



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAKIR VE BAZI BAKIR BENZERİ
İYONLARDA ATOMİK YAPI
HESAPLAMALARI

Elmas EROL

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Ocak-2016
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ KABUL VE ONAYI

Elmas EROL tarafından hazırlanan “Bakır ve Bazı Bakır Benzeri İyonlarda Atomik Yapı Hesaplamaları” adlı tez çalışması 15/01/2016 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği / oy çokluğu ile Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Başkan

Doç. Dr. Gültekin ÇELİK

Danışman

Doç. Dr. Gültekin ÇELİK

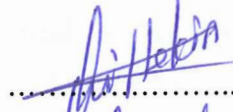
Üye

Doç. Dr. Şule ATEŞ


Üye

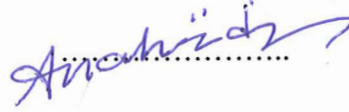
Doç. Dr. Murat YILDIZ

İmza

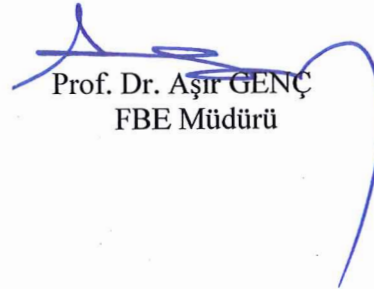

.....


.....


.....


.....

Yukarıdaki sonucu onaylarım.


Prof. Dr. Aşır GENÇ
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.

Elmas EROL

Tarih:29.12.2015

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

BAKIR VE BAZI BAKIR BENZERİ İYONLARDA ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

Elmas EROL

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Gültekin ÇELİK

2016, 89 Sayfa

Jüri

Doç. Dr. Gültekin ÇELİK

Doç. Dr. Şule ATEŞ

Doç. Dr. Murat YILDIZ

Bu tez çalışmasında, Cu I, Zn II, Ga III, Ge IV, As V, Se VI ve Kr VIII için elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri hesaplanmıştır. Hesaplamalarda en zayıf bağlı elektron potansiyel model “WBEPM” teori ve kuantum kusur orbital “QDO” teori kullanılmıştır. Elde edilen sonuçlar literatürdeki veriler ile karşılaştırılmış ve iyi bir uyum gözlenmiştir. Ayrıca bakır atomu ve bazı bakır benzeri iyonlar için literatürde bulunmayan geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süresi değerleri elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Bakır atomu, bakır benzeri iyonlar, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, geçiş olasılığı, kuantum kusur orbital teori, osilatör şiddeti, yaşam süresi

ABSTRACT

MS THESIS

**ATOMIC STRUCTURE CALCULATIONS IN THE COPPER AND SOME
COPPER LIKE IONS**

Elmas EROL

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

Advisor: Assoc. Prof. Gültekin ÇELİK

2016, 89 Pages

Jury

Assoc. Prof. Gültekin ÇELİK

Assoc. Prof. Şule ATEŞ

Assoc. Prof. Murat YILDIZ

In this study, the electric dipole transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes of excited levels for Cu I and Zn II, Ga III, Ge IV, As V, Se VI, Kr VIII have been calculated. In the calculations, the weakest bound electron potential model “WBEPM” theory and quantum orbital defect “QDO” theory have been used. The obtained results are compared to the data in the literature and a good agreement has been observed. Moreover, the transition probability, the oscillator strength and the lifetime values of excited levels not existing in literature for atomic copper and some copper-like ions have been obtained.

Keywords: Atomic copper, copper like ions, lifetime, oscillator strength, transition probability, quantum defect orbital theory, weakest bound electron potential model theory

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Doç. Dr. Gültekin ÇELİK yönetiminde hazırlanarak, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur.

Lisans ve Yüksek lisans eğitimim boyunca bana her konu da yol gösteren, engin bilgi ve deneyimlerini aktarmaktan çekinmeyen, her zaman ilgi ve alakasını esirgemeyen, öğrencisi olmaktan onur duyduğum saygıdeğer danışman hocam; Sayın Doç. Dr. Gültekin ÇELİK' e çok teşekkür ederim.

Ayrıca çalışmam esnasında bana sürekli yardım eden, her konuda yol gösteren ve desteğini hiç esirgemeyen hocam Doç. Dr. Şule ATEŞ' e çok teşekkür ederim.

Hayatım boyunca maddi ve manevi desteklerini hiç esirgemeyen, babam Osman EROL, annem Feride EROL ve kardeşlerime çok teşekkür ederim.

Çalışmalarım boyunca her an yanımda olan, her konuda desteğini esirgemeyen, yanındayken hep mutlu olduğum canım dostum, Gamze BAKKAL'a en içten teşekkürlerimi sunarım.

Elmas EROL
KONYA-2016

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
ÖNSÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR	ix
1. GİRİŞ	10
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI	13
2.1. Cu I için Daha Önce Yapılan Çalışmalar	13
2.2. Zn II için Daha Önce Yapılan Çalışmalar	14
2.3. Ga III için Daha Önce Yapılan Çalışmalar	14
2.4. Ge IV için Daha Önce Yapılan Çalışmalar	15
2.5. As V için Daha Önce Yapılan Çalışmalar	16
2.6. Se VI için Daha Önce Yapılan Çalışmalar	17
2.7. Kr VIII için Daha Önce Yapılan Çalışmalar	18
3. MATERYAL VE YÖNTEM	20
3.1. Atomik Yapı Hesaplamaları	20
3.1.1. Elektrik dipol geçiş olasılığı	20
3.1.2. Elektrik dipol osilatör şiddeti.....	21
3.1.3. Geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve çizgi şiddeti arasındaki bağıntılar	22
3.1.4. Uyarılmış seviyelerin yaşam süresi	22
3.1.5. Elektrik dipol çizgi şiddeti	23
3.2. En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model (WBEPM) Teori.....	31
3.3. Kuantum Kusur Orbital (QDO) Teori	36
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA	40
4.1. Araştırma Sonuçları	41
4.1.1. Atomik bakırda (Cu I) yapılan hesaplamalar	41
4.1.2. Bir kez iyonlaşmış çinkoda (Zn II) yapılan hesaplamalar	43
4.1.3. İki kez iyonlaşmış galyumda (Ga III) yapılan hesaplamalar	44
4.1.4. Üç kez iyonlaşmış germanyumda (Ge IV) yapılan hesaplamalar.....	45
4.1.5. Dört kez iyonlaşmış arsenik de (As V) yapılan hesaplamalar	46
4.1.6. Beş kez iyonlaşmış selenyum da (Se VI) yapılan hesaplamalar.....	47
4.1.7. Yedi kez iyonlaşmış kripton da (Kr VIII) yapılan hesaplamalar	49
4.2. Tartışma	51
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	53
5.1 Sonuçlar	53

5.2 Öneriler	54
KAYNAKLAR	55
EKLER	61
EK-1 Cu I için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları	61
EK-2 Zn II için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları	68
EK-3 Ga III için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları.....	73
EK-4 Ge IV için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları	76
EK-5 As V için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları	79
EK-6 Se VI için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları	82
EK-7 Kr VIII için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları	85
ÖZGEÇMİŞ	88

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

A	:	Einstein katsayısı
$A_{JJ'}$:	Elektrik dipol geçiş olasılığı (Hz)
$E_{J'} - E_J$:	Geçiş enerjisi (cm^{-1})
$f_{JJ'}$:	Osilatör şiddeti
S	:	Elektrik dipol çizgi şiddeti
τ_J	:	Yaşam süresi (s)

Kısaltmalar

As V	:	Dört kez iyonlaşmış arsenik
CI	:	Konfigürasyon etkileşmesi
Cu I	:	Atomik bakır
Ga III	:	İki kez iyonlaşmış galyum
Ge IV	:	Üç kez iyonlaşmış germanyum
HF	:	Hartree-Fock
Kr VIII	:	Yedi kez iyonlaşmış kripton
l^*	:	Etkin yörünge açısal momentum kuantum sayısı
MCDF	:	Multikonfigürasyonel Hartree-Fock
MCHF	:	Multikonfigürasyonel Dirac-Fock
n^*	:	Etkin baş kuantum sayısı
NCA	:	Sayısal Coulomb yaklaşımı
NRHF	:	Non-Relativistik Hartree-Fock
QDO	:	Kuantum kusur orbital
Se VI	:	Beş kez iyonlaşmış selenyum
Z^*	:	Etkin çekirdek yükü
Zn II	:	Bir kez iyonlaşmış çinko
WBEPM	:	En zayıf bağlı elektron potansiyel model

1. GİRİŞ

Doğada bulunan maddelerin atomik özelliklerinin detaylı olarak bilinmesi, yeni maddelerin üretilmesi ve bu yeni maddelere dayalı olarak yeni teknolojilerin geliştirilmesi için son derece önemlidir. Spektroskopi, ışık madde etkileşimini inceleyen bir bilimdir. Spektroskopi en çok tanınan hali ile maddenin özelliklerinin, soğurulan ve salınan parçacıkların, ışık veya ses aracılığı ile incelenmesidir. Maddenin dış özelliklerinin yanı sıra iç özellikleriyle de ilgili önemli bilgiler verir. Spektroskopide maddenin elektromanyetik radyasyonu yayması, soğurması, saçması, saptırması, genel olarak maddenin elektromanyetik radyasyonla etkileşimi ve bu etkileşimin sonuçları analitik amaçlara dönük olarak incelenir. Spektroskopi, gökbilim ve uzaktan algılamada da önemli uygulama alanı bulmaktadır. Spektroskopi bu bağlamda atomik ve moleküler seviyelerde temel fiziği ve astronomiyi birleştiren bir bağ oluşturur. Daha geniş olarak, doğada gözlemediğimiz her şeyi açıklar. Renkler arası ayırım gibi vizyonunu kendisi yaratır. Bunu her element tarafından radyasyonun soğurulması ya da salınmasıyla elde edilen ışık ve madde etkileşmesi çalışmasıyla sağlar (Pradhan ve Nahar, 2011). Geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve yaşam süresi gibi spektroskopik niceliklerin hesaplanması temel bilimsel araştırma kategorisine girer. Bu tür hesaplamalar, foton ile etkileşen atomik veya iyonik sistemlerin elektron konfigürasyonlarındaki elektronların enerji seviyeleri arasındaki geçişleriyle karakterize edilir. Atomik yapı hesaplamaları, Schrödinger denkleminin çözümüyle başlar. Göz önüne alınan atomik ya da iyonik sistemlerde elektron sayısı arttıkça hem elektronların birbirleri arasındaki etkileşimler hem de relativistik etkilerin hesaplamalarda göz önüne alınmasını gerektirdiğinden Schrödinger denkleminin çözümünü zorlaştırmaktadır. Tek elektronlu sistemler dışında Schrödinger denklemi analitik olarak çözülemediğinden, çok elektronlu sistemlerde nümerik çözümler yapılır. Bu nümerik çözümlerin yapılabilmesi için çok elektronlu sistemlerde çeşitli yaklaşımlar yapılır. Yapılan her bir yaklaşım literatüre farklı bir çözüm yöntemi olarak girmektedir. Bu yaklaşım yöntemleri genel olarak Ab initio yöntemler, yarı deneysel yöntemler ve yoğunluk fonksiyonel yöntemler olarak üç ana başlık etrafında toplanabilir.

İki seviye arasındaki elektron geçişiyle ilgili çalışmalarda ilk yapılacak iş ilk ve son seviyeye ait dalga fonksiyonlarının doğru olarak belirlenmesidir. Seviyelere ait dalga fonksiyonlarının belirlenmesi ile ilgili literatürde birçok yöntem bulunmaktadır. Multikonfigürasyonel Hartree-Fock (MCHF), Multikonfigürasyonel Dirac-Fock (MCDF),

Konfigürasyon etkileşmesi (CI) ve R-Matrix gibi relativistik etkileri ve elektron korelasyon etkilerini hesaba katan güçlü teorik yöntemler örnek olarak verilebilir. Bu yöntemler, temel ve düşük uyarılmış seviyeler içeren geçişleri çok hassas olarak karakterize edebilirken uyarılmış ve özellikle yüksek uyarılmış seviyelerle çalışılması gerektiğinde yüksek uyarılmış seviyeleri tanımlayacak dalga fonksiyonlarının oluşturulmasında çok fazla konfigürasyon ve orbital baz fonksiyonları kullanılması gerekir. Bu durum hesaplamaları oldukça karmaşıktır. Bu tür hesaplamalarda yarı deneysel yöntemlerin kullanılması, özellikle yüksek uyarılmış seviyelere ait dalga fonksiyonlarının oluşturulmasında önemli kolaylıklar sağlayabilmektedir (Ateş, 2010).

Bu çalışmada 29 elektrona sahip bakır atomu ve bazı bakır benzeri iyonlar (Zn II, Ga III, Ge IV, As V, Se VI, Kr VIII) çalışılmıştır. Söz konusu atom ve iyonlarda geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri hesaplanmıştır. Hesaplamalarda en zayıf bağlı elektron potansiyel model (WBEPM) teori ve kuantum kusur orbital (QDO) teori kullanılmıştır. Bu tip yarı deneysel yöntemlerde geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi spektroskopik niceliklerin hesaplanmasında bazı parametrelerin belirlenmesi için deneysel enerji değerleri gereklidir. Ayrıca en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride deneysel enerji değerlerine ek olarak seviyelere ait yarıçapların da bilinmesi gerekir. Bu çalışmada seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri, Sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) (Lindgrad ve Neilsen, 1977) ve Non-relativistic Hartree-Fock (NRHF) (Gaigalas ve Fischer, 1996) yöntemi kullanılarak belirlenmiş ve geçiş olasılığı, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam sürelerinin hesaplanmasında gerekli olan parametrelerin elde edilmesinde kullanılmıştır. Bu parametreler belirlendikten sonra Cu I, Zn II, Ga III, Ge IV, As V, Se VI ve Kr VIII için hesaplamalar bilgisayar ortamında yapılmıştır. Hesaplanan atomik yapı parametrelerine ait sonuçlar, literatürden elde edilebilen teorik ve deneysel yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmış ve literatürle uyumlu olduğu gözlenmiştir. Ayrıca literatürde olmayan bazı yüksek uyarılmış seviyelere ait geçişleri içeren geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süresi değerleri belirlenmiştir.

Çalışmanın 1. bölümünü oluşturan Giriş bölümünden ve 2. bölümünü oluşturan Kaynak Araştırması bölümünden sonra 3. bölümde atomik yapı hesaplamalarının önemli bir kısmını oluşturan çizgi şiddeti, geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve yaşam süresi gibi

spektroskopik nicelikler incelenmiştir. Daha sonra bu spektroskopik niceliklerin hesaplanmasında kullanılan yöntemler detaylı olarak ifade edilmiştir.

Araştırma sonuçlarının yer aldığı 4. bölümde sonuçları tezin *Ek* kısımlarında verilen atomik bakır ve bazı bakır benzeri iyonlar için hesaplanan elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam sürelerine ait sonuçların literatürden elde edilebilen değerlerle karşılaştırmaları detaylı olarak verilmiştir. Sonuçlar ve önerilerin yer aldığı 5. bölümde ise hesaplamalar için kullanılan metotların avantajları, elde edilen sonuçların değerlendirilmesi ve geleceğe yönelik planlar yer almaktadır.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Cu I için Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Spektroskopide referans çizgilerin bir kaynağı olarak bunların uygulamaları ve basit elektronik yapıya sahip olmaları nedeniyle 29 elektronu olan bakır izoelektronik diziye sahip iyonlar, birçok deneysel ve teorik yöntemle çalışılmaktadır. Bu sistemler kapalı kabuk dışında tek bir elektron içermesine rağmen özellikle serinin düşük üyelerinde uyarılmış konfigürasyonların çekirdekle güçlü etkileşmelerinden dolayı bunların teorik davranışları karmaşıktır (Curtis ve Theodosiou, 1989).

Literatürde bakır atomu (Cu I) için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam sürelerini veren birçok çalışma bulunmaktadır. Bunlardan bazıları şöyle sıralanabilir:

Corlis (1970), 2024-8092 Å aralığında 272 çizgi için osilatör şiddetlerini ölçen çalışmaları derleyerek sonuçları üzerinde kritik tartışmalar yaptı. Migdalek ve Baylis (1979), bakır izoelektronik dizisinin, $4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2, 3/2}$ ve $4p^2P_{1/2, 3/2} - 4d^2D_{3/2, 5/2}$ geçişleri için osilatör şiddetlerindeki core-polarizasyon etkilerini Relativistic Hartree-Fock metotla yarı deneysel model potansiyel yaklaşımı kullanarak hesapladılar. Lindgard ve ark. (1980), $n = 4$, $n = 5$ ve $n \leq 9$ için Cu I'in izoelektronik dizisinde rydberg seviyelerinin yaşam sürelerini, geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini nümerik Coulomb yaklaşımını kullanarak hesapladılar. Carlsson ve ark. (1987), uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri için deneysel ölçümler yaptılar. Carlsson (1988), Multiconfigurational Hartree-Fock (MCHF) yöntemiyle hesaplamalar yaptı. Curtis ve Theodosiou (1989), atom numarası 29-92 arasında olan bakır benzeri iyonlarda $4p^2P_{1/2}$, $4p^2P_{3/2}$, $4d^2D_{3/2}$ ve $4d^2D_{5/2}$ seviyelerinin yaşam sürelerini Hartree-Slater potansiyeli ve deneysel enerji verilerini kullanarak hesapladılar. Biemont ve ark. (1996), Cu I' in nl^2L ($l = s, p, d, f$) ($n \leq 9$) seviyeleri için yaşam sürelerini, konfigürasyon etkileşmelerini ve en önemli olan relativistik düzeltmelerini hesap içerisine alan Relativistic Hartree-Fock (HFR) yaklaşımı kullanarak hesapladılar. Nana ve ark. (1997), Kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarını kullanılarak lityum benzeri, sodyum benzeri ve bakır benzeri iyonların rydberg seviyelerinin ve düşük uyarılmış seviyelerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Ahmad ve ark. (2010), bakırın baş serileri için osilatör şiddetlerini $3d^{10}4s^2S_{1/2} \rightarrow 3d^{10}np^2P_{1/2}$ ($7 \leq n \leq 13$) ve $^2P_{3/2}$ ($7 \leq n \leq 23$) magneto-optical rotation spectroscopic tekniğiyle ölçtüler. Civis ve ark. (2011), Time-resolved FTIR emission spectroscopy tekniğini kullanarak enerji seviyelerini ölçtüler ve Coulomb yaklaşımını kullanarak geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini hesapladılar. Ayrıca Osherovich ve ark.

(1981), Zerneck ve ark. (1994) ve Malakhov (1978) tarafından gerçekleştirilen deneysel ölçümler de Cu I ile ilgili daha önce yapılan çalışmalar arasında yer almaktadır.

2.2. Zn II için Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Literatürde bakır benzeri bir kez iyonlaşmış çinko (Zn II) için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam sürelerini veren birçok çalışma bulunmaktadır. Bunlardan bazıları şöyle sıralanabilir:

Migdalek ve Baylis (1979), bakır izoelektronik dizisinin, $4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2, 3/2}$ ve $4p^2P_{1/2, 3/2} - 4d^2D_{3/2, 5/2}$ geçişleri için osilatör şiddetlerindeki core-polarizasyon etkilerini Relativistic Hartree-Fock metotla yarı deneysel model potansiyel yaklaşımı kullanarak hesapladılar. Lindgard ve ark. (1980), $n = 4$, $n = 5$ ve $n \leq 9$ için Cu I'in izoelektronik dizisinde rydberg seviyelerinin yaşam sürelerini, geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini nümerik Coulomb yaklaşımını kullanarak hesapladılar. Curtis ve Theodosiou (1989), atom numarası 29-92 arasında olan bakır benzeri iyonlarda $4p^2P_{1/2}$, $4p^2P_{3/2}$, $4d^2D_{3/2}$ ve $4d^2D_{5/2}$ seviyelerinin yaşam sürelerini Hartree-Slater potansiyeli ve deneysel enerji verilerini kullanarak hesapladılar. Nana ve ark. (1997), kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarını kullanarak lityum benzeri, sodyum benzeri ve bakır benzeri iyonların rydberg seviyelerinin ve düşük uyarılmış seviyelerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Lagmago ve ark. (1998), Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik radyal dipol matris elemanlarını uzunluk ve hız formunda analitik olarak türettiler. Bakır benzeri iyonlarda Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik yaklaşımda osilatör şiddetlerini hesapladılar. Blagoev ve ark. (2004), Zn I' in ($3d^{10}4s^2S_1$, $n = 6-8$; $3d^{10}4s^2D$, $n = 4-7$) ve Zn II'nin ($3d^{10}4p^2P_{1/2, 3/2}$, $4d^2D_{3/2, 5/2}$, $3d^{10}5s^2S_{1/2}$) seviyeleri için yaşam sürelerini time-resolved laser-induced fluorescence tekniğini kullanarak ölçtüler.

2.3. Ga III için Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Literatürde bakır benzeri iki kez iyonlaşmış galyum (Ga III) için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam sürelerini veren birçok çalışma bulunmaktadır. Bunlardan bazıları şöyle sıralanabilir:

Migdalek ve Baylis (1979), bakır izoelektronik dizisinin, $4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2, 3/2}$ ve $4p^2P_{1/2, 3/2} - 4d^2D_{3/2, 5/2}$ geçişleri için osilatör şiddetlerindeki core-polarizasyon etkilerini Relativistic Hartree-Fock metotla yarı deneysel model potansiyel yaklaşımı kullanarak

hesapladılar. Lindgard ve ark. (1980), $n = 4$, $n = 5$ ve $n \leq 9$ için Cu I'in izoelektronik dizisinde rydberg seviyelerinin yaşam sürelerini, geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini nümerik Coulomb yaklaşımını kullanarak hesapladılar. Lindgard ve ark. (1982), Ga I, Ga III, Tl I ve Tl III için beam-foil yöntemini kullanarak yaşam sürelerini ölçtüler. Curtis ve Theodosiou (1989), atom numarası 29-92 arasında olan bakır benzeri iyonlarda $4p \ ^2P_{1/2}$, $4p \ ^2P_{3/2}$, $4d \ ^2D_{3/2}$ ve $4d \ ^2D_{5/2}$ seviyelerinin yaşam sürelerini Hartree-Slater potansiyeli ve deneysel enerji verilerini kullanarak hesapladılar. Nana ve ark. (1997), kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarını kullanarak lityum benzeri, sodyum benzeri ve bakır benzeri iyonların rydberg seviyelerinin ve düşük uyarılmış seviyelerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Lagmago ve ark. (1998), Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik radyal dipol matris elemanlarını uzunluk ve hız formunda analitik olarak türettiler. Bakır benzeri iyonlarda Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik yaklaşımda osilatör şiddetlerini hesapladılar. Owono ve ark. (2005), relativistik osilatör şiddetlerini Cu benzeri sistemlerde dipol geçişler için, Dirac ve yarı relativistik kuantum kusur radyal dalga fonksiyonları kullanarak belirlediler. Hesaplamalar core-polarizasyon etkileri açıkça hesap içerisine dahil edilerek yapıldı. Radyal integraller kapalı formda analitik olarak elde edildi. Cheng ve Mitroy (2013), Ga III için siyah cisim ışınım kaymasını hesapladılar. Bazı seviyeler için de enerji seviyelerini ve osilatör şiddetlerini hesapladılar. Bu hesaplamalar yarı deneysel kor-potansiyelini temel alan konfigürasyon etkileşmesi yöntemiyle yapıldı.

2.4. Ge IV için Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Literatürde bakır benzeri üç kez iyonlaşmış germanyum (Ge IV) için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam sürelerini veren birçok çalışma bulunmaktadır. Bunlardan bazıları şöyle sıralanabilir:

Bakır benzeri iyonlar için $n=4,5,6$ uyarılmış seviyeler arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri, Relativistic Hartree-Fock (HFR) dalga fonksiyonları kullanılarak Cheng ve Kim (1978) tarafından hesaplandı. Migdalek ve Baylis (1979), bakır izoelektronik dizisinin, $4s \ ^2S_{1/2} - 4p \ ^2P_{1/2,3/2}$ ve $4p \ ^2P_{1/2,3/2} - 4d \ ^2D_{3/2,5/2}$ geçişleri için osilatör şiddetlerindeki core-polarizasyon etkilerini Relativistic Hartree-Fock metotla yarı deneysel model potansiyel yaklaşımı kullanarak hesapladılar. Lindgard ve ark. (1980), $n = 4$, $n = 5$ ve $n \leq 9$ için Cu I'in izoelektronik dizisinde rydberg seviyelerinin yaşam sürelerini, geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini nümerik Coulomb yaklaşımını kullanarak hesapladılar.

Curtis ve Theodosiou (1989), atom numarası 29-92 arasında olan bakır benzeri iyonlarda $4p^2P_{1/2}$, $4p^2P_{3/2}$, $4d^2D_{3/2}$ ve $4d^2D_{5/2}$ seviyelerinin yaşam sürelerini Hartree-Slater potansiyeli ve deneysel enerji verilerini kullanarak hesapladılar. Nana ve ark. (1997), kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarını kullanarak lityum benzeri, sodyum benzeri ve bakır benzeri iyonların rydberg seviyelerinin ve düşük uyarılmış seviyelerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Chou ve Johnson (1997), relativistic many-body perturbation theory yöntemini kullanarak bakır benzeri, gümüş benzeri ve altın benzeri iyonlar için geçiş genliklerini hesapladılar. Lagmago ve ark. (1998), Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik radyal dipol matris elemanlarını uzunluk ve hız formunda analitik olarak türettiler. Bakır benzeri iyonlarda Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik yaklaşımda osilatör şiddetlerini hesapladılar. Owono ve ark. (2005), relativistik osilatör şiddetlerini bakır benzeri sistemlerde elektrik dipol geçişler için, Dirac ve yarı relativistik kuantum kusur radyal dalga fonksiyonları kullanarak belirlediler. Hesaplamalar core-polarizasyon etkileri açıkça hesap içerisine dahil edilerek yapıldı. Radyal integraller kapalı formda analitik olarak elde edildi.

2.5. As V için Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Literatürde bakır benzeri dört kez iyonlaşmış arsenik (As V) için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam sürelerini veren birçok çalışma bulunmaktadır. Bunlardan bazıları şöyle sıralanabilir:

Bakır benzeri iyonlarda $n=4,5,6$ için uyarılmış seviyeler arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve dalga boyları Relativistic Hartree-Fock (HFR) dalga fonksiyonları kullanılarak Cheng ve Kim (1978) tarafından hesaplandı. Migdalek ve Baylis (1979), bakır izoelektronik dizisinin, $4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2, 3/2}$ ve $4p^2P_{1/2, 3/2} - 4d^2D_{3/2, 5/2}$ geçişleri için osilatör şiddetlerindeki core-polarizasyon etkilerini Relativistic Hartree-Fock metotla yarı deneysel model potansiyel yaklaşımı kullanarak hesapladılar. Lindgard ve ark. (1980), $n = 4$, $n = 5$ ve $n \leq 9$ için Cu I'in izoelektronik dizisinde rydberg seviyelerinin yaşam sürelerini, geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini numerical Coulomb yaklaşımını kullanarak hesapladılar. Pinnington ve ark. (1981), As III, IV ve V iyonları için $4s$, $5s$, $6s$, $4p$, $5p$, $6p$ seviyelerinin yaşam sürelerini ve multipllet osilatör şiddetlerini, beam-foil spectroscopi yöntemiyle ölçtüler. Curtis ve Theodosiou (1989), atom numarası 29-92 arasında olan bakır benzeri sistemlerde $4p^2P_{1/2}$, $4p^2P_{3/2}$, $4d^2D_{3/2}$ ve $4d^2D_{5/2}$ seviyelerinin yaşam sürelerini Hartree-Slater potansiyeli ve deneysel enerji verilerini kullanarak hesapladılar.

Nana ve ark. (1997), kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarını kullanarak lityum benzeri, sodyum benzeri ve bakır benzeri iyonların rydberg seviyelerinin ve düşük uyarılmış seviyelerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Chou ve Johnson (1997), relativistic many-body perturbation theory yöntemini kullanarak bakır benzeri, gümüş benzeri ve altın benzeri iyonlar için geçiş genliklerini hesapladılar. Lagmago ve ark. (1998), Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik radyal dipol matris elemanlarını uzunluk ve hız formunda analitik olarak türettiler. Bakır benzeri iyonlarda Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik yaklaşımda osilatör şiddetlerini hesapladılar. Owono ve ark. (2005), relativistik osilatör şiddetlerini Bakır benzeri sistemlerde dipol geçişler için, Dirac ve yarı relativistik kuantum kusur radyal dalga fonksiyonları kullanarak belirlediler. Hesaplamalar, core-polarizasyon etkileri açıkça hesap içersine dahil edilerek yapıldı. Radyal integraller kapalı formda analitik olarak elde edildi.

2.6. Se VI için Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Literatürde bakır benzeri beş kez iyonlaşmış selenyum (Se VI) için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam sürelerini veren birçok çalışma bulunmaktadır. Bunlardan bazıları şöyle sıralanabilir:

Bakır benzeri iyonlarda $n=4,5,6$ için uyarılmış seviyeler arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri Relativistik Hartree-Fock (HFR) dalga fonksiyonları kullanılarak Cheng ve Kim (1978) tarafından hesaplandı. Migdalek ve Baylis (1979), bakır izoelektronik dizisinin, $4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2,3/2}$ ve $4p^2P_{1/2,3/2} - 4d^2D_{3/2,5/2}$ geçişleri için osilatör şiddetlerindeki core-polarizasyon etkilerini Relativistic Hartree-Fock metotla yarı deneysel model potansiyel yaklaşımı kullanarak hesapladılar. Lindgard ve ark. (1980), $n = 4$, $n = 5$ ve $n \leq 9$ için Cu I'in izoelektronik dizisinde rydberg seviyelerinin yaşam sürelerini, geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini nümerik Coulomb yaklaşımını kullanarak hesapladılar. Curtis ve Theodosiou (1989), atom numarası 29-92 arasında olan bakır benzeri sistemlerde $4p^2P_{1/2}$, $4p^2P_{3/2}$, $4d^2D_{3/2}$ ve $4d^2D_{5/2}$ seviyelerinin yaşam sürelerini Hartree-Slater potansiyeli ve deneysel enerji verilerini kullanarak hesapladılar. Nana ve ark. (1997), kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarını kullanarak lityum benzeri, sodyum benzeri ve bakır benzeri iyonların rydberg seviyelerinin ve düşük uyarılmış seviyelerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Chou ve Johnson (1997), relativistic many-body perturbation theory yöntemini kullanarak bakır benzeri, gümüş benzeri ve altın benzeri iyonlar için geçiş genliklerini hesapladılar. Lagmago ve ark. (1998), Klein-Gordon dalga

fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik radyal dipol matris elemanlarını uzunluk ve hız formunda analitik olarak türettiler. Bakır benzeri iyonlarda Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik yaklaşımda osilatör şiddetlerini hesapladılar. Owono ve ark. (2005), relativistik osilatör şiddetlerini bakır benzeri sistemlerde elektrik dipol geçişler için, Dirac ve yarı relativistik kuantum kusur radyal dalga fonksiyonları kullanarak belirlediler. Hesaplamalar, core-polarizasyon etkileri açıkça hesap içerisine dahil edilerek yapıldı. Radyal integraller kapalı formda analitik olarak elde edildi.

2.7. Kr VIII için Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Literatürde bakır benzeri yedi kez iyonlaşmış kripton (Kr VIII) için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam sürelerini veren birçok çalışma bulunmaktadır. Bunlardan bazıları şöyle sıralanabilir:

Bakır benzeri iyonlarda $n=4,5,6$ için uyarılmış seviyeler arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri Relativistic Hartree-Fock (HFR) dalga fonksiyonları kullanılarak Cheng ve Kim (1978) tarafından hesaplandı. Migdalek ve Baylis (1979), bakır izoelektronik dizisinin, $4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2, 3/2}$ ve $4p^2P_{1/2, 3/2} - 4d^2D_{3/2, 5/2}$ geçişleri için osilatör şiddetlerindeki core-polarizasyon etkilerini Relativistic Hartree-Fock metotla yarı deneysel model potansiyel yaklaşımı kullanarak hesapladılar. Lindgard ve ark. (1980), $n = 4$, $n = 5$ ve $n \leq 9$ için Cu I'in izoelektronik dizisinde rydberg seviyelerinin yaşam sürelerini, geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetlerini nümerik Coulomb yaklaşımını kullanarak hesapladılar. Livingston ve ark.(1980), bakır benzeri Kr VIII iyonunda, enerji seviyelerini ve $4p$ seviyesinin yaşam sürelerini foil-excitation yöntemi kullanarak ölçtüler. Curtis ve Theodosiou (1989), atom numarası 29-92 arasında olan bakır benzeri sistemlerde $4p^2P_{1/2}$, $4p^2P_{3/2}$, $4d^2D_{3/2}$ ve $4d^2D_{5/2}$ seviyelerinin yaşam sürelerini Hartree-Slater potansiyeli ve deneysel enerji verilerini kullanarak hesapladılar. Nana ve ark. (1997), kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarını kullanarak lityum benzeri, sodyum benzeri ve bakır benzeri iyonların rydberg seviyelerinin ve düşük uyarılmış seviyelerin osilatör şiddetlerini hesapladılar. Chou ve Johnson (1997), relativistic many-body perturbation theory yöntemini kullanarak bakır benzeri, gümüş benzeri ve altın benzeri iyonlar için geçiş genliklerini hesapladılar. Lagmago ve ark. (1998), Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik radyal dipol matris elemanlarını uzunluk ve hız formunda analitik olarak türettiler. Bakır benzeri iyonlarda Klein-Gordon dalga fonksiyonu kullanarak relativistik yarı klasik yaklaşımda osilatör şiddetlerini hesapladılar. Owono ve ark. (2005), relativistik osilatör

şiddetlerini bakır benzeri sistemlerde elektrik dipol geçişler için, Dirac ve yarı relativistik kuantum kusur radyal dalga fonksiyonları kullanarak belirlediler. Hesaplamalar, core-polarizasyon etkileri açıkça hesap içerisine dahil edilerek yapıldı. Radyal integraller kapalı formda analitik olarak elde edildi.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Atomik Yapı Hesaplamaları

Atomlar, moleküler sistemlerden farklı olarak sadece elektronik enerji seviyelerine sahiptirler. Eğer atomun elektronik enerji seviyelerindeki elektron, bir dış alana maruz kalırsa bu elektron atomun diğer enerji seviyelerine geçiş yapabilir. Einstein'a göre atomdaki soğurma ve salma süreçleri ani süreçler olup birbirlerinden bağımsız olarak gerçekleşirler. Atomlardaki soğurma ve salma olayları elektron geçişleriyle karakterize edilir. Elektron geçişleri, göz önüne alınan iki seviye arasında geçiş hızları, geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve yaşam süreleri gibi temel niceliklerle tanımlanırlar.

3.1.1. Elektrik dipol geçiş olasılığı

Atomik geçiş olasılığı kavramı, 1916 yılında Einstein tarafından madde ve ışık arasındaki etkileşimin kuantum mekaniksel tanımlanması ile ortaya atılmıştır. Einstein, enerjileri E_i ve E_k olan iki uyarılmış atomik durum arasında soğurma, salma ve etkilemeli salma gibi üç temel kuantum sürecini göz önüne alarak Planck'ın temel ışımaya kanunlarını türetti (Wiese, 2001). Geçiş olasılığı, atom ya da iyonun ait enerji seviyeleri arasında üst enerji seviyesindeki bir elektronun alt enerji seviyesine geçişiyle ilgili bir nicelik olup iki enerji seviyesi arasındaki geçiş şiddeti, geçiş hızı gibi niceliklere bağlı olan bir parametredir ve birimi Hz (sn^{-1})'dir. Geçiş olasılığı, geçişin gözlemlendiği spektral bir çizginin şiddetinin gerçek bir ölçüsüdür. Geçiş olasılığı birçok durumda A (Einstein) katsayısı olarak adlandırılır. Atomik spektral çizgi radyasyonunda geçiş olasılığı bir spektral çizginin şiddetini belirleyen bir niceliktir.

J enerji seviyeli $g_J=2J+1$ durumlarının herhangi birine bir geçiş yapan J' durumundaki bir elektronun birim zamanda toplam geçiş olasılığı,

$$A_{JJ'} = \frac{64 \pi^4 e^2 a_0^2 (E_{J'} - E_J)^3}{3h(2J+1)} S \quad (3.1)$$

şeklinde verilir (Cowan, 1981). Denklemden bilinen fiziksel sabitler kullanılarak geçiş olasılığı ifadesi,

$$A_{J'J} = \frac{2,0261 \cdot 10^{-6} (E_{J'} - E_J)^3}{(2J' + 1)} S \quad (3.2)$$

şeklinde yazılır. Burada $(E_{J'} - E_J)$ geçiş enerjisidir ve birimi Kayser (cm^{-1})'dir. S ise geçişin söz konusu olduğu seviyeler arasındaki çizgi şiddetidir. Soğurmaya ve salmaya karşılık gelen geçiş olasılıklarının değerleri aynı ve pozitiftir.

3.1.2. Elektrik dipol osilatör şiddeti

Kuantum mekaniğinde J kuantum halinde olan atom çok sayıda başka kuantum hallerine geçebilir. Bu geçişlerin her biri bir osilatör şiddeti olarak karakterize edilir. Osilatör şiddeti, verilen 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. Birimsiz bir niceliktir ve astrofizik ve plazma fiziğinde geniş bir uygulama alanı bulmaktadır (Ateş, 2010).

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

$$f_{J'J} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 (E_{J'} - E_J)}{3h(2J' + 1)} S = \frac{(E_{J'} - E_J)}{3h(2J' + 1)} S \quad (3.3)$$

şeklinde verilir (Cowan, 1981) ve buradaki $g_J = 2J + 1$, alt seviyenin istatistiksel ağırlığıdır.

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

$$f_{JJ'} = -\frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h(2J' + 1)} S = -\frac{(E_{J'} - E_J)}{3h(2J' + 1)} S \quad (3.4)$$

biçiminde verilmektedir ve burada yine $(E_{J'} - E_J)$ geçiş enerjisidir. Denk.(3.3) ile verilen ve soğurmaya karşılık gelen osilatör şiddetinin değeri pozitif, Denk.(3.4) ile verilen ve salmaya karşılık gelen osilatör şiddetinin değeri ise negatiftir (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

3.1.3. Geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve çizgi şiddeti arasındaki bağıntılar

SI birim sisteminde (A ; sn^{-1} , λ ; m , S ; $\text{m}^2 \text{C}^2$) bir elektrik dipol geçiş için A , f ve S arasındaki bağıntılar,

$$A_{JJ'} = \frac{2\pi e^2}{m_e c \epsilon_0 \lambda^2} \frac{g_J}{g_{J'}} f_{JJ'} = \frac{16\pi^3}{3h \epsilon_0 \lambda^3 g_{J'}} S \quad (3.5)$$

şeklindedir. Sayısal olarak bilinen birimlerde (A ; sn^{-1} , λ ; Å , S ; atomik birimlerde) geçiş olasılığı için,

$$A_{JJ'} = \frac{6,6702 \cdot 10^{15}}{\lambda^2} \frac{g_J}{g_{J'}} f_{JJ'} = \frac{2,0261 \cdot 10^{18}}{\lambda^3 g_{J'}} S \quad (3.6)$$

ifadesi ve atomik birimlerde osilatör şiddeti için S ve ΔE ($E_{J'} - E_J$) 'ye bağlı olarak,

$$f_{JJ'} = \frac{2}{3} \left(\frac{\Delta E}{g_J} \right) S \quad (3.7)$$

yazılabilir (Cowan, 1981; Çelik, 2005; Ateş, 2010).

3.1.4. Uyarılmış seviyelerin yaşam süresi

Bir atomun uyarılmış durumu,

$$-\left(\frac{dN_j}{dt} \right) = N_j \sum_{(i < j)} A_{ji} \quad (3.8)$$

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 sebebiyle negatif işaret ortaya çıkar. Bu bağıntının integrali alınarak,

$$N_j(t) = N_j(0).e^{-t/\tau_j} \quad (3.9)$$

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

$$\tau_j = \frac{1}{\sum_{(i<j)} A_{ji}} \quad (3.10)$$

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

Görüldüğü gibi geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi fiziksel parametrelerin hesaplanmasında temel problem S çizgi şiddetinin belirlenmesidir (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

3.1.5. Elektrik dipol çizgi şiddeti

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

Atomik ya da iyonik bir sistemdeki elektronun $\gamma' J' M'$ kuantum sayılarıyla tanımlı bir seviyeden γJ seviyesinin tüm M durumlarına bir elektrik dipol geçiş yapması durumunda bu geçişi karakterize eden S çizgi şiddeti,

$$S = \sum_{MM'} \left| \langle \gamma J M | \mathbf{P}^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2 = \left| \langle \gamma J | \mathbf{P}^{(1)} | \gamma' J' \rangle \right|^2 \quad (3.11)$$

biçiminde verilmektedir (Cowan, 1981). Burada $\mathbf{P}^{(1)}$ elektrik dipol geçiş operatörüdür. Bilindiği üzere atom numarası küçük ($Z < 40$) olan elementlerin birçoğunda baskın olan çiftlenim şekli LS çiftlenimidir. N elektronlu bir atomun toplam elektronik orbital açısal momentum işlemcisi \hat{L}' , bireysel elektronların yörüngesel açısal momentumları kendi

aralarında toplanarak bulunur. Toplam elektronik spin açısal momentumu \hat{S}' , bireysel elektronların spinlerinin vektör toplamı olarak tanımlanır (Levine, 2000) ve elektronların spin açısal momentumları da kendi aralarında toplanarak bulunur. LS çiftleniminin meydana geldiği hafif atomlarda, elektronlar arasındaki elektrostatik itme kuvvetleri, bu atomlardaki spin-yörünge manyetik etkileşmesindeki manyetik kuvvetlerden daha üstündür. Spin-yörünge etkileşmesi ise ağır atomlarda, elektrostatik kuvvetlerinden daha baskın çıkar. Bu da LS çiftleniminin varlığını elektrostatik kuvvetlere, JJ çiftleniminin de spin-yörünge kuvvetlerine borçlu olduğu anlamına gelmektedir. LS çiftleniminde \hat{L}' ve \hat{S}' bileşke açısal momentum vektörleri arasında, elektrostatik kuvvetlere göre daha küçük olan spin-yörünge manyetik etkileşmesi vardır. Bu etkileşme, \hat{L}' ve \hat{S}' vektörlerinin vektörel olarak birleşmesiyle \hat{J}' toplam açısal momentum vektörünü verir. LS çiftleniminde yörüngesel açısal kuantum sayısının $\ell' = 0,1,2,3,\dots$ gibi değerlerinin her birini sırasıyla S,P,D,F,... gibi harflerle göstererek yazılan $^{2s'+1}L$ gösterimine atomun spektroskopik terimi adı verilir. Bu gösterimdeki $(2s'+1)$ niceliğine, spektroskopik terimin çokluğu adı verilir. Örneğin, $2s'+1 = 1,2,3,\dots$ gibi değerler alıyorsa bunlara karşı gelen spektroskopik terimlere, sırasıyla tekli (singlet), ikili (dublet), üçlü (triplet), gibi isimler verilir. Atomların spektroskopik terimlerini belirlemek için ℓ' ve s' kuantum sayılarının tüm olası değerlerini bulmak gerekir. Bu değerler, elektronların bireysel yörüngesel açısal momentum kuantum sayıları ℓ_i ve spin açısal momentum kuantum sayıları s_i 'lerle ilişkilidir. Bu nedenle bu sayıların olası değerleri bulunurken, elektronların birbirinden ayırt edilemezliği ve Pauli dışarlama ilkesinin getirdiği kısıtlamalar göz önünde tutulmalıdır (Apaydın, 2004; Ateş, 2010). Aşağıda LS çiftleniminin baskın olduğu atomik ve iyonik sistemlerin bazı elektronik konfigürasyonları gösterilmektedir.

Çizelge 3.1. LS çiftlenim şekline örnek konfigürasyonlar (Martin ve Wiese,1999)

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

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

$$\begin{aligned}
S_{LS} &\equiv \left\langle \left[(\dots \alpha_1 L_1, l_2) L (\dots S_1 s_2) S \right] J \left\| \mathbf{r}_N^{(1)} \right\| \left[(\dots \alpha_1 L_1', l_2') L' (\dots S_1' s_2') S' \right] J' \right\rangle^2 \\
&= \left[\delta_{S_1 S_1'} \delta_{s_1 s_1'} (-1)^{L+S+J'+1} [j, j']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \left\langle (\dots \alpha_1 L_1, l_2) L \left\| \mathbf{r}_N^{(1)} \right\| (\dots \alpha_1 L_1', l_2') L' \right\rangle \right]^2 \\
&= \left[\delta_{\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_1' L_1' S_1'} \delta_{s_1 s_1'} (-1)^{S+J'+L_1+l_2'} [J, J', L, L']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l_2' \end{Bmatrix} P_{l_2 l_2'}^{(1)} \right]^2
\end{aligned} \tag{3.12}$$

şeklinde yazılır (Cowan, 1981). Burada son ifadedeki köşeli parantez içerisinde verilen terim, iki ya da daha fazla açılal momentumun çiftleniminde kullanılan Racah katsayısı veya Wigner' in 6-J sembolü olarak bilinir. $P_{l_i l_f}^{(1)}$ niceliği ise elektrik dipol geçiş için radyal geçiş integrali (veya geçiş matris elemanı) olup,

$$P_{l_i l_f}^{(1)} = (-1)^{l_i l_f} P_{l_f l_i}^{(1)} = -P_{l_f l_i}^{(1)} \tag{3.13}$$

şeklinde yazılarak radyal geçiş integrali,

$$P_{\ell_2 \ell_2'}^{(k)} = P_{l_i l_f}^{(k)} = \ell_2 \langle n_i, l_i | r^k | n_f, l_f \rangle = \ell_2 \int_0^\infty r^{k+2} R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) dr \tag{3.14}$$

olarak elde edilir. Buradaki $\ell_>$ ifadesi, ℓ_i ve ℓ_f kuantum sayılarının büyük olanını ifade etmektedir.

Özdeş elektron bulunduran kabuktan geçişler için çizgi şiddeti ifadesi,

$$S_{LS} \equiv \langle \alpha_1 L_1 S_1, J \parallel \mathcal{P}^{(1)} \parallel \alpha_1' L_1' S_1', l_2 \rangle L'S', J' \rangle^2$$

$$= \left[\delta_{S_1 S_1'} (-1)^{L_1 + l_2 + S_1 + J'} (n [L_1, L', J, J'])^{1/2} x \begin{Bmatrix} L_1 & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & L_1' & L_1 \\ L' & 1 & l_2 \end{Bmatrix} (l_1^n \alpha_1 L_1 S_1 \{ l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1' \} P_{l_2 l_2}^{(1)}) \right]^2 \quad (3.15)$$

şeklinde verilir. Burada n kabuktaki özdeş elektronların sayısıdır (Cowan, 1981; Çelik, 2005).

Alt kabuktan geçişler için çizgi şiddeti ifadesi,

$$S_{LS} \equiv \langle [(\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_2 L_2, S_2) L S, J] J \parallel \mathcal{P}^{(1)} \parallel (\alpha_1' L_1' S_1', \alpha_2' L_2', S_2') L'S', J' \rangle^2$$

$$= \left[\delta_{S_1 S_1'} (-1)^{k+l_2+L_2+L_2'+L+S_1'+S_2'+J'} (nk [L_1, S_1, L_2', S_2', L, L', J, J'])^{1/2} x \right.$$

$$\left. \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_1' & S_2' & S \\ S_2 & S_1 & s \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & L_1' & l_1 \\ L_2 & L_2' & l_2 \\ L & L' & 1 \end{Bmatrix} x \right. \quad (3.16)$$

$$\left. (l_1^n \alpha_1 L_1 S_1 \{ l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1' \}) (l_2^{k-1} \alpha_2 L_2 S_2 \{ l_2^k \alpha_2' L_2' S_2' \}) P_{l_2 l_2}^{(1)} \right]^2$$

biçiminde verilir. Burada $(l_1^n \alpha_1 L_1 S_1 \{ l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1' \})$ ve $(l_2^{k-1} \alpha_2 L_2 S_2 \{ l_2^k \alpha_2' L_2' S_2' \})$ ifadeleri antisimetrikleşme katsayılarıdır ve literatürde bu katsayı değerleri tablolar halinde verilmektedir (Sobelman, 1975; Cowan, 1981).

Tüm çizgi şiddeti ifadelerinde radyal geçiş integralinde elektrik dipol geçişler için $k=1$ alınarak,

$$P_{l_1 l_1}^{(1)} = \int_0^\infty r R_{n_1 l_1}(r) R_{n_1 l_1}(r) r^2 dr = \int_0^\infty R_{n_1 l_1}(r) R_{n_1 l_1}(r) r^3 dr \quad (3.17)$$

ifadesi elde edilir.

DeneySEL verilerin analizi, LS çiftleniminin uygulanabilirlik aralığının sınırlı olduğunu gösterir. Pek çok atomda elektron konfigürasyonları LS çiftlenimi ile tanımlanamaz (Sobelman, 1996). Z atom numarası büyük olan ağır atomlar ya da Z atom numarası büyük

olan atomların oluşturduğu iyonlarda JJ çiftlenimi ortaya çıkar (Okur, 2000). Spin yörünge etkileşimi, hafif atomlardaki gibi elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşim ile karşılaştırıldığında zayıf değilse, JJ çiftlenimi kullanılır (Agaker, 2006).

Düşük ve orta atom numaralı elementler için elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşim baskındır. JJ çiftlenimi, yüksek atom sayılı elementler için

$$[(\ell_1 s_1)j_1, (\ell_2 s_2)j_2] J \quad (3.18)$$

ifadesi ile tanımlanır (Cowan ve Andrew, 1965).

Bu tip bir çiftlenimde J kuantum sayısı, genelleştirilmiş bir kuantum mekaniksel vektör modelinden açığa çıkar. Bir L bileşke yörünge açıl momentumu tanımlı değildir. Böylece burada S , P , D ,... vs. gibi terim sembolü yoktur. j bireysel elektronların açıl momentum sayılarını göstermek üzere (j_1, j_2) vs. gibi terim gösterimleri kullanılmalıdır (Okur, 2000). 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 çiftlenimde bireysel elektronların açıl momentumları,

$$j_1 = \ell_1 + s_1 \quad j_2 = \ell_2 + s_2 \quad (3.19)$$

ifadelerine göre çiftlenip, bu bireysel toplamlar j toplam açıl momentumunu verirler. Bunlar daha sonra atomun J toplam açıl momentumunu verecek şekilde vektörel olarak bir araya gelirler. JJ çiftleniminde spektral terimleri belirlemek için her elektronun n_i, ℓ_i, j_i bireysel kuantum sayıları ile j toplam açıl kuantum sayısının belirlenmesi gerekir. Örneğin $ns^1 n'p^1$ yerleşiminde iki elektronu olan bir atom ele alalım. s 'de ki bir elektron için $\ell_1 = 0$, $s_1 = 1/2$ olduğundan $j_1 = 1/2$ 'dir. p 'deki bir elektron için $\ell_2 = 1$, $s_2 = 1/2$ olduğundan $j_2 = 1/2, 3/2$ gibi iki ayrı değer alır. Bireysel j_i kuantum sayısının bu değerlerine göre $ns^1 n'p^1$ yerleşimine karşı gelen toplam açıl kuantum sayısı, $j_1 = 1/2, j_2 = 1/2$ için $j = 0, 1$ ve $j_1 = 1/2, j_2 = 3/2$ için de $j = 1, 2$ gibi değerler alır. Buna göre $ns^1 n'p^1$ yerleşimine karşı gelen terimler, (j_1, j_2) gibi bir gösterimde aşağıdaki gibidir (Ateş, 2010).

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_0, \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_1, \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)_1, \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)_2 \quad (3.20)$$

Çizelge 3.2. $J_1 j$ çiftlenimi için örnek konfigürasyonlar (Martin ve Wiese,1999)

1. $3d^9(^2D_{5/2})4p_{3/2} (5/2, 3/2)^o_3$
2. $4df^{11} (^2H^o_{9/2} 2)6s6p(^3P^o_1) (9/2, 1)_{7/2}$
3. $4f^9(^6H^o)5d (^7H^o_8)6s6p(^3P^o_0) (8,0)_8$
4. $4f^{12} (^3H_6) 5d(^2D)6s6p(^3P^o) (^4F^o_{3/2}) (6, 3/2)^o_{13/2}$
5. $5f^4(^5I_4)6d_{3/2} (4, 3/2)_{11/2}7s7p(^1P^o_1) (11/2, 1)^o_{9/2}$
6. $5f^4_{7/2}5f^5_{5/2} (8, 5/2)^o_{21/2}7p_{3/2} (21/2, 3/2)_{10}$
7. $5f^3_{7/2}5f^3_{5/2} (9/2, 9/2)^o_{97s7p} (^3P^o_2) (9, 2)^o_7$

jj çiftleniminde çizgi şiddeti,

$$\begin{aligned}
 S_{jj} &\equiv \left[\langle [(\dots\alpha_1 L_1 S_1) J_1, (l_2, s_2) j_2] J \parallel r_N^{(1)} \parallel [(\dots\alpha'_1 L'_1 S'_1) J'_1, (l'_2, s'_2) j'_2] J' \rangle \right]^2 \\
 &= \left[\delta_{\alpha_1 L_1 s_1, \alpha'_1 L'_1 s'_1} \delta_{j_1 j'_1} (-1)^{j_1 + j'_2 + 1} [J, J']^{1/2} \begin{Bmatrix} J_1 & j_2 & J \\ 1 & J' & j_2 \end{Bmatrix} \langle (l_2 s_2) j_2 K \parallel r^{(1)} \parallel (l'_2 s'_2) j'_2 \rangle \right]^2 \quad (3.21) \\
 &= \left[\delta_{\alpha_1 L_1 s_1, \alpha'_1 L'_1 s'_1} \delta_{j_1 j'_1} (-1)^{j_1 + J - l_2 - s} [J, J', j_2, j'_2]^{1/2} x \begin{Bmatrix} J_1 & j_2 & J \\ 1 & J' & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_2 & s & j_2 \\ j_2 & 1 & l_2 \end{Bmatrix} P_{l_2 l'_2}^{(1)} \right]^2
 \end{aligned}$$

olarak verilir (Cowan, 1981). Yine daha önce verilen seçim kurallarına ek olarak $\Delta j_2 = 0, \pm 1$ ($j_2 = j'_2 = 0$ yasak) $\Delta J_1 = 0$ seçim kuralları verilebilir (Cowan, 1981). Verilen bir atom veya iyon için çiftlenim şartları genellikle bir konfigürasyondan diğerine değişir. Örneğin $n_1 l_1^2$ konfigürasyonundaki elektronlar LS çiftlenimine çok yakın olabilir, fakat $n_1 l_1 n_2 l_2$ ($n_2 \rightarrow \infty$) uyarılmış konfigürasyonlarının Rydberg serilerinde iki elektron arasındaki Coulomb etkileşimi n_2 'nin artışı ile sıfıra doğru gider. Aynı noktada bu etkileşim $n_1 l_1$ elektronun spin-yörünge etkileşiminden daha zayıf olmalıdır. Bu durumda çiftlenim koşulları $j_1 j_2$ veya $j_1 K$ veya benzer çiftlenime doğru gitme eğilimindedir (Cowan, 1981). Dış elektron daha yüksek uyarıldığında ve özellikle ℓ 'nin büyük değerlerine sahip olduğunda, elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşim ve spin-yörünge etkileşimi aynı büyüklüğe sahip olduğunda, LS ve JJ çiftlenimleri genellikle iyi yaklaşımlar değildir (Sobelman, 1996).

Bazı durumlarda hemen hemen doldurulmuş kabuğun dışında dış valans elektron veya uyarılmış elektron, kor elektronları ile karşılaştırıldığında farklı etkileşim durumları ortaya çıkar. Bu durumda ara çiftlenimler (JK ve LK çiftlenimi olarak adlandırılan çiftlenimler) kullanılır. Ara çiftlenim temel olarak, uyarılmış elektron büyük açısız momentuma sahip olduğunda uygulanır, elektron bu durumda kor içine nüfuz etmez (Agaker, 2006).

Ara çiftlenimin en yaygın tipi, JK çiftlenimidir. Aynı zamanda literatürde jl (veya Jl) çiftlenimi olarak da bilinmektedir. Racah, bu çiftlenim türünü

$$[(\ell_1 s_1) j_1, \ell_2) K, s_2] J \quad (3.22)$$

şeklinde tanımlamıştır (Racah, 1942). Optik elektron (dış elektron) yüksek uyarıldığında, içteki elektronlarla onun etkileşimi öyle küçüktür ki iç elektronun spin-yörünge etkileşimi $(\ell_1 s_1)$, baskın olur. Aynı zamanda optik elektronun $(\ell_2 s_2)$ spin-yörünge etkileşimi öyle zayıftır ki elektrostatik etkileşim $(\ell_1 \ell_2)$, ikinci önemli etkileşimdir (Cowan ve Andrew, 1965; Ateş, 2010).

Çizelge 3.3. J_1l (JK) çiftlenimi için örnek konfigürasyonlar (Martin ve Wiese, 1999)

-
1. $3p^5 ({}^2P_{1/2}) 5g^2 [9/2]_5^o$
 2. $4f^2 ({}^3H_4) 5g^2 [3]_{5/2}$
 3. $4f^{13} ({}^2F_{7/2}^o) 5d^2 ({}^1D) [7/2]_{7/2}^o$
 4. $4f^{13} ({}^2F_{5/2}^o) 5d6s ({}^3D) [9/2]_{11/2}^o$
-

LK çiftleniminde çizgi şiddeti ifadesi,

$$\begin{aligned} S_{LK} &\equiv \left\langle \left[(\dots \alpha_1 L_1, l_2) L, S_1 \right] K, s_2 J \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[(\dots \alpha_1' L_1', l_2') L', S_1' \right] K', s_2 J' \right\rangle^2 \\ &= \left[(-1)^{K+s+J'+1} \left[J, J' \right]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} K & s & J \\ J' & 1 & K' \end{matrix} \right\} \left\langle \left[(\alpha_1 L_1, l_2) L, S_1 \right] K \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[(\alpha_1' L_1', l_2') L', S_1' \right] K' \right\rangle \right]^2 \\ &= \left[\delta_{s_1 s_1'} (-1)^{K+s+J'+L+s_1+K'} \left[J, J', K, K' \right]^{1/2} \times \left\{ \begin{matrix} K & s & J \\ J' & 1 & K' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} K & S_1 & K \\ K' & 1 & L' \end{matrix} \right\} \left\langle (\alpha_1 L_1, l_2) L \left\| r_N^{(1)} \right\| (\alpha_1' L_1', l_2') L' \right\rangle \right]^2 \\ &= \left[\delta_{\alpha_1 L_1 s_1, \alpha_1' L_1' s_1'} (-1)^{K+s+J'+L_1+s_1+K'+l_2'+1} \left[J, J', K, K', L, L' \right]^{1/2} \times \left\{ \begin{matrix} K & s & J \\ J' & 1 & K' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & S_1 & K \\ K' & 1 & L' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l_2' \end{matrix} \right\} P_{l_2 l_2'}^{(1)} \right]^2 \end{aligned} \quad (3.23)$$

şeklinde verilir. Daha önce J için verilen seçim kurallarına ek olarak burada,

$$\Delta K = 0, \pm 1 \quad (K = K' = 0 \text{ yasak})$$

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (L = L' = 0 \text{ yasak})$$

elde edilir. Bu tip durumlarda en güçlü çizgiler J 'nin maksimum değerinde $\Delta J = \Delta K$ durumunda olur.

JK çiftleniminde çizgi şiddeti,

$$\begin{aligned} S_{JK} &\equiv \left\langle \left[(\dots \alpha_1 L_1 S_1) J_1, l_2 \right] K, s_2 J \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[(\dots \alpha_1 L_1' S_1') J_1', l_2' \right] K', s_2 J' \right\rangle^2 \\ &= \left[(-1)^{K+s+J'+1} \left[J, J' \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K \end{Bmatrix} \left\langle \left[(\alpha_1 L_1 S_1) J_1, l_2 \right] K \left\| r_N^{(1)} \right\| \left[(\alpha_1 L_1' S_1') J_1', l_2' \right] K' \right\rangle \right]^2 \\ &= \left[\delta_{\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_1 L_1' S_1'} \delta_{j_1 j_1'} (-1)^{s+J'-J_1-l_2} \left[J, J', K, K' \right]^{1/2} \times \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_1 & l_2 & K \\ 1 & K' & l_2' \end{Bmatrix} P_{l_2 l_2'}^{(1)} \right]^2 \end{aligned} \quad (3.24)$$

şeklinde verilir. JJ', l_2, l_2' ve $\alpha_1 L_1 S_1$ seçim kurallarına ek olarak $\Delta K = 0, \pm 1$ ($K = K' = 0$ yasak) $\Delta J_1 = 0$ seçim kuralları verilir. Çiftlenim şemaları atomik yapı hesaplamalarında en çok kullanılan halleriyle aşağıda özetlenmiştir (Cowan, 1981).

Çizelge 3.4. Çiftlenim türleri (Martin ve Wiese, 1999)

Çiftlenim türü	Kuantum sayıları	Terim Sembolü
LS	L, S	$2S+1(L)_J$
$J_1 J_2$	J_1, J_2	$(j_1, j_2)_J$
$J_1 L_2 (\rightarrow K)$	K, S ₂	$J_1 [K]_J$
$LS_1 (\rightarrow K)$	K, S ₂	$L [K]_J$

Bu çalışmada göz önüne alınan bakır atomunda ve bakır benzeri iyonlarda LS çiftlenimi baskındır. Bu nedenle yapılan tüm hesaplamalarda çizgi şiddetleri LS çiftlenimine göre ifade edilmiştir. Çizgi şiddetlerinin belirlenmesinde radyal geçiş integralleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori kullanılarak hesaplanmıştır.

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

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, dinamik ardışık iyonlaşma, kuantum mekaniğinde sıfır enerji seçimi ve çok elektronlu bir sistemdeki elektronları sisteme en zayıf bağlı bir elektron ve en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar olarak tüm elektronları iki kısma ayırma düşüncesi üzerine kurulmuştur (Zheng ve ark., 2004). Verilen çok elektronlu bir sistemde en az enerjiyle uyarılacak ya da iyonlaşacak elektron sisteme en zayıf bağlı elektron olacaktır. Birinci uyarılma ya da iyonlaşma işleminde sistemden sadece tek bir elektron yani sisteme en zayıf bağlı bir elektron uyarılabilir ya da koparılabilir. Sistemdeki diğer elektronlar sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak adlandırılırlar. Bu nedenle bir sistemde bulunan en zayıf bağlı olan elektronu uyararak ve iyonlaştırmak daha kolaydır. Atomik ya da moleküler sistemlerin uyarılmasıyla yada iyonlaşmasıyla elde edilen veriler bu sistemlere ait birçok fiziksel özellik hakkında doğru bilgiler vermektedir. Bir atomun toplam dalga fonksiyonu, toplam enerjisi ve atomik enerji seviyeleri arasındaki geçişler gibi birçok özellik, sisteme en zayıf bağlı elektronun davranışıyla ilgilidir.

Bu yaklaşımda sistemdeki en zayıf bağlı elektron, çekirdek ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronların oluşturduğu ortalama küresel simetrik bir potansiyelde hareket eder. Eğer verilen bir sistemde, sisteme en zayıf bağlı olan tek bir elektronun uyarılması ile ilgileniyorsa “*En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori*” böyle fiziksel problemin çözülmesinde oldukça etkili olabilmektedir. Bu yaklaşımda 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 indirgenir (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

Bu yaklaşımda göz önüne alınan en zayıf bağlı elektron, çekirdek ve sistemdeki zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar tarafından oluşturulan,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{\beta}{r_i^2} \quad (3.25)$$

bir potansiyelde hareket eder (Zheng ve ark, 2000-a,b,c,d). Bu potansiyelin ilk kısmı Coulomb potansiyelidir. Sisteme en zayıf bağlı elektronun dışındaki diğer elektronların geçiş yapacak elektronu perdelerler. Bu sebeple, bu yöntemde potansiyel fonksiyonunun Coulomb teriminde bir etkin çekirdek yükü, Z^* kullanılır. Potansiyel alanın ikinci kısmı dipol

potansiyelidir. En zayıf bağlı elektron atomik çekirdeği kutupladığından bir elektrik dipol moment oluşur. Oluşan bu elektrik dipol moment en zayıf bağlı elektronun davranışını etkiler.

Schrödinger denkleminde en zayıf bağlı elektronun toplam potansiyeli kullanılarak,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r_i) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (3.26)$$

ve gerekli dönüşümler yapılarak radyal denklem çözülüp β parametresi,

$$\beta = \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2} \quad (3.27)$$

şeklinde türetilebilir. Bu durumda potansiyel,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2r_i^2} \quad (3.28)$$

olacak şekilde yeniden yazılır. Bu potansiyel Denk.(3.26)'da kullanılarak Schrödinger denklemini,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{-Z^*}{r_i} + \frac{d(d+1) + 2dl}{2r_i^2} \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (3.29)$$

şeklinde 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, 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. Buradaki d ; tamsayı olmayan n^* ve l^* kuantum sayılarıyla, n ve l kuantum sayılarından yararlanılarak belirlenmektedir (Ateş, 2010).

Bu yöntemle göre en zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonu genel olarak,

$$\psi_i(r_i, \theta_i, \varphi_i) = R_{n^*, l^*}(r_i) Y_{l^*, m}(\theta_i, \varphi_i) \quad (3.30)$$

şeklinde yazılır. Radyal denklemin çözümü sürecinde Denk.(3.26)'da ilk operatörden gelen $\frac{l(l+1)}{2r^2}$ terimi yerine $\frac{l^*(l^*+1)}{2r^2}$ ifadesi yazılmaktadır ve d' ye bağlı terim Denk.(3.31)'deki ikinci terimle gösterilmektedir. Tek elektron problemine benzer olarak en zayıf bağlı elektron için tek elektron Schrödinger denkleminin çözümü,

$$\psi = N \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n^*-l^*-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right) Y_{l^*, m}(\theta, \phi) \quad (3.31)$$

şeklinde verilir. Burada N normalizasyon katsayısı olup,

$$N = \left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n^*-l^*-1)!} \Gamma(n^*-l^*+1) \right]^{-1/2} \quad (3.32)$$

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

$$l^* = l + d \quad (3.33)$$

$$n^* = n + d \quad (3.34)$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (3.35)$$

şeklinde tanımlanmaktadır (Zheng, 1977; 1986; 1987; Zheng ve Xin, 1991; Zheng ve Li, 1994; Zheng ve ark., 2000-a,d; 2001-a,b,c). Denk. (3.35) ile tanımlanan ε , en zayıf bağlı elektronun enerjisi olup, buradaki n^* ise en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisinden kaynaklanan etkin baş kuantum sayısını göstermektedir (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

İlgili Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen dalga fonksiyonunun radyal kısmı, Laguerre polinomunun bir fonksiyonu olarak,

$$R = \left(\frac{2Z^*}{n^*} \right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!} \Gamma(n^* - l^* + 1) \right]^{-1/2} \exp \left(-\frac{Z^* r}{n^*} \right) r^{l^*} L_{n-l-1}^{2l^*+1} \left(\frac{2Z^* r}{n^*} \right) \quad (3.36)$$

şeklinde verilir. Radyal fonksiyon için,

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (3.37)$$

normalizasyon şartı kullanılarak ve iki Laguerre polinomunun integral formülünden,

$$\int_0^{\infty} t^{\lambda} e^{-t} L_m^{\mu}(t) L_m^{\mu'}(t) dt = (-1)^{m+m'} \Gamma(\lambda+1) \times \sum_k \binom{\lambda-\mu}{m-k} \binom{\lambda-\mu'}{m'-k} \binom{\lambda+k}{k} \quad (3.38)$$

ifadesi elde edilir.

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

$$\begin{aligned} \langle n_i, l_i | r^k | n_f, l_f \rangle &= \int_0^{\infty} r^{k+2} R_{n_i, l_i}(r) R_{n_f, l_f}(r) dr \\ &= (-1)^{n_f + n_i + l_f + l_i} \left(\frac{2Z_f^*}{n_f^*} \right)^{l_f^*} \left(\frac{2Z_i^*}{n_i^*} \right)^{l_i^*} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*} \right)^{-l_f^* - l_i^* - k - 3} \times \left[\frac{n_f^{*4} \Gamma(n_f^* + l_f^* + 1)}{4Z_f^{*3} (n_f - l_f - 1)!} \right]^{-1/2} \times \\ &\left[\frac{n_i^{*4} \Gamma(n_i^* + l_i^* + 1)}{4Z_i^{*3} (n_i - l_i - 1)!} \right]^{-1/2} \times \sum_{m_1=0}^{n_f - l_f - 1} \sum_{m_2=0}^{n_i - l_i - 1} \frac{(-1)^{m_2}}{m_1! m_2!} \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*} \right)^{m_1 + m_2} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} + \frac{Z_i^*}{n_i^*} \right)^{-m_1 - m_2} \times \\ &\Gamma(l_f^* + l_i^* + m_1 + m_2 + k + 3) \times \sum_{m_3=0}^S \binom{l_i^* - l_f^* + k + m_2 + 1}{n_f^* - l_f^* - 1 - m_1 - m_3} \times \binom{l_f^* - l_i^* + k + m_1 + 1}{n_i^* - l_i^* - 1 - m_2 - m_3} \times \\ &\binom{l_i^* + l_f^* + k + m_1 + m_2 + m_3 + 2}{m_3} \end{aligned} \quad (3.39)$$

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

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

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^{*}(l^{*}+1)}{2Z^{*}} \quad (3.40)$$

olarak bulunur (Zheng ve ark, 2000-a,b,c,d; Çelik, 2005). Denk. (3.35)'de verilen en zayıf bağlı elektronun ε enerjisinin negatifi, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisine eşit olup,

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (3.41)$$

olarak tanımlanır. WBEPM teoride radyal geçiş integralinin hesaplanmasında Z^{*} , n^{*} ve l^{*} parametrelerini belirlemek yeterlidir. Bu parametrelerin doğrudan teoriden hesaplanmasında bazı zorluklarla karşılaşıldığı bilinmektedir (Zheng ve ark., 1999). Bu nedenle uygun enerji değerleri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerini kullanarak Z^{*} , n^{*} ve l^{*} parametreleri istenilen hassasiyet de belirlenebilir. Z^{*} , n^{*} ve l^{*} parametrelerini en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride elde edebilmek için Denk. (3.40) ve Denk.(3.41) birlikte çözülür. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, uyarılma sürecine iştirak eden elektronun sisteme en zayıf bağlı elektron olduğu durumlarda hem düşük hem de yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçişler için etkili bir metottur.

3.3. Kuantum Kusur Orbital (QDO) Teori

Kuantum kusuru $\delta(l)$, söz konusu elektrona diğer elektronların etkisini gösteren bir terimdir. Aynı zamanda N elektronlu bir sistemdeki N-1 elektronu ve Z çekirdek yükünün hidrojenik değerlerden uzaklaşan enerji özdeğerlerinin kaymasıyla oluşturulan etkin yükü şekillendirmektedir. Hidrojen veya hidrojenik (tek elektronlu) iyon için Bohr enerji seviyeleri Rydberg birimlerinde,

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \quad (3.42)$$

ile verilir. Çok elektronlu bir atom için, hidrojenik E_n değerlerinden nl (kor) seviye serisinin ayrılması, temel olarak nl elektronu (düşük l değeri serileri) tarafından kor nüfuzu veya nl elektronu (yüksek l değeri serileri) tarafından kor kutuplanması veya bu iki etkinin kombinasyonu sebebiyle olabilir. Her bir durumda bu ayrılmaların, yaklaşık olarak Rydberg formülünde δ_l sabit bir kuantum kusur ile ifade edilebildiği gösterilebilir:

$$E_{nl} = -\frac{Z_c^2}{(n - \delta_l)^2} = -\frac{Z_c^2}{n^{*2}} \quad (3.43)$$

Burada Z_c , korun yüküdür ve $n^* = n - \delta$, etkin baş kuantum sayısıdır (Ateş, 2010).

Kuantum kusur teorileri, ilk kez Bates ve Damgaard (1949) ve Ham (1955) tarafından öne sürülmüştür. Daha sonra bu teori geliştirilerek Seaton (1958) ve Fano (1970) tarafından atomik süreçlere uygulanmıştır. Simons (1974) ve Martin ve Simons (1975), kuantum kusur teorisini geliştirerek Kuantum Kusur Orbital “QDO” metodunu öne sürdüler. Bu sürecin çıkış noktası, Bates ve Damgaard (1949) tarafından geliştirilen Coulomb yaklaşım tekniğidir. QDO yöntemi Coulomb yaklaşımından bazı noktalarda farklılıklar gösterir. Bu farklılıklar, sadece Hamiltoniyendeki merkezci terimin, potansiyel enerji teriminden çok daha az katkı getirdiği radyal mesafelerde gözlemlenir. QDO ve CA radyal orbitaller, birbirine çok benzer olabilir. Bununla birlikte eğer küçük r bölgeleri, geçiş integraline önemli bir katkı getirirse, her iki süreç de aynı enerji öz değerlerine sahip olsa bile osilatör şiddetleri oldukça farklı olabilir (Martin ve ark., 1991; Ateş, 2010).

Bu yöntemde, elektronun perdeleme etkilerini hesaba katan yaklaşık bir Hamiltoniyen kullanılarak, analitik olarak ifade edilebilen tam öz fonksiyonlar elde edilir ve geçiş integralleri analitik olarak hesaplanabilmektedir (Lavin ve ark., 1992). QDO yöntemi spektral verilerden valans, Rydberg ve sürekli orbitaller üretmek için geliştirilmiştir. Bu yöntem, geçiş integralleri için analitik ifadeler ve radyal orbitaller için tam çözümler üretir. Bazı araştırmacılar bu metodu kullanarak, atomik ve iyonik sistemlerde geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve fotoiyonizasyon tesir kesitleri gibi spektroskopik parametreler için hesaplamalar yapmışlardır (Martin ve Simons, 1975; Martin ve Simons, 1976; Barrientos ve Martin, 1985; Martin ve ark., 1991; Lavin ve ark., 1992; Ateş, 2010).

Merkezcil alan yaklaşımında valans, Rydberg veya sürekli orbitallerin radyal kısmı için Schrödinger denklemi,

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \mu}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] \mu = E \mu \quad (3.44)$$

olarak verilir (Martin ve Simons, 1975). Tek elektron Schrödinger denkleminin analitik çözümü temeline dayanan QDO metodunda, yaklaşık merkezcil alan elektron perdeleme potansiyeli

$$V(r) = \frac{\lambda(\lambda+1) - l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z_{net}}{r} \quad (3.45)$$

şeklinde yazılır. Burada Z_{net} , büyük radyal mesafelerde elektron tarafından görülen etkin çekirdek yüküdür (Martin ve Simons, 1975). λ parametresi ise, model potansiyelin perdeleme kısmını ifade etmektedir ve hem etkin potansiyelde hem de kuantum kusur orbitallerde karşımıza çıkmaktadır. Bu parametre, l açısız kuantum sayısına ve kuantum kusura bağlı olarak

$$\lambda = l - \delta + c \quad (3.46)$$

genel ifadesinden belirlenebilir. Burada c , radyal orbitallerin normalize edilebilirliğini sağlamak için ve doğru düğüm sayıları elde etmek için seçilen bir tamsayıdır (Martin ve Simons, 1975; Barrientos ve Martin, 1989; Lavin ve ark., 1992).

Bağlı durumlara ait dalga fonksiyonları, ikinci Whittaker fonksiyonlarına bağlı olarak ifade edilebilir:

$$\mu(r) = W_{n-\delta, \lambda+1/2} [2Z_{net} r / (n-\delta)] \quad (3.47)$$

Hartree birimlerinde kuantum kusur δ , bağlı durumların iyonlaşma enerjisinin negatifi ile ilişkilidir:

$$E = -Z_{net}^2 / 2(n-\delta)^2 \quad (3.48)$$

Normalize bağlı durum orbitaller, genelleştirilmiş Laguerre polinomlarına veya Kummer fonksiyonlarına bağlı olarak ifade edilebilir:

$$\mu(r) = \left[\frac{Z_{net} \Gamma(n-\delta+\lambda+1)}{\Gamma(n-\delta+\lambda)} \right]^{1/2} \left[\frac{(2Z_{net} r / (n-\delta))^{\lambda+1}}{(n-\delta) \Gamma(2\lambda+2)} \right] \times e^{-Z_{net} r / (n-\delta)} F[\lambda+1-n+\delta, 2\lambda+2, 2Z_{net} r / (n-\delta)] \quad (3.49)$$

Burada F , Kummer fonksiyonları olarak bilinir. Dipol uzunluk gösteriminde birçok spektroskopik özellik,

$$R_{ij} = \int \mu_i(r) r \mu_j(r) r^2 dr \quad (3.50)$$

ile verilen R_{ij} radyal geçiş integrallerine göre ifade edilebilir. Denk. (3.49) bağlı durum orbital fonksiyonları Denk. (3.50)'de yerine yazılarak ve

$$n^* = n - \delta \quad (3.51)$$

gösterimi kullanılarak radyal geçiş integrali,

$$R_{ij} = \frac{(2)^{\lambda_i + \lambda_j + 2} (n_i^*)^{\lambda_j + 2} (n_j^*)^{\lambda_i + 2}}{Z_{net} (n_i^* + n_j^*)^{\lambda_i + \lambda_j + 4}} \left[\frac{\Gamma(n_j^* + \lambda_j + 1) \Gamma(n_i^* + \lambda_i + 1)}{(n_i^* - \lambda_i - 1)! (n_j^* - \lambda_j - 1)!} \right]^{1/2} \quad (3.52)$$

$$\times \sum_{k_i=0}^{n_i^* - \lambda_i - 1} \sum_{k_j=0}^{n_j^* - \lambda_j - 1} \left[\frac{\langle \lambda_i - n_i^* + 1 \rangle_{k_i} \langle \lambda_j - n_j^* + 1 \rangle_{k_j} \Gamma(\lambda_i + \lambda_j + 4 + k_i + k_j)}{\Gamma(2\lambda_i + 2 + k_i) \Gamma(2\lambda_j + 2 + k_j) \Gamma(k_i + 1) \Gamma(k_j + 1)} \times \frac{n_i^{*k_j} n_j^{*k_i}}{[(n_i^* + n_j^*)/2]^{k_i + k_j}} \right]$$

ifadesi ile verilebilir. Burada $\langle x \rangle_n$ ve $\Gamma(x)$, sırasıyla Pochhammer ve Gama fonksiyonlarıdır. Denklemdaki her iki toplam sonlu olduğundan, gerekli hesaplamalar kolaylıkla yapılabilir (Simons, 1974; Martin ve Simons, 1975; Martin ve Simons, 1976; Ateş, 2010).

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

Atomik yapı hesaplamalarındaki her spektroskopik parametre, göz önüne alınan çiftlenim biçimine ve elektronun geçiş tipine göre tanımlanan S çizgi şiddeti ifadesi ile belirlenir. Atom veya iyonların seviyelerinde görülen çiftlenim biçimlerindeki sınırlama elektronlar arasındaki etkileşimin spin-yörünge etkileşimine ya da elektrostatik etkileşmeye bağlıdır. Bu çalışmada 29 elektrona sahip bakır atomunda (Cu I) ve elektron konfigürasyonu bakıra benzeyen Zn II, Ga III, Ge IV, As V, Se VI ve Kr VIII gibi iyonlarda elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri hesaplanmıştır. Bakır atomu ve bakıra benzeyen iyonlar hafif sistemler olarak bilinirler. Hafif atomlarda genel olarak LS çiftlenimi baskındır. Bu çalışmada yapılan hesaplamalarda gerekli ifadeler, tamamen LS çiftlenimine göre dizayn edilmiştir. Atomik yapı hesaplamaları; osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi spektroskopik niceliklerin belirlenmesini içerir.

J enerji seviyeli $g_J=2J+1$ durumlarının herhangi birine geçiş yapan J' durumundaki bir elektronun birim zamanda toplam geçiş olasılığı (Cowan, 1981),

$$A_{JJ'} = \frac{2,0261 \cdot 10^{-6} (E_{J'} - E_J)^3}{(2J'+1)} S \quad (4.1)$$

J \rightarrow J' geçişi için osilatör şiddeti (Cowan, 1981),

$$f_{JJ'} = \frac{(E_{J'} - E_J)}{3h(2J+1)} S \quad (4.2)$$

ve uyarılmış bir seviyenin yaşam süresi τ_j ise

$$\tau_j = \frac{1}{\sum_{(i<j)} A_{ji}} \quad (4.3)$$

şeklinde verilirler. Bu çalışmada tüm hesaplamalar yukarıdaki formüller kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Temel seviyeden uyarılmış seviyelere ve uyarılmış seviyeler arasındaki

geçişler için çizgi şiddetleri 3. Bölümde detaylı olarak verilmiştir. Çizgi şiddeti ifadelerindeki radyal geçiş integrallerinin belirlenmesinde en zayıf bağlı elektron potansiyel model (WBEPM) teori ve kuantum kusur orbital (QDO) teori kullanılmıştır.

Bu çalışmadaki tüm hesaplamalarda ilk olarak, temel-uyarılmış seviye ve uyarılmış seviyeler arası geçişler belirlenmiş ve bu seviyelerin data dosyaları oluşturulmuştur. Bu data dosyasında bakır atomu ve bakır benzeri iyonların temel seviye ve uyarılmış seviye konfigürasyonları, bu seviyelerin enerji değerleri, seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri ve ilgili açısal momentum kuantum sayıları mevcuttur. Tüm hesaplamalarda Fortran 77 programlama dilinde Real*8 aritmetiğinde (çift hassasiyet) bilgisayar programları kullanılmıştır. WBEPM teoride, radyal geçiş integrallerinin hesaplanması için gerekli olan Z^* , n^* , l^* parametrelerinin belirlenmesinde enerji değerleri için literatürdeki deneysel enerji verileri (Ralchenko ve ark., 2015; Wiese, 2006) kullanılmıştır. Elde edilecek sonuçların hassasiyetini arttırmak için seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri hem Nümerik Coulomb yaklaşımı (Lindgard ve Nielsen, 1975; 1977) hem de Nümerik non-relativistik Hartree-Fock yaklaşımını temel alan HF96 paket programı kullanılarak belirlenmiştir (Gaigalas ve Fischer, 1996). Bakır atomu ve bakıra benzeyen iyonlar için hesaplanan sonuçlar bu çalışmanın Ek kısmında tablolar halinde verilmiştir. Hesaplama sonuçlarının verildiği tablolarda, seviyelere ait yarıçapların Nümerik non-relativistik Hartree-Fock yöntemiyle hesaplanarak elde edilen sonuçlar yıldız üst indisyle gösterilmiştir. Tablolardaki diğer sonuçlar, seviyelere ait yarıçapların Nümerik Coulomb yaklaşımından belirlenerek elde edilen sonuçları göstermektedir. Tüm osilatör şiddeti ve geçiş olasılığı tablolarında her geçiş dizisinin ilk satırı multipler (yarılmamış) çizgileri göstermektedir.

4.1. Araştırma Sonuçları

4.1.1. Atomik bakırda (Cu I) yapılan hesaplamalar

Ek-1 de Tablo 1.1 ve Tablo 1.2 de atomik bakır (Cu I) için osilatör şiddeti sonuçları, Tablo 1.3 de elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları ve Tablo 1.4 de uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçları, literatürdeki diğer deneysel ve teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Ek-1, Tablo 1.1 de Bakır atomunun bazı düşük uyarılmış seviyeleri arasındaki osilatör şiddeti sonuçları verilmiştir. Ek-1' in Tablo 1.2 kısmında bakır atomu için bazı yüksek uyarılmış seviyeleri arasındaki osilatör şiddeti sonuçları verilmiştir.

Bakır atomu için en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori kullanılarak elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen Numerical Coulomb yaklaşımı yöntemiyle, Nana ve ark. (1997) tarafından verilen süper simetrikli kuantum kusur yöntemiyle, Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen Hartree-Slater yöntemiyle, Migdalek (1978) tarafından verilen kor polarizasyon etkilerinin hesaplamalara dahil edildiği yarı deneysel relativistik hesaplama yöntemiyle, Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen relativistik Hartree-Fock metodu yöntemiyle, Civis ve ark. (2011) tarafından Fourier Transform Infrared Emission Spectroscopy yöntemiyle yapılan ölçümlerle ve Ahmad ve ark. (2010), tarafından verilen magneto-optical rotation spectroscopic tekniğiyle yapılan ölçümlerle, Corlis (1970) tarafından verilen deneysel yöntemlerle elde edilen sonuçların bir kritiği yapılarak elde edilen çalışmanın sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Ek-1' in Tablo 1.1 ve Tablo 1.2 kısmında verilen karşılaştırmaların bir sonucu olarak WBEPM teori yöntemiyle elde edilen osilatör şiddetleri sonuçlarının literatürdeki diğer sonuçlarla % $\pm 6-26$ aralığında farkla uyumludur. Ayrıca QDO teori yönteminden elde edilen sonuçlarla da % $\pm 12-26$ aralığında farkla uyumludur.

Ek-1'deki Tablo 1.3'de Cu I için elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları verilmiştir. Bu karşılaştırmaların bir sonucu olarak WBEPM teori yönteminden elde edilen sonuçlar, Civis ve ark. (2011) Time-resolved FTIR emission spectroscopy tekniği kullanılarak elde edilen hesaplama sonuçları ile % ± 9 farkla uyumludur.

Bakır atomunda uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri Tablo 1.4'de verilmiştir. Elde edilen sonuçlar Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen Numerical Coulomb yaklaşımı yöntemiyle, Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen Hartree-Slater yöntemiyle, Biemont ve ark. (1996) tarafından verilen relativistik düzeltmelerini hesap içerisine alan Relativistic Hartree-Fock (HFR) yaklaşımı yöntemiyle, Carlsson (1988) tarafından verilen Multiconfigurational Hartree-Fock (MCHF) yöntemiyle, Carlsson ve ark. (1987) tarafından verilen bazı deneysel ölçüm sonuçlarıyla, Osherovich ve ark. (1981), Zerme ve ark. (1994) ve Malakhov (1978) tarafından verilen sonuçların bir kritiği yapılarak elde edilen çalışmanın sonuçlarıyla karşılaştırıldı. Tablo 1.4'de verilen 4f, 5f ve 6f seviyeleri için literatürde karşılaştırılma verileri bulunamamıştır. WBEPM teori ile elde edilen yaşam süresi sonuçları, literatürdeki diğer teorik ve deneysel sonuçlarla ortalama % ± 15 farkla uyumludur. QDO teori kullanılarak elde edilen sonuçlar ise teorik sonuçlarla % ± 17 , deneysel sonuçlarla % ± 15 farkla uyumludur.

4.1.2. Bir kez iyonlaşmış çinkoda (Zn II) yapılan hesaplamalar

Ek-2'de bir kez iyonlaşmış çinko (Zn II) için Tablo 2.1'de osilatör şiddeti sonuçları, Tablo 2.2'de elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları ve Tablo 2.3'de uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçları, literatürdeki diğer deneysel ve teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Ek-2'deki Tablo 2.1'de Zn II için osilatör şiddetleri verilmiştir. Bu karşılaştırmaların bir sonucu olarak WBEPM teori yönteminden elde edilen sonuçlar Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen Coulomb yaklaşımı kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 6 , Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile % ± 2 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen Hartree-Slater yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 6 , Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen relativistik Hartree-Fock metodu ile elde edilen sonuçlarla % ± 7 , Mayo ve ark. (2006) tarafından verilen MCHFR-IC metodu kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 16 , Hultberg ve ark. (1981) tarafından verilen deneysel yöntemin sonuçlarıyla % ± 9 , Blagoev ve ark. (2004) tarafından verilen Laser Induced Fluorescence (LIF) tekniği kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 12 farkla uyumludur.

Ayrıca QDO teori yönteminden elde edilen sonuçlar Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 12 , Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile % ± 12 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 2 , Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen sonuçlarla % ± 3 , Mayo ve ark. (2006) tarafından verilen sonuçlarla % ± 10 , Hultberg ve ark. (1981) tarafından verilen deneysel sonuçlarla % ± 9 , Blagoev ve ark. (2004) tarafından verilen sonuçlarla % ± 9 farkla uyumludur.

Ek-2'deki Tablo 2.3'de Zn II için WBEPM teori yönteminden elde edilen uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 14 , Hultberg ve ark. (1981) tarafından verilen yöntemin teorik sonuçlarıyla % ± 9 , Hultberg ve ark. (1981) tarafından verilen yöntemin deneysel sonuçlarıyla % ± 17 , Blagoev ve ark. (2004) tarafından verilen sonuçlarla % ± 12 , Laughlin (1997) tarafından verilen teorik sonuçlarıyla % ± 7 , Martinson ve ark. (1979) tarafından verilen sonuçlarla % ± 7 , Andersen ve ark. (1976) tarafından verilen sonuçlarla % ± 19 , Osherovich ve ark. (1979) tarafından verilen sonuçlarla % ± 24 farkla uyumludur.

Ayrıca bu karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen sonuçların uyumları % ± 15 ve % ± 9 olarak elde edilmiştir.

Tüm tablolar göstermektedir ki bu çalışmadan elde edilen sonuçlarla literatürde daha önce yayınlanmış deneysel ve teorik sonuçlar iyi uyumludur. Tablo 2.1'de WBEPM teori

sonuçları, literatürdeki teorik sonuçlarla % ± 2 -16 aralığında, QDO teori sonuçları ile % ± 2 -12 aralığındadır. Deneysel çalışmalarla bu uyumlar WBEPM teori için % ± 10 -12 aralığında, QDO teori için % ± 9 'dur.

Tablo 2.3'de verilen yaşam süresi sonuçları literatürdeki teorik ve deneysel sonuçlarla oldukça iyi uyumludur. Bu uyum WBEPM teori için teorik sonuçlarla % ± 7 -14 aralığında, QDO teori için % ± 6 -20 aralığındadır. Deneysel sonuçlar için WBEPM teori yöntemi % ± 7 -24 aralığında QDO teori ise % ± 7 -30 aralığındadır. Deneysel ölçümlerden elde edilen sonuçlar genellikle % ± 10 -30 aralığında belirsizlikler içerir. Bu nedenle elde edilen sonuçların büyük bir kısmı deneysel belirsizlik aralığında yer almaktadır.

4.1.3. İki kez iyonlaşmış galyumda (Ga III) yapılan hesaplamalar

İki kez iyonlaşmış galyum (Ga III) için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri sonuçları Ek-3'de verilmiştir. Tablo 3.1'de osilatör şiddeti sonuçları, Tablo 3.2'de elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları ve Tablo 3.3'de uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçları literatürdeki diğer deneysel ve teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Ek-3'deki Tablo 3.1'de Ga III için WBEPM teori yönteminden elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Owono ve ark. (2005) tarafından verilen relativistik osilatör şiddetleri RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen hesaplama sonuçlarıyla % ± 6 , RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 13 , Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile % ± 32 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen Hartree-Slater yönteminden elde edilen sonuçlarla % ± 10 , Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen Coulomb yaklaşımı kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 27 , Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen Relativistic Hartree-Fock metodu ile elde edilen sonuçlarla % ± 18 farkla uyumludur.

Ayrıca bu karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen sonuçlar, Owono ve ark. (2005) tarafından verilen relativistik osilatör şiddetleri RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 1 , RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 9 , Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile % ± 48 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 6 , Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 38 , Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen sonuçlarla % ± 23 farkla uyumludur.

Ek-3'deki Tablo 3.2'de Ga III için WBEPM teori yönteminden elde edilen elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 11 farkla uyumludur. Ayrıca bu karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen sonuçlarla ise, % ± 9 farkla uyumludur.

Ek-3'deki Tablo 3.3'de verilen uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri için WBEPM teori yönteminden elde edilen sonuçlar, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 10 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 6 , Lindgard ve ark. (1982) tarafından verilen deneysel sonuçlarla % ± 11 farkla uyumludur. Ayrıca bu karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen sonuçlar, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 11 , 1 qqa Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 8 , Lindgard ve ark. (1982) tarafından verilen deneysel sonuçlarla % ± 12 farkla uyumludur.

4.1.4. Üç kez iyonlaşmış germanyumda (Ge IV) yapılan hesaplamalar

Ek-4'de üç kez iyonlaşmış germanyum (Ge IV) için Tablo 4.1'de osilatör şiddeti sonuçları, Tablo 4.2'de elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları ve Tablo 4.3'de uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçları literatürdeki diğer teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Ek-4'deki Tablo 4.1'de Ge IV için WBEPM teori yönteminden elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile % ± 13 , Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen relativistik Hartree-Fock metodu ile elde edilen sonuçlarla % ± 14 , Owono ve ark. (2005) tarafından verilen relativistik osilatör şiddetleri RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 11 , RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 9 , Nana ve ark. (1997) tarafından verilen kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarının RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 42 , SQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 16 , Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen Coulomb yaklaşımı kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 16 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen Hartree-Slater yönteminden elde edilen sonuçlarla % ± 9 farkla uyumludur.

Ayrıca karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile % ± 21 , Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen sonuçlarla % ± 14 , Owono ve ark. (2005) tarafından verilen relativistik osilatör şiddetleri RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen

sonuçlarıyla % ± 11 , RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 9 , Nana ve ark. (1997), tarafından verilen RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 26 , SQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 26 , Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 10 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 9 farkla uyumludur.

Ek-4'deki Tablo 4.2'de Ge IV için WBEPM teori yönteminden elde edilen elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 19 farkla uyumludur. Ayrıca bu karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen sonuçlarla ise, % ± 21 farkla uyumludur.

Ek-4'deki Tablo 4.3'de Ge IV için WBEPM teori yönteminden elde edilen uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri sonuçları, Cheng ve Kim (1978) tarafından verilen Relativistic Hartree-Fock (HFR) dalga fonksiyonları kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 4 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 9 , Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 6 farkla uyumludur.

QDO teori yönteminden elde edilen uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri sonuçları, Cheng ve Kim (1978) tarafından verilen sonuçlarla % ± 4 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 9 , Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 19 farkla uyumludur.

4.1.5. Dört kez iyonlaşmış arsenik de (As V) yapılan hesaplamalar

Ek-5'de dört kez iyonlaşmış arsenik (As V) için Tablo 5.1'de osilatör şiddeti sonuçları, Tablo 5.2'de elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları ve Tablo 5.3'de uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçları literatürdeki diğer deneysel ve teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Ek-5'deki Tablo 5.1 de verilen WBEPM teori yönteminden elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen Coulomb yaklaşımı kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 2 , Owono ve ark. (2005) tarafından verilen relativistik osilatör şiddetlerinin RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 6 , RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 8 , Nana ve ark. (1997) tarafında verilen kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarının RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 6 , SQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 8 , Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen relativistik Hartree-Fock metodu ile elde edilen sonuçlarla % ± 8 , Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile % ± 1 ,

Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen Hartree-Slater yönteminden elde edilen sonuçlarla $\% \pm 6$ farkla uyumludur.

Karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 8$, Owono ve ark. (2005) tarafından verilen RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 8$, RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 9$, Nana ve ark. (1997) tarafından verilen RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 7$, SQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 9$, Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 6$, Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile $\% \pm 3$, Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 9$ farkla uyumludur.

Ek-5'deki Tablo 5.2'de As V için WBEPM teori yönteminden elde edilen elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları, Lindgard ve ark. (1980), tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 8$ uyumludur. Ayrıca bu karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen sonuçlarla ise, $\% \pm 15$ farkla uyumludur.

Ek-5'deki Tablo 5.3'de WBEPM teori yönteminden elde edilen yaşam süresi sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 5$, Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 8$, Cheng ve Kim (1978) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 9$, Pinnington ve ark. (1981) tarafından verilen deneysel sonuçlarla $\% \pm 15$ farkla uyumludur.

QDO teori yönteminden elde edilen uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 13$, Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 11$, Cheng ve Kim (1978) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 10$, Pinnington ve ark. (1981) tarafından verilen deneysel sonuçlarla $\% \pm 11$ farkla uyumludur.

4.1.6. Beş kez iyonlaşmış selenyum da (Se VI) yapılan hesaplamalar

Ek-6'da beş kez iyonlaşmış selenyum (Se VI) için Tablo 6.1'de osilatör şiddeti sonuçları, Tablo 6.2'de elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları ve Tablo 6.3'de uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçları literatürdeki diğer teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Ek-6'daki Tablo 6.1'de verilen WBEPM teori yönteminden elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen Coulomb yaklaşımı kullanılarak elde edilen sonuçlarla $\% \pm 2$, Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen relativistik Hartree-

Fock metodu ile elde edilen sonuçlarla $\% \pm 8$, Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen Hartree-Slater yönteminden elde edilen sonuçlarla $\% \pm 5$, Nana ve ark. (1997) tarafından verilen kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonları RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 7$, SQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarla $\% \pm 6$, Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile $\% \pm 1$, Owono ve ark. (2005) tarafından verilen relativistik osilatör şiddetlerinin RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 7$, RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 6$ farkla uyumludur.

QDO teori yönteminden elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 3$, Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 7$, Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 5$, Nana ve ark. (1997) tarafından verilen RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 7$, SQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 6$, Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile $\% \pm 1$, Owono ve ark. (2005) tarafından verilen relativistik osilatör şiddetlerinin RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 7$, RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla $\% \pm 6$ farkla uyumludur.

Ek-6'deki Tablo 6.2'de Se VI için WBEPM teori yönteminden elde edilen elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 2$ uyumludur. Ayrıca bu karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen sonuçlarla ise, $\% \pm 2$ farkla uyumludur.

Ek-6'daki Tablo 6.3 de WBEPM teori yönteminden elde edilen yaşam süresi sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 1$, Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 6$, Cheng ve Kim (1978) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 5$ farkla uyumludur.

Ayrıca aynı karşılaştırmada QDO teori yönteminden elde edilen yaşam süresi sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 2$, Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 6$, Cheng ve Kim (1978) tarafından verilen sonuçlarla $\% \pm 5$ farkla uyumludur.

4.1.7. Yedi kez iyonlaşmış kripton da (Kr VIII) yapılan hesaplamalar

Ek-7'de yedi kez iyonlaşmış kripton (Kr VIII) için Tablo 7.1'de osilatör şiddeti sonuçları, Tablo 7.2'de elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları ve Tablo 7.3'de uyarılmış seviyelerin yaşam süresi sonuçları literatürdeki diğer teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Ek-7'deki Tablo7.1'de WBEPM teori yönteminden elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen Coulomb yaklaşımı kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 17 , Nana ve ark. (1997) tarafından verilen kuantum kusur yönteminin relativistik ve yarı relativistik versiyonlarının RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 15 , SQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 5 , Owono ve ark. (2005) tarafından verilen relativistik osilatör şiddetlerinin RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 2 , RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 5 , Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen relativistik Hartree-Fock metodu ile elde edilen sonuçlarla % ± 9 , Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile % ± 4 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen Hartree-Slater yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 5 , Livingston ve ark.(1980) tarafından verilen foil-excitation yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarla % ± 4 farkla uyumludur.

Karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen osilatör şiddeti sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 22 , Nana ve ark. (1997) tarafından verilen RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 4 , SQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 22 , Owono ve ark. (2005) tarafından verilen relativistik osilatör şiddetlerinin RQDO yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 0.5 , RSQDOT yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlarıyla % ± 6 , Migdalek ve Baylis (1979) tarafından verilen sonuçlarla % ± 8 , Lagmago ve ark. (1998) tarafından verilen hesaplama sonuçları ile % ± 21 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 6 , Livingston ve ark.(1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 5 farkla uyumludur.

Ek-7'deki Tablo 7.2'de Kr VIII için WBEPM teori yönteminden elde edilen elektrik dipol geçiş olasılığı sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 10 farkla uyumludur. Ayrıca bu karşılaştırmalarda QDO teori yönteminden elde edilen sonuçlarla ise, % ± 10 farkla uyumludur.

Ek-7'deki Tablo 7.3'de uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri için WBEPM teori yönteminden elde edilen sonuçlar, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla

% ± 3 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 6 , Cheng ve Kim (1978) tarafından verilen sonuçlarla % ± 5 farkla uyumludur.

QDO teori yönteminden elde edilen uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri sonuçları, Lindgard ve ark. (1980) tarafından verilen sonuçlarla % ± 5 , Curtis ve Theodosiou (1989) tarafından verilen sonuçlarla % ± 7 , Cheng ve Kim (1978) tarafından verilen sonuçlarla % ± 4 farkla uyumludur.

4.2. Tartışma

Atomik bakır ve bazı bakır benzeri iyonlarda bu çalışmadan elde edilen osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam süresi sonuçları, tezin Ek kısmının tablolarında verilmektedir. Bu çalışmadan elde edilen sonuçlar literatürden ulaşılabilen daha önce yapılmış teorik ve deneysel yöntemlerin sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Tablolar dikkatlice incelendiğinde Cu I için bu çalışmadan elde edilen osilatör şiddeti sonuçlarının literatürdeki sonuçlarla ortalama % $\pm 6-26$, Zn II için % $\pm 2-16$, Ga III için % $\pm 6-32$, Ge IV için % $\pm 9-42$, As V için % $\pm 1-9$, Se VI için % $\pm 1-8$ ve Kr VIII için % $\pm 1-22$ aralığında uyumlu görülmektedir. Yaşam süresi sonuçları için ortalama uyumlar ise, Cu I için % $\pm 15-17$, Zn II için % $\pm 7-24$, Ga III için % $\pm 6-12$, Ge IV için % $\pm 4-19$, As V için % $\pm 5-15$, Se VI için % $\pm 1-6$ ve Kr VIII için % $\pm 3-7$ şeklinde elde edilmiştir. Tüm geçişler göz önüne alındığında bu çalışmadan elde edilen osilatör şiddeti sonuçlarının literatürdeki diğer sonuçlarla makul bir uyum içerisinde olduğunu, yaşam süresi sonuçlarının ise literatürle iyi uyumlu olduğunu söyleyebiliriz.

Tabloların bazı geçişlerinde ya da seviyelerinde bu çalışmadan elde edilen sonuçlar ile diğer sonuçlar arasında bazı farklılıklar göze çarpmaktadır. Bu tip geçişlerin bazıları için literatürdeki diğer sonuçların da birbirlerinden oldukça farklı olduğu görülmektedir. Ayrıca farklılıkların genelde s-p, p-d ve d-p geçişleri içeren durumlarda olması hata kaynağının kuantum kusurları olabileceğini düşündürmektedir. Hem WBEPM teori hem de QDO teoride geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve yaşam süreleri için yapılan hesaplamalarda gerekli parametrelerin belirlenmesinde kuantum kusurları kullanılmaktadır. Bu nedenle kuantum kusurlarının doğru olarak belirlenmesi sonuçların güvenilirliği açısından bu iki yöntem için son derece önemlidir.

Bakır atomu ve bakıra benzer iyonlar gibi ara atom numaralı sistemlerin atomik yapı hesaplamaları için yarı relativistik yaklaşımların yeterli olması beklenebilir. Hem WBEPM teori hem de QDO teoride relativistik etkiler ve konfigürasyon etkileşmesi etkileri deneysel enerjiler ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri ile kısmi olarak hesaplamalara dahil edilmektedir. Özellikle yüksek enerjili, pertürbe olmamış ve yüksek uyarılmış durumlar içeren geçişler için WBEPM teori ve QDO teori gibi yarı deneysel yöntemlerin tercih edilmesi bu tür atom ve iyonlar için uygundur. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori deneysel enerji değerlerini kullanır. WBEPM teoride yarıçaplara ait beklenen değerler de kullanılır. Bu yöntemlerde atomik yapı parametrelerinin hesaplanması için Z^* , n^* ve l^* parametrelerinin belirlenmesi yeterlidir. Bu yöntemler ile

yapılan hesaplamaların hassasiyeti ilgili parametrelerin belirlenmesinde kullanılan enerji değerlerine ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerine bağlıdır.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

5.1 Sonuçlar

Fizik ve astrofizik gibi birçok alanda ışık atom etkileşmesi sonucu gözlenebilen atomlara ait geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve yaşam süreleri gibi spektroskopik niceliklerin doğru olarak belirlenmesi oldukça önemlidir. Bu sonuçların belirlenmesindeki hassasiyet hesaplamalarda kullanılan dalga fonksiyonlarının doğruluğuna bağlıdır. Bu konuyla ilgili yapılan teorik ve deneysel çalışmalar yaklaşık 50 yıldır yoğun olarak sürdürülmektedir. Literatür dikkatlice incelenecek olursa söz konusu spektroskopik parametreleri hesaplayan birçok teorik yöntem olduğu görülebilir. Birçok saf teorik yöntemde geçişe iştirak eden elektronların bulunduğu seviyeyi tanımlayan dalga fonksiyonları, konfigürasyonların ve orbital baz setlerinin kombinasyonu şeklinde oluşturulur. Bu yöntemlerle yapılan hesaplamalar düşük uyarılmış seviyeler için makulken yüksek uyarılmış seviyelere doğru gidildikçe çok sayıda konfigürasyonun ve orbital baz setinin göz önüne alınmasını gerektirir. Çok sayıda konfigürasyon ve baz seti ile çalışmak hesaplamaları oldukça karmaşıktır. Bu nedenle güçlü teorik yöntemler birçok durumda yüksek uyarılmış seviyelerden ziyade düşük uyarılmış seviyeleri içeren sonuçlar verirler. Bu nedenle çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerin özellikle yüksek uyarılmış seviyelerine ait spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde literatürde önemli eksiklikler bulunmaktadır.

Bu tez çalışmasıyla, bakır atomu ve bazı bakır benzeri iyonlar için literatürde iyi bilinen saf teorik yöntemlerle belirlenemeyen bazı yüksek uyarılmış seviyelere ait temel spektroskopik veriler en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori kullanılarak diğer yöntemler kadar karmaşık bir hesaplama prosedürüne girmeden belirlenmiştir. Bu tez çalışmasından elde edilen sonuçlar SCI tarafından taranan bazı dergilerde makale olarak ve çeşitli uluslararası ve ulusal bilimsel kongrelerde sunum olarak yayınlanmıştır.

5.2 Öneriler

Hesaplamalarda en zayıf bağı elektron potansiyel model teori ve kuantum kusur orbital teori gibi yarı deneysel yöntemlerin kullanılması özellikle yüksek uyarılmış seviyeler içeren geçişlerin çalışılmasında avantajlı olduğunu söyleyebiliriz. Her iki yöntem kullanılarak yapılan hesaplamalarda, enerji değerlerinin ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerinin hassas olarak belirlenmesi geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve yaşam süresi sonuçlarındaki hassasiyeti arttıracaktır. Yarı deneysel yöntemlerle yüksek uyarılmış seviyeler daha kolay çalışılabilmektedir. Birçok durumda düşük uyarılmış seviyeler için yarı deneysel yöntemlerden elde edilen sonuçlar saf teorik yöntemlerden elde edilen sonuçlarla uyumludur.

Bundan sonraki çalışmalarda, özellikle seviyelere ait yarıçapların daha hassas olarak belirlenmesinin üzerinde durulması ve bu tez çalışmasında oluşturulan paket program kullanılarak yarı relativistik yaklaşımların yeterli olabileceği çok elektronlu sistemlerde atomik yapı parametrelerinin araştırılması amaçlanmaktadır.

KAYNAKLAR

- Agaker, M., 2006, Double Excitations in Helium Atoms and Lithium Compounds, *Ph.D.Thesis Uppsala Universty, Uppsala, Sweden.*
- Ahmad, I., Baig, M.A. and Rashid, A., 2010, Measurements of the Relative Oscillator Strengths of the Principal Series of Copper, *International Journal of Modern Physics B*, 24(14), 2189-2197.
- Andersen, T., Poulsen, O. and Ramanujam, P.S., 1976, Radiative lifetimes in Zn(II), Cd(II) and Hg(II) measured by fast-beam zero-field level-crossing technique, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 16, 521-527.
- Apaydın, F., 2004, Kuantum Fiziği, *Hacettepe Üniversitesi Yayınları*, Ankara.
- Ateş, Ş., 2010, Çok elektronlu sistemlerde atomik yapı hesaplamaları, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.
- Barrientos, C. and Martin, I., 1985, Quantum Defect Orbital Calculations on the Alkaline-Earth Elements: Oscillator Strengths and Photoionization Cross Sections, *Canadian Journal of Physics*, 63, 1441.
- Barrientos, C. and Martin, I., 1989, Core-Polarization Effects in Subordinate Series of the Alkali Atoms, *Canadian Journal of Physics*, 67, 996.
- Bates, D.R. and Damgaard, A., 1949, The Calculation of the Absolute Strengths of Spectral Lines. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 242, 101.
- Baumann, S.R. and Smith, W.H., 1970, Atomic Transition Probabilities: Ultraviolet Multiplets of Zn I,II and Cd I,II, *Journal of the Optical Society of America*, 60, 345-347.
- Biemont, E., Fryczynski, F., Palmeri, P., Quinet, P., Zeippen, C.J., 1996, Radiative lifetimes for states in Cu I, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 55, 215-224.
- Blagoev, K.B., Malcheva, G., Penchev, V., Biemont, E., Xu, H.L., Persson, A. and Svanberg, S., 2004, Radiative lifetimes of Zn I,II excited states, *Physica Scripta*, 69, 433-440.
- Carlsson, J., Dönszelmann, A., Lundberg, H., Persson, A., Sturesson, L., Svanberg, S., 1987, Natural Radiative Lifetimes in the $^2S_{1/2}$ and $^2D_{3/2, 5/2}$ Sequences of Neutral Copper, *Z. Phys. D., Atoms, Molecules and Clusters*, 6, 125-129.
- Carlsson, J., 1988, Configuration Interaction in the Neutral Copper Atom, *Physical Review A*, 38, 1702.
- Cheng, K.T. and Kim, Y.K., 1978, Energy Levels, Wavelengths and Transition Probabilities of Cu-like ions, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 22(6), 547-563.

- Cheng Y. and Mitroy J., 2013, Blackbody Radiation Shift of the Ga^+ Clock Transition, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 46, 185004.
- Chou H.S. and Johnson W.R., 1997, Relativistic many-body Perturbation -Theory Calculations of Transition Rates For Copper-like, Silver-like and Gold-like ions, *Physical Review A*, 56, 2424-2427.
- Civis, S., Matulkova, I., Ciheka, J., Kubelik, P., Kawaguchi, K., Chernov, V.E., 2011, Time-resolved FTIR emission spectroscopy of Cu in the 1800–3800 cm^{-1} region: transitions involving f and g states and oscillator strengths, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44, 1-7.
- Corlis, C.H., 1970, A review of Oscillator Strengths for Lines of Cu I, *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 74A, 781-790.
- Cowan, R.D., 1981, The Theory of Atomic Structure and Spectra, *University of California Press*, Berkeley.
- Cowan, R.D. and Andrew, K.L., 1965, Coupling Considerations in Two-Electron Spectra, *Journal of the Optical Society of America*, 55 (5), 502.
- Curtis L.J. and Theodosiou C.E., 1989, Comprehensive Calculations of 4p and 4d Lifetimes for the Cu Sequence, *Physical Review A*, 39, 605-615.
- Çelik, G., 2005, Çok Elektronlu Atomlarda Elektronik Geçişler, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.
- Çelik, G., Erol, E. and Taşer, M., 2013, Transition probabilities, oscillator strengths and radiative lifetimes for Zn II, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 129, 263-271.
- Çelik, G., Ateş, Ş. and Erol, E., 2015, Oscillator Strengths and Lifetimes for Cu I, *Canadian Journal of Physics*, 93(10), 1015-1023.
- Fano, U., 1970, Quantum defect Theory of I Uncoupling in H_2 as an Example of Channel-Interaction Treatment, *Physical Review A*, 2, 353.
- Gaigalas, G. and Fischer, C.F., 1996, Extension of the HF Program to Partially Filled F-Subshells, *Comput. Phys. Commun*, 98, 1-2, 255-264.
- Gökçe, Y., 2013, Si IX İyonu İçin Geçiş Olasılıkları, Osilatör Şiddetleri ve Uyarılmış Seviyelerin Yaşam Sürelerinin Hesaplanması, Yüksek Lisans Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.
- Ham, F.S., 1955, in Seitz F. and Turnbull D. (ed), *Solid State Physics*, p.127 *Academic Press*, NewYork.
- Hultberg, S., Liljeby, L., Lindgard, A., Mannervik, S. and Veje, E., 1981, Experimental and simulated beam-foil decay curves for some transitions in Zn II, *Physica Scripta*, 22, 623-631.

- Lagmago K.G., Nana Engo, S.G., Kwato Njock, M.G. and Oumarou, B., 1998, Consistent description of Klein-Gordon dipole matrix elements, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 31, 963-997.
- Laughlin, C.Z., 1997, The dipole polarisability of Zn⁺ and the high-*l* Rydberg levels of Zn, *Physics D.*, 39, 201-207.
- Lavin, C., Barrientos, C. and Martin, I., 1992, Quantum-Defect Studies of Transitions in the Diffuse spectral Series of the Potassium Isoelectronic Sequence, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 47, 411.
- Levine, I.N., 2000, Quantum Chemistry, 5th editör, *Prentice-Hall*, Inc. New Jersey.
- Lindgrad, A. and Neilsen, S.E., 1975, Numerical Approach to Transition Probabilities in the Coulomb Approximation: Be II and Mg II. Rydberg Series, *Journal Physics B*, 8, 1183.
- Lindgrad, A. and Neilsen, S.E., 1977, Transition Probabilities for the Alkali Isoelectronic Sequences Li I, Na I, K I, Rb I, Cs I, Fr I Sequences, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 19 (6), 533-633.
- Lindgard, A., Mannervik, S., Jelenkovic, B., Veje, E., 1980, A Beam-Foil Study of Lifetimes in Ga I, Ga III, Tl I and Tl III, *Nuclear Instruments and Methods*, 202, 59-65.
- Lindgard, A., Curtis, L.J., Martinson, I. and Nielsen, S.E., 1982, Semi-empirical oscillator strengths for the Cu I isoelectronic sequence, *Physica Scripta*, 21, 47-62.
- Livingston A.E., Curtis L.J., Schertman and R.M., Berry H.G., 1980, Energies and Lifetimes of Excited States in Copper-like Kr VIII, *Physical Review A*, 21(3), 771-781.
- Malakhov, Yu.I., 1978, Lifetimes of Cu I Levels, *Opt. Spectrosc.*, 44, 125.
- Martin, I. and Simons, G., 1975, New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals II. Atomic Photoionization Cross Sections, *Journal of Chemical Physics*, 62, 4799.
- Martin, I. and Simons, G., 1976, New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals III. The Be Isoelectronic Sequence, *Mol. Phys.*, 32, 1017.
- Martin, I., Lavin, C. and Barrientos, C., 1991, Systematic Trends Along the Potassium Sequence: Study of $ns^2S - mp^2P^o$ Transitions, *Can. J. Phys.*, 69, 1273.
- Martin, W. C. and Wiese, W. L., 1999, Atomic Spectroscopy National Institute of Standards and Technology Gaithersburg, Maryland 20899.
<http://sed.nist.gov/Pubs/AtSpec/total.html>
- Martinson, I., Curtis, L.J., Huldt, S., Litzen, U., Liljeby, L., Mannervik, S. and Jelenkovic, B., 1979, Lifetimes for low-lying levels in Zn I and Zn II, *Physica Scripta*, 19, 17-21.

- Mayo, R., Ortiz, M. and Campos, J., 2006, Experimental oscillator strengths of Zn II lines of astrophysical interest, *Eur. Phys. J. D*, 37, 181-186.
- Migdalek, J., 1978, Relativistic oscillator strengths for some transitions in Cu(I), Ag(I), and Au(I), *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 20, 81-87.
- Migdalek, J. and Baylis, W.E., 1979, Influence of Core Polarisation on Oscillator Strengths Along the Copper Isoelectronic Sequence, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 12 (7), 1113-1123.
- Nana Engo, S.G., Kwato Njock, M.G. and Owono Owono, L.C., 1997, Comparison of phenomenological and supersymmetry-inspired quantum-defect methods in their relativistic and quasirelativistic formulations, *Physical Review A*, 56, 2624-2647.
- Okur, İ., 2000., Atom ve Kuantum Fiziği, *Değişim Yayınları*, Sakarya.
- Osherovich, A.L., Verolainen, Ya, F. and Privlov, VI., 1979, Determination of Radiation Lifetimes for Excited States of Zn I and Zn II, *Opt. Spectrosc.*, 46, 617-619.
- Osherovich, A.L., Phekhokina, G.L. and Obidin, V.R., 1981, Excited State Radiation Lifetimes of Copper Atoms and Ions, *Opt. Spectrosc.*, 50, 576-578.
- Owono Owono L.C., Kwato Njock M.G., Owono Angue M.L.C., 2005, Core Polarisation Corrections to Dipole Transitions for One Valence Electron Systems in the Quantum-Defect Approximation, *Physics Letters A*, 339, 343-351.
- Pinnington E.H., Bahr J.L., Kernahan J.A. and Irwin D.J.G., 1981, Beam-Foil Spectroscopy of As III, IV and V, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 14, 1291-1301.
- Pradhan, A. K., Nahar, S. N., 2011, Atomic Astrophysics and Spectroscopy, 978-0-521-82536-8, *Cambridge University Press*, New York, 97-140.
- Racah, G., 1942, On a new Type of Vector Coupling in Complex Spectra. *Physical Review A*, 61, 537.
- Ralchenko, Y., Kramida, A.E., Reader, J. and NIST ASD Team (2015), NIST Atomic Spectra Database (version 4.0.1) [online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> *National Institute of Standards and Technology*, Gaithersburg, MD.
- Seaton, M. J., 1958, The Quantum Defect Method. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 118, 504.
- Simons, G., 1974, New Procedure for Generating Valence and Rydberg Orbitals I. Atomic Oscillator Strengths. *J. Chem. Phys.*, 60, 645-650.
- Sobelman, I.I., 1975, Introduction to the Theory of Atomic Spectra, *International Series of Monographs in Natural Philosophy*, 40, New York.
- Sobelman, I.I., 1996, Atomic Spectra and Radiative Transitions, *Springer Series in Chemical Physics*, 1 Berlin.

- Wiese, W.L., 2001, Transition Probabilities and Atomic Lifetimes, *McGraw-Hill Encyclopedia of Science and Technology*.
- Wiese, W.L., 2006, Atomic Transition Probabilities, (Web Version 2.0) [Online]. Available:URL:<http://physics.nist.gov/PhysRefData/datarefs/IAU/WG2/report2.html> National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- Zatsarinny, O. and Bandurina, L., 1999, R-Matrix Calculations of the Electron-Impact Excitation of Zn^+ , *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 32(19), 4793.
- Zerne, R., Larsson, J. and Svanberg, S., 1994, Determination of Radiative Lifetimes in the $3d^{10} np \ ^2P$ Sequence of Neutral Copper by Time- Resolved UV Laser Spectroscopy, *Physical Review A*, 49, 128.
- Zheng, N.W., 1977, A New Empirical Formule About Calculation of Ionization Potential, *Chinese Science Bulletin*, 22, 531-535.
- Zheng, N.W., 1986, A New Theoretical Model for Many-Electron Atom and Ion Systems I, *Chinese Science Bulletin*, 31, 1238- 1242.
- Zheng, N.W., 1987, A New Theoretical Model For Many-Electron Atom and Ion Systems II, *Chinese Science Bulletin*, 32, 1263-1267.
- Zheng, N.W. and Xin, H.W., 1991, Successive Ionization Potentials of $4f^n$ Electrons within WBEPM Theory, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 24 (6), 1187-1191.
- Zheng, N.W. and Li, G.S. 1994 Electronegativity - Average Nuclear-Potential of The Valence Electron, *J. Phys Chem-US*, 98, (15), 3964-3966.
- Zheng, N.W., Wang. T., Zhou, T., Sun, Y.J., Su, Y. and Zhang, Y., 1999, Study of Transition Probability of Low States of Alkali Metal Atoms with WBEPM Theory, *Journal of The Physical Society of Japan*, 68, 3859-3862.
- Zheng, N.W., Ma, D.X., Yang, R., Zhou, T., Wang. T. and Han, S., 2000-a, An Efficient Calculation of The Energy Levels of The Carbon Group, *Journal of Chemical Physics*, 113 (5), 1681-1687.
- Zheng, N.W., Sun, Y.J., Wang. T., Ma, D.X., Zhang, Y. and Su, W., 2000-b, Transition Probability of Lithium Atom and Lithiumlike Ions With Weakest Bound Electron Wave Functions and Coupled Equations, *International Journal of Quantum Chemistry*, 76, 51-61.
- Zheng, N.W., Wang. T. and Yang, R., 2000-c, Transition Probability of Cu I, Ag I and Au I from Weakest Bound Electron Potential Model Theory, *Journal of Chemical Physics*, 113 (15), 6169.

- Zheng, N.W., Zhou, T., Yang, R., Wang, T. and Ma, D.X., 2000-d, Analysis of Bound Odd-Parity Spectrum of Krypton by Weakest Bound Electron Potential Model Theory, *Chemical Physics*, 258, 37-46.
- Zheng, N.W., Sun, Y.J., Ma, D.X., Yang, R., Zhou, T. and Wang, T., 2001-a, Theoretical Study on Regularity of Changes in Quantum Defects in Rydberg State Series of Many-Valence Electron Atoms within WBEPM Theory, *International Journal of Quantum Chemistry*, 81, 232-237.
- Zheng, N.W., Wang, T., Yang, R., Zhou, T., Ma, D.X., Wu, Y.G. and Xu, H.T., 2001-b, Transition Probabilities For Be I, Be II, Mg I, and Mg II, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 79 (1), 109-141.
- Zheng, N.W., Wang, T., Ma, D.X. and Zhou, T., 2001-c, Calculation of Transition Probability for C (I-IV), *J. Opt. Soc. Am. B*, 18, 1395-1409.
- Zheng, N.W., Wang, T., Ma, D.X., Zhou, T. and Fan, J., 2004, Weakest Bound Electron Potential Model Theory, *In. J. Quant. Che.*, 98, 281-290.

EKLER

EK-1 Cu I için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları

Tablo 1.1. Cu I'in düşük uyarılmış seviyeleri arasındaki osilatör şiddetleri (Çelik ve ark., 2015)

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J _i	J _f	λ(Å)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Migdalek (1978)	Nana ve ark. (1997)	Curtis ve Theodosiou (1989)	Migdalek ve Baylis (1979)	Ahmad ve ark. (2010)	Civis ve ark. (2011)	Corlis (1970)
						WBEPM	QDO								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P			3257.23	7.31E-01	6.73E-01	7.82E-01			6.69E-01	6.49E-01			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	0.5	3274.9	2.43E-01	2.25E-01	2.63E-01	2.24E-01	2.22E-01	2.21E-01	2.15E-01		2.23E-01	2.23E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	1.5	3248.47	4.88E-01	4.47E-01	5.29E-01	4.53E-01	4.45E-01	4.47E-01	4.34E-01		4.49E-01	4.46E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P			2024.99	4.34E-02	4.16E-02								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	0.5	0.5	2024.98	1.45E-02	1.39E-02	8.76E-03		6.60E-03					
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	0.5	1.5	2024.99	2.89E-02	2.77E-02	1.75E-02		1.33E-02					
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P			1822.65	1.80E-02	1.63E-02								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	0.5	0.5	1817.27	5.52E-03	4.78E-03	9.09E-04							
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	0.5	1.5	1825.35	1.25E-02	1.16E-02	4.63E-05							
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	² S ² P			1730.94	1.45E-03	2.88E-03								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	² S ² P	0.5	0.5	1741.58	1.13E-04	1.64E-04	5.55E-04					1.13E-04		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	² S ² P	0.5	1.5	1725.67	2.43E-03	3.02E-03	4.95E-03					2.43E-03		
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D			5197.93	4.74E-01	5.96E-01								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	0.5	1.5	5154.67	4.77E-01	8.74E-01	5.47E-01	5.46E-01		5.11E-01			5.92E-01	4.88E-01
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	1.5	1.5	5221.52	4.72E-02	5.98E-02	5.54E-02	5.50E-02		5.20E-02			5.98E-02	6.14E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	1.5	2.5	5219.65	4.26E-01	5.38E-01	4.98E-01	4.99E-01		4.67E-01			5.38E-01	4.65E-01
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D			4050.39	9.87E-02	1.31E-01								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D	0.5	1.5	4023.76	9.93E-02	1.68E-01	1.24E-01	1.17E-01					1.31E-01	9.32E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D	1.5	1.5	4064.38	9.83E-03	1.67E-02	1.24E-02	1.19E-02					1.31E-02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D	1.5	2.5	4063.78	8.85E-02	1.18E-01	1.11E-01	1.07E-01					1.18E-01	7.91E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² P ² D			3677.36	6.10E-02	6.18E-02								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² P ² D	0.5	1.5	3655.27	6.13E-02	6.21E-02	4.95E-02							
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² P ² D	1.5	1.5	3688.76	6.08E-03	6.14E-03	4.92E-03							
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² P ² D	1.5	2.5	3688.48	5.47E-02	5.54E-02	4.44E-02						4.65E-02	

Tablo 1.2. Cu I'in yüksek uyarılmış seviyeleri arasındaki osilatör şiddetleri (Çelik ve ark., 2015)

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J _i	J _f	λ(Å)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Curtis ve Theodosiou (1989)	Ahmad ve ark. (2010)
						WBEPM	QDO			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)8p(1)	³ S ² P			1686.6	2.17E-03	2.49E-03			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)8p(1)	³ S ² P	0.5	0.5	1685.7	8.44E-04	8.47E-04	1.74E-03		2.96E-03
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)8p(1)	³ S ² P	0.5	1.5	1687.05	1.32E-03	1.66E-03	2.47E-03		1.20E-03
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)9p(1)	³ S ² P			1664.58	1.17E-03	1.52E-03			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)9p(1)	³ S ² P	0.5	0.5	1664.31	6.99E-04	7.12E-04	7.70E-04		1.35E-03
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)9p(1)	³ S ² P	0.5	1.5	1664.72	7.44E-04	4.11E-04	1.24E-03		6.99E-04
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)10p(1)	³ S ² P			1650.24	6.30E-03	5.16E-03			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)10p(1)	³ S ² P	0.5	0.5	1650.13	2.13E-03	2.40E-03			1.13E-03
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)10p(1)	³ S ² P	0.5	1.5	1650.3	4.86E-04	3.23E-04			4.42E-04
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)11p(1)	³ S ² P			1640.49	5.21E-04	6.77E-04			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)11p(1)	³ S ² P	0.5	0.5	1640.44	1.81E-04	1.22E-04			5.56E-04
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)11p(1)	³ S ² P	0.5	1.5	1640.52	3.40E-04	4.49E-04			3.01E-04
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)12p(1)	³ S ² P			1633.57	3.80E-04	4.91E-04			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)12p(1)	³ S ² P	0.5	1.5	1633.58	2.49E-04	1.95E-04		2.17E-04	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)12p(1)	³ S ² P	0.5	0.5	1633.54	1.31E-04	1.63E-04			3.04E-04
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F			18219.96	9.82E-01	1.01E+00			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	1.5	2.5	18199.69	9.81E-01	1.01E+00	9.90E-01		
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	2.5	2.5	18222.43	4.68E-02	4.80E-02	4.72E-02		
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	2.5	3.5	18234.06	9.36E-01	9.61E-01	9.44E-01		
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F			12550.38	1.82E-01	1.60E-01			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	1.5	2.5	12547	1.81E-01	1.59E-01	1.565E-01		
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	2.5	2.5	12557.81	8.62E-03	7.58E-03	7.44E-03		
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	2.5	3.5	12552.34	1.73E-01	1.52E-01	1.50E-01		
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)6f(1)	² D ² F			10729.31	6.22E-02	5.59E-02			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)6f(1)	² D ² F	1.5	2.5	10724.24	6.22E-02	5.60E-02			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)6f(1)	² D ² F	2.5	2.5	10732.13	2.96E-03	2.66E-03			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)6f(1)	² D ² F	2.5	3.5	10732.72	5.93E-02	5.31E-02			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)7f(1)	² D ² F			9869.496	2.88E-02	2.67E-02			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)7f(1)	² D ² F	1.5	2.5	9865.402	2.88E-02	2.67E-02			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)7f(1)	² D ² F	2.5	2.5	9872.081	1.37E-03	1.27E-03			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)7f(1)	² D ² F	2.5	3.5	9872.235	2.74E-02	2.53E-02			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)8f(1)	² D ² F			9385.79	1.64E-02	1.45E-01			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)8f(1)	² D ² F	1.5	2.5	9382.17	1.65E-02	1.45E-01			
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)8f(1)	² D ² F	2.5	2.5	9388.21	7.82E-04	6.87E-04			
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² F ² D			40543.61	1.50E-02	9.95E-03			
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² F ² D	2.5	1.5	40596.77	1.42E-02	9.35E-03	9.19E-03		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² F ² D	2.5	2.5	40563.01	1.00E-03	6.60E-04	6.46E-04		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² F ² D	3.5	2.5	40505.51	1.49E-02	9.88E-03	9.51E-03		

Tablo 1.2. Devamı

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J _i	J _f	$\lambda(\text{Å})$	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Civis ve ark. (2011)
						WBEPM	QDO		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² F ² D			26161.44	1.61E-03	1.75E-03		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² F ² D	2.5	1.5	26180.34	1.53E-03	1.64E-03	1.53E-03	
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² F ² D	2.5	2.5	26171.71	1.08E-04	1.16E-04	1.08E-04	
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² F ² D	3.5	2.5	26147.76	1.60E-03	1.74E-03	1.57E-03	
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	² F ² D			21560.09	4.03E-04	6.21E-04		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	² F ² D	2.5	1.5	21571.67	4.51E-04	5.84E-04	5.15E-04	
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	² F ² D	2.5	2.5	21567.85	3.22E-05	4.12E-05	3.62E-05	
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	² F ² D	3.5	2.5	21551.58	4.85E-04	6.17E-04	5.26E-04	
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	² F ² D			19353.44	4.14E-04	2.98E-04		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	² F ² D	2.5	1.5	19362.1	3.86E-04	2.80E-04		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	² F ² D	2.5	2.5	19360.15	2.76E-05	1.98E-05		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	² F ² D	3.5	2.5	19347.04	4.15E-04	2.97E-04		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)10d(1)	² F ² D			18085.21	3.45E-04	1.69E-04		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)10d(1)	² F ² D	2.5	1.5	18092.61	3.21E-04	1.59E-04		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)10d(1)	² F ² D	2.5	2.5	18091.2	2.30E-05	1.12E-05		
[Ar]3d(10)4f(1)	[Ar]3d(10)10d(1)	² F ² D	3.5	2.5	18079.75	3.45E-04	1.68E-04		
[Ar]3d(10)5d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F			39724.19	8.22E-01	8.72E-01		
[Ar]3d(10)5d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	1.5	2.5	39720.97	8.23E-01	8.72E-02	8.67E-01	8.73E-01
[Ar]3d(10)5d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	2.5	2.5	39778.23	3.93E-02	4.16E-02	4.14E-02	4.16E-02
[Ar]3d(10)5d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	2.5	3.5	39723.4	7.83E-01	8.30E-01	8.24E-01	8.28E-01
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² F ² D			7739938	1.73E-02	1.27 E-02		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² F ² D	2.5	1.5	8210180.6	1.31E-02	1.55E-02	1.978E-02	
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² F ² D	2.5	2.5	9871668.3	7.778E-04	6.15E-04	7.823E-04	
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² F ² D	3.5	2.5	7352941.2	2.00E-02	1.65E-02	2.113E-02	
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² F ² D			74459.05	3.43E-02	2.51E-02		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² F ² D	2.5	1.5	74392.03	3.19E-02	2.33E-02	2.28E-02	
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² F ² D	2.5	2.5	74322.37	2.25E-03	1.64E-03	1.61E-03	
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² F ² D	3.5	2.5	74514.54	3.45E-02	2.52E-02	2.47E-02	
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	² F ² D			46322.03	4.42E-03	4.74E-03		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	² F ² D	2.5	1.5	46290.3	4.11E-03	4.41E-03	4.25E-03	
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	² F ² D	2.5	2.5	46272.73	2.90E-04	3.11E-04	2.99E-04	
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	² F ² D	3.5	2.5	46347.15	4.44E-03	4.75E-03	4.61E-03	
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	² F ² D			37207.36	1.24E-03	1.74E-03		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	² F ² D	2.5	1.5	37184.4	1.15E-03	1.62E-03		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	² F ² D	2.5	2.5	37177.21	8.11E-05	1.14E-04		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	² F ² D	3.5	2.5	37225.23	1.24E-03	1.74E-03		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)10d(1)	² F ² D			32787.1	4.84E-04	8.49E-04		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)10d(1)	² F ² D	2.5	1.5	32768.73	4.50E-04	7.91E-04		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)10d(1)	² F ² D	2.5	2.5	32764.11	3.16E-05	5.58E-05		
[Ar]3d(10)5f(1)	[Ar]3d(10)10d(1)	² F ² D	3.5	2.5	32801.4	4.86E-04	8.51E-04		
[Ar]3d(10)7p(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² P ² D			67654.88	3.99E-01	2.45E-01		
[Ar]3d(10)7p(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	² P ² D	0.5	1.5	54638.84	7.16E-02	1.40E-01	7.29E-02	

Tablo 1.3. Cu I için elektrik dipol geçiş olasılıkları ($\times 10^8$ Hz)

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J _i	J _f	$\lambda(\text{Å})$	BU ÇALIŞMA		Civis ve ark. (2011)
						WBEPM	QDO	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	Multiplet		3257.23	2.33E+00*	1.75E+00	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	0.5	3274.9	2.29E+00*	1.04E+00	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	1.5	3248.47	2.35E+00*	1.76E+00	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	Multiplet		4515.11	3.30E-01*	1.96E-01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	0.5	0.5	4481.6	1.13E-01*	9.75E-01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	1.5	0.5	4532.05	2.17E-01*	1.28E-01	
[Ar]3d(10)5p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	Multiplet		28854.21	7.93E-02*	7.87E-02	
[Ar]3d(10)5p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	0.5	0.5	28855.96	2.64E-02*	2.62E-02	2.62E-02
[Ar]3d(10)5p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	1.5	0.5	28853.38	5.29E-02*	5.25E-02	5.25E-02
[Ar]3d(10)5d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	Multiplet		39724.19	2.48E-02	2.63E-02	
[Ar]3d(10)5d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	1.5	2.5	39720.97	2.32E-02	2.46E-02	2.46E-02
[Ar]3d(10)5d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	2.5	2.5	39778.23	1.66E-03	1.76E-03	1.76E-03
[Ar]3d(10)5d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	² D ² F	2.5	3.5	39723.4	2.48E-02	2.63E-02	2.63E-02
[Ar]3d(10)6s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	Multiplet		49589.87	1.47E-02*	1.42E-02	
[Ar]3d(10)6s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	0.5	0.5	45892.8	1.88E-02*	1.69E-02	1.69E-02
[Ar]3d(10)6s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	0.5	1.5	51671.28	1.29E-02*	1.28E-02	1.28E-02
[Ar]3d(10)6p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² P ² D	Multiplet		33014.31	8.34E-03	3.60E-03	
[Ar]3d(10)6p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² P ² D	0.5	1.5	34900.24	8.47E-03	1.04E-02	1.04E-02
[Ar]3d(10)6p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	² P ² D	1.5	1.5	32164.79	1.25E-03	1.67E-03	1.67E-03

Tablo 1.4. Cu I için uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri (*s*) (Çelik ve ark., 2015)

Uyarılmış Seviye	Terim	J	Enerji (cm ⁻¹)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Biemont ve ark. (1996)	Carlsson (1988)	Curtis ve Theodosiou (1989)	Carlsson ve ark. (1987)
				WBEPM	QDO					
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	0.5	30535.3	6.61E-09	7.14E-09	6.11E-09		6.87E-09	7.25E-09	
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	1.5	30783.69	6.49E-09	7.07E-09	5.98E-09		6.68E-09	7.07E-09	
[Ar]3d(10)5p(1)	² P	0.5	49383.26	2.72E-08	3.52E-08	3.88E-08	2.18E-08	1.95E-08		2.71E-08 ^a
[Ar]3d(10)5p(1)	² P	1.5	49382.95	2.72E-08	3.52E-08	3.88E-08	2.04E-08	1.65E-08		2.79E-08 ^a 2.30E-08
[Ar]3d(10)6p(1)	² P	0.5	55027.74	2.63E-07	2.25E-07	1.85E-07	2.41E-08	1.95E-08		2.51E-08 ^b
[Ar]3d(10)6p(1)	² P	1.5	54784.06	4.10E-07	4.85E-07	3.53E-07	5.91E-09	4.92E-09		5.20E-09 ^b
[Ar]3d(10)7p(1)	² P	0.5	57419.26	4.27E-08	4.18E-08	3.38E-07	3.27E-09	4.37E-09		4.00E-09 ^b
[Ar]3d(10)7p(1)	² P	1.5	57948.57	2.92E-08	2.25E-08	1.18E-07	1.04E-08	5.76E-09		1.50E-08 ^b
[Ar]3d(10)8p(1)	² P	0.5	59322.71	6.81E-08	5.24E-08	1.65E-07	1.58E-08	5.19E-09		1.58E-08 ^b
[Ar]3d(10)8p(1)	² P	1.5	59274.97	7.12E-08	6.79E-08	2.20E-07	2.84E-08	1.06E-08		3.10E-08 ^b
[Ar]3d(10)9p(1)	² P	0.5	60084.84	5.96E-07	5.81E-07	3.43E-07	5.53E-08	8.51E-09		5.10E-08 ^b
[Ar]3d(10)9p(1)	² P	1.5	60070.18	6.70E-07	6.28E-07	4.07E-07	1.06E-07	2.27E-08		1.23E-07 ^b
[Ar]3d(10)10p(1)	² P	0.5	60601.18	1.58E-07	1.52E-07					
[Ar]3d(10)10p(1)	² P	1.5	60595.07	1.60E-07	1.51E-07					
[Ar]3d(10)11p(1)	² P	0.5	60959.42	2.00E-07	2.13E-07					
[Ar]3d(10)11p(1)	² P	1.5	60956.35	2.01E-07	2.11E-07					

Tablo 1.4. Devamı

Uyarılmış Seviye	Terim	J	Enerji (cm ⁻¹)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Biemont ve ark. (1996)	Carlsson (1988)	Carlsson ve ark. (1987)	
				WBEPM	QDO					
[Ar]3d(10)12p(1)	² P	0.5	61216.84	2.49E-07	2.23E-07					
[Ar]3d(10)12p(1)	² P	1.5	61215.13	2.49E-07	2.23E-07					
[Ar]3d(10)13p(1)	² P	0.5	61407.5	3.05E-07	3.34E-07					
[Ar]3d(10)13p(1)	² P	1.5	61406.75	3.05E-07	3.74E-07					
[Ar]3d(10)14p(1)	² P	0.5	61552.67	3.69E-07	3.74E-07					
[Ar]3d(10)14p(1)	² P	1.5	61552.67	3.69E-07	3.74E-07					
[Ar]3d(10)15p(1)	² P	0.5	61665.89	4.40E-07	4.22E-07					
[Ar]3d(10)15p(1)	² P	1.5	61665.89	4.40E-07	4.22E-07					
[Ar]3d(10)16p(1)	² P	0.5	61755.75	3.54E-07	3.56E-07					
[Ar]3d(10)16p(1)	² P	1.5	61755.75	3.54E-07	3.56E-07					
[Ar]3d(10)17p(1)	² P	0.5	61828.24	1.65E-08						
[Ar]3d(10)17p(1)	² P	1.5	61828.24	1.65E-08						
[Ar]3d(10)5s(1)	² S	0.5	43137.21	1.72E-08	1.77E-08	2.35E-08	1.67E-08	1.69E-08	2.24E-08 ^c	
[Ar]3d(10)6s(1)	² S	0.5	52848.75	3.24E-08	3.51E-08	5.28E-08	4.54E-08	4.59E-08	4.82E-08 ^a	5.30E-08
[Ar]3d(10)7s(1)	² S	0.5	56671.39	5.50E-08	8.61E-08	1.01E-07	8.84E-08	9.60E-08	8.61E-08 ^a	1.03E-07
[Ar]3d(10)8s(1)	² S	0.5	58568.92	9.55E-08	1.37E-07	1.81E-07	1.24E-07	1.69E-07		2.04E-07
[Ar]3d(10)9s(1)	² S	0.5	59647.88	1.62E-07	1.47E-07	3.06E-07	1.81E-07	2.40E-07		2.83E-07

Tablo 1.4. Devamı

Uyarılmış Seviye	Terim	J	Enerji (cm ⁻¹)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Biemont ve ark. (1996)	Carlsson (1988)	Curtis ve Theodosiou (1989)	Carlsson ve ark. (1987)
				WBEPM	QDO					
[Ar]3d(10)4d(1)	² D	1.5	49935.2	1.40E-08	2.89E-08	1.22E-08	8.68E-09	9.69E-09	1.30E-08	1.45E-08 ^a
[Ar]3d(10)4d(1)	² D	2.5	49942.06	1.44E-08	1.14E-08	1.23E-08	8.87E-09	9.82E-09	1.31E-08	4.50E-08 ^c
[Ar]3d(10)5d(1)	² D	1.5	55387.67	4.03E-08	3.98E-08	2.68E-08	2.22E-08	2.48E-08		5.48E-08 ^c
[Ar]3d(10)5d(1)	² D	2.5	55391.29	4.13E-08	2.57E-08	2.71E-08	2.26E-08	2.54E-08		4.72E-08 ^c
[Ar]3d(10)6d(1)	² D	1.5	57893.05	5.35E-08	5.36E-08	5.11E-08	4.82E-08	4.98E-08		6.70E-08
[Ar]3d(10)6d(1)	² D	2.5	57895.1	5.46E-08	5.02E-08	5.27E-08	4.90E-08	4.95E-08		5.56E-08 ^a
[Ar]3d(10)7d(1)	² D	1.5	59249.46	7.42E-08	6.94E-08	8.84E-08	8.34E-08	8.48E-08		9.90E-08
[Ar]3d(10)7d(1)	² D	2.5	59250.72	7.57E-08	8.46E-08	8.79E-08	8.45E-08	8.52E-08		
[Ar]3d(10)8d(1)	² D	1.5	60065.51	1.02E-07	1.10E-07	1.37E-07	1.46E-07	1.27E-07	1.50E-07	
[Ar]3d(10)8d(1)	² D	2.5	60066.33	1.04E-07	1.11E-07	1.38E-07	1.48E-07	1.21E-07		
[Ar]3d(10)9d(1)	² D	1.5	60594.53	1.38E-07	1.66E-07		1.13E-07		2.20E-07	
[Ar]3d(10)9d(1)	² D	2.5	60595.05	1.41E-07	1.65E-07		1.11E-07			
[Ar]3d(10)10d(1)	² D	1.5	60956.92	1.64E-07	1.45E-07					
[Ar]3d(10)10d(1)	² D	2.5	60957.35	1.66E-07	1.57E-07					
[Ar]3d(10)4f(1)	² F	2.5	55429.8	6.42E-08	6.90E-08	7.023E-08	6.30E-08			
[Ar]3d(10)4f(1)	² F	3.5	55426.3	6.45E-08	6.92E-08	7.044E-08	2.87E-08			
[Ar]3d(10)5f(1)	² F	2.5	57905.23	6.73E-08	2.63E-08	1.36E-07	2.33E-08			
[Ar]3d(10)5f(1)	² F	3.5	57908.7	1.25E-07	1.24E-07	1.356E-07	1.229E-07			
[Ar]3d(10)8f(1)	² F	2.5	60593.72	7.24E-08	7.06E-08					

[a]- Osheroich ve ark. (1981) [b]- Zerne ve ark. (1994) [c]- Malakhov (1978)

EK-2 Zn II için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları

Tablo 2.1. Zn II için osilatör şiddetleri (Çelik ve ark., 2013)

İlk seviye	Son seviye	Terimler	J _i	J _f	λ (Å)	BU ÇALIŞMA		Lindgard ve ark. (1980)	Blagoev ve ark. (2004)	Diğer Sonuçlar				
						WBEPM	QDO							
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P		Multiplet	2038.17	8.72E-01	8,98E-01							
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	0.5	2062.66	2.87E-01	2.95E-01	2.96E-01	2.91E-01	2.90E-01 ^a	2.86E-01 ^b			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	1.5	2026.14	5.85E-01	6.03E-01	6.05E-01	5.86E-01	5.90E-01 ^a	5.82E-01 ^b			
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S		Multiplet	2539.78	1.23E-01	1,12E-01							
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	0.5	0.5	2502.74	1.20E-01	1.52E-01	1.27E-01	1.60E-01		1.15E-01 ^b			
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	1.5	0.5	2558.72	1.24E-01	1.55E-01	1.32E-01	1.47E-01		1.28E-01 ^b			
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D		Multiplet	2088.71	7.40E-01*	7,72E-01							
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	0.5	1.5	2064.89	7.48E-01*	7.69E-01	8.47E-01		5.43E-01 ^a	5.88E-01 ^c	7.84E-01 ^f	9.51E-01 ^j	7.89E-01 ^g
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	1.5	1.5	2102.84	7.35E-02*	7.73E-02	8.59E-01		8.7E-02 ^a	7.90E-02 ^f			7.99E-02 ^g
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	1.5	2.5	2100.60	6.63E-01*	6.96E-01	7.72E-01		6.90E-01 ^a	7.14E-01 ^f	7.04E-01 ^d	6.70E-01 ^h	7.18E-01 ^g
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F		Multiplet	4920.40	1.04E+00	1.03E+00							
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	1.5	2.5	4912.98	1.04E+00	1.02E+00	1.06E+00	1.08E+00		8.68E-01 ^c	9.90E-01 ^e	1.08E+00 ⁱ	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	2.5	2.5	4925.23	4.94E-02	4.88E-02	5.05E-02						
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	2.5	3.5	4925.38	1.11E+00*	9.76E-01	1.01E+00	1.32E+00		1.32E+00 ^e	1.02E+00 ⁱ		
[Ar]3d(10)5p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D		Multiplet	6077.44	9.81E-01*	8.72E-01							
[Ar]3d(10)5p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D	0.5	1.5	6022.86	9.90E-01*	8.64E-01	9.43E-01	8.26E-01		8.20E-01 ^e	8.26E-01 ^j		
[Ar]3d(10)5p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D	1.5	1.5	6113.25	9.74E-02*	8.77E-02	9.63E-02	7.87E-02		2.40E-02 ^e	7.87E-02 ^j		
[Ar]3d(10)5p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D	1.5	2.5	6104.18	8.79E-01*	7.88E-01	8.63E-01	7.08E-01		5.20E-01 ^e	7.08E-01 ^j		

[a] Beam-Foil (Hultberg ve ark., 1981)

[b] WKB method (Lagmago ve ark., 1998)

[c] NIST atomic spectra database

[d] Supersymmetry Quantum defect theory (Nana ve ark., 1997)

[e] Laser-produced plasma (Mayo ve ark., 2006)

[f] MCDF+ core polarization method (Curtis ve Theodosiou, 1989)

[g] RHF+ core polarization method (Migdalek ve Baylis, 1979)

[h] HF method (Zatsarinny ve Bandurina, 1999)

[j] MCHFR+IC method (Mayo ve ark., 2006)

Tablo 2.2. Zn II için elektrik dipol geçiş olasılıkları ($\times 10^8$ Hz) ve osilatör şiddetleri (Çelik ve ark., 2013)

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J_i	J_f	λ (Å)	Bu Çalışma				Lindgard ve ark. (1980)
						Geçiş Olasılıkları ($\times 10^8$ Hz)		Osilatör şiddetleri		
						WBEPM	QDO	WBEPM	QDO	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	$^2P \ ^2D$		Multiplet	1450.95	1.51E+00*	1.62E+00	7.92E-02*	8.52E-02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	$^2P \ ^2D$	0.5	1.5	1439.09	1.30E+00*	1.70E+00	8.05E-02*	1.06E-01	1.10E-01
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	1.5	1457.42	2.47E-01*	3.25E-01	7.85E-03*	1.04E-02	1.08E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	2.5	1456.91	1.48E+00*	1.96E+00	7.07E-02*	9.36E-02	9.75E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	$^2P \ ^2D$		Multiplet	1272.67	6.86E-01*	6.50E-01	2.78E-02*	2.63E-02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	$^2P \ ^2D$	0.5	1.5	1263.45	5.90E-01*	7.69E-01	2.83E-02*	3.68E-02	3.67E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	1.5	1277.55	1.13E-01*	1.43E-01	2.75E-03*	3.51E-03	3.56E-03
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	2.5	1277.32	6.75E-01*	8.66E-01	2.48E-02*	3.18E-02	3.23E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	$^2P \ ^2D$		Multiplet	1193.01	3.89E-01*	4.58E-01	1.38E-02*	1.63E-02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	$^2P \ ^2D$	0.5	1.5	1184.84	3.34E-01*	4.07E-01	1.41E-02*	1.71E-02	1.72E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	1.5	1197.24	6.38E-02*	7.71E-02	1.37E-03*	1.66E-03	1.66E-03
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)7d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	2.5	1197.13	3.82E-01*	4.66E-01	1.23E-02*	1.50E-02	1.51E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	$^2P \ ^2D$		Multiplet	1149.54	2.51E-01*	2.86E-01	8.29E-03*	9.44E-03	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	$^2P \ ^2D$	0.5	1.5	1141.93	2.16E-01*	2.46E-01	8.44E-03*	9.63E-03	9.62E-03
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	1.5	1153.44	4.12E-02*	4.66E-02	8.22E-04*	9.29E-04	9.25E-04
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)8d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	2.5	1153.38	2.47E-01*	2.81E-01	7.39E-03*	8.42E-03	8.40E-03
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	$^2P \ ^2D$		Multiplet	1122.93	1.66E-01*	1.87E-01	5.22E-03*	5.89E-03	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	$^2P \ ^2D$	0.5	1.5	1115.66	1.42E-01*	1.61E-01	5.31E-03*	6.01E-03	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	1.5	1126.65	2.72E-02*	2.85E-01	5.18E-04*	5.42E-03	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)9d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	2.5	1126.6	1.63E-01*	1.84E-01	4.66E-03*	5.25E-03	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	$^2D \ ^2P$		Multiplet	21789.06	3.40E-02	3.09E-02	1.45E-01	1.32E-01	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	$^2D \ ^2P$	1.5	0.5	22440.85	3.13E-02	2.84E-02	1.18E-01	1.07E-01	1.07E-01
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	$^2D \ ^2P$	1.5	1.5	21269.08	3.63E-03	3.31E-03	2.46E-02	2.24E-02	2.23E-02
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	$^2D \ ^2P$	2.5	1.5	21500.75	3.18E-02	2.89E-02	1.47E-01	1.34E-01	1.33E-01
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	$^2D \ ^2F$		Multiplet	3304.29	6.82E-01*	6.16E-01	1.56E-01*	1.41E-01	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	$^2D \ ^2F$	1.5	2.5	3300.37	6.38E-01*	5.79E-01	1.56E-01*	1.42E-01	1.38E-01
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	$^2D \ ^2F$	2.5	2.5	3305.89	4.53E-02*	4.10E-02	7.43E-03*	6.72E-03	6.56E-03
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5f(1)	$^2D \ ^2F$	2.5	3.5	3306.97	6.80E-01*	6.13E-01	1.49E-01*	1.34E-01	1.30E-01
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)6f(1)	$^2D \ ^2F$		Multiplet	2802.36	2.85E-01*	2.83E-01	4.70E-02*	4.67E-02	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)6f(1)	$^2D \ ^2F$	1.5	2.5	2801.56	2.69E-01*	2.61E-01	4.75E-02*	4.60E-02	4.27E-02
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)6f(1)	$^2D \ ^2F$	2.5	2.5	2805.54	1.91E-02*	1.85E-02	2.26E-03*	2.18E-03	2.02E-03
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)6f(1)	$^2D \ ^2F$	2.5	3.5	2802.77	2.83E-01*	2.86E-01	4.44E-02*	4.49E-02	4.29E-02

Tablo 2.3. Zn II için uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri (τ) (Çelik ve ark., 2013)

Uyarılmış seviye	Terim	J	ENERJİ (cm ⁻¹)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Deneysel		Teorik		Diğer Sonuçlar		
				WBEPM	QDO		Blagoev ve ark. (2004)	Blagoev ve ark. (2004)					
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	0.5	48481	2.22E-09	2.16E-09	2.15E-09	2.6E-09	2.19E-09			2.2E-09 ⁱ		2.1E-09 ^a ±0.4
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	1.5	49355.04	2.11E-09	2.04E-09	2.04E-09	2.6E-09	2.10E-09	3.1E-09 ^b ±0.4	2.9E-09 ^f	2.0E-09 ⁱ	2.07E-09 ^b ±0.2	2.1E-09 ^a ±0.3
[Ar]3d(10)5p(1)	² P	0.5	101365.9	1.84E-08	1.68E-08	1.71E-08		1.67E-08		1.83E-08 ^e	1.6E-08 ⁱ	1.7E-08 ^b ±2	
[Ar]3d(10)5p(1)	² P	1.5	101611.4	1.75E-08	1.57E-08	1.54E-08		1.59E-08		1.86E-08 ^e	1.6E-08 ⁱ	1.7E-08 ^b ±2	
[Ar]3d(10)6p(1)	² P	0.5	119888.51	7.34E-08	7.15E-08	7.02E-08		4.87E-08		7.00E-08 ^e			5.0E-09 ^a ±2
[Ar]3d(10)6p(1)	² P	1.5	119959.34	6.95E-08	5.74E-08	6.49E-08		4.68E-08		6.79E-08 ^e			
[Ar]3d(10)7p(1)	² P	0.5	128518.5	2.36E-07	1.60E-07	2.31E-07							
[Ar]3d(10)7p(1)	² P	1.5	128343.4	2.42E-07	1.17E-07	1.77E-07							
[Ar]3d(10)8p(1)	² P	0.5	132414.9	2.53E-08	1.81E-08	1.53E-08							
[Ar]3d(10)8p(1)	² P	1.5	133622.1	2.04E-07	2.61E-07	2.09E-07							
[Ar]3d(10)9p(1)	² P	1.5	136505.3	3.01E-07 ^g	1.41E-07								
[Ar]3d(10)5s(1)	² S	0.5	88437.15	2.20E-09 ^g	2.09E-09	2.47E-09	1.70E-09	1.99E-09	2.0E-09 ^c ±0.2		2.5E-09 ⁱ	1.8E-09 ^b ±0.2	
[Ar]3d(10)6s(1)	² S	0.5	114498.02	3.43E-09	4.05E-09	4.48E-09		3.58E-09		4.49E-09 ^e			
[Ar]3d(10)7s(1)	² S	0.5	125880	5.24E-09	5.14E-09	8.01E-09							5.6E-09 ^a ±2
[Ar]3d(10)8s(1)	² S	0.5	131876.9	8.02E-09	9.50E-09	13.2E-09							
[Ar]3d(10)9s(1)	² S	0.5	135423.3	1.20E-08	2.49E-08	2.68E-08							
[Ar]3d(10)4d(1)	² D	1.5	96909.74	1.44E-09 ^g	1.39E-09	1.26E-09	1.8E-09	1.27E-09	1.8E-09 ^c	1.39E-09 ^e	1.3E-09 ⁱ		1.4E-09 ^a ±0.2

Tablo 2.3. Devamı

Uyarılmış seviye	Terim	J	ENERJİ (cm ⁻¹)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Deneysel Blagoev ve ark. (2004)	Teorik Blagoev ve ark. (2004)		Diğer Sonuçlar			
				WBEPM	QDO								
[Ar]3d(10)4d(1)	² D	2.5	96960.4	1.50E-09 [*]	1.43E-09	1.28E-09	1.44E-09	1.31E-09		1.38E-09 ^f	1.8E-09 ^a ±0.4	1.4E-09 ^b ±0.15	1.4E-09 ^a ±0.2
[Ar]3d(10)5d(1)	² D	1.5	117969.32	3.81E-09 [*]	2.93E-09	3.17E-09		3.58E-09	5.3E-09 ^d	3.67E-09 ^e	3.2E-09 ⁱ		5.4E-09 ^a ±0.5
[Ar]3d(10)5d(1)	² D	2.5	117993.61	3.95E-09 [*]	4.03E-09	3.25E-09		3.68E-09	5.4E-09 ^d	3.75E-09 ^e			
[Ar]3d(10)6d(1)	² D	1.5	127629.6	7.58E-09 [*]	7.72E-09	6.36E-09		7.56E-09	7.7E-09 ^c	7.50E-09 ^e	6.4E-09 ⁱ		6.6E-09 ^a ±2.3
[Ar]3d(10)6d(1)	² D	2.5	127643.7	7.84E-09 [*]	7.80E-09	6.53E-09		7.73E-09	8.9E-09 ^d	7.85E-09 ^e	6.5E-09 ⁱ		8.2E-09 ^a ±2.7
[Ar]3d(10)7d(1)	² D	1.5	132880.6	1.28E-08 [*]	1.32E-08	1.11E-08			1.66E-08 ^c		1.13E-08 ⁱ		
[Ar]3d(10)7d(1)	² D	2.5	132888.4	1.30E-08 [*]	1.38E-08	1.14E-08			1.70E-08 ^d				
[Ar]3d(10)8d(1)	² D	1.5	136051.9	1.77E-08 [*]	1.88E-08	1.83E-08					1.8E-08 ^k		
[Ar]3d(10)8d(1)	² D	2.5	136056.8	2.06E-08 [*]	1.84E-08	1.82E-08					1.8E-08 ⁱ		
[Ar]3d(10)9d(1)	² D	1.5	138114	2.86E-08 [*]	2.82E-08								
[Ar]3d(10)9d(1)	² D	2.5	138117.5	3.06E-08 [*]	2.71E-08								
[Ar]3d(10)4f(1)	² F	2.5	117264	4.89E-09	4.94E-09	4.79E-09		4.49E-09	4.83E-09 ^e		4.8E-09 ⁱ		4.7E-09 ^a ±1.5
[Ar]3d(10)4f(1)	² F	3.5	117263.4	4.90E-09	4.97E-09	4.81E-09		4.51E-09	4.807E-09 ^d		4.8E-09 ⁱ		4.5E-09 ^a ±1.5
[Ar]3d(10)5f(1)	² F	2.5	127209.4	9.10E-09	9.83E-09	9.76E-09			9.22E-09	9.69E-09 ^e			
[Ar]3d(10)5f(1)	² F	3.5	127199.6	9.18E-09	9.91E-09	9.84E-09			9.39E-09	10.5E-09 ^e			
[Ar]3d(10)6f(1)	² F	2.5	132604.1	1.56E-08	1.74E-08	1.75E-08			1.71E-08	1.74E-08 ^e	1.7E-08 ⁱ		
[Ar]3d(10)6f(1)	² F	3.5	132639.4	1.53E-08	1.71E-08	1.71E-08			1.72E-08	1.88E-08 ^e			

Tablo 2.3. Devamı

Uyarılmış seviye	Terim	J	ENERJİ (cm ⁻¹)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Blagoev ve ark. (2004)
				WBEPM	QDO		
[Ar]3d(10)7f(1)	² F	2.5	135892.6	2.47E-08*	2.72E-08	2.74E-08	
[Ar]3d(10)7f(1)	² F	3.5	135889.9	2.48E-08*	2.74E-08	2.76E-08	
[Ar]3d(10)8f(1)	² F	2.5	138003.3	3.69E-08*	6.16E-08		
[Ar]3d(10)8f(1)	² F	3.5	138002.1	3.71E-08*	6.23E-08		
[Ar]3d(10)5g(1)	² G	3.5	127310.9	1.43E-08	1.42E-08	1.44E-08	1.389E-08
[Ar]3d(10)5g(1)	² G	4.5	127310.8	1.43E-08	1.42E-08	1.43E-08	1.39E-08
[Ar]3d(10)6g(1)	² G	3.5	132683.9	2.44E-08	3.73E-08	2.44E-08	3.768E-08
[Ar]3d(10)6g(1)	² G	4.5	132683.9	2.44E-08	3.71E-08	2.43E-08	3.768E-08
[Ar]3d(10)7g(1)	² G	3.5	135923.8	3.84E-08	3.83E-08	3.84E-08	
[Ar]3d(10)7g(1)	² G	4.5	135923.8	3.82E-08	3.82E-08	3.80E-08	

[a] Beam-Foil (Hultberg ve ark., 1981)

[b] Beam-Foil (Martinson ve ark., 1979)

[c] zero-field level-crossing technique (Andersen ve ark., 1976)

[d] the delayed coincidence method (Osherovich ve ark., 1979)

[e] polarization potential approach (Laughlin, 1997)

[f] Dirac Fock method (Curtis ve Theodosiou, 1989)

[g] RHF+ core polarization method (Cowan, 1981)

[h] phase-shift technique (Baumann ve Smith, 1970)

[i] numerical Coulomb approximation (Hultberg ve ark., 1981)

EK-3 Ga III için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları

Tablo 3.1. Ga III için osilatör şiddetleri

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J _i	J _f	λ(Å)	Bu Çalışma		Cheng ve Mitroy (2013)	Owono ve ark.(2005) RQDO	Owono ve ark.(2005) RSQDT	Lagmago ve ark.(1998)	Nana ve ark. (1997)QDO	Nana ve ark. (1997)SQDT	Curtis ve Theodosiou (1989)	Lindgard ve ark. (1980)	Migdalek ve Baylis(1979)	
						WBEPM	QDO										
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P			Multiplet	1507.96	8.91E-01	8.49E-01	7.96E-01					8.00E-01		1.08E+00	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	0.5	1534.46	2.92E-01	2.79E-01			2.75E-01	2.62E-01	2.87E-01	2.75E-01	2.61E-01	2.61E-01	2.97E-01	3.38E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	1.5	1495.04	5.99E-01	5.70E-01			5.68E-01	5.08E-01	5.90E-01	5.68E-01	5.08E-01	5.39E-01	6.11E-01	6.95E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P			Multiplet	620.64	1.06E-03*	2.44E-03	9.02E-03								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	0.5	0.5	622.02	3.03E-04*	4.90E-03				5.00E-04	9.90E-03	5.00E-04			1.91E-04	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	0.5	1.5	619.95	7.61E-04*	7.10E-03				3.00E-04	1.68E-02	4.00E-04			4.41E-05	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S			Multiplet	1343.51	1.33E-01*	1.34E-01	1.51E-01								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	0.5	0.5	1323.15	1.35E-01*	1.40E-01									1.25E-01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	1.5	0.5	1353.93	1.33E-01*	1.44E-01									1.31E-01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S			Multiplet	824.73	2.27E-02	2.82E-02	2.20E-02								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	0.5	0.5	817.01	2.23E-02	2.89E-02									1.71E-02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	1.5	0.5	828.65	2.30E-02	2.90E-02									1.75E-02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D			Multiplet	813.6	5.53E-02	4.06E-02	5.57E-02								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D	0.5	1.5	806.33	5.60E-02	4.31E-02									7.58E-02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D	1.5	1.5	817.66	5.45E-03	3.86E-03									7.19E-03	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5d(1)	² P ² D	1.5	2.5	817.24	4.95E-02	3.55E-02									6.55E-02	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² D ² P			Multiplet	5892.74	2.21E-01*	2.01E-01	2.08E-01								
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² D ² P	1.5	0.5	1323.15	1.81E-01*	1.66E-01									1.67E-01	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² D ² P	1.5	1.5	1353.93	3.75E-02*	3.38E-02									3.37E-02	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² D ² P	2.5	1.5	1353.93	2.23E-01*	2.02E-01									2.02E-01	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F			Multiplet	2422.39	1.09E+00	1.04E+00	1.12E+00								
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	1.5	2.5	2418.61	1.09E+00	1.04E+00									1.13E+00	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	2.5	2.5	2425.28	5.20E-02	4.93E-02									5.40E-02	

Tablo 3.2. Ga III için elektrik dipol geçiş olasılıkları ($\times 10^8$ Hz)

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J_i	J_f	λ (Å)	BU ÇALIŞMA		Lindgard ve ark.(1980)
						WBEPM	QDO	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	2S 2P		Multiplet	1507.96	8.71E+00	8.29E+00	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	2S 2P	0.5	0.5	1534.46	8.26E+00	7.91E+00	8.42E+00
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	2S 2P	0.5	1.5	1495.04	8.94E+00	8.50E+00	9.12E+00
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	2S 2P		Multiplet	620.64	1.99E-01	5.71E-01	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	2S 2P	0.5	0.5	622.02	2.70E-01	4.86E-01	3.29E-02
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	2S 2P	0.5	1.5	619.95	1.67E-01	9.42E-01	3.82E-03
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	2S 2P		Multiplet	509.62	8.51E-02	2.49E-02	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	2S 2P	0.5	0.5	509.36	1.19E-02*	1.63E-02	8.49E-02
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	2S 2P	0.5	1.5	509.75	9.33E-02	2.82E-02	4.46E-02
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	2S 2P		Multiplet	467.83	1.54E-02	1.91E-02	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	2S 2P	0.5	0.5	467.87	1.68E-02	1.82E-02	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	2S 2P	0.5	1.5	467.81	1.47E-02	1.65E-02	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)8p(1)	2S 2P		Multiplet	445.81	3.97E-02*	1.62E-02	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)8p(1)	2S 2P	0.5	1.5	445.81	3.97E-02*	1.62E-02	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)9p(1)	2S 2P		Multiplet	434.31	3.00E-02*	1.57E-02	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)9p(1)	2S 2P	0.5	1.5	434.31	3.00E-02*	1.57E-02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	2P 2S		Multiplet	1343.51	1.48E+01*	1.48E+01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	2P 2S	0.5	0.5	1323.15	5.14E+00*	5.02E+00	4.75E+00
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	2P 2S	1.5	0.5	1353.93	9.64E+00*	9.82E+00	9.53E+00

Tablo 3.3. Ga III için uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri (s)

Uyarılmış Seviye	Terim	J	Enerji (cm^{-1})	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Lindgard ve ark. (1982)	Curtis ve Theodosiou (1989)
				WBEPM	QDO			
[Ar]3d(10)4p(1)	2P	0.5	65169.4	1.21E-09	1.26E-09	1.19E-09		1.35E-09
[Ar]3d(10)4p(1)	2P	1.5	66887.63	1.12E-09	1.18E-09	1.10E-09	1.10E-09	1.24E-09
[Ar]3d(10)5p(1)	2P	0.5	160765.56	4.96E-09*	4.99E-09	5.41E-09	5.40E-09	
[Ar]3d(10)5p(1)	2P	1.5	161304.4	4.55E-09*	4.47E-09	5.13E-09	5.10E-09	
[Ar]3d(10)6p(1)	2P	0.5	196324.6	1.17E-08*	1.19E-08	1.40E-08		
[Ar]3d(10)6p(1)	2P	1.5	196173.7	1.23E-08*	1.39E-08	1.38E-08		
[Ar]3d(10)4d(1)	2D	1.5	144086.46	4.37E-10*	4.89E-10	4.08E-10	4.10E-10	4.44E-10
[Ar]3d(10)4d(1)	2D	2.5	144200.28	4.59E-10*	5.05E-10	4.20E-10		4.56E-10
[Ar]3d(10)5d(1)	2D	1.5	189187.72	1.45E-09	1.37E-09	1.18E-09	1.20E-09	
[Ar]3d(10)5d(1)	2D	2.5	189250.59	1.49E-09	1.44E-09	1.22E-09	1.20E-09	
[Ar]3d(10)5s(1)	2S	0.5	140746.84	6.76E-10*	6.74E-10	7.00E-10		

EK-4 Ge IV için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları

Tablo 4.1. Ge IV için osilatör şiddetleri

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J _i	J _f	λ(Å)	BU ÇALIŞMA		Lagmago ve ark. (1998)	Migdalek ve Baylis (1979)	Owono ve ark. (2005) RQDO	Owono ve ark. (2005) RSQDT	Nana ve ark. (1997)QDO	Nana ve ark. (1997)SQDT	Lindgard ve ark. (1980)	Curtis ve Theodosiou (1989)
						WBEPM	QDO								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	Multiplet		1202.33	8.84E-01	8.82E-01		1.03E+00						
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	0.5	1229.84	2.87E-01	2.88E-01	2.83E-01	3.24E-01	2.54E-01	2.62E-01	2.54E-01	2.62E-01	2.92E-01	2.62E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	1.5	1189.03	5.96E-01	5.94E-01	5.87E-01	6.73E-01	5.29E-01	5.48E-01	5.29E-01	5.48E-01	6.05E-01	5.45E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	Multiplet		440.37	7.75E-03*	7.82E-03								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	0.5	0.5	441.59	2.41E-03*	2.38E-03	2.60E-03				5.00E-04	2.60E-03	1.87E-03	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	0.5	1.5	439.77	5.34E-03*	1.82E-03	3.10E-03				1.80E-03	3.20E-03	2.09E-03	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	Multiplet		352.96	2.06E-03*	2.33E-03								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	0.5	0.5	353.32	6.07E-04*	6.28E-04							6.81E-04	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	0.5	1.5	352.78	1.46E-03*	1.72E-03							1.17E-03	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	² S ² P	Multiplet		321.09	5.80E-04	8.44E-04								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	² S ² P	0.5	0.5	321.19	2.29E-04	2.54E-04								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	² S ² P	0.5	1.5	321.05	3.53E-04	5.92E-04								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	Multiplet		861.39	1.26E-01*	1.35E-01								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	0.5	0.5	847.8	1.28E-01*	1.33E-01							1.21E-01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	1.5	0.5	868.35	1.25E-01*	1.36E-01							1.28E-01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	Multiplet		533.53	2.16E-02	2.69E-02								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	0.5	0.5	528.28	2.10E-02	1.84E-02							1.81E-02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	² P ² S	1.5	0.5	536.19	2.19E-02	1.84E-02							1.87E-02	

Tablo 4.2. Ge IV için elektrik dipol geçiş olasılıkları ($\times 10^8$ Hz)

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J_i	J_f	$\lambda(\text{\AA})$	BU ÇALIŞMA		Chou ve Johnson (1997)	Lindgard ve ark. (1980)
						WBEPM	QDO		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	$2S \ 2P$	Multiplet		1202.33	1.36E+01	1.36E+01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	$2S \ 2P$	0.5	0.5	1229.84	1.27E+01	1.27E+01	1.46E+01	1.29E+01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	$2S \ 2P$	0.5	1.5	1189.03	1.41E+01	1.40E+01	2.07E+01	1.43E+01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	$2S \ 2P$	Multiplet		440.37	8.89E-01*	8.07E-01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	$2S \ 2P$	0.5	0.5	441.59	8.25E-01*	8.14E-01		6.40E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	$2S \ 2P$	0.5	1.5	439.77	9.22E-01*	1.09E+00		3.60E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	$2S \ 2P$	Multiplet		352.96	3.68E-01*	3.73E-01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	$2S \ 2P$	0.5	0.5	353.32	3.25E-01*	3.15E-01		3.65E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	$2S \ 2P$	0.5	1.5	352.78	3.92E-01*	4.05E-01		3.13E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	$2S \ 2P$	Multiplet		321.09	1.25E-01	1.86E-01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	$2S \ 2P$	0.5	0.5	321.19	1.48E-01	1.75E-01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	$2S \ 2P$	0.5	1.5	321.05	1.14E-01	1.77E-01		
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	$2P \ 2S$	Multiplet		861.39	3.40E+01*	3.64E+01		
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	$2P \ 2S$	0.5	0.5	847.8	1.19E+01*	1.23E+01		1.12E+01
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	$2P \ 2S$	1.5	0.5	868.35	2.22E+01*	2.41E+01		2.27E+01
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	$2P \ 2S$	Multiplet		533.53	1.84E+01*	1.89E+01		
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	$2P \ 2S$	0.5	0.5	528.28	6.39E+00*	6.39E+00		4.31E+00
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)6s(1)	$2P \ 2S$	1.5	0.5	536.19	1.21E+01*	1.25E+01		8.63E+00

Tablo 4.3. Ge IV için uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri (s)

Uyarılmış Seviye	Terim	J	Enerji (cm ⁻¹)	BU ÇALIŞMA		Curtis ve Theodosiou (1989)	Cheng ve Kim (1978)	Lindgard ve ark. (1980)
				WBEPM	QDO			
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	0.5	81311.4	7.89E-10	7.87E-10	8.64E-10	7.58E-10	7.77E-10
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	1.5	84102.3	7.11E-10	7.13E-10	7.77E-10	6.85E-10	7.01E-10
[Ar]3d(10)5p(1)	² P	0.5	226456.7	1.54E-09*	1.22E-09			1.68E-09
[Ar]3d(10)5p(1)	² P	1.5	227393.9	1.46E-09	1.13E-09			1.66E-09
[Ar]3d(10)6p(1)	² P	0.5	283027.8	2.72E-09*	2.44E-09			2.96E-09
[Ar]3d(10)6p(1)	² P	1.5	283461.4	2.73E-09	2.24E-09			2.98E-09
[Ar]3d(10)7p(1)	² P	0.5	311342	4.69E-09	4.50E-09			
[Ar]3d(10)7p(1)	² P	1.5	311482	4.72E-09	4.26E-09			
[Ar]3d(10)5s(1)	² S	0.5	199263.7	2.94E-10*	2.75E-10			2.95E-10
[Ar]3d(10)6s(1)	² S	0.5	270603.4	4.29E-10	4.40E-10			4.53E-10

EK-5 As V için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları

Tablo 5.1. As V için osilatör şiddetleri

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J _i	J _f	λ(Å)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Nana ve ark. (1997)QDO	Nana ve ark. (1997)SQDT	Owono ve ark. (2005) RQDO	Owono ve ark. (2005) RSQDT	Migdalek ve Baylis (1979)	Lagmago ve ark. (1998)	Curtis ve Theodosiou (1989)
						WBEPM	QDO								
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	Multiplet		1021.71	9.66E-01*	8.66E-01						9.97E-01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	0.5	1029.5	2.81E-01	2.86E-01	2.85E-01	2.65E-01	2.57E-01	2.65E-01	2.57E-01	3.12E-01	2.78E-01	2.62E-01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	1.5	987.7	5.88E-01	5.97E-01	5.97E-01	5.51E-01	5.45E-01	5.51E-01	5.45E-01	6.53E-01	5.82E-01	5.48E-01
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	Multiplet		603.42	1.23E-01*	1.27E-01								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	0.5	0.5	600.74	1.23E-01*	1.26E-01	1.15E-01							
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	1.5	0.5	615.95	1.21E-01*	1.30E-01	1.23E-01							
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	Multiplet		717.93	1.07E+00*	1.14E+00						1.13E+00		
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	0.5	1.5	715.5	1.07E+00*	1.14E+00	1.07E+00					1.13E+00		9.89E-01
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	1.5	1.5	737.18	1.04E-01*	1.12E-01	1.07E-01					1.13E-01		9.87E-02
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	1.5	2.5	734.77	9.38E-01*	9.40E-01	9.61E-01					1.02E+00		8.90E-01
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	Multiplet		1054.04	1.24E+00*	1.46E+00								
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	1.5	2.5	1051.64	1.24E+00*	1.46E+00	1.21E+00							
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	2.5	2.5	1056.58	5.89E-02*	4.87E-02	5.77E-02							
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	² D ² F	2.5	3.5	1055.6	1.18E+00*	1.39E+00	1.15E+00							

Tablo 5.2. As V için elektrik dipol geçiş olasılıkları ($\times 10^8$ Hz)

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J_i	J_f	$\lambda(\text{\AA})$	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Chou ve Johnson (1997)
						WBEPM	QDO		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	$^2S \ ^2P$	Multiplet		1021.71	1.81E+01	1.79E+01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	$^2S \ ^2P$	0.5	0.5	1029.5	1.77E+01	1.75E+01	1.80E+01	1.32E+01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	$^2S \ ^2P$	0.5	1.5	987.7	2.01E+01	2.04E+01	2.04E+01	1.88E+01
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	$^2P \ ^2S$	Multiplet		603.42	6.74E+01*	7.00E+01		
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	$^2P \ ^2S$	0.5	0.5	600.74	2.27E+01*	2.34E+01	2.13E+01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	$^2P \ ^2S$	1.5	0.5	615.95	4.24E+01*	4.60E+01	4.33E+01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	$^2P \ ^2D$	Multiplet		717.93	7.07E+01	6.54E+01		
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	$^2P \ ^2D$	0.5	1.5	715.5	5.93E+01	5.48E+01	6.97E+01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	1.5	737.18	1.12E+01	1.04E+01	1.31E+01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	2.5	734.77	6.78E+01	6.28E+01	7.92E+01	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	$^2D \ ^2F$	Multiplet		1054.04	4.86E+01	4.39E+01		
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	$^2D \ ^2F$	1.5	2.5	1051.64	4.56E+01	4.11E+01	4.87E+01	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	$^2D \ ^2F$	2.5	2.5	1056.58	3.23E+00	2.91E+00	3.45E+00	
[Ar]3d(10)4d(1)	[Ar]3d(10)4f(1)	$^2D \ ^2F$	2.5	3.5	1055.6	4.85E+01	4.37E+01	5.17E+01	

Tablo 5.3. As V için uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri (s)

Uyarılmış Seviye	Terim	J	Enerji (cm ⁻¹)	Bu Çalışma		Lindgard ve ark. (1980)	Curtis ve Theodosiou (1989)	Cheng ve Kim (1978)	Pinnington ve ark. (1981)
				WBEPM	QDO				
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	0.5	97135	5.65E-10	5.71E-10	5.57E-10	6.07E-10	5.39E-10	6.8E-10±0.09
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	1.5	101245	4.97E-10	4.90E-10	4.90E-10	5.34E-10	4.76E-10	5.4E-10±0.03
[Ar]3d(10)5s(1)	² S	0.5	263596	1.54E-10*	1.44E-10	1.55E-10		1.40E-10	1.4E-10±0.01
[Ar]3d(10)4d(1)	² D	1.5	236897	1.42E-10	1.53E-10	1.21E-10	1.31E-10	1.20E-10	1.66E-10±0.012
[Ar]3d(10)4d(1)	² D	2.5	237342	1.48E-10	1.59E-10	1.26E-10	1.36E-10	1.30E-10	1.8E-10±0.02
[Ar]3d(10)4f(1)	² F	2.5	331987	1.87E-10*	1.59E-10	1.92E-10			
[Ar]3d(10)4f(1)	² F	3.5	332075	1.89E-10*	1.60E-10	1.93E-10			

EK-6 Se VI için osilatör şiddeti, geçiş olasılığı ve yaşam süresi tabloları

Tablo 6.1. Se VI için osilatör şiddetleri

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J_i	J_f	$\lambda(\text{Å})$	BU ÇALIŞMA		Lindgard ve ark. (1980)	Migdalek ve Baylis (1979)	Curtis ve Theodosiou (1989)	Nana ve ark. (1997) QDO	Nana ve ark. (1997) SQDT	Lagmago ve ark. (1998)	Owono ve ark. (2005) RQDO	Owono ve ark. (2005) RSQDT	
						WBEPM	QDO									
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	$^2S \ ^2P$		Multiplet	857.91	8.52E-01	8.48E-01		9.65E-01							
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	$^2S \ ^2P$	0.5	0.5	886.82	2.74E-01	2.75E-01	2.76E-01	3.01E-01	2.64E-01	2.55E-01	2.56E-01	2.78E-01	2.55E-01	2.56E-01	
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	$^2S \ ^2P$	0.5	1.5	844.15	5.78E-01	5.74E-01	5.82E-01	6.35E-01	5.59E-01	5.34E-01	5.47E-01	5.82E-01	5.34E-01	5.47E-01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	$^2P \ ^2S$		Multiplet	460.76	1.17E-01*	1.25E-01									
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	$^2P \ ^2S$	0.5	0.5	452.83	1.19E-01*	1.22E-01	1.14E-01								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	$^2P \ ^2S$	1.5	0.5	464.83	1.17E-01*	1.27E-01	1.22E-01								
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	$^2P \ ^2D$		Multiplet	599.97	1.06E+00	1.08E+00		1.13E+00							
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	$^2P \ ^2D$	0.5	1.5	588	1.09E+00	1.08E+00	1.06E+00	1.12E+00	1.01E+00						
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	1.5	608.39	1.05E-01	1.08E-01	1.05E-01	1.11E-01	1.00E-01						
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	$^2P \ ^2D$	1.5	2.5	605.89	9.48E-01	9.72E-01	9.50E-01	1.00E+00	9.04E-01						

Tablo 6.2. Se VI için elektrik dipol geçiş olasılıkları ($\times 10^8$ Hz)

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J _i	J _f	$\lambda(\text{\AA})$	BU ÇALIŞMA		Lindgard ve ark. (1980)	Chou ve Johnson (1997)
						WBEPM	QDO		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P		Multiplet	857.91	2.57E+01	2.56E+01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	0.5	886.82	2.32E+01	2.33E+01	2.34E+01	1.22E+01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	1.5	844.15	2.71E+01	2.69E+01	2.72E+01	1.72E+01
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S		Multiplet	460.76	1.11E+02*	1.18E+02		
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	0.5	0.5	452.83	3.88E+01*	3.97E+01	3.70E+01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)5s(1)	² P ² S	1.5	0.5	464.83	7.20E+01*	7.82E+01	7.56E+01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D		Multiplet	599.97	1.18E+02*	1.20E+02		
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	0.5	1.5	588	1.05E+02*	1.04E+02	1.02E+02	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	1.5	1.5	608.39	1.89E+01*	1.94E+01	1.90E+01	
[Ar]3d(10)4p(1)	[Ar]3d(10)4d(1)	² P ² D	1.5	2.5	605.89	1.15E+02*	1.18E+02	1.15E+02	

Tablo 6.3. Se VI için uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri (s)

Uyarılmış Seviye	Terim	J	Enerji (cm ⁻¹)	BU ÇALIŞMA		Lindgard ve ark. (1980)	Curtis ve Theodosiou (1989)	Cheng ve Kim (1978)
				WBEPM	QDO			
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	0.5	112762	4.31E-10	4.29E-10	4.27E-10	4.60E-10	4.08E-10
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	1.5	118462	3.70E-10	3.72E-10	3.67E-10	3.95E-10	3.52E-10
[Ar]3d(10)5s(1)	² S	0.5	333594	9.03E-11*	8.48E-11	8.88E-11		
[Ar]3d(10)4d(1)	² D	1.5	282830	8.08E-11*	8.14E-11	8.24E-11	8.67E-11	
[Ar]3d(10)4d(1)	² D	2.5	283509	8.70E-11*	8.66E-11	8.69E-11	9.14E-11	

Tablo 7.2. Kr VIII için elektrik dipol geçiş olasılıkları ($\times 10^8$ Hz)

İlk Seviye	Son Seviye	Terim	J _i	J _f	$\lambda(\text{\AA})$	BU ÇALIŞMA		Lindgard ve ark. (1980)	Chou ve Johnson (1997)	Livingston ve ark. (1980)
						WBEPM	QDO			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	Multiplet		665.71	4.09E+01	4.12E+01			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	0.5	695.91	3.56E+01	3.61E+01	3.55E+01	1.05E+01	1.07E+01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)4p(1)	² S ² P	0.5	1.5	651.57	4.37E+01	4.38E+01	4.35E+01	1.49E+01	1.50E+01
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	Multiplet		183.09	3.04E+01*	2.53E+01			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	0.5	0.5	182.92	3.08E+01*	2.45E+01	3.13E+01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)5p(1)	² S ² P	0.5	1.5	181.67	2.82E+01	1.88E+01	2.37E+01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	Multiplet		138.53	1.62E+01*	1.52E+01			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	0.5	0.5	138.77	1.50E+01*	1.74E+01	2.36E+01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)6p(1)	² S ² P	0.5	1.5	138.41	1.69E+01*	1.42E+01	1.92E+01		
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	² S ² P	Multiplet		122.97	5.36E+00	6.06E+00			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	² S ² P	0.5	0.5	123.08	6.36E+00	6.67E+00			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)7p(1)	² S ² P	0.5	1.5	122.92	4.89E+00	5.77E+00			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)8p(1)	² S ² P	Multiplet		115.27	4.73E+00*	3.88E+00			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)8p(1)	² S ² P	0.5	0.5	115.33	4.26E+00*	4.24E+00			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)8p(1)	² S ² P	0.5	1.5	115.24	4.97E+00*	3.71E+00			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)9p(1)	² S ² P	Multiplet		110.8	2.90E+00*	2.60E+00			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)9p(1)	² S ² P	0.5	0.5	110.84	2.58E+00*	2.84E+00			
[Ar]3d(10)4s(1)	[Ar]3d(10)9p(1)	² S ² P	0.5	1.5	110.79	3.06E+00*	2.48E+00			

Tablo 7.3. Kr VIII için uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri (*s*)

Uyarılmış Seviye	Terim	J	Enerji (cm ⁻¹)	BU ÇALIŞMA		Lindgard ve ark. (1980)	Curtis ve Theodosiou (1989)	Cheng ve Kim (1978)
				WBEPM	QDO			
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	0.5	143696	2.81E-10	2.76E-10	2.82E-10	2.97E-10	2.65E-10
[Ar]3d(10)4p(1)	² P	1.5	153476	2.29E-10	2.28E-10	2.30E-10	2.42E-10	2.17E-10
[Ar]3d(10)5p(1)	² P	0.5	546681	9.44E-11*	9.55E-11	9.33E-11		
[Ar]3d(10)5p(1)	² P	1.5	550444	9.51E-11	9.38E-11	9.86E-11		
[Ar]3d(10)6p(1)	² P	0.5	720594	1.28E-10*	1.39E-10	1.19E-10		
[Ar]3d(10)6p(1)	² P	1.5	722471	1.20E-10*	1.37E-10	1.27E-10		
[Ar]3d(10)7p(1)	² P	0.5	812476	1.97E-10	2.12E-10			
[Ar]3d(10)7p(1)	² P	1.5	813550	2.07E-10	2.08E-10			
[Ar]3d(10)8p(1)	² P	0.5	867081	2.95E-10	3.13E-10			
[Ar]3d(10)8p(1)	² P	1.5	867745	3.07E-10	3.08E-10			
[Ar]3d(10)9p(1)	² P	0.5	902191	4.26E-10	4.47E-10			
[Ar]3d(10)9p(1)	² P	1.5	902635	4.42E-10	4.39E-10			

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Elmas Erol
Uyruğu : T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi : Konya-1989
Telefon :
Faks :
e-mail : elmas_erol@hotmail.com

EĞİTİM

Derece	Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise	: Muhittin Güzelkılınç Lisesi, Meram, Konya	2006
Üniversite	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2012
Yüksek Lisans	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görevi
2015	MEB (Ücretli)	Fizik Öğretmenliği

UZMANLIK ALANI: Atom ve Molekül Fiziği

YABANCI DİLLER: İngilizce

YAYINLAR:

1. Çelik, G., Erol, E. and Taşer, M., 2013, Transitions probabilities, oscillator strengths and radiative lifetimes for Zn II, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 129, 263-271.
2. Çelik, G., Ateş, Ş. and Erol, E., 2015, Oscillator strengths and lifetimes for Cu I, *Canadian Journal of Physics*, 93(10), 1015-1023.
3. Çelik, G., Erol, E. and Taşer, M., 2013, Oscillator strengths for singly ionized zinc, 11th International Colloquium on Atomic Spectra and Oscillator Strengths (ASOS 11) for Astrophysical and Laboratory Plasmas August 5 – 9, Mons, Belgium, Oral Presentation CT-33 page,86.
4. Erol, E. Ateş, Ş. and Çelik, G., 2015, Electric dipole transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes for copper like arsenic (As V), *Adım Fizik Günleri-IV*, Kütahya 2015, Poster Presentation, PA4, page, 92.

5. Erol, E. and Çelik, G., 2014, Lifetimes of Excited levels for Cu like Germanium *Turkish Physical Society 31 st International Physics Congress*, Bodrum, Poster Presentation Page, 283.
6. Erol, E., Çelik, G., Ateş, Ş., Yıldız, M., Taşer, M., 2014, Electric Dipole Transition Probabilities and Oscillator Strengths for Cu like Galyum, *Adım Fizik Günleri-III*, Isparta, Poster Presentation, PA6, page,76.
7. Çelik, G. and Erol, E., 2013, Weakest bound electron potential model theory calculations of transition probabilities and lifetimes for Cu I, *11th International Colloquium on Atomic Spectra and Oscillator Strengths (ASOS 11) for Astrophysical and Laboratory Plasmas August 5 – 9*, Mons, Belgium, Poster Presentation PO-44, page,134.
8. Erol, E. and Çelik,G., 2013, Weakest Bound Electron Potential Model Theory Calculations Of Oscillator Strengths In Cu Isoelectronic Sequence, *Turkish Physical Society 30 th International Physics Congress*, İstanbul, Poster Presentation 01-PP29, page, 45,
9. Çelik, G., Ateş, Ş. and Erol, E., 2013, Electric Dipole Transition Probabilities For Ne II, *Turkish Physical Society 30 th International Physics Congress*, İstanbul, Poster Presentation 01-PP24, page, 45.