomun birim zamandaki toplam olasılığı olarak tanımlanır.

$$A_{ji} = \sum_{M_i} a_{ji} \quad (3.47)$$

Elektrik dipol geçişler ancak farklı pariteli enerji seviyeleri arasında meydana gelmektedir. Bir diğer deyişle $\psi_{n,l,m}^*$ ve $\psi_{n,l,m}$ farklı pariteli fonksiyonlar olmak zorundadır. O halde atomların kuantum seviyeleri arasında bir elektrik dipol geçişi olması için parite belirleyicisi durumunda olan yörünge açısal momentum kuantum sayısındaki değişim

$$\Delta l = \mp 1 \quad (3.48)$$

Yukarıdaki eşitlik elektrik dipol seçim kuralı olarak adlandırılır.

4. BULGULAR

4.1 Niyobyum (^{93}Nb)

Nb sembolü ile gösterilen Niyobyum elementinin atom numarası 41 olup 4d-geçiş elementidir. Oda koşullarında katı halde bulunan metalik gri renkli kimyasal bir element olan niyobyum sadece bir kararlı izotopa sahiptir. Çekirdek spini $I = 9/2$ kararlı izotopunun atomik spektrumu büyük çekirdek manyetik dipol momentle $\mu_I = 6.1705(3)\mu_N$ [31] (burada μ_N nükleer magnetondur) ve buna karşılık küçük elektrik kuadropol momentle $Q = -0.36(7)b$ [31] tanımlanır. Tablo 4.1'de Niyobyum elementinin temel kimyasal özellikleri verildi.

Tablo 4.1: Niobyum (^{93}Nb) elementinin temel kimyasal özellikleri[31].

Özellik	
Bağlı atom kütlesi	92,90638 g/mol
Erime noktası	2468°C
Kaynama noktası	4744°C
Yoğunluğu	8,57 g/cc
Keşfi	1801 - Charles Hatchet
Atom çapı	2,08 Å
Elektron dizilimi	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 d^{10} 4s^2 p^6 d^4 5s^1$

4.2 Nötral Niyobyum Elementinin İnce Yapı Analizi

Nb I elementinin ince yapı analizi, çift pariteye sahip $4d^4 5s$, $4d^3 5s^2$, $4d^5$, $4d^4 6s$ ve $4d^3 5s 6s$ konfigürasyonları ile tek pariteye sahip $4d^3 5s 5p$, $4d^4 5p$, $4d^3 5s 6p$, $4d^2 5s^2 5p$ konfigürasyonları için ayrı ayrı gerçekleştirildi. Enerji seviyelerinin dalga fonksiyonları SL kuplajı ile Cowan programlar zinciri [2] kullanılarak multi-konfigürasyon fit işlemi ile elde edildi. Cowan programı, Nb I elementinin incelenen çift pariteli konfigürasyonları için toplam 141 tane teorik ince yapı enerji seviyesi ve tek pariteli

konfigürasyonları için toplam 426 adet teorik ince yapı enerji seviyesi vermiştir. NIST [33] atomik veri tablosundan hesaplarda kullanılmak üzere alınan bilinen deneysel enerji değerleri ise çift pariteli konfigürasyonları için toplam 73 tane, tek pariteli konfigürasyonları için toplam 286 adettir. Bu deneysel değerler fit işlemi için kullanıldı. İnce yapı analizi gerçekleştirilen konfigürasyonlar, pariteleri ve bu konfigürasyonların yer aldığı enerji aralıkları ile birlikte Tablo 4.2’de verildi.

Tablo 4.2: Nb I elementine ait incelenen konfigürasyonlar, pariteleri ve bu konfigürasyonların yer aldığı enerji aralıkları [33].

Konfigürasyon	Enerji Aralığı (cm ⁻¹)	Parite
4d ⁴ 5s	0.00 - 20060.84	Çift
4d ³ 5s ²	1142.79 – 13515.20	Çift
4d ³ 5s5p	16672.00 – 51788.30	Tek
4d ⁴ 5p	22006.74 – 45982.56	Tek
4d ⁵	22936.90 – 23048.58	Çift
4d ² 5s ² 5p	33086.98 – 33428.20	Tek
4d ⁴ 6s	37410.17 – 38567.85	Çift
4d ³ 5s6s	37871.30 – 39648.67	Çift
4d ³ 5s6p	45978.84 – 46919.48	Tek

Çok konfigürasyonlu fit işlemi yapılırken aynı pariteye sahip enerji seviyelerinin aralıkları göz önüne alınmalıdır. Tablo 4.2’den görüldüğü gibi 4d⁴5s, 4d³5s² çift pariteli konfigürasyonların enerji değerleri birbiri içine geçmiş ve 4d⁵ çift pariteli konfigürasyonunun enerji değeri bu iki konfigürasyonun enerji değerine çok yakın yerleşmiştir. Ayrıca benzer durum nedeni ile 4d⁴6s ve 4d³5s6s çift pariteli konfigürasyonların enerjileri ayrı ayrı hesaplanmamalıdır. Aynı şekilde tek pariteli konfigürasyonların enerjileri incelendiğinde enerjilerin iç içe geçme benzer durumu görülmektedir. 4d³5s5p, 4d⁴5p, 4d²5s²5p ve 4d³5s6p tek pariteli konfigürasyonların enerji aralıkları çakışmaktadır.

Hesaplamaların doğru şekilde yapılabilmesi için öncelikle kullanılan enerji değerlerinin, NIST [33] tablosunda tanımlandığı gibi, doğru konfigürasyon ve terimde yerleştirilmesi gereklidir. Diğer bir önemli nokta ise, başlangıç değerleri program tarafından hesaplanan ince yapı parametre değerlerinin fit işlemi boyunca uygun şekilde değişmesini

sağlamaktır. İnce yapı parametreleri fit işlemine 3 değişik şekilde dahil edilebilir. İlk olarak, parametreler serbest bırakılabilir. Bunun anlamı fit işlemi sırasında herhangi bir sınırlama olmaksızın parametre değeri istediği değeri alabilir. Belli bir değerde sabit tutulabilir ve son olarak kuplaj yapılabilir. Parametrelerin kuplajı belirli kurallar çerçevesinde gerçekleştirilebilir. Kuplaj yapılması ile parametrelerin birbirleri ile orantılı olarak değişim göstermeleri sağlanır. Bu oran, program tarafından Hartree – Fock yöntemi ile başlangıç değeri olarak hesaplanan değerlerin oranı ile yaklaşık aynı değerde olmalıdır. Böylece ince yapı parametrelerinin değişimine bir sınır getirilmiş olur. Kuplaj için dikkat edilmesi gereken ilk kural aynı cins parametrelerin kuplaja dahil edilmesidir. Örneğin $F^k (l, l')$ radyal direkt Coulomb etkileşme parametresi için parantez içindeki değerler veya k indisi aynı olacak şekilde konfigürasyonlar arası ya da konfigürasyon içi kuplaj yapılabilir. Aynı durum radyal indirekt Coulomb etkileşme parametreleri için de aynıdır.

Bunun yanı sıra hesaplarda en doğru parametre değerlerine ulaşabilmek için Büttgenbach [32] tarafından 4d ve 5d kabuklu atomlar için yaptığı çalışmada çift pariteli konfigürasyonlar için belirtilen kurallara uyulmuştur.

Enerji seviyelerinin dalga fonksiyonları SL kuplajı uygulanarak elde edilirken ince yapı parametre değerlerinin arasında $F^k, G^k \gg \zeta_l, \zeta_2$ ilişkisinin varlığına tüm hesaplamalarda dikkat edildi [2].

4.2.1.Çift Pariteli $4d^45s, 4d^35s^2, 4d^5$ Konfigürasyonların İnce Yapı Analizi

Niyobyum elementinin çok-konfigürasyonlu fit işleminde Cowan programı çift pariteli $4d^45s$ konfigürasyonu için 59 tane, $4d^35s^2$ konfigürasyonu için 18 tane ve $4d^5$ konfigürasyonu için ise 42 tane teorik ince yapı enerji seviyesi verilmiştir. NIST atomik veri tablosundan ise, $4d^45s$ konfigürasyonu için 43 tane, $4d^35s^2$ konfigürasyonu için 15 tane ve $4d^5$ konfigürasyonu için ise 4 tane deneysel ince yapı enerji seviyesi bulunmaktadır. Toplam 62 deneysel enerji değerinden 62 enerji seviyesinin değeri fit işleminde kullanılmıştır.

Çift pariteye sahip $4d^4 5s$, $4d^3 5s^2$ ve $4d^5$ konfigürasyonlarının multi-konfigürasyon fit işlemi ile incelenmesinde, ortalama enerji E_{av} hariç F^2 , F^4 ve ζ_{4d} parametreleri konfigürasyonlar arası uygun parametreler ile aşağıdaki eşitliğe uygun olarak sabit oranda tutulmuştur.

$$\frac{P(4d^5)}{P(4d^4 5s)} = \frac{P(4d^4 5s)}{P(4d^3 5s^2)} \quad (4.1)$$

Formülde P herhangi bir parametredir.

Bu üç konfigürasyonlu sistemin incelenmesinde, F^2 ve ζ_{4d} parametreleri konfigürasyonlar arası uygun parametreler ile aşağıdaki eşitliğe uygun olarak sabit oranda tutulmuştur.

$$P(4d^5) - P(4d^4 5s) = P(4d^4 5s) - P(4d^3 5s^2) \quad (4.2)$$

Formülde P herhangi bir parametredir.

Çift pariteye sahip $4d^4 5s$, $4d^3 5s^2$ ve $4d^5$ konfigürasyonları incelenirken a ve b ile gösterilen F^2 ve F^4 parametre değerleri bu üç konfigürasyondaki aynı parametre değerleri ile sabit tutuldu. Benzer şekilde c ile gösterilen β parametre değeri $4d^4 5s$ ve $4d^3 5s^2$ konfigürasyonundaki aynı parametre değerleri ile sabit tutuldu. Bu çalışmada diğer iki referans çalışmasında fit işlemine alınmayan beta parametresinin $4d^4 5s$, $4d^3 5s^2$ konfigürasyonları arasında sabit tutularak işleme alınması gerçekleştirildi.

Çift pariteli bu üç konfigürasyonun incelenmesi sonucu her bir konfigürasyona ait ortalama enerji sapma değerlerinde daha önce gerçekleştirilen iki referans çalışmaya kıyasla ciddi bir düşüş olduğu açık bir gerçek olarak ortaya çıktı. ζ_{4d} parametresinin daha önce gerçekleştirilen iki referans çalışmadan farklı olarak her üç konfigürasyonda birden serbest bırakılması $4d^4 5s$ ve $4d^3 5s^2$ konfigürasyonlarındaki parametre standart sapmasını önemli ölçüde düşürdü.

Buna ek olarak $G^2(4d,5s)$ parametresinin standart sapması iki referans çalışmaya göre $4d^4 5s$ konfigürasyonu için ciddi oranda azaldı. Bu çalışmada ilk kez

$4d^5$ konfigürasyonundaki T değerine sabit bir değer verilerek ortalama enerji ve parametre standart sapmalarının düşüşü gerçekleştirildi.

Tablo 4.3'te Ab initio değerleri ile birlikte çift pariteli $4d^4 5s$, $4d^3 5s^2$ ve $4d^5$ konfigürasyonlarının ince yapı parametre değerleri ve Tablo 4.4'te en küçük kareler yöntemi ile fit edilen en iyi enerji değerleri deneysel değerlerle birlikte verildi. Deneysel ve teorik enerji değerleri arasında tüm seviyelerde iyi bir uyum elde edildi. Bu nedenle bu üç konfigürasyonlu sistemde hiçbir seviye fit işlemi dışında tutulmadı.

4.2.2.Çift Pariteli $4d^4 6s$, $4d^3 5s 6s$ Konfigürasyonların İnce Yapı Analizi

Çift pariteye sahip $4d^4 6s$ ve $4d^3 5s 6s$ konfigürasyonlarının multi-konfigürasyon fit işlemi ile incelenmesi ilk kez bu çalışmada gerçekleştirildi.

Fit işleminde Cowan programı çift pariteli $4d^4 6s$ konfigürasyonu için 9 tane, $4d^3 5s 6s$ konfigürasyonu için 13 tane teorik ince yapı enerji seviyesi verilmiştir. NIST atomik veri tablosundan ise, $4d^4 6s$ konfigürasyonu için 5 tane, $4d^3 5s 6s$ konfigürasyonu için 6 tane deneysel ince yapı enerji seviyesi fit işlemine alınmıştır. Toplam 12 deneysel enerji değerinden 11 enerji seviyesinin değeri fit işleminde kullanılmıştır.

F^2 ve F^4 parametre değerleri bu iki konfigürasyondaki aynı parametre değerleri ile sabit tutuldu. Parametrelere ait standart sapma 1 cm^{-1} gibi çok düşük bir seviyede gerçekleşti. 12 adet deneysel enerji ve Landé g değeri bilinmeyen seviye için ilk kez teorik bir enerji ve Landé g değeri bu çalışmada önerildi.

Tablo 4.5'te Ab initio değerleri ile birlikte çift pariteli $4d^4 6s$ ve $4d^3 5s 6s$ konfigürasyonlarının ince yapı parametre değerleri, Tablo 4.6'te en küçük kareler yöntemi ile fit edilen en iyi enerji değerleri deneysel değerlerle birlikte verildi. Deneysel ve teorik enerji değerleri arasında 39028.74 cm^{-1} seviyesi dışında tüm seviyelerde iyi bir uyum elde edildi.

4.2.3. Tek Pariteli $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^25s^25p$ ve $4d^35s6p$ Konfigürasyonların İnce Yapı Analizi

Tek pariteye sahip $4d^35s6p$ konfigürasyonun da dahil edilmesi ile multi-konfigürasyon fit işlemi ilk kez bu çalışmada gerçekleştirildi.

Fit işleminde Cowan programı tek pariteli $4d^35s5p$ konfigürasyonu için 200 tane, $4d^45p$ konfigürasyonu için 141 tane, $4d^25s^25p$ konfigürasyonu için 36 tane, $4d^35s6p$ konfigürasyonu için 54 tane teorik ince yapı enerji seviyesi verilmiştir. NIST atomik veri tablosundan ise, $4d^35s5p$ konfigürasyonu için 157 tane, $4d^45p$ konfigürasyonu için 92 tane, $4d^25s^25p$ konfigürasyonu için 16 tane, $4d^35s6p$ konfigürasyonu için 21 tane deneysel ince yapı enerji seviyesi kullanılmıştır. Toplam 302 deneysel enerji değerinden 286 enerji seviyesinin değeri fit işleminde kullanılmıştır.

Tek parametreye sahip $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^25s^25p$ ve $4d^35s6p$ konfigürasyonları incelenirken a, b ve f ile gösterilen $F^2(4d,4d)$, $F^4(4d^2)$ ve $F^2(4d,5p)$ parametre değerleri bu dört konfigürasyondaki aynı parametre değerleri ile sabit tutuldu. Benzer şekilde c ve d ile gösterilen ζ_{4d} ve ζ_{5p} parametreleri bu dört konfigürasyondaki aynı parametre değerleri ile sabit tutuldu. Bu dört konfigürasyon içerisinde parametre değeri sabit tutulan bir diğer parametre ise h ile gösterilen $G^l(4d,5p)$ 'dir.

Buna ek olarak, g ve n ile gösterilen $G^2(4d,5s)$ ve $G^l(5s,5p)$ parametreleri $4d^35s5p$ ve $4d^35s6p$ konfigürasyonlarındaki aynı parametre değerleri ile sabit tutuldu. Bu çalışmada α ve β parametre değerleri bu dört konfigürasyon için sabit bir değer verilerek ortalama enerji ve parametre standart sapmalarının ciddi bir düşüşü gerçekleştirildi.

İlk kez bu çalışmada tek pariteli $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^25s^25p$ ve $4d^35s6p$ konfigürasyonlarının 52000 cm^{-1} düzeyine kadar olan deneysel enerji seviyeleri fit işlemine dahil edildi.

Tablo 4.7'de Ab initio değerleri ile birlikte tek pariteli $4d^3 5s5p$, $4d^4 5p$, $4d^2 5s^2 5p$ ve $4d^3 5s6p$ konfigürasyonlarının ince yapı parametreler değerleri, Tablo 4.8'de en küçük

kareler yöntemi ile fit edilen en iyi enerji değerleri deneysel değerlerle birlikte verildi. Deneysel ve teorik enerji değerleri arasında 41676.81 ve 40481.96cm^{-1} seviyesi dışında tüm seviyelerde iyi bir uyum elde edildi.

4.2.3. Geçiş Olasılıkları Hesabı

İnce yapı parametrik analizi sonucu elde edilen ince yapı parametreleri kullanılarak, 3069.02 \AA ile 5706.15 \AA dalga boyu aralığında geçiş olasılıkları hesaplandı. Toplam 46 seviye için geçiş olasılığı hesapladığımızı bu çalışmada 8 adet teorik geçiş olasılığı ilk defa bu çalışmada verildi. Tablo 4.9'da nötral Nb I elementine ait elektronik dipol geçiş olasılıkları ($10^8/\text{sec}$) verildi. Bu çalışmada hesaplanan sonuçların literatürdeki [21], [20] verileriyle karşılaştırıldığında, sonuçların uyum içinde olduğu gözükmemektedir. Bu uyum hesaplanan ince yapı parametre değerlerinin tutarlı ve doğru olduğunu göstermektedir.

Tablo 4.3: Ab initio ve referans [18] deęerleri ile birlikte çift pariteli $4d^4 5s$, $4d^3 5s^2$ ve $4d^5$ konfigurasyonlarının ince yapı parametreleri

Parametreler	Bu alıřma (cm^{-1})			Reference [18]			Ab initio (cm^{-1})		
	$4d^4 5s$	$4d^3 5s^2$	$4d^5$	$4d^4 5s$	$4d^3 5s^2$	$4d^5$	$4d^4 5s$	$4d^3 5s^2$	$4d^5$
E_{AV}	17125 (29)	12813 (56)	30294 (89)	17170 (60)	12810 (70)	30060 (120)	22373	18941	37921
$F^2(4d,4d)$	32205 ^a	36618 ^a	28341 ^a	32750 (190)	37400 (300)	28680	32200	35255	28890
$F^4(4d,4d)$	19152 ^b	23358 ^b	16503 ^b	19900 (200)	23100 (300)	17140	20588	22747	18282
ζ_{4d}	416 (13)	492 (15)	355 (11)	425 (15)	494 (20)	366	440	503	381
$G^2(4d,5s)$	9112 (54)			9100 (80)			9775		
α	29 (3)	18 (4)	25	34 (3)	28 (5)	30			
β	279 ^c	174 ^c							
$T(d^3)$			9						
$R^2(d^2,ds)$	-12687 ^d			-12600 (300)			-12246		
$R^2(ds,d^2)$	-10774 ^d			-10700 (600)			-12265		
$R^2(s^2,d^2)$	10902 ^d			10600			12107		
Serbest parametre sayısı	12								
Fit edilen seviye sayısı	62						51		
Standart sapma (cm^{-1})	79						70		

a: $F^2(4d,4d)$ parametresi üç konfigurasyondaki aynı cins parametreler ile sabit oranda tutuldu. b: $F^4(4d,4d)$ parametresi üç konfigurasyondaki aynı cins parametreler ile sabit oranda tutuldu. c: β parametresi $4d^4 5s$ ve $4d^3 5s^2$ konfigurasyonlarındaki aynı cins parametreler ile sabit oranda tutuldu. d: $R^2(d^2,ds)$, $R^2(ds,d^2)$, $R^2(s^2,d^2)$ parametreleri sabit oranda tutuldu.

Tablo 4.4: Nb I elementinin çift pariteli $4d^4 5s$, $4d^3 5s^2$ ve $4d^5$ konfigürasyonlarına ait Nist atomik spektra veri tablosuna göre deneysel E_{deney} ve g_{deney} değerleri ile hesaplanan E_{teorik} ve g_{teorik} değerleri, özvektör bileşenleri.

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	%
$j = 1/2$								
0.00	-39	39	3.323	3.328	-0.005	$4d^4 5s$	$^5D^6D$	99
4998.17	4877	121	2.650	2.655	-0.005	$4d^3 5s^2$	4P	52
8410.90	8477	-66	0.060	0.059	0.001	$4d^4 5s$	$^5D^4D$	89
10126.06	10266	-140	0.660	0.639	0.021	$4d^3 5s^2$	2P	65
13629.15	13536	93	2.640	2.616	0.024	$4d^4 5s$	$^3P^4P$	37
15460.77	15541	-80	0.040	0.013	0.027	$4d^4 5s$	$^3D^4D$	93
17740.78	17603	138		1.657		$4d^4 5s$	$^1S^2D$	49
18710.09	18652	58		1.043		$4d^4 5s$	$^3P^2P$	33
	24043			2.655		$4d^5$	4P	65
	26861			1.023		$4d^5$	4D	57
	27219			1.650		$4d^5$	4D	35
	29810			0.674		$4d^4 5s$	$^3P^2P$	54
	37590			2.000		$4d^5$	2S	87
	48106			2.001		$4d^4 5s$	$^1S^2S$	68
	49364			0.670		$4d^5$	2P	93

Tablo 4.4 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	%
J = 3/2								
154.19	115	39	1.863	1.866	-0.003	4d ⁴ 5s	⁵ D ⁶ D	99
1142.79	1200	-57	0.402	0.404	-0.002	4d ³ 5s ²	⁴ F	91
5297.92	5162	136	1.721	1.724	-0.003	4d ³ 5s ²	⁴ P	53
8705.32	8770	-65	1.197	1.202	-0.005	4d ⁴ 5s	⁵ D ⁴ D	94
9439.08	9502	-63	0.953	0.947	0.006	4d ³ 5s ²	² D	44
11318.09	11439	-121	1.175	1.195	-0.020	4d ³ 5s ²	² P	51
12288.25	12284	4	0.402	0.406	-0.004	4d ⁴ 5s	³ F ⁴ F	68
14211.30	14127	84	1.710	1.718	-0.008	4d ⁴ 5s	³ P ⁴ P	39
15439.25	15504	-65	1.210	1.204	0.006	4d ⁴ 5s	³ D ⁴ D	92
	19166			1.285		4d ⁴ 5s	³ D ² D	40
	19377			0.819		4d ⁴ 5s	³ P ² P	38
	21556			0.832		4d ⁴ 5s	³ D ² D	34
	23945			1.723		4d ⁵	⁴ P	60
	24706			0.409		4d ⁴ 5s	³ F ⁴ F	72
	26559			1.539		4d ⁵	⁴ D	32
	27232			1.384		4d ⁵	⁴ D	58
	28373			0.826		4d ⁵	² D	23
	29114			1.300		4d ⁴ 5s	³ P ² P	50

Tablo 4.4 (devam)

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler			
						Konfig.	Terim	%	
	30132			0.424		$4d^5$	4F	92	
	34517			0.799		$4d^5$	2D	30	
	35940			0.800		$4d^4 5s$	$^1D^2D$	40	
	42006			0.800		$4d^5$	2D	52	
	49211			1.298		$4d^5$	2P	87	
	50648			0.836		$4d^5$	2D	64	
J = 5/2									
	391.99	351	41	1.652	1.656	-0.004	$4d^4 5s$	$^5D^6D$	99
	1586.90	1637	-50	1.029	1.031	-0.002	$4d^3 5s^2$	4F	91
	5965.45	5793	172	1.596	1.600	-0.004	$4d^3 5s^2$	4P	56
	9043.14	9086	-43	1.360	1.364	-0.004	$4d^4 5s$	$^5D^4D$	92
	10237.51	10241	-3	1.206	1.206	0.000	$4d^3 5s^2$	2D	57
	11344.70	11169	176	1.990	2.001	-0.011	$4d^5$	6S	100
	12018.25	12113	-95	0.742	0.814	-0.072	$4d^4 5s$	$^3G^4G$	45
	12692.12	12781	-89	0.852	0.791	0.061	$4d^4 5s$	$^3G^4G$	49
	13404.77	13387	18	0.860	0.862	-0.002	$4d^4 5s$	$^3F^2F$	39
	14899.26	14845	54	1.540	1.570	-0.030	$4d^4 5s$	$^3P^4P$	37
	15467.08	15486	-19	1.420	1.395	0.025	$4d^4 5s$	$^3D^4D$	81

Tablo 4.4 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	%
19568.72	19525	44	0.940	0.891	0.049	$4d^4 5s$	$^3D^2D$	28
19931.98	19946	-14	1.130	1.171	-0.041	$4d^4 5s$	$^3D^2D$	32
	21379			1.201		$4d^4 5s$	$^3D^2D$	32
	22998			0.576		$4d^5$	4G	94
	23765			1.587		$4d^5$	4P	49
	24615			1.023		$4d^4 5s$	$^3F^4F$	68
	25634			0.873		$4d^3 5s^2$	2F	38
	26200			1.544		$4d^5$	4P	29
	27163			1.406		$4d^5$	4D	70
	27614			0.921		$4d^4 5s$	$^1F^2F$	29
	28449			1.144		$4d^3 5s^2$	2D	18
	30120			1.036		$4d^5$	4F	93
	33165			0.938		$4d^5$	2F	42
	34519			1.122		$4d^5$	2D	23
	35759			1.055		$4d^5$	2F	35
	36377			1.005		$4d^5$	2F	48
	42034			1.200		$4d^5$	2D	52
	50583			1.200		$4d^5$	2D	68

Tablo 4.4 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	%
J = 7/2								
695.25	648	47	1.582	1.586	-0.004	4d ⁴ 5s	⁵ D ⁶ D	99
2154.11	2192	-38	1.235	1.240	-0.005	4d ³ 5s ²	⁴ F	91
8827.00	8910	-83	0.885	0.896	-0.011	4d ³ 5s ²	² G	83
9497.52	9511	-13	1.420	1.418	0.002	4d ⁴ 5s	⁵ D ⁴ D	93
10922.74	10984	-61	0.690	0.688	0.002	4d ⁴ 5s	³ H ⁴ H	93
12136.86	12214	-77	1.081	1.110	-0.029	4d ⁴ 5s	³ G ⁴ G	40
12982.38	13072	-90	1.120	1.094	0.026	4d ⁴ 5s	³ G ⁴ G	50
13515.20	13473	42	1.130	1.146	-0.016	4d ⁴ 5s	³ F ² F	37
15282.35	15343	-61	1.430	1.425	0.005	4d ⁴ 5s	³ D ⁴ D	93
16918.78	16821	98	0.880	0.895	-0.015	4d ⁴ 5s	¹ G ² G	53
19034.71	19050	-15	0.920	0.948	-0.028	4d ⁴ 5s	³ G ² G	59
20060.84	19956	105	1.100	1.083	0.017	4d ⁴ 5s	¹ F ² F	29
22936.90	23042	-105	0.980	0.986	-0.006	4d ⁵	⁴ G	94
	24535			1.231		4d ⁴ 5s	³ F ⁴ F	69
	25814			1.151		4d ³ 5s ²	² F	36
	26911			1.385		4d ⁵	⁴ D	77
	27412			1.175		4d ⁴ 5s	³ F ² F	40
	29359			0.904		4d ⁴ 5s	¹ G ² G	54

Tablo 4.4 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	%
	30114			1.232		$4d^5$	4F	92
	33299			1.105		$4d^5$	2F	48
	33990			0.928		$4d^5$	2G	68
	36104			1.142		$4d^5$	2F	80
	41209			0.891		$4d^5$	2G	96
J = 9/2								
1050.26	991	59	1.549	1.553	-0.004	$4d^4 5s$	$^5D^6D$	98
2805.36	2824	-19	1.330	1.334	-0.004	$4d^3 5s^2$	4F	89
9328.88	9386	-57	1.103	1.102	0.001	$4d^3 5s^2$	2G	78
11044.08	11104	-60	0.984	0.989	-0.005	$4d^4 5s$	$^3H^4H$	91
12102.12	12054	48	0.930	0.924	0.006	$4d^3 5s^2$	2H	72
12357.7	12412	-54	1.230	1.254	-0.024	$4d^4 5s$	$^3F^4F$	40
13145.71	13233	-87	1.224	1.225	-0.001	$4d^4 5s$	$^3G^4G$	56
16828.52	16741	88	1.040	1.058	-0.018	$4d^4 5s$	$^1G^2G$	39
18035.97	18015	21	0.970	0.970	0.000	$4d^4 5s$	$^3H^2H$	59
19556.91	19601	-44	1.140	1.111	0.029	$4d^4 5s$	$^3G^2G$	78
23010.58	23075	-64	1.160	1.172	-0.012	$4d^5$	4G	95

Tablo 4.4 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	%
	24585			1.333		$4d^4 5s$	$^3F^4F$	77
	29129			1.122		$4d^4 5s$	$^1G^2G$	51
	30106			1.319		$4d^5$	4F	90
	30864			0.915		$4d^5$	2H	94
	34088			1.111		$4d^5$	2G	78
	41162			1.111		$4d^5$	2G	97
J = 11/2								
11247.88	11298	-50	1.120	1.140	-0.020	$4d^4 5s$	$^3H^4H$	94
12502.97	12407	96	1.100	1.092	0.008	$4d^3 5s^2$	2H	77
13012.20	13144	-132	1.260	1.264	-0.004	$4d^4 5s$	$^3G^4G$	89
17476.22	17381	95	1.010	0.973	0.037	$4d^4 5s$	$^1I^2I$	70
18332.04	18243	89		1.042		$4d^4 5s$	$^3H^2H$	58
23048.58	23072	-23	1.250	1.272	-0.022	$4d^5$	4G	94
	27036			0.927		$4d^5$	2I	97
	31035			1.088		$4d^5$	2H	94

Tablo 4.4 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	%
J = 13/2								
11524.65	11551	-26	1.220	1.230	-0.010	4d ⁴ 5s	³ H ⁴ H	99
17777.88	17657	121		1.078		4d ⁴ 5s	¹ I ² I	99
	27134			1.077		4d ⁵	² I	99

Tablo 4.5: Ab initio deęerleri ile birlikte çift pariteli $4d^4 6s$ ve $4d^3 5s6s$ konfigürasyonlarının ince yapı parametreleri

Parametreler	Bu çalışma (cm^{-1})		Ab initio (cm^{-1})	
	$4d^4 6s$	$4d^3 5s6s$	$4d^4 6s$	$4d^3 5s6s$
E_{AV}	54113 (161)	52730 (211)	22373	21384
$F^2(4d,4d)$	32124 ^a	37517 ^b	33839	36465
$F^4(4d,4d)$	20647 ^a	24298 ^b	21749	23616
ζ_{4d}	459*	501*	463	522
$G^2(4d,6s)$		10741*		10741
$G^2(4d,6s)$	1125*	802*	1125	802
$G^0(5s,6s)$		976*		976
α	128*	128*		
β				
$T(d^3)$	35*			
$R^2(d^2,ds)$	-10000*		-13079	
Serbest parametre sayısı	4			
Fit edilen seviye sayısı	11			
Standart sapma (cm^{-1})	1			

a: $F^2(4d,4d)$ ve $F^4(4d,4d)$ parametreleri her bir konfigürasyon içerisinde sabit oranda tutuldu. * ile gösterilen parametreler sabit tutulmuştur.

Tablo 4.6: Nb I elementinin çift pariteli $4d^4 6s$ ve $4d^3 5s6s$ konfigürasyonlarına ait Nist atomik spektra veri tablosuna göre deneysel E_{deney} ve g_{deney} değerleri ile hesaplanan E_{teorik} ve g_{teorik} değerleri, özvektör bileşenleri.

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	%
J = 1/2								
37410.17	37411	-0.83		3.315		$4d^4 6s$	$^5D^6D$	98
37871.30	37872	0.30		-0.666		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^6F$	99
	38571			0.022		$4d^4 6s$	$^5D^4D$	98
J = 3/2								
37578.72	37578	0.72		1.86		$4d^4 6s$	$^5D^6D$	98
38021.41	38021	0.41		1.062		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^6F$	99
	38836			1.208		$4d^4 6s$	$^5D^4D$	98
	39761			0.406		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^4F$	98
	44451			2.39		$4d^3 5s 6s$	$^4P^5P^6P$	98
J = 5/2								
37842.36	37842	0.36		1.655		$4d^4 6s$	$^5D^6D$	98
38276.59	38277	-0.41		1.311		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^6F$	98

Tablo 4.6 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Konfig.	Bileşenler Terim %
	39213			1.374		$4d^4 6s$	$^5D^4D$ 98
	40156			1.033		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^4F$ 97
	44623			1.877		$4d^3 5s 6s$	$^4P^5P^6P$ 96
$J = 7/2$							
	38177.65	-1.35		1.586		$4d^4 6s$	$^5D^6D$ 99
	38638.47	-0.53		1.395		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^6F$ 98
	39657			1.428		$4d^4 6s$	$^5D^4D$ 98
	40683			1.24		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^4F$ 97
	45117			1.715		$4d^3 5s 6s$	$^4P^5P^6P$ 100
$J = 9/2$							
	38567.85	0.85		1.555		$4d^4 6s$	$^5D^6D$ 99
	39100.73	0.73		1.434		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^6F$ 99
	41317			1.334		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^4F$ 97
$J = 11/2$							
	39648.67	-0.33		1.455		$4d^3 5s 6s$	$^4F^5F^6F$ 99

Tablo 4.7: Ab initio değerleri ile birlikte tek pariteli $4d^3 5s5p$, $4d^4 5p$, $4d^2 5s^2 5p$ ve $4d^3 5s6p$ konfigürasyonlarının ince yapı parametreleri (cm^{-1})

Parametreler	Bu çalışma				ab initio			
	$4d^3 5s5p$	$4d^4 5p$	$4d^2 5s^2 5p$	$4d^3 5s6p$	$4d^3 5s5p$	$4d^4$ 5p	$4d^2 5s^2 5p$	$4d^3 5s6p$
E_{AV}	36560 (37)	40092 (42)	43773 (135)	56640 (83)	22373	27625	31651	44066
$F^2(4d^2)$	39969 ^a	30224 ^a	34205 ^a	35649 ^a	35913	33177	38396	36500
$F^4(4d^2)$	18666 ^b	16624 ^b	22467 ^b	22773 ^b	23219	21280	24996	23641
ζ_{4d}	524 ^c	381 ^c	613 ^c	523 ^c	514	454	576	523
ζ_{5p}	625 ^d	820 ^d	864 ^d	89 ^d	471	314	659	88
$F^1(4d.5p)$	500 ^e							
$F^2(4d.5p)$	10402 ^f	8472 ^f	11003 ^f	1090 ^f	9630	8151	11151	1692
$G^2(4d.5s)$	11848 ^g			9853 ^g	9806			10618
$G^1(4d.5p)$	5398 ^h	4953 ^h	631 ^h	734 ^h	4792	4411	5158	678
$G^2(4d.5p)$	251 ^k	1003 ^k						
$G^3(4d.5p)$	893 ^m	1277 ^m	30830 ^m	898 ^m	3578	3132	4030	547
$G^1(5s.5p)$	16111 ⁿ			2323 ⁿ	19423			2034
α	37 ^p	8 ^p	16 ^p	7 ^p				
β	1461 ^r	1510 ^r	1529 ^r	655 ^r				
T (D 3)	2 ^t	2 ^t						
T2 (D 3)	35 ^v	35 ^v						

a, b, c, d, f, h, m, p, r ile gösterilen parametreler dört konfigürasyondaki karşılık gelen parametreler ile sabit oranda tutuldu. g, n ile gösterilen parametreler $4d^3 5s5p$ ve $4d^3 5s6p$ konfigürasyonlarında sabit oranda tutuldu. k, t, v ile gösterilen parametreler $4d^3 5s5p$ ve $4d^4 5p$ ile sabit oranda tutuldu. e ve g ile gösterilen parametreler sabit bırakıldı. y ile gösterilen parametreler sabit oranda tutuldu.

Tablo 4.7 (devam):

Parametreler	Bu çalışma	ab initio
$R^2(4d5s.4d^2)$	-13443 ^y	-12385
$R^2(5s5p.4d5p)$	-7500 ^y	-8916
$R^1(5s5p.5p4d)$	-8283 ^y	-9071
$R^2(4d^2.4d5s)$	-11638 ^y	-12203
$R^2(4d5p.5s5p)$	-7790 ^y	-9714
$R^1(4d5p.5p5s)$	-9011 ^y	-9873
$R0(4d5p.4d5p)$		0
$R2(4d5p.4d5p)$	3180 ^y	3131
$R1(4d5p.4d5p)$	1791 ^y	1763
$R3(4d5p.4d5p)$	1397 ^y	1375
$R0(5s5p.5s5p)$		0
$R1(5s5p.5s5p)$	5779 ^y	5690
$R^2(4d^2.5s^2)$	12751 ^y	12180
$R2(4d^2.4d5s)$		0
$R2(4d5p.5s5p)$	-2459 ^y	-2325
$R1(4d5p.5s5p)$	-3231 ^y	-3054
$R2(4d5s.4d^2)$		0
$R2(5s5p.4d5p)$	114 ^y	-2978
$R1(5s5p.4d5p)$	119 ^y	-3111
Serbest parametre sayısı	19	
Fit edilen seviye sayısı	286	
Standart sapma (cm ⁻¹)	171	

Tablo 4.8: Nb I elementinin tek pariteli $4d^3 5s5p$, $4d^4 5p$, $4d^2 5s^2 5p$ ve $4d^3 5s6p$ konfigürasyonlarına ait Nist atomik spektra veri tablosuna göre deneysel E_{deney} ve g_{deney} değerleri ile hesaplanan E_{teorik} ve g_{teorik} değerleri, özvektör bileşenleri.

$E_{\text{deney}} (cm^{-1})$	$E_{\text{teorik}} (cm^{-1})$	$\Delta E (cm^{-1})$	g_{deney}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
J = 1/2								
18791.09	18743	48	-0.373	-0.451	0.078	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 F$	67
19623.96	19614	10	3.010	2.934	0.076	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 D$	74
20107.36	20084	23	-0.020	0.171	-0.191	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 D$	38
22006.74	22162	-155	2.470	2.526	-0.056	$4d^4 5p$	$^5 D^4 P$	40
23984.87	23775	210	-0.601	-0.620	0.019	$4d^4 5p$	$^5 D^6 F$	88
23910.90	24160	-249	2.123	2.134	-0.011	$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^2 S$	25
25879.81	25925	-45	3.220	3.131	0.089	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 D$	64
26552.40	26323	229	2.441	2.142	0.299	$4d^4 5p$	$^5 D^6 D$	35
26717.73	26708	10	1.141	1.098	0.043	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 D$	14
27498.94	27113	386	2.467	1.893	0.574	$4d^4 5p$	$^5 D^6 D$	19
27666.46	27388	278	0.222	1.089	-0.867	$4d^4 5p$	$^5 D^4 D$	24
	28129			2.313		$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 P$	35
28442.16	28509	-67	0.772	0.941	-0.169	$4d^4 5p$	$^3 P^2 P$	19
	31706			0.045		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 D$	54

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
32066.06	32029	37	0.046	0.052	-0.006	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 D$	43
33011.45	33002	9	0.460	0.159	0.301	$4d^4 5p$	$^3 P^4 D$	22
	33184			0.838		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^2 P$	21
33902.24	33815	87	0.442	1.217	-0.775	$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^2 S$	28
34644.22	34637	7	2.050	1.117	0.933	$4d^3 5s5p$	$^4 P^3 P^2 P$	17
34807.57	34855	-47	2.080	2.328	-0.248	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 P$	34
	34981			0.274		$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	17
37536.56	37431	106	0.100	0.258	-0.158	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 D$	21
38182.96	38213	-30	0.564	0.433	0.131	$4d^3 5s5p$	$^2 P^1 P^2 P$	21
38730.16	38965	-235	2.550	2.475	0.075	$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^4 P$	27
	39878			0.508		$4d^4 5p$	$^3 P^4 D$	10
	40543			0.552		$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	11
41676.81	41019	658		1.854		$4d^4 5p$	$^3 D^4 P$	21
	41279			1.815		$4d^4 5p$	$^3 D^4 P$	26
	41680			0.996		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^2 S$	20
42324.31	41931	393		0.439		$4d^4 5p$	$^3 D^4 D$	23
	42618			-0.211		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 F$	87
	42805			2.811		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 D$	85

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
42801.67	43030	-228		0.238		$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 D$	26
	43467			0.548		$4d^3 5s5p$	$^2 P^1 P^2 P$	25
	44171			0.069		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 D$	27
	44873			2.015		$4d^3 5s5p$	$^4 P^3 P^2 S$	20
	45308			1.308		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 D^2 P$	14
	45460			1.284		$4d^3 5s5p$	$^4 P^3 P^2 S$	37
	45545			0.704		$4d^3 5s5p$	$^4 P^3 P^2 S$	19
46004.29	45930	74		2.517		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^4 P$	29
45978.84	46250	-271		0.036		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 D$	30
	47247			0.624		$4d^4 5p$	$^3 D^2 P$	14
	47991			0.363		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^4 D$	19
	48511			2.395		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 P$	33
	49390			0.878		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^2 P$	28
	49804			1.719		$4d^3 5s5p$	$^2 P^1 P^2 S$	24
	50086			3.314		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^6 D$	97
	50685			0.025		$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	30
	51729			0.110		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 D$	46

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
J = 3/2								
16672.00	16680	-8	0.000	0.004	-0.004	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 G$	98
19036.55	18988	49	1.145	1.118	0.027	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 F$	70
19765.18	19736	29	1.720	1.710	0.010	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 D$	67
20383.62	20403	-19	1.260	1.300	-0.040	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 D$	38
23006.86	23077	-70	1.610	1.683	-0.073	$4d^4 5p$	$^5 D^4 P$	51
23243.87	23257	-13	0.416	0.454	-0.038	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 F$	53
23525.80	23896	-370	0.898	0.996	-0.098	$4d^4 5p$	$^5 D^6 F$	66
24164.79	24255	-90	1.060	0.853	0.207	$4d^3 5s5p$	$^4 F^3 F^2 D$	23
24283.34	24619	-336	2.382	2.359	0.023	$4d^4 5p$	$^5 D^6 P$	48
25930.01	26033	-103	0.467	0.678	-0.211	$4d^4 5p$	$^5 D^4 F$	32
26067.06	26067	0	1.820	1.693	0.127	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 D$	54
26713.32	26622	91	1.450	1.580	-0.130	$4d^4 5p$	$^5 D^6 D$	42
26936.86	27072	-135	1.292	1.446	-0.154	$4d^4 5p$	$^5 D^4 D$	25
	27358			1.463		$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^4 D$	16
27782.57	27724	59	1.660	1.490	0.170	$4d^4 5p$	$^5 D^4 D$	21
27918.85	28022	-103	1.450	1.630	-0.180	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 P$	30
28208.48	28128	80	1.794	2.254	-0.460	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 P$	43
28278.25	28335	-57	1.981	1.497	0.484	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 P$	18

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
29622.73	29451	172	0.810	0.829	-0.019	$4d^3 5s5p$	$^4 F^3 F^2 D$	36
29779.44	29641	138	0.420	0.416	0.004	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 F$	39
31174.65	30996	179	1.957	1.969	-0.012	$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^4 S$	42
31551.46	31601	-50	0.501	0.559	-0.058	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 F$	27
31707.94	31738	-30	0.800	0.830	-0.030	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 D$	27
31907.74	31999	-91	0.791	0.751	0.040	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 D$	24
32248.69	32153	96	1.184	1.206	-0.022	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 D$	39
32623.02	32647	-24	1.000	0.985	0.015	$4d^3 5s5p$	$^4 P^3 P^2 P$	7
33086.98	33043	44	1.058	1.123	-0.065	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^2 P$	9
	33491			1.242		$4d^4 5p$	$^3 P^4 D$	16
33717.01	33710	7	1.230	1.536	-0.306	$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^4 S$	11
34252.96	34520	-267		1.618		$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^4 S$	18
34752.70	34751	2	0.948	0.970	-0.022	$4d^4 5p$	$^3 P^2 D$	15
34867.68	34941	-73	1.587	1.598	-0.011	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 P$	34
35119.65	35044	76	1.806	1.218	0.588	$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	18
35829.46	35658	171	0.834	0.824	0.010	$4d^4 5p$	$^3 F^2 D$	16
36016.26	36125	-109	1.195	0.551	0.644	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 S$	36
36371.05	36745	-374	1.948	1.972	-0.024	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 F$	24

Tablo 4.8 (devam):

E _{deneySEL} (cm ⁻¹)	E _{teorik} (cm ⁻¹)	ΔE (cm ⁻¹)	g _{deneySEL}	g _{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
37111.67	37505	-393	0.526	0.748	-0.222	4d ³ 5s5p	² F ³ F ⁴ F	11
37865.42	37829	36	0.900	1.195	-0.295	4d ³ 5s5p	² P ¹ P ² P	14
38446.78	38282	165	1.290	1.261	0.029	4d ³ 5s5p	⁴ F ⁵ F ⁴ D	20
38709.66	38629	81	1.660	1.704	-0.044	4d ² 5s ² 5p	³ F ⁴ F	46
38903.00	39009	-106	0.448	0.461	-0.013	4d ³ 5s5p	² P ³ P ⁴ P	25
	39450			0.787		4d ³ 5s5p	² F ³ F ² D	17
39981.20	40210	-229	0.450	0.424	0.026	4d ⁴ 5p	³ D ⁴ F	43
	40292			1.203		4d ⁴ 5p	³ P ⁴ D	16
41082.24	40994	88	1.380	1.444	-0.064	4d ⁴ 5p	³ D ⁴ P	32
	41138			0.863		4d ⁴ 5p	³ G ⁴ F	11
	41246			0.881		4d ⁴ 5p	³ D ⁴ F	17
41460.97	41496	-35	1.420	1.406	0.014	4d ³ 5s5p	² P ¹ P ² P	20
41554.86	41582	-27	0.556	0.958	-0.402	4d ² 5s ² 5p	³ F ² D	16
	41984			0.779		4d ³ 5s5p	² F ³ F ⁴ F	22
42339.56	42199	141		0.945		4d ⁴ 5p	³ D ⁴ D	21
	42469			0.108		4d ³ 5s6p	⁴ F ⁵ F ⁶ G	88
42473.21	42487	-14		0.811		4d ⁴ 5p	³ D ² D	23
	42764			1.148		4d ³ 5s6p	⁴ F ⁵ F ⁶ F	71

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
42894.24	42861	33		1.842		$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 S$	29
42900.07	43033	-133		1.644		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 D$	69
	43216			1.271		$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 D$	31
	43851			0.891		$4d^4 5p$	$^3 D^2 D$	26
44063.49	44132	-69	1.270	1.307	-0.037	$4d^3 5s5p$	$^2 P^1 P^2 P$	23
	44363			1.254		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 D$	22
44939.08	44918	21		1.365		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 D^2 P$	17
	45175			1.544		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^4 P$	18
	45569			1.230		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 D$	26
	45793			0.994		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 D^2 D$	20
	46123			1.497		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^4 P$	22
46170.04	46382	-212		0.925		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 D$	19
	46417			0.926		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^2 D$	10
46364.79	46663	-298		0.581		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 F$	46
	46914			0.440		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 F$	34
	47328			0.955		$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^2 D$	20
47537.67	47688	-150		1.217		$4d^4 5p$	$^3 D^2 P$	10
	48072			1.435		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 P$	17

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler			
						Konfig.	Terim	Yüzde	
	48569			1.450		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 P$	18	
	48991			0.466		$4d^4 5p$	$^3 F^4 F$	39	
	49456			1.269		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^2 P$	12	
	49672			1.041		$4d^4 5p$	$^3 F^2 D$	13	
	50134			1.914		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^6 D$	87	
	50314			2.230		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^6 P$	72	
	50455			1.802		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^4 S$	23	
	50639			0.982		$4d^3 5s5p$	$^2 D^1 D^2 D$	14	
	50754			1.082		$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	18	
	51176			0.814		$4d^3 5s6p$	$^4 F^3 F^2 D$	60	
	51450			1.520		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^4 S$	20	
	51552			0.925		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 F$	52	
	51699			1.117		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 F$	15	
J = 5/2									
	16981.01	16984	-3		0.859	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 G$	98	
	19427.90	19375	53	1.350	1.333	0.017	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 F$	78

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
19993.78	19976	18	1.560	1.590	-0.030	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 D$	68
20837.98	20889	-51	1.390	1.414	-0.024	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 D$	42
22647.03	22844	-197	0.578	0.581	-0.003	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 G$	47
23574.14	23572	2	1.061	1.057	0.004	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 F$	49
23684.44	23779	-95	1.477	1.555	-0.078	$4d^4 5p$	$^5 D^4 P$	49
24396.80	24260	137	1.306	1.293	0.013	$4d^4 5p$	$^5 D^6 F$	81
24543.13	24792	-249	1.874	1.860	0.014	$4d^4 5p$	$^5 D^6 P$	51
	25289			1.218		$4d^3 5s5p$	$^4 F^3 F^2 D$	21
26060.65	26140	-79	1.085	1.157	-0.072	$4d^4 5p$	$^5 D^4 F$	29
26386.36	26341	45	1.610	1.587	0.023	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 D$	55
26983.34	27011	-28	1.618	1.557	0.061	$4d^4 5p$	$^5 D^6 D$	51
27359.70	27420	-60	1.320	1.390	-0.070	$4d^4 5p$	$^5 D^4 D$	44
27614.10	27686	-72	1.370	1.582	-0.212	$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^4 P$	22
27797.44	28012	-215	1.160	1.387	-0.227	$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^4 D$	19
28549.42	28258	291	1.472	1.580	-0.108	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 P$	22
28445.33	28316	129	1.606	1.092	0.514	$4d^3 5s5p$	$^4 F^3 F^2 F$	15
28652.66	28504	149	1.768	1.730	0.038	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 P$	39
29359.58	29468	-108	0.693	0.743	-0.050	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 G$	14

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
29775.80	29670	106	1.348	1.196	0.152	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 S$	18
29987.45	29903	84	1.006	1.124	-0.118	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 F$	27
30059.60	30032	28		1.665		$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 S$	57
30716.50	30619	98	0.891	0.708	0.183	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 G$	31
31056.60	31143	-86	0.630	0.836	-0.206	$4d^3 5s5p$	$^4 F^3 F^2 F$	22
31933.68	31667	267	0.982	0.720	0.262	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 G$	16
31807.55	31865	-57	1.048	1.092	-0.044	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 D$	18
32139.78	32040	100	1.035	0.988	0.047	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 F$	33
32013.40	32070	-57	1.010	1.092	-0.082	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 D$	22
32545.52	32392	154	1.320	1.094	0.226	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 D$	16
32654.48	32446	208	0.830	1.232	-0.402	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 D$	25
33389.87	33290	100	1.212	1.236	-0.024	$4d^3 5s5p$	$^4 P^3 P^2 D$	12
33872.18	33926	-54	1.350	1.327	0.023	$4d^4 5p$	$^3 P^4 D$	21
34654.79	34750	-95	0.627	0.905	-0.278	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 G$	20
34703.70	34831	-127	1.550	1.311	0.239	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 P$	27
35099.86	35133	-33	0.868	1.386	-0.518	$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	15
	35277			0.800		$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 G$	12
35497.48	35347	150	1.160	1.181	-0.021	$4d^4 5p$	$^3 P^2 D$	17

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
	35706			1.114		$4d^3 5s5p$	$^2 P^1 D^2 D$	13
36180.13	36373	-193	1.316	0.920	0.396	$4d^4 5p$	$^3 G^2 F$	22
36866.60	36742	125	0.846	0.864	-0.018	$4d^4 5p$	$^3 G^2 F$	15
37188.28	36957	231	0.840	1.047	-0.207	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 F$	29
37286.62	37666	-379	0.964	0.838	0.126	$4d^4 5p$	$^3 G^4 G$	25
37814.64	37896	-81	0.876	0.968	-0.092	$4d^4 5p$	$^3 G^2 F$	12
38393.49	38504	-111	1.371	1.330	0.041	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 D$	30
38180.32	38631	-451	1.077	0.618	0.459	$4d^4 5p$	$^3 H^4 G$	21
38763.34	39034	-271	1.588	1.040	0.548	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^4 F$	48
39248.30	39220	28	0.973	1.560	-0.587	$4d^3 5s5p$	$^2 P^3 P^4 P$	18
	39383			1.125		$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^2 D$	13
39530.46	39507	23	0.610	0.693	-0.083	$4d^4 5p$	$^3 G^4 G$	20
40209.72	40429	-219	0.886	0.992	-0.106	$4d^4 5p$	$^3 D^4 F$	40
40473.90	40576	-102	1.290	1.305	-0.015	$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	16
40735.18	40907	-172	0.910	0.947	-0.037	$4d^4 5p$	$^3 D^2 F$	21
	41146			0.961		$4d^4 5p$	$^1 F^2 F$	18
	41228			1.405		$4d^4 5p$	$^3 D^4 P$	33
	41433			1.102		$4d^4 5p$	$^3 G^4 F$	18

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
41746.34	41657	89	1.250	1.149	0.101	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^2 D$	14
41829.11	41933	-104	0.860	0.784	0.076	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 G$	35
	42156			0.984		$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 G$	19
42316.90	42385	-68	1.210	1.282	-0.072	$4d^4 5p$	$^3 D^4 D$	24
42642.90	42574	69		0.953		$4d^4 5p$	$^3 F^2 F$	18
42719.18	42664	55	1.390	0.920	0.470	$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 G$	85
42888.84	42687	202		1.107		$4d^4 5p$	$^3 D^2 D$	27
43342.88	43025	318		1.325		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 F$	66
	43333			1.419		$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 D$	26
43187.00	43446	-259		1.519		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 D$	55
	43809			0.858		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^2 F$	29
	44021			1.216		$4d^4 5p$	$^3 P^2 D$	24
	44250			0.938		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 D^2 F$	25
44905.54	44660	246		1.313		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 D$	28
45297.30	45208	89	0.940	1.519	-0.579	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^4 P$	19
	45583			1.318		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 D$	23
46011.48	45698	313		0.595		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 G$	70
	45970			1.276		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 D^2 D$	23

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
	46224			1.339		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^4 P$	13
46509.80	46355	155		0.953		$4d^3 5s5p$	$^2 F^1 F^2 F$	21
	46480			1.040		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^2 F$	11
46543.56	46708	-164		1.216		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^2 D$	15
	46747			1.225		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 D$	21
46812.58	46986	-173		1.046		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 F$	28
46919.48	47056	-137		1.121		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 F$	38
	47842			1.220		$4d^3 5s5p$	$^2 P^1 D^2 D$	18
	48140			1.521		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 P$	25
	48527			0.904		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 G^2 F$	18
	48792			1.100		$4d^4 5p$	$^3 F^4 G$	14
	48852			0.982		$4d^4 5p$	$^3 F^4 G$	17
	49186			0.979		$4d^4 5p$	$^3 F^4 F$	17
	49590			1.106		$4d^4 5p$	$^3 F^2 D$	13
	50217			1.734		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^6 D$	64
	50344			1.861		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^6 S$	46
	50558			1.009		$4d^4 5p$	$^3 F^2 F$	11
	50593			1.178		$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	12

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
	50783			1.242		$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	17
	50838			1.921		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^6 P$	48
	51146			0.619		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 G$	83
	51452			0.982		$4d^3 5s6p$	$^4 F^3 F^2 F$	33
	51600			1.131		$4d^3 5s6p$	$^4 F^3 F^2 F$	13
$J = 7/2$								
17405.32	17400	5		1.144		$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 G$	99
19916.69	19848	69	1.390	1.399	-0.009	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 F$	88
20315.74	20351	-35	1.550	1.566	-0.016	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 D$	76
21512.18	21576	-64	1.440	1.441	-0.001	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 D$	50
23022.56	23203	-180	0.980	0.992	-0.012	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 G$	47
24015.11	23994	21	1.243	1.252	-0.009	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 F$	45
24769.91	24676	94	1.380	1.375	0.005	$4d^4 5p$	$^5 D^6 F$	79
24904.86	25047	-142	1.703	1.705	-0.002	$4d^4 5p$	$^5 D^6 P$	57
26165.79	26130	36	1.245	1.286	-0.041	$4d^4 5p$	$^5 D^4 F$	34
26832.43	26775	57	1.248	1.533	-0.285	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 D$	47

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
	27260			0.740		$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 H$	54
27427.07	27326	101	1.567	1.482	0.085	$4d^4 5p$	$^5 D^6 D$	22
27596.74	27643	-46	1.422	1.508	-0.086	$4d^4 5p$	$^5 D^6 D$	29
27855.13	28151	-296	0.920	0.877	0.043	$4d^3 5s5p$	$^4 F^3 F^2 G$	32
28535.36	28616	-81	1.120	1.501	-0.381	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 P$	26
28973.12	28801	172	1.701	1.583	0.118	$4d^4 5p$	$^5 D^6 P$	33
29209.42	29338	-129	1.241	1.170	0.071	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^2 F$	14
29271.99	29522	-250	0.890	0.765	0.125	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 H$	34
29762.70	29882	-119	0.999	0.999	0.000	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 G$	12
30161.56	30127	35	1.180	1.145	0.035	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 F$	25
31025.52	31041	-15	1.139	1.046	0.093	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 G$	26
31485.20	31444	41	1.012	1.112	-0.100	$4d^3 5s5p$	$^4 F^3 F^2 F$	28
31800.74	31756	45	0.906	0.975	-0.069	$4d^3 5s5p$	$^4 F^3 F^2 G$	14
31973.24	31972	1	1.343	1.071	0.272	$4d^3 5s5p$	$^2 G^1 G^2 G$	14
32087.58	32086	2	1.074	1.245	-0.171	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 D$	23
32451.99	32212	240	1.115	1.000	0.115	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^4 G$	22
32501.33	32295	206	1.060	1.194	-0.134	$4d^4 5p$	$^3 H^2 G$	12
32333.18	32437	-104	1.199	1.163	0.036	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 F$	31

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
33003.89	32794	210	1.341	1.318	0.023	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^4 D$	23
32899.08	32825	74	1.170	1.240	-0.070	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 F$	13
34168.94	34104	65	1.390	1.016	0.374	$4d^3 5s5p$	$^2 G^1 G^2 G$	17
34319.09	34243	76	0.870	1.293	-0.423	$4d^4 5p$	$^3 P^4 D$	20
34853.50	34887	-34	1.000	1.094	-0.094	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 G^4 G$	16
35178.82	35256	-77	1.117	1.114	0.003	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 G^4 G$	22
	35422			1.336		$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	16
	35948			0.706		$4d^4 5p$	$^3 G^4 H$	34
36048.10	36018	30	0.925	0.901	0.024	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^2 G$	15
36460.34	36459	1	0.691	1.133	-0.442	$4d^4 5p$	$^3 G^2 F$	29
37343.50	37168	176	1.058	1.206	-0.148	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 F$	27
37539.67	37360	180	1.172	1.073	0.099	$4d^4 5p$	$^3 G^4 G$	17
37624.53	37648	-23	0.706	0.721	-0.015	$4d^4 5p$	$^3 G^4 H$	36
38231.85	37889	343	1.111	1.061	0.050	$4d^4 5p$	$^3 G^4 G$	25
	38531			0.885		$4d^4 5p$	$^3 G^2 G$	35
38982.20	38869	113	1.010	1.001	0.009	$4d^4 5p$	$^3 H^4 G$	17
38854.14	38965	-111		1.382		$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 D$	30
39426.84	39341	86	1.305	1.038	0.267	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^2 G$	19

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
39620.13	39600	20	1.094	1.114	-0.020	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^4 F$	28
39885.66	39909	-23	1.085	0.998	0.087	$4d^4 5p$	$^3 G^4 G$	15
40362.00	40483	-121	1.129	1.188	-0.059	$4d^4 5p$	$^1 G^2 F$	17
40555.28	40858	-303	1.089	1.257	-0.168	$4d^4 5p$	$^3 D^4 F$	45
40953.36	41104	-151	1.367	1.322	0.045	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 D$	11
41571.61	41409	163		1.168		$4d^4 5p$	$^3 D^2 F$	12
	41589			0.952		$4d^4 5p$	$^3 F^2 G$	16
41930.87	41766	165	1.186	1.186	0.000	$4d^4 5p$	$^3 G^4 F$	25
41987.35	41989	-2	1.135	1.112	0.023	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 G$	30
42551.56	42383	169	1.450	1.230	0.220	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 G$	22
	42533			1.271		$4d^4 5p$	$^3 D^4 D$	20
	42830			1.087		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^2 F$	20
43173.00	42954	219	1.220	1.180	0.040	$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 G$	84
43414.44	43189	225		0.970		$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^2 G$	13
43332.66	43395	-62		1.390		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 F$	70
43553.17	43598	-45		1.422		$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 D$	34
43880.22	43893	-13		1.547		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 D$	79
	44182			1.127		$4d^4 5p$	$^1 D^2 F$	12

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
	44569			1.090		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 D^2 F$	20
	44684			1.018		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^2 F$	15
45170.90	45137	34		1.379		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 D$	27
45719.07	45548	171	0.840	1.380	-0.540	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 D$	24
46470.71	46045	426		0.993		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 G$	71
	46404			1.180		$4d^3 5s5p$	$^2 F^1 F^2 F$	21
	46808			1.185		$4d^4 5p$	$^3 F^2 F$	13
46932.06	47095	-163		1.204		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 F$	26
47022.78	47252	-229		1.323		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 F$	25
47275.64	47524	-248		1.300		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 F$	33
	47754			0.929		$4d^3 5s5p$	$^2 G^1 G^2 G$	17
	48577			1.171		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 G^2 F$	15
	48900			1.115		$4d^4 5p$	$^3 F^4 G$	30
	49041			1.345		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 P^4 D$	25
	49528			1.153		$4d^4 5p$	$^3 F^4 F$	29
	50386			1.594		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^6 D$	65
	50528			1.322		$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	18
	50878			1.678		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^6 P$	72

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
	51000			1.150		$4d^4 5p$	$^3 F^4 D$	9
	51174			0.992		$4d^4 5p$	$^1 F^2 G$	18
	51345			0.947		$4d^3 5s6p$	$^4 F^3 F^2 G$	43
	51707			0.979		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 G$	50
J = 9/2								
17937.26	17918	19		1.273		$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 G$	99
20432.11	20348	84	1.440	1.430	0.010	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 F$	91
20733.88	20847	-113	1.540	1.551	-0.011	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 D$	84
23536.77	23701	-164	1.150	1.178	-0.028	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 G$	47
24506.53	24467	40	1.336	1.341	-0.005	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 F$	40
25199.81	25163	37	1.427	1.418	0.009	$4d^4 5p$	$^5 D^6 F$	78
26440.33	26300	140	1.334	1.363	-0.029	$4d^4 5p$	$^5 D^4 F$	29
27419.62	27322	98	1.422	1.509	-0.087	$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 D$	39
27974.87	27750	225	1.542	0.996	0.546	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 H$	61
	28085			1.536		$4d^3 5s5p$	$^4 P^5 P^6 D$	53
28433.74	28623	-189	1.120	1.119	0.001	$4d^3 5s5p$	$^4 F^3 F^2 G$	33

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
29519.05	29773	-254	1.010	1.034	-0.024	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 H$	33
30117.32	30120	-3	1.276	1.280	-0.004	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 F$	41
30279.23	30382	-103	1.200	1.152	0.048	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 G$	22
30940.02	31187	-247		0.881		$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 I$	27
32004.63	31713	292	1.160	1.160	0.000	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 G$	37
32213.94	32148	66	1.092	0.915	0.177	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 I$	29
32156.00	32246	-90	0.835	1.023	-0.188	$4d^3 5s5p$	$^2 G^1 G^2 G$	16
32605.39	32549	56	1.216	1.246	-0.030	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 F$	18
32802.44	32689	113	1.210	1.174	0.036	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^4 G$	25
32923.87	32830	94	1.240	1.207	0.033	$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 F$	26
33136.30	33221	-85	1.240	1.272	-0.032	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 F$	21
34235.04	34114	121	1.100	1.111	-0.011	$4d^3 5s5p$	$^2 G^1 G^2 G$	26
34415.52	34280	136	0.819	0.798	0.021	$4d^4 5p$	$^3 H^4 I$	37
35156.94	35226	-69	1.073	0.986	0.087	$4d^4 5p$	$^3 H^2 H$	18
35496.39	35508	-12	0.954	1.051	-0.097	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 G^4 G$	27
	35986			0.963		$4d^3 5s5p$	$^2 H^1 H^2 H$	13
36333.70	36245	89	1.086	1.012	0.074	$4d^4 5p$	$^3 H^4 H$	16
36717.11	36500	217	0.970	1.023	-0.053	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^2 G$	10

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
37523.53	37480	44	1.190	1.321	-0.131	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 F$	33
37831.58	37659	173	1.260	1.147	0.113	$4d^4 5p$	$^3 G^4 G$	40
37866.06	37967	-101	0.992	0.997	-0.005	$4d^4 5p$	$^3 G^4 H$	41
38448.77	38273	176	0.936	0.932	0.004	$4d^3 5s5p$	$^2 H^1 H^2 H$	23
	38783			1.092		$4d^4 5p$	$^3 G^2 G$	34
39380.77	39075	306	1.100	1.138	-0.038	$4d^4 5p$	$^3 H^4 G$	18
39637.83	39572	66	1.040	1.033	0.007	$4d^4 5p$	$^3 G^2 H$	19
39845.51	39663	183		1.093		$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^2 G$	19
40008.52	40142	-133	1.108	1.268	-0.160	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^4 F$	29
40421.93	40432	-10	1.228	1.167	0.061	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^4 G$	16
	41219			0.989		$4d^4 5p$	$^3 H^2 H$	15
40921.15	41375	-454	1.243	1.312	-0.069	$4d^4 5p$	$^3 D^4 F$	49
41895.67	41808	88		1.240		$4d^4 5p$	$^3 G^4 F$	23
42193.70	42045	149	1.150	1.141	0.009	$4d^4 5p$	$^3 F^2 G$	10
	42289			1.245		$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 G$	25
	42716			1.245		$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 G$	35
43395.80	43231	165	1.280	1.121	0.159	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^2 G$	17
	43342			1.292		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 G$	87

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
	43863			1.425		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 F$	79
	44464			1.545		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 D$	91
	44889			1.067		$4d^4 5p$	$^1 G^2 G$	11
45110.13	45209	-99		0.956		$4d^4 5p$	$^1 I^2 H$	25
46724.20	46510	214		1.175		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 G$	72
46954.40	46935	19		1.005		$4d^3 5s5p$	$^2 H^1 H^2 H$	19
47146.06	47096	50		1.252		$4d^3 5s5p$	$^2 D^3 D^4 F$	35
47680.59	47936	-255		1.329		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 F$	59
48242.44	48319	-77	1.100	1.095	0.005	$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^2 G$	18
	49120			1.231		$4d^4 5p$	$^3 F^4 G$	29
	49653			1.259		$4d^4 5p$	$^3 F^4 F$	29
	50426			0.935		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 G^2 H$	37
	50888			1.555		$4d^3 5s6p$	$^4 P^5 P^6 D$	99
	51649			1.109		$4d^4 5p$	$^3 F^2 G$	25
51788.30	51960	-172		1.127		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 G$	25

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
J = 11/2								
18568.18	18529	39		1.343		$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 G$	99
20939.92	20869	71		1.449		$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 F$	90
24203.05	24356	-153	1.250	1.277	-0.027	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 G$	49
25680.36	25741	-61	1.450	1.454	-0.004	$4d^4 5p$	$^5 D^6 F$	93
	28264			1.135		$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 H$	66
29846.50	30099	-253	1.150	1.143	0.007	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 H$	39
30657.60	30835	-177	1.250	1.258	-0.008	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 G$	28
31378.58	31629	-250		1.084		$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^2 H$	27
32382.24	32246	136	0.993	1.206	-0.213	$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^4 G$	28
32572.72	32435	138	1.240	1.048	0.192	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 I$	37
33428.20	33370	58	1.270	1.265	0.005	$4d^2 5s^2 5p$	$^3 F^4 G$	27
34004.08	34126	-122	0.946	0.933	0.013	$4d^4 5p$	$^3 H^2 I$	61
34838.33	34717	121	1.010	1.013	-0.003	$4d^4 5p$	$^3 H^4 I$	41
35344.86	35302	43	1.125	1.073	0.052	$4d^4 5p$	$^3 H^2 H$	27
35630.62	35694	-63	1.160	1.247	-0.087	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 G$	48
36275.77	36291	-15	1.140	1.110	0.030	$4d^4 5p$	$^3 G^4 H$	15
36976.10	36678	298	1.150	1.114	0.036	$4d^4 5p$	$^3 H^4 H$	22
37760.60	37751	10	1.250	1.252	-0.002	$4d^4 5p$	$^3 G^4 G$	39

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
38143.76	38241	-97	1.089	0.959	0.130	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^2 I$	46
38251.28	38325	-74	0.970	1.139	-0.169	$4d^4 5p$	$^3 G^4 H$	51
39020.81	38784	237	1.084	1.078	0.006	$4d^3 5s5p$	$^2 H^1 H^2 H$	27
	39403			1.233		$4d^4 5p$	$^3 G^4 G$	20
40003.00	39822	181	1.152	1.124	0.028	$4d^4 5p$	$^3 G^2 H$	30
40481.96	41018	-536	1.180	1.109	0.071	$4d^4 5p$	$^1 I^2 I$	29
41371.17	41204	167	1.250	1.109	0.141	$4d^4 5p$	$^1 I^2 I$	27
	41994			1.065		$4d^4 5p$	$^3 H^2 H$	22
	42821			1.272		$4d^3 5s5p$	$^2 F^3 F^4 G$	64
	43821			1.350		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 G$	92
	44408			1.446		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 F$	92
45259.03	45064	195	1.090	1.083	0.007	$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^2 H$	29
	46425			0.950		$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^2 I$	47
47080.83	47075	6		1.271		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^4 G$	73
47155.22	47372	-217	1.000	1.076	-0.076	$4d^3 5s5p$	$^2 H^1 H^2 H$	26
	49681			1.268		$4d^4 5p$	$^3 F^4 G$	53
	51274			1.097		$4d^2 5s^2 5p$	$^1 G^2 H$	42

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
J = 13/2								
19291.57	19221	71		1.385		$4d^3 5s5p$	$^4 F^5 F^6 G$	99
	28817			1.230		$4d^3 5s5p$	$^2 G^3 G^4 H$	66
30191.25	30428	-237	1.230	1.228	0.002	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 H$	42
32672.39	32703	-31	1.080	1.110	-0.030	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^4 I$	69
34323.20	34252	71	1.080	1.081	-0.001	$4d^4 5p$	$^3 H^2 I$	61
35336.77	35312	25	1.150	1.110	0.040	$4d^4 5p$	$^3 H^4 I$	67
37254.41	36891	363	1.230	1.221	0.009	$4d^4 5p$	$^3 H^4 H$	36
38583.04	38547	36	1.090	1.109	-0.019	$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^2 I$	39
38513.85	38758	-244	1.210	1.204	0.006	$4d^4 5p$	$^3 G^4 H$	49
	39733			0.942		$4d^4 5p$	$^1 I^2 K$	94
	41474			1.071		$4d^4 5p$	$^1 I^2 I$	69
	44382			1.384		$4d^3 5s6p$	$^4 F^5 F^6 G$	99
	46951			1.077		$4d^3 5s5p$	$^2 H^3 H^2 I$	54

Tablo 4.8 (devam):

E_{deneysel} (cm^{-1})	E_{teorik} (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	g_{deneysel}	g_{teorik}	Δg	Bileşenler		
						Konfig.	Terim	Yüzde
J = 15/2								
33116.36	33186	-70	1.190	1.200	-0.010	4d ³ 5s5p	² H ³ H ⁴ I	73
35731.34	35755	-24	1.240	1.200	0.040	4d ⁴ 5p	³ H ⁴ I	73
	40678			1.068		4d ⁴ 5p	¹ I ² K	99
	56519			1.200		4d ³ 5s6p	² H ³ H ⁴ I	100

Tablo 4.9: Nötral Nb I elementine ait Elektrik Dipol Geçiş Olasılıkları ($10^8/\text{sec}$)

$\lambda_{\text{vakum}} (\text{Å})$	Konfigürasyon E_i	Konfigürasyon E_k	Geçiş Olasılığı				
			g_i	g_k	Bu Çalışma	Referans [21]	Referans [20]
3069.02	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4D$	4	4	0.093	0.074	
3096.49	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4D$	6	6	0.075	0.098	
3111.44	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4D$	6	4	0.229	0.203	
3122.65	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4D$	8	8	0.062	0.063	
3136.97	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4D$	4	2	0.175	0.122	
3151.86	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4D$	8	6	0.106	0.152	
3294.25	$4d^35s^{24}F$	$4d^45p^4G$	8	8	0.057	0.035	
3332.70	$4d^35s^{24}F$	$4d^45p^4G$	10	10	0.012	0.024	
3341.97	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4G$	4	6	1.808		
3343.71	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4G$	6	8	1.528		
3349.06	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4G$	8	10	2.474		
3358.42	$4d^35s^{24}F$	$4d^35s5p^4G$	10	12	1.916		
3481.04	$4d^35s^{24}P$	$4d^35s5p^4D$	2	4	0.106	0.079	
3498.65	$4d^35s^{24}P$	$4d^35s5p^4D$	4	6	0.296	0.293	
3517.76	$4d^35s^{24}P$	$4d^35s5p^4D$	4	4	0.141	0.139	
3535.30	$4d^45s^6D$	$4d^35s5p^6P$	8	8	0.759		
3535.30	$4d^45s^6D$	$4d^35s5p^6P$	2	4	0.925		

Tablo 4.9 (devam):

$\lambda_{\text{vakum}} (\text{\AA})$	Konfigürasyon E_i	Konfigürasyon E_k	Geçiş Olasılığı $a_{ik} (10^{-8})$				
			g_i	g_k	Bu Çalışma	Referans [21]	Referans [20]
3544.65	$4d^35s^24P$	$4d^35s5p^4D$	6	8	0.458	0.514	
3568.72	$4d^35s^24P$	$4d^35s5p^4D$	2	2	0.205	0.228	
3575.85	$4d^45s^6D$	$4d^35s5p^6P$	8	6	1.259		
3580.27	$4d^45s^6D$	$4d^35s5p^6P$	10	8	1.868		
3582.34	$4d^35s^24P$	$4d^35s5p^4D$	6	6	0.083	0.074	
3739.80	$4d^45s^6D$	$4d^45p^6D$	8	8	0.694		0.590
3972.36	$4d^45s^4D$	$4d^35s5p^4D$	4	6	0.028	0.022	
4058.94	$4d^45s^6D$	$4d^45p^6F$	10	12	1.900		1.280
4079.73	$4d^45s^6D$	$4d^45p^6F$	8	10	0.919		0.990
4100.92	$4d^45s^6D$	$4d^45p^6F$	6	8	0.774		0.760
4123.81	$4d^45s^6D$	$4d^45p^6F$	4	6	0.571		0.580
4152.58	$4d^45s^6D$	$4d^45p^6F$	8	8	0.694		0.380
4163.66	$4d^45s^6D$	$4d^45p^6F$	4	4	0.910		0.650
4164.66	$4d^45s^6D$	$4d^45p^6F$	6	6	0.780		0.500
4168.13	$4d^45s^6D$	$4d^45p^6F$	2	2	1.224		0.910
4258.91	$4d^35s^22G$	$4d^45p^4G$	10	10	0.018	0.012	
4564.19	$4d^45s^4H$	$4d^45p^4G$	14	12	0.077	0.028	
4638.09	$4d^45s^4H$	$4d^45p^4G$	12	10	0.026	0.032	
4744.64	$4d^45s^4G$	$4d^45p^4G$	10	12	0.067	0.115	

Tablo 4.9 (devam):

$\lambda_{\text{vakum}} (\text{\AA})$	Konfigürasyon E_i	Konfigürasyon E_k	Geçiş Olasılığı $a_{ik} (10^{-8})$				
			g_i	g_k	Bu Çalışma	Referans [21]	Referans [20]
4837.61	$4d^45s^4G$	$4d^45p^4G$	8	10	0.057	0.066	
4880.72	$4d^45s^4G$	$4d^45p^4G$	6	8	0.077	0.075	
4900.78	$4d^35s^{22}H$	$4d^45p^4G$	10	8	0.045	0.065	
4924.86	$4d^35s^{22}H$	$4d^45p^4G$	12	10	0.016	0.016	
4928.99	$4d^45s^4F$	$4d^45p^4G$	10	12	0.067	0.056	
4976.74	$4d^45s^4P$	$4d^35s5p^4D$	2	4	0.027	0.027	
5043.99	$4d^45s^4F$	$4d^45p^4G$	8	10	0.020	0.031	
5046.75	$4d^45s^4F$	$4d^45p^4G$	6	8	0.071	0.059	
5125.28	$4d^45s^4P$	$4d^35s5p^4D$	4	4	0.037	0.032	
5706.15	$4d^45s^4D$	$4d^45p^4G$	8	10	0.040	0.025	

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Nötral Niyobyum elementinin ince yapı analizi, çift ve tek pariteye sahip konfigürasyonlar için ayrı ayrı çok-konfigürasyon fit metodu ile Cowan [2] programı kullanılarak yapıldı. Çift pariteye sahip konfigürasyonların fit işleminin, enerji seviye aralıkları göz önüne alınarak iki ayrı grupta yapılması uygun görüldü. Tablo 4.2’de görüldüğü gibi $4d^25s$, $4d^35s^2$ çift pariteli konfigürasyonlarının enerji değerleri birbiri içine geçmiş ve $4d^5$ çift pariteli konfigürasyonunun enerji değeri bu iki konfigürasyonun enerji değerine çok yakın yerleşmiştir. Benzer şekilde $4d^46s$ ve $4d^35s6s$ çift pariteli konfigürasyonlarına ait ince yapının parametrik analizi ayrı bir grupta ele alındı. $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^25s^25p$ ve $4d^35s6p$ tek pariteli konfigürasyonların enerjileri çakışık olduğu için bu dört konfigürasyon birlikte fit işlemine alındı.

Çift pariteli $4d^45s$, $4d^35s^2$, $4d^5$ konfigürasyonların ince yapı analizinde 62 deneysel enerji değeri kullanılarak multi-konfigürasyonlu fit işlemi yapılmıştır. Yapılan fit işlemi sonucunda $4d^45s$ konfigürasyonu için 59 tane, $4d^35s^2$ konfigürasyonu için 18 tane ve $4d^5$ konfigürasyonu için ise 42 tane teorik ince yapı enerji seviyesi önerildi. Teorik olarak önerilen toplam enerji sayısı 119’dur. İnceleme süresince ortalama enerji E_{av} tüm konfigürasyonlar için serbest bırakılmıştır. Diğer taraftan F^2 , F^4 ve ζ_{4d} parametreleri konfigürasyonlar arası uygun parametreler ile eşitlik 4.1’e uygun olacak şekilde sabit oranda tutulmuştur. Benzer şekilde F^2 ve ζ_{4d} parametreleri konfigürasyonlar arası uygun parametreler ile eşitlik 4.2’ye uygun şekilde sabit oranda tutulmuştur.

Çift pariteye sahip $4d^45s$, $4d^35s^2$ ve $4d^5$ konfigürasyonları incelenirken F^2 ve F^4 parametre değerleri bu üç konfigürasyondaki aynı parametre değerleri ile sabit tutuldu. Bu çalışmadan önce gerçekleştirilen iki referans çalışmasından farklı olarak beta parametresi fit işlemine alındı. Ancak beta parametresi sadece $4d^45s$, $4d^35s^2$ konfigürasyonları arasında sabit tutulurken $4d^5$ konfigürasyonu için bu parametreye herhangi bir değer verilmedi. Bu üç konfigürasyona ait ortalama enerji ve parametre standart sapmalarının düşüşü için bu çalışmada ilk kez $4d^5$

konfigürasyonundaki T değerine sabit bir değer verildi. Buna ek olarak, $4d^45s$ konfigürasyonu için $G^2(4d,5s)$ parametresinin standart sapmasının önemli ölçüde düşüşü gerçekleştirildi. Özellikle ζ_{4d} parametresinin her üç konfigürasyon için serbest bırakılması özellikle $4d^45s$ ve $4d^35s^2$ konfigürasyonlarındaki parametre standart sapmasını önemli ölçüde düşürdü. Sonuç olarak her bir konfigürasyona ait ortalama enerji sapma değerlerinde ve parametre standart sapma değerlerinde daha önce gerçekleştirilen iki referans çalışmaya kıyasla ciddi bir düşüş meydana geldiği görüldü. En küçük kareler yöntemi ile fit edilen en iyi enerji değerleri deneysel enerji değerleri ile uyumlu bir görüntü çizdi. Bu üç konfigürasyonlu sistemde hiçbir seviye fit işlemi dışında tutulmadı ve deneysel ve teorik enerji değerleri arasında çok yakın bir uyum elde edildi.

Çift pariteye sahip konfigürasyonlarının multi-konfigürasyon fit işleminin ikinci kısmı $4d^46s$ ve $4d^35s6s$ konfigürasyonları ile gerçekleştirildi. Çift pariteli $4d^46s$ ve $4d^35s6s$ konfigürasyonların ince yapı analizinde 11 deneysel enerji değeri kullanılarak multi-konfigürasyonlu fit işlemi yapılmıştır. Yapılan fit işlemi sonucunda $4d^46s$ konfigürasyonu için 9 tane, $4d^35s6s$ konfigürasyonu için 13 tane teorik ince yapı enerji seviyesi önerildi. Teorik olarak önerilen toplam enerji sayısı 22'dir. İnceleme süresince ortalama enerji E_{av} tüm konfigürasyonlar için serbest bırakılmıştır.

Deneysel enerji ve Landé g değeri bilinmeyen 12 adet seviye için ilk kez bu çalışmada teorik bir enerji ve Landé g değeri önerildi. Buna ek olarak ince yapı parametrelerine ait standart sapmanın 1 cm^{-1} oranında gerçekleşmesinin temel nedeni F^2 ve F^4 parametre değerleri bu iki konfigürasyondaki aynı parametre değerleri ile sabit tutulmasıdır.

En küçük kareler yöntemi ile fit edilen en iyi enerji değerleri deneysel verilerle iyi bir uyum elde edildi. Deneysel ve teorik enerji değerleri arasında elde edilen uyumun korunması için 39028.74 cm^{-1} seviyesi multi-konfigürasyon işlemine alınmadı.

Niobyum elementinin tek pariteli $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^25s^25p$ ve $4d^35s6p$ konfigürasyonları enerji seviyelerindeki çakışık durum dikkate alınarak aynı grup içerisinde gerçekleştirildi. Tek pariteye sahip $4d^35s6p$ konfigürasyonun multi-konfigürasyon fit işlemi ile incelenmesi ilk kez gerçekleştirildiği bu çalışmada ince

yapı analizi 286 deneysel enerji değeri kullanılarak yapıldı. Yapılan fit işlemi sonucunda $4d^35s5p$ konfigürasyonu için 200 tane, $4d^45p$ konfigürasyonu için 141 tane, $4d^25s^25p$ konfigürasyonu için 36 tane ve $4d^35s6p$ konfigürasyonu için 54 tane teorik ince yapı enerji seviyesi önerildi. Teorik olarak önerilen toplam enerji sayısı 431'dir. İnceleme süresince ortalama enerji E_{av} , tüm konfigürasyonlar için serbest bırakılmıştır.

Konfigürasyonlar arası parametre değerlerinin uyumu göz önüne alınarak $F^2(4d,4d)F^2(4d,4d)$, $F^4(4d,4d)$ $F^4(4d,4d)$ ve $F^2(4d,5p)$, ζ_{4d} ve ζ_{5p} ve $G^l(4d,5p)$ parametre değerleri aynı parametre değerleri ile sabit tutuldu. Buna ek olarak, $G^2(4d,5s)$ ve $G^l(5s,5p)$ parametreleri $4d^35s5p$ ve $4d^35s6p$ konfigürasyonlarındaki aynı parametre değerleri ile sabit tutuldu. Diğer taraftan ortalama enerji ve parametre standart sapmalarının ciddi bir düşüşünün gerçekleştirilmesi için α ve β parametre değerlerine bu dört konfigürasyon için sabit bir değer verildi.

İlk kez bu çalışmada tek pariteli $4d^35s5p$, $4d^45p$, $4d^25s^25p$ ve $4d^35s6p$ konfigürasyonlarının 52000 cm^{-1} düzeyine kadar olan deneysel enerji seviyeleri fit işlemine dahil edildi. 41676.81 ve 40481.96 cm^{-1} seviyeleri dışında en küçük kareler yöntemi ile elde edilen en iyi enerji değerlerinin deneysel enerji değerleri ile iyi bir uyum sağlandığı gözlemlendi .

Tek ve çift pariteye sahip konfigürasyonların ince yapı parametrik analizi sonucu elde edilen parametreler alınarak Cowan programında diğer bir hesaplama yapıldı ve 3069.02 \AA ile 5706.15 \AA dalgaboyu aralığında, 46 seviyeiçingeçiş olasılıkları belirlendi. Elde edilen sonuçlar literatürdeki [21], [20] verileriyle karşılaştırılarak uyum içinde oldukları belirlendi. Bu uyum, çalışmanın amacı olan ince yapı parametre hesabından elde edilen parametre değerlerinin doğru olarak hesaplandığını gösterdi. İncelenen bölgede 8 adet teorik geçiş olasılığı ilk defa bu çalışmada verildi.

KAYNAKLAR

- [1]. Aygün, E., Zengin, D.M., 1998, Atom ve Molekül Fiziği Fiziği, Bilim Yayınları, Ankara, 975-95625-0-2.
- [2]. Cowan, R.D., 1981, The Thoery of Atomic Structure and Spectra, Berkeley, Los Angeles, London: University of California Press, 0-520-03821-5. <ftp://plasma-gate.weizmann.ac.il/pub/software/dos/cowan>.
- [3]. Ballard, S.S., 1934, The Nuclear Moments of Columbium from Hyperfine Structure, Physical Review, Vol.46, 806-811.
- [4]. Meeks, W.W., Fisher, R.A., 1947, Hyperfine Structure and Nuclear Moments of Columbium, Physical Review, Vol.72, 451-455.
- [5]. Murakawa, K., 1955, Nuclear Moments of Nb⁹³, La¹³⁹ Os¹⁸⁷, and Hg²⁰¹, Physical Review, Vol.98, 1285-1288.
- [6]. Moore, Atomic Energy Levels, 1971, Vol. II (NSRDS-NBS 35)
- [7]. Humphreys, C., J., Meggers, W., F., 1945, Term analyses of the first two spectra of columbium, J. Res. Natl. Bur. Stand. (U.S.) 34(6), 477
- [8]. Büttgenbach, R., Dicke, H., Gebauer, H., Herschel, M., Meisel, G., 1975, Hyperfine Structure of Nine Levels in Two Configurations of ⁹³Nb, 1. Experimental, Z. Physik A, 275, 193-196.
- [9]. Büttgenbach, R., Dicke, 1975, Hyperfine Structure of Nine Levels in Two Configurations of ⁹³Nb, II. Theoretical Analysis, Z. Physik A, 275, 197-202.
- [10]. Fraenkel, L., Bengtsson, C., Hanstrop, D., Nyberg, A., Persson, J., 1988, Hyperfine Structure Measurements of ⁹³Nb, Z. Physics D, Atoms, Molecules and Clusters 8, 171-176.
- [11]. Singh R., Rao, G.N., 1989, Hyperfine Structure Studies of Niobium Using Laser Optogalvanic Spectroscopy, Physica Scripta, Vol.40, 170-172.
- [12]. Singh R., Thareja, R. K., Rao, G.N., 1992, Hyperfine Structure Studies of ⁹³Nb by Laser Optogalvanic Spectroscopy, J. Opt. Soc. Am. B., 493-497.
- [13]. Bouzed, A., Kröger, S., Zimmermann, D., Kronfeldt, H.-D., Guthöhrlein, G., 2003, Hyperfine Structure in the Atomic Spectrum of Niobium, I: Experimental Investigation, Eur. Phys. J. D **23**, DOI: 10.1140/epjd/e2003-00026-8, 57-62

- [14]. Kröger, S., Scharf, O., Guthöhrlein, G., 2004, New and Revised Energy Levels of Atomic Niobium, *Europhys. Lett.*, 66(3), DOI: 10.1209/epl/i2003-10209-9, 344-349,
- [15]. Kröger, S., 2007, Further Experimental Investigation of the Hyperfine Structure in the Spectrum of Atomic Niobium, *The European Physical Journal D*, DOI: 10.1140/epjd/e2006-00206-0. 55-59.
- [16] Başar, Gü., Başar, Gö., Bayram, S.B., Kroger, S., High-resolution Laser Spectroscopy of the Hyperfine Structure of High-lying Levels of Nb I, 2008, *Physica Scripta*, Vol. 78, DOI: 10.1088/0031-8949/78/01/015303, 1-6.
- [17]. Başar, Gö., Başar, Gü., Öztürk, I. K., Er, A., Güzelçimen, F., Kröger, S., 2013, Hyperfine Structure Investigation of Atomic Niobium with Optogalvanic and Laser-Induced Fluorescence Spectroscopy in the Near-Infrared Wavelength Range, *Astronomy & Astrophysics*, DOI: 10.1051/0004-6361/201321919. 1-10.
- [18]. Kröger, S., Bouzed, A., 2003, Hyperfine Structure in the Atomic Spectrum of Niobium, *The European Physical Journal D*, DOI: 10.1140/epjd/e2003-00027-7.
- [19]. Kröger, S., Öztürk, I.K., Acar, F.G., Başar, G.C., Başar, G., Wyart, J.F., 2006, Fine and Hyperfine Structure in the Atomic Spectrum of Niobium, *The European Physical Journal D*, DOI: 10.1140/epjd/e2006-00207-y. 1-9.
- [20]. Sansonetti, J.E., Martin, W.C., 2005, *Handbook of Basic Atomic Spectroscopic Data*, American Institute of Physics, DOI: 10.1063/1.1800011]
- [21]. Malcheva, G., Nilsson, H., Engström, L., Lundberg, H., Biemont, E., Palmeri, P., Quinet, P., Blagoev, K., 2011, Radiative parameters of Nb I Excited States, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*.
- [22]. Şahin, Y., Kurucu, Y., 2005, *Atom Fiziği*, Pegem Yayıncılık, Ankara, 975-8792-57-1
- [23]. Demtröder, W., 2005, *Atoms, Molecules and Photons*, Springer, Kaiserslautern, Germany, ISBN-10 3-540-20631-0, ISBN-13 978-3-540-20631-6
- [24]. Aygün, E., Zengin, D.M., 2000, *Kuantum Fiziği*, Bilim Yayınları, Ankara, 975-556-005-X.
- [25]. Eisberg, R., 1985, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*, Santa Barbara: University of California Press, 0-471-87373-X.
- [26]. Taylor, J., R. Zafaritos, C., 1996, *Fizik ve Mühendislikte Modern Fizik*, Güven Yayınları, İstanbul.
- [27]. Haken, H., Wolf, H.C., 2000, *The Physics of Atoms and Quanta*, Springer-Verlag Berlin, 3-540-67274-5.

- [28]. Bařar, G., 1994, Lazer Spektroskopisi ve İnterferens Spektroskopisi ile Rhenium ve Platin Elementlerinin izotopik kaymalarının ve Hiper İnce Yapı Ayrılmalarının İncelenmesi, Doktora Tezi, İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [29]. Amstrong, L., Jr., 1971, Theory of Hyperfine Structure of Free Atoms, Wiley-Interscience, Newyork, London, Sydney, Toronto.
- [30]. Rajnak, K., Wybourne, B.G., 1963, Configuration Interaction Effects in l^N Configurations, Phys. Rev, 132, 280-290
- [31]. Tübitak: <http://www.biltek.tubitak.gov.tr/bilgipaket/periodydik/> [Ziyaret tarihi: 9 Mayıs 2014].
- [32]. Büttgeenbach, S., 1982, Hyperfine Structure in 4d- and 5d-Shell Atoms, Springer-Verlag Berlin, 3-540-11740-7.
- [33]. Nist Atomic Spectra Database: <http://www.nist.gov> [Ziyaret Tarihi: 9 Mayıs 2014].

ÖZGEÇMİŞ



Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı	Taha Yusuf Kebapcı
Uyruğu	Türk
Doğum tarihi, Yeri	14.10.1980, İstanbul
Telefon	0534 576 42 90
E-mail	tahayusuf@cankaya.edu.tr

Eğitim

Derece	Kurum/Anabilim Dalı/Programı	Yılı
Lisans	M.Ü/ Fen-Edebiyat fakültesi/ Fizik bölümü	2012
Lise	İzmir Güzelbahçe Lisesi/Fen Bölümü	1998
Ortaokul	İzmir Ali Bayırlar Ortaöğretim Okulu	1995
İlkokul	İzmir Ali Bayırlar İlköğretim Okulu	1992