



SELÇUK
ÜNİVERSİTESİ

T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YASAK GEÇİŞLER

Duygu DOĞAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Haziran-2013
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ KABUL VE ONAYI

Duygu DOĞAN tarafından hazırlanan “Yasak Geçişler” adlı tez çalışması 28/06/2013 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

Yrd. Doç. Dr. Mehmet TAŞER

Üye

Yrd. 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.



Duygu DOĞAN

Tarih: 12.06.2013

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

YASAK GEÇİŞLER

Duygu DOĞAN

**Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı**

Danışman: Doç. Dr. Gültekin ÇELİK

2013, 61 Sayfa

Jüri

**Doç. Dr. Gültekin ÇELİK
Yrd. Doç. Dr. Mehmet TAŞER
Yrd. Doç. Dr. Murat YILDIZ**

Bu tez çalışmasında, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ilk kez yasak geçişlere uygulanmıştır. Mg II (Bir kez iyonlaşmış magnezyum) için elektrik kuadropol geçiş olasılıkları ve Fe IV (Üç kez iyonlaşmış demir) için manyetik dipol geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Bu çalışmadan elde edilen elektrik kuadropol ve manyetik dipol geçiş olasılığı sonuçları literatürdeki diğer teorik sonuçlarla karşılaştırılmış ve iyi bir uyum elde edilmiştir.

Anahtar kelimeler: En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, Fe IV, Geçiş olasılığı, Mg II, Yasak geçişler

ABSTRACT

MS THESIS

FORBIDDEN TRANSITIONS

Duygu DOĞAN

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

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK

2013, 61 Pages

Jury

Assoc. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK

Asst. Prof. Dr. Mehmet TAŞER

Asst. Prof. Dr. Murat YILDIZ

In this study, the weakest bound electron potential model theory has been applied to forbidden transitions for the first time. Electric quadrupole transition probabilities for Mg II (singly ionized magnesium) and magnetic dipole transition probabilities for Fe IV (three times ionized iron) were calculated. The electric quadrupole and magnetic dipole transition probability results obtained from this study compared with other theoretical results in the literature and good agreement was obtained.

Keywords: Weakest bound electron potential model theory, Fe IV, Transition probability, Mg II, Forbidden transitions

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 yardımını esirgemeyen, karşılaştığım zorlukları aşmam için bilgi, tecrübe ve manevi desteğini hiçbir zaman esirgemeyen saygı değer danışman hocam sayın Doç. Dr. Gültekin ÇELİK'e, ayrıca bana her konuda yardımcı olan, tecrübelerinden faydalandığım bilgi ve desteğini gördüğüm Dr. Şule ATEŞ'e, teşekkürü bir borç bilirim.

Ayrıca çalışmalarım boyunca bana maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen sevgili anneme, babama, kardeşlerime ve çok değerli arkadaşlarıma en içten teşekkürlerimi sunarım.

Duygu DOĞAN
KONYA-2013

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
ÖNSÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR	ix
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI	3
2.1. Alkali - Benzeri Atomlarda Daha Önce Yapılan Hesaplamalar	3
2.2. Mg II İle İlgili Daha Önce Yapılan Hesaplamalar	3
2.3. Fe IV İle İlgili Daha Önce Yapılan Hesaplamalar	4
3. MATERYAL VE YÖNTEM	5
3.1. Geçiş Tipleri.....	5
3.1.1. Kendiliğinden geçişler	6
3.1.2. Uyarılmış salınım	7
3.1.3. LS Çiftlenimi ve Spektroskopik Terim	8
3.2. Seçim Kuralları	12
3.2.1. Elektrik dipol geçiş için seçim kuralları	12
3.2.2. Elektrik kuadropol geçiş için seçim kuralları	13
3.2.3. Manyetik dipol geçiş için seçim kuralları	16
3.3. İşımalı Geçişler	19
3.3.1. Einstein katsayıları.....	19
3.4. Yasak Geçişler	23
3.4.1. Elektrik kuadropol geçiş	24
3.4.1.1. Elektrik kuadropol geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti	26
3.4.1.2. Elektrik kuadropol çizgi şiddeti	27
3.4.2. Manyetik dipol geçiş	32
3.4.2.1. Manyetik dipol geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti	33
3.4.2.2. Manyetik dipol çizgi şiddeti.....	33
3.5. En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori	35
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA	40
4.1. Araştırma Sonuçları	40
4.1.1. Bir kez iyonlaşmış magnezyumda yapılan hesaplamalar	41
4.1.2. Üç kez iyonlaşmış demirde yapılan hesaplamalar	49
4.2. Tartışma	54
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	55
5.1. Sonuçlar	55
5.2. Öneriler	56

KAYNAKLAR	57
ÖZGEÇMİŞ.....	61

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

Fe:	Demir
Mg:	Magnezyum
He:	Helyum
Na:	Sodyum
K:	Potasyum
Ar:	Argon
Co:	Kobalt

Kısaltmalar

Mg I:	Atomik Magnezyum
F I:	Atomik Flor
Li:	Atomik Lityum
Mg II:	Bir kez iyonlaşmış Magnezyum
Fe IV:	Üç kez iyonlaşmış Demir
WBEPMT:	Weakest Bound Electron Potential Model Theory
RHF:	Relativistic Hartree-Fock
HS:	Hartree-Slater
NCA:	Numerical Coulomb-Approximation
NIST:	National Institute of Standards and Technology
NRHF:	Numerical Non-Relativistic Hartree-Fock
MCHF:	Multiconfiguration Hartree-Fock
MCDHF:	Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock
RHF:	Roothann-Hartree-Fock
TDHF:	Time Dependent Hartree-Fock
E1:	Elektrik dipol
E2:	Elektrik kuadropol
E3:	Elektrik oktupol
M1:	Manyetik dipol
A:	Geçiş olasılığı
S:	Çizgi şiddeti
f:	Osilatör şiddeti
n:	Başkuantum sayısı
Z*:	Etkin çekirdek yükü
Z:	Atom numarası
\bar{B} :	Manyetik alan
\hbar :	Planck sabiti
L:	Yörünge açısal momentum
S:	Spin açısal momentum
J:	Toplam açısal momentum

1. GİRİŞ

Maddenin yapısına inildiğinde molekül ve atomlarla karşılaşılır. Molekül ve atomların yapısının incelenmesi maddeyi anlamamızı sağlar ve spektroskopik yöntemlerle maddenin yapısı anlaşılabilir. Bu yapıların saldığı ya da soğurduğu ışınım, soğurma ve emisyon spektrumları ile açıklanır (Aygün ve Zengin, 1998). Astronomide spektroskopi yorumlamaları atom ve molekül fiziğinin iyi bilinmesini gerektirir. Atomik yapı hesaplamaları, atomik veya iyonik sistemlerin elektron konfigürasyonlarındaki elektronların geçişleriyle karakterize edilir. Atomların dış etkileşmeler sonucu ortaya çıkan soğurma ve salma spektrumları ile oluşan, spektral çizgi şiddeti yardımıyla seviyeler arasındaki geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve hayat süreleri gibi parametreler belirlenebilir (Güzelçimen, 2007).

Geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi spektroskopik parametrelerinin belirlenmesi astrofizikte, plazma fiziğinde, lazer fiziğinde ve termonükleer füzyon araştırmalarında önemli bir yere sahiptir (Charro ve ark. 2003). Herhangi bir astrofiziksel cismin sahip olduğu elementlerin bolluğu yani bulunma miktarı ancak gözlenen geçişin çizgi şiddeti bilinirse belirlenebilir. Çizgi şiddeti ifadesini laboratuvar ortamında belirlemek zordur. Astrofiziksel olarak herhangi bir geçişin şiddeti, optiksel olarak uygun şartları altında geçişin meydana geldiği atomların sayısı ile ilgilidir. Bu da ortamdan hiç elektron kaybı olmadan atomları tutmak demektir. Bu deneysel olarak mümkün olmadığından yasak geçişlerin deneysel olarak gözlenmesi zordur ve teorik değerlerin güvenilirliğine inanmak gerekir (Charro ve Martin, 2003).

Mg II deki rezonans dubleti birçok astrofiziksel spektrumda önemlidir ve Mg II çizgileri, güneş ve yıldız atmosferinin baskın spektrumuna katkı sağlamaktadır. Bu nedenle bir kez iyonlaşmış magnezyumun enerji seviyeleri arasındaki elektron geçişlerini karakterize eden geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri gibi spektroskopik özelliklerin belirlenmesiyle ilgili literatürde birçok çalışma yapılmaktadır.

Bu tez çalışmasında, “En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori” (WBEPMT) kullanılarak bir kez iyonlaşmış magnezyum (Mg II) için elektrik kuadropol geçiş olasılıkları belirlenmiştir. Ayrıca üç kez iyonlaşmış demir (Fe IV) için manyetik dipol geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Bu teoride geçiş olasılıklarının hesaplanması için gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde, deneysel enerji değerleri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri kullanılmıştır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model

teoride seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri Sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) (Lindgrad ve Neilsen, 1977) ve Numerical Non-Relativistic Hartree-Fock (NRHF) (Gaigalas ve Fischer, 1996) yöntemi kullanılarak belirlenmiş, geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin hesaplanmasında gerekli olan parametrelerin elde edilmesinde kullanılmıştır. Bu parametreler belirlendikten sonra bir kez iyonlaşmış magnezyum (Mg II) ve üç kez iyonlaşmış demir (Fe IV) için hesaplamalar bilgisayar ortamında yapılmıştır. Bulunan sonuçlar literatürden elde edilebilen değerlerle karşılaştırılmış ve sonuçların literatürdeki değerler ile uyumlu olduğu gözlenmiştir. Ayrıca literatürde olmayan bazı yüksek uyarılmış seviyelere ait elektrik kuadropol ve manyetik dipol geçiş olasılığı değerleri belirlenmiştir. Bu tez çalışmasında, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ilk defa yasak geçişlere uygulanmıştır.

Çalışmanın birinci bölümünü oluşturan Giriş bölümünde çalışılan konunun astrofiziksel öneminden bahsedilmiştir. İkinci bölümünü oluşturan Kaynak Araştırması bölümünde tez konusunun uygulandığı atomlarla ilgili literatür bilgilerden, üçüncü bölümünde, Geçiş Tipleri, Seçim Kuralları, Işımalı Geçişler, Yasak Geçişler ve hesaplamalarda kullanılmış olan En zayıf bağlı elektron potansiyel model (WBEPM) teori detaylı olarak ifade edilmiştir. Araştırma sonuçlarının bulunduğu dördüncü bölümde WBEPM teori ile hesaplanan Mg II için elektrik kuadropol geçiş olasılıkları ve Fe IV için manyetik dipol geçiş olasılıkları ait sonuçlar literatürden elde edilen değerlerle karşılaştırılmış ve çizelgeler halinde sunulmuştur. Sonuçlar ve Önerilerin yer aldığı beşinci bölümde ise hesaplamalarda kullanılan metodun kullanılabilirliği tartışılmıştır. Ayrıca elde edilen sonuçların değerlendirilmesi bulunmaktadır.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Alkali - Benzeri Atomlarda Daha Önce Yapılan Hesaplamalar

Yapılan literatür araştırmaları sonucu; elektrik kuadropol geçiş hesaplamalarının alkali-benzeri atomlarda daha çok hesaplandığı ve elde edilen hesaplamaların birbiriyle çok daha uyumlu olduğu görülmüştür. Ali, M. A. (1971), Na ve K dizilerinde $3^2D - 3^2S$ ve $4^2D - 4^2S$ geçişleri için elektrik kuadropol geçiş olasılığı ve deneysel enerji değerlerini LS çiftlenimini varsayarak Hartree-Fock yaklaşımı ile hesapladı. Caves, (1975), Li I de elektrik kuadropol geçiş olasılıklarını ve osilatör şiddetini hesaplamak için etkin potansiyelin özfonksiyonlarını, bağlı-bağlı geçişler ve bağlı-serbest geçişlerin sayısını kullanarak hesapladı. Cheng ve ark. (1979), Li I den F I ya izoelektronik dizilerinin ilk satır atomlarının $2s^n 2p^m$ konfigürasyonlarının E1, E2 ve M1 geçişleri için osilatör şiddetleri, çizgi şiddetleri ve geçiş olasılıklarını Multiconfiguration Dirac-Fock yöntemini kullanarak hesapladılar. Fischer ve Tachiev, (2006), Na benzeri ($Z=11, \dots, 26$) ve Ar-benzeri ($Z=18, \dots, 30$) diziler için hesaplanan seviyeler arasındaki geçişlerin enerji seviyeleri, yaşam süreleri ve geçiş olasılığı sonuçlarını hesapladılar. Bunun için Non-orthogonal (ortogonal olmayan) spline (CI), Multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF) ve ayrıca Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) gibi çeşitli yöntemler kullandılar. Hem izinli (E1) ve hem de bazı yasak geçişlerin (M1, E2, M2, E3) sonuçlarını hesapladılar.

2.2. Mg II İle İlgili Daha Önce Yapılan Hesaplamalar

Bir kez iyonlaşmış magnezyum da geçiş olasılıkları sonuçlarını veren birkaç çalışma bulunmaktadır. Fischer ve Tachiev, (2004), geçişlerin enerji seviyeleri, yaşam süreleri ve geçiş olasılığı sonuçlarını Multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF) metodunu kullanarak hesapladılar. Bu yöntem Breit-Pauli Hamiltonian ile relativistik etkileri içermektedir, sadece yörünge-yörünge etkileşimi ihmal edilmektedir. Hesaplamalarında hem izinli (E1) ve hem de bazı yasak (M1, E2, M2, E3) geçişlerin enerji değerleri, geçiş olasılıkları ve yaşam süreleri sonuçlarını verdiler. Majumder ve ark. (2004), astrofiziksel alanlarda ilgi çeken elektrik kuadropol geçiş olasılıkları ve çizgi şiddetlerini Relativistic Coupled Cluster (CC) metodunu kullanarak hesapladılar. Elde ettikleri hesaplama sonuçlarını literatürdeki mevcut sonuçlar ile karşılaştırdılar. Bir

kez iyonlaşmış magnezyumun spektroskopik öneminin yanında güneş sistemi ve lazer soğutma sistemlerinde kullanımından dolayı yasak geçişlerinin hesaplanmasının doğru bir karar olduğunu belirttiler.

2.3. Fe IV İle İlgili Daha Önce Yapılan Hesaplamalar

Üç kez iyonlaşmış demirin atomik yapı hesaplamaları, karmaşık yapısı nedeniyle şimdiye kadar çok az çalışılmıştır (Kurucz, 1988). Atom fiziğinde Fe IV' ün teorik hesaplamalarında dikkate alınması gereken noktalar vardır. Fe IV hesaplamaları zor olan demir iyonlarından biridir. Bu zorluğun nedenlerinden birisi yarıdan az dolu d kabuğu ve 4l elektronlarından kaynaklanır (Nahar, 2006). Üç kez iyonlaşmış demirde geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri sonuçlarını veren bir kaç çalışma bulunmaktadır. Fischer ve Rubin, (2004) Fe IV'ün $3d^5$ seviyeleri arasındaki elektrik kuadropol ve manyetik dipol geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini ve radyal fonksiyonları sonuçlarını MCHF ile Breit–Pauli metodlarını kullanarak hesapladılar. Garstang, (1958) tarafından daha önce 1958'de yayımlanan E2 ve M1 geçiş olasılıkları sonuçları ile karşılaştırdılar. Mevcut sonuçların birbiriyle uyumlu olduğunu söylediler. Garstang (1958), Fe IV'ün $3d^5$ konfigürasyonunun kuantum mekaniksel parametrelerini ve bu konfigürasyonun enerji seviyelerini hesapladı. Ayrıca $3d^5$ konfigürasyonunun seviyeleri arasındaki manyetik dipol ve elektrik kuadropol geçiş olasılıklarını hesapladı. Nahar (2006), Fe IV' de izinli elektrik dipol (E1) geçişin, yasak elektrik kuadropol (E2), elektrik oktopol (E3) ve manyetik dipol (M1) geçişin geçiş oranlarını (A) ve çizgi şiddetlerini (S) hesapladı. Bu uyarılmış iyon, güçlü elektron korelasyonu arasında oldukça karmaşık etkiler göstermektedir. Toplamda $3s^23p^63d^5$, $3s^23p^63d^44s$, $3s^23p^63d^44p$, $3s^23p^63d^44d$, $3s^23p^63d^34s4p$, $3s^23p^63d^34s4d$ olmak üzere 6 tane konfigürasyona ait yaklaşık 173 000 geçişin E1, E2, E3 ve M1 geçişlerinin ince yapı enerji seviye farklarını ve geçiş olasılıklarını hesapladı. Sonuçları Relativistik Breit-Pauli yaklaşımını ve güncel Superstructure atomik yapı kodunu kullanarak elde etti. Mevcut sonuçlar ile geçiş olasılığı sonuçlarını karşılaştırarak karşılaştırmaların uyumlu olduğunu gözlemledi.

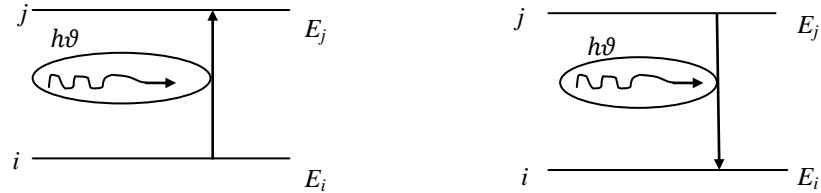
3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1.Geçiş Tipleri

Atomlar elektronik enerji seviyelerine sahiptirler. Atomların bir dış alanla etkileşmesi elektronik enerji seviyelerindeki elektronların atomun diğer enerji seviyeleri arasında geçiş yapmasına sebep olur. 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 ve osilatör şiddeti gibi fiziksel niceliklerle tanımlanırlar.

Bir atomda elektronlar $E_1, E_2, E_3...$ gibi kesikli enerji değerleri ile ifade edilen enerji durumlarında bulunmaktadır. Atomdaki bir elektron, iki enerji düzeyi arasında ν frekanslı bir foton salarak veya soğurarak geçiş yapar.

Atom sisteminde iki seviye arasındaki bu elektron geçişini incelersek birinci durumda E_i alt enerji düzeyinde bulunan bir elektron, E_j üst enerji düzeyine $E_j - E_i$ enerjisine sahip fotonu soğurarak (absorblayarak) çıkar.



Şekil 3.1. İki seviye arasındaki elektron geçişi

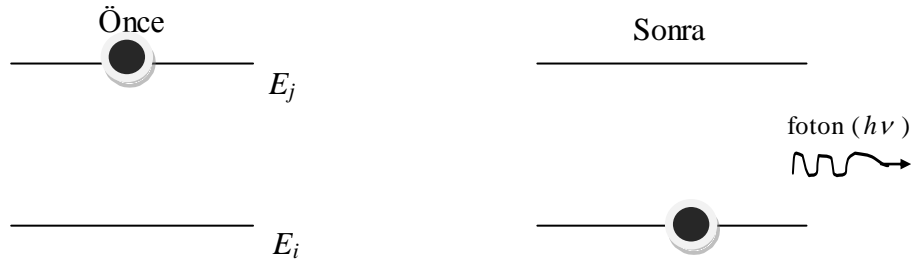
İkinci durumda, E_j üst enerji düzeyinde bulunan bir elektron, bir foton yayarak taban durumuna inebilir ve enerji salınır (yayınlanır). Bu iki seviye arasındaki geçiş şekil 3.1'deki gibi olur. Einstein'a göre j seviyesinden i seviyesine bu salınım olayı kendiliğinden geçişler ve uyarmalı geçişler olmak üzere iki durumda meydana gelir.

3.1.1. Kendiliğinden geçişler

Uyarılmış herhangi bir atom belirli bir t anında E_j enerjili uyarılmış bir j seviyesinden daha düşük E_i enerji seviyesine geçiş yapar. Bu geçiş esnasında elektron, enerjisi

$$h\nu_{ji} = E_j - E_i \quad (3.1)$$

olan bir foton yayarak kendiliğinden ışımalı bir geçiş yapabilir. Burada h ; Planck sabiti, ν_{ji} ; enerjisi E_j olan seviyeden, enerjisi E_i olan seviyeye geçiş yaparken salınan (veya soğurulan) elektromanyetik dalganın frekansıdır. Atomun uyarılmış durumdan denge durumuna geçmesiyle meydana gelen geçişe kendiliğinden geçiş denir. Atomun uyarılmış durumdan düşük enerjili seviyeye kendiliğinden geçişi dışarıdan bir etki olmaksızın ortaya çıkan ve üst seviyede kalma süresine bağlı bir durumdur.



Şekil 3.2. Kendiliğinden Geçiş

Bu geçişe karşılık gelen dalga sayısı,

$$\bar{\nu}_{ji} = \sigma_{ji} = 1/\lambda_{ji} = (E_j - E_i)/hc \quad (\text{cm}^{-1}) \quad (3.2)$$

ile verilir. Birim zaman başına geçiş olasılığı a_{ji} ile gösterilir. Toplam açısal momentumu J_i olan bir atomda M_i manyetik kuantum sayısının $2J_i + 1$ tane olası değerine karşılık E_i enerjisinin

$$g_i = 2J_i + 1 \quad (3.3)$$

tane dejenere kuantum durumu vardır. Einstein kendiliğinden yayma geçiş olasılığı oranı bir j durumundan i enerjili her g_i durumuna geçiş yapan bir atomun birim zaman başına toplam olasılığı olarak tanımlanır (Einstein 1917, Çelik 2005).

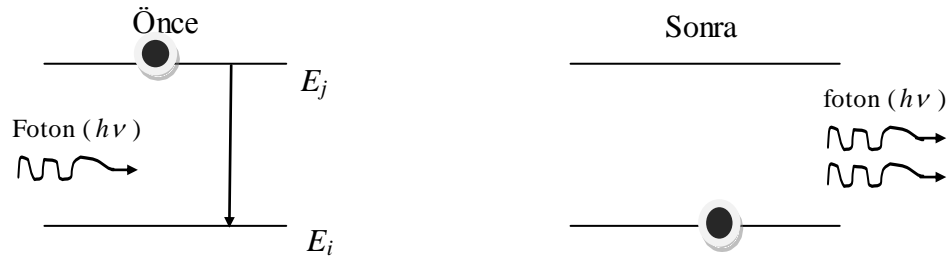
$$A_{ji} = \sum_{M_i} a_{ji} \quad (3.4)$$

Bu ifadeden görüldüğü gibi $j \rightarrow i$ kendiliğinden geçiş olasılığı A_{ji} ile gösterilir. Kendiliğinden geçişlerin Einstein katsayısının birimi sn^{-1} ile ölçülür.

3.1.2. Uyarılmış salınım

Düşük enerji seviyesinden uyarılma yolu ile bir üst enerji seviyesine geçiş olayının benzeri bir şekilde yine uyarılma yolu ile uyarılmış bir E_j üst enerji seviyesinden alt E_i enerji seviyesine elektron $E_j - E_i$ enerjisine sahip bir foton tarafından uyarılır.

Uyarılmış salınım durumunda enerjinin korunumu gereği gelen foton ile aynı enerjide ve momentumun korunumu gereği aynı doğrultu ve fazda, ortama geçiş esnasında bir foton yayılır.



Şekil 3.3. Uyarılmış Salınım

Kendiliğinden meydana gelen salınımın olasılığı, uyarılmış salınımın meydana gelme olasılığından çok daha fazla olduğundan, uyarılmış durumların meydana gelmesi daha az olasılığa sahiptir.

3.1.3. LS Çiftlenimi ve Spektroskopik Terim

Daha çok hafif atomlarda ($Z < 40$) görülen çiftlenim biçimine *Russel-Saunders* çiftlenimi denmektedir. Atom üzerinde uygulanan dış elektrik alan şiddeti Zeeman bölgesinde kaldığı sürece bu çiftlenim şekli bozulmaz, o bakımdan LS çiftlenimine “zayıf alan çiftlenimi” de denir.

Bu çiftlenim türünde atomun elektronlarının yörünge açısal momentumları kendi aralarında, spin açısal momentumları da kendi aralarında, ayrı ayrı birleşirler (Aygün ve Zengin, 1998)

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \vec{l}_3 + \dots + \vec{l}_N \quad (3.5)$$

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 + \vec{s}_3 + \dots + \vec{s}_N \quad (3.6)$$

atomun toplam yörünge ve toplam spin açısal momentumlarını oluştururlar.

Atomun elektronlarına ait J toplam açısal momentum ise,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (3.7)$$

$$|\vec{J}| = [J(J+1)]^{1/2} \hbar \quad (3.8)$$

yörünge kuantum sayılarının ve spin kuantum sayılarının ayrı ayrı toplanmasıyla elde edilir. Bu oluşum LS çiftlenimi olarak adlandırılır. \vec{L} ve \vec{S} vektörleri, kendi \vec{J} bileşkeleri etrafında, \vec{J} vektörü de z eksenini etrafında döner. Ayrıca \vec{L} vektörleri, elektrostatik itmelerden ileri gelen dönme momentleri yüzünden kendi \vec{L} bileşkeleri etrafında \vec{S} vektörleri de kendi \vec{S} bileşkeleri etrafında dönerler. Yani her vektör kendi bileşkesi etrafında, \vec{J} 'de z eksenini (varsa bir \vec{B} dış alanı) etrafında döner. Bu vektörlerin büyüklükleri sabit olup kuantumlaşmıştır (Başar, 2000).

LS çiftleniminde yörüngesel açısal kuantum sayısının $l=0,1,2,3, \dots$ gibi değerlerinin her birini sırasıyla İngilizce adlarının baş harfleri olan S,P,D,F,... gibi harflerle başlayıp, sonra Latin alfabesi ile devam eden harflerle gösterilerek yazılan $^{2s+1}L_J$ gösterimine atomun spektroskopik terimi adı verilir.

l	: 0 , 1 , 2 , 3 , 4,
Elektron kodu	: s , p , d , f , g, ...
Seviye kodu	: S , P , D , F, G,

Şekil 3.4. l sayısal değerlerine göre orbitallerin isimleri

Enerji seviyeleri eğer birden fazla elektron içeriyorsa, atomun ya da iyonun sahip olduğu enerji seviyelerinde ayrılmalar gözlenir. Ayrılan enerji seviyelerinin sayısına o enerji seviyesinin çok katlılığı, çokluğu ya da multiplletliği denir. Çok katlılık $(2s+1)$ ya da $(2l+1)$ 'den küçük olan ifade ile gösterilir. Ayrıca verilen bir (n, l) seviyesinin ince yapı bileşenlerinin çeşitliğine de çokluk (multiplet) denmektedir. Örneğin; $(2s+1)=1,2,3,...$ gibi değerler alıyorsa bunlara karşılık gelen spektroskopik terimler sırasıyla, tekli (singlet), ikili (dublet), üçlü (triplet), dördü (kuadruplet) terimler olarak adlandırılır.

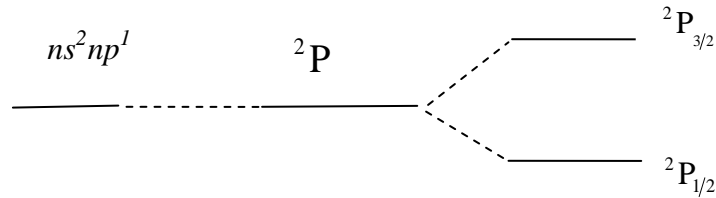
Hund kuralları, bir atomda enerji seviyelerini s, l, j kuantum sayılarına bağlı olarak spektroskopik bakışla nasıl sıralandığını açıklar. Bir atomdaki iki elektronun aynı kuantum sayıları setine (n, l, s, m_l, m_s) sahip olamayacağı ilkesi olan; Pauli dışarlama ilkesini de göz önüne alarak Hund kuralları yazılırsa;

- 1) Terimler spin kuantum sayısı s 'nin değerlerine göre sıralanır. s değeri büyük olan terim daha karardır. Yani $s = \sum_{i=1} s_i$ ifadesi ile s değeri belirlenir.
- 2) Verilen bir s değeri için l değerleri söz konusu olduğunda l 'si büyük olan seviye en karardır. Yani $l = \sum_{i=1} (m_l)_i$ ifadesi ile spektral terimin sembolü belirlenir.
- 3) Verilen bir s ve l çifti için, elektron kabuğu yarıdan az dolu ise j 'si en küçük olan seviye en kararlı, alt kabuk yarıdan fazla dolu ise j değeri en büyük olan seviye en karardır. Yarı dolu kabuklar, yarıdan fazla dolu seviye gibi düşünülerek işlem yapılır. j enerji değerleri $(l+s) \geq j \geq (l-s)$ aralığında değerler alır.

Kapalı kabuklara sahip sistemler için taban enerji seviyesinin spektral gösterimi 1S_0 'dır. Çünkü çok katlılık $(2s+1)=1$ olur. Dolayısıyla en dış kabuğu ns^2, np^6 ve nd^{10} ile biten atomların spektral gösterimi 1S_0 'dır. Örneğin, atom numarası 2 olan Helyum (He) $1s^2$ konfigürasyonuna sahiptir ve spektral gösterimi 1S_0 'dır. Atom numarası 10 olan

Neon (Ne) son elektronu $2p^6$ dır ve spektral gösterimi 1S_0 'dır. Yani spektral terim bulunurken açık ya da tam dolmamış kabuklarda aktif elektronu göz önünde bulundurmamak yerinde olacaktır (Silfvast, 2004).

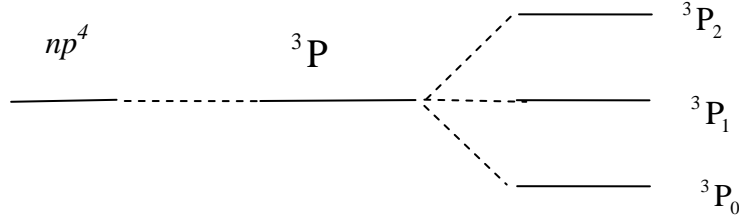
LS çiftlenim gösterimi için ns^2np^1 konfigürasyonunu ele alalım. Hund kuralları kural 1'den son kabukta 1 tane elektron olduğu için $s = \sum_{i=1} s_i = \frac{1}{2}$ olur. Çok katlılık $(2s+1)$ ile belirlendiğinden $s = \frac{1}{2}$ yazılırsa $(2s+1)=2$ doublet yapı olur. Kural 2'den son kabukta $m_l=1$ olduğundan $l = \sum_{i=1} (m_l)_i$ eşitliğine göre $l=1$ spektral dil de P-terimine karşılık gelir. Kural 3'den $l=1$ ve $s = \frac{1}{2}$ olduğundan $(l+s) \geq j \geq (l-s)$ ifadesine göre $\frac{3}{2} \geq j \geq \frac{1}{2} \Rightarrow j = (\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ enerji değerlerini alır. Bu durumda $^{2s+1}L_j$ ifadesine göre 2 tane $^2P_{1/2}, ^2P_{3/2}$ spektral gösterime sahip olur. Bu konfigürasyona sahip atomun taban durum spektral gösterimi ise, Hund kuralları kural 3'den son kabuğu yarıdan az dolu olduğu için j enerji değeri küçük olan alınır bu durumda ns^2np^1 konfigürasyonuna sahip atomun taban durum spektral gösterimi $^2P_{1/2}$ 'dir



Şekil 3.5. ns^2np^1 yerleşimine sahip bir atomda LS çiftlenimine göre oluşan yarılmalar.

ns^2np^4 konfigürasyonunu ele alalım. $s = \sum_{i=1} s_i$ ifadesinden son kabukta 4 elektron olduğu için $s = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) = 1$, $s=1 \Rightarrow (2s+1)$ ifadesinden çok katlılık 3'tür ve triplet yapıya sahiptir. $l = \sum_{i=1} (m_l)_i = (1+0-1+1) = 1 \Rightarrow l=1$ P- terimine karşılık gelir. j enerji değerleri $(l+s) \geq j \geq (l-s)$ ifadesinden $j = 0, 1, 2$ olur. Bu konfigürasyona ait spektral gösterimler $^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$ 'dir. Hund kuralları kural 3'den son kabuğu yarıdan fazla dolu

olduğu için j enerji değeri büyük olan seviye daha karardır, bu durumda ns^2np^1 konfigürasyonuna sahip atomun taban durum spektral gösterimi 3P_2 'dir.



Şekil 3.6. np^4 yerleşimine sahip bir atomda LS çiftlenimine göre oluşan yarılmalar.

Önemli olan bir durum da dolmamış alt kabuk sayısının birden fazla olması halidir. Bu durumlar genellikle yörüngelerin iç-içe girmelerinden oluşur. Bu durumlarda dolmamış kabuklar birlikte değerlendirilir ve sonuçta bileşke s (spin kuantum sayısı) belirlenir. Yani taban durum gösterimini bileşke kuantum sayıları belirler. $_{41}\text{Nb} = [\text{Kr}]5s4d^4$, $_{42}\text{Mo} = [\text{Kr}]5s4d^5$, $_{44}\text{Ru} = [\text{Kr}]5s4d^7$, gibi elektronik konfigürasyonlara sahip atomlarda dolmamış 2 alt kabuk vardır. Bu kabuklar birlikte değerlendirilerek spektral gösterimleri belirlenir.

Örnek olarak $_{41}\text{Nb} = [\text{Kr}]5s4d^4$ atomunun spektral gösterimlerini belirleyelim. Hund kuralları kural 1'den s kabuğunda 1 elektron ve d kabuğunda 4 elektron olduğu için $s = \sum_{i=1}^5 s_i = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) = \frac{5}{2}$ ve çok katlılık $(2s+1)=6$ olur. $l = \sum_{i=1}^5 (m_l)_i = 2+1++0-1+0=2$ $l=2$ D -terimidir. J enerji değeri $(l+s) \geq j \geq (l-s)$ aralığında değerler alacağı için $l=2$ ve $s = \frac{5}{2}$ değerleri için $j = \frac{9}{2}, \frac{7}{2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ olmak üzere 5 tane enerji değerine sahiptir. Bu durumda bu konfigürasyona ait spektral gösterimler $^6D_{9/2}, ^6D_{7/2}, ^6D_{5/2}, ^6D_{3/2}, ^6D_{1/2}$ 'dir. Son kabuğu yarıdan az dolu olduğu için j enerji değeri küçük olan taban durum enerjisidir bu durumda $_{41}\text{Nb} = [\text{Kr}]5s4d^4$ konfigürasyonuna sahip atomun taban durum spektral gösterimi $^6D_{1/2}$ 'dir.

Hund kuralları ve Pauli prensibi ile bir atomda enerji seviyeleri s, l, j kuantum sayılarına bağlı olarak spektroskopik gösterimi ifade edilmiş olur.

3.2. Seçim Kuralları

Elektronik geçişler genellikle “izinli” ve “yasak” olmak üzere iki gruba ayrılır. Ancak bu gruplama görelidir. Genellikle elektrik dipol geçişler (E1) izinli diye adlandırılırken diğer tüm geçişler yasak olarak kabul edilir. Diğer yandan en az bir seçim kuralının ihlali durumunda geçiş “yasak” olarak tanımlanır (Rudzikas,1997). Yukarıda belirtilen geçişlerin daha doğru ve genel sınıflandırılması seçim kuralları ile daha net anlaşılabilir. Seçim kuralları belli bir geçiş tipi için uygun şartlar altında değişmektedir. Genel olarak meydana gelen geçişin olasılığı sıfır olmamalıdır ancak bu daha küçük ve yüksek mertebeden ışımalar veya iki foton süreci gibi ışımalarda meydana gelebilir.

3.2.1. Elektrik dipol geçiş için seçim kuralları

Elektrik dipol geçişler herhangi iki i ve j seviyesi için

$$\langle D \rangle_{ji} = \langle j | D | i \rangle \neq 0 \rightarrow \text{İzinli Geçişler} \quad (3.9)$$

$$\int (\text{çift pariteli}) \neq 0 \quad (3.10)$$

verilen matris elemanlarının sıfırdan farklı olduğu durumda meydana gelir. Çünkü elektrik dipol operatörü farklı pariteye sahiptir.

Toplam açısal momentum kuantum sayısı, yörünge açısal momentum kuantum sayısı, spin açısal momentum kuantum sayısı ve toplam yörünge açısal momentum kuantum sayısı için elektrik dipol seçim kuralları

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (\text{fakat } j_1 = 0 \leftrightarrow j_2 = 0 \text{ izinsiz})$$

$$\Delta l = \pm 1 \quad (3.11)$$

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (\text{ fakat } L_1 = 0 \leftrightarrow L_2 = 0 \text{ izinsiz })$$

olarak verilir.

3.2.2. Elektrik kuadropol geiş için seçim kuralları

Elektrik kuadropol geişler

$$\langle D \rangle_{ji} = \langle j | D | i \rangle = 0 \rightarrow \text{Yasak Geişler} \quad (3.12)$$

$$\int (\text{ tek pariteli }) = 0 \quad (3.13)$$

verilen matris elemanlarının sıfır olduėu durumda meydana gelir. ünkü elektrik dipol operatörü aynı pariteye sahiptir.

Toplam açısai momentum kuantum sayısı, yörünge açısai momentum kuantum sayısı, spin açısai momentum kuantum sayısı ve toplam yörünge açısai momentum kuantum sayısı için elektrik kuadropol seçim kuralları

$$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (\text{ fakat } j_1 = 0 \leftrightarrow j_2 = 0, 1 \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2} \text{ izinsiz })$$

$$\Delta l = 0, \pm 2$$

$$\Delta S = 0 \quad (3.14)$$

$$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (\text{ fakat } L_1 = 0 \leftrightarrow L_2 = 0, 1 \text{ izinsiz })$$

olarak verilir.

Mg II'nin iki farklı seviyesi arasındaki geiş aşığıdaki gibi olsun,



Geişin gerekleştii ilk ve son seviyeler arasındaki kuantum sayılarını ve açısai momentum ifadelerini yazalım,

İlk seviye için açısai momentum kuantum sayıları;

$$l_1 = 2 \quad (\text{ Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısı } d' \text{ dir})$$

$$s_1 = \frac{1}{2} \quad (\text{Açık kabuktaki 1 tane elektronun spin kuantum sayısıdır})$$

$$L_1 = 2 \quad (\text{İlk seviyenin terim sembolü D'dir.})$$

$$S_1 = \frac{1}{2} \quad (\text{Terim sembolünün çok katlılığı } (2s+1)=2 \text{ ifadesinden gelir.})$$

Son seviye için açısal momentum kuantum sayıları;

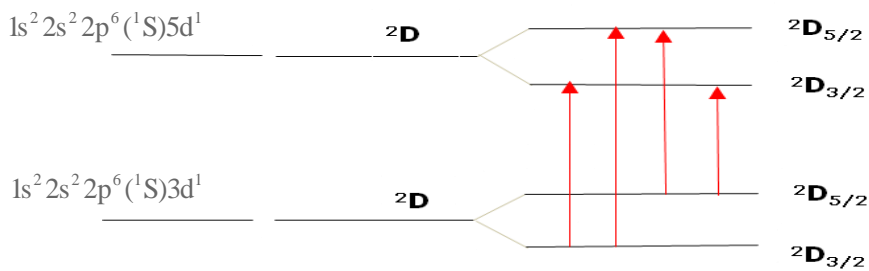
$$l_2 = 2 \quad (\text{Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısı } d' \text{ dir})$$

$$s_2 = \frac{1}{2} \quad (\text{Açık kabuktaki 1 tane elektronun spin kuantum sayısıdır})$$

$$L_2 = 2 \quad (\text{Son seviyenin terim sembolü D'dir.})$$

$$S_2 = \frac{1}{2} \quad (\text{Terim sembolünün çok katlılığı } (2s+1)=2 \text{ ifadesinden gelir.})$$

Sonuç olarak yukarıda Mg II için verilen geçiş de $l_1 = 2$ ve $l_2 = 2$ yörünge açısal momentum kuantum sayıları $\Delta l = 0$ seçim kuralına uygundur. $S_1 = \frac{1}{2}$ ve $S_2 = \frac{1}{2}$ spin kuantum sayıları $\Delta S = 0$ seçim kuralına uygundur. $L_1 = 2$ ve $L_2 = 2$ toplam açısal momentum kuantum sayıları $\Delta L = 0$ seçim kuralına uygundur. Aynı değerlere sahip ilk seviye ile son seviyenin $(\frac{3}{2}, \frac{5}{2})$ enerji değerleri arasında $\Delta J = \frac{5}{2} - \frac{3}{2} = 1$, $\Delta J = \frac{5}{2} - \frac{5}{2} = 0$, $\Delta J = \frac{3}{2} - \frac{5}{2} = -1$, $\Delta J = 0, \mp 1, \mp 2$ seçim kuralına uygun olduğu görülmektedir. Şekil 3.7.'de yukarıdaki Mg II için ince yapı seviyeleri arasındaki geçişler verilmiştir.



Şekil 3.7. $3d^1 ({}^2D_{3/2,5/2})$ seviyesinden $5d^1 ({}^2D_{3/2,5/2})$ seviyesine elektrik kuadropol geçiş.

$\Delta l = +2$ seçim kuralına örnek olarak Mg II'de iki farklı geçiş için ilk ve son seviyeler arasındaki kuantum sayılarını ve açısal momentum ifadelerini yazalım,

$$1s^2 2s^2 2p^6 ({}^1S) 3p^1 ({}^2P_{1/2,3/2}) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 ({}^1S) 4f^1 ({}^2F_{5/2,7/2}) \quad (3.16)$$

İlk seviye için açısal momentum kuantum sayıları;

$l_1=1$ (Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısı p ' dir)

$s_1=\frac{1}{2}$ (Açık kabuktaki 1 tane elektronun spin kuantum sayısıdır)

$L_1=1$ (İlk seviyenin terim sembolü P'dir.)

$S_1=\frac{1}{2}$ (Terim sembolünün çok katlılığı $(2s+1)=2$ ifadesinden gelir.)

Son seviye için açısal momentum kuantum sayıları;

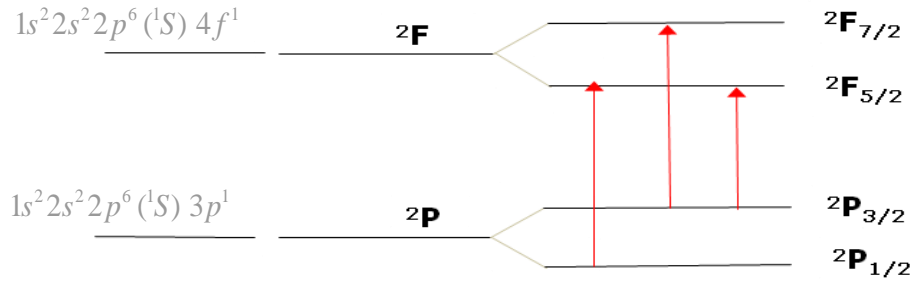
$l_2=3$ (Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısı f ' dir)

$s_2=\frac{1}{2}$ (Açık kabuktaki 1 tane elektronun spin kuantum sayısıdır)

$L_2=3$ (Son seviyenin terim sembolü F' dir.)

$S_2=\frac{1}{2}$ (Terim sembolünün çok katlılığı $(2s+1)=2$ ifadesinden gelir.)

Sonuç olarak yukarıda Mg II için verilen geçiş de $l_1=1$ ve $l_2=3$ yörünge açısal momentum kuantum sayıları $\Delta l = 2$ seçim kuralına uygundur. $S_1=\frac{1}{2}$ ve $S_2=\frac{1}{2}$ spin kuantum sayıları $\Delta S=0$ seçim kuralına uygundur. $L_1=1$ ve $L_2=3$ toplam açısal momentum kuantum sayıları $\Delta L=+2$ seçim kuralına uygundur. İlk seviyenin enerji değerleri $\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$ ve son seviyenin $\left(\frac{5}{2}, \frac{7}{2}\right)$ enerji değerleri arasında $\Delta J = \frac{5}{2} - \frac{3}{2} = 1$, $\Delta J = \frac{5}{2} - \frac{1}{2} = 2$, $\Delta J = \frac{7}{2} - \frac{3}{2} = 2$, örnek geçişlerinin $\Delta J = 0, \mp 1, \mp 2$ seçim kuralına uygun olduğu görülmektedir. Şekil 3.8'de yukarıdaki Mg II için ince yapı seviyeleri arasındaki geçişler verilmiştir.



Şekil 3.8. $3p^1 ({}^2P_{1/2,3/2})$ seviyesinden $4f^1 ({}^2F_{5/2,7/2})$ seviyesine elektrik kuadropol geçişler.

3.2.3. Manyetik dipol geçiş için seçim kuralları

Manyetik dipol geçişler tek ve aynı konfigürasyona sahip seviyeler arasında meydana gelir. Toplam açısal momentum kuantum sayısı, yörünge açısal momentum kuantum sayısı, spin açısal momentum kuantum sayısı ve toplam yörünge açısal momentum kuantum sayısı için manyetik dipol geçiş seçim kuralları

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (\text{fakat } j_1 = 0 \leftrightarrow j_2 = 0 \text{ izinsiz})$$

$$\Delta l = 0$$

$$\Delta S = 0 \tag{3.17}$$

$$\Delta L = 0$$

olarak verilir. Görüldüğü gibi manyetik dipol geçişlerde yörünge açısal momentum kuantum sayısı, spin açısal momentum kuantum sayısı ve toplam yörünge açısal momentum kuantum sayısı için geçişler arasındaki fark 0'dır. Farklı olan sadece enerji seviyeleridir. Seçim kuralları oldukça kısıtlıdır.

Fe IV'ün iki farklı seviyesi arasındaki geçişin ilk ve son seviyeler arasındaki kuantum sayılarını ve açısal momentum ifadelerini seçim kurallarına uygun olarak yazalım;

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 ({}^4D_{1/2,5/2,7/2}) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 ({}^4D_{3/2,5/2}) \tag{3.18}$$

İlk seviye için açısal momentum kuantum sayıları;

$$l_1=2 \quad (\text{Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısı } d' \text{ dir})$$

$$s_1=\frac{5}{2} \quad (\text{Açık kabuktaki 5 tane elektronun spin kuantum sayısıdır})$$

$$L_1=2 \quad (\text{İlk seviyenin terim sembolü } D' \text{ dir.})$$

$$S_1=\frac{3}{2} \quad (\text{Terim sembolünün çok katlılığı } (2s+1)=4 \text{ ifadesinden gelir.})$$

Son seviye için açısal momentum kuantum sayıları;

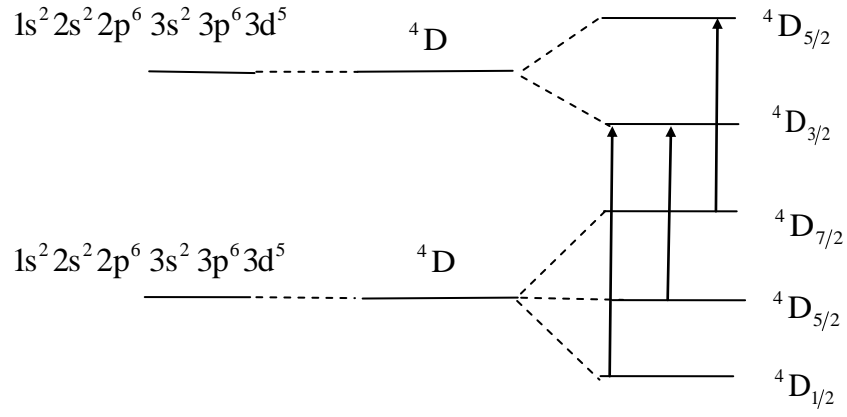
$$l_2=2 \quad (\text{Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısı } d' \text{ dir})$$

$$s_2=\frac{5}{2} \quad (\text{Açık kabuktaki 5 tane elektronun spin kuantum sayısıdır})$$

$$L_2=2 \quad (\text{Son seviyenin terim sembolü } D' \text{ dir.})$$

$$S_2=\frac{3}{2} \quad (\text{Terim sembolünün çok katlılığı } (2s+1)=4 \text{ ifadesinden gelir.})$$

Sonuç olarak yukarıda Fe IV için verilen geçiş de $l_1 = 2$ ve $l_2 = 2$ yörünge açısal momentum kuantum sayıları $\Delta l = 0$ seçim kuralına uygundur. $S_1 = \frac{3}{2}$ ve $S_2 = \frac{3}{2}$ spin kuantum sayıları $\Delta S = 0$ seçim kuralına uygundur. $L_1 = 2$ ve $L_2 = 2$ toplam açısal momentum kuantum sayıları $\Delta L = 0$ seçim kuralına uygundur. İlk seviyenin enerji değerleri $\left(\frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}\right)$ ve son seviyenin $\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)$ enerji değerleri arasında $\Delta J = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} = 1$, $\Delta J = \frac{3}{2} - \frac{5}{2} = -1$, $\Delta J = \frac{7}{2} - \frac{5}{2} = 1$ örnek geçişlerinin $\Delta J = 0, \mp 1$ seçim kuralına uygun olduğu görülmektedir. Şekil 3.9'da yukarıdaki Fe IV için verilen geçişin ince yapı yarıлма şekli verilmiştir.



Şekil 3.9. $3d^5$ (${}^4D_{1/2,5/2,7/2}$) seviyesinden $3d^5$ (${}^4D_{3/2,5/2}$) seviyesine manyetik dipol geçişi.

3.3. Işımalı Geçişler

3.3.1 Einstein katsayıları

Atomik ışımada atomdaki elektrik yüklerinin titreşim veya geçiş hareketinden kaynaklanmaktadır. E_j enerjili uyarılmış bir j seviyesindeki atom daha düşük E_i enerjili bir i seviyesine, enerjisi

$$h\nu_{ij} = E_j - E_i \quad (3.19)$$

olan bir foton yayımlayarak kendiliğinden ışımalı bir geçiş yapabilir. Bu geçişe karşılık gelen dalga sayısı denk.(3.2)'de verilmiştir. Einstein kendiliğinden yayma geçiş olasılığı oranı özel bir J durumunda i enerjili her g_i durumuna geçiş yapan bir atomun birim zaman başına toplam olasılığı olarak tanımlanır (Einstein 1917, Çelik 2005).

$$A_{ji} = \sum_{M_i} a_{ji} \quad (3.20)$$

Buradaki A_{ji} , niceliği M_j 'den bağımsızdır. Bu durum fiziksel olarak geçiş olasılığının koordinat eksenlerinin yöneliminin keyfi seçimine bağlı olmadığını göstermektedir.

j durumunda t zamanında $N_j(t)$ atom varsa j seviyesinden tüm i durumlarına kendiliğinden geçişler için N_j 'nin değişim hızı,

$$\frac{dN_j(t)}{dt} = -A_{ji}N_j(t) \quad (3.21)$$

olarak ifade edilir. Normal uyarma şartları altında j seviyesine ait her durumda atomların sayısı aynıdır ve bu yüzden spektrum çizgisinin şiddeti (birim zamanda yayılan enerji)

$$I(t) = hc \sigma_{ji} g_j A_{ji} N_j(t) \quad (3.22)$$

olarak verilir. Burada,

$$g_j A_{ji} = g_j \sum_{M_i} a_{ji} = \sum_{M_j} \sum_{M_i} a_{ji} \quad (3.23)$$

niceliği kendiliğinden yayılma geçiş olasılığı olarak ifade edilir.

Tüm olası kendiliğinden geçişler için N_j 'nin toplam değişim oranı

$$\frac{dN_j(t)}{dt} = -N_j(t) \sum_i A_{ji} \quad (3.24)$$

olarak verilir. İfadedeki toplam, atomun sahip olduğu E_j 'den daha düşük enerjili tüm durumlar üzerindedir. Eğer diğer uyarılmalar ya da geri uyarılma söz konusu değil ise,

$$N_j(t) = N_j(0) e^{-t/\tau_j} \quad (3.25)$$

yazılır. Burada τ_j

$$\tau_j = \left(\sum_i A_{ji} \right)^{-1} \quad (3.26)$$

şeklinde olup j seviyeli her durumda atomun uyarılmış seviyesinin doğal yaşam süresidir. Eğer bu yaşam süresi sonsuz değilse belirsizlik prensibi yardımıyla j seviyesinin sonlu bir genişliği bulunabilir ve σ_{ji} niceliği spektrum çizgisinin merkezî dalga sayısını göstermektedir.

Geçişler her zaman kendiliğinden olmayabilir. Bir radyasyonla geçiş olma ihtimali de vardır. Bu radyasyon alanı izotropik ve kutuplanmamış olarak gözönüne alınır ve $\partial\sigma$ dalga sayısı bölgesinde birim hacimde $\rho(\sigma) \partial\sigma$ enerjisine sahip olduğu düşünülür.

Eğer $\rho(\sigma)$ spektrum çizgisinin profili üzerinden sabit ise bir i durumunda atomlar tarafından soğurma için,

$$\frac{\partial N_i(t)}{\partial t} = \beta_{ij} N_i(t) \rho(\sigma_{ji}) \quad (3.27)$$

ve j durumu da etkilemeli uyarma ile i seviyesine ışımali geçiş için

$$\frac{\partial N_j(t)}{\partial t} = \beta_{ji} N_j(t) \rho(\sigma_{ji}) \quad (3.28)$$

olarak verilir. Burada radyasyon alanı ve atomların T sıcaklığında termodinamik dengede olduğu göz önüne alınır.

Radyasyon enerji yoğunluğu birim dalga sayısı aralığı başına Planck kanunu ile

$$\rho(\sigma) = \frac{8\pi hc\sigma^3}{e^{hc\sigma/kT} - 1} \quad (3.29)$$

olarak verilir ve farklı kuantum durumlarında atomların sayısı Maxwell-Boltzman kanunlarına göre

$$\frac{N_j}{N_i} = e^{-(E_j - E_i)/KT} = e^{-hc\sigma_{ji}/KT} \quad (3.30)$$

şeklinde yazılır. i seviyeli tüm durumlardan j seviyeli tüm durumlara radyasyon soğurulması yoluyla geçiş oranı, j seviyesinden i seviyesine kendiliğinden ve etkilemeli yayma oranlarının toplamına eşit olmalıdır, yani,

$$g_i B_{ij} N_i \rho(\sigma_{ji}) = g_j A_{ji} N_j + g_j B_{ji} N_j \rho(\sigma_{ji}) \quad (3.31)$$

yazılabilir. Denk. (3.31) kullanılarak,

$$\rho(\sigma_{ji}) = \frac{q_j A_{ji}}{q_i B_{ij} e^{hc\sigma_{ji}/KT} - g_j B_{ji}} \quad (3.32)$$

elde edilir. Bu sonuç Denk (3.32) ile karşılaştırılarak

$$g_i B_{ij} = g_j B_{ji} \quad (3.33)$$

ve

$$g_j A_{ji} = 8\pi h c \sigma_{ji}^3 g_j B_{ji} \quad (3.34)$$

olduğu görülür. Buradaki g niceliği ilk seviyenin istatistiksel ağırlığını göstermektedir. Uyarılmış durumlarda atomların dağılımı Maxwell-Boltzman kanunlarına yaklaşır. Radyasyon alanı ile atomların dengede olduğu spektroskopik kaynaklar çok azdır. Genellikle radyasyon yoğunluğu yeterince küçük olmalıdır ki uyarmalı yayınlama, kendiliğinden yayılma ile karşılaştırıldığında önemsiz olsun. Aynı zamanda soğurmanın fark edilebilmesi için N_i, N_j 'den çok büyük olabilir. Diğer taraftan lazerler de radyasyon yoğunluğu yüksek yansıtıcı aynalarla arttırılır, fakat optiksel pompalama kullanılarak $N_j \gg N_i$ durumunu sağlamak için soğurma küçük tutulur. Uyarmalı yayınlama bu suretle etkin çizgi daralmasına karşılık en önemli etkiyi yapmaktadır (Cowan, 1981).

3.4. Yasak Geçişler

Klasik fizikte ışımalı geçişler denildiğinde elektrik dipol geçişler akla gelmektedir. Ancak astrofiziksel alanlarda daha yüksek mertebeden geçişler olarak bilinen ‘‘yasak geçişler’’ daha yaygın hale gelmektedir. Yasak geçişlere olan ilgi uzun zamandır astrofizikte çalışılıyordu, daha sonra güneş fiziğinde ve bu on yıl içerisinde güneş sistemlerinin X-ışını spektrumlarının çalışmaları ile birlikte literatürde daha fazla çalışılmaya başlanılmıştır. Ayrıca ağır-iyonların çizgisel hızlandırıcılarının yapımı ile ilişkili olarak beam-foil (ışın-yaprak) spektroskopisinin gelişmesiyle birlikte astrofizikte kendini göstermiştir. 1970’de kurulan laboratuvarı ‘‘Yasak geçişler ile atomik bozunma süreci’’ ilk defa saptanmıştır. İlk olarak He-benzeri argonun yaşam süresi hesaplanmıştır (Sucher, 1978).

Astrofiziksel ve spektroskopik deyimde elektronik geçişler, ‘‘izinli’’ ya da ‘‘yasak’’ olarak sınıflandırılır. Elektrik dipol geçişler için $\Delta J=0,\pm 1$ seçim kuralı geçerlidir ve parite deęişimi vardır. Manyetik dipol geçişlerde $\Delta J=0,\pm 1$ seçim kuralı vardır fakat parite deęişimi yoktur. Buna göre seçim kuralları temelde kinematiktir. Sadece dinamik olarak daha yüksek multipoller ile karşılaştırıldığında görecelidir. M2 ve E3 geçişi E1’e göre görelidir. E2 ve M3 geçişi, M1 geçişine göre görelidir. Sonuçta E1 geçişler ‘‘izinli’’, en az bir seçim kuralının ihlali durumunda ki geçişler ‘‘yasak’’ olarak adlandırılır. Yasak geçişler sadece uyarılmış seviyeler arasında deęil, kararlı seviyeler arasında da meydana gelebilir (Fluri, 2009)

Yasak çizgilerin geçiş oranları izinli çizgilere göre çok daha küçüktür. Bu yüzden, laboratuvar deneyleri gözleendiğinde yasaklı çizgilerin, izinli çizgilerden çok daha zayıf olduęu görülmüştür. Fakat çoęu astrofiziksel kaynaklarda özellikle H II bölgeleri (gazlar, nebula, süpernova kalıntıları, yıldızlar arası ortam) iç fiziksel şartları küçük olmasına rağmen, yasak geçişler, uyarma (eksitasyon) ve radyoaktif bozunma durumunda baskındır. Yani yasak çizgiler fiziksel şartlara baęlı olarak izinli çizgilere benzeyebilir.

Alkali-benzeri iyonlarda yasak geçişler, Güneş koronasının spektrumu, plazma spektrumları, astrofiziksel araçlar ve füzyon cihazlarında görülür. Yasak geçişler yüksek iyonize metallerde daha iyi sonuçlar vermektedir. Demir grubuna ait iyonlar (Fe, Co Ni) bu açıdan özellikle önemlidir (Ray, 2002).

3.4.1. Elektrik kuadropol geiş

Atomik enerji seviyeleri arasında meydana gelen izinli geişler [E1] ve yasak geişler [M1, E2, M3...vb] sonucu oluşan spektrumlar bu seviyeler hakkında önemli bilgiler içerir.

İvmeli bir elektrik yükünün birim zamanda saldığı enerji

$$\varepsilon_v = \frac{2}{3c^2} \left| \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right|^2 + \frac{2}{3c^3} \left| \frac{d^2 \boldsymbol{\mu}}{dt^2} \right|^2 + \frac{1}{180c^5} \left| \frac{d^3 \mathbf{Q}}{dt^3} \right|^2 + \dots \quad (3.35)$$

şeklinde ifade edilir. Burada;

$\mathbf{D} \rightarrow$ Elektrik dipol operatörü

$\boldsymbol{\mu} \rightarrow$ Manyetik dipol operatörü

$\mathbf{Q} \rightarrow$ Elektrik kuadropol operatörü

olarak tanımlanır (Kuli-Zade, C.M., 1995).

Elektrik dipol geişlere yasak olan enerji seviyeleri arasında, elektrik dipol geişlerden kat kat daha zayıf olan yüksek mertebeden geişler (elektrik kuadropol, manyetik dipol, manyetik kuadropol... vb) meydana gelir (Kuli-Zade, C.M., 1995).

Elektrik dipol geişler, manyetik dipol geişlerden yaklaşık 10^6 kadar, elektrik kuadropol geişlerden de yaklaşık 10^7 kat daha güçlüdür. Aralarındaki bu ilişki

$$E1 = 10^6 M1 \quad (3.36)$$

$$E1 = 10^7 E2 \quad (3.37)$$

şeklinde verilebilir.

Herhangi iki j ve i seviyesi için elektrik dipol geiş matris elemanı,

$$\langle \mathbf{D} \rangle_{ji} = \langle j | \mathbf{D} | i \rangle \neq 0 \rightarrow \text{İzinli Geişler} \quad (3.38)$$

$$\langle \mathbf{D} \rangle_{ji} = \langle j | \mathbf{D} | i \rangle = 0 \rightarrow \text{Yasak Geişler} \quad (3.39)$$

şeklinde tanımlanır. Burada elektrik dipol geçiş matris elemanı sıfırdan farklıysa Denk. (3.38)'da görüldüğü gibi izinli geçişler meydana gelir, matris elemanı sıfıra eşitse Denk. (3.39)'da olduğu gibi yasak geçişler meydana gelir.

D elektrik dipolün beklenen değeri

$$\langle D \rangle = -e \int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \psi_{nlm}^*(r, \theta, \varphi) r \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) dV \quad (3.40)$$

şeklinde ifade edilir.

Denk.(3.40)'daki ψ_{nlm}^* ve ψ_{nlm} ve fonksiyonlarının paritelerini yörünge açışal momentum sayısı l belirler.

$$\int (\text{çift pariteli}) \neq 0 \quad (3.41)$$

$$\int (\text{tek pariteli}) = 0 \quad (3.42)$$

Denk. (3.41) ve Denk. (3.42)'den görüldüğü gibi elektrik dipol geçişler, elektrik dipol momentin sıfır olmadığı farklı pariteli seviyeler arasında, elektrik kuadropol geçişler ise elektrik dipol momentin sıfır olduğu aynı pariteli seviyeler arasında olur, sonucu çıkarılır.

Geçiş olasılığı, elektrik dipol momentin seviyeleri arasındaki beklenen değere bağlıdır. Bu yüzden seçim kuralları beklenen değerden gidilerek hesaplanır. Bu konu bir sonraki bölümde ayrıntılı olarak anlatılmıştır.

3.4.1.1. Elektrik kuadropol geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti

Geçiş olasılığı, i enerji seviyeli g_i durumlarının herhangi birine bir geçiş yapan j durumundaki bir atomun birim zaman başına toplam geçiş olasılığı olarak tanımlanır ve $S_{jj'}^{(2)}$ çizgi şiddeti ifadesine bağlı olarak elektrik kuadropol geçiş olasılığı

$$A_{jj'}^{(2)} = \frac{32\pi^5 \alpha c a_0^4}{15 g_j (E_{j'} - E_j)^5} S_{jj'}^{(2)} \quad (3.43)$$

şeklinde verilmektedir. Burada $(E_{j'} - E_j)$, \AA birimlerinde geçiş dalga boyudur. $S_{jj'}^{(2)}$ ilgili geçişe karşılık gelen atomik birimlerde ($e^2 a_0^4$) elektrik kuadropol çizgi şiddeti, α ince yapı sabiti, c ışık hızı (cm/sn) ve g_j üst seviyenin istatistiksel ağırlığıdır.

İlgili sabitlerin değerleri yerlerine yazılırsa elektrik kuadropol geçiş olasılığı, elektrik kuadropol çizgi şiddetine bağlı olarak

$$A_{jj'}^{(2)} = \frac{1,11995 \cdot 10^{18}}{g_j (E_{j'} - E_j)^5} S_{jj'}^{(2)} \quad (\text{s}^{-1}) \quad (3.44)$$

şeklinde ifade edilir (Charro ve ark. 2003; Aggarwal ve ark., 2007, 2008).

Osilatör şiddeti astrofizikte sık kullanılan bir niceliktir. Daha çok deneysel olarak ölçülen ve enerji parametresine bağlı olmayan çizgi şiddeti ile orantılı, boyutsuz bir niceliktir. Elektrik kuadropol osilatör şiddeti $S^{(2)}$ elektrik kuadropol çizgi şiddetine bağlı olarak

$$F_{ij}^{(2)} = \frac{167,89}{(E_j - E_i)^3 g_i} S^{(2)} \quad (3.45)$$

şeklinde verilir (Aggarwal ve ark., 2007, 2008).

3.4.1.2. Elektrik kuadropol çizgi şiddeti

Bir çizgi, iki seviye arasındaki bağlantı parçalarının bütünüdür. Pek çok durumda iki düzeye ait iki farklı terimler vardır. Spektroskopide terimler aralarına tire işareti konularak gösterilir, örneğin; $^3P_0-^3P_1$ gibi. Bu terim sembollerinin gösterimi soğurma veya salma durumları ile aynıdır. Çizgi şiddeti, ilgili geçişin matris elemanı olan D operatörünün karesi ile orantılı kuantum mekaniksel bir niceliktir ve özellikle teorik çalışmalarda oldukça önemlidir. Çizgi şiddetinin doğru belirlenmesi; çizgi şiddetine bağlı olan geçiş olasılığı, osilatör şiddeti gibi parametrelerinin de oldukça hassas sonuçlar vermesi demektir (Fluri, 2009).

Düşük γJ seviyesinden bir üst $\gamma' J'$ seviyesine geçiş için çizgi şiddeti

$$S_{\gamma\gamma'} = \left| \langle \gamma J \| D^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \right|^2 \quad (3.46)$$

olarak verilir. Burada J ve J' sırasıyla alt ve üst seviyenin toplam açısal momentum sayıları, γ ve γ' diğer kuantum sayılarını göstermektedir. Çizgi şiddeti ilk ve son durumlara göre simetriktir. Burada D, geçiş operatörüdür. Elektrik dipol geçiş için elektrik dipol operatörü, elektrik kuadropol geçiş için elektrik kuadropol operatörü veya manyetik dipol geçiş için manyetik dipol geçiş operatörü Denk.(3.46)'da yazılarak çizgi şiddeti parametresi elde edilir (Fluri, 2009).

Bir geçiş için yapılması gereken ilk iş iki seviye arasındaki çizgi şiddetinin belirlenmesidir. Elektrik kuadropol geçişler için çizgi şiddeti elektrik kuadropol matris elemanı ile ifade edilir ve matris elemanının karesiyle orantılıdır. Elektrik kuadropol geçiş için çizgi şiddeti, elektrik kuadropol matris elemanının karesiyle orantılıdır. Elektrik kuadropol operatörü,

$$Q^{(\xi)} = e \sum_k r_k^\xi \left(\frac{4\pi}{2\xi + 1} \right)^{1/2} Y_\xi^\mu \quad (3.47)$$

ile verilir. Racah katsayıları C_ξ^μ kullanılarak elektrik kuadropol operatörü

$$Q^{(2)} = e r_k^2 C_m^2 \quad (3.48)$$

elektrik kuadrupol geçiş operatörü

$$Q^{(2)} = e r^2 C_m^{(2)} \quad (3.49)$$

olarak verilir. Condon and Shortley notasyonuna göre elektrik kuadrupol çizgi şiddeti

$$S_{ij,j'}^{(2)} = (\gamma J; \gamma J') = (\gamma J'; \gamma J) = \frac{2}{3} \left| \langle \gamma J \| Q^{(2)} \| \gamma J' \rangle \right|^2 \quad (3.50)$$

şeklinde yazılır. (Charro ve ark., 2003). Burada $\langle \alpha J \| Q^2 \| \alpha' J' \rangle$, indirgenmiş matris elemanıdır ve Denk.(3.51)'deki gibi ifade edilir.

$$\langle \alpha J \| Q^2 \| \alpha' J' \rangle = R_{\text{line}}(SLJ, S'L'J') \langle \alpha L \| Q^2 \| \alpha' L' \rangle \delta_{SS'} \quad (3.51)$$

$\delta_{SS'} \rightarrow$ Kronocker delta fonksiyonu olmak üzere

$$R_{\text{line}}(SLJ, S'L'J') = \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} W(SJL'2, LJ') \quad (3.52)$$

tanımlanır ve $W(SJL'2, LJ')$ niceliği

$$W(SJL'2, LJ') = (-1)^{S+J+L'+2} \begin{Bmatrix} S & J & L \\ 2 & L' & J' \end{Bmatrix} \quad (3.53)$$

şeklinde tanımlanır. Matris elemanının karesi $S_{nljn'l'j'}^{(2)}$ çizgi şiddetine eşit olduğundan (3.52) eşitliği tekrar yazılırsa:

$$R_{\text{line}}(SLJ, S'L'J') = \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \quad (-1)^{S+J+L'+2} \begin{Bmatrix} S & J & L \\ 2L & J' & \end{Bmatrix} \quad (3.54)$$

$$S_{nlj,n'l'j'}^{(2)} = \frac{2}{3} \left| \langle \alpha J \| Q^2 \| \alpha' J' \rangle \right|^2 \quad (3.55)$$

$$S_{nlj,n'l'j'}^{(2)} = \frac{2}{3} (2J+1) (2J'+1) \begin{Bmatrix} S & J & L \\ 2L & J' & \end{Bmatrix}^2 \left| \langle \alpha L \| Q^2 \| \alpha' L' \rangle \right|^2 \quad (3.56)$$

$$\left| \langle \alpha L \| Q^2 \| \alpha' L' \rangle \right|^2 = R_{\text{mult}}(\alpha L, \alpha' L')^2 \langle nL \| Q^2 \| n' L' \rangle^2 \quad (3.57)$$

$$R_{\text{mult}}(\alpha L, \alpha' L')^2 = (2L+1) (2L'+1) W(L_c L l' 2, l L')^2 \quad (3.58)$$

$$W(L_c L l' 2, l L')^2 = (-1)^{L_c+L+l+2} \begin{Bmatrix} L_c & L & l \\ 2 & l' & L' \end{Bmatrix}^2 \quad (3.59)$$

ifadeleri elde edilir. Denk. (3.53) ve Denk. (3.59) eşitliklerine Racah katsayıları veya 6-j katsayıları denir.

$$\langle nL \| Q^2 \| n' L' \rangle^2 = \langle L \| C^{(2)} \| L' \rangle^2 \langle R_{nl} | Q^{(2)} | R_{n'l'} \rangle \quad (3.60)$$

Denk. (3.60)'daki $\langle R_{nl} | Q^{(2)} | R_{n'l'} \rangle$ niceliği, radyal geçiş integralidir ve dalga fonksiyonunun radyal kısmı ile ilgilidir (Charro ve ark., 2003).

$$P_{ll'}^{(2)} = \left| \langle R_{nl} | Q^{(2)} | R_{n'l'} \rangle \right|^2 \quad (3.61)$$

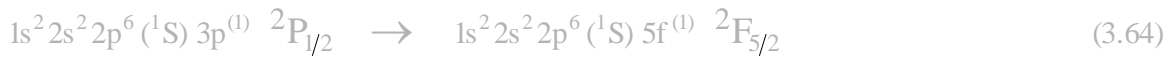
$$\langle L \| C^{(2)} \| L' \rangle^2 = (2L+1) (2L'+1) \begin{pmatrix} L & 2L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (3.62)$$

Denk. (3.62)'deki $\langle L \| C^{(2)} \| L' \rangle^2$ eşitliğine indirgenmiş matris elemanı denir ve 3-j sembolüne bağlı olarak yukarıdaki gibi yazılır. Sonuç olarak $S_{lj,l'j'}^{(2)}$ elektrik kuadropol çizgi şiddetinin en genel ifadesi

$$S_{lj,l'j'}^{(2)} = \frac{2}{3} (2J+1) (2J'+1) \left\{ \begin{matrix} S & J & L \\ 2 & L' & J' \end{matrix} \right\}^2 (2L+1)^2 (2L'+1)^2 \left\{ \begin{matrix} L_c & L & l \\ 2 & l' & L' \end{matrix} \right\}^2 \left(\begin{matrix} L & 2 & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right)^2 P_{ll'}^{(2)} \quad (3.63)$$

olarak yazılır. Atomik veya iyonik sistemlerde çizgi şiddeti çiftlenim türüne göre belirlenir. Denk. (3.63)'den görüldüğü gibi çizgi şiddeti ilk ve son seviyenin açısal momentum kuantum sayılarına ve radyal geçiş integraline bağlıdır.

Mg II'nin $J=1/2$ enerji seviyesinden $J'=5/2$ enerji seviyesine aşağıdaki geçiş için S çizgi şiddeti parametresinin hesaplanışına bakalım;



İlk seviye için açısal momentum kuantum sayıları;

$$l_1=1 \quad (\text{Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısı } p \text{ dir})$$

$$L_c=0 \quad (\text{Konfigürasyondaki dolu kabuğa kadar olan atomun atomik koru})$$

$$L_1=1 \quad (\text{İlk seviyenin terim sembolü } P \text{ dir.})$$

$$S_1=\frac{1}{2} \quad (\text{Terim sembolünün çok katlılığı } (2s+1)=2 \text{ ifadesinden gelir.})$$

$$J = \frac{1}{2}$$

Son seviye için açısal momentum kuantum sayıları;

$$l_2=3 \quad (\text{Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısı } f \text{ dir})$$

$$L_2=3 \quad (\text{Son seviyenin terim sembolü } F \text{ dir.})$$

$S_2 = \frac{1}{2}$ (Terim sembolünün çok katlılığı $(2s+1)=2$ ifadesinden gelir.)

$$J' = \frac{5}{2}$$

olarak verilir. Bu kuantum sayılarından L_c , en zayıf bağlı elektronun dışında kalan en zayıf bağlı olmayan elektronların konfigürasyonunu tanımlayan terim sembolüdür. Bu kuantum sayıları Denk.(3.63)'de yerlerine yazılırsa

$$S_{1,1/2,3,5/2}^{(2)} = \frac{2}{3} \left(2\left(\frac{1}{2}\right)+1\right) \left(2\left(\frac{5}{2}\right)+1\right) \left\{ \frac{1/2}{2} \frac{1/2}{3} \frac{1}{5/2} \right\}^2 (2(1)+1)^2 (2(3)+1)^2$$

$$\left\{ \begin{matrix} 0 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 3 \end{matrix} \right\}^2 \left(\begin{matrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right)^2 P_{3p \rightarrow 5f}^{(2)} \quad (3.65)$$

$S_{1,1/2,3,5/2}^{(2)}$ elektrik kuadropol çizgi şiddeti elde edilir.

3.4.2 . Manyetik dipol geiş

Elektrik kuadropol geişler yksek iyonize olmayan atomlarda daha sık grlmektedir. Ancak iyonizasyon derecesinin artışı ile manyetik dipol geişler baskın hale gelmektedir. rneđin; Fe XX (On dokuz kez iyonlaşmış azot benzeri demir) iin manyetik dipol geişin meydana gelme olasılığı elektrik kuadropol geişin meydana gelme olasılığından yaklaşık 3 kat daha fazladır. Bunun yanı sıra iyonizasyon derecesinin artışı ile elektrik dipol geişin dalgaboyları UV tesi hatta X-ışını spektrumunu tesine taşınmaktadır. Elektrik kuadropol ve manyetik dipol geişlerin izgileri grnr dalgaboyu blgelerinde meydana gelmektedir. Bu yzden yksek ısı plazmaların teşhisinde yasak geişler daha ok yararlıdır. Diđer yandan atom ii etkileşmelerin ayrımında da grelili bilgiler vermektedir (Rudzikas,1997). Elektrik multipol (E1 ve E2) ve manyetik multipol (M1 ve M2) geişleri genellikle Tokamak gibi dşk yođunluklu plazma araştırmalarında, gneş koronalarında, yksek yođunluklu laser retebilen plazmalarda veya beam-foil etkileşimlerinde gzlenir. Nebulalar ve gneş koronalarında gzlenen koronal izgilerin iyonlaşmış demire ait olduđu kanıtlanmıştır. Bu nedenle geiş metalleri olan demir elementleri (Fe, Ni Co) iin manyetik dipol geiş hesaplamaları literatrde fazla sayıdadır. Nebulalar ve koronal izgilerin yasaklanmış geişlere karşılık geldiđi başka bir deyişle yasak izgiler oldukları belirlenmiştir.

Atomik geiş olasılığı, osilatr şiddeti gibi parametrelerinin ve iyonlaşan sistemlerin zelliklerinin belirlenmesi astrofizikte, plazma fiziđinde, lazer fiziđinde ve termonkleer fzyon araştırmalarının hesaplanmasında oldukça önemlidir. Serbest elektron yođunluđuna hassasiyetinden dolayı yasak geişler astrofizikte ve plazma fiziđinde nemli rol oynamaktadır. Gzlenen spektrum izgilerinin ođunluđu elektrik dipol geişlerden kaynaklanmaktadır. Ancak manyetik ve daha yksek mertebeden geişler zel durumlar altında gzlenebilir. Bu geişler esas olarak sođurmada gzlenir ve S izgi şiddeti ve A_{ij} geiş olasılığı nicelikleri ile tanımlanır (Charro ve ark., 2003).

Yasak izgiler iin deneysel geiş oranlarının hesaplanması zordur ve ođu durumlarda iyonizasyon derecesi 2'den daha yksektir. Ayrıca gerekte hala yksek iyonlaşmış atomlar iin osilatr şiddetleri tam olarak llememiştir. Bu nedenle teorik deđerlerin sonuçları daha gvenilirdir (Charro ve ark., 2003).

3.4.2.1. Manyetik dipol geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti

Elektrik kuadropol geçiş de olduğu gibi manyetik dipol geçiş olasılığı A^{M1} parametresi de, çizgi şiddeti S^{M1} ile ilişkilidir ve en genel haliyle

$$A_{ji}^{M1} = \frac{2.6974 \times 10^{13}}{(E_j - E_i)^3 g_j} S^{M1} \quad s^{(-1)} \quad (3.66)$$

şeklinde verilir (Aggarwal ve ark., 2007, 2008; Safronova ve ark. 2006; Charro ve ark., 2003). Burada $(E_j - E_i)$, j . seviyeden i . seviyeye geçiş enerjisidir. S^{M1} ilgili geçişe karşılık gelen manyetik dipol çizgi şiddeti ve g_j üst seviyenin istatistiksel ağırlığıdır.

Manyetik dipol geçiş osilatör şiddeti, S^{M1} çizgi şiddetine direkt bağlıdır ve en genel haliyle

$$f_{ij}^{M1} = \frac{4.044 \times 10^{-3}}{(E_j - E_i) g_i} S^{M1} \quad (3.67)$$

şeklinde verilir (Aggarwal ve ark., 2007, 2008).

3.4.2.2. Manyetik dipol çizgi şiddeti

Manyetik multipol momentin genel ifadesi

$$M_m^{(g)} = \sum_i r_i^{g-1} \sqrt{g(2g-1)} \left\{ \frac{1}{g+1} [C_m^{(g-1)} \times l_i^1]^g + [C_m^{(g-1)}(i) \times s_i^1]_m^g \right\} \quad (3.68)$$

olarak verilir.

Yukarıdaki denklemde $g=1$ olduğu durumda manyetik dipol geçişler (M1) meydana gelir. Bu durumda denk.(3.68)

$$M_m^{(1)} = \sum_i \frac{1}{2} [l_i^1 + 2s_i^1] \quad (3.69)$$

şeklinde yazılabilir.

Burada l^1 ve s^1 orbital ve spin momentum vektör operatörüdür. Bu bağlamda manyetik dipol geçişlerin olasılık formülü radyal geçiş integrali içermemektedir. Bundan dolayı S^{M1} çizgi şiddeti geçişin frekansından bağımsızdır.

Manyetik dipol çizgi şiddeti LSJ çiftlenimi içinde iki durum arasındaki geçiş için

$$S_{n'l_j, n'l'_j}^{(M1)} = \left\langle \gamma J \parallel \mathbf{M}^{(1)} \parallel \gamma' J' \right\rangle^2 \quad (3.70)$$

olarak verilir.

Son durumda genel olarak çizgi şiddeti

$$S^{M1}(nlj, n'l'_j - 1) = \frac{1}{4j} \left(l + \frac{1}{2} + j + 1 \right) \left(l + \frac{1}{2} - j + 1 \right) \left(\frac{l}{2} + j - l \right) \left(j + l - \frac{1}{2} \right) \quad (3.71)$$

olarak verilir (Charro ve ark.,2003).

3.5. En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model Teori

Atomik yapı hesaplamaları Schrödinger denkleminin çözümüyle başlar. Tek elektronlu sistemler dışında Schrödinger denklemi tam olarak çözülemediğinden, çok elektronlu sistemlerde çeşitli yaklaşımlar yapılır. Bu yaklaşım yöntemleri

- Teorik
- Deneysel
- Yarı-deneysel

olmak üzere üç ana başlık altında toplanabilir (Ateş, 2010).

En zayıf bağlı elektron kabulü serbest bir parçacığın iyonlaşma potansiyelinin tanımlanmasıyla başlamaktadır. Bu teori olarak ilk defa Zheng tarafından ortaya atılmıştır (Zheng 1987; Zheng ve ark., 2001-a). Atomik ya da moleküler yapıların uyarılma ve iyonlaşma verileri bu yapılara ait birçok fiziksel özellik hakkında doğru bilgiler vermektedir. Hem uyarma hem de iyonlaşma sürecinde sistemde en aktif elektron sisteme en zayıf bağlı olan elektrondur ve en zayıf bağlı elektron bu süreç içerisinde önemli bir rol oynamaktadır. Atom ya da moleküler bir sistemdeki serbest bir parçacık için iyonlaşma potansiyeli temel seviyede bulunan bir parçacıktan en zayıf bağlı elektronu tamamen koparmak için gerekli olan enerji olarak tanımlanır. Sisteme en zayıf bağlı elektronu koparmak ve iyonlaştırmak en kolaydır.

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisine uygun olarak verilen bir sistemdeki en zayıf bağlı elektron, çekirdek ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar tarafından oluşturulan

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{\beta}{r_i^2} \quad (3.72)$$

İfadesi ile verilen merkezci bir potansiyel alanın etkisinde kalır. Bu potansiyel alan iki kısma ayrılabilir. İlk potansiyel alan Coulomb potansiyelidir. Sisteme en zayıf bağlı elektronun dışındaki diğer elektronların perdelemesi en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisinden dolayı tam değildir. Bunun için 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 (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

Toplam potansiyel en zayıf bağlı elektronun Schrödinger denkleminde kullanılarak,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r_i) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (3.73)$$

ifadesi elde edilir. Bazı dönüşümler yapılarak radyal denklem çözülüp β parametresi,

$$\beta = \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2} \quad (3.74)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda (3.72) toplam potansiyel ifadesinde β yerine yazılırsa

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2r_i^2} \quad (3.75)$$

toplam potansiyel yukarıdaki gibi yazılabilir. Bu potansiyel denk.(3.73)'de yerine yazılırsa

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{-Z^*}{r_i} + \frac{d(d+1) + 2dl}{2r_i^2} \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (3.76)$$

İfadesi elde edilir. 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 kullanılan bir parametredir.

En zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonu radyal ve açısız kısma bağlı olarak,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.77)$$

şeklinde ifade edilir.

En genel haliyle en zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonu

$$\Psi = \left(\frac{2Z^*}{n^*} \right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!} \Gamma(n^* + l + 1) \right]^{-1/2} \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n-l-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (3.78)$$

olarak verilir. (Zheng, 2000-b; Çelik, 2005; Ateş, 2010) Denk.(3.78)'deki $L_{n-l-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right)$ niceliği Laguerre polinomunu, $\Gamma()$ niceliği ise gama fonksiyonunu göstermektedir ve fonksiyondaki n^*, l^* ve ε ,

$$l^* = l + d \quad (3.79)$$

$$n^* = n + d \quad (3.80)$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (3.81)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. (Zheng, 1986, 1987, Zheng ve Xin, 1991, Zheng ve ark. 2000-a,d, 2001-a,b,c). Denk. (3.79) ile tanımlanan l^* etkin yörünge açısal momentum kuantum sayısı, n^* ise en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisini hesaba katan etkin baş kuantum sayısıdır. ε , en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisini göstermektedir. Atomik hacim arttıkça zayıf bağlı olmayan elektronlar çok daha kolay bozunur ve en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisi artar.

Radyal fonksiyon için

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (3.82)$$

normalizasyon şartı kullanılarak ve iki Laguerre polinomunun integral formülünden,

$$\int_0^{\infty} t^{\lambda} e^{-t} L_m^{\mu}(t) L_{m'}^{\mu'}(t) dt = (-1)^{m+m'} \Gamma(\lambda+1) \times \sum_k \binom{\lambda-\mu}{m-k} \binom{\lambda-\mu'}{m'-k} \binom{\lambda+k}{k} \quad (3.83)$$

ifadesi elde edilir.

Farklı kuantum sayılarıyla tanımlı herhangi iki seviye arasındaki geçiş matris elemanını ya da radyal geçiş integralini hesaplamak için;

$$P_{l_f, l_i}^{(k)} = \langle n_i, l_i | r^k | n_f, l_f \rangle = \int_0^{\infty} r^{k+2} R_{n_i, l_i}(r) R_{n_f, l_f}(r) dr \quad (3.84)$$

ifadesi kullanılır. Denk. (3.84)'de $k=1$ yazılırsa ifade elektrik dipol radyal geçiş integrali, $k=2$ yazılırsa elektrik kuadropol radyal geçiş integrali olarak tanımlanır.

Bu durumda elektrik kuadropol radyal geçiş integrali;

$$P_{l_f, l_i}^{(2)} = \langle R_{n_i, l_i} | Q(r)^{(2)} | R_{n_f, l_f} \rangle = \int_0^{\infty} r^4 R_{n_i, l_i}(r) R_{n_f, l_f}(r) dr \quad (3.85)$$

şeklinde verilir.

WBEPM teoriye göre bir elektrik kuadropol geçiş için radyal geçiş integrali

$$\begin{aligned}
\langle R_{n_l} | Q(r)^{(2)} | R_{n_l'} \rangle &= \langle n_i, l_i | r^2 | n_f, l_f \rangle = \int_0^\infty r^4 R_{n_i, l_i}(r) R_{n_f, l_f}(r) dr \\
&= (-1)^{n_f + n_i + l_f + l_i} \left(\frac{2Z_f^*}{n_f} \right)^{l_f} \left(\frac{2Z_i^*}{n_i} \right)^{l_i} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f} - \frac{Z_i^*}{n_i} \right)^{-l_f - l_i - 5} \times \left[\frac{n_f^{*4} \Gamma(n_f^* + l_f^* + 1)}{4Z_f^{*3} (n_f - l_f - 1)!} \right]^{-1/2} \times \\
&\left[\frac{n_i^{*4} \Gamma(n_i^* + l_i^* + 1)}{4Z_i^{*3} (n_i - l_i - 1)!} \right]^{-1/2} \times \sum_{m_1=0}^{n_f - l_f - 1} \sum_{m_2=0}^{n_i - l_i - 1} \frac{(-1)^{m_2}}{m_1! m_2!} \left(\frac{Z_f^*}{n_f} - \frac{Z_i^*}{n_i} \right)^{m_1 + m_2} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f} + \frac{Z_i^*}{n_i} \right)^{-m_1 - m_2} \times \\
&\Gamma(l_f^* + l_i^* + m_1 + m_2 + 5) \times \sum_{m_3=0} \left(\begin{matrix} l_i^* - l_f^* + m_2 + 3 \\ n_f^* - l_f^* - 1 - m_1 - m_3 \end{matrix} \right) \times \left(\begin{matrix} l_f^* - l_i^* + m_1 + 3 \\ n_i^* - l_i^* - 1 - m_2 - m_3 \end{matrix} \right) \times \\
&\left(\begin{matrix} l_i^* + l_f^* + m_1 + m_2 + m_3 + 4 \\ m_3 \end{matrix} \right)
\end{aligned} \tag{3.86}$$

şeklinde verilir (Zheng ve ark. 1999; Zheng ve Wang, 2002; Zheng ve ark. 2004; Çelik 2005, Ateş 2010). Burada $S = \min \{ n_f^* - l_f^* - 1 - m_1, n_i^* - l_i^* - 1 - m_2 \}$ dir ve $k > -l_f^* - l_i^* - 3$ şartını sağlamaktadır. Elde edilen bu ifadede $i = f$ ve $k=2$ yazılarak en zayıf bağlı elektronun konumunun beklenen değer ifadesi,

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^* + 1)}{2Z^*} \tag{3.87}$$

şeklinde bulunur. Denk.(3.81)'de en zayıf bağlı elektronun ε enerjisinin negatifi, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisine eşittir. Yani

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \tag{3.88}$$

olarak tanımlanır. Denk. (3.85)'de verilen radyal geçiş integrali ifadesi kullanılarak atomik sistemlere ait geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve yaşam süreleri gibi fiziksel özellikler hesaplanabilir. Elde edilen matris elemanının hesaplanmasında Z^* , n^* ve l^* parametrelerini belirlemek yeterlidir.

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

4.1. Araştırma Sonuçları

Geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti gibi spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde ilk iş, göz önüne alınan atomik ya da iyonik sistemin baskın olduğu çiftlenim biçimine ve geçiş tipine göre belirlenen S çizgi şiddetinin belirlenmesidir. Bu çalışmada LS çiftleniminin baskın olduğu Mg II'de elektrik kuadropol geçiş olasılıkları ve Fe IV'de manyetik dipol geçiş olasılıkları hesaplanmıştır.

Herhangi iki seviye arasındaki elektrik kuadropol geçiş olasılığı Denk. (4.1) ve manyetik dipol geçiş olasılığı Denk. (4.2)

$$A_{jj'}^{(2)} = \frac{1,11995 \cdot 10^{18}}{g_j (E_j - E_{j'})^5} S_{jj'}^{(2)} \quad (s^{-1}) \quad (4.1)$$

$$A^{M1} = \frac{2.6974 \times 10^{13}}{(E_j - E_{j'})^3 g'} S^{M1} \quad s^{(-1)} \quad (4.2)$$

biçimde tanımlanır. Elektrik kuadropol ve manyetik dipol geçiş olasılığını oluşturan nicelikler Bölüm 3.4.1. ve Bölüm 3.4.2.'de ayrıntılı olarak verilmiştir.

Farklı yöntemlerle de hesaplanabilen

$$P_{l_i l_f}^{(2)} = \langle R_{n_l} | Q(r)^{(2)} | R_{n_l'} \rangle = 1_{>} \langle n_i, l_i | r^2 | n_f, l_f \rangle = 1_{>} \int_0^{\infty} r^4 R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) dr \quad (4.3)$$

elektrik kuadropol radyal geçiş integralinin belirlenmesinde WBEPM teori kullanılmıştır. Bölüm 3.5.'de WBEPM teori ile ilgili ayrıntılı bilgi verilmiştir.

Hesaplamalar için Fortran 77 programlama dilinde real*8 aritmetiğinde bilgisayar programı kullanılmıştır. WBEPM teoride, radyal geçiş integrallerinin hesaplanması için gerekli olan Z^* , n^* , l parametrelerin belirlenmesinde enerji değerleri için NIST' den alınan deneysel enerji değerleri kullanılmıştır (Kramida ve ark.2011). Seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri için Nümerik Coulomb yaklaşımı ve

Numerical Non-Relativistic Hartree-Fock yöntemi kullanılmıştır (Lindgrad ve Nielsen, 1977; Gaigalas ve Fischer, 1996).

4.1.1. Bir kez iyonlaşmış magnezyumda yapılan hesaplamalar

Bu çalışmada en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, elektrik kuadropol geçişler için ilk defa kullanılmıştır. Mg II'nin atom numarası $Z < 30$ olduğu için LS çiftlenimi baskın olarak görülmektedir. Hesaplama prosedüründe ilk olarak temel seviye-uyarılmış seviye ve uyarılmış seviyeler arası geçişlerin seviyeleri belirlenmiş ve bu seviyelerin data dosyası hazırlanmıştır. Bu data dosyasında bir kez iyonlaşmış magnezyumun temel seviye ve uyarılmış seviye konfigürasyonları, bu seviyelerin enerji değerleri için NIST'den alınan deneysel enerji değerleri, bu seviyelerin terim gösterimleri ve açısal momentum kuantum sayıları bulunmaktadır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride, radyal geçiş integrallerinin hesaplanması için gerekli olan Z^* , n^* , l parametrelerin belirlenmesinde, seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri Nümerik Coulomb yaklaşımı ve Numerical Non-Relativistic Hartree-Fock yöntemi kullanılmıştır (Lindgrad ve Nielsen, 1977; Gaigalas ve Fischer, 1996).

Magnezyum atomunun elektronik konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ 'dir. Bir kez iyonlaşmış magnezyum ise sodyum benzeri ($Z=11$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$) konfigürasyona benzemektedir. $1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 nd$ ($n=3, 4, 5$), $1s^2 2s^2 2p^6 3p \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 np$ ($n=3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$), $1s^2 2s^2 2p^6 3p \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 np$ ($n=4, 5, 6, 7, 8, 9$), $1s^2 2s^2 2p^6 3d \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 nd$ ($n=4, 5, 6, 7, 8, 9$), $1s^2 2s^2 2p^6 4s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 nd$ ($n=4, 5, 6, 7, 8, 9$), $1s^2 2s^2 2p^6 4f \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 np$ ($n=5, 6, 7, 8, 9$), $1s^2 2s^2 2p^6 4f \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 np$ ($n=5, 6, 7, 8, 9$), $1s^2 2s^2 2p^6 4p \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 nf$ ($n=4, 5, 6, 7, 8, 9$), $1s^2 2s^2 2p^6 5s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 5d$, seviyeleri arasında görülen geçişler için elektrik kuadropol geçiş olasılıkları hesaplanmıştır ve sonuçlar çizelge 4.1' de verilmiştir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriyi kullanarak elde ettiğimiz sonuçlar, Fischer ve Tachiev, (2004), tarafından MCHF yöntemi kullanılarak ve Majumder ve ark, (2004) tarafından Relativistic Coupled Cluster (CC) metodu kullanılarak hesaplanan elektrik kuadropol geçiş olasılığı sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Yarıçapların beklenen değerlerinin belirlenmesi için kullanılan Numerical Non-Relativistic Hartree-Fock yaklaşımından elde edilen sonuçlar çizelge 4.1.'de, elde edilen sonuçların sayısal değerleri üzerine “ * ” işareti konularak gösterilmiştir. Verilen sonuçların literatürden alınan sonuçlar ile oldukça uyumlu

olduđu gözlemlenmiştir. Bazı yüksek uyarılmış seviyelere ait geçiş olasılığı sonuçları literatürde bulunmadığı için bu geçişlerde karşılaştırma yapılamamıştır.

Çizelge 4.1.Mg II'de elektrik kuadropol geçiş olasılığı sonuçları (s^{-1}) (Çelik, Doğan ve ark.2012)

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Bu çalışma WBEPMT	Fischer ve Tachiev (2004)	Majumder ve ark. (2004)
2s(2)2p(6)3s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	4.94E+03		5.01E+03
2s(2)2p(6)3s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	4.94E+03		5.01E+03
2s(2)2p(6)3s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	7.01E+02		6.58E+02
2s(2)2p(6)3s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	7.01E+02		6.59E+02
2s(2)2p(6)3s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{5/2}$	1.86E+02		4.43E+03
2s(2)2p(6)3s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{3/2}$	1.87E+02		5.01E+03
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2.99E-11*	3.81E-11	3.05E-11
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	3.85E+02*	4.22E+02	3.97E+02
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	7.60E+02*	8.37E+02	
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	3.82E+02*	4.19E+02	3.75E+02
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{3/2}$	1.53E+02		1.44E+02
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{1/2}$	3.05E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{3/2}$	1.53E+02		1.30E+02
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)6p(1)	$^2P_{3/2}$	1.04E+02*		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6p(1)	$^2P_{1/2}$	2.06E+02*		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6p(1)	$^2P_{3/2}$	1.03E+02*		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)7p(1)	$^2P_{3/2}$	5.11E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7p(1)	$^2P_{1/2}$	1.02E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7p(1)	$^2P_{3/2}$	5.10E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)8p(1)	$^2P_{3/2}$	3.33E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)8p(1)	$^2P_{1/2}$	6.64E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)8p(1)	$^2P_{3/2}$	3.32E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)9p(1)	$^2P_{3/2}$	2.29E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9p(1)	$^2P_{1/2}$	4.56E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9p(1)	$^2P_{3/2}$	2.28E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{5/2}$	2.86E+03*		2.62E+03
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{5/2}$	8.12E+02*		7.46E+02
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{7/2}$	3.65E+03*		3.36E+03
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$5f^2F_{5/2}$	1.37E+03		1.17E+03
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$5f^2F_{5/2}$	3.90E+02		3.33E+02
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$5f^2F_{7/2}$	1.76E+03		1.50E+03

Çizelge 4.1. Devamı

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Bu çalışma WBEPMT	Fischer ve Tachiev (2004)	Majumder ve ark. (2004)
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6f(1)	$^2F_{5/2}$	2.36E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6f(1)	$^2F_{7/2}$	1.06E+03		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)7f(1)	$^2F_{5/2}$	5.32E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7f(1)	$^2F_{7/2}$	6.82E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7f(1)	$^2F_{5/2}$	1.52E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)8f(1)	$^2F_{5/2}$	3.59E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)8f(1)	$^2F_{7/2}$	4.61E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)8f(1)	$^2F_{5/2}$	1.02E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)9f(1)	$^2F_{5/2}$	2.54E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9f(1)	$^2F_{5/2}$	7.22E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9f(1)	$^2F_{7/2}$	3.25E+02		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	6.36E+01*	6.30E+01	
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	2.38E+01*	2.36E+01	
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	1.59E+01*		1.55E+00
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	5.56E+01*	5.51E+01	
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{5/2}$	2.98E+01		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{3/2}$	1.12E+02		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{5/2}$	7.46E+00		5.15E+00
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{3/2}$	2.67E+01		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{5/2}$	1.63E+01		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{3/2}$	6.11E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{5/2}$	4.07E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{3/2}$	1.43E+01		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{5/2}$	9.90E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{3/2}$	3.71E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{5/2}$	2.47E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{3/2}$	8.66E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{5/2}$	6.48E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{3/2}$	2.43E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{5/2}$	1.62E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{3/2}$	5.67E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{5/2}$	4.49E+00		

Çizelge 4.1. Devamı

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Bu çalışma WBEPMT	Fischer ve Tachiev (2004)	Majumder ve ark. (2004)
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{3/2}$	1.68E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{5/2}$	1.12E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{3/2}$	3.93E+00		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6f(1)	$^2F_{5/2}$	2.36E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6f(1)	$^2F_{7/2}$	1.06E+03		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)7f(1)	$^2F_{5/2}$	5.32E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7f(1)	$^2F_{7/2}$	6.82E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7f(1)	$^2F_{5/2}$	1.52E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)8f(1)	$^2F_{5/2}$	3.59E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)8f(1)	$^2F_{7/2}$	4.61E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)8f(1)	$^2F_{5/2}$	1.02E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)9f(1)	$^2F_{5/2}$	2.54E+02		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9f(1)	$^2F_{5/2}$	7.22E+01		
2s(2)2p(6)3p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9f(1)	$^2F_{7/2}$	3.25E+02		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	6.36E+01*	6.30E+01	
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	2.38E+01*	2.36E+01	
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	1.59E+01*		1.55E+00
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	5.56E+01*	5.51E+01	
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{5/2}$	2.98E+01		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{3/2}$	1.12E+02		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{5/2}$	7.46E+00		5.15E+00
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{3/2}$	2.67E+01		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{5/2}$	1.63E+01		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{3/2}$	6.11E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{5/2}$	4.07E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{3/2}$	1.43E+01		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{5/2}$	9.90E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{3/2}$	3.71E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{5/2}$	2.47E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{3/2}$	8.66E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{5/2}$	6.48E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{3/2}$	2.43E+00		

Çizelge 4.1. Devamı

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Bu çalışma WBEPMT	Fischer ve Tachiev (2004)	Majumder ve ark. (2004)
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{5/2}$	1.62E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{3/2}$	5.67E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{5/2}$	4.49E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{3/2}$	1.68E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{5/2}$	1.12E+00		
2s(2)2p(6)3d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{3/2}$	3.93E+00		
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	3.00E+02		2.93E+02
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	3.00E+02		2.93E+02
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{5/2}$	1.02E+02*		1.25E+02
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{3/2}$	1.02E+02*		1.25E+02
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{5/2}$	4.06E+01		
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{3/2}$	4.06E+01		
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{5/2}$	2.08E+01		
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{3/2}$	2.08E+01		
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{5/2}$	1.21E+01		
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)8d(1)	$^2D_{3/2}$	1.21E+01		
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{5/2}$	7.69E+00		
2s(2)2p(6)4s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)9d(1)	$^2D_{3/2}$	7.69E+00		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{3/2}$	4.31E+01		4.44E+01
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{1/2}$	8.63E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{3/2}$	4.31E+01		4.14E+01
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)6p(1)	$^2P_{3/2}$	2.54E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6p(1)	$^2P_{1/2}$	5.07E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6p(1)	$^2P_{3/2}$	2.54E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)7p(1)	$^2P_{3/2}$	1.59E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7p(1)	$^2P_{1/2}$	3.17E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7p(1)	$^2P_{3/2}$	1.59E+01		

Çizelge 4.1. Devamı

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Bu çalışma WBEPMT	Fischer ve Tachiev (2004)	Majumder ve ark. (2004)
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)8p(1)	$^2P_{3/2}$	1.05E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)8p(1)	$^2P_{1/2}$	2.10E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)9p(1)	$^2P_{3/2}$	7.33E+00		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9p(1)	$^2P_{1/2}$	1.46E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9p(1)	$^2P_{3/2}$	7.31E+00		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{5/2}$	4.66E+01		4.73E+01
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{5/2}$	1.32E+01		1.34E+01
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{7/2}$	5.94E+01		6.02E+01
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2F_{5/2}$	4.80E+01		4.81E+01
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2F_{5/2}$	1.38E+01		1.37E+01
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2F_{7/2}$	6.21E+01		6.18E+01
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)6f(1)	$^2F_{5/2}$	6.52E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6f(1)	$^2F_{5/2}$	1.87E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)6f(1)	$^2F_{7/2}$	8.41E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)7f(1)	$^2F_{5/2}$	5.52E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7f(1)	$^2F_{7/2}$	7.11E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)7f(1)	$^2F_{5/2}$	1.58E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)8f(1)	$^2F_{5/2}$	4.28E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)8f(1)	$^2F_{7/2}$	5.51E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)8f(1)	$^2F_{5/2}$	1.23E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)9f(1)	$^2F_{5/2}$	3.27E+01		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9f(1)	$^2F_{5/2}$	9.36E+00		
2s(2)2p(6)4p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)9f(1)	$^2F_{7/2}$	4.21E+01		
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{5/2}$	1.43E+01		
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{5/2}$	3.57E+00*		3.39E+00
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{3/2}$	5.36E+00*		
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{3/2}$	1.25E+01*		
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{5/2}$	8.47E+00		
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{3/2}$	3.18E+00		
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)6d(1)	$^2D_{5/2}$	2.12E+00		

Çizelge 4.1. Devam

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Bu çalışma WBEPMT	Fischer ve Tachiev. (2004)	Majumder ve ark. (2004)
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{5/2}$	5.30E+00		
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{5/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{3/2}$	1.99E+00		
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{5/2}$	1.32E+00		
2s(2)2p(6)4d(1)	$^2D_{3/2}$	2s(2)2p(6)7d(1)	$^2D_{3/2}$	4.64E+00		
2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{5/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2F_{5/2}$	8.42E+01		
2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{5/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2F_{7/2}$	1.05E+00*		2.56E+00
2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{7/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2F_{5/2}$	1.40E+00		
2s(2)2p(6)4f(1)	$^2F_{7/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2F_{7/2}$	1.47E+00		
2s(2)2p(6)5s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{5/2}$	4.32E+01*		4.22E+01
2s(2)2p(6)5s(1)	$^2S_{1/2}$	2s(2)2p(6)5d(1)	$^2D_{3/2}$	4.32E+01*		4.22E+01
2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{3/2}$	4.70E-13*		5.35E-13
2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{1/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2P_{3/2}$	1.02E+01*		1.16E+03
2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2F_{5/2}$	2.88E+00*		2.86E+00
2s(2)2p(6)5p(1)	$^2P_{3/2}$	2s(2)2p(6)5f(1)	$^2F_{7/2}$	1.30E+01*		1.29E+01

4.1.2. Üç kez iyonlaşmış demirde yapılan hesaplamalar

Demir atomunun atom numarası 26'dır ve elektronik konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ 'dir. Üç kez iyonlaşmış demir ise vanadyum benzeri ($Z=23$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 = [Mg]3p(6)3d(5)$) konfigürasyona benzemektedir. Çalışmamızın bu kısmında üç kez iyonlaşmış demir (Fe IV) için manyetik dipol geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. $[Mg]3p(6)3d(5) \rightarrow [Mg]3p(6)3d(5)$ seviyeleri arasında görülen geçişler için manyetik dipol geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Hesaplamalarda seviyelere ait enerji değerleri NIST'den alınmıştır (Kramida ve ark.2011). Hesaplanan manyetik dipol geçiş olasılığı sonuçları çizelge 4.2.'de verilmiştir. Elde ettiğimiz sonuçlar, Fischer ve Rubin, (2004) tarafından Multiconfiguration Hartree–Fock (MCHF) yöntemi kullanılarak ve Garstang (1958) tarafından RR Telescopii yöntemi kullanılarak ölçülen teorik sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Çizelge 4.2.'de verilen sonuçların literatürden alınan sonuçlar ile uyumlu olduğu gözlemlenmiştir. Bazı yüksek uyarılmış seviyelere ait geçiş olasılığı sonuçları literatürde bulunmadığı için bu geçişlerde karşılaştırma yapılamamıştır. Hesaplanan sonuçlar çizelge 4.3.'de verilmiştir.

Çizelge 4.2. Fe IV’de manyetik dipol geçiş olasılığı sonuçları (s⁻¹)

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji Değeri (cm ⁻¹)	Geçiş Olasılığı	Fischer ve Rubin (2004)	Garstang (1958)
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ G _{7/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ G _{9/2}	6550.032	0.129E-07	0.129E-07	3.5E-07
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ G _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ G _{7/2}	4004.00	0.278E-05	0.277E-05	1.1E-06
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ G _{11/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ G _{9/2}	6152.02	0.822E-05	0.821E-05	2.6E-08
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ P _{3/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ P _{1/2}	3677.32	0.177E-04	0.224E-05	1.1E-05
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ P _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ P _{3/2}	1327.81	0.122E-04	0.590E-04	3.7E-05
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ D _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ D _{3/2}	4660.54	0.558E-09	0.016E-09	1.3E-04
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ D _{1/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ D _{3/2}	5470.01	0.289E-05	0.065E-05	1.0E-05
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ D _{7/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ D _{5/2}	1897.3	0.011E-05	0.201E-05	1.3E-07
[Mg]3p(6)3d(5)	² I _{11/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² I _{13/2}	82.97.8	0.209E-07	0.704E-07	5.9E-06
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	5821.7	0.214E-02	0.244E-02	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	2393.21	2.40E-05	0.90E-05	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	2398.15	0.150E-05	4.040E-05	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	2451..43	0.239E-05	0.048E-05	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	2456.36	0.505E-04	7.91E-04	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	5805.41	0.212E-04	0.381E-04	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	5809.74	0.127E-03	0.153E-03	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	5863.63	0.687E-03	0.605E-03	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	5867.96	0.327E-04	0.001E-04	

Çizelge 4.2. Devamı

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji Değeri (cm ⁻¹)	Geçiş Olasılığı	Fischer ve Rubin (2004)	Garstang (1958)
[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{7/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{5/2}	8371.06	0.710E-02	0.705E-02	
[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{5/2}	8897.17	0.126E-05	0.077E-05	
[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{7/2}	9025.46	0.867E-07	0.867E-07	
[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{7/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{7/2}	9734.27	0.531E-05	0.972E-05	
[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{7/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{5/2}	9862.56	0.143E-02	4.14E-02	
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ F _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ F _{3/2}	3900.00	0.314E-10	0.032E-10	4.6E-06
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ F _{9/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ F _{7/2}	1007.3	0.140E-04	0.303E-04	1.4E-06
[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ F _{7/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	⁴ F _{5/2}	1816.2	0.167E-03	0.283E-03	5.8E-05
[Mg]3p(6)3d(5)	² H _{9/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² H _{11/2}	3279.1	0.367E-03	0.353E-03	9.4E-04
[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{7/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{9/2}	3226.8	0.368E-03	0.363E-03	
[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{9/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{9/2}	2515.19	0.131E-03	0.170E-03	
[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{9/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{7/2}	2529.90	0.299E-05	0.277E-05	
[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{7/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{9/2}	2548.46	0.198E-05	0.257E-05	
[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{7/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² G _{7/2}	2553.17	0.555E-04	2.570E-04	
[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² F _{7/2}	1282.81	0.108E-04	0.244E-04	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	4934.0	0.524E-06	1.29E-06	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	3407.26	0.134E-03	0.067E-06	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	3411.59	0.643E-05	0.078E-03	
[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{3/2}	[Mg]3p(6)3d(5)	² D _{5/2}	3412.19	0.429E-05	0.0532E-03	

Çizelge 4.3. Fe IV’de uyarılmış seviyeler arası manyetik dipol geçiş olasılığı sonuçları (s⁻¹)

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji Değeri (cm ⁻¹)	Geçiş Olasılığı
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{1/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{3/2}	1629.6	6.68E-11
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{1/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{5/2}	4253.8	8.10E-09
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{3/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{5/2}	2624.2	2.07E-10
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{3/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{7/2}	6127.3	6.48E-08
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{5/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{7/2}	3503.09	4.41E-10
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{5/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{9/2}	7761.2	2.96E-07
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{7/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁶ D _{9/2}	4258.20	7.12E-10
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{1/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{3/2}	2484.8	6.24E-10
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{1/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{5/2}	6380.19	6.98E-08
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{3/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{5/2}	3895.3	1.70E-09
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{3/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{7/2}	8947.10	4.89E-07
[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{5/2}	[Ar]3d(4)(⁵ D)4s(1)	⁴ D _{7/2}	5059.6	3.13E-09
[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	⁴ P _{1/2}	[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	⁴ P _{3/2}	8231.6	3.08E-07
[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	⁴ P _{1/2}	[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	⁴ P _{5/2}	2093.1	4.41E-07
[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	⁴ P _{3/2}	[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	⁴ P _{5/2}	1270.1	7.17E-07

Çizelge 4.3.Devamı

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji Değeri (cm ⁻¹)	Geçiş Olasılığı
[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{7/2}	[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{9/2}	1401.1	3.81E-04
[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{7/2}	[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{11/2}	3268.2	4.36E-09
[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{9/2}	[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{11/2}	1867.09	1.08E-11
[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{9/2}	[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{13/2}	4053.3	1.31E-11
[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{11/2}	[Ar]3d(4)(³ H)4s(1)	⁴ H _{13/2}	2186.2	1.60E-11
[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{5/2}	[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{7/2}	2716.9	1.84E-10
[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{5/2}	[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{7/2}	4892.1	3.05E-08
[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{7/2}	[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{9/2}	2175.09	6.76E-08
[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{7/2}	[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{11/2}	3324.9	0.539E-10
[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{9/2}	[Ar]3d(4)(³ G)4s(1)	⁴ G _{11/2}	1149.8	5.47E-08
[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	² P _{1/2}	[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	² P _{3/2}	2789.53	3.89E-07
[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	² P _{3/2}	[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	² P _{1/2}	2754.52	3.93E-07
[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	² P _{3/2}	[Ar]3d(4)(³ P)4s(1)	² P _{3/2}	2833.46	3.91E-07
[Ar]3d(4)(³ F)4s(1)	² F _{5/2}	[Ar]3d(4)(³ F)4s(1)	² F _{5/2}	2928.58	5.91E-07
[Ar]3d(4)(³ F)4s(1)	² F _{7/2}	[Ar]3d(4)(³ F)4s(1)	² F _{5/2}	2929.72	1.14E-07
[Ar]3d(4)(³ F)4s(1)	² F _{7/2}	[Ar]3d(4)(³ F)4s(1)	² F _{7/2}	2837.43	4.49E-07

4.2. Tartışma

Geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri gibi spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde ilk yapılması gereken, hesaplanan seviyeler arasındaki çizgi şiddetinin belirlenmesidir. Çizgi şiddeti, baskın olan çiftlenim türüne göre hesaplanır. Bu çalışmada baskın olarak LS çiftlenimine sahip magnezyum ve demir elementi için hesaplamalar yapılmıştır. Çizgi şiddetini hesaplamak için ise radyal geçiş integrallerinin belirlenmesi gerekir. Elektrik kuadropol geçiş çizgi şiddeti radyal geçiş integraline bağlıdır. Radyal geçiş integralleri farklı yöntemlerle hesaplanabilmektedir. Bu çalışmada radyal geçiş integrallerinin hesaplanmasında en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak bir kez iyonlaşmış magnezyumda elektrik kuadropol geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Ayrıca üç kez iyonlaşmış demirde manyetik dipol geçiş olasılıkları belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar literatürdeki teorik yöntemlerle elde edilen sonuçlarla karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülmüştür. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori yarı deneysel bir yöntemdir ve hesaplama süreci karmaşık olmayıp çok zaman almamaktadır. Bu yöntem kullanılarak ince yapı seviyeleri arasındaki geçişleri ve yüksek uyarılmış seviyeleri incelemek karmaşık yöntemler kadar zor değildir. Bu yöntemle radyal geçiş integrallerinin belirlenmesi için etkin yük Z^* , etkin baş kuantum sayısı n^* ve etkin yörünge açıl momentum kuantum sayısı l^* parametrelerini belirlemek yeterlidir. Bu parametrelerin belirlenmesinde atomik seviyelerin deneysel enerji değerleri ve her bir seviyedeki yarıçap için beklenen değer sonuçları kullanılmaktadır.

Hesaplama kullandığımız program ile LS çiftleniminin baskın olduğu atomik ve iyonik sistemlerde geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri gibi parametrelerin radyal geçiş integrallerinin belirlenmesinde en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi için gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde beklenen değer hesaplamaları için Sayısal Coulomb Yaklaşımı (Lingrad ve Neilsen, 1977) ve Numerical Non-Relativistic Hartree-Fock yöntemi (Gaigalas ve Fischer, 1996) ile Multikonfigürasyonel süreci kullanan HF96 paket programı kullanılmıştır.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

5.1. Sonuçlar

Mg II deki rezonans dubleti birçok astrofiziksel spektrumda önemlidir ve Mg II çizgileri güneş ve yıldız atmosferinin baskın spektrumuna katkı sağlamaktadır. Bu nedenle bir kez iyonlaşmış magnezyumun enerji seviyeleri arasındaki elektron geçişlerini karakterize eden geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri gibi spektroskopik özelliklerin belirlenmesiyle ilgili literatürde birçok çalışma yapılmaktadır. Ancak özellikle yüksek uyarılmış seviyelere ait geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde literatürde önemli eksiklikler bulunmaktadır. Saf teorik yöntemler tarafından verilen sonuçların birçoğu yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçişlerden ziyade düşük uyarılmış seviyeler arasındaki geçişleri içermektedir. Bu çalışmada en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ilk kez yasak geçişlere uygulanarak karmaşık bir hesaplama sürecine girmeden elektrik kuadropol geçiş olasılıkları belirlenmiştir. İlk kez yasak geçişlere uygulanan en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile elde edilen sonuçların, literatürle uyumlu olması atom fiziğinde bu yöntemin uygulama alanlarının genişleyebileceğini göstermektedir.

5.2. Öneriler

Bu tez çalışmasında kullanılan en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisinin spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde karmaşık olmaması ve hesaplama sürecinin fazla zaman almaması özellikleri nedeniyle kullanışlı olduğu söylenilebilir. Yasak geçişlerin belirlenmesinde deneysel çalışmaların çok nadir olması teorik çalışmalar üzerindeki önemi arttırmaktadır. Bu tez çalışmasından elde edilen sonuçların literatürle uyumlu olması en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisinin yasak geçişler için kullanılabilirliğinin bir göstergesidir. Yasak geçişlerle ilgili olarak daha fazla hesaplama ve karşılaştırmanın yapılması bu yöntemin yasak geçişler için geçerliliği konusunda daha somut bilgiler sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

- Aggarwal, K.M., Tayal, V., Gupta, G.P., Keenan, F.P., 2007, Energy levels and radiative rates for transitions in Mg-like iron, cobalt and nickel, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 93, 615-710.
- Aggarwal, K.M., Keenan, F.P., Lawson, K.D., 2008, Energy levels and radiative rates for transitions in B-like to F-like Kr ions (Kr XXXII-XXVIII), *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 94, 323-559.
- Ali, M.A., 1971, Electric quadrupole transition probability in sodium and potassium sequences, *J. Quant. Spect. Radiat. Tran*, 11 (11), 1611-1619.
- Apaydın, F., 2004, Kuantum fiziği, *Hacettepe Üniv. Yayınları*, Ankara.
- Ateş, Ş., 2010, Çok elektronlu sistemlerde atomik yapı hesaplamaları, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.
- Aygün, E., ve Zengin, M., 1998, Kuantum fiziği, *Ankara Üniversitesi 4. Baskı Bilim Yayınları*, Ankara.
- Başar, B., 2000, Fizikçiler ve Kimyacılar için kuantum kimyası, *Birsen Yayınevi*, İstanbul.
- Caves, T.C., 1975, Electric quadrupole transitions in neutral Li, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 15 (6), 439-444.
- Charro, E., Martin, I., 2003, Intensities of E2 spectral lines In the astrophysically important ion Mg II, *Astrophysical Journal*, 585,1191-1196.
- Charro, E., Lopez-Ferrero, S. and Martin, I., 2003, Trends in E2 and M1 transition rates between $3p_{3/2}$ and $3p_{1/2}$ levels in $3s^23p^k$, *Astronomy and Astrophysics*, 406, 741-749.
- Cheng, K. T., Kim, Y-K., Desclaux, J. P., 1979, Electric dipole, quadrupole and magnetic dipole transition probabilities of ions isoelectronic to the first-row atoms, Li through F, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 24 (2), 111-189.
- Cowan, R. D., 1981, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press Berkeley, 412-420.
- Çelik, G., 2005, Çok elektronlu atomlarda elektronik geçişler, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.
- Çelik, G., Doğan, D., Ateş, Ş., and Taşer, M., 2012, Electric quadrupole transition probabilities for singly ionized magnesium, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 113, 1691-1605.

- Çelik, G., Doğan, D., Ateş, Ş., and Taşer, M., 2012, Transition probabilities and radiative lifetimes of levels in F I, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 98, 566-588.
- Einstein, A. 1917, *Physics.Z.*, 121.
- Fischer, C.F., and Rubin, R.H., 2004, Breit–Pauli energy levels, transition probabilities and lifetimes for $3d^5$ levels in Fe IV of astrophysical interest, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 355, 461–474.
- Fischer, C.F., Tachiev, G., 2004, Breit–Pauli Energy Levels, Lifetimes, And Transition Probabilities For The Beryllium-Like To Neon-Like Sequences, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 87 (1), 1-184.
- Fischer, C.F., Tachiev, G., 2006, Relativistic energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the sodium-like to argon-like sequences, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 92 (5), 607-812.
- Fluri, D., 2009, Atomic Spectroscopy, [online], Molecular Universe, ETH Zurich, <http://www.astro.phys.ethz.ch/.../fluri/.../MolecUniv/...>
- Gaigalas, G. and Fischer, C.F. 1996, *Extension of The HF Program To Partially Filled F-Subshells* Computer Physics Communications, 98, 1-2, 255-264.
- Garstang, R. H., 1958, Energy Levels and Transition Probabilities of Fe IV, *MNRAS*, 118, 572
- Güzelçimen, F., 2007, Manganiz I Elementinin Tek Konfigürasyonlarındaki İnce ve Aşırı İnce Yapılarının İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, İstanbul, 1-10.
- Kramida, A., Ralchenko, Yu., Reader, J. and NIST ASD Team, (2011), *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.0), URL: <http://physics.nist.gov/asd>, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- Kuli-Zade C.M., Tektunalı, H.G., 1995, Atom Spektroskopisinin Temelleri, *İstanbul Üniversitesi Yayınları*, İstanbul.
- Kurucz, R. L., 1988, *Extreme ultraviolet astronomy*, New York, 168.
- 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.
- Majumder, S., Gopakumar, G., Chaudhuri, R. K., Das, B.P., Merlitz, H., 2004, Theoretical studies of electric quadrupole transition probabilities in Mg II, *Eur.Phys.J.D* 28, 3-9.

- Nahar S. N., 2006, Radiative E1, E2, E3, and M1 transition probabilities for Fe IV*, *Astronomy and Astrophysics*, 448, 779–785.
- Ray, H., 2002, Studies on the E2-transition in Co XVII, *Astronomy and Astrophysics*, 391, 1173-1184.
- Rudzikas, Z., 1997, Theoretical Atomic Spectroscopy, *Cambridge University*, 1. Bask1,
- Safronova, U.I., Safronova, A.S., Hamasha, S.M., Beiersdorfer, P., 2006, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 92, 47-104.
- Silfvast, W. T., 2004, Laser fundamentals, *Cambridge University Press*, Cambridge.
- Sucher, J., 1978, Magnetic dipole transitions in atomic and particle physics: ions and psions, *Rep. Prog. Phys*, 41, 1781.
- Zheng, N.W., 1986, A new theoretical model for many-electron atom and ion systems I, *Chinese Science Bulletin*, 31, 1238-1242.
- Zheng, N.W., 1987, A New Theoretical Model For Many-Electron Atom and Ion Systems II, *Chinese Science Bulletin*, 32, 1263-1267.
- Zheng, N.W., and Xin, H.W., 1991, *Succesive Ionization Potentials of 4fⁿ Electron within WBEPM Theory* Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 24 6 1187-1191.
- 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 lithium like 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(33).

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

Zheng, N.W., and Wang, T., 2002, Radiative Lifetimes and Atomic Transition Probabilities for Atomic Carbon and Oxygen, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 143, 231-240.

Zheng, N.W., Wang, T., Ma, D.X., Zhou, T. and Fan, J. 2004, Weakest bound electron potential model theory, *Int. J. Quant. Chem.*, 98, 281-290.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Duygu Doğan
Uyruğu : T.C
Doğum Yeri ve Tarihi : Kartal-1988
Telefon : 0 507 370 25 42
Faks :
e-mail : duygu.dogan_42@hotmail.com

EĞİTİM

Derece	Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise	: Aydın Lisesi, Merkez, Aydın	2005
Üniversite	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2010
Yüksek Lisans :		

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görevi
2013	MEB (ücretli)	Matematik Öğretmenliği

UZMANLIK ALANI: Atom ve Molekül Fiziği

YABANCI DİLLER: İngilizce

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

Çelik, G., Doğan, D., Ateş, Ş. and Taşer, M., 2012, Electric quadrupole transition probabilities for singly ionized magnesium, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 113, 1691-1605.