

T.C.
ÇANAKKALE ONSEKİZ MART ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
YÜKSEK LİSANS TEZİ

HİDROJENE BENZER ATOMLARIN
RÖLATİVİSTİK ENERJİSİNİN İNCE YAPI
SABİTİNE GÖRE SERİSİNİN İNCELENMESİ

Gürkan DEMİRDAK

Fizik Anabilim Dalı

Tezin Sunulduğu Tarih: 11 / 07 / 2011

Tez Danışmanı:

Prof. Dr. İsrail HÜSEYİN

ÇANAKKALE

YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU

GÜRKAN DEMİRDAK tarafından **PROF. DR. İSRAFİL HÜSEYİN** yönetiminde hazırlanan “**HİDROJENE BENZER ATOMLARIN RÖLATİVİSTİK ENERJİSİNİN İNCE YAPI SABİTİNE GÖRE SERİSİNİN İNCELENMESİ**” başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. İsrail HÜSEYİN

Danışman

Prof. Dr. Selahattin YILMAZ

Jüri üyesi

Prof. Dr. İsmail TARHAN

Jüri üyesi

Sıra No:

Tez Savunma Tarihi: 11 / 07 / 2011

Prof. Dr. İsmet KAYA

Müdür

Fen Bilimleri Enstitüsü

İNTİHAL(AŞIRMA) BEYAN SAYFASI

Bu tezde görsel, işitsel ve yazılı biçimde sunulan tüm bilgi ve sonuçların akademik ve etik kurallara uyularak tarafımdan elde edildiğini, tez içinde yer alan ancak bu çalışmaya özgü olmayan tüm sonuç ve bilgileri tezde kaynak göstererek belirttiğimi beyan ederim.

Gürkan DEMİRDAK

TEŐEKKÜR

Bu alıőmada bana yon gosteren yardım ve desteęini esirgemeyen danıőmanım Prof. Dr. İsrail HÜSEYİN'E, alıőmalarımda yardımlarını gördüğüm alıőma arkadaşlarım Murat ERTÜRK, Ali BAĞCI ve Ercan ŐAHİN'e ayrıca maddi manevi destek gördüğüm kardeşim Ertan DEMİRDAK'a ve aileme teşekkürlerimi sunarım.

Gürkan DEMİRDAK

SİMGELER ve KISALTMALAR LİSTESİ

α	İnce yapı sabiti
Z	Atom numarası
n	Baş kuantum sayısı
l	Orbital (açısal) kuantum sayısı
m	Manyetik kuantum sayısı
j	Toplam açısal momentum kuantum sayısı
s, p, d, f	Atom orbitallerinin l 'ye göre adlandırması
F_{nlj}^i	Seriye açılan fonksiyon
A_{nlj}^i	i. terimin açılım katsayısı
$E_{nlj}^0 = E_n$	Rölativistik olmayan enerji
E_{nlj}^s	Quasirölativistik enerji
$E_{nlj}^\infty = E_{nlj}$	Rölativistik enerji
ΔE_{nlj}	Rölativistik-rölativistik olmayan enerji farkı
ΔE_{nlj}^s	s. yaklaşımda quasirölativistik-rölativistik olmayan enerji farkı
$\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)}$	Quasirölativistik enerjiler arası fark
AO	Atom orbitali
H-benzeri	Hidrojene benzer

ÖZET

HİDROJENE BENZER ATOMLARIN RÖLATİVİSTİK ENERJİSİNİN İNCE YAPI SABİTİNE GÖRE SERİSİNİN İNCELENMESİ

Gürkan DEMİRDAK

Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Tezi

Danışman: Prof. Dr. İsrail HÜSEYİN

11 / 07 / 2011, 50

Bu çalışmada Dirac denkleminin Hidrojene benzer atomlar için çözümünden elde edilen enerji özdeğeri formülü ve bunun ince yapı sabiti üzerine Maclaurin seri açılımı kullanılmıştır.

Rölativistik enerji değerlerine yaklaşımları bulmak için seriye açma yöntemi faydalıdır. Bu nedenle quasirölativistik adı verilen ve serinin terimleri kullanılarak belirlenen rölativistik enerjiye yaklaşımları araştırıldı. Serinin terimleri sırasıyla dikkate alınarak, birinci terimden rölativistik olmayan enerjilerin aynısı, ikinci terimden Pauli yaklaşımının aynısı olan enerji özdeğerleri hesaplanmıştır. Ayrıca üçüncü ve dördüncü terimler dikkate alınarak daha sonraki yaklaşımlardan bulunan quasirölativistik enerji değerleri de belirlenmiştir. Atom numarası $Z = 1$ 'den 10 a kadar olan hidrojene benzer atomlar için hesaplamalar yapılmıştır. Rölativistik etkiler ile enerjinin nasıl değiştiğini belirlemek için, rölativistik etkilerden gelen katkılar ile ilişkili olan rölativistik olmayan, quasirölativistik ve rölativistik enerji değerleri arasındaki farklar araştırılmıştır.

Farklı Hidrojene benzer atomlar için hesaplanan atom orbitallerinin sayısal enerji değerlerinin tartışılmıştır. Sonuç olarak değişen atom orbitallerinin kuantum sayıları (n, l, m, j, \dots vb.) ve farklı hidrojene benzer atomların atom numaraları gibi değişen parametreler ile rölativistik etkiler arasında açık bir ilişki bulunmuştur.

Anahtar Kelimeler: Rölativistik Dirac denklemi, İnce yapı yarılmaları, Maclaurin seri açılımı, Rölativistik ve quasirölativistik enerji değerlerinin sayısal incelenmesi, Atom orbital enerjileri, Pauli yaklaşımı

ABSTRACT

INVESTIGATION OF SERIES OVER FINE STRUCTURE COEFFICIENT FOR RELATIVISTIC ENERGY OF HYDROGEN-LIKE ATOMS

Gürkan DEMİRDAK

Çanakkale Onsekiz Mart University

Graduate School

Chair for Physics Thesis of Master

Advisor: Prof. Dr. İsrail HÜSEYİN

11/ 07 /2011, 50

In this work, relativistic energy eigenvalue formula that derived from the exact solution of the relativistic Dirac equation for Hydrogen-like atoms and the Maclaurin series expansion over fine structure coefficient of it are used.

Series expansion method is useful to find the approximations to the relativistic energy values. Therefore, we have searched the approximations to the relativistic energy which is found by using the terms of series expansion formula, called quasirelativistic. By taking into account the terms respectively, energy eigenvalues determined from the first term were same as non-relativistic energy eigenvalues and from second term were same as energy eigenvalues obtained from the Pauli approximation. Also third and fourth terms have been considered and we determined the quasirelativistic energy values from further approximations. The calculations have been done for Hydrogen-like atoms having the atomic number $Z = 1$ to 10 (Hydrogen to Neon). In order to find how energy changes with relativistic effects, the differences between quasirelativistic, relativistic and non-relativistic energy values of atomic orbitals which are dealing with the additions come from relativistic effects are investigated.

Calculated numerical energy values of atomic orbitals for different Hydrogen-like atoms are discussed. Finally, we have found a brief relation between relativistic effects and changing parameters; quantum numbers (n, l, m, j, \dots etc.) of atomic orbitals, atomic number for different Hydrogen-like atoms.

Keywords: Relativistic Dirac equation, Fine structure splitting, Maclaurin series expansion, Numerical investigation of relativistic and quasirelativistic energies, Atomic orbital energy values, Pauli approximation

İÇERİK	Sayfa
TEZ SINAVI SONUÇ FORMU.....	ii
İNTİHAL (AŞIRMA) BEYAN SAYFASI.....	iii
TEŞEKKÜR.....	iv
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	v
ÖZET.....	vi
ABSTRACT.....	vii
BÖLÜM 1 – GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2 - ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR.....	4
2.1 Spini Sıfır Olan Parçacığın Rölativistik Olmayan	
ve Rölativistik Denklemleri.....	4
2.2 Spini 1/2 Olan Parçacıkların QuasiRölativistik Denklem.....	5
BÖLÜM 3 – MATERYAL VE YÖNTEM.....	8
3.1 Spini 1/2 Olan Parçacık İçin Rölativistik Denklem.....	8
3.2 H-benzeri Atom İçin Dirac Denkleminin Enerji	
Çözümünün Maclaurin Seri Açılımı.....	9
BÖLÜM 4 – ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA.....	12
4.1. Dirac Denkleminden Bulunan Enerji İfadesinin	
Maclaurin Seri Açılım Katsayıları.....	12
4.2. Hidrojen Atomu İçin Orbital Enerjileri.....	14
4.3 Hidrojen Atomu İçin Quasirölativistik Enerji Terimleri	
Arasındaki Fark.....	17
4.4 Hidrojen Atomu İçin Belirlenen Enerji Seviyeleri.....	18
4.5 H-benzeri Atomlar İçin Orbital Enerjileri.....	20
4.6. H-Benzeri Atomlar Quasirölativistik Enerjiler Arasındaki Fark....	33
4.7 H-Benzeri Atomlarda Quasirölativistik ve Rölativistik Olmayan	
Enerjiler Arası Fark.....	38
BÖLÜM 5 – SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	46
KAYNAKLAR.....	49
Çizelgeler.....	I
Şekiller.....	III
Özgeçmiş.....	IV

BÖLÜM I**GİRİŞ**

17. yüzyılın sonlarında Isaac Newton çok sayıda atom ve molekülden oluşan büyük boyutlardaki parçacıkların özelliklerini açıklayan klasik mekaniği keşfetmiştir. 19. yüzyılın sonlarına kadar kuramsal fizik anlayışı Newton mekaniği olarak da bilinen klasik mekanikten oluşuyordu ve 19. yüzyılın sonlarına doğru bu alandaki kuramsal fizik çalışmaları önemli ölçüde tamamlanmıştır.

20. yüzyılın başlarında teknolojik gelişmeler sayesinde yapılan deneyler ile incelenebilen atom ve molekül sistemlerinin özellikleri ve bunların elektromanyetik alan ile etkileşimleri artık klasik fizik ile açıklanamamaktadır. Bu nedenle atom, molekül ve daha küçük boyutlarda parçacıkların özelliklerini inceleyebilmek için kuantum mekaniği önerilmiştir. Kuantum mekaniğinin yasaları doğanın nesnel yasaları olduğu için kuramsal çalışmalar ile deneysel veriler uyum içerisinde olmalıdır. Planck'ın 1900 yılında Siyah cisim ışıması üzerine yaptığı çalışmalar kuantum mekaniğinin başlangıcı olarak kabul edilmektedir.

Kuantum mekaniğinin geliştirilmesindeki önemli olaylar aşağıda verilmiştir. 1860 yılında James Clerk Maxwell elektrik ve manyetizmanın kurallarını bir bütün haline getiren Maxwell Denklemleri adı verilen dört denklem geliştirmiştir. Bu denklemlere göre ivmeli hareket eden yüklü parçacık elektromanyetik ışımaya yapmaktadır. Einstein'a göre elektromanyetik dalgaların hızı boşlukta ışık hızının değeri ile aynıdır. Böylece Maxwell ışığın bir elektromanyetik dalga olduğu sonucuna varmıştır. 1900 yılında Max Planck elektromanyetik ışımanın sadece ışığın frekansı ve bir orantı sabiti (Planck sabiti) $h = 6.6 \times 10^{-34} J \cdot s$ 'nin çarpımından bulunan $h\nu$ enerji değerlerinde olduğunu gösteren ve deneyler ile uyumlu bir kuram geliştirmiştir. Planck'ın önerdiği bu durum var olan tüm klasik fizik düşüncelerine ters düşmektedir ancak elde edilen deneysel verilere yakın sonuçlar bulabilmek için bu varsayımın kullanılması gerekmektedir. Bu olaya ışımaya enerjisinin kuantlanması denir. Kuantumsal olarak açıklanabilen başka bir olayda Fotoelektrik olaydır. Einstein Planck'ın kuantum teorisinden faydalanarak Fotoelektrik olayını incelemiştir. Bu çalışmaların sonucunda elektromanyetik ışımanın hem dalga hem de parçacık özelliği gösterdiği, enerjisinin ve momentumunun sürekli değerlere sahip olmadığını ortaya konulmuştur.

Maddenin atomlardan oluştuğu fikrine dayanarak madde özelliklerinin incelemeleri de yapılmıştır. 1911 yılında Rutherford alfa parçacıklarının saçılması deneyini yaparak atomun modelinin Güneş modeline benzer olduğunu önermiştir: Çekirdek ve elektronlardan oluşan atomun kütesinin çekirdeğin kütesine yakın olduğunu ve kütenin atom içinde küçük bir hacimde bulunduğunu saptamıştır. Bu atom modeli ivmeli hareket eden yüklü parçacığın klasik elektrodinamiğe göre elektromanyetik ışıma yaparak enerjisini yitirmesinden dolayı çekirdeğe düşeceği için atomun yapısını açıklamaya yeterli olmamıştır. Karşılaşılan bu problem 1913 yılında Bohr tarafından önerilen kesikli enerji değerleri uygulanmasıyla aşılmıştır. Bohr'un önerdiği atom modeline göre elektronlar, klasik mekaniğe aykırı olarak, yörüngelerde ışıma yapmadan hareket ederler. Bu modelin de sadece hidrojen atomu için geçerli olduğu belirlenmiştir çünkü çok elektronlu atom ve moleküllere uygulandığında deneylerle uyumlu sonuçlar bulunamamıştır. Bohr teorisinde ortaya çıkan bu sorunların çözülmesi için farklı çalışmalar yapılmıştır fakat Bohr modelinin bu sorunları giderilememiştir. Bohr teorisinde ki sorunların çözülememesinden dolayı yeni bir kuantum teorisi önerilmesi ihtiyacı doğmuştur. Böylece, Planck teorisinde ve Fotoelektrik olayında ortaya çıkan elektromanyetik dalgaların ikili özelliğe sahip olduğu fikri ağırlık kazanmıştır.

1923 yılında, Louis de Broglie elektron hareketinin bir dalga özelliğine sahip olması gerektiğini önermiştir. Herhangi bir parçacık için de Broglie formülleri

$$E = \hbar\omega \quad (1.1)$$

$$p = \hbar k, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.2)$$

şeklindedir. Bu denklemlerin sol tarafındaki E parçacığın enerjisi ve p momentumudur, (1.1) denkleminin sağ tarafındaki ω bu parçacığa eşlik eden de Broglie dalgasının açısal frekansı ve (1.2)'de k dalgasayısı, λ ise dalgaboyudur. De Broglie'nin önerdiği parçacıkların ikili özelliğe sahip olduğu fikrini dikkate alarak Schrödinger 1925 yılında kendi adı ile adlandırılan denklemi önermiştir. Rölativistik olmayan kuantum mekaniği olarak adlandırılan Schrödinger teorisi elektronun spinini de içermemektedir. Bu nedenle deneylerden bulunan sonuçlar ile karşılaştırıldığında iyileştirilmesi gerektiği ortaya çıkmaktadır.

Kuantum mekaniği 1925 yılında oldukça başarılı bir kuram olarak ortaya atılmıştır. Ancak Einstein'ın yüksek hızlarda gerçekleşen olayları doğru bir şekilde

açıklayan ve deneyler ile de desteklenen özel rölativite kuramı ile uyumlu değildir. 1926 yılında spini sıfır olan parçacıklar için Schrödinger teorisi Klein-Gordon tarafından geliştirilmiştir. Klein-Gordon denklemi spini sıfır olan parçacık için Einstein'ın özel görelilik kuramı ile uyumlu olan rölativistik denklemdir. Ancak spin dikkate alınmadığı için deneysel veriler ile uyum sağlanamamaktadır.

Deneysel verileri açıklayabilmek için elektronun spini de dikkate alınmalıdır. Böylece spin kavramının kuantum mekaniğinde kullanılması 1927 yılında Pauli tarafından önerilmiştir. Pauli spini $1/2$ olan parçacık için bir denklem önermiştir. Pauli'nin önerdiği denklem rölativistik özellikleri içermediğinden, 1928'de Dirac tarafından $s=1/2$ spinli elektron için rölativistik kuantum mekaniğinin denklemi (Dirac denklemini) önermiştir. Bu nedenle Pauli'nin önerdiği denklem quasirölativistik (yarı rölativistik) kuantum mekaniği denklemi olarak tanımlanmıştır. Darwin 1928 yılında, Dirac denkleminin Hidrojene benzer (H-benzeri) atomlar için çözümünü bulmuştur. Sunulan bu tezde Dirac denkleminin H-benzeri atomlar için çözümünden bulunan enerji özdeğerleri incelenmiştir. Bilindiği gibi quasirölativistik kuantum mekaniğinde Pauli yaklaşımı kullanılmaktadır. Bu çalışmamızda Dirac denkleminde, Pauli yaklaşımından ve Schrödinger denkleminde bulunan enerji özdeğerlerinin karşılaştırılması yapılmıştır.

Literatürden bilindiği gibi (Bethe-Salpeter, 1957; Levine, 2000), kuantum mekaniğinin geçerli olduğunun test edilmesinde en önemli ve en çok kullanılan sistemler; Hidrojen atomu ve Hidrojene benzer atomlar diye tarif edilen He^+, Li^{++} vb. tek elektronlu iyonlardır. H-benzeri atomlar için yapılan incelemeler çok elektronlu sistemlerin incelenmesine de olanak sağlayacağından önemlidir. Bu nedenle bu çalışmamızda $1 \leq Z \leq 10$ atom numarasına sahip H-benzeri atomlar için de rölativistik olmayan, quasirölativistik ve rölativistik enerji özdeğerleri hesaplanarak incelemeler yapılmıştır.

BÖLÜM II

ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

2.1 Spini Sıfır Olan Parçacığın Rölativistik Olmayan ve Rölativistik Denklemleri

Bilindiği gibi kuantum mekaniğinde atom-molekül sistemlerinin özelliklerini iyi açıklayacak bir kuram oluşturabilmek için çeşitli çalışmalar yapılmıştır. Kuantum mekaniğinde bir sistemin özelliklerinin belirlenebilmesi için sisteme ait ψ dalga fonksiyonunun belirlenmesi gerekmektedir. Bu nedenle Schrödinger 1925 yılında, kuantum mekaniğinde spin kavramının kullanılmasından önce rölativistik olmayan durumda spini sıfır olan parçacıklar için

$$\hat{H} \psi = E \psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - V(r) \right) \psi \quad (2.1.1)$$

denklemini önermiştir. Burada \hat{H} Hamiltoniyen, \hat{p} momentum operatörü, $m = 9.1093821545 \times 10^{-31} \text{kg}$ elektronun kütlesi, $e = 1.60277 \times 10^{-19} \text{Coulomb}$ elektronun elektrik yükü, $V(r)$ (H-benzeri atom için Coulomb potansiyeli

$V(r) = \frac{Ze^2}{r}$) küresel simetrik potansiyeldir. (2.1.1) denkleminin H-benzeri atom için

çözülmesinden elde edilen enerji özdeğerlerinin ifadesi

$$E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{2n^2 \hbar^2} = -m c^2 \frac{\alpha^2 Z^2}{2n^2} \quad (2.1.2)$$

şeklinde bulunur. Burada Z atom numarasını, n ise baş kuantum sayısını göstermektedir. (2.1.2)'den görüldüğü gibi enerji özdeğerleri ifadesi sadece n kuantum sayısına bağlıdır. Bu nedenle her n kuantum sayısına sahip durumda enerji özdeğerleri katlı olarak bulunur ve bu katlılık, l orbital açısal momentum kuantum sayısı, m_l manyetik kuantum sayısına da bağlı olarak

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m_l=-l}^l m_l = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (2.1.3)$$

şeklinde belirlenebilir.

Burada kuantum sayıları

$$1 \leq n < \infty, 0 \leq l \leq n-1, -l \leq m_l \leq l \quad (2.1.4)$$

değerlerini alırlar. Böylece rölativistik olmayan kuantum mekaniğine göre H-benzeri atom durumunda $n=1$ için $1s$ orbitalinde katlılık yoktur. $n=2$ için $2s$ ve $2p$, $n=3$ için $3s$, $3p$ ve $3d$ orbitallerinin enerjileri birbirine eşittir.

Rölativistik etkilerin de dikkate alındığı durumda Schrödinger denklemine benzer denklem Klein, Gordon ve Fock tarafından 1926 yılında önerilmiştir. Spini sıfır olan parçacıklar için Klein-Gordon denklemi adı ile bilinen rölativistik denklem

$$\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = [\hbar^2 \nabla^2 - m^2 c^2] \psi \quad (2.1.5)$$

şeklinindedir. Burada ∇^2 Laplace operatörü, m parçacığın durgun kütlesi ve $c \approx 2.99792458 \times 10^8$ ışık hızıdır. Bu denklemin H-benzeri atom için çözümünden n ve l kuantum sayılarına bağlı olan enerji özdeğerleri

$$E_{nl} = mc^2 \left[1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right] \quad (2.1.6)$$

şeklinde elde edilir. (2.1.6) denkleminde bulunan enerji özdeğerleri Schrödinger'den bulunan enerji özdeğerlerinden farklı olarak l kuantum sayısına da bağlıdır ve buna göre yarılmalar bulunur. Buradan bulunan sonuçlar spini sıfır olan parçacıklar için rölativistik durumu iyi açıklar ancak burada spin dikkate alınmadığı için spini sıfırdan farklı olan parçacıklar için deneyler ile tam olarak uyuşmamaktadır. Deneysel verilerin yorumlanabilmesi için spinin de dikkate alınması gerekmektedir. Spinin de dikkate alındığı H-benzeri atom için çözümünü inceleyeceğimiz rölativistik denklem Dirac denklemidir. Dirac denkleminin çözümleri Klein-Gordon denkleminin de çözümleridir ancak Klein-Gordon denkleminin çözümleri Dirac denklemini sağlamaz.

2.2 Spini 1/2 Olan Parçacıkların Quasirölativistik Denklem

Literatürden bilindiği gibi kuantum mekaniğinde parçacıkların spininin dikkate alınması önem taşımaktadır. Spini tam olan ($s=0,1,2,3,\dots$) parçacıklar bozonlar, yarım spinli parçacıklar ($s=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\dots$) ise fermiyonlar olarak tanımlanırlar. Özellikle atom-molekül sistemlerinin yapısının incelenmesinde spini 1/2 olan parçacıklardan (elektronlar, protonlar) faydalanılır. Pauli 1927 yılında spin kavramını kuantum mekaniğine dahil etmiş ve kendi adıyla bilinen quasirölativistik

$$\left[\frac{\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m} + eA_0 - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma} \cdot \vec{H}) \right] \Psi = E\Psi \quad (2.2.1)$$

denklemini önermiştir. Burada E enerji özdeğeri, Ψ iki boyutlu spinorler, \vec{A} vektör potansiyel, $\vec{H} = \text{rot}\vec{A}$ manyetik alan vektörü ve $\vec{\sigma}$ bileşenleri

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.2.2)$$

şeklinde verilen Pauli spin matrisleridir. Spinin dikkate alındığı durumda toplam açısal momentum korunan bir nicelik olarak ortaya çıkar ve $l-s \leq j \leq l+s$ değerlerini alan j kuantum sayısı ile temsil edilir. Pauli denkleminin H-benzeri atom için çözümünden elde edilen n ve j kuantum sayılarına bağlı enerji özdeğerleri şöyle bulunmuştur

$$E_{nj} = -\frac{mc^2 Z^2 \alpha^2}{2n^2} \left(1 + \frac{(\alpha Z)^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) \quad (2.2.3)$$

Burada Schrödinger'e göre aynı n kuantum sayılı ve aynı enerji özdeğerine sahip orbitallerin enerjilerindeki katlılık spinin dikkate alınmasıyla j kuantum sayısına göre yarılmalara uğrar. Bu ifadeden n kuantum sayıları aynı, j kuantum sayıları farklı orbitaller için farklı enerji özdeğerleri bulunur. Ancak n ve j kuantum sayıları aynı, l kuantum sayısı farklı olan orbitaller için bulunan enerji özdeğerleri birbirine

eşittir. $n=1$ durumunda $1s_{1/2}$ orbitali için katlılık olmadığından tek bir enerji özdeğeri bulunur, $n=2$ durumunda $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ orbitalleri için birbirine eşit enerji özdeğeri ve $2p_{3/2}$ orbitali için bu enerji özdeğerinden farklı bir enerji özdeğeri bulunur. Bu durum incelemelerimizde de görülecektir. Paulinin önerdiği bu denklem de deneyleri açıklamakta yetersiz kalmıştır. Bu nedenle deneylerle uyumlu sonuçların elde edilebilmesi için rölativistik durumda spinin de dikkate alındığı bir denklem önerilmesi gerekmektedir. Bu denklem Dirac tarafından Klein-Gordon denkleminde Pauli'nin önerdiği matris şeklindeki spin fonksiyonları kullanılarak geliştirilmiştir. Bu çalışmada kullanacağımız bu denklemin özellikleri ve Maclaurin serisi açılımı sonraki bölümde ele alınacaktır.

BÖLÜM III

MATERYAL VE YÖNTEM

Teknolojik gelişmeler sayesinde atom ve molekül sistemlerinin daha hassas incelenebildiği deneyler sonucunda rölativistik etkilerin önemi ortaya çıkmıştır. Bu rölativistik etkiler parçacığın spinine ve yüksek hızlarda değişen kütesine bağlıdır. Pauli rölativistik olmayan durumda spini dikkate almıştır ancak tam rölativistik çözüm elde edememiştir. Deneyler ile uyumlu sonuçlar elde edebilmek için spinin de dikkate alındığı rölativistik bir denklem elde edilmelidir.

3.1 Spini 1/2 Olan Parçacık İçin Rölativistik Denklem

Dirac, 1928 yılında spinin dikkate alınmadığı rölativistik Klein-Gordon denklemini 1/2 spinli parçacıklar için spinin dikkate alındığı Pauli matrislerine dayalı 4 boyutlu matrisler ile geliştirerek rölativistik bir denklem elde etmiştir. Dirac denklemi kuantum mekaniği ilkeleri ve Einstein'ın özel rölativite teorisi ile uyumlu olan bir denklemdir. Dirac bu denklemin çözümünü kendisi vermemiştir, Gordon Hipergeometrik fonksiyonlar ile Hidrojen atomu için tam çözümü bulmuştur. H-benzeri atom için Dirac denklemi Darwin tarafından kuvvet serileri kullanılarak çözülmüştür.

Rölativistik Dirac denklemi Schrödinger formunda

$$\hat{H}_D \Psi = E \Psi, \quad (3.1.1)$$

ile gösterilir, burada Ψ 4-boyutlu spinörler şeklinde dalga fonksiyonları, E enerji özdeğerleri ve

$$\hat{H}_D = c(\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}}) + mc^2 \beta + V(r) \quad (3.1.2)$$

H-benzeri atom için rölativistik Dirac hamiltoniyenidir. Bu ifadede $\hat{\vec{p}}$ momentum operatörü, mc^2 durgun kütle enerjisi, $V(r)$ Coulomb potansiyeli $\vec{\alpha}$ ve β dört boyutlu matrisler

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, 0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1.3)$$

ifadeleri ile verilir. Burada $\vec{\sigma}$ iki boyutlu Pauli spin matrisleri, I birim matris, 0 ise sıfır matrisidir.

Dirac denkleminin H-benzeri atom için çözümünden elde edilen enerji özdeğeri:

$$E' = E - mc^2 = mc^2 \left\{ \left[1 + \left(\frac{\alpha Z}{N + \sqrt{\tau^2 - \alpha^2 Z^2}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} - 1 \right\} \quad (3.1.4)$$

burada $\tau = 1, 2, \dots$, $N = n + \tau$, $N = 0, 1, 2, \dots$ ile verilir.

H-benzeri atom için Dirac denkleminin özdeğerleri iki mertebeden dejenereye sahiptir, yani enerjinin (3.1.4) ifadesine karşılık iki tane lineer bağımsız ($k = +\tau$ ve $k = -\tau$) özfonksiyon bulunmaktadır.

3.2 H-benzeri Atom İçin Dirac Denkleminin Enerji Çözümünün Maclaurin Seri Açılımı

Bu bölümde H -benzeri atom için Dirac denkleminin çözümünden bulunan enerji özdeğerleri için ince yapı sabitine göre Maclaurin serisi

$$E_{nlj} = E_n F_{nlj}(x) \quad (3.2.1)$$

incelenecektir. Burada E_n H-benzeri atom için Schrödinger denkleminin özdeğeridir.

F_{nlj} ise Dirac denkleminde elde edilen ifadedir.

$$F_{nlj}(x) = \frac{2n^2}{x} \left\{ 1 - \left[1 + \left(\frac{\sqrt{x}}{n - \tau + \sqrt{\tau^2 - x}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (3.2.2)$$

Burada

$$x = \alpha^2 Z^2, \quad j = l + 1/2, \quad \tau = j + 1/2 = l + 1, \quad 1 \leq n < \infty, \quad 0 \leq l \leq n - 1. \quad (3.2.3)$$

Bir $f(x)$ fonksiyonu

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} x^i = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i \quad (3.2.4)$$

şeklinde Maclaurin serisine açılabilir. Bu ifade F_{nlj} için kullanıldığında

$$F_{nlj}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{F_{nlj}^{(i)}}{i!} x^i = \sum_{i=0}^{\infty} A_{nlj}^i x^i \quad (3.2.5)$$

şeklinde gösterilir. Burada A_{nlj}^i Maclaurin serisinin katsayılarıdır ve 1.,2.,3. ve 4. terim için analitik ifadeleri

$$A_{nlj}^0 = 1 \quad (3.2.6)$$

$$A_{nlj}^1 = \frac{1}{n^2} \left(\frac{n}{\tau} - \frac{3}{4} \right), \quad (3.2.7)$$

$$A_{nlj}^2 = \frac{1}{8n^4} \left(\frac{2n^3}{\tau^3} + \frac{6n^2}{\tau^2} - \frac{12n}{\tau} + 5 \right), \quad (3.2.8)$$

$$A_{nlj}^3 = \frac{1}{64n^6} \left(\frac{8n^5}{\tau^5} + \frac{24n^4}{\tau^4} + \frac{8n^3}{\tau^3} - \frac{120n^2}{\tau^2} + \frac{120n}{\tau} - 35 \right), \dots \quad (3.2.9)$$

şeklinde belirlenmiştir. Serinin tüm terimleri dikkate alındığında bulunacak rölativistik enerji değerleri için

$$E_{nlj} = E_{nlj}^{\infty} = E_n \sum_{i=0}^{\infty} F_{nlj}^i(x) = E_n F_{nlj}^0(x) + E_n \lim_{s \rightarrow \infty} F_{nlj}^s(x) \quad (3.2.10)$$

formülü verilmiştir. Burada

$$F_{nlj}^s(x) = \sum_{i=1}^s A_{nlj}^i x^i \quad (3.2.11)$$

seri ifadesidir. Serinin terimleri dikkate alınarak hesaplanacak olan quasirölativistik enerji özdeğerleri için

$$E_{nlj}^s(x) = E_n F_{nlj}^0(x) + E_n \sum_{i=1}^s F_{nlj}^i(x) \quad (3.2.12)$$

ifadesi kullanılır. Burada seri ile verilen kısım bize rölativistik katkıları vermektedir ve E_n sıfırcı yaklaşımda Schrödinger denkleminin çözümünden bulunan rölativistik olmayan enerji değeri,

$$F_{nlj}^0(x) = A_{nlj}^0 = 1, \quad (3.2.13)$$

serinin birinci terimi ile çarpıldığında rölativistik olmayan enerji değeri elde edilecektir.

$$E_n \equiv E_{nlj}^0 = -mc^2 \frac{\alpha^2 Z^2}{2n^2}. \quad (3.2.14)$$

Burada E_n orbitallerin gösterimi gereği E_{nlj}^0 şeklinde gösterilmiştir.

Bu çalışmamızda H-benzeri atomlar için (3.2.10) ifadesinden rölativistik, (3.2.12) ifadesinde serinin terimleri dikkate alınarak quasirölativistik enerji değerleri hesaplanmıştır.

Rölativistik ve rölativistik olmayan enerji özdeğerleri arasındaki fark

$$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty = E_n F_{nlj}^0(x) - E_n \sum_{i=0}^{\infty} F_{nlj}^i(x) \quad (3.2.15)$$

ile hesaplanır. Quasirölativistik enerji ve rölativistik olmayan enerji değerleri arasındaki fark

$$\Delta E_{nlj}^s = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^s = E_n F_{nlj}^0(x) - E_n \sum_{i=0}^s F_{nlj}^i(x) \quad (3.2.16)$$

ile belirlenir. Quasirölativistik enerji terimleri arasındaki fark (rölativistik katkılar)

$$\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)} = E_{nlj}^{s-1} - E_{nlj}^s = E_n \Delta F_{nlj}^{s-(s-1)} \quad (3.2.17)$$

denklemini ile hesaplanabilir. Burada

$$\Delta F_{nlj}^{s-(s-1)} = \left[\sum_{i=1}^{s-1} F_{nlj}^i(x) - \sum_{i=1}^s F_{nlj}^i(x) \right] = \Delta A_{nlj}^{s-(s-1)} x \quad (3.2.18)$$

ile verilmiştir. Böylece seri yöntemi kullanılarak rölativistik enerji değerlerinden faydalanılarak rölativistik etkilerin özellikleri ayrıntılı bir şekilde araştırılabilir. Sonraki bölümde elde edilen bu formüller kullanılarak hesaplanan veriler tartışılacaktır.

BÖLÜM IV

ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA

Hidrojen ve hidrojene benzer atomlar için Schrödinger denklemi çözülerek rölativistik olmayan durumda orbital enerjileri bulunmuştur. Ancak hesaplamalarda rölativistik düzeltmeler ve spin dikkate alınmadığı için deneylerle tam olarak uyumlu olmayan kaba değerler elde edilmiştir. Rölativistik etkiler dikkate alınarak önerilmiş Klein-Gordon denklemi de spin dikkate alınmadığından rölativistik durumu iyi açıklayamamıştır. Dirac, elektron için Pauli'nin önerdiği spin fonksiyonlarını kullanarak rölativistik denklem önermiştir. Bu denklem çözülerek deneyler ile daha uyumlu rölativistik orbital enerjileri belirlenebilmektedir.

Dirac denkleminde bulunan (3.1.4) enerji ifadesinin (ince yapı formülü) seri açılımı ile rölativistik olmayan ve quasirölativistik enerji özdeğerleri hesaplanabilmektedir. Burada (3.2.12) ile verilen seri açılım ince yapı sabitinin karesi $(\alpha Z)^2$ üzerine yapılan Maclaurin serisidir. Bu bölümde H-benzeri atomların rölativistik olmayan, quasirölativistik ve rölativistik orbital enerjileri için elde edilen sonuçlar incelenmiştir.

4.1. Dirac Denkleminde Bulunan Enerji İfadesinin Maclaurin Seri Açılım Katsayıları

Quasirölativistik enerji değerlerinin hesaplanmasında kullanılan (3.2.12) denklemi, analitik ifadeleri (3.2.6-3.2.9) ile verilen A_{nlj}^i katsayılarına bağlıdır. Ayrıca serinin terimleri enerjiye katkılar ile orantılı olduğu için sayısal değerlerinin belirlenmesi rölativistik katkılar hakkında fikir edinmek için önemlidir. Bu nedenle katsayılar, atom orbitallerini tanımlayan n ve j kuantum sayılarına bağlı analitik ifadelerden sayısal olarak hesaplanmış ve Çizelge-1. ile verilmiştir.

Çizelge 1. $1 \leq s \leq 3$ için Enerji ifadesinden elde edilen Maclaurin serisinin A_{nlj}^i katsayılarının sayısal değerleri ($A_{nlj}^0 = 1$)

AO	n	l	j	τ	A_{nlj}^1	A_{nlj}^2	A_{nlj}^3
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	0.25	0.125	0.078125
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.3125	0.164063	0.104736
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.3125	0.164063	0.104736
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.0625	0.0078125	0.0012207

$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.25	0.118827	0.0717807
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	0.25	0.118827	0.0717807
$3p_{3/2}$			3/2	2	0.0833333	0.0111883	0.00180577
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.0833333	0.0111883	0.00180577
$3d_{5/2}$			5/2	3	0.0277778	0.00154321	0.000107167
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	0.203125	0.0883789	0.0510139
$4p_{1/2}$		1	1/2	1	0.203125	0.0883789	0.0510139
$4p_{3/2}$			3/2	2	0.078125	0.0102539	0.00163651
$4d_{3/2}$		2	3/2	2	0.078125	0.0102539	0.00163651
$4d_{5/2}$			5/2	3	0.0364583	0.00215205	0.000153326
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	0.0364583	0.00215205	0.000153326
$4f_{7/2}$			7/2	4	0.015625	0.000488281	0.0000190735

Çizelge 1’de serinin 1. teriminin katsayısı tüm orbitaller için sabittir ve sayısal olarak 1 değerine eşittir, tablonun başlığında ($A_{nlj}^0 = 1$) ile gösterilmiştir. Serinin 2., 3. ve 4. teriminin katsayıları, sırasıyla A_{nlj}^1 , A_{nlj}^2 ve A_{nlj}^3 için de sayısal değerler hesaplanmış ve çizelge-1’de verilmiştir. Buradan şu sonuçlar çıkarılabilir:

a) (3.2.12) denkleminde göre sadece ilk terim dikkate alınarak hesaplanan orbital enerjileri için rölativistik olmayan E_n değerlerinin bulunabileceği kolayca görülmektedir.

b) Çizelge 1’de yukarıdan aşağıya A_{nlj}^i katsayıları, baş kuantum sayısı ve orbital kuantum sayısı küçük (çekirdeğe yakın) olan orbitaller için büyük değerler ve çekirdekten uzaklaştıkça daha küçük değerler almaktadır. Buna göre (3.2.17) ifadesinden hesaplanan rölativistik enerji katkıları baş kuantum sayısının büyük değerlerinde katsayılara bağlı olarak hızla küçülecektir.

c) Çizelge 1’de soldan sağa gidildikçe değerler belli bir orbital için serideki 2., 3. ve 4. terimin katsayılarının $A_{nlj}^1 > A_{nlj}^2 > A_{nlj}^3$ şeklinde olduğu görülebilir. (3.2.17) formülünde enerjiye serinin bu terimlerden gelecek olan katkıları katsayılara bağlı olarak küçülecektir.

c) A_{nlj}^1 , A_{nlj}^2 ve A_{nlj}^3 katsayılarının değerleri $i \geq 1$, durumunda $1 > A_{nlj}^1 > A_{nlj}^2 > A_{nlj}^3$ şeklindedir. Böylece seri açılımında enerjiye en büyük katkının 1.

terimden geldiği ve daha yüksek dereceli terimlerden gelen katkıların katsayılarına göre azalacağı sonucuna varılabilir.

d) Bu katsayıların n , j kuantum sayıları aynı ve l kuantum sayısı farklı orbitaller için aynı sayısal değerleri aldığı görülmektedir. Bunun sebebi katsayıların sadece n ve j ye bağlı olmasındandır. Burada Dirac denkleminin bir özelliği olan ince yapıya göre yarılma bu katsayılarından görülmektedir. Bu katsayılarla bağlı olarak hesaplanacak olan quasirölativistik ve rölativistik enerji özdeğerleri katsayıların aynı olduğu atom orbitallerinde aynı değerleri alacaktır.

4.2. Hidrojen Atomu İçin Orbital Enerjileri

Hidrojen atomunun $1 \leq n \leq 4$, $0 \leq l \leq 3$, $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ kuantum sayılarına sahip orbitallerin $E_n \equiv E_{nl}^0$ rölativistik olmayan ve $E_{nl}^1, E_{nl}^2, E_{nl}^3$ quasirölativistik enerjileri, seri açılım katsayılarından faydalanılarak (3.2.12) denklemi ile belirlenmiştir. Rölativistik E_{nl}^∞ enerjileri ise (3.2.10) denkleminde hesaplanmıştır. Ayrıca $(\Delta E_{nl} = E_{nl}^0 - E_{nl}^\infty)$ ile gösterilen rölativistik ve rölativistik olmayan enerjiler arası fark (3.2.15)'den eV biriminde hesaplanmıştır. Böylece elde edilen veriler Çizelge 2' de verilmiştir. Burada rölativistik etkiler çok küçük olduğundan belirlenen enerji özdeğerleri arasındaki farkın görünebilmesi için hesaplamalar yapılırken hassasiyet 100 rakam üzerinden tutulmuştur.

Çizelge 2. H atomunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ durumunda $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	13.600455133992208	13.600636192011782	13.600636196832504	13.600636196832665	13.60063619681069	0.00018106281848240258
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	3.400113783498052	3.4001703641291687	3.4001703657109688	3.400170365711022	3.40017036573758	0.00005658223952798025
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	3.400113783498052	3.4001703641291687	3.4001703657109688	3.400170365711022	3.40017036573758	0.00005658223952798025
$2p_{3/2}$	2	1	3/2	2	3.400113783498052	3.400125099624275	3.400125099699599	3.400125099699593	3.4001250997680836	0.000011316270031702658
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	1.5111616815546898	1.5111817991124203	1.5111817996216048	1.5111817996216212	1.5111817995637158	0.00002011800902601557
$3p_{1/2}$	3	1	1/2	1	1.5111616815546898	1.5111817991124203	1.5111817996216048	1.5111817996216212	1.5111817995637158	0.00002011800902601557
$3p_{3/2}$	3	1	3/2	2	1.5111616815546898	1.5111683874072666	1.511168387455209	1.5111683874552098	1.5111683874624133	0.000006705907723558724
$3d_{3/2}$	3	2	3/2	2	1.5111616815546898	1.5111683874072666	1.511168387455209	1.5111683874552098	1.5111683874624133	0.000006705907723558724
$3d_{5/2}$	3	2	5/2	3	1.5111616815546898	1.511163916838882	1.5111639168454944	1.5111639168454944	1.5111639167997866	0.00000223245096793292
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	0.850028445874513	0.8500376402270695	0.8500376404400946	0.8500376404401011	0.8500376403848005	0.000009194510287469093
$4p_{1/2}$	4	1	1/2	1	0.850028445874513	0.8500376402270695	0.8500376404400946	0.8500376404401011	0.8500376403848005	0.000009194510287469093
$4p_{3/2}$	4	1	3/2	2	0.850028445874513	0.8500319821639577	0.8500319821886735	0.8500319821886736	0.8500319821882358	0.00000353631372285168
$4d_{3/2}$	4	2	3/2	2	0.850028445874513	0.8500319821639577	0.8500319821886735	0.8500319821886736	0.8500319821882358	0.00000353631372285168
$4d_{5/2}$	4	2	5/2	3	0.850028445874513	0.850030961429207	0.850030961481078	0.850030961481077	0.850030960849068	0.00000165021039377662
$4f_{5/2}$	4	3	5/2	3	0.850028445874513	0.850030961429207	0.850030961481078	0.850030961481077	0.850030960849068	0.00000165021039377662
$4f_{7/2}$	4	3	7/2	4	0.850028445874513	0.8500291531324019	0.8500291531335789	0.8500291531335789	0.8500291530899535	0.00000707215440542974

Çizelge 2’de (3.2.12) denklemindeki serinin ilk terimi dikkate alınarak hesaplanan rölativistik olmayan E_{nl}^0 değerleri sadece baş kuantum sayısına bağlıdır. Bu nedenle aynı n kuantum sayısına sahip atom orbitallerinin enerjileri birbirine eşit olarak görülmektedir.

Rölativistik denklemin çözümü (3.1.4) denkleminde bulunan enerji değerleri E_{nl}^∞ ile verilmiştir. Rölativistik olmayan durumdan farklı olarak, aynı n ve farklı j kuantum sayısına sahip atom orbitallerinin enerjileri farklı bulunmuştur. Burada ince yapıya göre enerji özdeğerlerindeki yarılmalar görülmektedir. Burada aynı n ve j kuantum sayısına sahip l kuantum sayısı farklı olan orbitaller için enerji değerlerinin birbirine eşit olduğu görülmektedir. Ayrıca E_{nl}^∞ rölativistik enerji değeri tabloda en düşük değerler olarak görülmektedir. Bu rölativistik etkilerin orbital enerjilerini düşürdüğünü göstermektedir.

Çizelge 2’de bulunan E_{nl}^1 , E_{nl}^2 ve E_{nl}^3 , seri açılımında 2., 3., ve 4. terimler dikkate alınarak (3.2.12) ifadesiyle hesaplanan quasirölativistik enerji değerleridir. Quasirölativistik olarak adlandırdığımız enerji değerlerinden özel olarak ikinci terimin dikkate alınması ile hesaplanan E_{nl}^1 enerji değerleri Pauli yaklaşımından bulunan enerji değerleri ile aynıdır. Geriye kalan E_{nl}^2 ve E_{nl}^3 enerji değerleri 3. ve 4. terimin dikkate alınması ile hesaplanmış quasirölativistik enerjilerdir. Eğer serinin tüm terimleri dikkate alınırsa rölativistik enerji değeri E_{nl}^∞ bulunur. Bulduğumuz enerji değerleri karşılaştırılırsa $E_{nl}^0 > E_{nl}^1 > E_{nl}^2 > E_{nl}^3 > E_{nl}^\infty$ olduğu görülebilir. Böylece serinin daha yüksek dereceli terimlerinin dikkate alınması ile quasirölativistik enerji değerleri için E_{nl}^∞ ’a yaklaşan sonuçların elde edilebileceği görülebilir.

$\Delta E_{nl} = E_{nl}^0 - E_{nl}^\infty = E_n - E_{nl}^\infty$ rölativistik olmayan enerji değeri ile rölativistik enerji değerleri arasındaki farkın incelenmesi atom orbitallerinin hangilerinde rölativistik etkilerin daha büyük olduğunu görülmeye çalışılması açısından önemlidir. Çizelge 2’de ΔE_{nl} farkını incelersek n ve l kuantum sayılarının küçük olduğu orbitallerde bu farkın büyük ve büyük olduğu orbitallerde ise küçüldüğünü görebiliriz. Böylece rölativistik etkilerin çekirdekten uzaklaştıkça (beklendiği gibi) azaldığını

söyleyebiliriz. Bunun nedeni elektronun hızının çekirdeğe yakın orbitallerde daha yüksek iken çekirdekten uzak olanlarda düşük olmasıdır.

4.3 Hidrojen Atomu İçin Quasirölativistik Enerjiler Arasındaki Fark

Atom orbitalleri için 1., 2. ve 3. yaklaşımdan bulunan quasirölativistik enerji değerlerini incelerken seri açılımın terimlerine bağlı olan quasirölativistik enerji değerleri arasındaki farklar, rölativistik etkilerin atom orbitallerinin enerjilerini nasıl değiştiğini görmek için önemlidir. Bu nedenle (3.2.17) denklemi ile $\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)}$ hesaplanmış ve Çizelge 3 ile verilmiştir.

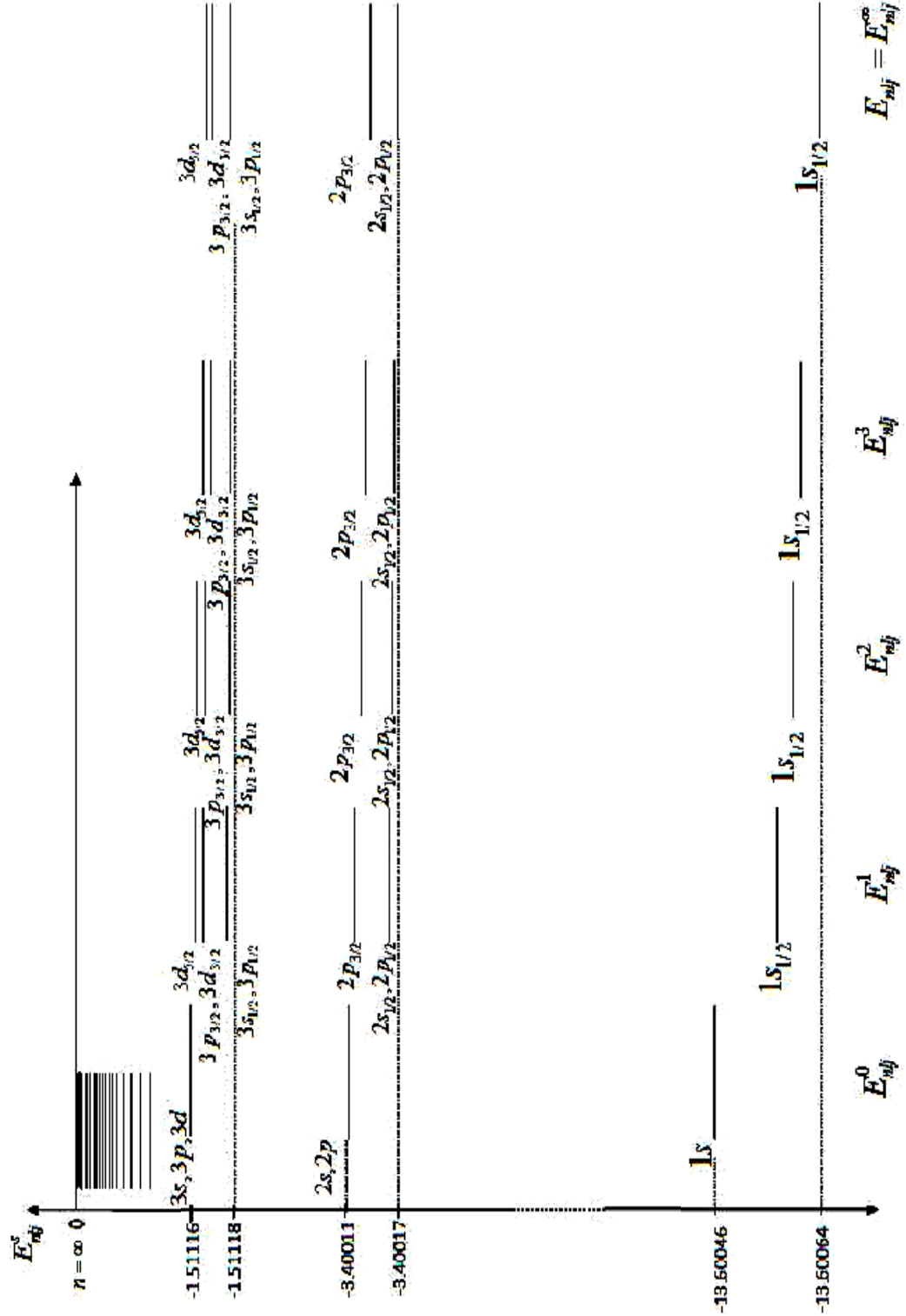
Çizelge 3. H atomu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları ($\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)}$) (eV biriminde)

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	0.000181058	4.82072×10^{-9}	1.61648×10^{-13}
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.0000565806	1.5818×10^{-9}	5.32907×10^{-14}
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0000565806	1.5818×10^{-9}	5.32907×10^{-14}
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.0000113161	7.53237×10^{-11}	4.44089×10^{-16}
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.0000201176	5.09184×10^{-10}	1.64313×10^{-14}
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0000201176	5.09184×10^{-10}	1.64313×10^{-14}
$3p_{3/2}$			3/2	2	6.70585×10^{-6}	4.79425×10^{-11}	6.66134×10^{-16}
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	6.70585×10^{-6}	4.79425×10^{-11}	6.66134×10^{-16}
$3d_{5/2}$			5/2	3	2.23528×10^{-6}	6.61249×10^{-12}	0
$4s_{1/2}$		4	0	1/2	1	9.19435×10^{-6}	2.13025×10^{-10}
$4p_{1/2}$	1		1/2	1	9.19435×10^{-6}	2.13025×10^{-10}	6.55032×10^{-15}
$4p_{3/2}$			3/2	2	3.53629×10^{-6}	2.47158×10^{-11}	1.11022×10^{-16}
$4d_{3/2}$	2		3/2	2	3.53629×10^{-6}	2.47158×10^{-11}	1.11022×10^{-16}
$4d_{5/2}$			5/2	3	1.65027×10^{-6}	5.18707×10^{-12}	1.11022×10^{-16}
$4f_{5/2}$	3		5/2	3	1.65027×10^{-6}	5.18707×10^{-12}	1.11022×10^{-16}
$4f_{7/2}$			7/2	4	7.07258×10^{-7}	1.17695×10^{-12}	0

Çizelge 3'te serinin 2., 3., ve 4. terimlerinden gelen katkıları sırasıyla, ΔE_{nlj}^{1-0} , ΔE_{nlj}^{2-1}

, ΔE_{nlj}^{3-2} , Çizelge 2 için tartıştığımız (ΔE_{nlj}) farkına benzer şekilde artan n ve l kuantum sayılarına sahip orbitaller için küçülmektedir. Buradan da anlaşılacağı gibi serinin terimlerinden gelen katkıları da toplam rölativistik düzeltme ile orantılı olarak değişmektedir. Bu katkıları karşılaştırılacak olursa $\Delta E_{nlj}^{1-0} > \Delta E_{nlj}^{2-1} > \Delta E_{nlj}^{3-2}$ olduğu görülebilir.

4.4 Hidrojen Atomu İçin Belirlenen Enerji Seviyeleri



Şekil 1. Hidrojen için rölativistik olmayan, quasirölativistik ve rölativistik enerji seviyeleri için ölçeksiz diyagram.

Yukarıda H atomu için elde edilen sayısal verileri somutlaştırmak amacıyla bu verilere bağlı olarak H atomunun enerji seviyelerini bir enerji diyagramı ile Şekil 1'deki gibi gösterebiliriz. Burada çizimler yapılırken hesaplamaların sayısal değerleri

göz önünde bulundurulmuş ancak belirli bir ölçek kullanılmamıştır. Şekil-1’de ilk sütun $E_{nlj}^0 = E_n$ serinin ilk terimi, ortada E_{nlj}^1, E_{nlj}^2 ve E_{nlj}^3 serinin 2., 3. ,4. terimleri, sonda ise E_{nlj}^∞ serinin tüm terimleri dikkate alındığında belirlenen rölativistik olmayan, quasirölativistik ve rölativistik enerji seviyelerini göstermektedir.

İlk terim dikkate alındığında elde edilen enerji seviyeleri en üstte çizilmiştir. Çünkü sayısal değerleri rölativistik etkiler dikkate alınmadan hesaplandığı için diğerlerine göre büyüktür. Şekilde serinin dikkate alınan terimleri arttıkça enerji için daha düşük değerler elde edildiğinden enerji seviyeleri de aşağıya düşmektedir. Burada dikkat edilirse bu seviyeler arası fark 2. ve 3. terimde fazla daha sonraki terimde ise oldukça azdır. Buna göre serinin ilk birkaç terimi ile rölativistik etkilerin çoğu dikkate alınabilmektedir. Sonraki terimlerin katkısı çok daha az olmaktadır. Eğer serinin tüm terimleri dikkate alınırsa değeri en düşük olan rölativistik enerji değerleri elde edilir ve bunları gösteren enerji seviyeleri diğer tüm seviyelerden altta çizilmiştir.

Literatürden de bilindiği gibi rölativistik olmayan durumda her n baş kuantum sayısı için n^2 katlılık bulunur ve burada rölativistik olmayan durum için tek çizgi ile gösterilen değerler aslında katlı değerlerdir. Quasirölativistik ve rölativistik enerji seviyelerine bakılacak olursa bu katlılık azalmıştır. $n=1$ için $1s$ enerji seviyesinde katlılık olmadığından serinin sonraki terimleri dikkate alındığında yarılımlar ortaya çıkmaz sadece enerji seviyeleri aşağı düşmektedir. Ancak $n > 1$ durumunda serinin terimlerinin dikkate alınması ile belirlenen quasirölativistik enerji seviyelerinde bu katlılık kısmen azalır yani yarılımlar görülmektedir. Açık olarak incelersek rölativistik olmayan durumda $n=2$ için $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ ve $2p_{3/2}$ orbitallerinin enerji değerleri aynıdır, rölativistik etkiler dikkate alındığında $2p_{3/2}$ orbitali için ayrı ve $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ orbitalleri için ayrı olmak üzere iki farklı enerji değeri hesaplanır ve burada enerji seviyeleri ikiye ayrılmış olarak gösterilmiştir. $n=3$ için ise rölativistik olmayan durumda $3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}, 3d_{3/2}$ ve $3d_{5/2}$ orbitallerinin enerji seviyeleri aynıdır. Rölativistik etkilerin dikkate alınması ile bunlar da yarılmaya uğrayarak $3s_{1/2}, 3p_{1/2}$ orbitali için ayrı, $3p_{3/2}, 3d_{3/2}$ orbitali için ayrı ve $3d_{5/2}$ orbitali için ayrı olmak üzere 3 farklı enerji değeri alır ve üç farklı enerji seviyesi ile gösterilmiştir. Buradaki 3 enerji seviyesinden ikisi hala katlıdır ve Şekil

1'de buna göre gösterilmiştir. Genel ifadeyle n ve j kuantum sayısı aynı olan, l kuantum sayısı farklı olan durumlar aynı enerji değerlerine sahiptir ve l kuantum sayısına göre dejenere vardır denir.

Orbitallerin quasirölativistik ve rölativistik enerji seviyelerinin dizilimi de hesaplanan enerji değerlerine göre çizilmiştir. Buna göre $n = 2$ durumunda $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ enerji seviyeleri $2p_{3/2}$ enerji seviyelerinden daha aşağıda çizilmiştir. $n = 3$ durumunda en altta $3s_{1/2}, 3p_{1/2}$ enerji seviyeleri, $3p_{3/2}, 3d_{3/2}$ ondan üstte ve en üstte $3d_{5/2}$ çizilmiştir. Bu durumda çekirdeğe yakın olan orbitallerde rölativistik etkilerin daha fazla olduğu görülmektedir. Böylece H atomu için ince yapı dikkate alınarak belirlenen quasirölativistik ve rölativistik enerji seviyelerinin doğası şematik olarak gösterilmiştir.

4.5 H-benzeri Atomlar İçin Orbital Enerjileri

Bilindiği gibi çok elektronlu atomların ve moleküllerin incelenebilmesi için H-benzeri atomlar bir model oluşturmaktadır. Bu nedenle H-benzeri atomlar için rölativistik enerji değerlerinin incelenmesi önemlidir.

İncelediğimiz Dirac denklemi çözümü H-benzeri atomlar için olduğundan istediğimiz atom numarasına sahip H-benzeri atom modeli için incelemeler yapılabilir ve atom numarası değişiminin rölativistik etkileri nasıl değiştirdiği de bulunabilir. Böylece Hidrojen atomunun incelenmesinde olduğu gibi seri yönteminden elde edilen denklemler kullanılarak H-benzeri atomlar için $1 \leq n \leq 4$, $0 \leq l \leq 3$, $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ kuantum sayılarına sahip orbitallerin rölativistik olmayan $E_n \equiv E_{nl}^0$, quasirölativistik $E_{nl}^1, E_{nl}^2, E_{nl}^3$, rölativistik E_{nl}^∞ enerjileri ile rölativistik ve rölativistik olmayan enerjiler arası fark $\Delta E_{nl} = E_{nl}^0 - E_{nl}^\infty$ değerleri eV biriminde hesaplanarak Çizelge (4-12)'de verilmiştir. Bu çalışmada hesaplamalar ($2 \leq Z \leq 10$) atom numarasına sahip H-benzeri atomlar için yapılmıştır.

Çizelge 4. He^{+1} iyonunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	54.40182053596883	54.40471746428205	54.404717772808254	54.404717772849324	54.4047177728542	0.002897236885367249
$2s_{1/2}$		0	1/2	1	13.600455133992208	13.601360424090087	13.601360525325248	13.601360525339015	13.601360525366742	0.0009053913745340481
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	13.600455133992208	13.601360424090087	13.601360525325248	13.601360525339015	13.601360525366742	0.0009053913745340481
$2p_{3/2}$		1	3/2	2	13.600455133992208	13.600636192011782	13.600636196832504	13.600636196832665	13.60063619681069	0.00018106281848240258
$3s_{1/2}$		0	1/2	1	6.044646726218759	6.04496860714245	6.044968639730264	6.044968639734458	6.044968639726906	0.00032191350814692044
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	6.044646726218759	6.04496860714245	6.044968639730264	6.044968639734458	6.044968639726906	0.00032191350814692044
$3p_{3/2}$	3	2	3/2	2	6.044646726218759	6.044754019859989	6.0447540229283225	6.044754022928428	6.044754022854447	0.00010729663568831427
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	6.044646726218759	6.044754019859989	6.0447540229283225	6.044754022928428	6.044754022854447	0.00010729663568831427
$3d_{5/2}$			5/2	3	6.044646726218759	6.044682490765835	6.044682491189054	6.04468249118906	6.044682491174906	0.00003576495614687758
$4s_{1/2}$		0	1/2	1	3.400113783498052	3.4002608931389573	3.4002609067725613	3.4002609067742378	3.400260906693664	0.00014712319561205334
$4p_{1/2}$		1	1/2	1	3.400113783498052	3.4002608931389573	3.4002609067725613	3.4002609067742378	3.400260906693664	0.00014712319561205334
$4p_{3/2}$		1	3/2	2	3.400113783498052	3.4001703641291687	3.4001703657109688	3.400170365711022	3.40017036573758	0.00005658223952798025
$4d_{3/2}$	4	2	3/2	2	3.400113783498052	3.4001703641291687	3.4001703657109688	3.400170365711022	3.40017036573758	0.00005658223952798025
$4d_{5/2}$			5/2	3	3.400113783498052	3.4001401877925734	3.4001401881245563	3.4001401881245603	3.4001401880843147	0.00002640458626279596
$4f_{3/2}$		3	5/2	3	3.400113783498052	3.4001401877925734	3.4001401881245563	3.4001401881245603	3.4001401880843147	0.00002640458626279596
$4f_{7/2}$			7/2	4	3.400113783498052	3.400125099624275	3.400125099699599	3.400125099699593	3.4001250997680836	0.000011316270031702658

Çizelge 5. Li^{+2} iyonunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	122.40409620592987	122.40409620592987	122.41876541982187	122.41876542087451	122.41876542089676	0.014669214966886557
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	30.60102405148247	30.60560708260299	30.605608235734753	30.605608236087555	30.605608236084983	0.004584184602514085
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	30.60102405148247	30.60560708260299	30.605608235734753	30.605608236087555	30.605608236084983	0.004584184602514085
$2p_{3/2}$	2	1	3/2	2	30.60102405148247	30.601940657706574	30.60194071261761	30.601940712621722	30.601940712641802	0.0009166611593336427
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	13.600455133992208	13.602084656168392	13.602085027363986	13.602085027471448	13.60208502745927	0.0016298934670615495
$3p_{1/2}$	3	1	1/2	1	13.600455133992208	13.602084656168392	13.602085027363986	13.602085027471448	13.60208502745927	0.0016298934670615495
$3p_{3/2}$	3	1	3/2	2	13.600455133992208	13.600998308050935	13.60099834300117	13.600998343003871	13.60099834294111	0.000543208948903029
$3d_{3/2}$	3	2	3/2	2	13.600455133992208	13.600998308050935	13.60099834300117	13.600998343003871	13.60099834294111	0.000543208948903029
$3d_{5/2}$	3	2	5/2	3	13.600455133992208	13.600636196832504	13.600636196832504	13.600636196832665	13.60063619681069	0.00018106281848240258
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	7.650256012870617	7.651000755427701	7.651000910722976	7.651000910765936	7.651000910723341	0.0007448978527238026
$4p_{1/2}$	4	1	1/2	1	7.650256012870617	7.651000755427701	7.651000910722976	7.651000910765936	7.651000910723341	0.0007448978527238026
$4p_{3/2}$	4	1	3/2	2	7.650256012870617	7.6505424523156496	7.650542470333334	7.650542470334712	7.650542470335477	0.0002864574648597795
$4d_{3/2}$	4	2	3/2	2	7.650256012870617	7.6505424523156496	7.650542470333334	7.650542470334712	7.650542470335477	0.0002864574648597795
$4d_{5/2}$	4	2	5/2	3	7.650256012870617	7.650389684611631	7.650389688393122	7.650389688393249	7.650389688423223	0.00013367555260579422
$4f_{5/2}$	4	3	5/2	3	7.650256012870617	7.650389684611631	7.650389688393122	7.650389688393249	7.650389688423223	0.00013367555260579422
$4f_{7/2}$	4	3	7/2	4	7.650256012870617	7.650313300759623	7.650313301617609	7.650313301617623	7.650313301635374	0.000057288764756968646

Çizelge 6. Be^{+3} iyonunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	217.60728214387532	217.65363299688684	217.65365274256405	217.65365275307872	217.65365275307855	0.04637060920322256
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	54.40182053596883	54.41630517753492	54.416311656585265	54.416311660109315	54.41631166011259	0.014491124143759748
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	54.40182053596883	54.41630517753492	54.416311656585265	54.416311660109315	54.41631166011259	0.014491124143759748
$2p_{3/2}$	3	1	3/2	2	54.40182053596883	54.40471746428205	54.404717772808254	54.404717772849324	54.4047177728542	0.002897236885367249
$3s_{1/2}$		0	1/2	1	24.178586904875036	24.18373699965409	24.18373908527432	24.183739086347742	24.18373908640497	0.005152181529933131
$3p_{1/2}$	3	1	1/2	1	24.178586904875036	24.18373699965409	24.18373908527432	24.183739086347742	24.18373908640497	0.005152181529933131
$3p_{3/2}$		1	3/2	2	24.178586904875036	24.18030360313472	24.18030379950805	24.180303799535054	24.180303799571316	0.0017168946962797804
$3d_{3/2}$	3	2	3/2	2	24.178586904875036	24.18030360313472	24.18030379950805	24.180303799535054	24.180303799571316	0.0017168946962797804
$3d_{5/2}$		2	5/2	3	24.178586904875036	24.17915913762826	24.179159164714235	24.17915916471584	24.179159164701343	0.000572259826306265
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	13.600455133992208	13.602808888246697	13.602809760797376	13.602809761226492	13.602809761217328	0.002354627225120254
$4p_{1/2}$		1	1/2	1	13.600455133992208	13.602808888246697	13.602809760797376	13.602809761226492	13.602809761217328	0.002354627225120254
$4p_{3/2}$	4	1	3/2	2	13.600455133992208	13.601360424090087	13.601360525325248	13.601360525339015	13.601360525366742	0.0009053913745340481
$4d_{3/2}$		2	3/2	2	13.600455133992208	13.601360424090087	13.601360525325248	13.601360525339015	13.601360525366742	0.0009053913745340481
$4d_{5/2}$	4	2	5/2	3	13.600455133992208	13.600877602704552	13.600877623951437	13.600877623952725	13.600877623934784	0.00042248994257576555
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	13.600455133992208	13.600877602704552	13.600877623951437	13.600877623952725	13.600877623934784	0.00042248994257576555
$4f_{7/2}$	4	7/2	4	13.600455133992208	13.600636192011782	13.600636196832504	13.600636196832665	13.60063619681069	0.00018106281848240258	

Çizelge 7. B^{+4} iyonunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	340.0113783498051	340.1245396120403	340.1246149358211	340.1246149984936	340.1246149984939	0.11323664868876904
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	85.00284458745128	85.03820748189978	85.03823219751538	85.03823221852042	85.03823221857368	0.03538763112240417
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	85.00284458745128	85.03820748189978	85.03823219751538	85.03823221852042	85.03823221857368	0.03538763112240417
$2p_{3/2}$	2	1	3/2	2	85.00284458745128	85.00991716634098	85.00991834327506	85.00991834351989	85.00991834356675	0.007073756115474339
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	37.779042038867246	37.79161551244892	37.791623468458695	37.791623474856806	37.79162347486792	0.012581436000672852
$3p_{1/2}$	3	1	1/2	1	37.779042038867246	37.79161551244892	37.791623468458695	37.791623474856806	37.79162347486792	0.012581436000672852
$3p_{3/2}$	3	1	3/2	2	37.779042038867246	37.7832331967278	37.78323394583261	37.78323394599357	37.78323394599246	0.004191907125211003
$3d_{3/2}$	3	2	3/2	2	37.779042038867246	37.7832331967278	37.78323394583261	37.78323394599357	37.78323394599246	0.004191907125211003
$3d_{5/2}$	3	2	5/2	3	37.779042038867246	37.78043909148743	37.780439194812224	37.780439194821774	37.78043919471905	0.0013971558518051097
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	21.25071114686282	21.2564576172107	21.256460945727387	21.25646094828512	21.25646094831155	0.005749801448729386
$4p_{1/2}$	4	1	1/2	1	21.25071114686282	21.2564576172107	21.256460945727387	21.25646094828512	21.25646094831155	0.005749801448729386
$4p_{3/2}$	4	1	3/2	2	21.25071114686282	21.252921327765854	21.252921713947348	21.252921714029394	21.252921714034926	0.002210567172106437
$4d_{3/2}$	4	2	3/2	2	21.25071114686282	21.252921327765854	21.252921713947348	21.252921714029394	21.252921714034926	0.002210567172106437
$4d_{5/2}$	4	2	5/2	3	21.25071114686282	21.25174256461757	21.251742645668006	21.25174264567569	21.251742645614627	0.0010314987518071916
$4f_{5/2}$	4	3	5/2	3	21.25071114686282	21.25174256461757	21.251742645668006	21.25174264567569	21.251742645614627	0.0010314987518071916
$4f_{7/2}$	4	3	7/2	4	21.25071114686282	21.251153183043428	21.251153201433024	21.251153201433983	21.251153201405256	0.00044205454243595454

Çizelge 8. C^{+5} iyonunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	489.6163848237195	489.85103601709034	489.8512609326947	489.8512612021746	489.85126120252204	0.23487637880253942
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	122.40409620592987	122.47742470385825	122.47749850429096	122.47749859460882	122.47749859468796	0.07340238875808325
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	122.40409620592987	122.47742470385825	122.47749850429096	122.47749859460882	122.47749859468796	0.07340238875808325
$2p_{3/2}$	2	1	3/2	2	122.40409620592987	122.41876190551554	122.41876541982187	122.41876542087451	122.41876542089676	0.014669214966886557
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	54.40182053596883	54.42789289078782	54.42791664730569	54.42791667481638	54.427916674858864	0.026096138890032705
$3p_{1/2}$	3	1	1/2	1	54.40182053596883	54.42789289078782	54.42791664730569	54.42791667481638	54.427916674858864	0.026096138890032705
$3p_{3/2}$	3	1	3/2	2	54.40182053596883	54.41051132090849	54.410513557723476	54.41051355841556	54.410513558382604	0.008693022413773122
$3d_{3/2}$	3	2	3/2	2	54.40182053596883	54.41051132090849	54.410513557723476	54.41051355841556	54.410513558382604	0.008693022413773122
$3d_{5/2}$	3	2	5/2	3	54.40182053596883	54.40471746428205	54.404717772808254	54.404717772849324	54.4047177728542	0.002897236885367249
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	30.60102405148247	30.61293993239583	30.612949871293388	30.612949882291172	30.612949882234684	0.011925830752215205
$4p_{1/2}$	4	1	1/2	1	30.60102405148247	30.61293993239583	30.612949871293388	30.612949882291172	30.612949882234684	0.011925830752215205
$4p_{3/2}$	4	1	3/2	2	30.60102405148247	30.60560708260299	30.605608235734753	30.605608236087555	30.605608236084983	0.004584184602514085
$4d_{3/2}$	4	2	3/2	2	30.60102405148247	30.60560708260299	30.605608235734753	30.605608236087555	30.605608236084983	0.004584184602514085
$4d_{5/2}$	4	2	5/2	3	30.60102405148247	30.60316279933871	30.603163041354023	30.60316304138707	30.603163041380917	0.0021389898984480737
$4f_{5/2}$	4	3	5/2	3	30.60102405148247	30.60316279933871	30.603163041354023	30.60316304138707	30.603163041380917	0.0021389898984480737
$4f_{7/2}$	4	3	7/2	4	30.60102405148247	30.601940657706574	30.60194071261761	30.601940712621722	30.601940712641802	0.0009166611593336427

Çizelge 9. N^{+6} iyonunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	666.4223015656181	666.8570218706207	666.8575890237402	666.8575899486528	666.8575899503667	0.43528638474856
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	166.60557539140453	166.74142548671784	166.74161158383518	166.7416118938254	166.7416118943258	0.13603650292128577
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	166.60557539140453	166.74142548671784	166.74161158383518	166.7416118938254	166.7416118943258	0.13603650292128577
$2p_{3/2}$	2	1	3/2	2	166.60557539140453	166.63274541046718	166.6327542723468	166.63275427584765	166.63275427589596	0.02717888449143402
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	74.0469223961798	74.0952246522912	74.09528455735318	74.09528465177576	74.09528465203424	0.04836225585444254
$3p_{1/2}$	3	1	1/2	1	74.0469223961798	74.0952246522912	74.09528455735318	74.09528465177576	74.09528465203424	0.04836225585444254
$3p_{3/2}$	3	1	3/2	2	74.0469223961798	74.06302314821691	74.0630287886286	74.06302879100396	74.06302879101258	0.016106394832789306
$3d_{3/2}$	3	2	3/2	2	74.0469223961798	74.06302314821691	74.0630287886286	74.06302879100396	74.06302879101258	0.016106394832789306
$3d_{5/2}$	3	2	5/2	3	74.0469223961798	74.0522893135255	74.05229009151331	74.05229009165429	74.05229009163145	0.005367695451653276
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	41.65139384785113	41.67346948833955	41.67349455052573	41.67349458827249	41.67349458836146	0.022100740510325068
$4p_{1/2}$	4	1	1/2	1	41.65139384785113	41.67346948833955	41.67349455052573	41.67349458827249	41.67349458836146	0.022100740510325068
$4p_{3/2}$	4	1	3/2	2	41.65139384785113	41.659884478808216	41.659887386575676	41.65988738778657	41.65988738770944	0.008493539858307031
$4d_{3/2}$	4	2	3/2	2	41.65139384785113	41.659884478808216	41.659887386575676	41.65988738778657	41.65988738770944	0.008493539858307031
$4d_{5/2}$	4	2	5/2	3	41.65139384785113	41.65535614229777	41.65535675256996	41.6553567526834	41.65535675269074	0.003962904839610815
$4f_{5/2}$	4	3	5/2	3	41.65139384785113	41.65535614229777	41.65535675256996	41.6553567526834	41.65535675269074	0.003962904839610815
$4f_{7/2}$	4	3	7/2	4	41.65139384785113	41.65509197404255	41.653092112507665	41.65309211252178	41.65309211248405	0.0016982646329211093

Çizelge 10. O^{+7} iyonunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	870.4291285755013	871.1707422236856	871.1720059470266	871.1720086387862	871.1720086452	0.7428800696986855
$2s_{1/2}$		0	1/2	1	217.60728214387532	217.8390364089329	217.83945106815418	217.83945197031434	217.83945197243375	0.23216982855842616
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	217.60728214387532	217.8390364089329	217.83945106815418	217.83945197031434	217.83945197243375	0.23216982855842616
$2p_{3/2}$		1	3/2	2	217.60728214387532	217.8390364089329	217.83945106815418	217.83945197031434	217.83945197243375	0.23216982855842616
$3s_{1/2}$		0	1/2	1	96.71434761950015	96.79674913596509	96.79688261565951	96.79688289045616	96.79688289106348	0.08253527156333007
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	96.71434761950015	96.79674913596509	96.79688261565951	96.79688289045616	96.79688289106348	0.08253527156333007
$3p_{3/2}$	3	1	3/2	2	96.71434761950015	96.7181479165513	96.7182735954842	96.7182736646142	96.7182736651224	0.027479747012094435
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	96.71434761950015	96.7181479165513	96.7182735954842	96.7182736646142	96.7182736651224	0.027479747012094435
$3d_{5/2}$			5/2	3	96.71434761950015	96.72350334355181	96.72350507705433	96.72350507746458	96.72350507744451	0.00915745794436873
$4s_{1/2}$		0	1/2	1	54.40182053596883	54.439480604040696	54.439536447284034	54.439536557137856	54.43953655742797	0.03771602145913988
$4p_{1/2}$		1	1/2	1	54.40182053596883	54.439480604040696	54.439536447284034	54.439536557137856	54.43953655742797	0.03771602145913988
$4p_{3/2}$	4	1	3/2	2	54.40182053596883	54.41630517753492	54.416311656585265	54.416311660109315	54.41631166011259	0.014491124143759748
$4d_{3/2}$		2	3/2	2	54.40182053596883	54.41630517753492	54.416311656585265	54.416311660109315	54.41631166011259	0.014491124143759748
$4d_{5/2}$		2	5/2	3	54.40182053596883	54.40858003336634	54.40858139516703	54.40858139549719	54.40858139546656	0.006760859497731531
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	54.40182053596883	54.40858003336634	54.40858139516703	54.40858139549719	54.40858139546656	0.006760859497731531
$4f_{7/2}$			7/2	4	54.40182053596883	54.40471746428205	54.404717772808254	54.416311660109315	54.4047177728542	0.002897236885367249

Çizelge 11. F^{+1} iyonunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	1101.6368658533688	1102.8247875198088	1102.8273494491145	1102.8273563555906	1102.827356376528	1.1904905231592693
$2s_{1/2}$		0	1/2	1	275.4092164633422	275.78044198410464	275.78128261715824	275.7812849319067	275.7812849389976	0.37206847565539647
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	275.4092164633422	275.78044198410464	275.78128261715824	275.7812849319067	275.7812849389976	0.37206847565539647
$2p_{3/2}$		1	3/2	2	275.4092164633422	275.4834615674947	275.48350159764004	275.4835016246185	275.48350162463987	0.07428516129766649
$3s_{1/2}$		0	1/2	1	122.40409620592987	122.53608750220097	122.53635810378748	122.53635880885643	122.53635881090523	0.13226260497535236
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	122.40409620592987	122.53608750220097	122.53635810378748	122.53635880885643	122.53635881090523	0.13226260497535236
$3p_{3/2}$	3	1	3/2	2	122.40409620592987	122.44809330468689	122.4481878340771	122.4481880114497	122.4481880118434	0.04402259525446084
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	122.40409620592987	122.44809330468689	122.4481878340771	122.4481880114497	122.4481880118434	0.04402259525446084
$3d_{5/2}$			5/2	3	122.40409620592987	122.41876190551554	122.41876541982187	122.41876542087451	122.41876542089676	0.014669214966886557
$4s_{1/2}$		0	1/2	1	68.85230411583555	68.91262826295944	68.91274147321444	68.9127417550757	68.91274175595633	0.060437640120781566
$4p_{1/2}$		1	1/2	1	68.85230411583555	68.91262826295944	68.91274147321444	68.9127417550757	68.91274175595633	0.060437640120781566
$4p_{3/2}$			3/2	2	68.85230411583555	68.8755057108832	68.87551884577466	68.87551885481665	68.87551885486117	0.02321473902561877
$4d_{3/2}$	4	2	3/2	2	68.85230411583555	68.8755057108832	68.87551884577466	68.87551885481665	68.87551885486117	0.02321473902561877
$4d_{5/2}$			5/2	3	68.85230411583555	68.86313152685779	68.8631342835634	68.86313428441056	68.86313428442537	0.01083016859819777
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	68.85230411583555	68.86313152685779	68.8631342835634	68.86313428441056	68.86313428442537	0.01083016859819777
$4f_{7/2}$			7/2	4	68.85230411583555	68.85694443484508	68.8569450603161	68.85694506042148	68.85694506045331	0.004640944617761988

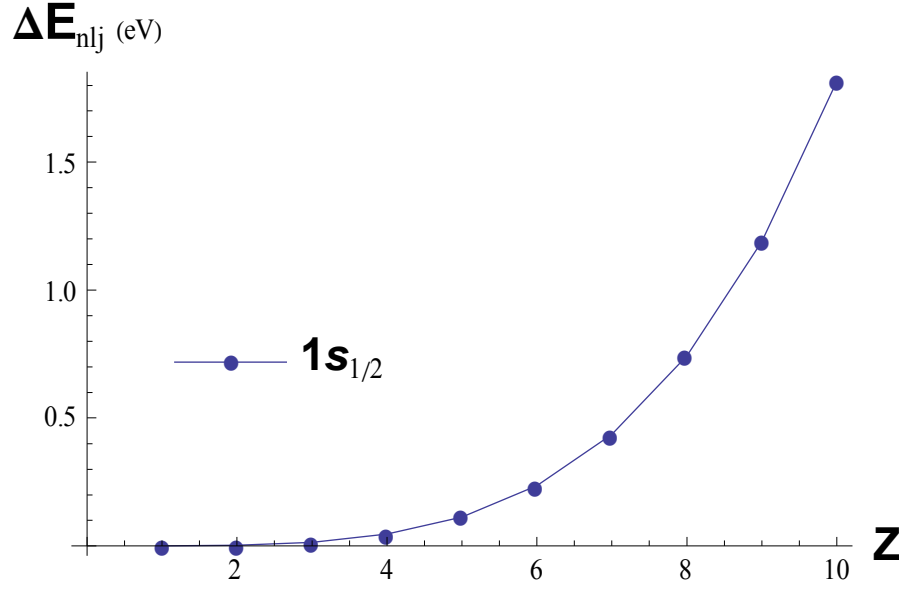
Çizelge 12. Ne^{+9} iyonunun $-E_{nlj}^0$, $-E_{nlj}^\infty$, $0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$ enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri

AO	n	l	j	τ	$-E_{nlj}^0$	$-E_{nlj}^1$	$-E_{nlj}^2$	$-E_{nlj}^3$	$-E_{nlj}^\infty$	$\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	1360.0455133992205	1361.8560935949836	1361.8609143169563	1361.8609303610954	1361.8609304211388	1.8154170219183925
$2s_{1/2}$		0	1/2	1	340.0113783498051	340.57718466098106	340.5787664603784	340.5787718376719	340.5787718580403	0.5673935082351704
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	340.0113783498051	340.57718466098106	340.5787664603784	340.5787718376719	340.5787718580403	0.5673935082351704
$2p_{3/2}$		1	3/2	2	340.0113783498051	340.1245396120403	340.1246149358211	340.1246149984936	340.1246149984939	0.113233664868876904
$3s_{1/2}$		0	1/2	1	151.11616815546898	151.31734373277595	151.31785291740132	151.31785455531696	151.3178545612399	0.20168640577091423
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	151.11616815546898	151.31734373277595	151.31785291740132	151.31785455531696	151.3178545612399	0.20168640577091423
$3p_{3/2}$	3	1	3/2	2	151.11616815546898	151.18322668123795	151.18327462394618	151.18327466515083	151.18327466525253	0.06710650978354238
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	151.11616815546898	151.18322668123795	151.18327462394618	151.18327466515083	151.18327466525253	0.06710650978354238
$3d_{5/2}$			5/2	3	151.11616815546898	151.13852099739196	151.1385276101793	151.13852761262467	151.13852761252926	0.022359457060275645
$4s_{1/2}$		0	1/2	1	85.00284458745128	85.09478811301737	85.09500113808501	85.095000179286489	85.09500179518733	0.09215720773605085
$4p_{1/2}$		1	1/2	1	85.00284458745128	85.09478811301737	85.09500113808501	85.09500179286489	85.09500179518733	0.09215720773605085
$4p_{3/2}$			3/2	2	85.00284458745128	85.03820748189978	85.03823219751538	85.03823221852042	85.03823221857368	0.03538763112240417
$4d_{3/2}$	4	2	3/2	2	85.00284458745128	85.03820748189978	85.03823219751538	85.03823221852042	85.03823221857368	0.03538763112240417
$4d_{5/2}$			5/2	3	85.00284458745128	85.01934727152727	85.01935245875522	85.0193524607232	85.01935246064032	0.01650787318904179
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	85.00284458745128	85.01934727152727	85.01935245875522	85.0193524607232	85.01935246064032	0.01650787318904179
$4f_{7/2}$			7/2	4	85.00284458745128	85.00991716634098	85.00991834327506	85.00991834351989	85.00991834356675	0.007073756115474339

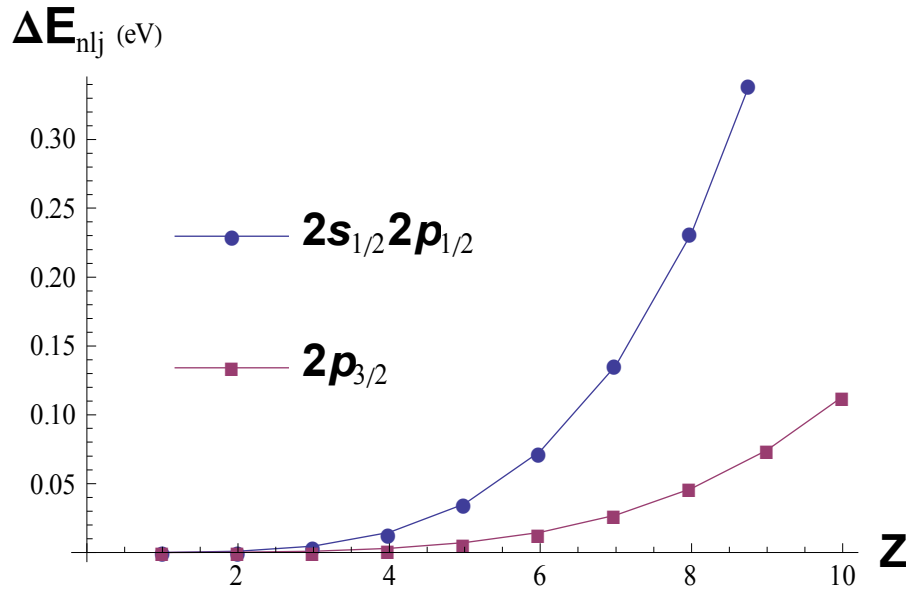
Yukarıda Çizelge (4-12)'de $2 \leq Z \leq 10$ atom numarasına sahip H-benzeri atomların orbital enerjileri gösterilmiştir. Buradaki veriler incelenirse çizelgede atom orbitallerine göre dizilimler Hidrojen atomu için oluşturulan Çizelge3'teki gibidir ve benzer özellikler görülmektedir. Yani atom orbitallerinin enerjileri için ince yapıya göre yarılmalara, serinin terimlerinden gelen katkılardan kaynaklı düşmeler, çekirdeğe yakın olan durumlarda büyük ve çekirdekten uzak durumlarda daha küçük değerlerin bulunduğu burada da görülmektedir. Tablodaki veriler incelenecek olursa burada atom numarası arttıkça 1., 2., 3. yaklaşımdan bulunan ve rölativistik enerji değerlerinin rölativistik olmayan enerji değerinden farkının daha büyük olduğu görülebilmektedir. Bu değerler artan atom numarasının rölativistik katkıları nasıl etkilediğinin belirlenmesi için önemlidir. Burada rölativistik olmayan ve rölativistik enerji değerleri arası fark buradaki çizelgelerde verilmiştir. Quasirölativistik enerji değerlerinin farkı da belirlenmiştir ve Çizelge (13-21)'de verilmiştir.

Bu nedenle $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farklarının Z atom numarasına göre değişiminin incelenebilmesi için atom numarası $1 \leq Z \leq 10$ olan Hidrojen ve H-benzeri atomlar için Çizelge 2 ve Çizelge (4-12)'de verilen $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ fark değerlerinin atom numarasına göre değişimleri

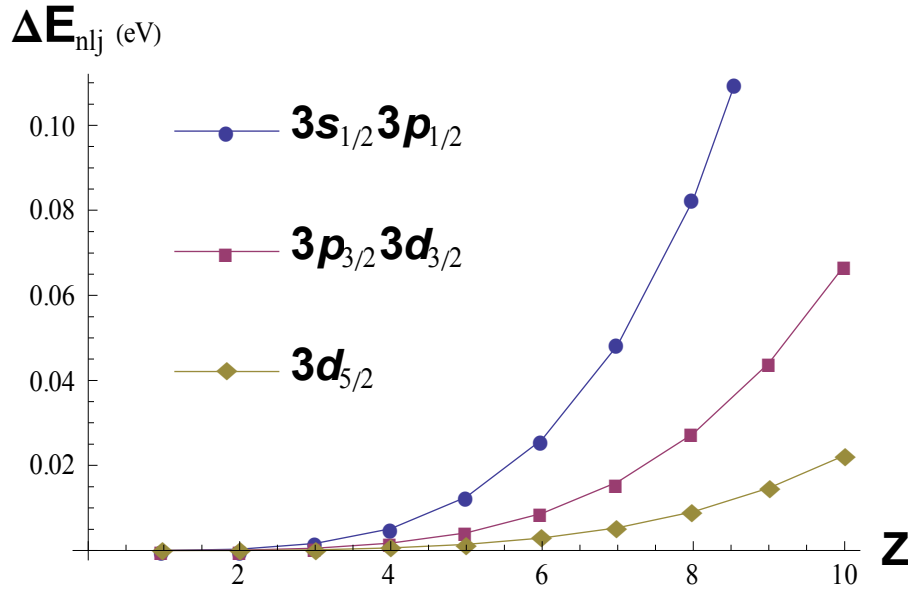
$1s_{1/2}; 2s_{1/2}; 2p_{1/2}; 2p_{3/2}; 3s_{1/2}; 3p_{1/2}; 3p_{3/2}; 3d_{3/2}; 3d_{5/2}; 4s_{1/2}; 4p_{1/2}; 4p_{3/2}; 4d_{3/2}; 4d_{5/2}; 4f_{5/2}; 4f_{7/2}$ orbitalleri için Şekil (2-5) ile verilen grafiklerde gösterilmiştir. Burada gösterilen orbitallerden “;” işareti ile ayrılan orbitallerin enerji değerleri ince yapıya göre yarılmaya uğradıktan sonra değerleri birbirine eşit kalan durumlardır ve grafiklerde de bu orbitaller aynı eğri ile gösterilmektedir.



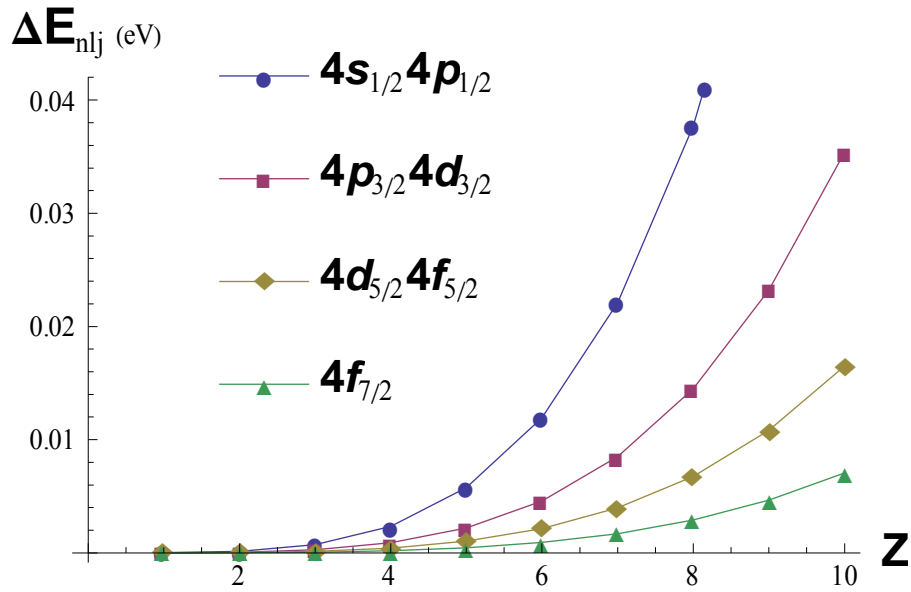
Şekil 2. $n = 1, l = 0$ ve $j = \frac{1}{2}$ durumlarında $\Delta E_{n,l,j}$ değerinin Z 'ye göre değişimi.



Şekil 3. $n = 2, 0 \leq l \leq 1$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2}$ durumlarında $\Delta E_{n,l,j}$ değerlerinin Z 'ye göre değişimi.



Şekil 4. $n = 3$, $0 \leq l \leq 2$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{5}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj} değerlerinin Z 'ye göre değişimi.



Şekil 5. $n = 4$, $0 \leq l \leq 3$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj} değerlerinin Z 'ye göre değişimi.

Şekil (2-5)'te ΔE_{nlj} 'nin Z atom numarasına göre değişimi görülmektedir. Elde edilen grafikler incelenirse ΔE_{nlj} farkının, Z atom numarasının büyük değerlerinde ve yine beklediğimiz gibi $n > 1$ için çizilen grafiklerde ortaya çıkan l kuantum sayısının küçük değerlerinde belirgin olduğu açık olarak görülebilir. Ayrıca çizilen grafikler birbiri ile karşılaştırıldığında belli bir Z atom numarasındaki ΔE_{nlj} değerinin n kuantum sayısı arttıkça hızla azaldığı görülmektedir.

4.6. H-Benzeri Atomlar Quasirölativistik Enerjiler Arasındaki Fark

Daha önce de bahsettiğimiz gibi rölativistik etkileri inceleyebilmek için seride terimlerden gelen katkıların belirlenmesi önemlidir. Bu nedenle H-benzeri atomlar için serinin terimleri dikkate alınarak (3.2.17) formülü ile belirlenen bu enerjiler arası farklar $\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)}$ eV biriminde hesaplanarak Çizelge (13-21)'e kaydedilmiştir.

Çizelge 13. He^{+1} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları ($\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)}$)

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	0.00289693	3.08526×10^{-7}	4.10694×10^{-11}
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.00090529	1.01235×10^{-7}	1.37668×10^{-11}
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.00090529	1.01235×10^{-7}	1.37668×10^{-11}
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.000181058	4.82072×10^{-9}	1.61648×10^{-13}
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.000321881	3.25878×10^{-8}	4.19398×10^{-12}
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	0.000321881	3.25878×10^{-8}	4.19398×10^{-12}
$3p_{3/2}$			3/2	2	0.000107294	3.06833×10^{-9}	1.05693×10^{-13}
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.000107294	3.06833×10^{-9}	1.05693×10^{-13}
$3d_{5/2}$	5/2		3	0.0000357645	4.23219×10^{-10}	6.21725×10^{-15}	
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	0.00014711	1.36336×10^{-8}	1.67644×10^{-12}
$4p_{1/2}$		1	1/2	1	0.00014711	1.36336×10^{-8}	1.67644×10^{-12}
$4p_{3/2}$			3/2	2	0.0000565806	1.5818×10^{-9}	5.32907×10^{-14}
$4d_{3/2}$		2	3/2	2	0.0000565806	1.5818×10^{-9}	5.32907×10^{-14}
$4d_{5/2}$			5/2	3	0.0000264043	3.31983×10^{-10}	3.9968×10^{-15}
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	0.0000264043	3.31983×10^{-10}	3.9968×10^{-15}
$4f_{7/2}$	7/2		4	0.0000113161	7.53237×10^{-11}	4.44089×10^{-16}	

Çizelge 14. Li^{+2} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları ($\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)}$)

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	0.0146657	3.51431×10^{-6}	1.05264×10^{-9}
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.00458303	1.15313×10^{-6}	3.52802×10^{-10}
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.00458303	1.15313×10^{-6}	3.52802×10^{-10}
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.000916606	5.4911×10^{-8}	4.11404×10^{-12}
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.00162952	3.71196×10^{-7}	1.07462×10^{-10}

$3p_{1/2}$	3	1	1/2	1	0.00162952	3.71196×10^{-7}	1.07462×10^{-10}
$3p_{3/2}$			3/2	2	0.000543174	3.49502×10^{-8}	2.70184×10^{-12}
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.000543174	3.49502×10^{-8}	2.70184×10^{-12}
$3d_{5/2}$			5/2	3	0.000181058	4.82072×10^{-9}	1.61648×10^{-13}
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	0.000744743	1.55295×10^{-7}	4.29603×10^{-11}
$4p_{1/2}$			1	1/2	1	0.000744743	1.55295×10^{-7}
$4p_{3/2}$		3/2		2	0.000286439	1.80177×10^{-8}	1.37845×10^{-12}
$4d_{3/2}$		2	3/2	2	0.000286439	1.80177×10^{-8}	1.37845×10^{-12}
$4d_{5/2}$			5/2	3	0.000133672	3.78149×10^{-9}	1.2701×10^{-13}
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	0.000133672	3.78149×10^{-9}	1.2701×10^{-13}
$4f_{7/2}$			7/2	4	0.0000572879	8.57986×10^{-10}	1.42109×10^{-14}

Çizelge 15. Be^{+3} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	0.0463509	0.0000197457	1.05147×10^{-8}
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.0144846	6.47905×10^{-6}	3.52405×10^{-9}
$2p_{1/2}$			1	1/2	1	0.0144846	6.47905×10^{-6}
$2p_{3/2}$				3/2	2	0.00289693	3.08526×10^{-7}
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.00515009	2.08562×10^{-6}	1.07342×10^{-9}
$3p_{1/2}$			1	1/2	1	0.00515009	2.08562×10^{-6}
$3p_{3/2}$		3/2		2	0.0017167	1.96373×10^{-7}	2.70042×10^{-11}
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.0017167	1.96373×10^{-7}	2.70042×10^{-11}
$3d_{5/2}$				5/2	3	0.000572233	2.7086×10^{-8}
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	0.00235375	8.72551×10^{-7}	4.29116×10^{-10}
$4p_{1/2}$			1	1/2	1	0.00235375	8.72551×10^{-7}
$4p_{3/2}$		3/2		2	0.00090529	1.01235×10^{-7}	1.37668×10^{-11}
$4d_{3/2}$		2	3/2	2	0.00090529	1.01235×10^{-7}	1.37668×10^{-11}
$4d_{5/2}$			5/2	3	0.000422469	2.12469×10^{-8}	1.28786×10^{-12}
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	0.000422469	2.12469×10^{-8}	1.28786×10^{-12}
$4f_{7/2}$			7/2	4	0.000181058	4.82072×10^{-9}	1.61648×10^{-13}

Çizelge 16. B^{+4} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	0.113161	0.0000753238	6.26725×10^{-8}
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.0353629	0.0000247156	2.1005×10^{-8}
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0353629	0.0000247156	2.1005×10^{-8}
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.00707258	1.17693×10^{-6}	2.44825×10^{-10}
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.0125735	7.95601×10^{-6}	6.39811×10^{-9}
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0125735	7.95601×10^{-6}	6.39811×10^{-9}
$3p_{3/2}$			3/2	2	0.00419116	7.49105×10^{-7}	1.60959×10^{-10}
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.00419116	7.49105×10^{-7}	1.60959×10^{-10}
$3d_{5/2}$			5/2	3	0.00139705	1.03325×10^{-7}	9.54969×10^{-12}
$4s_{1/2}$		4	0	1/2	1	0.00574647	3.32852×10^{-6}
$4p_{1/2}$	1		1/2	1	0.00574647	3.32852×10^{-6}	2.55773×10^{-9}
$4p_{3/2}$			3/2	2	0.00221018	3.86181×10^{-7}	8.20464×10^{-11}
$4d_{3/2}$	2		3/2	2	0.00221018	3.86181×10^{-7}	8.20464×10^{-11}
$4d_{5/2}$			5/2	3	0.00103142	8.10504×10^{-8}	7.68452×10^{-12}
$4f_{5/2}$	3		5/2	3	0.00103142	8.10504×10^{-8}	7.68452×10^{-12}
$4f_{7/2}$			7/2	4	0.000442036	1.83896×10^{-8}	9.59233×10^{-13}

Çizelge 17. C^{+5} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	0.234651	0.000224916	2.6948×10^{-7}
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.0733285	0.0000738004	9.03179×10^{-8}
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0733285	0.0000738004	9.03179×10^{-8}
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.0146657	3.51431×10^{-6}	1.05264×10^{-9}
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.0260724	0.0000237565	2.75107×10^{-8}
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0260724	0.0000237565	2.75107×10^{-8}
$3p_{3/2}$			3/2	2	0.00869078	2.23681×10^{-6}	6.92083×10^{-10}
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.00869078	2.23681×10^{-6}	6.92083×10^{-10}
$3d_{5/2}$			5/2	3	0.00289693	3.08526×10^{-7}	4.10694×10^{-11}
$4s_{1/2}$		4	0	1/2	1	0.0119159	9.9389×10^{-6}

$4p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0119159	9.9389×10^{-6}	1.09978×10^{-8}
$4p_{3/2}$			3/2	2	0.00458303	1.15313×10^{-6}	3.52802×10^{-10}
$4d_{3/2}$		2	3/2	2	0.00458303	1.15313×10^{-6}	3.52802×10^{-10}
$4d_{5/2}$			5/2	3	0.00213875	2.42015×10^{-7}	3.30473×10^{-11}
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	0.00213875	2.42015×10^{-7}	3.30473×10^{-11}
$4f_{7/2}$			7/2	4	0.000916606	5.4911×10^{-8}	4.11404×10^{-12}

Çizelge 18. N^{+6} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	0.43472	0.000567153	9.24913×10^{-7}
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.13585	0.000186097	3.0999×10^{-7}
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.13585	0.000186097	3.0999×10^{-7}
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.02717	8.86177×10^{-6}	3.61297×10^{-9}
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.0483023	0.0000599051	9.44226×10^{-8}
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0483023	0.0000599051	9.44226×10^{-8}
$3p_{3/2}$			3/2	2	0.0161008	5.64041×10^{-6}	2.37536×10^{-9}
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.0161008	5.64041×10^{-6}	2.37536×10^{-9}
$3d_{5/2}$			5/2	3	0.00536692	7.77988×10^{-7}	1.40972×10^{-10}
$4s_{1/2}$		4	0	1/2	1	0.0220756	0.0000250622
$4p_{1/2}$	1		1/2	1	0.0220756	0.0000250622	3.77468×10^{-8}
$4p_{3/2}$			3/2	2	0.00849063	2.90777×10^{-6}	1.21089×10^{-9}
$4d_{3/2}$	2		3/2	2	0.00849063	2.90777×10^{-6}	1.21089×10^{-9}
$4d_{5/2}$			5/2	3	0.00396229	6.10272×10^{-7}	1.13445×10^{-10}
$4f_{5/2}$	3		5/2	3	0.00396229	6.10272×10^{-7}	1.13445×10^{-10}
$4f_{7/2}$		7/2	4	0.00169813	1.38465×10^{-7}	1.41185×10^{-11}	

Çizelge 19. O^{+7} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	0.741614	0.00126372	2.69176×10^{-6}
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.231754	0.000414659	9.0216×10^{-7}
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.231754	0.000414659	9.0216×10^{-7}
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.0463509	0.0000197457	1.05147×10^{-8}

$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.0824015	0.00013348	2.74797×10^{-7}
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0824015	0.00013348	2.74797×10^{-7}
$3p_{3/2}$			3/2	2	0.0274672	0.0000125679	6.913×10^{-9}
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.0274672	0.0000125679	6.913×10^{-9}
$3d_{5/2}$			5/2	3	0.00915572	1.7335×10^{-6}	4.10253×10^{-10}
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	0.0376601	0.0000558432	1.09854×10^{-7}
$4p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0376601	0.0000558432	1.09854×10^{-7}
$4p_{3/2}$			3/2	2	0.0144846	6.47905×10^{-6}	3.52405×10^{-9}
$4d_{3/2}$		2	3/2	2	0.0144846	6.47905×10^{-6}	3.52405×10^{-9}
$4d_{5/2}$			5/2	3	0.0067595	1.3598×10^{-6}	3.30154×10^{-10}
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	0.0067595	1.3598×10^{-6}	3.30154×10^{-10}
$4f_{7/2}$			7/2	4	0.00289693	3.08526×10^{-7}	4.10694×10^{-11}

Çizelge 20. F^{+8} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları ($\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)}$)

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	1.18792	0.00256193	6.90648×10^{-6}
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.371226	0.000840633	2.31475×10^{-6}
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.371226	0.000840633	2.31475×10^{-6}
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.0742451	0.0000400301	2.69785×10^{-8}
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.131991	0.000270602	7.05069×10^{-7}
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	0.131991	0.000270602	7.05069×10^{-7}
$3p_{3/2}$			3/2	2	0.0439971	0.0000254787	1.77373×10^{-8}
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.0439971	0.0000254787	1.77373×10^{-8}
$3d_{5/2}$			5/2	3	0.0146657	3.51431×10^{-6}	1.05264×10^{-9}
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	1	0.0603241	0.00011321	2.81861×10^{-7}
$4p_{1/2}$		1	1/2	1	0.0603241	0.00011321	2.81861×10^{-7}
$4p_{3/2}$			3/2	2	0.0232016	0.0000131349	9.04198×10^{-9}
$4d_{3/2}$		2	3/2	2	0.0232016	0.0000131349	9.04198×10^{-9}
$4d_{5/2}$			5/2	3	0.0108274	2.75671×10^{-6}	8.47166×10^{-10}
$4f_{5/2}$		3	5/2	3	0.0108274	2.75671×10^{-6}	8.47166×10^{-10}
$4f_{7/2}$			7/2	4	0.00464032	6.25471×10^{-7}	1.05388×10^{-10}

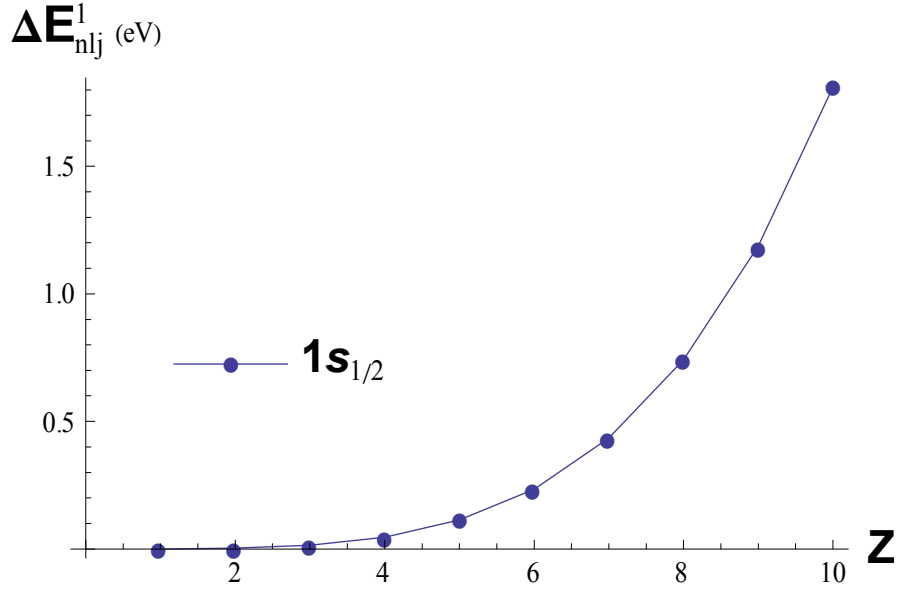
Çizelge 21. Ne^{+9} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji değerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$

AO	n	l	j	τ	ΔE_{nlj}^{1-0}	ΔE_{nlj}^{2-1}	ΔE_{nlj}^{3-2}	
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	1	1.81058	0.00482072	0.0000160441	
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	0.565806	0.0015818	5.37729×10^{-6}	
$2p_{1/2}$		1	1/2	1	0.565806	0.0015818	5.37729×10^{-6}	
$2p_{3/2}$			3/2	2	0.113161	0.0000753238	6.26725×10^{-8}	
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	1	0.201176	0.000509185	1.63792×10^{-6}	
$3p_{1/2}$		1	1/2	1	0.201176	0.000509185	1.63792×10^{-6}	
$3p_{3/2}$			3/2	2	0.0670585	0.0000479427	4.12047×10^{-8}	
$3d_{3/2}$		2	3/2	2	0.0670585	0.0000479427	4.12047×10^{-8}	
$3d_{5/2}$			5/2	3	0.0223528	6.61279×10^{-6}	2.44538×10^{-9}	
$4s_{1/2}$			4	0	1/2	1	0.0919435	0.000213025
$4p_{1/2}$		1		1/2	1	0.0919435	0.000213025	6.5478×10^{-7}
$4p_{3/2}$	3/2			2	0.0353629	0.0000247156	2.1005×10^{-8}	
$4d_{3/2}$	2	3/2		2	0.0353629	0.0000247156	2.1005×10^{-8}	
$4d_{5/2}$		5/2		3	0.0165027	5.18723×10^{-6}	1.96798×10^{-9}	
$4f_{5/2}$	3	5/2		3	0.0165027	5.18723×10^{-6}	1.96798×10^{-9}	
$4f_{7/2}$		7/2		4	0.00707258	1.17693×10^{-6}	2.44825×10^{-10}	

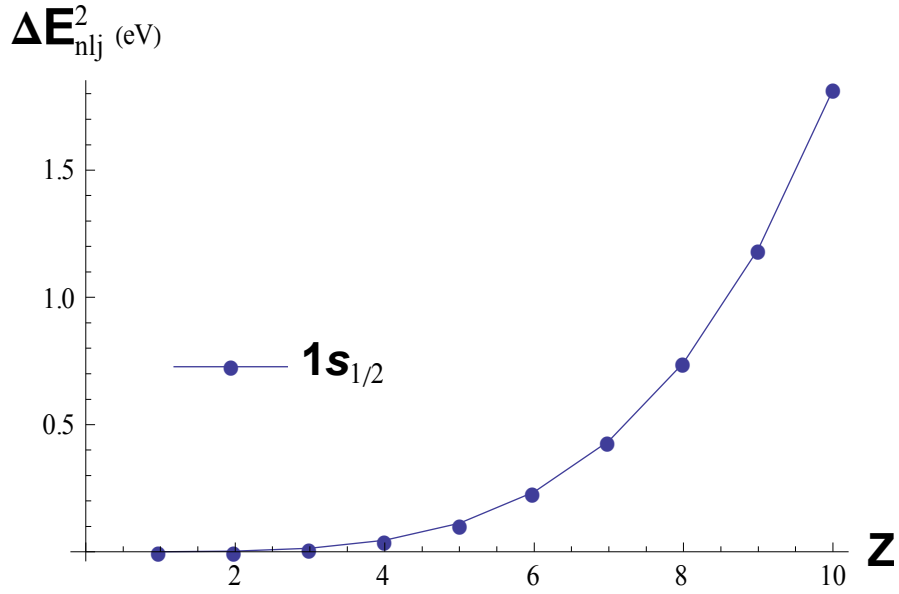
Burada bu katkıların değerleri de atom orbitallerinde ince yapıya göre yarılmaları yansıtmaktadır. Ayrıca katkılar n ve l kuantum sayılarının büyük olduğu durumlarda küçük, küçük olduğu durumlarda büyük değer alır ve yüksek dereceli terimlerin enerjiye katkılarına bakacak olursak daha yüksek dereceli terimlerden gelen katkıların daha küçük olduğu görülür. Bu çizelgelerdeki veriler karşılaştırılırsa Z atom numarasına göre artan atom numarasının bu katkıları arttırdığı görülmektedir.

4.7 H-Benzeri Atomlarda Quasirölativistik ve Rölativistik Olmayan Enerjiler Arası Fark

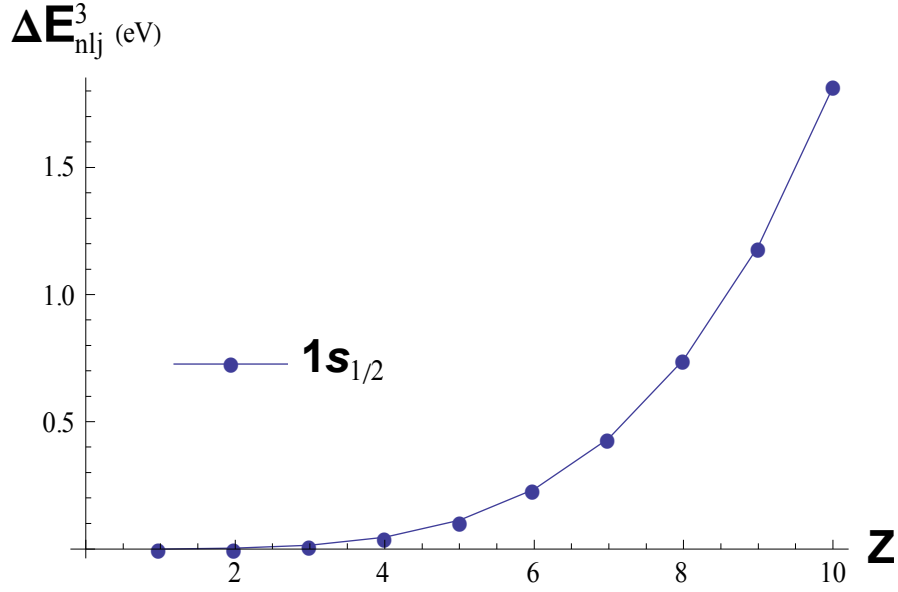
$1 \leq Z \leq 10$ atom numarasına sahip Hidrojen ve H-benzeri atomlar için (3.2.16) denkleminde hesaplanan değerleri Çizelge (13-21) de verilen Quasirölativistik enerjiler ile rölativistik olmayan enerji farkları (ΔE_{nlj}^s) 'nin atom numarası Z 'ye göre değişimleri Şekil (6-17) de çizilen grafikler ile verilmiştir. Buradaki grafikler $1 \leq n \leq 4$ baş kuantum sayıları için çizilmiştir.



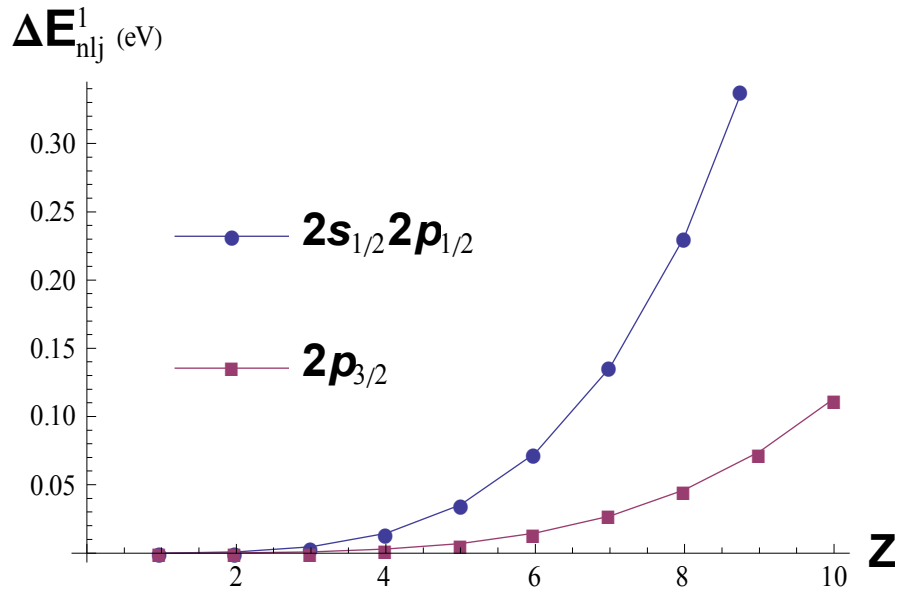
Şekil 6. $n = 1, l = 0$ ve $j = \frac{1}{2}$ durumlarında ΔE^1_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.



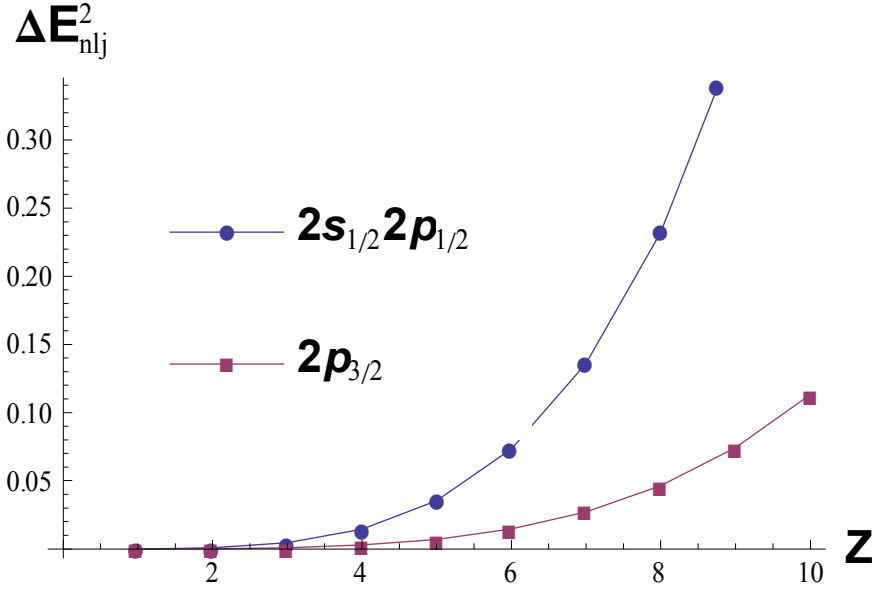
Şekil 7. $n = 1, l = 0$ ve $j = \frac{1}{2}$ durumlarında ΔE^2_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.



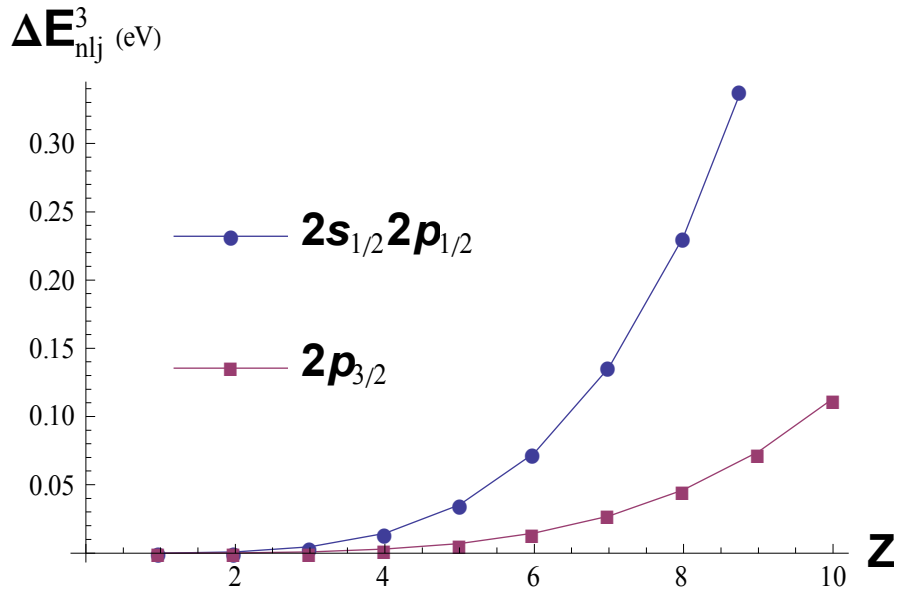
Şekil 8. $n = 1, l = 0$ ve $j = \frac{1}{2}$ durumlarında ΔE^3_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.



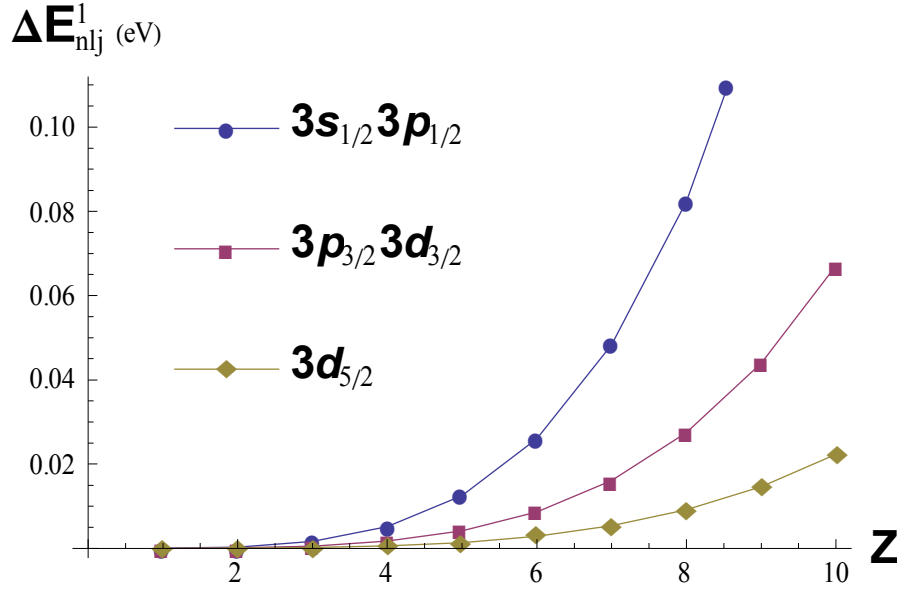
Şekil 9. $n = 2, 0 \leq l \leq 1$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2}$ durumlarında ΔE^1_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.



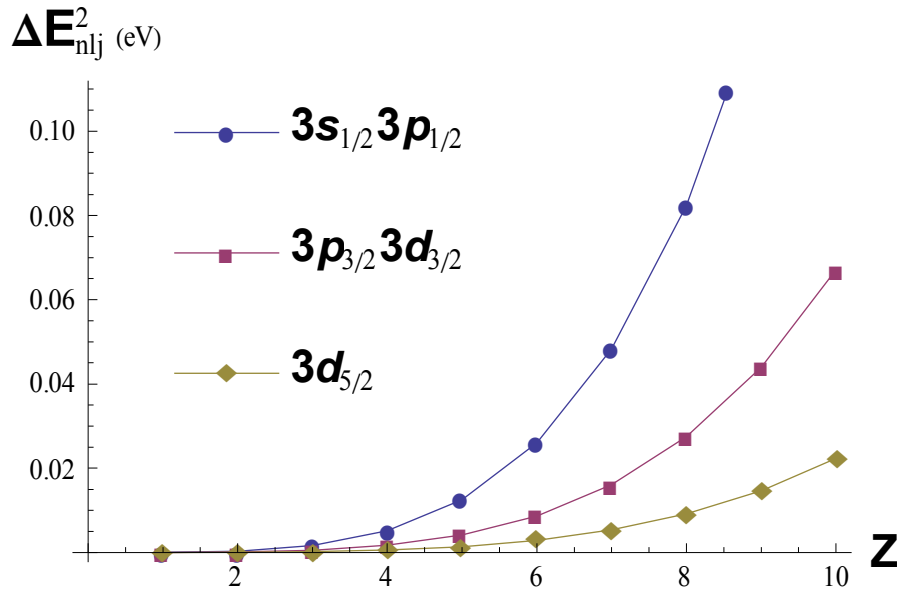
Şekil 10. $n = 2, 0 \leq l \leq 1$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^2 farkının Z 'ye göre değişimi.



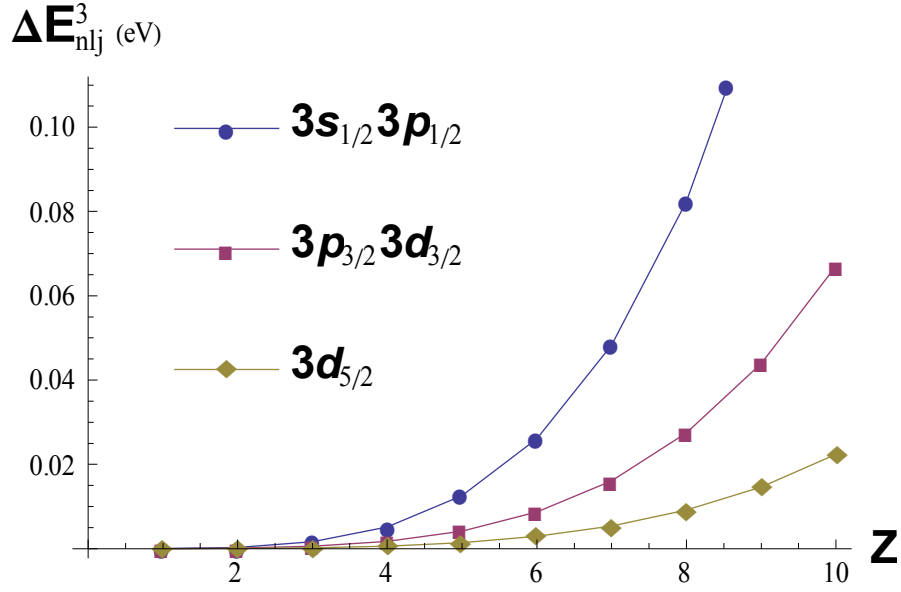
Şekil 11. $n = 2, 0 \leq l \leq 1$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^3 farkının Z 'ye göre değişimi.



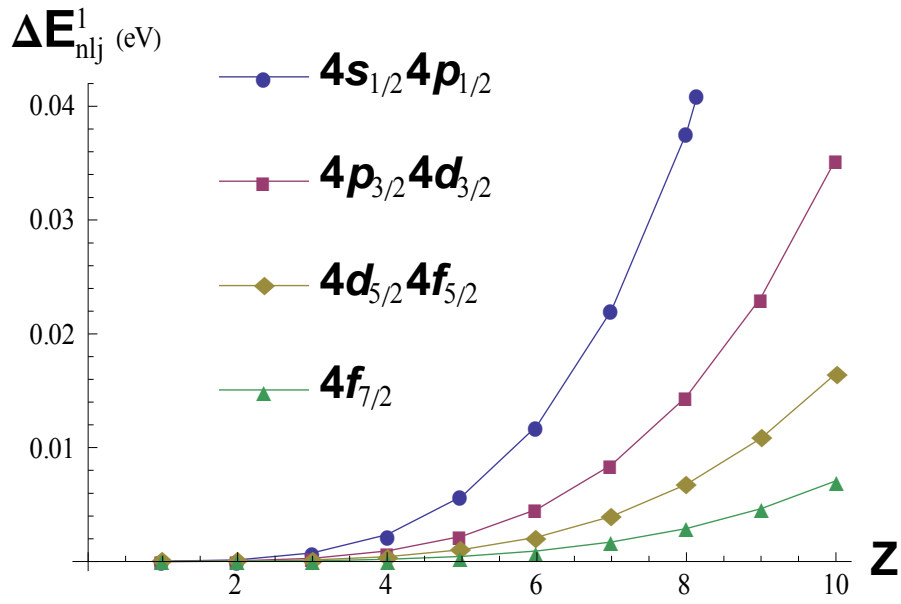
Şekil 12. $n = 3, 0 \leq l \leq 2$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{5}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^1 farkının Z 'ye göre değişimi.



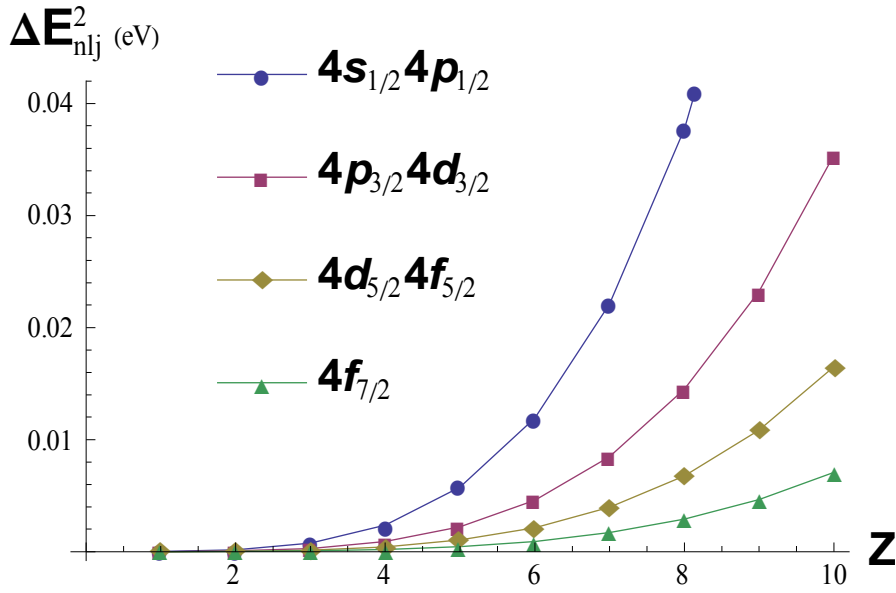
Şekil 13. $n = 3, 0 \leq l \leq 2$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{5}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^2 farkının Z 'ye göre değişimi.



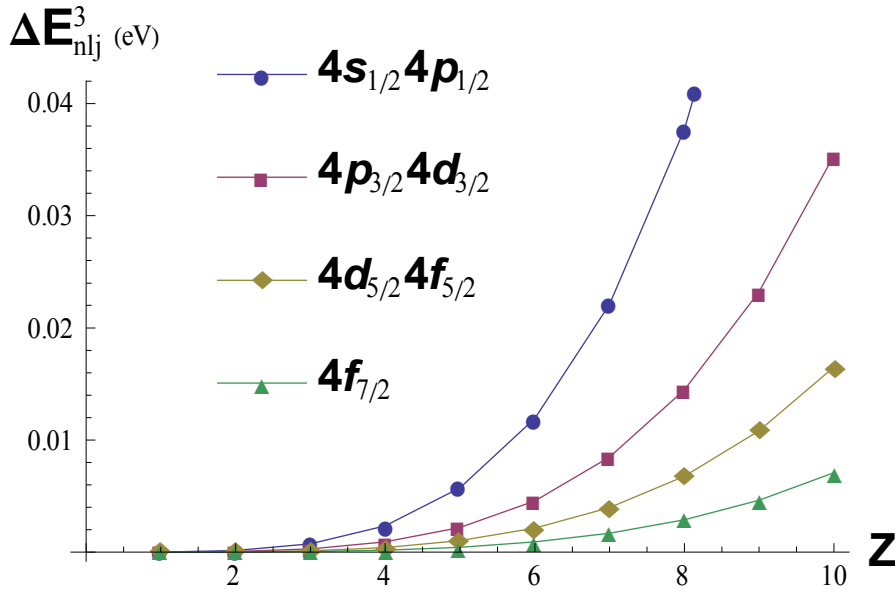
Şekil 14. $n = 3, 0 \leq l \leq 2$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{5}{2}$ durumlarında ΔE^3_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.



Şekil 15. $n = 4, 0 \leq l \leq 3$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ durumlarında ΔE^1_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.



Şekil 16. $n = 4, 0 \leq l \leq 3$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^2 farkının Z 'ye göre değişimi.



Şekil 17. $n = 4, 0 \leq l \leq 3$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^3 farkının Z 'ye göre değişimi.

Şekiller (6-17) de verilen grafikler incelendiğinde rölativistik olmayan enerji değerine gelen toplam katkıların atom numarasına göre değişimi görülebilmektedir. Diğer bir deyişle bu grafikler yardımıyla 1., 2. ve 3. yaklaşımdan elde edilen quasirölativistik enerji değerlerinin rölativistik olmayan enerjilerden farkları $\Delta E_{nlj}^s = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^s$ incelenebilmektedir. Şekillerde görülen ΔE_{nlj}^1 birinci terimden gelen

katkısı, ΔE_{nl}^2 birinci ve ikinci terimden gelen toplam katkıyı ve ΔE_{nl}^3 ise bu 3 teriminden toplamda gelen katkıyı göstermektedir. Bu grafiklerde incelenen ΔE_{nl}^s atom numarasının büyük değerlerinde ayrıca n ve l kuantum sayılarının küçük olduğu orbitallerde belirgindir. Burada serinin üst dereceden terimlerinin katkılarının enerji değerini çok fazla değiştirmedigine dikkat edilmelidir. Bu durum aynı orbitallerin $1 \geq s \geq 3$ için çizilen grafiklerin birbirine benzer olarak bulunmuş olmasından görülebilmektedir. Daha önce de bahsettiğimiz gibi rölativistik olmayan enerji değerlerine en büyük katkı 1. yaklaşımdan gelmektedir ve bundan sonraki katkılar enerji değerinde sadece küçük değişimlere sebep olmaktadır. Böylece yapılan Maclaurin seri açılımının yakınsak bir seri olduğu buradan anlaşılabilir.

Bu çalışmamızda H-benzeri atomların orbitalleri için elde edilen rölativistik olmayan, quasirölativistik ve rölativistik enerji değerlerinin karşılaştırması için çizelge ve şekiller oluşturulmuş. Bu çizelge ve şekillerde ortaya çıkan özelliklerden atom orbitallerinin enerji değerlerinde rölativistik etkilerin oluşturduğu değişimler ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir. İncelemeler sonucunda rölativistik etkilerin hangi durumlarda daha fazla değişime neden olduğu belirlenebilmiştir. Kısacası rölativistik etkilerin doğası açık olarak ortaya konulmuştur. Burada beklendiği gibi rölativistik etkilerin elektron hızının yüksek olduğu iç yörüngelerde ve atom numarası büyük olan H-benzeri atomlarda kendini daha fazla gösterdiği sayısal olarak yaptığımız incelemeler sonucunda bulunmuştur.

BÖLÜM VI

SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu çalışmada Dirac denkleminin H-benzeri atom için çözümünden bulunan, orbital enerjilerini veren formül ve bu formülün ince yapı sabitine göre Maclaurin serisi açılımı kullanılmıştır. Rölativistik olmayan, quasirölativistik ve rölativistik enerjilerin sayısal değerleri karşılaştırılarak rölativistik etkilerin dikkate alınması ile enerjinin nasıl değiştiği incelenmiştir.

Hesaplamalarda rölativistik enerji ifadesinin seri açılımının ilk terimi dikkate alındığında atom orbitalleri için rölativistik olmayan enerjilere eşit değerler bulunmuştur. Serinin 2. ve daha üst terimleri dikkate alınarak quasirölativistik olarak adlandırılan enerji değerleri ve tüm terimleri dikkate alındığında rölativistik enerji değerlerine eşit değerler hesaplanmıştır. Bu çalışmamızda serinin 4. terimine kadar olan terimlerin dikkate alınması ile quasirölativistik enerji değerleri hesaplanmıştır. Ayrıca bu çalışmada rölativistik etkilerin hangi durumlarda daha etkili olduğunu görmek için serinin terimlerinden gelen katkılar da hesaplanmıştır. Elde edilen bu değerler atom orbitallerine göre çizelgelere yerleştirilmiştir.

Hazırlanan bu çizelgelerde önemli bir özellik göze çarpmaktadır. Bu özellik şöyle açıklanabilir. Dirac denkleminin H-benzeri atom için çözümünden bulunan enerji ifadesinde τ yeni kuantum sayısıdır. $n = \tau$ olduğu durum haricinde τ 'nin aldığı her değer için $l = j + 1/2$ ve $l = j - 1/2$ olmak üzere iki tane orbital kuantum sayısı karşılık gelmektedir. $n = \tau$ olduğu durumda ise orbital kuantum sayısı $l = j - 1/2 = n - 1$ değerini alabilir. Rölativistik olmayan durumda her n baş kuantum sayısı için n^2 tane birbirinden bağımsız durum enerji için eşit değerler alır. Burada Schrödinger'den bulunan enerji seviyeleri her τ için n farklı duruma ayrılır ve dejenere kısmen birbirinden ayrılır. Her n kuantum sayısına karşılık $2n^2$ tane bağımsız durum elde edilir, buradaki 2 çarpanı elektronun spininin alacağı iki olası değerden gelmektedir. Bu yarımalar bilindiği gibi spin manyetik momenti ile yörünge manyetik momentinin etkileşmesinden kaynaklanmaktadır ve ince yapı yarımaları olarak adlandırılmaktadır. Bu yarımalarından sonra halen aynı n ve j kuantum sayısına sahip sadece l kuantum sayısı ile farklı durumların enerji özdeğerleri katlıdır. Bu çalışmada oluşturulan tüm çizelgelerde quasirölativistik ve rölativistik enerji değerleri için bu özellik görülebilmektedir. Quasirölativistik enerji

değerlerinden özellikle ikinci terim dikkate alındığında Pauli yaklaşımından bulunan enerji değerlerine eşit değerler bulunmuştur. 3. ve 4. Terimler dikkate alınarak bu enerji değerinden daha düşük olan enerji değerleri hesaplanmıştır. Ancak elde edilen verilerin enerji değerinde meydana getirdiği değişimler çok daha küçük olmaktadır. Buna göre serinin ilk teriminden gelen katkı en büyük ve daha yüksek dereceli terimlerden enerjiye gelen katkıların çok daha küçük olduğu hesaplanan veriler incelendiğinde ortaya çıkmaktadır. Bunun nedeni seri açılımın çok küçük bir sayı olan ince yapı sabitinin karesi üzerine yapılması ve bu serinin katsayılarının hızla küçülmesidir. Böylece rölativistik enerji ifadesinden elde edilen Maclaurin serisinin yakınsak bir seri olduğu görülebilmektedir.

Oluşturulan çizelgelerde serinin terimlerinden gelen katkılar incelendiğinde atom orbitallerinin n ve l kuantum sayılarının küçük değerlerinde daha büyük olduğu görülmüştür. Buradan atomun çekirdeğine yakın orbitallerde elektronun hızından dolayı rölativistik etkilerin daha büyük olduğu söylenebilir.

Dirac denkleminin çözümünde istenilen Z için olduğundan daha büyük atom numarasına sahip atomlar için de hesaplamalar yapılabilir. Rölativistik etkilerin atom numarasının büyük değerlerinde değişimini inceleyebilmek için $1 \leq Z \leq 10$ aralığında atom numarasına sahip H-benzeri atomlar için hesaplamalar yapılmıştır. Buradan elde edilen veriler incelendiğinde enerji değerine serinin terimlerinden gelen katkıların atom numarası arttıkça büyük değer aldığı görülmüştür ve buradan ağır çekirdekler etrafında hareket eden elektronun hızına bağlı olarak rölativistik etkilerin bu durumda daha fazla olduğu ortaya çıkmıştır.

Burada elde edilen sonuçlara göre atom ve molekül sistemlerinin incelenmesinde önemli bir model olan H-benzeri atomlarda rölativistik etkiler ayrıntılı bir şekilde incelenmiş ve özellikleri belirlenmiştir. Hidrojen ve H-benzeri atomlar için rölativistik olmayan, quasirölativistik ve rölativistik orbital enerjileri için sayısal veriler oldukça hassas olarak hesaplanmıştır. Bu veriler ilerideki çalışmalarda elde edilecek sonuçların karşılaştırılabileceği bir kaynak olarak kullanılabilir.

Dirac kuramına göre bulunan katlı enerji özdeğerleri arasında küçük bir fark bulunur. Bu fark, 1947 yılında Lamb ve Retherford tarafından deneysel olarak bulunmuştur. Lamb Kayması denen ve ince yapıdan kaynaklı yarılmalara $1/10$ 'u kadar olan bu küçük fark için elektronun vakum ile etkileşmesi sebep olarak gösterilmektedir.

Deneysel verilerle uyum sağlayabilmek için ek olarak çekirdeğin içyapısı ve boyutunun da dikkate alınmasının gerekli olduğu düşünülmektedir. İnce yapı dikkate alınarak rölativistik düzeltmeler yapılırken atom çekirdeğinin alanının küresel simetrik olduğu düşünülmüştür ancak küçük de olsa çekirdeğin yapısından dolayı bir manyetik momenti vardır. Bu manyetik momentin elektronun manyetik momenti ile olan etkileşmesinden dolayı, toplam açısal momentuma bağlı bulunan katlı durumlarda da yarılmalar ortaya çıkar. Çekirdeğin manyetik momenti orbitalin manyetik momentinin 1/1000'i kadardır ve buna bağlı olan yarılmalar da ince yapıdan bulunan 1/1000'i kadardır. Bu nedenle çekirdeğin manyetik momentine bağlı yarılmalara aşırı ince yapı yarılmaları adı verilmektedir. Bu yarılmaları ve Lamb kaymasının matematiksel incelemeleri kuantum elektrodinamiğinde verilmektedir. (Bethe-Salpeter, 1957).

KAYNAKLAR

- Bethe H.A., Salpeter E.E., 1957 *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Springer, Verlag, Berlin, Gottingen, Heidelberg, New York), 368p.
- Davydov A. S., 1965 *Quantum Mechanics*, (2nd ed.), (Pergamon, Oxford), 680p.
- Levine I.N., 1999. *Quantum Chemistry* (5th ed.), New Jersey Prantice Hall, 739p.
- Greiner W., 2000. *Relativistic Quantum Mechanics Wave Equations* (3th ed.) (Springer, Berlin, Heidelberg, New York, Barcelona, Hong Kong, London, Milan, Paris, Singapore, Tokyo) 424 p.
- Greiner W., 2000. *Quantum Mechanics An Introduction* (4th ed.) (Springer, Berlin, Heidelberg, New York, Barcelona, Hong Kong, London, Milan, Paris, Singapore, Tokyo) 485 p.
- Grant I.P., 2010. "Relativistic Atomic Structure: past, present and future" *J.Phys. B:At. Mol. Opt. Phys.*, 43; 074033 (11pp)
- Micheal I.E., Howard G., Valery A. S., 2001. "Theory of Light Hydrogenlike Atoms" *Physics Reports* 342;63-261.
- Guseinov I.I., 2007 "Unified Treatment of Complete Orthonormal Sets for Wave Functions and Slater Orbitals of Particles with Arbitrary Spin in Coordinate, Momentum and Four- Dimensional Spaces" *Physics Letters A*, 372;44-48.
- Guseinov I.I., 2008 "Unified Treatment of Complete Orthonormal Sets of Nonrelativistic, Quasirelativistic and Relativistic Sets of Spinor Wave Functions, and Slater Spinor Orbitals in Coordinate, Momentum and Four-Dimensional Spaces" *Journal of Mathematical Chemistry*, 44;839-848.
- Guseinov I.I., 2008 "Combined Theory of Two-Electron Nonrelativistic and Quasirelativistic Multicenter Integrals over Integer and Noninteger n Slater Type Orbitals Using Auxiliary Functions Q_{-n}^q and Q_{-n}^q ", *Match-Communications In Mathematical and Computer Chemistry*, 60;385-394.
- Guseinov I.I., 2009 "Theory of Complete Orthonormal Sets of Relativistic Tensor Wave Functions and Slater Tensor Orbitals of Particles with Arbitrary Spin in Position, Momentum and Four-Dimensional Spaces" *Physics Letters A*, 373;2178-2181.
- Guseinov I.I., 2009 "Unified Treatment of Nonrelativistic and Quasirelativistic Atomic Integrals Over Complete Orthonormal Sets of Ψ_α -Exponential Type Orbitals". *Journal of Mathematical Chemistry*, 45;1032-1040.

Guseinov I.I., 2009 “Theory of Complete Orthonormal Relativistic Vector Wave Function Sets and Slater Type Relativistic Vector Orbitals in Coordinate, Momentum and Four-Dimensional Spaces” *Journal of Mathematical Chemistry*, 45;946-952.

Çizelge 1. $1 \leq s \leq 3$ için Enerji ifadesinden elde edilen
Maclaurin serisinin A_{nlj}^i katsayılarının sayısal değerleri ($A_{nlj}^0 = 1$)12

Çizelge 2. H atomunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ durumunda $-E_{nlj}^s$
enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri15

Çizelge 3. H atomu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik
olmayan enerji değerlerine katkıları $\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)}$ 17

Çizelge 4. He^{+1} iyonunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$
enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri 21

Çizelge 5. Li^{+2} iyonunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$
enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri 22

Çizelge 6. Be^{+3} iyonunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$
enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri 23

Çizelge 7. B^{+4} iyonunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$
enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri 24

Çizelge 8. C^{+5} iyonunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$
enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri 25

Çizelge 9. N^{+6} iyonunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$
enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri 26

Çizelge 10. O^{+7} iyonunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$
enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri 27

Çizelge 11. F^{+8} iyonunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$
enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden değerleri 28

Çizelge 12. Ne^{+9} iyonunun $-E_{nlj}^0, -E_{nlj}^\infty, 0 \leq s \leq 3$ için $-E_{nlj}^s$

enerjilerinin ve $\Delta E_{nlj} = E_{nlj}^0 - E_{nlj}^\infty$ farkının eV cinsinden deęerleri	29
Çizelge 13. He^{+1} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji deęerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$	33
Çizelge 14. Li^{+2} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji deęerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$	33
Çizelge 15. Be^{+3} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji deęerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$	34
Çizelge 16. B^{+4} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji deęerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$	35
Çizelge 17. C^{+5} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji deęerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$	35
Çizelge 18. N^{+6} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji deęerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$	36
Çizelge 19. O^{+7} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji deęerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$	36
Çizelge 20. F^{+8} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji deęerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$	37
Çizelge 21. Ne^{+9} iyonu için serinin $1 \leq s \leq 3$ terimlerinin Rölativistik olmayan enerji deęerlerine katkıları $(\Delta E_{nlj}^{s-(s-1)})$	38

Şekiller**Sayfa No**

Şekil-1. Hidrojen için rölativistik olmayan, quasirölativistik ve rölativistik enerji seviyeleri için ölçeksiz diyagram.....	18
Şekil 2. $n = 1, l = 0$ ve $j = \frac{1}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.	31
Şekil-3. $n = 2, 0 \leq l \leq 1$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.	31
Şekil-4. $n = 3, 0 \leq l \leq 2$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{5}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.	32
Şekil-5. $n = 4, 0 \leq l \leq 3$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj} farkının Z 'ye göre değişimi.	32
Şekil-6. $n = 1, l = 0$ ve $j = \frac{1}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^1 farkının Z 'ye göre değişimi.	39
Şekil-7. $n = 1, l = 0$ ve $j = \frac{1}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^2 farkının Z 'ye göre değişimi.	39
Şekil-8. $n = 1, l = 0$ ve $j = \frac{1}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^3 farkının Z 'ye göre değişimi.	40
Şekil-9. $n = 2, 0 \leq l \leq 1$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^1 farkının Z 'ye göre değişimi.	40
Şekil-10. $n = 2, 0 \leq l \leq 1$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^2 farkının Z 'ye göre değişimi.	41
Şekil-11. $n = 2, 0 \leq l \leq 1$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^3 farkının Z 'ye göre değişimi.	41
Şekil-12. $n = 3, 0 \leq l \leq 2$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{5}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^1 farkının	

Z 'ye göre deęiřimi.	42
řekil-13. $n = 3, 0 \leq l \leq 2$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{5}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^1 farkının	
Z 'ye göre deęiřimi.	42
řekil-14. $n = 3, 0 \leq l \leq 2$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{5}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^2 farkının	
Z 'ye göre deęiřimi.	43
řekil-15. $n = 4, 0 \leq l \leq 3$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^1 farkının	
Z 'ye göre deęiřimi.	43
řekil-16. $n = 4, 0 \leq l \leq 3$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^2 farkının	
Z 'ye göre deęiřimi.	44
řekil-17. $n = 4, 0 \leq l \leq 3$ ve $\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{7}{2}$ durumlarında ΔE_{nlj}^3 farkının	
Z 'ye göre deęiřimi.	44

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı: Gürkan DEMİRDAK

Doğum Yeri: Susurluk / BALIKESİR

Doğum Tarihi: 13 / 02 / 1985

EĞİTİM DURUMU

İlköğretim: 1990-1995 Göbel Şehit Nusret Kula İlköğretim Okulu

Lise Öğrenimi: 1995-2003 Balıkesir Susurluk Anadolu Lisesi

Lisans Öğrenimi: 2004-2008 Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi
Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü

Yüksek Lisans Öğrenimi: 2009-2011 Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Bölümü

Bildiği Yabancı Diller: İngilizce

İLGİ ALANLARI

İngilizce, kitap okumak, bilimsel araştırma yapmak, bilgisayar ve internet, sinema, müzik, spor

İLETİŞİM BİLGİLERİ

gurkan_demirdak@hotmail.com

gurkan_demirdak@yahoo.com