



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



**F III, Ar II VE Yb III, İÇİN SPEKTROSKOPİK
YAPI HESAPLAMALARI**

Yağmur Nuray ATEŞ

YÜKSEK LİSANS

Fizik Anabilim Dalını

Ağustos-2019
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ KABUL VE ONAYI

Yağmur Nuray ATEŞ tarafından hazırlanan “F III, Ar II ve Yb III İçin Spektroskopik Yapı Hesaplamaları” adlı tez çalışması 02/09/2019 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda YÜKSEK LİSANS olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Başkan

Prof. Dr. Gültekin ÇELİK

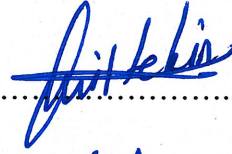
Danışman

Doç. Dr. Şule ATEŞ

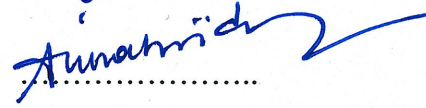
Üye

Doç. Dr. Murat YILDIZ

İmza


.....


.....


.....

Yukarıdaki sonucu onaylarım.

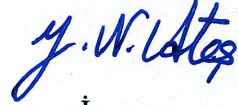
Prof. Dr. Mustafa YILMAZ
FBE Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

DECLARATION PAGE

I hereby declare that all information in this document has been obtained and presented in accordance with academic rules and ethical conduct. I also declare that, as required by these rules and conduct, I have fully cited and referenced all material and results that are not original to this work.



İmza

Yağmur Nuray ATEŞ

Tarih: 11.03/2019

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

F III, Ar II VE Yb III, İÇİN SPEKTROSKOPİK YAPI HESAPLAMALARI

Yağmur Nuray ATEŞ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Şule ATEŞ

2019, 79 Sayfa

Jüri

Doç. Dr. Şule ATEŞ
Prof. Dr. Gültekin ÇELİK
Doç. Dr. Murat YILDIZ

Bu tez çalışmasında, LS çiftlenim şekline uyan F III'de elektrik dipol geçiş olasılığı ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri, yine LS çiftlenim şekline uyan Ar II'de elektrik dipol geçiş olasılığı ve jj çiftlenim şekline uyan Yb III de elektrik dipol geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti hesaplanmıştır. Hesaplamalarda en zayıf bağlı elektron potansiyel model (WBEPM) teori kullanılmıştır. Elde edilen sonuçlar literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılmış, bunun sonucunda iyi bir uyum gözlenmiştir. Ayrıca bazı geçişler için literatürde olmayan geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi değerler elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, geçiş olasılığı, LS ve jj çiftlenimi, osilatör şiddeti, yaşam süresi

ABSTRACT

MS THESIS

**SPECTROSCOPIC STRUCTURE CALCULATIONS
FOR F III, Ar II AND Yb III**

Yağmur Nuray ATEŞ

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

**Advisor: Assoc. Prof. Dr. Şule ATEŞ
2019, 79 Pages**

**Jury
Assoc. Prof. Dr. Şule ATEŞ
Prof. Dr. Gültekin ÇELİK
Assoc. Prof. Dr. Murat YILDIZ**

In this thesis, the electric dipole transition probability and the lifetime of excited levels in F III matching LS coupling, the electric dipole transition probability in Ar II matching LS coupling, and the electric dipole transition probability and oscillator strength in Yb III matching jj coupling were calculated. The weakest bound electron potential model (WBEPM) theory was used in the calculations. The results obtained were compared with the results in the literature and a good agreement was observed. In addition, the parameter values such as transition probability, oscillator strength and lifetime of excited levels not existing in the literature were obtained for transitions.

Keywords: Lifetime, LS and jj coupling, oscillator strength, transition probability, weakest bound electron potential model theory

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur.

Bu çalışmada, Ar II, F III gibi hafif iyonlarda ve Yb III gibi ağır iyonlarda atomik yapı hesaplamaları en zayıf bağlı elektron potansiyel model (WBEPM) teori kullanılarak yapılmıştır.

Akademik hayatım boyunca en önemli dönemlerden biri olan Yüksek Lisans eğitimim boyunca değerli bilgi ve tecrübelerinden yararlandığım danışmanım sayın Doç. Dr. Şule ATEŞ'e, ayrıca tecrübe ve bilgilerinden yararlandığım sayın Prof. Dr. Gültekin ÇELİK'e teşekkürlerimi sunarım.

Bu süreçte sevgilerini, sabırlarını, maddi ve manevi desteklerini her zaman hissettiğim beni bugünlere getiren aileme teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışmayı annem Aynur ATEŞ'e ve babam Nazif ATEŞ'e ithaf ediyorum.

Yağmur Nuray ATEŞ

KONYA-2019

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
ÖNSÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	ix
1. GİRİŞ.....	1
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI	4
2.1. İki Kez İyonlaşmış Flor (FIII) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar	4
2.2. Bir Kez İyonlaşmış Argon (Ar II) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar	4
2.3. İki Kez İyonlaşmış İtterbiyum (Yb III) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar	5
3. MATERYAL VE YÖNTEM	7
3.1. Çok Elektronlu Sistemler	7
3.1.1. Pauli Prensibi	10
3.1.2. Merkezci Alan Yaklaşıklığı.....	11
3.1.3. Enerjinin Yörüngesel Kuantum Sayısına Bağlılığı.....	17
3.1.4. Elektrik Dipol Geçişler ve Seçim Kuralları	19
3.1.5. Açısal Momentum Çiftlenimi	22
3.1.5.1. LS Çiftlenimi (Russell-Saunders)	23
3.1.5.2. jj Çiftlenimi.....	25
3.2. Elektrik Dipol Geçişlerde Spektroskopik Yapı Parametreleri	26
3.2.1. Elektrik Dipol Geçiş Olasılığı	26
3.2.2. Osilatör Şiddeti	27
3.2.3. Uyarılmış Seviyelerin Yaşam Süresi	28
3.3. En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model (WBEPM) Teori	29
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA	35
4.1. F III için Yapılan Hesaplamalar	36
4.2. Ar II için Yapılan Hesaplamalar.....	36

4.3. Yb III için Yapılan Hesaplamalar	37
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	38
5.1 Sonuçlar	38
5.2 Öneriler	38
KAYNAKLAR	40
EKLER	46
EK-1 F III İçin Geçiş Olasılıkları ve Yaşam Süreleri	46
EK-2 Ar II İçin Geçiş Olasılıkları	62
EK-3 Yb III İçin Geçiş Olasılıkları ve Osilatör Şiddetleri	65
ÖZGEÇMİŞ	78

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

A	: Einstein katsayısı
$A_{JJ'}$: Elektrik dipol geçiş olasılığı
$E_{J'} - E_J$: Geçiş enerjisi
$f_{JJ'}$: Osilatör şiddeti
S	: Elektrik dipol çizgi şiddeti
τ_J	: Yaşam süresi

Kısaltmalar

UV	: Ultraviyole
Ar II	: İki kez iyonlaşmış argon
Yb III	: Bir kez iyonlaşmış iterbiyum
F III	: İki kez iyonlaşmış flor
l^*	: Etkin yörünge açısal momentum kuantum sayısı
n^*	: Etkin baş kuantum sayısı
Z^*	: Etkin çekirdek yükü
NCA	: Sayısal Coloumb yaklaşımı
NRHF	: Non-Relativistik Hatree-Fock
WBEPM	: En zayıf bağlı elektron potansiyel model
MCOPM	: Multikonfigürasyon optimize potansiyel model
E1	: Elektrik dipol
E2	: Elektrik kuadrupol
M1	: Manyetik dipol
M2	: Manyetik kuadrupol
He II	: Bir kez iyonlaşmış helyum
RMBPT	: Relativistik çok-parçacık pertürbasyon teori

1. GİRİŞ

Geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve yaşam süresi gibi spektroskopik parametreler atom ve iyonların uyarılmış durumlarının temel karakteristikleridir. Bu parametreler, kuantum elektronik, atom fiziği, lazer spektroskopisi, plazma fiziği ve astrofizik gibi alanlarda oldukça önemli bilgiler içerirler. Özellikle geçiş olasılıkları gibi atomik datalar kozmik modelleme ve teşhiste ve laboratuvar plazmalarında önemli rol oynarlar. Plazma modellemede açığa çıkan çeşitli kinetik süreçler, geçiş olasılığı değerlerinin güvenilir bilgisine ihtiyaç duyarlar. Ayrıca geçiş olasılığı değerleri bilgisi, soğurma ve uyarılmış emisyonu karakterize eden katsayıların belirlenmesi için bir olanak sağlar. Yıldızlardaki element bolluklarının analizinde çeşitli elementler için farklı çizgilerin geçiş olasılıkları kullanılmıştır (Djenizea, 2002). Ayrıca geçiş olasılığı verileri, güneş atmosferindeki bollukların tahmin edilmesine katkıda bulunur; bu da, karasal ve Venüs atmosferlerinin evrimini modellemek için oldukça önemlidir (Belmonte ve ark., 2014; Lodders, 2008).

Argon, lazer fiziği, laboratuvar plazmaları, tokamaklar ve astrofizikteki uygulamaları sebebiyle en çok çalışılan nadir gazdır (Dipti, 2016). Argonda geçiş olasılıklarının belirlenmesi, özellikle astrofizikte oldukça ilgi görmektedir. Argon plazmaları, arzulanan özellikleri sebebiyle ve plazma teşhisi için, özellikle sıcaklık belirleme aracı olarak çalışmak amacıyla spektral çizgilerinin uygunluğundan dolayı, son 50 yılı aşkın süredir kapsamlı olarak çalışılmaktadır (Belmonte ve ark., 2014; Wiese, 1988; Behringer ve Thoma, 1976). Bununla birlikte, tam bir geçiş olasılığı seti oluşturmak için yapılan tüm çabalara rağmen, UV (Ultraviyole) bölgesindeki Ar II spektral çizgileri için Kramida ve çalışma arkadaşlarının önerdiği bazı verilerde yaklaşık %50 oranında belirsizlikler bulunmaktadır (Belmonte ve ark., 2014; Kramida ve ark., 2015). Bu sebeple bir kez iyonlaşmış argon (Ar II)' da farklı yöntemlerle belirlenecek geçiş olasılığı ve yaşam süresi değerleri önem arz edecektir.

Elektron sayısı 4 ila 10 arasında olan hafif elementler, astrofiziksel uygulamalarda önemlidir (Froese Fischer and Tachiev, 2004). İki kez iyonlaşmış flor (F III)'ün de içinde olduğu azot izoelektronik dizi iyonlarında geçişler, astrofiziksel kaynak spektrasına ilaveten tokamak ve lazer-üretimli plazmalarda da sıklıkla gözlenmiştir (Feldman ve ark., 1978; Bhatia ve Landi 2003; Rynkun ve ark. 2014).

Astrofizik ve plazma fiziğindeki önemi sebebiyle azot dizisi üzerine daha fazla teorik ve deneysel çalışma yıllardır yapılmakta ve yapılmaya devam edilmektedir.

Nadir toprak (NT) elementlerinden biri olan Yb III, $4f^{14}$ temel konfigürasyonu ve [Xe] $4f^{13}$ tipi bir iyonik çekirdek dışında bir dış elektrona karşılık gelen düşük uyarılmış konfigürasyonlara sahip bir atomik yapı ile karakterize edilir. NT elementlerinin veya iyonlarının spektral verilerine olan ilgi, esas olarak, astrofizikteki kimyasal olarak kendine özgü yıldızların spektrumlarında onların gözlemlenmelerinden kaynaklanmaktadır. Birçok laboratuvar analizi, nötr veya tek başına iyonize lantanit atomlarının araştırılmasına adanmıştır. Çift-iyonize NT atomlarının bir dizi spektral çizgisi yıldız spektrumlarında tanımlanmıştır ancak doğru atomik veri eksikliğinden kaynaklanan çizgi tanımlamaları ve bolluk tespitleri üzerine çalışmalar sürdürülmektedir. Nadir toprak elementlerinden özellikle iterbiyum iyonu (Yb III) birçok nedenden dolayı fizikçilerin oldukça dikkatini çekmiştir. Atomik saatler ve tuzaklanmış iyon frekans standartları için özel bir ilgiye sahiptir, çünkü düşük-seviyeli durumların yapısı optik, kızılötesi veya mikrodalga frekans standartları için kullanılabilir. $\alpha 2CVn$ (HD112413) yıldızının orta-UV spektrumunda absorbe olan atomları ve iyonları farklı tekniklerle araştıran Hensberge ve arkadaşları (1986) tarafından bir CP yıldızında Yb III'ün varlığı ilk kez açığa çıkarılmıştır. Dolayısıyla Yb III'ün aynı zamanda astrofizikte de oldukça önemli bir yeri vardır.

Çok elektronlu atomik ve iyonik sistemler için Schrödinger denklemini yazmak kolay olsa da denklemin tam çözümü çok zordur. Bu sebeple kompleks sistemler olan çok elektronlu sistemler için çeşitli yaklaşımlar yapılır. Yapılan bu yaklaşımlar teorik ve yarı deneysel olmak üzere iki ana başlık altında toplanabilir.

Çizgi şiddetlerini ve matris elemanlarını içeren bağıntıların açık olarak ifade edilmesine olanak sağlayan yarı deneysel yöntemlerden biri de “En zayıf bağlı elektron model (WBEPM) teori”dir. Bu teori, çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde spektroskopik parametre değerlerinin elde edilmesinde oldukça kullanışlı bir metot olup duyarlı sonuçlar verebilmektedir. Bu teori ile elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri, yaşam süreleri analitik radyal dalga fonksiyonlarına bağlı olarak hesaplanabilmektedir.

Bu tez çalışmasında F III, Ar II ve Yb III iyonları için WBEPM teori kullanılarak elde edilen geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti değerleri literatürdeki mevcut değerlerle karşılaştırılmıştır. Ayrıca, özellikle astrofizikte önem arz eden söz konusu iyonlara ait literatürde mevcut olmayan atomik yapı parametre değerleri de rapor edilmiştir.



2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. İki Kez İyonlaşmış Flor (FIII) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Azot benzeri dizi üyesi olan iki kez iyonlaşmış flor (F III) için literatürde birçok geçiş olasılığı, yaşam süresi ve osilatör şiddeti gibi spektroskopik yapı parametre değerleri rapor edilmiştir. Andersen ve Aashamar (1993), multikonfigürasyon optimize potansiyel model (MCOPM) kullanarak atomik azotun izoelektronik serisinde $2s^2 2p^3 4S^o$ temel durumu ve pek çok uyarılmış durum için enerjiler ve geçiş oranları hesapladılar. Bu terimler arasındaki geçişler için osilatör şiddetlerini hem uzunluk hem de hız formunda hesapladılar. Kendi elde ettikleri değerleri diğer teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırdılar. Verner ve ark. (1994), birçok atom ve iyonda 2249 spektral çizgi için dalgaboyu, istatistiksel ağırlık ve osilatör şiddeti değerleri listelediler. Bu derleme, 227,838 Å da He II Lyman sınırının uzun bölgelerine uzanan tüm dalgaboyları ve hidrojenden bizmuta (Z=83) tüm elementlerin tüm iyon durumlarını kapsar. Sunulan data, kuasar soğurma spektrumunu yorumlamada kullanılır. Raja ve ark. (1998), (FIII)'ün 7 seviyesi için ortalama yaşam sürelerini ölçtüler. Yapılan çalışmalar boyunca ölçülen değerlerin, rapor edilen sonuçlarla yakın uyumlu olduğunu çalışmalarında rapor ettiler. Froese Fischer ve Tachiev (2004) relativistik etkileri hesaplamalara dahil eden Multi-konfigürasyonel Hartree-Fock metodunu kullanarak Berilyum benzeri (Z=4,...,12) diziler ile Neon benzeri (Z=10,...,24) diziler için seviyeler arası hem izinli (E1) hem de yasak (M1, E2, M2) geçişlerde enerji seviyeleri, yaşam süreleri ve geçiş olasılığı değerleri rapor ettiler. Rynkun ve ark. (2014), multikonfigürasyon Dirac-Hartree-Fock ve konfigürasyon etkileşim hesaplamalarından relativistik dalgaboyları temelli E1, M1, E2 ve M2 geçiş oranları, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve yaşam sürelerini, F III ve K XXX arasındaki tüm azot benzeri iyonlarda bazı konfigürasyon durumları için değerlendirmişlerdir.

2.2. Bir Kez İyonlaşmış Argon (Ar II) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Günümüze kadar Ar II'de geçiş olasılıkları ile ilgili bazı teorik ve deneysel çalışmalar yapılmıştır. Örneğin; Ar II'de $3s^2 3p^5$, $3s 3p^6$, $3p^4 3d$, $3p^4 4s$, and $3p^4 4p$ seviyeleri arasındaki geçiş oranları, Hibbert ve arkadaşları tarafından çalışılmıştır (Hibbert ve Hansen, 1987; 1989; 1994). Belmonte ve ark., Aparicio ve ark. tarafından

gerçekleştirilen deneysel çalışmayı daha fazla genişleterek UV Ar II spektral çizgileri için güvenilir ve yeni geçiş olasılığı değerleri rapor ettiler (Belmonte ve ark., 2014; Aparicio ve ark., 1997). Onlar bu deneylerinde, 294 nm'den 386 nm'ye kadar uzanan ultraviyole bölgede 43 iyonize argon spektral çizgi ölçtüler ve 11 yeni geçiş olasılığı üretttiler. Bir kez iyonlaşmış argon (Ar II)'da $3p^4$ nd ($n=4-6$) seviyelerinin geçiş olasılığı ile ilişkili olan yaşam süreleri, Karmakar ve Das (2007) tarafından yüksek frekans sapma tekniği kullanılarak ölçüldü. Biemont ve Träbert (2000), Cl I izoelektronik seride en düşük uyarılmış seviyeleri içeren geçiş oranlarını yeniden araştırdılar. Relativistik düzeltme ile Hartree-Fock metodu kullanarak hesaplamalarını yaptılar. Verner ve ark. (1996), argonun tüm iyonlarının izinli rezonans spektral çizgileri için enerji seviyelerini, vakum dalga boylarını, geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini, istatistiksel ağırlıklarını çeşitli kaynaklardan derleyerek listelediler. Hibbert ve Hansen (1994) çalışmalarında, $3s^23p^5$, $3s3p^6$, $3p^43d$, $3p^44s$ and $3p^44p$ durumlarının seviyeleri arasında Ar II'deki tüm geçişlerin osilatör şiddetlerinin, geçiş olasılıklarının ve uyarılmış seviyelerin yaşam sürelerinin genişletilmiş konfigürasyon etkileşim (CI) hesaplamalarını sunmuşlardır. Abbas ve ark. (1988), Ar II için çizgi kayması, geçiş olasılığı, yaşam süresi, osilatör şiddeti ve bazı çizgilerin profili gibi özellikleri *high-current wall-stabilized arc* tekniğini kullanarak araştırdılar. Morton (1991), hidrojenen germanyuma kadar tüm elementlerin tüm iyon durumlarının geçişleri için geçiş olasılıkları sonuçlarını derlemiş ve sunmuştur.

2.3. İki Kez İyonlaşmış İtterbiyum (Yb III) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Yb III de deneysel ve teorik enerji seviyeleri, geçiş olasılıkları ve radiatif yaşam süreleri Biemont ve çalışma arkadaşları (2001) tarafından çalışıldı. Safronova ve Safronova (2009), Yb III ün $[Xe]4f^{14}$ temel durum ve $[Xe]4f^{13}ns$, $[Xe]4f^{13}nd$, ve $[Xe]4f^{13}np$ uyarılmış durumları arasındaki multipol (E1, M1, E2, M2 ve E3) geçişleri için dalgaboyu, geçiş oranları ve çizgi şiddetlerini hesapladılar. Bu multipol geçişler için enerji ve geçiş oranlarını değerlendirmek amacıyla Breit etkileşimini içeren relativistik çok-parçacık pertürbasyon teorisi (RMBPT) kullandılar. Zhang ve arkadaşları (2011), iki kez iyonlaşmış itterbiyumda $4f^{13}5d$ konfigürasyonuna ait üç seviyenin yaşam sürelerini ilk kez *time-resolved laser-induced fluorescence* metodu

kullanarak ölçtüler. Deneysel geçiş olasılıkları, çalışılan seviyeler ve temel durum arasındaki geçişler için elde edildi. Loginov ve Tuchkin (2001), Yb III ve bazı diğer erbiyum izoelektronik dizi iyonlarının spektrumları için $4f^{13}6p$ ve $4f^{13}5d$ konfigürasyon seviyelerinin yaşam sürelerini hesapladılar.



3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Çok Elektronlu Sistemler

İki ve daha fazla elektronu olan atomlar, başka bir deyişle çok elektronlu atomlar, yükü $+Ze$ olan çekirdek ve toplam yükü $-Ze$ olan Z sayıda elektronlardan ibarettir. Çok elektronlu atomlar da hidrojen atomuna benzer bir modelle anlatılabilir. Atomun merkezinde, kütlelerin neredeyse tamamını taşıyan artı yüklü bir çekirdek vardır. Çekirdekteki artı yük sayısı kadar elektron çekirdeği çevreleyerek, atomu oluşturur. Yarı klâsik atom modellerine göre elektronlar çekirdek etrafında çeşitli yörüngeler üzerinde dolanırlar. Bu elektronlar hem birbirleriyle, hem de çekirdek ile karşılıklı etkileşimlerde bulunurlar. Bu nedenle çok elektronlu bir atomun herhangi bir elektronunun hareketi yalnız çekirdek ile değil, aynı zamanda atomun diğer bütün elektronları ile tayin olunur.

Elektronlar farklı enerji seviyelerinde bulunmaktadırlar; enerjisi kuantumlu olarak alarak ya da vererek alt ya da üst enerji seviyesine geçebilirler. Enerji seviyesi değiştiren elektronlar aradaki enerji farkını elektromanyetik ışınlar şeklinde yayarak ya da soğururlar.

Dalga mekaniğinde, atomlarda elektronların yerleşebileceği enerji seviyeleri, kuantum sayıları denilen sayılarla anlatılır. Atomun genel enerji durumu ise atomdaki bütün elektronların bütün kuantum sayıları hesaba katılarak belirlenir. Bu kuantum sayıları n , l ve m simgeleriyle gösterilir.

Baş kuantum sayısı da denilen birinci kuantum sayısı n , elektronun enerjisini belirleyen başlıca ve en önemli etkendir. Hidrojen atomunda bu ilişki kesinlikle,

$$E = -B/n^2 \quad (3.1)$$

bağıntısıyla ifade edilir. Çok elektronlu atomlarda da elektronların enerjisi yine baş kuantum sayısı ile belirlenir; ama bu etki hidrojen atomundaki kadar kesin değildir. Baş kuantum sayısı büyüdükçe elektronun enerjisi de artar. Ayrıca elektron bulutunun çekirdekten olan ortalama uzaklığı da artar. Baş kuantum sayısı daima bir tam sayıdır, ama 0 olamaz.

$$n = 1,2,3,4, \dots, \infty \quad (3.2)$$

Çok elektronlu atomlarda baş kuantum sayısı aynı olan elektronlar atomun elektron katlarını meydana getirirler. Yani aynı baş kuantum sayısına sahip elektronlar atomda kabaca aynı yerde bulunur. Bunların aynı enerji düzeyinde olduğu söylenir. Baş kuantum sayısının belli bir değerinde elektron katındaki elektronların maksimum sayısı $2n^2$ dir. Spektroskopide baş kuantum sayısının $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ değerlerine karşılık gelen elektron katları sırasıyla K, L, M, N,... diye adlandırılır. K ($n = 1$) katındaki elektronların maksimum sayısı 2, L ($n = 2$) katındakilerinki 8, M ($n = 3$) katındakilerinki 18, N ($n = 4$) katındakilerinki 32,... vs. dir.

Baş kuantum sayısı n 'nin verilen bir değerinde aynı kuantum sayısı l 'ye karşılık gelen elektronlar, verilen katın alt katlarını meydana getirirler. Atomlardaki enerji düzeylerinin her biri, bir veya daha fazla alt düzey içerir. Belirli bir katmandaki alt düzeyleri birbirinden ayıran şey l ile sembolize edilen ikinci kuantum sayısıdır. Bohr-Sommerfeld modelinde açısal kuantum sayısı olarak adlandırılır. Açısal kuantum sayısı, dalga mekaniği modelindeki olasılık bulutunun uzaydaki biçimini belirler. Açısal kuantum sayısının alacağı değerler, baş kuantum sayısına bağlıdır; sıfırdan başlayarak, baş kuantum sayısının bir eksikliğine kadar olan tüm tam değerleri alabilirler:

$$l = 0,1,2,3, \dots, (n - 1). \quad (3.3)$$

Buna göre, atomun K katı yalnız bir alt kattan (1s); L katı iki alt kattan (2s, 2p); M katı üç alt kattan (3s, 3p, 3d); N katı dört alt kattan (4s, 4p, 4d, 4f),... ibaret olacaktır. Böylece baş kuantum sayısı n 'nin verilen bir değerinde atomun her bir elektron katı, n sayıda alt elektron katına ayrılır ve bu alt düzeylerin enerji halleri, sahip oldukları açısal kuantum sayısına bağlı olarak birbirinden biraz farklıdır. Belirli bir n düzeyindeki elektronların enerjileri l büyüdükçe artar. Örneğin, enerji hali $n=3$ ve $l=1$ kuantum sayılarıyla belirtilen elektronun enerjisi, $n=3$ ve $l=0$ kuantum sayılarıyla anlatılan elektronunkinden biraz fazladır. $n=3$ düzeyindeki en büyük enerjili elektron, $l=2$ alt düzeyinde bulunan elektrondur. Tablo 3.1 de n 'nin çeşitli değerleri için atomun elektron katları ve alt elektron katları verilmiştir:

Tablo 3.1. Atomun elektron katları ve alt katları

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

Enerji düzeyinin dış manyetik alan içindeki yöneliş biçimiyle ilgili olan manyetik kuantum sayısı m , elektronun enerjisini çok az etkiler. Manyetik kuantum sayısı, açısal kuantum sayısına bağlıdır.

$$m = -l, \dots, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, \dots, +l \quad (3.4)$$

Açısal kuantum sayısı l olan bir alt düzeyde $2l + 1$ tane orbital vardır. Belirli bir orbitalde bulunan elektronların n , l ve m değerleri aynıdır. Ya da başka bir deyişle; baş, açısal ve manyetik kuantum sayıları aynı olan elektronlar aynı orbitaldedir.

Açısal kuantum sayısı 0 ($l = 0$) olan alt düzeylerde m de ancak 0 olabilir. Yani bu alt düzeylerde yalnızca bir orbital vardır. Açısal kuantum sayısı 1 olan alt düzeylerde ise, manyetik kuantum sayısı -1, 0 ve 1 olabileceğine göre 3 orbital vardır. Bu alt düzeye gelen bir elektron, dış manyetik alan yoksa, bu 3 orbitalden herhangi birine yerleşebilir.

Dalga mekaniği formüllerinden çıkarılan dördüncü kuantum sayısı, elektronların kendi çevrelerinde topaç gibi dönüşünden ortaya çıktığı düşünülen spin kuantum sayısı s 'dir. Spin kuantum sayısının kurama katılışı atomların kuramsal özelliklerini deney sonuçlarına uydurabilmek içindir. Klasik kuramda elektron spinlerinin enerji durumunu etkilemesi beklenemez. Bu varsayım dalga mekaniğine özgüdür. Spin kuantum sayısı diğer kuantum sayılarına bağlı değildir. Elektronun dönüş yönüne bağlı olarak $+1/2$ ya da $-1/2$ değerini alır. Spin kuantum sayısı ne olursa olsun, bir elektron herhangi bir orbitalde tek başına bulunabilir. Ama iki elektronun bir orbitalde bulunabilmesi için spin kuantum sayılarının farklı olması gerekir. Aynı yörüngeyi paylaşan iki elektronun

çiftleşmiş olduğu söylenir (elektron çiftleşmesi). Belirli bir orbitalde ikiden fazla elektron bulunamaz. (Zeren, 1998)

3.1.1. Pauli Prensibi

Bir elektronlu atom ve iyonların tek bir elektronu, kuantum sayılarının

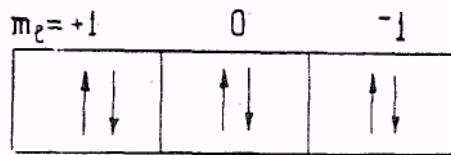
$$n = 1, 2, 3, \dots; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n - 1; \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad \text{ve} \quad m_s = \pm 1/2$$

değerleriyle tayin olunan kuantum hallerinin her birinde olabilir. Çok elektronlu atomlarda da her bir elektronun hali bu kuantum sayıları ile tayin edilir. Fakat atomda aynı anda aynı kuantum halinde olabilen elektronların sayısı Pauli prensibine uymak zorundadır. Bu prensibe göre atomda aynı kuantum halinde iki elektron olamaz. Başka bir deyişle, atomda aynı kuantum sayıları takımı ile karakterize olunan iki elektron olamaz. Atomun herhangi iki elektronu için n , l , m_l ve m_s kuantum sayılarının en azından biri farklı olmalıdır.

Örneğin s , p , d ,... alt katlarında Pauli prensibine göre elektronların maksimum sayısını bulalım: s alt katı için $l = 0$ olduğundan bu alt kat $m_l = 0$ 'a karşılık gelen tek bir yuva ile gösterilebilir. Bu s alt katında birbirinden yalnız m_s kuantum sayısı ile farklı olan ($m_{s1} = 1/2$, $m_{s2} = -1/2$) iki elektron olabilir. ($m_s = 1/2$ olduğunda elektronun spinini \uparrow şeklinde, $m_s = -1/2$ olduğunda ise \downarrow şeklinde gösterelim).

Şimdi de p alt katındaki elektronların maksimum sayısına bakalım. Bu alt katı için $l = 1$ ve $m_l = 1, 0, -1$ dir. Buna göre, p alt katını m_l 'nin bu değerlerine karşılık gelen üç yuva ile gösterebiliriz. Bunların her birinde Pauli prensibine göre, yalnız m_s kuantum sayılan ile farklı olan iki elektron olabilir. O halde p alt katındaki elektronların maksimum sayısı 6 olarak bulunur.

Şekil 3.1'de p alt katlarında elektronların Pauli prensibine göre nasıl yerleştikleri gösterilmiştir.



Şekil 3.1 Pauli prensibine göre elektronların p alt katında yerleşmesi

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

3.1.2. Merkezil Alan Yaklaşığı

Genel olarak, atomun hareketi incelenen herhangi bir elektronu, çekirdek ve diğer ($Z-1$) elektronla karşılıklı etkileşmelerde bulunur. Bu nedenle bu elektronun hareketini genel halde analiz etmek çok güçtür. Schrödinger denklemi çok elektronlu atomlar veya iyonlar için tam olarak çözülememektedir. Bundan dolayı çok elektronlu atomların veya iyonların yapısını incelemek için olayı basitleştirici bazı genel yöntemler geliştirilmiştir.

Çok elektronlu atomlar için tüm hesaplamaların başlangıç noktası merkezil alan yaklaşımıdır. Bu yaklaşımdaki temel düşünce, atomik elektronların, çekirdek ve diğer tüm elektronların oluşturdukları etkin, küresel olarak simetrik $V(r)$ potansiyelinde hareket etmeleridir. (Joachain, 1999)

Çok elektronlu atomların arasındaki karşılıklı etkileşmenin dikkate alınmayacak derecede olduğunu varsayalım. Bu varsayım, elektronların çekirdek etrafındaki çeşitli yörüngeler üzerinde dolandıkları ve bu nedenle birbirlerinin yakınında ancak çok kısa bir süre bulunabildikleri esası üzerine temellendirilmiştir. Ayrıca, elektronların çekirdek etrafında küresel-simetrik bir elektron bulutu meydana getirdiklerini varsayalım. Bu halde elektron bulutundaki elektrik yükünün yoğunluğu yalnız çekirdekten olan mesafeye bağlıdır, yöne bağlı değildir. Atomda, hareketi incelenen herhangi bir elektron, hem çekirdeğin oluşturduğu Coulomb alanında, hem de diğer elektronların oluşturduğu alanda hareket eder.

Küresel simetrik bulut, kendi içinde yerleşen bir yüke etki etmez; bulutun dışında yerleşen bir yüke ise bulutun merkezinde toplaşan noktasal bir yük gibi etki eder. Bu durumda, klâsik modele göre çekirdekten r mesafede bulunan bir elektrona yükü $+Ze$ olan çekirdekten başka, r yapıçaplı kürenin içinde bulunan bütün elektronlar da etki eder.

Bilindiği gibi çekirdeğin hemen yakınındaki potansiyel, yükü $+Ze$ olan çekirdeğin olağan Coulomb potansiyelidir. Çekirdekten uzaklaştıkça, çekirdeğin yükü negatif yüklü elektron bulutu ile kısmen nötralleşir ve çekirdeğin, potansiyeli değişir. Çekirdekten en uzakta bulunan bir elektron için potansiyel, yükü $(Z-1)$ sayıda elektronla nötralleşmiş (perdelenmiş) çekirdeğin potansiyeline, başka bir deyişle yükü $+e$ olan protonun potansiyeline eşit olacaktır.

$+Ze$ yüklü olan çekirdek ile N elektronlu olan bir atomu veya iyonu göz önüne alırsak, bu sistem için aşağıdaki nicelikler hesaba katılmalıdır.

1. Çekirdeğin (çekirdek nokta gibi ve sonsuz kütleli kabul edilecek) elektrostatik Coloumb etkileşmesi alanında elektronun kinetik ve potansiyel enerjileri.

2. Elektronlar arasındaki elektrostatik (Coloumb) itme.

3. Elektron spinlerinin, yörüngesel hareketleriyle olan manyetik etkileşmeleri (spin-yörünge etkileşmeleri).

4. Elektronlar arasındaki spin-spin etkileşmeleri gibi birkaç küçük etki, çeşitli görelilik etkileri, ışımışlı düzeltmeler ve çekirdek düzeltmeleri (çekirdeğin sonlu kütlesi, sonlu boyutu, çekirdek manyetik dipol momentini nedeniyle olan düzeltmeler). (Brandson,1999)

Çok elektronlu bir atomun böyle ayrıntılı incelenmesinin çok zor bir iş olduğu yaklaşıklık yapılması gerektiği açıktır. 4. madde de belirtilen tüm "küçük" etkileri ihmal edecektir. Buna göre sadece elektronla çekirdek arasında ki (çekirdeği sonsuz ağır varsayıyoruz) çekici Coloumb etkileşmelerini ve elektronlar arasında ki Coloumb itmelerini göz önünde bulundurarak, dış alan yokken N elektronlu atomun Hamiltoniyeni,

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_i}^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r_i} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r_{ij}} \quad (3.5)$$

olarak yazılabilir. Burada r_i çekirdeğe göre i elektronunun bağlı koordinatını gösterir. $r_{ij}=|r_i - r_j|$ ve son toplam tüm elektron çiftleri üzerindedir. Atomik birimleri kullanmak elverişli olduğundan atomun Hamiltoniyeni

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (3.6)$$

dir ve N elektronlu atom için dalga fonksiyonu $\Psi (q_1, q_2, \dots, q_N)$ olmak üzere Schrödinger denklemi,

$$\left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = E \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) \quad (3.7)$$

biçiminde ifade edilir. Burada q_i ler i elektronunun r_i (sürekli) uzay koordinatlarını ve kesikli spin koordinatları topluluğunu gösterir.

N ayırt edilemez parçacığı ihtiva eden sistemi ele aldığımızdan hamiltoniyen, herhangi iki parçacığın (uzay ve spin) koordinatlarının değiş-tokuşu altında değişmemelidir. Bu durum, elektron spinlerinden bağımsız ve uzay koordinatlarına simetrik olan Denk (3.7) hamiltoniyeni için böyledir. Bundan başka elektronlar $\frac{1}{2}$ spinine sahip oldukları ve bu nedenle fermiyon olduklarından Pauli'nin dışarlama ilkesi toplam dalga fonksiyonu $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N)$ nin tamamen antisimetrik olmasını yani herhangi iki elektronun koordinatları (uzay ve spin) aralarında değişirse, işaretinin değişmesini gerektirir.

Elektron spininden bağımsız olan Denk (3.7) hamiltoniyenine ait Ψ öz fonksiyonu, $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ uzay kısmı ile $\chi(1, 2, \dots, N)$ spin kısmına ayrılabilir. Buna göre

$$\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \chi(1, 2, \dots, N) \quad (3.8)$$

şeklinde yazılabilir. Burada, dalga fonksiyonunun uzay kısmı,

$$\left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = E \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (3.9)$$

Schrödinger denklemini sağlar.

Bu denklemin, elektronların r_1, r_2, \dots, r_N koordinatlarını ihtiva eden $3N$ boyutlu bir kısmi diferansiyel denklem olduğu görülmektedir. Elektronların karşılıklı itmelerini ifade eden $1/r_{ij}$ teriminin varlığından ötürü bu denklem, değişkenlerine ayrılamaz. $1/r_{ij}$ teriminin pertürbasyon kuramı ile türetilbildiği iki elektronlu atomlar durumunun aksine (3.9) da görülen $\sum_{i<j} 1/r_{ij}$ terimi genel olarak bir pertürbasyon olarak alınamayacak ölçüde büyüktür, Z nin oldukça büyük değerleri için bile $1/r_{ij}$ teriminin herhangi biri Z/r_i yanında küçüktür, ayrıca birçok $1/r_{ij}$ terimi vardır ve bunların toplam etkisi, i inci elektron ile çekirdek arasındaki etkileşme ile aynı mertebede olabilir.

Bu probleme Hartree ve Slater tarafından önerilen cevap, merkezci alan yaklaşıklığını kullanmaktır. Bu yaklaşıklık, her elektronun, çekirdeğin çekimi ve bir elektron ile diğer $(N-1)$ elektron arasındaki itme etkileşmelerinin ortalama etkisini gösteren, bir etkin potansiyelde hareket ettiği düşünülen bağımsız parçacık modelini temel alır. Bundan başka $(N-1)$ elektronun toplam etkisi elektron ve çekirdek arasındaki merkezci Coloumb çekimini perdelemek olduğundan $\sum_{i<j} 1/r_{ij}$ elektronlar arasındaki itme terimini $\sum_i S(r_i)$ olarak yazacağımız, büyük küresel simetrik bileşeni ihtiva ettiği görülmektedir. Bir elektronun etkin potansiyel enerjisine iyi bir yaklaşıklık, bu nedenle,

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + S(r) \quad (3.10)$$

küresel simetrik potansiyelle sağlanır.

Büyük ve küçük uzaklıklarda $V(r)$ nin biçimini kolayca elde edebiliriz. Gerçekten, önce diğer $(N-1)$ elektrona ait r_j uzaklığına kıyasla çekirdekten r_i uzaklığı büyük olan bir i elektronu göz önüne alalım. Bu durumda $r_{ij} \approx r_i$ ve $1/r_{ij} \approx 1/r_i$ dir. Buna göre i elektronu, yaklaşık olarak,

$$-\frac{Z}{r_i} + \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{r_i} = -\frac{Z-N+1}{r_i} \quad (3.11)$$

ile verilen bir potansiyelde hareket eder ve bu potansiyel diğer (N-1) elektron tarafından perdelenen çekirdeğin Coloumb alanına karşılık gelir. r_i uzaklığı azaldığı zaman bu perdeleme etkisi daha az belirgin olur. Gerçekten i elektronlu çekirdeğe yakın iken $r_i \approx r_j$ olur ve bu elektron tarafından perdelenen potansiyel yaklaşık olarak,

$$-\frac{Z}{r_i} + \langle \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{r_j} \rangle = -\frac{Z}{r_i} + C \quad (3.12)$$

ile verilir. Burada $\langle \rangle$ gösterimi diğer (N-1) elektronun uzaklıkları üzerindeki ortalamayı gösterir ve C sabittir. Buna göre $r_i \rightarrow 0$ sınırında i elektronu üzerine etki eden etkin potansiyelin, çekirdeğin neden olduğu $-Z/r_i$ perdelenmemiş Coloumb potansiyeli olduğunu görürüz. Bu nedenle $V(r)$ etkin potansiyelin,

$$V(r) \rightarrow -\frac{Z}{r}, \quad r \rightarrow 0 \quad (3.13a)$$

$$V(r) \rightarrow -\frac{Z-N+1}{r}, \quad r \rightarrow \infty \quad (3.13b)$$

olması gerekir. Özel olarak, bir nötr atom için ($Z=N$ olacağından)

$$V(r) = -\frac{1}{r}, \quad r \rightarrow \infty \quad (3.13c)$$

bağıntısı vardır.

H nin bir pertürbe olmamış kısım ve bir de pertürbe edici olmak üzere anlamlı bir ayırmanın

$$H = H_c + H_i \quad (3.14)$$

yazılarak gerçekleştirilebildiği açıktır. Burada

$$H_c = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 + V(r_i) \right) = \sum_{i=1}^N h_i, \quad h_i = -\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 + V(r_i) \quad (3.15)$$

Merkezcil alan yaklaşımına karşılık gelir ve

$$H_1 = \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_i \left(\frac{z}{r_i} + V(r_i) \right) = \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_i S(r_i) \quad (3.16)$$

ise tüm hamiltoniyen (3.16) nın elektronik itme teriminin geriye kalan küresel olmayan kısmını içeren kısımdır.

N elektronlu merkezcil alan dalga fonksiyonunun uzaysal kısmı $\Psi_c(r_1, r_2, \dots, r_N)$ ye karşılık gelen Schrödinger denklemi, o zaman

$$H_c \Psi_c = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r_i) \right] \Psi_c = E_c \Psi_c \quad (3.17)$$

olur ve her elektron için bir tane olmak üzere N denkleme ayrılabilir. Denklem (3.17) nin bir çözümü,

$$\Psi_c = u_{a1}(r_1) u_{a2}(r_2), \dots, \dots, \dots u_{aN}(r_N) \quad (3.18)$$

olarak yazılabilir. Burada (normalize edilmiş) $u_{a1}(r_1) u_{a2}(r_2), \dots, \dots$ bireysel elektron yörüngemsileri

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r) \right] u_{nlm_l}(r) = E_{nl} u_{nlm_l}(r) \quad (3.19)$$

biçimine sahip bir denklemin çözümüdürler ve (3.18) deki a_i gösterimi i . elektronun (n_i, l_i, m_i) olan üç kuantum sayısını gösterir.

$V(r)$ potansiyeli merkezci olduğu için bir elektron veya $u_{n_i l_i m_i}(r)$ merkezci alan yörüngesimleri, radyal fonksiyonların küresel harmonikle çarpımlarıdır. Yani

$$u_{n_i l_i m_i}(r) = R_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\theta, \phi) \quad (3.20)$$

dir ve burada radyal fonksiyonlar,

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{n_i l_i}(r) + V(r) R_{n_i l_i}(r) = E_{n_i} R_{n_i l_i}(r) \quad (3.21)$$

denklemini sağlar. Baş kuantum sayısı $n = n_r + l + 1$ olarak tanımlanır ve burada n_r , radyal fonksiyonun düğüm sayısıdır.

Denklem (3.19) daki $V(r)$ potansiyeli küresel simetrik olduğundan E_{n_i} enerji özdeğerleri m_i kuantum sayısına bağlı değildir. Bununla birlikte hidrojen tipi durumun aksine bireysel elektron enerjileri n ve l ye bağlıdır. Merkezci alan yaklaşımında E_c toplam enerjisi, kuşkusuz bireysel elektronların enerjilerinin toplamı, yani

$$E_c = \sum_{i=1}^N E_{n_i l_i} \quad (3.22)$$

dir. Elektron koordinatlarının bir pertürbasyonu ile Denk (3.18) den elde edilen herhangi uzay dalga fonksiyonu aynı Denk (3.22) enerjisine karşılık gelen ve Denk (3.17) nin iyi bir çözümü olduğu için değiş-tokuş dejenereliği vardır.

3.1.3. Enerjinin Yörüngesel Kuantum Sayısına Bağlılığı

Bir elektronlu atom ve iyonların kararlı hallerinin enerjisi, yörüngesel kuantum sayısı l ye bağlı olmaksızın, yalnız baş kuantum sayısı n ile tayin edilir. Fakat çok

elektronlu atomların kararlı hallerinin enerjisi yörüngesel kuantum sayısına da bağlıdır. Baş kuantum sayısı n 'nin verilen bir değerinde, yörüngesel kuantum sayısı l büyüdükçe enerji de büyür.

Küresel-simetrik alanda hareket eden elektronun enerjisinin, yörüngesel ve spin momentlerin belirli bir yöndeki izdüşümlerinin kuantize olmuş değerlerini tayin eden yörüngesel manyetik m_l ve spin manyetik m_s kuantum sayılarına bağlı olmadığını belirtmek gerekir.

Küresel-simetrik alan yaklaşımında çok elektronlu atomların kararlı hallerinin enerjisi,

$$E_{ni} = \frac{RZ_{nl}^*{}^2}{n^2} hc \quad (3.23)$$

gibi yazılabilir. Bu formüle dahil olan perdeleme fonksiyonu çekirdekten olan r mesafesine bağlıdır. Küresel-simetrik alanda çekirdeğe yaklaştıkça perdeleme fonksiyonu azalır ve nihayet $r \rightarrow r_{\min}$ 'e yaklaştıkça perdeleme fonksiyonu 0 olur. Hem klâsik hem de kuantum teorisine göre s-elektronlar çekirdeğe p-elektronlardan daha fazla yaklaşabilirler; p-elektronlar çekirdeğe d-elektronlardan daha fazla yaklaşabilirler,... vs. Yani yörüngesel kuantum sayısı büyüdükçe elektronların çekirdekten olan minimum uzaklıkları artar. O halde perdeleme fonksiyonu $\sigma(r)$ kuantum sayısına bağlı olacaktır. Buna göre etkin yük,

$$Z_{nl}^* = Z - \sigma_{ni} \quad (3.24)$$

şeklinde yazılır. Baş kuantum sayısı n 'nin verilen bir değeri için yörüngesel kuantum sayısı küçüldükçe perdeleme fonksiyonu küçülecektir. Yani,

$$\sigma_{ns} < \sigma_{np} < \sigma_{nd} < \sigma_{nf} \dots \quad (3.25)$$

olacaktır. Denk (3.23) formülünden görüldüğü gibi kararlı halin enerjisinin mutlak değeri çekirdeğin etkin yükünün karesi ile orantılıdır. Yani,

$$|E_{nl}| \propto Z^{*2} \quad (3.26)$$

Diğer taraftan Denk (3.24)'den görüldüğü gibi σ_{nl} büyüdükçe Z^* azalır. Buna göre l küçüldükçe E_{nl} büyür. Zaten, atomda bağlı elektronlar için $E < 0$ olduğundan, baş kuantum sayısının verilen bir değeri için yörüngesel kuantum sayısı l büyüdükçe kararlı hallerin enerjisi E_{nl} büyür. Bu nedenle çok elektronlu atomların enerji seviyeleri diyagramında n 'nin verilen bir değeri için l küçüldükçe enerji seviyesi daha aşağıya yerleşir. Yani,

$$E_{ns} < E_{np} < E_{nd} < E_{nf} < \dots \quad (3.27)$$

olur.

3.1.4. Elektrik Dipol Geçişler ve Seçim Kuralları

Atomun kuantum enerji seviyeleri arasındaki geçişler kendiliğinden oluşabileceği gibi dış elektromanyetik alanın uyarması ile de oluşabilir. E_i ve E_j gibi iki enerji seviyesi arasında üç çeşit geçiş mümkündür. Bu geçişlerin olasılık katsayıları (Einstein katsayıları); A_{ji} kendiliğinden geçiş olasılığı, B_{ij} soğurma ile geçiş olasılığı, B_{ji} uyarma ile geçiş olasılığı şeklinde yazılabilir.

Çekirdekten elektrona uzanan vektör r olmak üzere, hidrojen atomu için elektrik dipol

$$\vec{D} = -e \cdot \vec{r} \quad (3.28)$$

ifadesi ile verilir. Klasik olarak böyle bir dipol titreşirse ışımaya yapar. Kuantum mekaniğinde ise bu dipolün beklenen değeri zamanla değişirse dipol ışımaya yapar, aksi halde ışımaya yapmaz.

Hidrojen atomunda ışımalı bir geçişte, ilk ve son durumları belirlemek için ilk durumun baş, yörünge ve manyetik kuantum sayıları sırasıyla n' , l' , m_l' ve son durumunkiler n , l , m_l olmak üzere üç kuantum sayısına gerek vardır. Hidrojen atomunun n, l, m durumundaki dalga fonksiyonu

$$\psi_{nlm}(r, t) = U_{nlm}(r) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (3.29)$$

Hidrojen atomunun n', l', m' durumundaki dalga fonksiyonu

$$\psi_{n'l'm'}(r, t) = U_{n'l'm'}(r) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n'} t} \quad (3.30)$$

olsun. Hidrojen atomu saf nlm durumundayken dipolün beklenen değeri

$$\begin{aligned} \langle d \rangle &= e \langle r \rangle = \int \psi_{nlm}(r, t) r \psi_{nlm}(r, t) d^3 r \\ &= e \int U_{nlm}(r) r U_{nlm}(r) d^3 r \end{aligned} \quad (3.31)$$

olup, zamandan bağımsızdır. Dolayısıyla Hidrojen atomu saf bir durumda (yani belirli bir yörüngesinde) iken ışımaya yapmaz.

Şimdi hidrojen atomunun

$$\psi = a \psi_{nlm} + b \psi_{n'l'm'} \quad , \quad |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (3.32)$$

durumunda bulunduğunu varsayalım ve bu durum üzerinden $\langle r \rangle$ ortalamasını hesaplayalım:

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= |a|^2 \int U_{nlm} r U_{nlm}(r) d^3r + |b|^2 \int U_{n'l'm'} r U_{nlm}(r) d^3r \\ &+ 2abc \cos\left(\frac{E_n - E_{n'}}{h} t\right) \int U_{nlm} r U_{n'l'm'} d^3r \end{aligned} \quad (3.33)$$

olsun. $\langle r \rangle$ ifadesindeki ilk iki terim zamandan bağımsızdır; zamana bağlı olan sonuncu terimin zamanla değişme frekansı $\nu_{nn'} = (E_n - E_{n'})/h$ 'dir. Son terimdeki

$$I = \int U_{nlm} r U_{n'l'm'} d^3r \quad (3.34)$$

integrali sıfırsa ışına yoktur. Dolayısıyla nlm durumundan $n'l'm'$ durumuna geçiş olabilmesi için bu integralin sıfırdan farklı olması gerekir (Aydın, 1998). Çünkü ışının şiddeti bununla orantılıdır. Bu integralin sonlu olduğu geçişler izinli geçişler, sıfır olduğu geçişler ise yasak geçişler olarak adlandırılır. Başka bir ifadeyle herhangi iki i ve j seviyeleri arasında,

$\langle D \rangle_{ji} = \langle j|D|i \rangle = 0$ olduğu durumda elektrik dipol geçişi mümkün değildir. Bu tür geçişler elektrik dipole “yasaklanmış geçişlerdir.

$\langle D \rangle_{ji} = \langle j|D|i \rangle \neq 0$ olduğu durumda ise seviyeler arasında elektrik dipol geçişlerin mümkün olduğu “izinli geçişler” söz konusudur.

Özellikle geçiş integralinin ya da dipol matris elemanının sıfırdan farklı olması ve böylece elektrik dipol geçişlerin gerçekleşmesi için l ve m üzerindeki zorunlu koşullar türetilmelidir. Bu koşullar genellikle elektrik dipol geçişler için seçim kuralları olarak adlandırılır. Bu seçim kurallarına uymayan geçişler genellikle “yasak geçişler” olarak adlandırılır. Tabi ki bunlar sadece yaklaşıklıklarımızın geçerli olduğu kadarıyla yasaktır. Yasak geçişler pekala da gerçekleşebilir, fakat bunlar, burada göz önüne aldığımız elektrik dipol geçişlerden çok daha düşük olasılıklıdır. Seçim kuralları yalnızca pertürbe edilmemiş kararlı durumların açısal momentum özellikleri tarafından belirlenir (anonim).

Denk. (3.34) ile verilen integralin değeri fonksiyonların paritelerine bağlıdır. İntegralin önündeki r tek paritelidir ve dalga fonksiyonlarının paritelerini de l ve l'

belirler. Bu durumda integralin önündeki çarpım fonksiyon tek pariteli ise integralin değeri sıfır, çift pariteli ise integralin değeri sıfırdan farklıdır. Bu durumda elektrik dipol geçişlerin ancak farklı pariteli seviyeler arasında mümkün olacağı sonucuna varılır (Laporte kuralı) ki elektrik dipol momentin beklenen değeri sıfırdan farklı olsun. Bu durumda geçişi belirleyen iki seviyenin yörünge açısal momentum kuantum sayıları farkı

$$\Delta l = l' - l = \pm 1 \text{ (tek sayı)} \quad (3.35)$$

olmalıdır. Elektrik dipol momentinin özellikleri, spinden bağımsız olduğu için ışımali geçişlerde toplam spin kuantum sayısı değişmez kalır. Yani

$$\Delta s = 0 \quad (3.36)$$

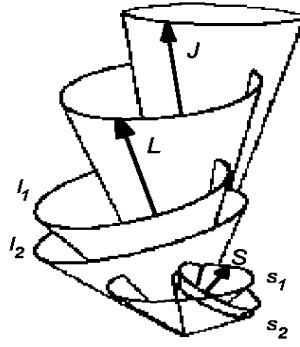
olmalıdır. Yörünge açısal momentum kuantum sayısının dış elektrik ya da manyetik alan üzerindeki izdüşümünü gösteren m kuantum sayısının, dış alanın polarizasyon doğrultusuna bağlı olarak değişimleri $\Delta m = 0$ (π polarizasyonu) ve $\Delta m = \pm 1$ (σ polarizasyonu) şeklindedir. Bunlar birleştirilirse $\Delta m = 0, \pm 1$ olarak yazılabilir. (Aygün ve Zengin 1998, Gökhan Tekeli 2009).

3.1.5. Açısal Momentum Çiftlenimi

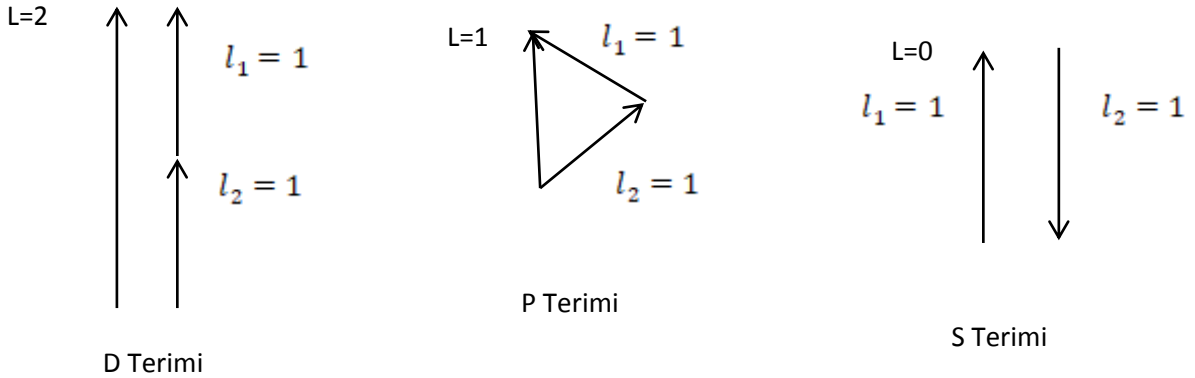
Tek elektron sisteminde l ve s ferdi açısal momentumları j bileşke açısal momentumunu verecek şekilde bir araya gelirler. Aynı atomdaki farklı açısal momentumlar arasında da benzer çiftlenimler vardır. Kapalı kabukların toplam açısal momentumu sifira eşittir. Bu sebeple bir atomun toplam açısal momentumunun hesabında sadece değerlik, yani doldurulmamış kabukların elektronlarının açısal momentumunu ele almak gerekir. Bu açısal momentumlar, atomdaki elektronlar arasındaki manyetik ve elektrik etkileşmeler yoluyla çiftlenirler. Bunlar, atomun J toplam açısal momentumunu üreten özel kuantum mekanik kurallarına göre bir araya gelirler. Açısal momentum çiftlenmesinde iki limit durum vardır: LS ya da Russell-Saunders çiftlenimi ve JJ çiftlenimi.

3.1.5.1. LS Çiftlenimi (Russell-Saunders)

Ferdi i elektronlarının spin ve yörünge açısall momentu arasındaki $(s_i l_i)$ etkileşmeleri, farklı elektronların yörünge ve spin açısall momentu arasındaki karşılıklı etkileşmelerinden $[(l_i, l_j) \text{ ya da } s_i, s_j \text{ çiftlenimi}]$ daha küçüktür; l_i yörünge açısall momentu L toplam yörünge açısall momentunu ve spinler bir S toplam spinini verecek şekilde vektörel olarak bir araya gelirler. LS ile, J toplam açısall momentunu verecek şekilde çiftlenir.



Şekil 1.2. LS Çiftlenimi



Şekil 1.3. İki elektronun l_1 ve l_2 yörünge açısall momentlerinin L toplam açısall momentini verecek şekilde çiftlenmesi.

İki elektronlu He atomu gibi bir sistem için sonuç davranışı 1.3 şeklinde gösterilmiştir. Atomun L yörünge açısall momentu iki elektronun yörünge açısall momentlerinin toplamıdır.

İki elektronlu He atomu gibi bir sistem için sonuç davranışı 1.3 şeklinde gösterilmiştir. Atomun L yörünge açısai momentumu iki elektronun yörünge açısai momentlerinin toplamıdır.

$$L = l_1 + l_2 \quad (3.37)$$

L 'nin mutlak değeri için yine $|L| = \sqrt{L(l+1)} \hbar$ kuralı L kuantum sayısıyla, izleyen değerler geçerli olmak üzere korunur:

$$L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, l_1 - l_2 \quad l_1 \geq l_2 \quad (3.38)$$

L kuantum sayısı terim karakteristiklerini belirler: $L = 0, 1, 2, \dots, S, P, D, \dots$ terimlerini gösterir. Burada $L=1$ olan bir terim P terimi olarak isimlendirilir. Fakat bunun bu konfigürasyonda elektronların birinin ferdi olarak bir p halinde olacağı anlamına gelmediği bilinmelidir.

Optik geçişler için aşağıdaki seçim kuralları geçerlidir:

$$\Delta l = \mp 1 \quad \text{tek elektron için}$$

$$\Delta L = 0, \mp 1 \quad \text{toplam sistem için}$$

Burada $\Delta L = 0$ 'ın anlamı iki elektronlu kuantum durumlarının aynı anda, fakat zıt yönlere değiştiği anlamına gelir. Bu ancak, ağır atomlarda karşımıza çıkan, çiftlenimin kuvvetli olduğu durumlarda mümkündür. Bundan başka toplam spin için,

$$S = s_1 + s_2 \quad |S| = \sqrt{S(S+1)} \hbar \quad (3.39)$$

yazılabilir. S toplam kuantum sayısı burada

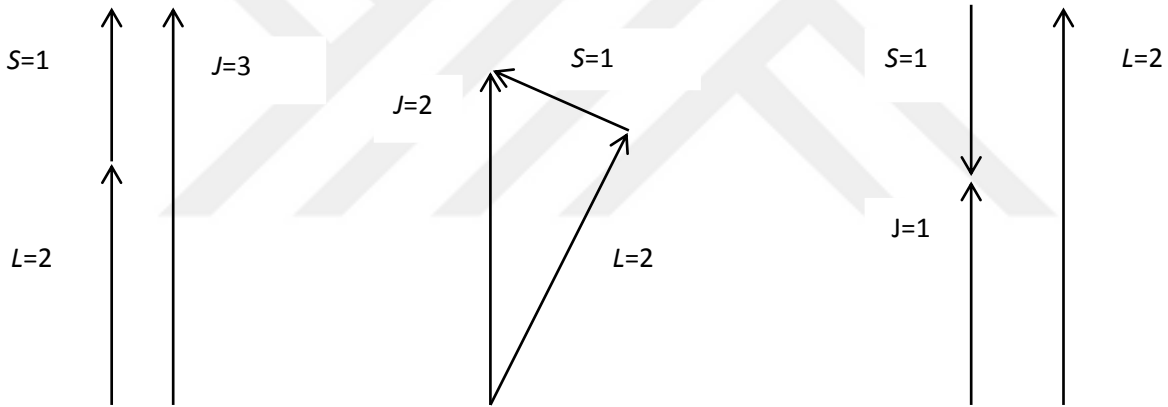
$$S = 1/2 + 1/2 \quad \text{ya da} \quad S = 1/2 - 1/2 \quad \text{yani } S=0 \text{ ya da } S=1$$

iki değerinden birini alabilir. S ile, L toplam yörünge açısal momentumundan açığa çıkan B_L manyetik alanı arasındaki etkileşme L ve S iki açısal momentinin J toplam açısal momentini verecek şekilde çiftlenmesine sebep olur:

$$J = L + S, \quad |J| = \sqrt{J(J+1)} \hbar \quad (3.40)$$

J kuantum sayısı izleyen değerleri alabilir: $S=0$ için $J=L$ ve $S=1$ için $J= L+1, L, L-1$
Bu son durumda bütün terimler üçlülerdir.

Çok elektronlu genel bir durumda S 'nin L 'ye göre $2S+1$ mümkün yönelimi vardır; yani terimlerin çokluğu ($S < L$ ise) $2S+1$ 'dir. Örnek olarak Şekil (1.3) $S=1, L=2$ olan durumdaki mümkün çiftlenimleri göstermektedir.



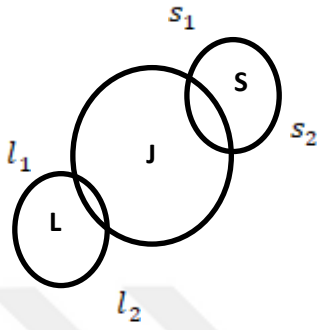
Şekil 1.4. Spin (S) ve yörünge (L) açısal momentlerinin (J) toplam açısal momentumunu oluşturmak üzere bir araya gelmeleri.

3.1.5.2. jj Çiftlenimi

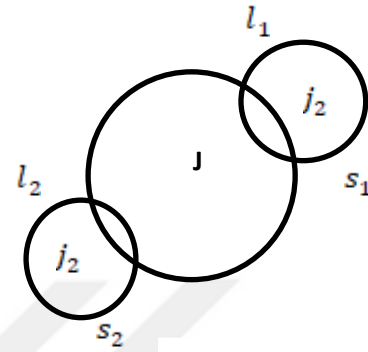
Artan Z çekirdek yüküyle hızlıca artan, her bir elektronun spin-yörünge çiftlenimi sebebiyle sadece ağır atomlar da jj çiftlenimi oluşur.

jj çiftleniminde, tek bir elektron için $(l_i s_i)$ spin-yörünge etkileşimi, farklı elektronlar arasındaki $(l_i l_j)$ ve $(s_i s_j)$ etkileşimleriyle karşılaştırıldığında büyüktür. Bu tip çiftlenme Şekil 1.5b de şematik olarak gösterilmiştir. Karşılaştırma amacıyla LS çiftlenimi Şekil 1.5a da verilmiştir. jj çiftleniminde ferdi elektronların açısal momentumları $l_1 + s_1 \rightarrow j_1$ ve $l_2 + s_2 \rightarrow j_2$ ifadelerine göre çiftlenip, bu ferdi

toplamlar j toplam açısal momentumunu verirler. Bunlar daha sonra atomun J toplam açısal momentumunu verecek şekilde vektörel olarak bir araya gelirler. Burada $J = \sum J_i$ ve $|J| = \sqrt{J(J+1)} \hbar$ dir.



Şekil 1.5a



Şekil 1.5b

Şekil 1.5. a) İki elektron arasındaki LS çiftleniminin şematik gösterimi, b) İki elektron arasındaki JJ çiftleniminin şematik gösterimi

Bu tip çiftlenimde J kuantum sayısı genelleştirilmiş bir kuantum matematiksel vektör modelinden açığa çıkar. Bir L bileşke yörünge açısal momentumu tanımlı değildir. Böylece, burada S , P , D gibi terim sembolü yoktur. J ferdi elektronların açısal momentum kuantum sayılarını göstermek üzere (j_1, j_2) gibi terim notasyonları kullanılmak zorundadır. Mümkün durumların ve J değerlerinin sayısının LS çiftlenimindeki ile aynı olduğu kolaylıkla görünür.

Saf jj çiftlenimi oldukça ağır atomlarda görünür. Optik geçişler için seçim kuralı $\Delta J=0, \pm 1$ 'dir ve $J=0$ 'dan $J=0$ 'a geçiş yasaktır. (Haken, 2000)

3.2. Elektrik Dipol Geçişlerde Spektroskopik Yapı Parametreleri

3.2.1. Elektrik Dipol Geçiş Olasılığı

Geçiş olasılığı, atomik haldeki bir atom uyarıldığında yani atom elektronik seviyede enerji kazandığında atomda olan değişiktir. Bu değişiklik son kabuktaki elektronların daha üst enerji seviyesindeki orbitallere geçmesiyle meydana gelir. (Anonim)

Başka bir tanıma göre bir atomik ya da iyonik sistemin üst enerji seviyesinden alt enerji seviyesine elektronların geçişini karakterize eden geçiş şiddeti ya da geçiş hızı olarak ifade edilebilir ve birimi Hz (s^{-1}) dir (Cowan 1981, Erol 2016).

γJM kuantum sayıları ile tanımlanan enerji seviyesi ile $\gamma' J' M'$ kuantum sayıları ile tanımlanan farklı bir seviye arasındaki elektrik dipol geçiş olasılığı

$$A(\gamma JM \rightarrow \gamma' J' M') = \frac{64\pi^2 \epsilon^2 a_0^2 |E_j - E_i|^2}{3h} S \sum_q \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 \quad (3.41)$$

olarak verilir. (Cowan 1981). Burada $(E_j - E_i)$ ilgili seviyeler arasındaki enerji farkı ve S , çizgi şiddeti olarak bilinir, çiftlenim şekillerine göre değişiklik gösterir ve genel olarak

$$S \equiv |\langle \gamma J | P^{(1)} | \gamma' J' \rangle|^2 \quad (3.42)$$

olarak ifade edilir (Shortley 1935, Tekeli 2009). $\gamma' J' M'$ halinden γJ seviyesinin tüm M durumlarına geçiş ele alındığında elektrik dipol geçiş olasılığı,

$$A = \frac{64\pi^2 \epsilon^2 a_0^2 |E_j - E_i|^2}{3h} S \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^2 \epsilon^2 a_0^2 |E_j - E_i|^2}{3h(2J+1)} S \quad (3.43)$$

şeklinde verilir (Cowan 1981, Tekeli 2009).

3.2.2. Osilatör Şiddeti

Kuantum mekaniğinde J kuantum halinde olan atom çok sayıda başka kuantum hallerine geçebilir. Bu geçişlerin her biri bir osilatör şiddeti olarak bilinir. Osilatör şiddeti, verilen alt enerji seviyesinden üst enerji seviyesine spektroskopik bir geçiş için soğurmaya karşılık gelen atom başına elektronların sayısı olarak da tanımlanabilir. Osilatör şiddeti, klasik soğurma ve dispersiyon teorisi kökenli olup geçiş olasılığıyla

hemen hemen özdeş bir tanımlamaya sahiptir. Birimi olmayan bir niceliktir ve astrofizik ve plazma fiziğinde geniş bir uygulama alanı bulmaktadır (Hilborn 1982, Ateş, 2010).

$J \rightarrow J'$ soğurma geçişi için osilatör şiddeti, S çizgi şiddetine bağlı olarak

$$f_{JJ'} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 (E_{J'} - E_J)}{3h(2J+1)} S = \frac{(E_{J'} - E_J)}{3h(2J+1)} S \quad (3.44)$$

şeklinde verilir (Cowan 1981).

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

$$f_{J'J} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h(2J'+1)} S = -\frac{(E_{J'} - E_J)}{3h(2J'+1)} S \quad (3.45)$$

şeklinde verilir. $(E_{J'} - E_J)$ geçiş enerjisidir. Denk.(3.44) ile verilen ve soğurmaya karşılık gelen osilatör şiddetinin değeri pozitif, Denk.(3.45) ile verilen ve salmaya karşılık gelen osilatör şiddetinin değeri ise negatiftir (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

3.2.3. Uyarılmış Seviyelerin Yaşam Süresi

Uyarılmış haldeki atomların buldukları durumda bulunma süreleri birbirinden farklıdır. Bu nedenle herhangi bir uyarılmış durumun süresi denildiğinde, atomların bu kuantum durumunda ortalama bulunma süresi göz önüne alınır. Bir atomun uyarılmış hali,

$$-\left(\frac{dN_j}{dt}\right) = N_j \sum_{(i < j)} A_{ji} \quad (3.46)$$

ile verilen bozunma sebebiyle ayırt edici bir yaşam süresine sahip olacaktır. Burada N_j , j uyarılmış durumdaki nüfus yoğunluğudur ve A_{ji} 'ler j seviyesinden kaynaklanan tüm ışımali geçişler için Einstein kendiliğinden salma katsayılarıdır. Oranın zamanla azalması nedeniyle negatif işaret ortaya çıkar. Bu bağıntının integrali alınarsa,

$$N_j(t) = N_j(0)e^{-t/\tau_j} \quad (3.47)$$

ifadesi bulunur. Burada $N_j(t)$, herhangi bir t anındaki uyarılmış durum nüfus yoğunluğu, $N_j(0)$ ise $t=0$ 'daki başlangıç uyarılmış durum nüfus yoğunluğudur. τ_j ise

$$\tau_j = \frac{1}{\sum_{(i<j)} A_{ji}} \quad (3.48)$$

şeklinde tanımlanan yaşam süresidir. Güçlü atomik geçişlerde A_{ji} , 10^{+8} s^{-1} ile 10^{+9} s^{-1} arasında değişir. Yaşam süreleri çarpışmalar veya etkilemeli salma ile kısaltılabilir (Cowan, 1981).

3.3. En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model (WBEPM) Teori

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, çok elektronlu bir sistemdeki elektronları sisteme en zayıf bağlı bir elektron ve en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar olmak üzere elektronları iki kısma ayırma düşüncesi üzerine kurulmuştur (Zheng ve ark., 2004). İyonlaşma potansiyeli sisteme en zayıf bağlı elektronun, bulunduğu temel seviyeden tamamen koparılması için dışarıdan verilmesi gereken minimum enerji olarak tanımlanmaktadır. Bu durum, teori olarak ilk defa Zheng tarafından ortaya atılmıştır (Zheng 1986, Zheng ve ark 2001-a-c, Çelik 2005). Birinci iyonlaşma işleminde sistemden sadece tek bir elektron yani sisteme en zayıf bağlı bir elektron uyarılabilir ya da koparılabilir. Örnek olarak $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 2p^5$ elektronik konfigürasyonuna sahip bir kez iyonlaşmış Argon verilebilir. Bu konfigürasyondaki beş adet p elektronu özdeştir ve bunları birbirinden ayırt etmek mümkün değildir. Böyle bir sistemde uyarma ya da iyonlaşma işleminde ilk önce bu p elektronları uyarılacak ya da iyonlaşacaktır. Bu sebepten dolayı ilk uyarılmış ya da iyonize olmuş elektron bir kez iyonlaşmış Argon' un en zayıf bağlı elektronu olacaktır.

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori de sisteme en zayıf bağlı elektron ele alındığından sistemdeki diğer elektronlarla ilgili karmaşık hesaplamalar basite indirgenir. Bu yöntemde atomik ya da iyonik özelliklerin araştırılması daha kolaydır ve

bu yöntemle, diğer yöntemlere göre daha doğru sonuçlar elde edilmektedir. Bu teoride çok elektrona sahip sistemler tek elektronlu sistemler gibi göz önüne alınabilmektedir. Böylelikle karmaşık çok elektron problemi, sisteme en zayıf bağlı olan tek bir elektronun basit analitik tek elektron probleminin çözümüne indirgenmektedir (Zheng ve ark., Çelik, 2005; Ateş, 2010).

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisine uygun olarak verilen bir sistemdeki en zayıf bağlı elektron, çekirdek ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar tarafından oluşturulan bir potansiyel alanda hareket eder. Bu potansiyel alan

$$V(r_i) = \frac{Z^*}{r_i} + \frac{\beta}{r_i^2} \quad (3.49)$$

olarak tanımlanır. (Zheng ve ark, 2000-a,b,c,d). Potansiyelin ilk kısmı Coloumb potansiyelidir. Sisteme en zayıf bağlı elektronun dışındaki diğer elektronlar geçiş yapacak elektronu perdeleler. Bundan dolayı bu yöntemde potansiyel fonksiyonun Coulomb teriminde bir etkin çekirdek yükü, Z^* kullanılır. Potansiyel alanın ikinci kısmı ise elektrik dipol potansiyelidir.

En zayıf bağlı elektron atomik çekirdeği kutupladığı için bir elektrik dipol moment oluşur. Oluşan bu elektrik dipol moment en zayıf bağlı elektronun davranışını etkiler. Schrödinger denkleminde en zayıf bağlı elektronun toplam potansiyeli kullanılarak,

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r_i) \right] \Psi_i = \varepsilon_i \Psi_i \quad (3.50)$$

ve bazı dönüşümler yapılarak, radyal denklem çözülüp β parametresi,

$$\beta = \frac{[d(d+1)+2dl]}{2} \quad (3.51)$$

olarak bulunabilir. Bu durumda potansiyel,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{[d(d+1)+2dl]}{2r_i^2} \quad (3.52)$$

olarak yazılabilir. (Zheng ve ark, 2000-a,b,c,d; Çelik, 2005; Ateş, 2010). Burada ilk terim en zayıf bağlı elektronun kinetik enerjisini, ikinci terim Coulomb potansiyelini ve üçüncü terim ise kutuplanma etkisinden kaynaklanan elektrik dipol potansiyelini göstermektedir. İfadedeki r_i ; en zayıf bağlı elektron ile çekirdek arasındaki uzaklık, l ; yörünge açısız momentum kuantum sayısı, Z^* ; sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronların perdeleme etkisi ile en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisini göz önüne alan etkin çekirdek yükü ve d ise kuantum kusurunun belirlenmesinde gerekli olan bir parametredir. d , tamsayı olmayan etkin baş kuantum sayısı (n^*) ve etkin yörünge kuantum sayısı (l^*) kuantum sayılarıyla ve tam sayı olan n ve l kuantum sayılarından yararlanılarak belirlenir.

En zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonu genel olarak,

$$\Psi_i(r_i, \theta_i, \varphi_i) = R_{n^* l^*}(r_i) Y_{l^* m}(\theta_i, \varphi_i) \quad (3.53)$$

olarak yazılır. Radyal denklemin çözümü sürecinde denklem (3.50) ilk operatörden gelen $\frac{l(l+1)}{2r^2}$ merkezci potansiyelin yerine, $\frac{l^*(l^*+1)}{2r^2}$ ifadesi yazılmaktadır ve d 'ye bağlı terim (3.52)'de ki ikinci terimle gösterilmektedir. Tek elektronlu atom olan Hidrojen atomuna benzer olarak en zayıf bağlı elektron için tek elektron Schrödinger denkleminin çözümü,

$$\Psi = C \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n^*-l^*-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right) Y_{l^* m}(\theta, \phi) \quad (3.54)$$

olarak verilir. Burada C normalizasyon katsayısı olup,

$$C = \left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n^*-l^*-1)!} \Gamma(n^* - l^* + 1)\right]^{-1/2} \quad (3.55)$$

olarak verilir ve ifadede ki n^* , l^* ve ε ,

$$l^* = l + d \quad (3.56)$$

$$n^* = n + d \quad (3.57)$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (3.58)$$

olarak tanımlanır (Zheng 1977; 1986; 1987, Zheng ve Xin 1991, Zheng ve Li 1994, Zheng ve ark. 2000-a,d; 2001-a,b,c, Çelik 2005). Denk. (3.58) ile tanımlanan ε , en zayıf bağlı elektronun enerjisi olup, buradaki n^* ise en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisinden kaynaklanan etkin baş kuantum sayısını ifade etmektedir (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

Radyal dalga fonksiyonu için

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (3.59)$$

normalizasyon şartı kullanılarak ve (3.59) ifadesinde verilen iki Laguerre polinomunun integral formülü kullanılarak,

$$\int_0^{\infty} t^{\lambda} e^{-t} L_m^{\mu}(t) L_m^{\mu'}(t) dt = (-1)^{m+m'} \Gamma(\lambda+1) \times \sum_k \binom{\lambda-\mu}{m-k} \binom{\lambda-\mu'}{m'-k} \binom{\lambda+k}{k} \quad (3.60)$$

ifadesi elde edilir. Herhangi farklı (n_i, l_i) seviyesinden, (n_f, l_f) seviyesine geçiş için radyal geçiş integrali,

$$\begin{aligned}
\langle n_i, l_i | r^k | n_f, l_f \rangle &= \int_0^\infty r^{k+2} R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) dr \\
&= (-1)^{n_f+n_i+l_f+l_i} \left(\frac{2Z_f^*}{n_f^*} \right)^{l_f^*} \left(\frac{2Z_i^*}{n_i^*} \right)^{l_i^*} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*} \right)^{-l_f^*-l_i^*-k-3} \times \left[\frac{n_f^{*4} \Gamma(n_f^*+l_f^*+1)}{4Z_f^{*3} (n_f-l_f-1)!} \right]^{-1/2} \\
&\times \left[\frac{n_i^{*4} \Gamma(n_i^*+l_i^*+1)}{4Z_i^{*3} (n_i-l_i-1)!} \right]^{-1/2} \times \sum_{m_1=0}^{n_f-l_f-1} \sum_{m_2=0}^{n_i-l_i-1} \frac{(-1)^{m_2}}{m_1! m_2!} \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*} \right)^{m_1+m_2} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} + \frac{Z_i^*}{n_i^*} \right)^{-m_1-m_2} \\
&\times \Gamma(l_f^*+l_i^*+m_1+m_2+k+3) \times \sum_{m_3=0}^S \binom{l_i^*-l_f^*+k+m_2+1}{n_f^*-l_f^*-1-m_1-m_3} \times \binom{l_f^*-l_i^*+k+m_1+1}{n_i^*-l_i^*-1-m_2-m_3} \\
&\times \binom{l_i^*+l_f^*+k+m_1+m_2+m_3+2}{m_3}
\end{aligned} \tag{3.61}$$

olarak verilir. (Zheng ve ark, 2000-a,b,c,d; Çelik, 2005).

Bu durumda en zayıf bağlı elektronun konumunun beklenen değer ifadesi,

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^*+1)}{2Z^*} \tag{3.62}$$

olarak bulunur (Zheng ve ark, 2000-a,b,c,d; Çelik, 2005).

En zayıf bağlı elektronun ε enerjisinin negatifi, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisine eşittir. Yani,

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \tag{3.63}$$

olarak tanımlanır. WBEPM teoride radyal geçiş integralinin hesaplanmasında Z^*, n^* ve l^* parametrelerini belirlemek yeterlidir. Bu parametrelerin doğrudan teoriden

elde edilmesi zordur (Zheng ve ark.,1999). Bu nedenle uygun enerji deęerleri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen deęerlerini kullanarak Z^*, n^* ve l^* parametleri belirlenebilir. Z^*, n^* ve l^* parametlerini en zayıf baęlı elektron potansiyel model teori de elde edebilmek için Denk. (3.62) ve Denk. (3.63) birlikte çözümlür. En zayıf baęlı elektron potansiyel model teori, hem düşük hem de yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçiřler için etkili bir metottur.



4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, F III, Ar II ve Yb III gibi iyonlarda geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süresi gibi spektroskopik parametreler WBEPM teori kullanılarak hesaplanmıştır.

Spektroskopik parametrelerin hesaplanmasında yapılması gereken ilk iş, çizgi şiddetini belirlemektir. Çizgi şiddeti ise baskın olan çiftlenim durumuna, elektronun geçiş tipine, geçiş yapan elektron sayısına göre belirlenir. Hafif olarak tabir edilen atom ya da iyonlarda *LS* çiftlenimi baskınken, ağır atom ya da iyonlarda *jj* çiftlenimi baskındır. Dolayısıyla bu çalışmada, F III ve Ar II iyonik sistemlerinde baskın çiftlenim şekli *LS* çiftlenimi olduğundan, çizgi şiddeti *LS* çiftlenimine göre yazılıp hesaplamalara dahil edilmiştir. Yb III ağır iyonu için ise baskın çiftlenim şekli *jj* çiftlenimi olduğundan çizgi şiddeti *jj* çiftlenimine göre hesaplamalara dahil edilmiştir.

Real*8 aritmetiğinde (çift hassasiyet) Fortran 77 programlama dilinde bilgisayar programları ile hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalarda temel seviyeden uyarılmış seviyelere veya uyarılmış seviyeden diğer uyarılmış seviyelere elektrik dipol geçişler göz önüne alınmıştır.

Yapılan hesaplamalarda gerekli radyal geçiş integralleri, saf teorik hesaplama yöntemlerinde olduğu gibi karmaşık hesaplama sürecine girmeden pratik hesaplama sürecine sahip yarı deneysel yöntem olan WBEPM teori kullanılarak belirlenmiştir. WBEPM teoride radyal geçiş integrallerinin hesaplanmasında, Z^* , n^* , l^* parametrelerinin belirlenmesi yeterlidir. Bu parametrelerin belirlenebilmesi için de enerji değerlerine ve yarıçapların beklenen değerlerine ihtiyaç vardır. Bu teori, deneysel enerji değerlerini ve yarıçaplara ait beklenen değerleri esas alan bir hesaplama yöntemidir. Bu sebeple hesaplamalarda gerekli enerji değerleri için, NIST (National Institute of Standards and Technology) veritabanındaki enerjiler kullanılmıştır. Elde edilecek sonuçların hassasiyeti için seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri de sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) ile ve relativistik olmayan Hartree-Fock (NRHF) yöntemiyle belirlenmiştir. NRHF yöntemiyle yarıçapların beklenen değerlerini hesaplamak için HF96 paket programı kullanılmıştır.

WBEPM teorii kullanılarak geiş olasılıkları, osilatör Őiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi parametreler, hem düşük hem de yüksek uyarılmış seviyeler için hesaplanabilmektedir. Ayrıca bu teori ile izinli seviyeler arasındaki geişler için hesaplamalar yapılırken, yasak seviyeler arasındaki geişler için hesaplamalar da kolaylıkla yapılabilmektedir (Çelik ve Ateş 2016, Çelik ve ark. 2016, Ateş ve ark. 2014;2012, Çelik ve ark. 2012, Ateş ve Çelik 2009).

F III, Ar II ve Yb III için elde edilen geiş olasılığı, osilatör Őiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri, çalışmanın ek kısmında tablolar ile verilmiştir. Geiş olasılığı ve osilatör Őiddeti tablolarında her geiş dizisinin ilk satırı multipler geiş çizgileri geri kalan satırlar ince yapı geiş çizgilerini ifade etmektedir. Tablolarda yıldız üst indisi ile verilen değerler NRHF yöntemiyle belirlenen yarıçapların beklenen değerleri kullanılarak elde edilen değerleri, diğer sonuçlar ise NCA yöntemiyle belirlenen yarıçapların beklenen değerleri kullanılarak elde edilen değerleri göstermektedir.

4.1. F III için Yapılan Hesaplamalar

Yedi elektrona sahip azot benzeri Flor'da elektrik dipol geiş olasılığı, ve uyarılmış seviyelerin yaşam süresi değerleri WBEPM teorii kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplamalarda hem multipler çizgiler arasındaki geişler hem de ince yapı çizgileri arasındaki geişler göz önüne alınmıştır. Bu geişler için hesaplanan geiş olasılığı değerleri, NIST de mevcut olan Coulomb yaklaşımı kullanılarak hesaplanan Wiese ve arkadaşları (1966) tarafından verilen değerlerle karşılaştırılmış olup Ek 1 deki Tablo 2.1 de verilmiştir. Tablo 2.2 de FIII için WBEPM teorii kullanılarak elde edilen uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri sunulmuştur.

Tablo 2.1 de verilen elde edilen geiş olasılığı değerlerinin, NIST'de verilen değerlerle % \pm 99 uyumlu olduğu görülmüştür. Ayrıca tabloda, literatürde mevcut olmayan bazı geiş olasılığı değerleri de rapor edilmiştir.

4.2. Ar II için Yapılan Hesaplamalar

Klor benzeri ve hafif olarak adlandırılabilcek bir kez iyonlaşmış Argon'da elektrik dipol geiş olasılığı sonuçları, hem multipler çizgiler arasındaki geişler için hem de ince yapı çizgileri arasındaki geişler için hesaplanmıştır ve Ek 2'de bulunan Tablo

3.1’de rapor edilmiştir. Ar II’de yapılan tüm hesaplamalarda WBEPM teori kullanılmıştır.

Tablo 3.1’de verilen göz önüne alınan temel seviyeden uyarılmış seviyeye ve iki uyarılmış seviyeler arasındaki geçişler için geçiş olasılığı değerleri, literatürdeki NIST’de listelenen (Kramida ve ark. (2015) tarafından verilen değerlerle, Hibbert ve Hansen (1994) tarafından verilen değerlerle ve Irimia ve Fischer (2003) tarafından verilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Bu karşılaştırmalar neticesinde genel olarak bu çalışmada elde edilen değerlerle literatürdeki bahsi geçen değerler arasında iyi bir uyum söz konusudur.

4.3. Yb III için Yapılan Hesaplamalar

jj çiftlenim durumuna sahip, ağır nadir toprak elementlerinden biri olan ve atom numarası 68 olan Erbium benzeri iki kez iyonlaşmış İterbiyum’da WBEPM teori kullanılarak geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti değerleri hesaplanmış ve bu değerler Ek 3’deki Tablo 4.1.’de sunulmuştur.

Elde edilen elektrik dipol geçiş olasılığı değerleriyle literatürden edinilen geçiş olasılığı değerleri karşılaştırıldığında; bu çalışmada verilen sonuçların, Safronova ve Safronova (2009) tarafından verilen ilk mertebe ve ikinci mertebe RMBPT değerlerinden her ikisi ile de uyum içerisinde olduğu gözlenmiştir. Öberg ve Lundberg (2007) tarafından rapor edilen geçiş olasılığı değerleri ile bazı geçiş değerlerinde oldukça uyum söz konusu iken bazı geçiş değerlerinde uyumsuzluk mevcuttur. Biemont ve ark. (2001) tarafından verilen iki farklı değerle ise bazı değerler hariç genel bir uyumsuzluk görülmüştür. Ancak Tablo 4.1 dikkatlice incelenecek olursa, literatürden elde edilebilen burada adı geçen literatür değerlerinin de birbirleriyle uyumsuzluğu söz konusudur. Sonuç olarak bu çalışmada verilen ve literatürde rapor edilen diğer değerlerin doğruluklarının tam olarak saptanması için daha çok deneysel ve teorik değer gerekmektedir.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

5.1 Sonuçlar

Her cisim temel olarak belli atomlardan oluşur. Her atom da kendine özgü spektrum verir. Astrofiziksel bir cismin (yıldızın, yıldızlar arası atmosferin, güneşin, gezegenlerin,...vs.) sahip olduğu atomların ya da iyonların belli seviyeleri arasındaki elektron geçişleri (ya da bu geçişlerle karakterize edilen geçiş olasılığı, osilatör şiddeti, uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi nicelikler) hakkında bilgi edinilirse, o cismin hangi bileşenlerden ne miktarda oluştuğu hakkında bilgi edinilmiş olunur. Yani bu astrofiziksel cisimlerden gözlemlenebilen, bize ulaşan spektrumlar sayesinde o cisimde bulunan elementlerin bolluğu başka bir deyişle bulunma miktarı belirlenebilir. Bu gözlenen spektrumlar gözlenen geçişin şiddetini verir. Astrofiziksel herhangi bir geçişin şiddeti, optiksel olarak uygun şartlar altında geçişin meydana geldiği atomların sayısı ile ilgilidir.

Sonuç olarak, özellikle astrofizikte önemli olan spektroskopik niceliklerin belirlenmesi ile birçok astrofiziksel cisim hakkında önemli bilgiler edinilebilir. Dolayısıyla F III, Ar II ve Yb III gibi astrofiziksel cisimlerde tespit edilmiş bu iyonik yapılara ait spektroskopik parametrelerin belirlenmesi de önem arz etmektedir.

Tablolarda verilen değerler ile literatürden elde edilen değerler arasındaki uyuma bakıldığında bu çalışmada kullanılan hesaplama yönteminin kullanılabilirliği ve bu yöntem kullanılarak elde edilen verilerin güvenilirliği açıktır. Ayrıca bu tez çalışmasında ele alınan iyonlara ait bazı çizgiler arasındaki geçişlerle ilgili olan geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve yaşam süresi değerlerinin eksikliği literatürde hala mevcut olabilmektedir. Dolayısıyla bu çalışmada verilen literatürde bulunmayan spektroskopik parametre değerlerinin sunulmasıyla literatürdeki bu eksiklik giderilebilir.

5.2 Öneriler

WBEPM teorisinin, bu çalışmadan ve daha önce yapılan çalışmalardan (Ateş ve Çelik 2009, Ateş ve ark. 2009; 2012; 2014, Çelik ve Ateş 2016, Çelik ve ark. 2016, Çelik ve ark. 2012) görülebileceği gibi hafif atom ve iyonlarda spektroskopik parametrelerin hesaplanmasında güvenilir sonuçlar verdiği gibi ağır atom ve iyonlarda

da kullanışlı bir yöntem olduğu söylenebilir. Buradan hareketle WBEPM teorisinin, jj çiftleniminin baskın olduğu karmaşık elektron konfigürasyonuna sahip diğer ağır atom ve iyonlarda kullanışlılığı ve güvenilirliği daha fazla test edilebilir. Böylece, özellikle ağır atomlarda ve iyonlarda hem bu teoriyle ilgili daha kesin bir yargıya varılabilir hem de astrofizikte oldukça önemli yeri olan ağır atomik ve iyonik sistemlerin spektroskopik özellikleri hakkında teorik bilgi elde edilebilir ve eğer literatürde varsa eksiklikler giderilebilir.



KAYNAKLAR

- Abbas, A., Basha, T.S., Abdel-Aal, Z.A., 1988, Half-width, shift and transition probability of Ar II lines, *Jpn J Appl Phys* 27: 804–807.
- Andersen, J.O, Aashamar, K., 1993, Oscillator strengths for transitions among low-lying quartet terms in the nitrogen isoelectronic sequence, *Physica Scripta* 47, 160-168.
- Anonim, <https://acikders.ankara.edu.tr/mod/resource/view.php?id=10496>
- Aparicio, J.A., Gigosos, M.A., Mar, S., 1997, Transition probability measurement in an Ar II plasma, *J Phy B At Mol Opt Phys* 30: 3141–3157.
- Ateş, Ş., 2010, Çok Elektronlu Sistemlerde Atomik Yapı Hesaplamaları, Doktora Tezi, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.
- Ateş, Ş., and Çelik, G., 2009, “Oscillator Strengths for Allowed Transitions in Li II”, *Acta Phys. Pol. A*, 116, 169-175.
- Ateş, Ş., Çelik, G., Tekeli, G., and Taşer, M., 2012, “Oscillator strengths of allowed transitions for O III”, *Atomic Data And Nuclear Data Tables*, 98 Issue: 1 Pages: 1-18.
- Ateş, Ş., Gökçe, Y., Çelik, G., Yıldız, M., 2014, ‘Oscillator strengths and transition probabilities for singly ionized terbium’, *Canadian Journal of Physics*, 92, 9, 1043-1046.
- Ateş, Ş., Tekeli, G., Çelik, G., Akın, E., and Taşer, M., 2009. “Oscillator strengths for singly ionized oxygen”, *Eur. J. Phys. D* 54, 21-24.
- Aygün, E., Zengin, D.M., Atom ve Molekül Fiziği, Ankara Üniversitesi Fizik Bölümü Ankara.
- Behringer K, Thoma P (1976). Measurement of ultraviolet Argon (II) transition probabilities. *J Quant Spect Radiat Trans* 16: 605

- Belmonte, M.T., Djurović, S., Peláez, R.J., Aparicio, J.A., Mar, S., 2014, Improved and expanded measurements of transition probabilities in UV Ar II spectral lines, *Mon Not R Astron Soc* 445: 3345–3351.,
- Bhatia, A.K., Landi, E., 2003, *At. Data Nucl. Data Tables*, 85, 317.
- Biemont, E., Träbert, E., 2000, Transition rates of the resonance line doublet in the Cl I sequence, Ar II-Ge XVI, *J Phys B: At Mol Opt Phys* 33: 2939–2946.
- Biemont, E., Garnir, H.P., Li, Z.S., Lokhnygin, V., Palmeri, P., Quinet, P., Svanberg, S., Wyart, J.H. and Zhang, Z.G., 2001, *J.Phys.B: At. Mol.Opt.Phys.*, 34, 1869.
- Brandsen, B.H., Joachain, C.J., 1999, *Bilim Yayıncılık*, 290-296.
- Cowan, R.D., 1981, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, Berkeley, *University of California Press*.
- Çelik, G., 2005, Çok Elektronlu Atomlarda Elektronik Geçişler, Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.
- Çelik, G., Ateş, Ş., 2007, The calculation of transition probabilities for atomic oxygen, *Eur. J. Phys. D*, 44, 433.
- Çelik, G., 2007, The calculation of transition probabilities between individual lines for atomic lithium, *J Quant Spect Radiat Trans* 103: 578.
- Çelik, G., Ateş, Ş., 2008, Calculations of transition probabilities for some excited levels of Na I, *Acta Phys Pol A* 113: 1619–1627.
- Çelik, G., Ateş, Ş., 2016, “E1 and E2 transitions for Fe XVI, Co XVII and Ni XVIII” *Astrophysics and Space Science*, 361,229.
- Çelik, G., Ateş Ş., and Tekeli, G., 2016, “Electric dipole transition probabilities, oscillator strengths, and lifetimes for Co^{16+} ”, *Canadian Journal of Physics*, Vol. 94 (1) 23-25.
- Çelik, G., Çelik, E., Kılıç, H.Ş., 2008, Calculation of the 1s-2s two-photon excitation cross - section in atomic hydrogen, *Eur J Phys D* 50: 237.

- Çelik, G., Ateş, Ş., Özarlan, S., Taşer, M., 2011, Transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes for singly ionized magnesium, *J Quant Spect Radiat Trans* 112: 2330–2334.
- Çelik, G., Ateş, Ş., Tekeli, G., 2016, Electric dipole transition probabilities, oscillator strengths, and lifetimes for Co16+, *Can J Phys* 94: 23–25.
- Çelik, G., Ateş, Ş., Erol, E., 2015, Oscillator strengths and lifetimes for Cu I, *Can J Phys* 93: 1015–1023.
- Çelik, G., Doğan, D., Ateş Ş., and Taşer, M., 2012, "*Electric quadrupole transition probabilities for singly ionized magnesium*", *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 113, 1601–1605.
- Çelik, G., Gökçe, Y., Yıldız, M., 2014, Electric quadrupole transition probabilities for atomic lithium, *At Data Nucl Data Tables* 100: 792–802.
- Çelik, G., Erol, E., Taşer, M., 2013, Transition probabilities, oscillator strengths and radiative lifetimes for Zn II, *J Quant Spect Radiat Trans* 129: 263–271.
- Çelik, G., Doğan, D., Ateş, Ş., Taşer, M., 2012, Transition probabilities and radiative lifetimes of levels in F I, *At Data Nucl Data Tables* 98: 566–588.
- Dipti SD (2016). Electron-impact excitation rate-coefficients and polarization of subsequent emission for Ar⁺ ion. *J Quant Spect Radiat Trans* 176: 12–23.
- Gaigalas G, Fischer CF (1996). Extension of the HF program to partially filled F-subshells.
- Djenizea, S., Sreckovi A., and Bukvic, S., Experimental transition probabilities in N III, N IV and NV spectra, *Eur. Phys. J.D* 20, 11-16 (2002).].
- Feldman, U., Doschek, G.A., Mariska, J.T., Bhatia, A.K., Mason, H.E., 1978, Electron densities in the solar corona from density-sensitive line ratios in the N I isoelectronic sequence, *Astrophysical Journal*, 226, 674.
- Froese Fischer, C., And Tachiev, G., 2004, Breit–Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences, *At. Data Nucl Data Tables* 87, 1-184.

Gaigalas, G., Fischer, C.F., 1996, Extension of the HF program to partially filled F-subshells, *Comput Phys Commun* 98: 255.

Haken, H., Wolf, H.C., 2000, Atom ve Kuantum Fiziği, Değişim Yayınları, 305-314

Hensberge, H., Van Santvoort, J., van der Huent, K.A., and Morgan, T.H., 1986, *Astron. Ap.*, in press.

Hibbert, A., Hansen, J.E., 1987, Accurate wavefunctions for 2S and 2P^o states of Ar II, *J Phys B At Mol Phys* 20: 245–251.

Hibbert, A., Hansen, J.E., 1989, Lifetimes of some 3p44p levels in Ar II, *J Phys B At Mol Phys* 22: 347–351.

Hibbert, A., Hansen, J.E., 1994, Transitions in Ar II, *J Phys B At Mol Phys* 27: 3325–3347.

Irimia, A., Fischer, C.F., (2003)
http://nlte.nist.gov/MCHF/Elements/Ar/Cl_18.20.abimchflin.dat.mp

Karmakar, S., Das, M.B., 2007, Lifetime measurement of some excited states belonging to the 3p4nd (n=4–6) configuration of Ar II, *Pramana J Phys* 69: 477–480.

Kuantum Mekaniği ve Atom Fiziği Ders Notları Z. Zekeriya AYDIN Ankara Üniversitesi

Kramida A, Ralchenko Yu, Reader J, NIST ASD Team (2015). NIST Atomic Spectra Database (ver.5.3), [online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2017, September 22]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

Lindgard, A., Nielsen, S.E., 1977, *At Data Nucl Data Tables* 19: 533.

Lodders K (2008). *Ap J* 674: 607.

Loginov, A.V., Tuchkin, V.I., 2001, Radiative constants in the spectra of ions of the erbium isoelectronic sequence, *Optics and Spectroscopy*, 90, 631-638.

- Morton, D.C., 1991, Atomic data for resonance absorption lines. i. wavelengths longward of the Lyman limit, *The Astrophysical Journal Supplement Series 77*: 119–202.
- Öberg, R.J., and Lundberg, H., 2007, Experimental transition probabilities and improved level energies in Yb III, *Eur. Phys. J.D* 42, 15-34.
- Raja Sekhar, B.N., Padmanabhan, S., Shastri, A., Meenakshi Raja Rao, P., Kurup, M.B., Prasad, K.G., 1998, Mean lifetime measurements of F II and F III levels using beam-foil technique, *Pramana J.Phys.* 50, 231-237.
- Rynkun, P., Jönsson, P., Gaigalas, G., Froese Fischer, C., 2014, Energies and E1, M1, E2, and M2 transition rates for states of the $2s^2 2p^3$, $2s 2p^4$, and $2p^5$ configurations in nitrogen-like ions between F III and Kr XXX, *At. Data Nucl Data Tables* 100, 315-402.
- Safranova, U.I., and Safronova, M.S., 2009, Correlation and relativistic effects for the 4f-nl multipole transitions in Yb III ions, *Phys. Rev. A*, 79, 032511.
- Tekeli, G., 2009, Yüksek Lisans Tezi, Elektrik Dipol Geçişler.
- Tekeli, G., Ateş, Ş., Çelik, G., 2008, Electric Dipole Oscillator Strengths of Boron, *Turkish journal of physics* 32, 331.
- Verner, D.A., Barthel, P.D., Tytler, D., 1994, Atomic data for absorption lines from the ground level at wavelengths greater than 228Å, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* 108, 287-340.
- Verner, D.A., Verner, E.M., Ferland, G.J., 1996, Atomic data for permitted resonance lines of atoms and ions from H to Si, and S, Ar, Ca, and Fe, *At Data Nucl Data Tables* 64 : 1–180.
- Zeren, A.M., 1998, Atomlar Moleküller, Birsen Yayınevi, 155-160.
- Zhang, Z.G., Li, Z.S., Svanberg, S., Palmeri, P., Quinet, P. And Biemont, E., 2011, Experimental and theoretical lifetimes in Yb III, *Eur. Phys. J. D.*, 15, 301-305.

- Zheng, N.W., 1986, A New Theoretical Model for Many-Electron Atom and Ion Systems I, *Chinese Science Bulletin*, 31: 1238-1242.
- Zheng, N.W., 1987, A new theoretical model for many-electron atom and ion systems II, *Chin Sci Bull* 32: 1263–1267.
- Zheng, N.W., 1988, A new outline of atomic theory, *Jiang Su Education Press*, Nanjing, P.R. China.
- Zheng, N.W., Wang, T., Yang, R., Wu, Y.G., 2000-a, Theoretical calculation of transition probability for N atom and ions, *J Chem Phys* 112: 7042–7056.
- Zheng, N.W., Sun, Y.J., Wang, T., Ma, D.X., Zhang, Y. and Su, W., 2000-b, Transition Probability of Lithium Atom and Lithiumlike Ions With Weakest Bound Electron Wave Functions and Coupled Equations, *International Journal of Quantum Chemistry* 76: 51-61.
- Zheng, N.W., Wang, T. and Yang, R., 2000-c, Transition Probability of Cu I, Ag I and Au I from Weakest Bound Electron Potential Model Theory, *Journal of Chemical Physics* 113 (15), 6169.
- Zheng, N.W., Ma, D.X., Yang, R.Y., Zhou, T., Wang T. and Han S 2000-d An Efficient Calculation of the Energy Levels of the Carbon Group *Journal of Chemical Physics* 113 (5): 1681-1687
- Zheng, N.W., Wang, T., 2002, Theoretical resonance transition probabilities and lifetimes for atomic hydrogen, *Chem Phys* 282: 31.
- Zheng, N.W., Wang, T., Ma, D. X., Zhou, T. and Fan, J., 2004, Weakest Bound Electron Potential Model Theory, *In. J. Quant. Che.*, 98, 281-290.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Yağmur Nuray ATEŞ
Uyruğu : T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi : AKSARAY-1992
Telefon : 0506 756 99 26
Faks :
e-mail :

EĞİTİM

Derece	Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise	: Cemil Keleşoğlu Lisesi, Karatay, Konya	2010
Üniversite	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2015
Yüksek Lisans	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2019
Doktora	:	

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görevi
2017-2018	Çumra Anadolu İmam Hatip Lisesi	Ücretli Öğretmenlik
2018-2019	Çumra Sedat Çumralı Mesleki ve Teknik Anadolu Lisesi	Ücretli Öğretmenlik
2018-2019	Çumra Mevlana Mesleki ve Teknik Anadolu Lisesi	Ücretli Öğretmenlik

UZMANLIK ALANI

Atom ve Molekül Fiziği

YABANCI DİLLER

İngilizce, Rusça

BELİRTMEK İSTEĞİNİZ DİĞER ÖZELLİKLER**YAYINLAR**

Ateş, Ş., Ateş, Y.N., 2018, Bir Kez İyonlaşmış Argon (Ar II)' da Geçiş Olasılığı Hesaplamaları, Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi., 44(2), 107-116.

Ateş, Ş., Çelik, G., Ateş, Y.N., 2016, Yb III İçin Geçiş Olasılıkları, Adım Fizik Günleri V, Eskişehir, Poster Bildiri, 111.

Ateş, Ş., Çelik, G., Ateş, Y.N., 2016, Ar II İçin Elektrik Dipol Geçiş Olasılıkları, Adım Fizik Günleri V, Eskişehir, Poster Bildiri, 96.