



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

AĞIR ATOMLARDA ATOMİK YAPI
HESAPLAMALARI

Selma ÖZARSLAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalını

Ocak-2012
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ BİLDİRİMİ

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

DECLARATION PAGE

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

Selma ÖZARSLAN

Tarih: 17/01/2012

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

AĞIR ATOMLARDA ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

Selma ÖZARSLAN

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

Danışman: Doç. Dr. Gültekin ÇELİK

2012, 71 Sayfa

Jüri

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

Bu tez çalışmasında, Ho I, Ho II ve Ho III nadir toprak elementlerinde elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri gibi spektroskopik parametreler en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori "WBEPMT" kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar literatürden elde edilebilen değerlerle karşılaştırılmış ve iyi bir uyum gözlenmiştir. Ayrıca literatürde bulunmayan bazı geçiş olasılığı, osilatör şiddeti ve uyarılmış seviyelerin hayat süresi değerleri elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, Geçiş olasılığı, Hayat süresi, Nadir toprak elementleri, Osilatör şiddeti

ABSTRACT

MS THESIS

ATOMIC STRUCTURE CALCULATIONS IN HEAVY ATOMS

Selma ÖZARSLAN

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

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK

2012, 71 Pages

Jury

Assoc. Prof. Dr. Gültekin ÇELİK

Assist. Prof. Dr. Mehmet TAŞER

Assist. Prof. Dr. Murat YILDIZ

In this study, the spectroscopic parameters such as electric dipol transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes of excited levels have been calculated using the weakest bound electron potential model theory “WBEPMT” for Ho I, Ho II and Ho III rare earth elements. The obtained results are compared to the available values from literature and a good agreement has been observed. Moreover, the transition probability, the oscillator strength and the lifetime values of excited levels not exciting in literature have been obtained.

Keywords: Lifetime, Transition probability, Oscillator strength, Rare earth elements, Weakest bound electron potential model theory

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Doç. Dr. Gültekin ÇELİK yönetiminde hazırlanarak, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur. Ho I, Ho II ve Ho III gibi ağır atom ve iyonlarda atomik yapı hesaplamaları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) kullanılarak yapılmıştır.

Akademik hayatım için en önemli dönemeçlerden biri olan Yüksek Lisans eğitimim boyunca yardımlarını esirgemeyen, engin bilgi ve tecrübesini benimle paylaşan, tez danışmanım sayın Doç. Dr. Gültekin ÇELİK'e, bana her konuda yardımcı olan, tecrübelerinden faydalandığım ve manevi desteğini her zaman üzerimde hissettiğim Dr. Şule ATEŞ'e, sabırlarını, özverilerini, maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen sevgili annem Esmâ ÖZARSLAN'a ve babam Yunus ÖZARSLAN'a, kardeşlerime ve de her zaman yanımda olan çok sevgili arkadaşlarıma en içten teşekkürlerimi sunarım.

Selma ÖZARSLAN
KONYA-2012

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
ÖNSÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR	ix
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI	3
2.1. Holmiyum Atomu (Ho I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar	3
2.2. Bir Kez İyonlaşmış Holmiyum (Ho II) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar.	3
2.3. İki Kez İyonlaşmış Holmiyum (Ho III) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar	4
3. MATERYAL VE YÖNTEM	5
3.1. Çok Elektronlu Sistemler ve Açısız Momentum	5
3.1.1. Çok elektronlu atomların genel özellikleri	5
3.1.2. Ağır atomlar (Nadir toprak elementleri).....	9
3.1.3. Açısız momentum için spektroskopik tanımlama.....	13
3.1.4. Atomların açısız momentumları	14
3.2. Toplam açısız momentum çiftlenim biçimleri.....	17
3.2.1. LS çiftlenimi	17
3.2.2. jj çiftlenimi.....	22
3.2.3. JK ve LK çiftlenimi	29
3.3. Işımalı Geçişler	32
3.3.1. Einstein A ve B Katsayıları	33
3.3.2. Osilatör Şiddeti, Geçiş Olasılığı ve Hayat Süresi.....	36
3.3.3. Elektrik dipol ışınması	37
3.3.4. Elektrik dipol çizgi şiddeti.....	39
3.4. En Zayıf Bağlı Elektron Potansiyel Model (WBEPM) Teori.....	44
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA	50
4.1. Araştırma Sonuçları	50
4.1.1. Ağır atomlarda Osilatör Şiddeti, Geçiş Olasılığı ve Hayat Süresi Hesaplamaları	50
4.1.2. Atom ve İyonlarda Yapılan Hesaplamalar.....	51
4.2. Tartışma	64
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	66

5.1 Sonular	66
5.2 neriler	66
KAYNAKLAR	67
ZGEMİŐ	71

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

Ce:	Seryum
Cu:	Bakır
Dy:	Disprozyum
Er:	Erbiyum
Eu:	Evropyum
Gd:	Gadolinyum
Ho:	Holmiyum
La:	Lantan
Lu:	Lutesyum
Nd:	Neodimyum
Pm:	Prometyum
Pr:	Praseodim
Sm:	Samaryum
Sc:	Skandiyum
Tb:	Terbiyum
Tm:	Tulyum
Y:	Yitriyum
Yb:	İterbiyum

Kısaltmalar

CP:	Core Polarization
FTS:	Fourier Transform Spectrometer
HFR:	Relativistic Hartree-Fock
HS:	Hartree-Slater
Ho I:	Atomik Holmiyum
Ho II:	Bir kez İyonlaşmış Holmiyum
Ho III:	İki kez İyonlaşmış Holmiyum
KED:	Kuantum Elektrodinamik
MCHF:	Multiconfigurational Hartree-Fock
NCA:	Numerical Coulomb-Approximation
NIST:	National Institute of Standards and Technology
REE:	Rare-Earths Elements
RHF:	Roothann-Hartree-Fock
RMP:	Relativistic Model-Potential
TDHF:	Time Dependent Hartree-Fock
WBEPMT:	Weakest Bound Electron Potential Model Theory

1. GİRİŞ

Astronomide spektrum yorumlamaları atom ve molekül fiziğinin iyi bilinmesini gerektirir. Gözlenen spektrumdan elde edilen astrofiziksel bilgi ve fiziksel parametreler arasında doğrudan bir ilişki vardır. Bir spektrumda gözlenen herhangi bir çizgi için atom, iyon veya molekül hakkında birçok bilgiye ulaşılabilmektedir. Gözlenen bir astrofiziksel cismin sahip olduğu atom ya da iyonun belli seviyeleri arasında meydana gelen elektron geçişleri hakkında bilgi edinilirse, o cismin sahip olduğu bileşenler hakkında da bilgi edinilmiş olur. Aynı zamanda bu geçişler, cismin çevresindeki sistemin uyarılma derecesiyle de doğrudan ilişkilidir. Bu ise sistemin çevresinin sıcaklık ve yoğunluğu gibi fiziksel şartlarını belirlenmesinde kullanılır. Herhangi bir astrofiziksel cismin sahip olduğu elementlerin bolluğu yani bulunma miktarı ancak gözlenen geçişin çizgi şiddeti bilinirse belirlenebilir. Çizgi şiddetini laboratuvar ortamında belirlemek zordur. Astrofiziksel olarak herhangi bir geçişin şiddeti, optiksel olarak uygun şartlar altında geçişin meydana geldiği atomların sayısı ile ilgilidir. Bu sebepten geçişin yoğunluğu hakkındaki bilgi astrofiziksel cisimlerdeki elementlerin bolluğunu belirlemek için önemlidir. Ancak, herhangi bir astrofiziksel spektrumun yorumlanması atomik spektrumun iç dinamiklerinin özellikleri hakkında detaylı bir bilgi gerektirir. Fizik ve astrofizik gibi birçok alanda ışık-madde etkileşmesi sonucu gözlenebilen spektrumlar, atomlara ait elektronların belirli seviyeler arasındaki geçişleriyle karakterize edilirler. Bu elektron geçişleri, atomik yapı hesaplamalarında sıkça kullanılan geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri gibi birçok temel spektroskopik niceliğin doğru olarak belirlenmesi için oldukça önemlidir. Bu tür fiziksel niceliklerin belirlenmesinde literatürde hem teorik hem de deneysel birçok çalışma halen yapılmaktadır. Özellikle astrofiziksel spektrumda baskın olarak görülen nadir toprak elementlerinin spektroskopik özellikleri hakkında elde edilebilecek teorik bilgiler, gözlenen spektrumların yorumlanmasında oldukça faydalı olacaktır (Tennyson, 2005).

Bu tez çalışmasında, atomik holmiyum (Ho I) , bir kez iyonlaşmış holmiyum (Ho II) ve iki kez iyonlaşmış holmiyum (Ho III) gibi nadir toprak elementlerinde elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri “En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori” (WBEPMT) kullanılarak hesaplanmıştır. Bu teoride geçiş olasılıklarının hesaplanmasında ve gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde, deneysel enerji değerleri ve seviyelere ait yarıçapların

beklenen deęerleri kullanılmıřtır. En zayıf baęlı elektron potansiyel model teoride seviyelere ait yarıçapların beklenen deęerleri Sayısal Coulomb yaklařımı (NCA) (Lindgrad ve Neilsen, 1977) kullanılarak belirlenmiř ve geçiř olasılıęı, osilatör řiddetleri ve uyarılmıř seviyelerin hayat sürelerinin hesaplanmasında gerekli olan parametrelerin elde edilmesinde kullanılmıřtır. Bu parametreler belirlendikten sonra Ho I, Ho II ve Ho III gibi nadir toprak elementlerinde hesaplamalar bilgisayar ortamında yapılmıřtır. Hesaplanan atomik yapı parametrelerine ait sonular, literatürden elde edilebilen deęerlerle karřılařtırılmıř ve sonuların literatürle uyumlu olduęu gözlenmiřtir. Ayrıca literatürde olmayan bazı yüksek uyarılmıř seviyelere ait geçiř olasılıęı, osilatör řiddetleri ve uyarılmıř seviyelerin hayat süresi deęerleri WBEPM teori kullanılarak belirlenmiřtir.

alıřmanın 1. bölümünü oluřturan Giriř bölümünden ve 2. bölümünü oluřturan Kaynak Arařtırması bölümünden sonra, 3. bölümünde ok Elektronlu Sistemler ve Aısal Momentum Özellikleri, iftlenim Biimleri, Iřımalı Geçiřler ve hesaplamalarda kullanılan En Zayıf Baęlı Elektron Potansiyel Model Teori detaylı olarak ifade edilmiřtir. Arařtırma sonularının yer aldıęı 4. bölümde WBEPM teori ile hesaplanan Ho I, Ho II ve Ho III gibi nadir toprak elementlerine ait yapılarda elektrik dipol geçiř olasılıkları, osilatör řiddetleri ve uyarılmıř seviyelerin hayat sürelerine ait sonular literatürden elde edilebilen deęerlerle karřılařtırmalı olarak çizelgeler halinde sunulmuřtur. Sonular ve Öneriler'in yer aldıęı 5. bölümde ise hesaplamalar için kullanılan metodun avantajları, elde edilen sonuların deęerlendirilmesi ve geleceęe yönelik planlar yer almaktadır.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Holmiyum Atomu (Ho I) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Holmiyum atomunda atomik yapı hesaplamalarına dair az sayıda literatür çalışması bulunmaktadır. Blagoev ve ark. (1978), holmiyum atomuna ait yirmi dokuz spektral çizginin osilatör şiddetlerinin bağıl değerlerini Hook metodu ile ölçtüler. Gorshkov ve Komarovskii (1979), Ho I'de on iki seviyenin hayat sürelerini multichannell delayed-coincidence metodu kullanarak ölçtüler. Ho I seviyeleri için ölçülen hayat süreleri kullanılarak Ho I'in osilatör şiddetlerini hesapladılar. Den Hartog ve ark. (1999), holmiyum atomunun kırk iki tek pariteli seviyeleri ve otuz dokuz çift pariteli seviyeleri için hayat sürelerini zaman çözümlenmeli lazer indüklü floresan tekniği ile ölçtüler. Nave (2003), holmiyum atomunun yetmiş üç seviyesinden, 345 nm ve 1080 nm arasındaki dalga boylarına sahip 321 çizginin geçiş oranlarını, Den Hartog (1999) tarafından ölçülen hayat süreleri ile fourier dönüşüm spektrometreden (Fourier transform spectrometer; FTS) elde edilen dallanma oranlarını birleştirerek ölçtü.

2.2. Bir Kez İyonlaşmış Holmiyum (Ho II) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

Bir kez iyonlaşmış holmiyumda geçiş olasılıklarını, osilatör şiddetlerini ve uyarılmış seviyelerin hayat sürelerini veren birkaç çalışma bulunmaktadır. Gorshkov ve Komarovskii (1979), bir kez iyonlaşmış holmiyumun iki seviyesine ait hayat sürelerini multichannel delayed-coincidence metodu kullanarak ölçtüler. Ho II'nin uyarılmış seviyelerine ait hayat sürelerini ve Ho II'nin ölçülen bağıl yoğunluğunu kullanarak Ho II'nin dört spektral çizgisi için soğurma osilatör şiddetlerini hesapladılar. Worm ve ark. (1990), Ho II'nin hayat sürelerini, osilatör şiddetlerini ve aşırı ince yapılarını ölçtüler. Migdalek (1984), jj çiftlenimine sahip Eu II (n=7), Tb II (n=9) ve Ho II (n=11) spektrumu için en düşük seviye olan $4f^n6s \rightarrow 4f^n6p$ geçişlerini çalıştı. Osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıklarını belirlemek için gerekli olan rölativistik radyal geçiş integrallerini kor-polarizasyon (Core-Polarization; CP) etkisini de içeren rölativistik model-potansiyel (RMP), metot ile hesapladı. Den Hartog ve ark. (1999), Ho II için otuz yedi tek pariteli seviyelerin hayat sürelerini zaman çözümlenmeli lazer indüklü floresan tekniği ile ölçtüler. Lawler ve ark. (2004), Ho II'nin yirmi iki çizgisi için geçiş olasılıklarını belirlemek amacıyla zaman çözümlenmeli lazer indüklü floresan tekniği ile

ölçülen hayat süreleri ile fourier dönüşüm spektrometreden elde edilen dallanma oranlarını birleştirdiler.

2.3. İki Kez İyonlaşmış Holmiyum (Ho III) İle İlgili Daha Önce Yapılan Çalışmalar

İki kez iyonlaşmış holmiyum için osilatör şiddetlerini, geçiş olasılıklarını, hayat sürelerini içeren hesaplamalar ve ölçümler içeren bazı çalışmalar şöyle sıralanabilir: Biemont ve ark. (2001), Ho III'ün $4f^{10} 6p$ konfigürasyonuna ait altı seviyenin hayat sürelerini zaman çözümlmeli lazer indüklü florasan metodu kullanarak ölçtüler ve sonuçları multiconfigurational pseudo-rölativistik Hartree-Fock (HFR) hesaplamaları ile karşılaştırdılar. Karşılaştırılan sonuçlar arasında iyi bir uyum buldular. Deneysel hayat süreleri teorik dallanma oranlarını kullanılarak astrofiziksel öneme sahip olan geçiş olasılıklarını bu iyon için elde ettiler. Zhang ve ark. (2002), Ho III'ün $4f^{10}5d$ konfigürasyonuna ait üç seviyenin hayat sürelerini Zaman çözümlmeli lazer indüklü florasan tekniği kullanarak ölçtüler. Kor polarizasyon (CP) etkisini içeren multiconfigurational pseudo-relativistik Hartree-Fock (HFR) ile elde edilen teorik sonuçlar ve deneysel hayat süreleri arasında uyumlu bir sonuç gözlemlenildi.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Çok Elektronlu Sistemler ve Açısai Momentum

3.1.1. Çok elektronlu atomların genel özellikleri

Çok elektronlu bir atom $+Ze$ yüklü bir çekirdek ile her birinin yükü $-e$ olan, Z tane elektronun oluşturduğu bir kuantum sistemidir. Böyle bir atomda elektronlardan her biri $+Ze$ yüklü çekirdek ile Coulomb etkileşmesi ve geri kalan $(Z-1)$ ile de Coulomb itme kuvvetine karşı gelen elektron-elektron etkileşmesi içine girer. Bu etkileşmeler atomun potansiyel enerjisini kontrol eder (Apaydın, 2004).

N elektronlu sistem için rölativistik olmayan Hamiltonyen ifadesi,

$$\hat{H} = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \sum_i \delta(r_i) (\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i) \quad (3.1)$$

ile verilir. Burada ilk toplam tek parçacıklı Hamiltonyen ifadesidir. İkinci toplam, elektrostatik etkileşme olarak bilinen elektronlar arasındaki karşılıklı etkileşmedir ve son terim de spin-yörünge etkileşmesidir. İkinci toplam hidrojen benzeri iyonların Hamiltonyen ifadesini çok elektronlu sistemlerin Hamiltonyen ifadesinden ayırır (Hill ve Lee, 2007).

Bu etkileşmelerin dışında başka etkileşmeler de vardır. Özellikle Coulomb etkileşmesinden daha zayıf olan ve açısai momentum içeren bu etkileşmelerden bazıları şunlardır:

- i) Elektronların yörüngesel açısai momentumlarının kendi aralarında çiftlenimine sebep olan etkileşme. Bu etkileşme çok elektronlu atomda, toplam yörüngesel açısai momentum kavramına neden olur.
- ii) Elektronların spin açısai momentumlarının yine kendi aralarında çiftlenimine neden olan etkileşme. Bu da, atomda toplam spin açısai momentum kavramını verir.
- iii) Spin-yörünge etkileşmesi adını alan, elektronların yörünge açısai momentumları ile spin açısai momentumları arasında çiftlenim oluşturan etkileşme. Bu etkileşme, tek elektronlu etkileşmelerde olduğu gibi çok elektronlu atomlarda da ince yapı yarılmalarına neden olur.

- iv) Atom üzerinde uygulanan dış manyetik alan ile atomun manyetik momenti arasındaki etkileşme. Bu etkileşme Zeeman yarılmalarına neden olur.
- v) Aşırı ince yapı etkileşmesi adını da alan, elektronların spin açısai momentumlarıyla çekirdeğin spin açısai momentumu arasında çiftlenim oluşturan etkileşme.
- vi) Elektronların yörüngesel açısai momentumlarıyla çekirdeğin spin açısai momentumu arasında çiftlenim oluşturan etkileşme.

Bu etkileşmelerin büyüklükleri çok farklıdır. Bu nedenle, çok elektronlu atomlar incelenirken önce büyük olan etkileşmeler göz önüne alınır, daha sonra zayıf olan etkileşmelerden gelen katkılar hesaplamaya dahil edilir (Apaydın, 2004).

İki veya daha fazla parçacıklı sistemler için Hamiltonyen ifadesini belirlerken Schrödinger denkleminin çözümü için birçok yaklaşımlar yapılmaktadır. En basit ve oldukça önemli olan yaklaşım *merkezsel alan yaklaşımı* olarak bilinmektedir.

Tek parçacık yaklaşımında elektronlar arasındaki etkileşimin bir etkin potansiyel $U(r)$ vermek için, çekirdeğin Coulomb potansiyeline dahil edilerek ortalama bir merkezi potansiyelde hareket ediyormuş gibi kabul edilir. Schrödinger denklemi;

$$\nabla^2\psi(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi(\vec{r}) = 0 \quad (3.2)$$

tek elektronlu sistemler için kullanılan şekle dönüşür. Buradaki $\psi(\vec{r})$ hem açısai hem de radyal dalga fonksiyonundan oluşmaktadır. Radyal dalga fonksiyonu çözüldüğünde

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R_{nl}(r) \right) + [E - U_1(r)] R_{nl}(r) = 0 \quad (3.3)$$

şeklinde ifade edilir. Burada;

$$U_1(r) = U(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (3.4)$$

$R_{nl}(r)$ 'nin çözümü $U(r)$ 'nin kesin olarak ifade edilen çok elektronlu sistemlerin dinamiği ve yapısının tanımlanmasıyla yapılabilir. Çok elektronlu sistemlerin detaylarına girmeden önce bazı özelliklerine değinmek gereklidir.

- 1) $E < 0$ için $U(r)$ nin değerleri,
- 2) $U(r) \rightarrow V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$, $r \rightarrow 0$ için
 $U(r) \rightarrow 0$, $r \rightarrow \infty$ için

şeklinde değişir. İlk durum $r \rightarrow 0$ olduğunda diğer elektronların hepsi daha büyük yörüngelere sahip olacaktır ve böylelikle elektron çekirdekteymiş gibi düşünülecektir. İkinci durum ise bağlı seviyelerde geçerlidir.

- 3) Genelde bir kuantum sistemi E, l, m_l ile belirlenir.
- 4) Atomik sistemlerin durumları atomik yörüngelerin toplamı olan kabuk ve alt kabuklardan oluşur.

- Bir atomik orbital nl olarak tanımlanır. Örneğin $1s, 2p$ 'de sırasıyla $l = 0, 1$ değerlerini alır.
- Bir alt kabuk, yörüngeye benzer. Aralarındaki fark içerdiği elektronların sayısının belirlenmesiyle başlar. Yani, $2s$ orbitali için $2s^2$ bir alt kabuktur. Genelde bir alt kabuk nl^q ile tanımlanır. Burada q 'nun maksimum değeri $(2l + 1)(2l + 1) = 2(2l + 1)$ ile verilir. $l = 0 - 3$ için maksimum değerler aşağıda verilmiştir.

l	Tanımlama	Maksimum değer
0	s	2
1	p	6
2	d	10
3	f	14

- Bir kabuk ya da alt kabuk maksimum sayıda elektron içerdiğinde *kapalı* kabuk olarak adlandırılır. Kapalı bir alt kabuk küresel simetrik özelliklere sahiptir. Örneğin toplam açısal momentumu $J = 0$ 'dir.
- Bir *konfigürasyon* bir atomdaki bütün elektronların durumlarını tanımlar. Örneğin temel durumdaki karbon için konfigürasyon: $1s^2 2s^2 2p^2$ şeklindedir.
- *Terim* ifadesi bir atomdaki bütün elektronların çiftlenimini ya da özel bir gruplanmayı tanımlar. Örneğin, karbon atomu için en düşük alt

kabuklardaki elektronlar, her biri farklı enerjiye sahip olan ${}^3P_{0,1,2}$, 1D_2 ve 1S_0 gibi farklı LS terimlerini vermek üzere çiftlenim yaparlar. Kapalı kabuklar küresel yük dağılımına sahip oldukları için, terim ifadesini en yüksek ya da açık alt kabuklar oluşturur.

5) Çok elektronlu sistemlerde elektronlar, kor veya kor elektronları da denilen iç elektronlar ve dış ya da valans elektronları olarak iki gruba ayrılırlar. Valans elektronlarının birkaç özelliğine aşağıda değinilmiştir.

- *Valans elektronları* : Dış elektronlar, bir atomun bağlı uyarılmış elektronik seviyelerini ve temel seviyelerini belirler ve de genellikle atomun kimyasal davranışından sorumludurlar. Valans elektronları, enerjileri 1 ile 10 eV arasında değişen düşük frekanslı ışık ile etkileşirler. Valans elektronlarının dalga boyları atomun en dış kabuğundan çekirdeğe kadar uzanır. Kor dışındayken nötr atomdaki valans elektronları bir elektrik yükünün, bir etkin yükü ile çekirdeğe karşı Coulomb etkileşmesi gösterir. Kor içindeyken nükleer yük kısmen perdelenir ve etkin nükleer yük çekirdeğin daha güçlü çekimi ile artar. Aynı zamanda valans elektronları, kor içerisinde olduklarında daha güçlü olarak kor elektronları ile etkileşirler. Genel olarak çıkarılacak sonuç şudur ki; valans elektronları atoma, hidrojen atomundaki bir özdeş elektrondan daha zayıf bağlıdır.
- *Etkin çekirdek yükü*: Birden fazla elektron içeren atomlarda, orbitallerin enerji seviyelerini nicel olarak görmek zordur. Bunun için perdeleme kavramı, yaygın olarak kullanılan bir yaklaşımdır. Her elektron çekirdekten daha uzak olan elektronlara karşı bir kalkan gibi davranır ve onu perdeler. Böylece çekirdek ve dış elektronlar arasındaki hafif etkileşimler sonucu orbitallerin yalın sırası artan n ile, enerjinin artış sırası sadece küçük numaralı atomlar ve herhangi bir atomun en içteki elektronları ile değişir. Dış orbitaller aynı n, fakat farklı l değerlerine sahip düzeyler arasındaki artan enerji farkı n=3 ve n=4 enerji düzeylerini örtüşmeye zorlar ve önce 4s sonra 3d dolar. Benzer şekilde 5s, 4d'den 6s, 5d'den ve 5s, 6d'den önce dolar. Dolayısıyla çekirdeğe yakın elektronların dış kabuk elektronları üzerine perdeleyici bir etkileri vardır. Perdeleyici elektronların varlığı, çekirdekteki pozitif yüklü protonlarla dış

elektronlar arasındaki elektrostatik çekimi zayıflatır. Etkin çekirdek yükü Z_{et} , bir elektron tarafından hissedilen yüküdür ve

$$Z_{et} = Z - \sigma \quad (3.5)$$

formülü ile verilir. Burada Z , gerçek çekirdek yüküdür yani elementin numarasıdır ve σ (sigma) perdeleme sabiti olarak bilinir. Perdeleme sabiti sıfırdan büyük Z 'den küçüktür (Hill ve Lee, 2007). Çoğu atomik karakteristikler birçok pratik uygulamalar için oldukça kullanışlı olan Z_{et} tarafından ölçülür. Çizelge 3.1'de nükleer yük sayısı $Z_{et} \cong Z$ alınarak atom ve iyonların Z 'ye bağlı bazı ifadeleri verilmiştir. Burada σ , m_e ve m_p sırasıyla; ince yapı sabiti, elektron ve protona ait kütlelerdir. (Beyer ve Shevelko, 2003).

Çizelge 3.1. Atom ve iyonların çarpışmalı ve ışmalı karakteristiklerinin yaklaşık olarak nükleer yük Z 'ye bağlı ifadeleri

Atomik yarıçap	Z^{-1}
İyonlaşma potansiyeli	Z^2
Geçiş enerjisi (frekansı)	Z^2
İnce yapı (multiplet) yarılmaması	$\alpha^2 Z^4$
Aşırı ince yapı yarılmaması	$(m_e/m_p)\alpha^2 Z^3$
Lamb kayması	$\alpha^5 Z^4$
Osilatör şiddeti	Z^0
Geçiş olasılığı	Z^4
Hayat süresi	Z^{-4}
Dopler kayması	Z^1
Otoiyonlaşma olasılığı	Z^0
Statik dipol polarizabilirliliği	Z^{-4}
İyonlaşma için dış elektrik alan şiddeti	Z^3
Fotoiyonlaşma tesir kesiti	$\alpha^1 Z^{-2}$
Bremsstrahlung tesir kesiti	$\alpha^3 Z^2$
Elektron yakalama tesir kesiti	$Z^a, a = 1 - 5$
İyon sıcaklığı	Z^2

3.1.2. Ağır atomlar (Nadir toprak elementleri)

Nadir toprak elementleri, ağır atomların oluşturduğu grubun içerisinde yer almaktadır. Atom numarası Z 'nin büyük olduğu (genelde $Z > 40$) atom grubu ağır atomlar olarak adlandırılmaktadır. Nadir toprak elementleri, lantanit serileri ve aktinit serileri olarak iki kısma ayrılırlar. Periyodik tabloda 3. grup, yedinci ve sekizinci

periyotta bulunurlar. Fakat aktinit serileri her zaman bu gruba dahil edilmezler. Lantanitler geçiş metallerinin bir alt serisini oluştururlar. Nadir toprak elementlerinin özellikleri geçiş metallerinin özelliklerine oldukça benzemektedir. Bu yüzden bu elementlerden özel geçiş metalleri olarak da bahsedilir. Nadir toprak elementleri, isminin aksine radyoaktif prometyum (Pm) hariç bütün elementler Dünya’da bol miktarda bulunmaktadırlar (Castor ve Hedrick, 2006). Örneğin seryum (Ce), bakır (Cu) gibi en çok bulunan yirmi beşinci elementtir. Ancak nadir toprak elementleri, kimyasal özelliklerinden dolayı diğerlerinden ayrılır ve nadir toprak mineralleri olarak bilinen ekonomik olarak kullanılabilir formları sıklıkla bulunamaz. Bu mineraller çok nadirdir ve “nadir toprak” terimi buradan gelmektedir.

Nadir toprak elementleri (Rare-Earths Elements; REE) kimyasal açıdan skandiyum, yitriyum ve lantanitlerin içinde bulunduğu bir grubu kapsamaktadır. Lantanitler, atom numaraları 57’den 71’e kadar olan ve kimyasal olarak benzer elementlerin oluşturduğu bir gruptur. Bu gruptaki elementlerin atom numaralarına göre sıralanışı; lantan (La), seryum (Ce), praseodim (Pr), neodimyum (Nd), prometyum (Pm), sarmayum (Sm), evropyum (Eu), gadolinyum (Gd), terbiyum (Tb), disprozyum (Dy), holmiyum (Ho), erbiyum (Er), tulyum (Tm), iterbiyum (Yb), lutesyum (Lu) şeklindedir. Atom numarası 39 olan yitriyum (Y) ve atom numarası 21 olan skandiyum (Sc) da lantanitlere benzer kimyasal özellikleri nedeniyle bu grubun içine dahil edilmiştir (Castor ve Hedrick, 2006).

Nadir toprak elementleri doğada serbest halde bulunmazlar. Nadir toprak oksitlerin % 95’i; bastnazit, monazit ve ksenatimde bulunur. Nadir toprak elementleri; oksit, klorür, florür, karbonat, nitrat, hidrat, silikat ve fosfat gibi tuzları karışık oksit, ayrı ayrı metaller, yitriyum dışındaki elementlerden oluşan karışık metal, yüksek saflıkta metal ve alaşımlar halinde üretilmekte ve tüketilmektedir. Nadir toprak elementlerin % 36’sı katalizör olarak, % 31’i metalurjide, % 30’u cam ve seramik sanayisinde, % 3’ü ise diğer alanlarda kullanılır.

Bu tez çalışmasında holmiyum elementine ait atomik ve iyonik sistemlerde hesaplamalar yapılmıştır. Lantanit elementlerinden holmiyumun atom numarası 67, atom ağırlığı 164.94, oksidi açık sarı renkte, tuzları portakal sarısı renginde olan, seyrek bulunan bir elementtir. Bu element katı halde bulunup, yoğunluğu 8.79 g/cm^3 , erime noktası $1734 \text{ }^\circ\text{K}$, kaynama noktası $2993 \text{ }^\circ\text{K}$ ’dir ve kristal yapısı hegzagonaldir.

Lantanitler genellikle üç kez iyonlaşırlar ve bu elementlerin +3 değerlikli halleri birbirlerine çok benzer özellikler gösterirler. Lantanitlerin ayrı bir özelliği de 4f

orbitallerinin çekirdeğe olan uzaklığının çok küçük olmasıdır. Böylece 4f orbitalindeki elektronlar dış valans elektronlarından ve çevresel etkilerden korunurlar. Nadir toprak atomlarının spektrumları geniş ve oldukça kompleks olduğundan spektrumları onlarca, yüzlerce, hatta binlerce gözlenebilir çizgilere sahip olabilir. Lantanit spektrumlarının basit bir analizi 1927 ve 1930 yılları arasında yapılmıştır. Ancak 1960'lara kadar daha kompleks durumlar için çalışmalar yapılmamıştır. O zamandan bu yana spektral çizgi sınıflandırılması ve uyarılmış seviye gösterimindeki büyük ilerlemeler, deneysel cihazların geliştirilmesi, analiz ve veri azaltımı için bilgisayarların kullanımını ve Racah cebirinin kullanımını içeren teorik çalışmaların yapılmasıyla birlikte atomik sabitler ile ilgili hem deneysel hem de teorik hesaplamaların yapılması mümkün hale gelmiştir. Deneysel ilerlemedeki tarihsel özet Martin (1972) tarafından yapılmış ve ilk beş spektrumun analizi Wyart (1978) tarafından tablolaştırılmıştır. Teori ve gözlemler arasındaki karşılaştırma ise Wybourn (1965) ve Goldschmidt (1978) tarafından verilmiştir (Cowan, 1981).

Nadir toprak atom ya da iyonunun elektronik yapısı 4f elektronları tarafından tam doldurulmamış kabuk ile karakterize edilir. Lantan (La=57) hariç nadir toprak elementlerinde elektron değişimi yalnızca 4f orbitaline elektron katılımıyla gerçekleşmektedir. Tam dolu olmayan elektron konfigürasyonları:

$$(4f)^{w_1}(n_2l_2)^{w_2}(n_3l_3)^{w_3} \dots \quad (3.6)$$

şeklinindedir. Lantanit atomlarının temel seviye konfigürasyonu Çizelge 3.2'de verilmiştir. Lantanitlerin 3. ve 4. iyonlaşma durumlarında temel konfigürasyonları $4f^N$ ile başlar. Düşük seviyeli konfigürasyonlar $4f^N - 1nl$, $4f^N - 2nl'n'l$, $4f^N - 3nl'n'l'n'l$ tipine sahiptirler. Güçlü konfigürasyon etkileşmelerinin izoelektronik seri ile birlikte ilk iyonlaşma derecesi için bu konfigürasyonlar arasında meydana gelmesi beklenir (Biemont ve Quinet, 2003).

Çizelge 3.2. Korun konfigürasyonu ksenon [Xe] olan Lantanitlerin ilk dört iyonlaşma durumu için temel enerji seviyeleri

Element	Z	I	II	III	IV
La	57	5d6s ²	5d ²	5d	5p ⁶
Ce	58	4f5d6s ²	4f5d ²	4f ²	4f
Pr	59	4f ³ 6s ²	4f ³ 6s	4f ³	4f ²
Nd	60	4f ⁴ 6s ²	4f ⁴ 6s	4f ⁴	4f ³
Pm	61	4f ⁵ 6s ²	4f ⁵ 6s	4f ⁵	4f ⁴
Sm	62	4f ⁶ 6s ²	4f ⁶ 6s	4f ⁶	4f ⁵
Eu	63	4f ⁷ 6s ²	4f ⁷ 6s	4f ⁷	4f ⁶
Gd	64	4f ⁷ 5d6s ²	4f ⁷ 5d6s	4f ⁷ 5d	4f ⁷
Tb	65	4f ⁹ 6s ²	4f ⁹ 6s	4f ⁹	4f ⁸
Dy	66	4f ¹⁰ 6s ²	4f ¹⁰ 6s	4f ¹⁰	4f ⁹
Ho	67	4f ¹¹ 6s ²	4f ¹¹ 6s	4f ¹¹	4f ¹⁰
Er	68	4f ¹² 6s ²	4f ¹² 6s	4f ¹²	4f ¹¹
Tm	69	4f ¹³ 6s ²	4f ¹³ 6s	4f ¹³	4f ¹²
Yb	70	4f ¹⁴ 6s ²	4f ¹⁴ 6s	4f ¹⁴	4f ¹³
Lu	71	4f145d6s ²	4f ¹⁴ 6s ²	4f ¹⁴ 6s	4f ¹⁴

Bir atom ya da iyonun spektral çizgilerinin osilatör şiddetleri ve elektronik geçiş olasılıkları, elektromanyetik radyasyonun soğurma ve salma yoğunlukları tarafından karakterize edilen atomik sabitlerle ifade edilir. Bu sabitlere ait bilgi temel astrofiziksel problemlerin çözümü için gereklidir. Bu problemler: Güneşteki nadir toprak içeriğinin belirlenmesi (burada nadir toprak elementleri, elementlerin dağılım eğrisi üzerinde maksimumlardan birinin oluşturur), diğer yıldız sistemleri ve güneşin gelişimini ve kökeninin anlaşılması, yıldızların içyapısı ve atmosfer modellerinin analizi, yıldızlar arası atmosferde yer alan süreçlerin araştırılması ve astrofiziksel cisimlerdeki kimyasal elementlerin nükleosentezinin araştırılmasıdır.

Lantanitlerin atom ve ilk iyonları, metal buharında kendini sınırlayan geçişler ile lazer tasarımına yardımcı olmaktadır. Özellikle neodimyum (Nd), gadolinyum (Gd), holmiyum (Ho), erbiyum (Er), tulyum (Tm), iterbiyum (Yb) lazer alanında oldukça fazla kullanılmaktadır. Nadir toprak metal buharlarında en uygun aktif medyum seçimi ve araştırılması için osilatör şiddetlerine veya geçiş olasılıklarına ait bir bilgi gerekmektedir.

Nadir toprak elementlerinin geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin deneysel değerleri, kompleks atomik yapı hesaplamalarında kullanılan teorik metotlarının doğruluğunu görebilmemiz için gereklidir (Blagoev ve Komarovskii, 1994). Yaklaşık 50 yıldır atom ve iyonların gözlenen optik spektrumlarından elde edilen enerji seviyeleriyle birçok hesaplama yapılabilir hale gelmiştir. Ancak oldukça kompleks olan nadir toprak elementlerinin (lantanitler-aktinitler) spektrumlarının ve

yüksek iyonlaşmış atomlar üzerine, sahip oldukları deneysel ve teorik zorluklardan dolayı atomik yapı hesaplamalarının eksik olduğu görülmektedir. Ayrıca daha önceki çalışmalarda teorik bilginin ulaşılmazlığından ve deneysel teçhizatın yetersizliğinden kaynaklanan hatalardan dolayı tekrar gözden geçirilmesi gerekmektedir.

Lantanitler ve lantanit iyonlarının ışımali özellikleri geçmiş yıllarda çok fazla çalışılmamıştır. Bu durum, lantanit atom ve iyonların hesaplamaları çok zor olan tam dolmamış 4f kabuklarından dolayı karmaşık bir konfigürasyona sahip olmaları ve laboratuvar analizlerindeki eksiklikten kaynaklanmaktadır.

3.1.3. Açısai momentum için spektroskopik tanımlama

Çok elektronlu bir atomun enerji seviyelerini belirlemek için atomik hesaplamaların detaylarını vermeden önce çok elektronlu yapılar için açısai momentum kavramını tanımlamak çok daha kullanışlı olacaktır.

Çok elektronlu bir sistem için spektroskopik seviye ve o sistemin sahip olduğu konfigürasyon tarafından tanımlanır. Bir atomik sistemin elektronik konfigürasyonu, yörünge ve kabuklardaki elektronların düzenlenmesiyle tanımlanır ve nl^q olarak ifade edilir. Helyum atomunda temel konfigürasyon $1s^2$ 'dir. Burada üst indis 1s orbitalindeki elektronların sayısını ya da doluluk sayısını verir. 6 elektrona sahip olan karbon atomu için konfigürasyon: $1s^2 2s^2 2p^2$ 'dir. Yani 1s kabuğunda iki elektron, 2s kabuğunda iki elektron ve 2p kabuğunda iki elektron vardır. Bir atomun açısai momentumu o atomun ya da iyonun elektronik konfigürasyonuna bağlıdır.

Bir atom ya da iyonun spektroskopik durumu bütün elektronların bireysel açısai momentumlarının vektörel toplamı olan L toplam yörünge açısai momentumu ile tanımlanır. Diğer yandan S toplam spin açısai momentumu, bütün elektronların spin kuantum sayılarının üzerinden toplam olarak ifade edilir. Her atom ya da iyonun sahip olduğu enerji değerleri birbirinden farklıdır ve o atom ya da iyonun sahip olduğu nükleer yük Z 'ye, atom ya da iyonun elektron sayısı gibi fiziksel niceliklere bağlı olarak değişmektedir. Spektroskopik tanımlama atom ya da iyonun bütün elektronlarının spin ve yörünge kuantum sayılarının çiftlenimine bağlıdır (Pradhan ve Nahar, 2011).

3.1.4. Atomların açısai momentumları

Atomun tam dolmamış katındaki elektronlar, başka bir ifadeyle dış elektronlar arasındaki elektostatik karşılıklı etkileşme, her bir dış elektronun yörüngesel ve spin manyetik momentlerinin manyetik karşılıklı etkisi (spin-yörünge karşılıklı etkileşme) ve diğer etkileşmeler olmasaydı, her elektron konfigürasyonuna yalnız bir enerji seviyesi karşılık gelirdi. Fakat bu etkileşmeler kaçınılmaz olduğundan, verilen bir elektron konfigürasyonuna birçok enerji seviyesi karşılık gelir. Bu seviyelerin sayısını ve karşılıklı durumlarını tayin etmek için atomun dış elektronlarının momentlerinin vektörel toplamına ihtiyaç vardır. Atomdaki dış elektronların momentleri birçok modele göre toplanabilir. Bu toplamlar spin açısai momentumu ve yörünge açısai momentumlarının çiftlenimi olarak adlandırılır. Bu çiftlenim biçimleri atom ya da iyonun sahip olduğu özelliklere göre değişiklik göstermektedir (Tektunalı ve Kuli-Zade, 1995; Ateş, 2010).

Bir atomun farklı kuantum durumlarındaki enerji seviyeleri, açısai momentum kuantum sayıları ile ilgilidir. Pozitif yüklü bir çekirdeğin etrafından dolanan bir elektronun açısai momentumu Schrödinger denklemi çözülerek kuantum mekaniği ile ifade edilir. Schrödinger denkleminde uygun özdeğer denklemi kullanılır, fakat enerji operatörünün yerini açısai momentum operatörleri alır. Toplam açısai momentum, spin açısai momentum ve yörünge açısai momentumun toplamı olarak ifade edilir.

3.1.4.1. Yörünge açısai momentum

Yörünge açısai momentumu \vec{L} 'nin büyüklüğü aşağıdaki denklem tarafından verilen bir büyüklüğe sahiptir.

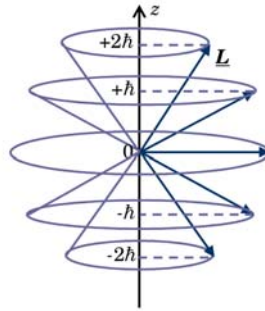
$$|L| = [l(l + 1)]^{1/2} \frac{h}{2\pi} = [l(l + 1)]^{1/2} \hbar \quad (3.7)$$

Burada l , açısai kuantum sayısıdır. $l = 0$ (s durumu) için yörünge açısai momentumu yoktur. Bu durum elektronun dönme hareketinin olmadığı anlamına gelmez sadece net dönmesinin olmadığını ifade eder.

Schrödinger denkleminde kullanılan açısai momentumun çözümü için L_z açısai momentumunun z bileşeni kullanılır.

$$L_z = m \frac{h}{2\pi} = m \hbar \quad (3.8)$$

Manyetik yörünge kuantum sayısı m_l , φ açısı boyunca z eksenini üzerindeki elektron'un dönmesiyle ilgilidir ve $m_l = l, (l - 1), \dots, -l$ arasında değerler alır. $m \hbar$ açısal momentumun olası bütün değerleri $2l + 1$ tane farklı değer alır. Böylelikle açısal momentum vektörleri buldukları kabuklara göre farklı yönlerde yönelirler.



Şekil 3.1. $l = 2$ için $m_l = 2, 1, 0, -1, -2$ olmak üzere L açısal momentumunun z bileşenleri

Eğer atomlara manyetik alan uygulanırsa, seviyeler ilgili açısal momentum durumlarına ayrılır (s durumu istisnai bir durumdur, çünkü m daima sıfırdır). n . kuantum sayısı ile ilgili olan l değerlerinin her biri için farklı enerji seviyelerini $2l + 1$ durumları sağlar. Bu seviyelerin enerjileri için multipler değerleri, seviyeler arasındaki muhtemel geçişlere sebep olur (Silfvast, 2004).

3.1.4.2. Spin açısal momentum

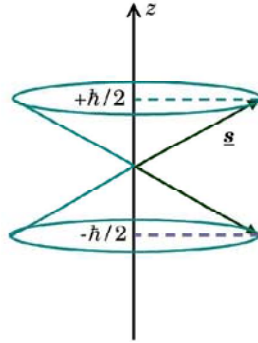
Bir atomun yörüngesindeki elektron, çekirdek etrafındaki yörüngesel hareketinden başka, kendi eksenini etrafındaki hareketinden kaynaklanan \vec{S} spin açısal momentumuna da sahiptir. Spin açısal momentumu da yörünge açısal momentumunun taşıdığı özellikleri aynen taşır. Negatif yükün dönme hareketinden dolayı sahip olacağı $\vec{\mu}_s$ spin manyetik momenti, elektronun spini ile zıt yöndedir. Spin açısal momentumun büyüklüğü,

$$|\vec{S}| = [s(s + 1)]^{1/2} \hbar ; \quad s = 1/2 \quad (3.9)$$

şeklindedir. Burada s ; spin kuantum sayısıdır ve z eksenindeki bileşeninin değeri;

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2} = s\hbar \quad (3.10)$$

ifadesi ile verilir.



Şekil 3.2. Elektronların $s = 1/2$ kuantum sayısı ile ifade edilen iç spin açısal momentumuna ait z bileşenleri

Manyetik spin kuantum sayısı ise iki olası değer alabilir. Bu değerler aşağı spin ve yukarı spin olmak üzere $m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ 'dir.

Atomlarda kuantum seviyeleri elektronlarla doldurulurken Pauli ilkelerini göz önünde bulundurmamak gerekmektedir. Pauli prensiplerine göre elektronların sahip olacağı kuantum sayıları aşağıda ifade edilmiştir.

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

$$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l \rightarrow (2l + 1) \text{ farklı değer} \quad (3.11)$$

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

$$m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rightarrow (2s + 1) = 2 \text{ farklı değer}$$

Baş kuantum sayısı n aynı olan elektronlar bir kabuk oluşturur. Baş kuantum sayısı n ile birlikte yörünge kuantum sayısı l 'nin aynı olduğu elektronlar ise bir alt kabuk oluşturur. Kuantum sayıları ile yukarıda verilen sınırlamalar göz önüne alınarak, bir alt kabuğa ya da kabuğa kaç elektron yerleşeceğini belirleyebiliriz. Bir alt kabuğa konabilecek elektron sayısı, m_l ve m_s kuantum sayılarının belirlediği durum sayılarının

çarpımı ile bulunur. Yani $m_l \rightarrow (2l + 1)$, $m_s \rightarrow 2$ olduğundan her bir altkabuğa $2(2l + 1)$ kadar elektron konabilir (Aygün ve Zengin, 1998).

3.2. Toplam açısal momentum çiftlenim biçimleri

Bir atom veya iyonun yörünge açısal momentumu \vec{L} ve spin açısal momentumu \vec{S} toplanarak o atomun veya iyonun toplam açısal momentumu olan \vec{J} ifadesini verirler. Bu toplam atomun sahip olduğu birkaç özelliğe göre değişiklik göstermektedir. Atom, iyon ya da moleküllerin elektronları arasındaki etkileşmeler farklı olabilir. Bu durumda Hamiltonyen ifadesindeki etkileşme enerjisi ifadeleri birbirlerine göre daha baskın halde bulunabilir. Baskın olunan etkileşme enerjisine göre de atom ya da iyon farklı türden bir çiftlenim biçimine sahip olabilir.

Bu sınırlama çok elektronlu atomlardaki elektrostatik etkileşme ve spin-yörünge etkileşmesi arasındadır. Eğer atom ya da iyonun dolmamış kabukları arasındaki elektrostatik etkileşme V_{ee} , spin- yörünge etkileşmesi V_{SY} 'den daha büyük ise toplam açısal momentum ifadesi J ; LS çiftlenim biçimine göre ifade edilir. Bunun tersi olduğu durumda vardır. Eğer spin- yörünge etkileşmesi V_{SY} elektronlara arasındaki elektrostatik etkileşme V_{ee} 'den büyük ise toplam açısal momentum J ; jj çiftlenim biçimine göre toplanır. LS çiftlenimine Russell-Saunders çiftlenimi de denmektedir ve genellikle hafif atomlarda görülmektedir. jj çiftlenim biçimine ise daha ağır atomlarda rastlanmaktadır. Bu çiftlenim biçimlerinden başka çiftlenim biçimleri de vardır. Bu çiftlenim biçimlerine ise nadir olarak rastlanır (Apaydın, 2004).

3.2.1. LS çiftlenimi

Bu çiftlenim biçimi daha çok hafif atomlarda ($Z < 40$) görülmektedir. Atom üzerinde uygulanan dış alan şiddeti Zeeman bölgesinde kaldığı sürece de bu çiftlenim şekli bozulmaz, o bakımdan LS çiftlenimine “zayıf alan çiftlenimi” de denir. Bu çiftlenim türünde atomun elektronlarının yörünge açısal momentumları kendi aralarında, spin açısal momentumları da kendi aralarında, ayrı ayrı birleşirler (Aygün ve Zengin, 1998).

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \vec{l}_3 + \dots + \vec{l}_N = \sum_i \vec{l}_i \quad (3.12)$$

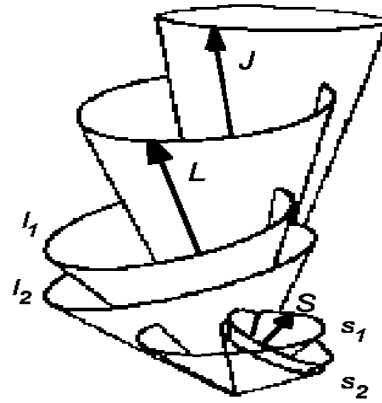
(3.13)

Yörünge kuantum sayılarının ve spin kuantum sayılarının ayrı ayrı toplanmasıyla elde edilen yörünge ve spin açısal momentumları çiftlenim yaparak toplam açısal momentum ifadesini oluştururlar. Toplam açısal momentum ifadesi ise;

(3.14)

(3.15)

ile verilir. Bu oluşum LS çiftlenimi olarak adlandırılır. ve vektörleri, kendi bileşkeleri etrafında, vektörü de z ekseni etrafında döner. Ayrıca vektörleri, elektrostatik itmelerden ileri gelen dönme momentleri yüzünden kendi bileşkeleri etrafında vektörleri de kendi bileşkeleri etrafında dönerler. Yani her vektör kendi bileşkesi etrafında, de z ekseni (varsa bir dış alanı) etrafında döner. Bu vektörlerin büyüklükleri sabit olup kuantumlaşmıştır (Başar, 2000).



Şekil 3.3. LS çiftlenimine göre vektörlerin toplanması

LS çiftleniminde yörüngesel açısal kuantum sayısının gibi değerlerinin her birini sırasıyla S,P,D,F,... gibi harflerle göstererek yazılan gösterimine atomun spektroskopik terimi adı verilir. Konfigürasyonları eğer birden fazla elektron içeriyorsa, atomun ya da iyonun sahip olduğu enerji seviyelerinde ayrılmalar gözlenir. Ayrılan enerji seviyelerinin sayısına o enerji seviyesinin çok katlılığı, çokluğu denir. Çok katlılık ya da den küçük olan ifade ile

gösterilir. Genellikle $(2s + 1)$, $(2l + 1)$ 'den daha küçük değere sahiptir. Bu yüzden üst indis $(2s + 1)$ ile gösterilir. Ayrıca verilen bir (n, l) seviyesinin ince yapı bileşenlerinin çeşitliliğine de çokluk (multiplet) denmektedir. Örneğin; $(2s+1)= 1,2,3, \dots$ gibi değerler alıyorsa bunlara karşılık gelen spektroskopik terimler sırasıyla, tekli (singlet), ikili (dublet), üçlü (triplet) terimler olarak adlandırılır.

Spektroskopik terim ifadelerini belirleyebilmek için atomların l ve s kuantum sayılarının tüm olası değerlerini bulmamız gerekmektedir. Bu değerleri belirlerken elektronların birbirinden ayırt edilemezliğinin ve Pauli dışarlama ilkesinin getirdiği sınırlamalar göz önünde bulundurulmalıdır. Pauli prensipleri göz önüne alındığında kapalı kabuklar için, örneğin; $1s^2$ ve $2p^6$ konfigürasyonundaki gibi hem $L = 0$ hem de $S = 0$ 'dır. Dolayısıyla kapalı kabuklara sahip sistemler için taban enerji seviyesinin spektral gösterimi 1S_0 'dır. Yani spektral terim bulunurken açık ya da tam dolmamış kabuklarda aktif elektronu göz önünde bulundurmamak yerinde olacaktır (Silfvast, 2004).

3.2.1.1. Farklı alt kabuğa sahip elektronların çiftlenimi

Bir alt kabuktaki yerleşim, elektronların bireysel n, l, m_l, m_s kuantum sayılarının oluşturduğu bir takım ile belirlenir. Buna göre n, l, m_l kuantum sayılarından en az birinin farklı olduğu yerleşim durumları bu sınıf içine girer. Örneğin; $np^1n'p^1, nd^1n'p^1, ns^1n'p^1$ durumlarında olduğu gibi. Bu durumdaki elektronlara özdeş olmayan elektronlar denir ve bu durumlarda Pauli dışarlama ilkesi kendiliğinden sağlanır. l_i ve s_i bireysel kuantum sayılarının olası bütün toplamları izinlidir. l ve s kuantum sayılarının olası değerleri de elektronların l_i ve s_i bireysel kuantum sayıları cinsinden,

$$l = |l_1 + l_2 + \dots + l_z + |_{min}, |l_1 + l_2 + \dots + l_z + |_{min} + 1, \dots, |l_1 + l_2 + \dots + l_z + |_{maks} \quad (3.16)$$

$$s = |s_1 + s_2 + \dots + s_z + |_{min}, |s_1 + s_2 + \dots + s_z + |_{min} + 1, \dots, |s_1 + s_2 + \dots + s_z + |_{maks} \quad (3.17)$$

eşitlikleri yardımıyla bulunur.

Örnek olarak $np^1n'p^1$ durumundaki iki elektronu göz önüne alalım. Bu yerleşime göre, np 'deki bir elektronun bireysel kuantum sayıları $l_1 = 1$, $s_1 = 1/2$ ve $n'p^1$ 'deki ikinci elektronunkiler ise $l_2 = 1$, $s_2 = 1/2$ 'dir. O halde denklem (3.16) ve (3.17)'den $l = 0,1,2$ ve $s = 0,1$ değerlerini alır. Buna göre $np^1n'p^1$ durumundaki bir

atomun $^{2s+1}L_J$ spektroskopik terimlerin sayısı, $s = 0$ iken $l = 0,1,2$ değerlerine karşı gelen üç tane tekli ve $s = 1$ iken yine $l = 0,1,2$ değerlerine karşı gelen üç tane üçlü olmak üzere altı tanedir:

$$^1S, ^1P, ^1D, ^3S, ^3P, ^3D \quad (3.18)$$

Merkezsiz alan yaklaşımı altında belli bir enerji değerine karşı gelen $np^1n'p^1$ enerji durumu, elektron-elektron etkileşmesinden dolayı altı ayrı enerji durumu içermektedir.

Eğer verilen yerleşimde ikiden fazla elektron varsa önce iki elektron için yukarıdaki işlem yapılır. Sonra bulunan l ve s kuantum sayıları ile 3. elektronun bireysel kuantum sayıları, denklem (3.16) ve (3.17)'de kullanılarak yeni l'' ve s'' kuantum sayıları bulunur. Bu işlem elektron sayısı arttıkça yinelenir (Apaydın, 2004; Ateş, 2010).

3.2.1.2. Aynı alt kabuğa sahip elektronların çiftlenimi

Çok elektronlu bir atomda dolu kabuk ya da kabuklar dışında kalan elektronların yerleşimi $np^2, np^3, nd^3, nf^2 \dots$ gibi olan konfigürasyondaki elektronlara özdeş elektronlar denmektedir. Özdeş elektron durumunda Pauli prensiplerinin getirdiği sınırlamaların göz önünde bulundurulması gerekmektedir. Bu tür durumların incelenmesi iki nedenden dolayı zordur. Bu nedenlerden birisi, Pauli dışarlama ilkesidir. Daha önce bahsedildiği gibi özdeş olmayan elektron durumunda Pauli ilkesi kendiliğinden sağlanmaktaydı. Oysa burada Pauli dışarlama ilkesi kendiliğinden sağlanmaz. İkinci neden ise elektronların birbirinden ayırt edilemezliği özelliğinden kaynaklanmaktadır. Yani, iki elektronun kendi aralarında yer değiştirmesine yeni bir kuantum durumu karşılık geliyormuş gibi görünürse de gerçekte yeni bir kuantum durumu oluşmaz.

İşte, özdeş elektronlar durumu incelenirken yukarıdaki iki nedenin ortaya koyduğu zorluklar göz önünde tutulmalıdır. Bu zorlukları gidermenin birçok yolu vardır. Burada bu yollardan biri np^2 durumundaki bir atoma uygulanacaktır.

np^2 durumundaki iki elektronun bireysel kuantum sayıları $l_1 = 1, s_1 = 1/2$ ve $l_2 = 1, s_2 = 1/2$ 'dir. O halde, Pauli dışarlama ilkesine göre, n, l, m_l kuantum sayıları

farklı olmak üzere toplam spin kuantum sayısı $s = 0,1$ gibi iki farklı değer alır. Böylece Pauli dışarlama ilkesi kendiliğinden sağlanmış olur.

Diğer taraftan, l toplam açısal kuantum sayısının oluşturulması için s 'nin 0 ve 1 değerlerinin her birine ayrı ayrı karşı gelmek üzere, iki elektronun bireysel m_l kuantum sayıları eşleştirilir. Böylece toplam manyetik kuantum sayısı m_l bulunduktan sonra, l toplam açısal momentum kuantum sayısı bulunabilir.

np^2 durumunda elektronların bireysel manyetik kuantum sayıları $m_{l_1} = 0, \pm 1$ ve $m_{l_2} = 0, \pm 1$ 'dir. O halde, $s = 1$ ve $s = 0$ için eşleştirilen manyetik kuantum sayıları ve onlara bağlı olarak bulunan m_l ve l kuantum sayıları Çizelge 3.3'de gösterilmiştir.

Çizelge 3.3. np^2 yerleşimindeki iki elektronlu atomun spektroskopik gösterimlerini belirleyen kuantum sayıları

s	m_{l_1}	m_{l_2}	m_l	l	Spektroskopik gösterim
	0	1	1		
1	1	-1	0	1	3P
	-1	0	-1		
	1	1	2		
	1	0	1		
0	1	-1	0	2	1D
	0	-1	-1		
	-1	-1	-2		
	0	0	0	0	1S

Çizelge 3.3'de $s = 1$ için m_{l_1} ve m_{l_2} 'nin olası eşleşmesinin yalnızca üçü gösterilmiştir. m_{l_1} ve m_{l_2} 'nin (1,1), (-1,1) ve (0,-1) gibi eşleşmeleri de vardır. Ancak bunlardan ilki Pauli dışarlama ilkesine ters düştüğü ve öteki ikisi de elektronların kendi aralarında yer değiştirmelerine karşı geldiği için geçerli değildir ve çizelgeye alınmamıştır.

Öte yandan, $s = 0$ için Pauli dışarlama ilkesi kendiliğinden sağlanmıştır. Bu nedenle, m_{l_1} ve m_{l_2} manyetik kuantum sayılarının eşleşmelerinde, yalnızca kendi aralarındaki yer değiştirmelerden kaynaklanan zorluk göz önünde tutulmuştur.

Örneğin; $s = 0$ için m_{l_1} ve m_{l_2} arasındaki eşleşmeye karşılık gelen $(0,1)$, $(-1,1)$, $(-1,0)$ gibi eşleşmeler tabloya alınmamıştır. Çünkü bunlar tablonun 2., 3. ve 4. satırdaki eşleşmelerden farklı değildir.

Çizelge 3.3'den görüldüğü gibi, $s = 1$ için toplam açısal manyetik kuantum sayısı $m_l = 0, \pm 1$ değerleri alır. Bu değerler, toplam açısal kuantum sayısı l 'nin 1 ve spektroskopik gösteriminin de 3P olduğunu gösterir.

$s = 0$ için m_l kuantum sayısı $m_l = 0, \pm 1, \pm 2$ ve $m_l = 0$ olmak üzere iki aynı grupta toplanmıştır. Bunlardan ilkinde $l = 2$ ve ikincisine de $l = 0$ toplam açısal kuantum sayıları karşılık gelir. O halde, $s = 0$ için atomun spektroskopik gösterimleri; $l = 2$ için tekli 1D ve $l = 0$ için de yine tekli 1S 'dir, yani merkezsiz alan yaklaşımı altında belli bir enerji değerine karşılık gelen np^2 durumu, elektron-elektron etkileşiminin artık potansiyeli nedeniyle üç ayrı enerji durumu içermektedir (Apaydın, 2004).

3.2.2. jj çiftlenimi

Çok elektronlu sistemlerin seviyeleri incelendiğinde sahip oldukları çiftlenim biçimlerinin farklı olduğu görülmüştür. Çiftlenim biçimlerindeki sınırlama elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşim ve spin-yörünge etkileşiminin birbirlerine göre baskın olma durumundan ileri gelmektedir. LS çiftleniminde elektrostatik etkileşim spin-yörünge etkileşiminden daha baskındır. Fakat bu durumun tersi olduğu durumda söz konusu olabilir. Eğer spin-yörünge etkileşimi elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşimden baskın ise, jj çiftlenimi olarak adlandırılan başka bir çiftlenim biçimi ortaya çıkar.

jj çiftlenimi atomik spektrumda saf oluşumlarda nadir olarak gözlenir. Ancak ağır elementlerin spektrumlarının yapısı incelendiğinde, elementlerin spektrumlarının jj çiftleniminin karakteristik yapısına benzediği görülmüştür. Genel olarak konuşacak olursak, hafif elementlerden ağır elementlere doğru gidildikçe çiftlenim biçimlerinin LS çiftleniminden, jj çiftlenim biçimine doğru değiştiği görülür. LS çiftlenim biçimlerinden jj çiftlenim biçimine geçişlerde görülen çiftlenim biçimlerine ise ara (intermediate) çiftlenim biçimi denir. Bu çiftlenim biçimine daha sonra değinilecektir.

jj çiftlenim biçimi ağır atomların yanı sıra çok yüklü iyonlarda da görülür ve nükleer fizikte de yaygın olarak kullanılır. Elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşim

$\langle e^2/|r_1-r_2| \rangle$, nükleer yük Z_e ($Z_e = e.N$) ile orantılıdır. Z_e yüküne sahip hidrojen benzeri iyonlar için Bohr yarıçapı $1/Z$ oranındadır. Fakat spin-yörünge etkileşim enerjisi Z^4 oranındadır. Bu yüzden Z 'nin artması ile spin-yörünge etkileşmesi büyük oranda artar. Son yörüngedeki elektronlar, hafif atomların son yörüngelerindeki elektronlarından daha büyük uzaklıklarda bulunurlar. Bu seviyelerdeki elektronlar yüksek hızlara sahiptirler. Bu elektronların çekirdek yakınındaki elektronlar ile elektrostatik etkileşimi zayıftır. Dış elektronlar ile atomik kordaki elektronların etkileşimi elektronların spin-yörünge etkileşimi ile karşılaştırıldığında daha küçüktür (Sobelman, 1979).

Bu tip bir çiftlenimde J kuantum sayısı, genelleştirilmiş bir kuantum mekaniksel vektör modelinden açığa çıkar. Bir L bileşke yörünge açısız momentumu tanımlı değildir. Böylece burada S, P, D vs. gibi terim sembolü yoktur. j bireysel elektronların açısız momentum sayılarını göstermek üzere (j_1, j_2) gibi terim gösterimi kullanılmaktadır (Okur, 2000). S, P, D,.. gibi ifadelerin yerine bireysel l_i ve s_i vektörlerinden bahsedilir ve bu bireysel l_i ve s_i yörünge ve spin kuantum sayıları birbirleriyle çiftlenim yaparak j_i vektörünü oluştururlar. Daha sonra bu açısız kuantum sayıları kendi aralarında çiftlenim yaparak, toplam açısız momentum J ifadesini verirler.

$$l_i + s_i = j_i \quad (3.19)$$

$$J = \sum_i j_i \quad (3.20)$$

J toplam açısız momentum ifadesinin büyüklüğü ise;

$$|\vec{J}| = [J(J + 1)]^{1/2} \hbar \quad (3.21)$$

ifadesi ile verilir.

Spin yörünge etkileşmesi, merkezci alan modelinden elde edilen $E_{n,l}$ enerji düzeyine i . elektronun j_i toplam açısız kuantum sayısına bağlı E_{n_i, l_i, j_i} gibi bir katkı getirir ve toplam enerji, tüm elektronların E_{n_i, l_i, j_i} enerjilerinin toplamından oluşur:

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

jj çiftleniminde atomların spektroskopik terimlerini belirlemek için her elektronun n_i, l_i, j_i bireysel kuantum sayıları ile J toplam açısal momentum kuantum sayısının belirlenmesi gerekir. Bu nedenle bu sayıların olası değerleri bulunurken, elektronların birbirinden ayırt edilemezliği ve Pauli dışarlama ilkesinin getirdiği kısıtlamalar göz önünde tutulmalıdır. Dolu alt kabuklara sahip elektronlar jj çiftlenim biçimine sahip değildirler.

Şimdi ise tam dolmamış alt kabuklara sahip atomları (ya da iyonları) göz önüne alalım.

3.2.2.1. Farklı alt kabuğa sahip elektronların çiftlenimi

jj çiftleniminde farklı alt kabuklarda bulunan elektronlar farklı kuantum sayıları takımına sahip olabilirler. Farklı kabuklardaki elektronlar özdeş olmadıkları için Pauli prensipleri kendiliğinden sağlanmış olur. Toplam açısal momentum J ifadesi ise aşağıdaki eşitlikler yardımıyla bulunur.

$$j_1 = l_1 + s_1 \quad (3.23)$$

$$j_2 = l_2 + s_2 \quad (3.24)$$

$$|j_1 + j_2| \geq J \geq |j_1 - j_2| \quad (3.25)$$

Örneğin: $ns^1n'p^1$ yerleşiminde iki elektronu olan bir atom ele alalım. s' deki bir elektron için $\ell_1 = 0$, $s_1 = 1/2$ olduğundan $j_1 = 1/2$ 'dir. p' deki bir elektron için $\ell_2 = 1$, $s_2 = 1/2$ olduğundan $j_2 = 1/2, 3/2$ gibi iki ayrı değer alır. Demek ki, spin-yörünge etkileşmesinden sonra atomun enerji durumları;

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_J, \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)_J \quad (3.26)$$

şeklinde iki ayrı değer alır.

Bireysel j_i kuantum sayısının bu değerlerine göre $ns^1n'p^1$ yerleşimine karşılık gelen toplam açısal kuantum sayısı, $j_1 = 1/2, j_2 = 1/2$ için $j = 0, 1$ ve $j_1 = 1/2, j_2 = 3/2$ için ise $j = 1, 2$ gibi değerler alır. Buna göre $ns^1n'p^1$ yerleşimine karşı gelen terimler, (j_1, j_2) gibi bir gösterimde,

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_0, \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_1, \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)_1, \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)_2 \quad (3.27)$$

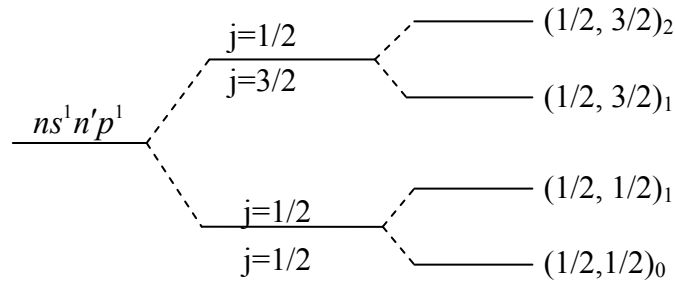
olarak ifade edilir. Demek ki, $ns^1n'p^1$ elektron yerleşimini gösteren bir atomda jj çiftlenimine karşılık gelen dört ayrı enerji durumu vardır. Yani $ns^1n'p^1$ yerleşiminin merkezsiz alan yaklaşımına karşı gelen enerji durumu önce spin-yörünge etkileşmesinden dolayı, ikiye yarılmıştır. Daha sonra U_{ee} artık potansiyelin katkısından dolayı, yeniden ikiye yarılmıştır.

Ayrıca, jj çiftleniminde elde edilen spektroskopik gösterimlerin, enerjilerin artan değerine göre sıralanışı, LS çiftlenimindeki gibi olacaktır. Çünkü bir atom ister LS çiftlenimi ister jj çiftlenim biçimi gösterebilir toplam açısal momentumun korunumlu olması ilkesinden dolayı, atomu niteleyen J toplam açısal momentum sayısı bu çiftlenim türlerinin her ikisinde de aynı değerleri alır. Bu nedenle, her iki çiftlenim sonunda ortaya çıkan spektroskopik gösterimlerin enerjinin artan değerlerine göre sıralanışı aynı olacaktır.

$ns^1n'p^1$ yerleşiminde jj çiftlenimine göre elde ettiğimiz dört spektroskopik değeri LS çiftlenim biçimine göre elde etmiş olsaydık, $^1P_1, ^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$ şeklinde elde etmiş olacaktık. Bu dört değerın Hund Kuralına göre sıralanış biçimi ise;

$$^3P_0 \rightarrow ^3P_1 \rightarrow ^3P_2 \rightarrow ^1P_1 \quad (3.28)$$

şeklindedir. O halde $ns^1n'p^1$ elektron yerleşimindeki atomu jj çiftlenimine göre niteleyen spektroskopik gösterimlerin, enerjinin artan değerlerine göre sıralanışı; şekil 3.4'deki gibi olur (Cowan, 1981).



Şekil 3.4. $ns^1n'p^1$ yerleşimine sahip bir atomda jj çiftlenimine göre oluşan yarılmalar

Farklı bir örnek olarak $nd^1n'd^1$ konfigürasyonunu ele alalım. nd^1 konfigürasyonun da bir elektron bulunmaktadır. Bu durumda bu elektron için $l_1 = 2$, $s_1 = 1/2$ olduğu için $j_1 = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ gibi iki değer alır. Aynı şekilde $n'd^1$ konfigürasyonu için de $l_1 = 2$, $s_1 = 1/2$ olduğu için $j_1 = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ gibi iki değer alır. O halde, jj çiftlenim biçimine göre bu konfigürasyon için spektroskopik gösterimleri;

$$\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_J, \left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_J, \left(\frac{5}{2}, \frac{3}{2}\right)_J, \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right)_J \quad (3.29)$$

olmak üzere dört tanedir. Burada, J toplam açısal kuantum sayısını,

$$J = |j_1 + j_2|, |j_1 + j_2| - 1, \dots \text{ ya da } |j_1 + j_2| \geq J \geq |j_1 - j_2| \quad (3.30)$$

bağıntılarından yazarsak;

$$\begin{aligned} \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_J \text{ için, } \left|\frac{3}{2} + \frac{3}{2}\right| \geq J \geq \left|\frac{3}{2} - \frac{3}{2}\right| &\rightarrow J = 3, 2, 1, 0 \\ \left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_J \text{ için, } \left|\frac{3}{2} + \frac{5}{2}\right| \geq J \geq \left|\frac{3}{2} - \frac{5}{2}\right| &\rightarrow J = 4, 3, 2, 1 \\ \left(\frac{5}{2}, \frac{3}{2}\right)_J \text{ için, } \left|\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\right| \geq J \geq \left|\frac{5}{2} - \frac{3}{2}\right| &\rightarrow J = 4, 3, 2, 1 \\ \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right)_J \text{ için, } \left|\frac{5}{2} + \frac{5}{2}\right| \geq J \geq \left|\frac{5}{2} - \frac{5}{2}\right| &\rightarrow J = 5, 4, 3, 2, 1, 0 \end{aligned} \quad (3.31)$$

şeklinde olacaktır. O halde, atomu niteleyen spektroskopik gösterimler,

$$\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_{0,1,2}, \left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_{1,2,3,4}, \left(\frac{5}{2}, \frac{3}{2}\right)_{1,2,3,4}, \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right)_{0,1,2,3,4,5} \quad (3.32)$$

şeklinindedir. Bu spektroskopik gösterimlerden görüldüğü gibi on sekiz ayrı enerji seviyesi oluşmuştur. Daha öncede bahsedildiği gibi jj çiftlenim biçimindeki terimlerin enerji seviyelerinin sıralanışı Hund kurallarına göre LS çiftlenimindeki gibidir.

3.2.2.2. Aynı alt kabuğa sahip elektronların çiftlenimi

Aynı alt kabuğa sahip elektronlar için elektronların aynı kuantum takımına sahip olmama ilkesinden dolayı, Pauli prensiplerini ihlal eden terimleri ortadan kaldırmak gerekmektedir. Örneğin, np^2 konfigürasyonundaki iki elektronu göz önüne alalım. Bu konfigürasyondaki yerleşime göre, p kabuğundaki bir elektron için $l_1 = 1, s_1 = \frac{1}{2}$ ve spin ve yörünge kuantum sayılarının vektör toplamından $j_1 = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ elde edilir. Aynı şekilde p kabuğundaki diğer elektron içinde $l_1 = 1, s_1 = \frac{1}{2}$ olduğu için $j_1 = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ elde edilir. jj çiftlenim biçimine göre spektroskopik gösterim;

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_{0,1} \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)_{1,2}, \left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right)_{1,2}, \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_{0,1,2,3} \quad (3.33)$$

şeklindedir. Yukarıdaki spektroskopik gösterimlerden görüleceği üzere, np^2 konfigürasyonu için toplam on ayrı enerji seviyesi mevcuttur. Aynı alt kabuğa sahip elektronlar için izinli jj terim ifadelerini bulurken dikkat edilecek husus Pauli prensiplerinin ihlal eden terimleri ortadan kaldırmaktır. Örneğin, $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ gösterimi için izinli ve yasak enerji seviyelerini inceleyelim.

$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ terim ifadesi için $J = 0, 1$ değerlerini alır. Pauli prensiplerine göre, elektronlar aynı kuantum sayıları takımına sahip olamazlar. Yani her bir elektron için n, l, j, m_j sayıları farklıdır. $6p^2$ kabuğunda ki bir elektron için kuantum sayıları;

$$n = 6, l = 1, j = \frac{1}{2}, m_j = \frac{1}{2} \quad (3.34)$$

ise diğer elektron için kuantum sayıları;

$$n = 6, l = 1, j = \frac{1}{2}, m_j = -\frac{1}{2} \quad (3.35)$$

şeklinde olmalıdır. Dolayısıyla $J = 1$ seviyesi her elektronun kuantum sayılarının aynı olması anlamına gelir. Burada yalnızca $J = 0$ seviyesi izinlidir. Aynı şekilde $\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)$ gösterimi içinde $J = 0, 1, 2, 3$ değerlerini alır. Pauli prensiplerine göre $J = 0, 2$ değerleri

izinli, $J = 1, 3$ değerleri ise yasaklı enerji seviyeleridir. $\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$ ile $\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right)$ seviyelerinin antisimetrik lineer kombinasyonları izinli, simetrik lineer kombinasyonları ise yasaklıdır (Cowan, 1981).

Genel olarak jj çiftleniminde özdeş elektronların bulunduğu konfigürasyonlar için izinli ve yasak terimleri belirleme de iki durum söz konusudur.

- 1) Eğer $j_1 \neq j_2$ ise özdeş olmayan elektronları hepsi izinlidir. Fakat elektronlar aynı alt kabukta bulunuyorlarsa $(j_1 j_2)_J$ ile $(j_2 j_1)_J$ seviyeleri benzerdir ve seviyelerin sayısı yarıya indirilir. Seviyeler $j_1 < j_2$ şeklinde sıralanır.
- 2) Eğer $j_1 = j_2$ ise özdeş olamayan elektronlar da seviyelerin hepsi izinlidir. Fakat özdeş elektron durumunda J 'nin izinli değerleri;

$$J = (2j - 1), (2j - 3), (2j - 5), \dots, 0 \quad (3.36)$$

şeklinde olacaktır. J 'nin yasaklı değerleri ise,

$$J = (2j), (2j - 2), (2j - 4), \dots, 0 \quad (3.37)$$

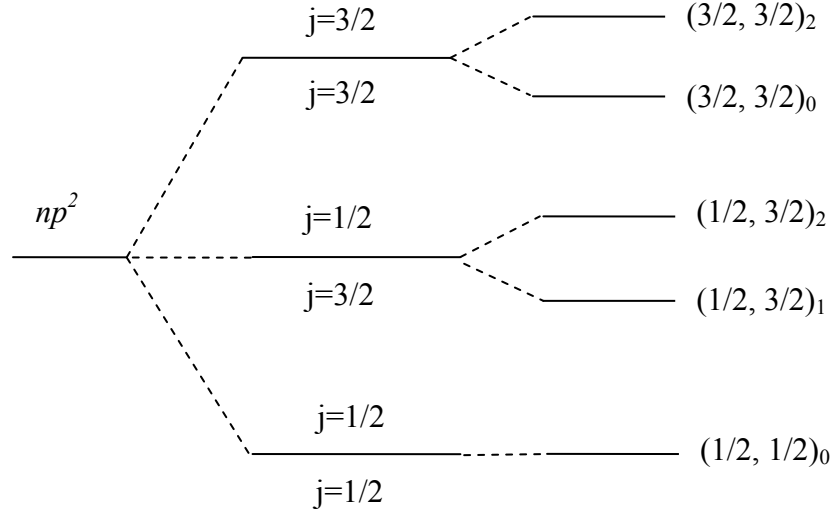
şeklinde dir. Bu durumda np^2 konfigürasyonu için izinli seviyeler aşağıdaki gibi sıralanır (Burkhardt ve Leventhal, 2006).

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_0, \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)_{1,2}, \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_{0,2} \quad (3.38)$$

Yasak seviyeler ise;

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_1, \left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right)_{1,2}, \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_{1,3} \quad (3.39)$$

ile gösterilir. Böylece np^2 yerleşimi için Hund kurallarına göre bu spektroskopik terimlerin enerjilerin artan şekilde sıralanış biçimi aşağıdaki gibi olur.



Şekil 3.5. np^2 yerleşimine sahip bir atomda jj çiftlenimine göre oluşan yarılmalara.

np^2 konfigürasyonu için izinli kuantum sayılarının tablosu ise aşağıda verilmiştir.

Ağır atomlar genellikle jj çiftlenim biçimi göstermelerine rağmen, alkali metallerde olduğu gibi her ağır atom için bu çiftlenim biçimi geçerli olmayabilir. Grup IIA elementlerinin temel seviyesi ns^2 konfigürasyonuna sahiptir. Bu yüzden bu atomlar genellikle $ns(n+1)p$ konfigürasyonunun düşük uyarılmış seviyelerine sahip olurlar. Grup IIA elementlerindeki genel fark, p konfigürasyonundaki elektron atomun korunda kalır. s kabuğundaki elektron ise daha yüksek orbitalde bulunur. Bu yüzden böyle atomların atom numaraları büyük olsa bile LS çiftlenim biçimi gösterirler (Burkhardt ve Leventhal, 2006).

3.2.3. JK ve LK çiftlenimi

Bazı durumlarda hemen hemen doldurulmuş kabuğun dışında dış valans elektron veya uyarılmış elektron, kor elektronları ile karşılaştırıldığında farklı etkileşim durumları ortaya çıkar. Bu durumda ara çiftlenim (JK ve LK çiftlenimi) olarak adlandırılan çiftlenim biçimleri kullanılır. Ara çiftlenim temel olarak, uyarılmış elektron büyük açısal momentuma sahip olduğunda uygulanır, elektron bu durumda kor içine giremez ve sadece küçük bir spin bağımlı Coulomb etkileşmesine sahip olur. Ara çiftlenimin en yaygın olanı JK çiftlenimidir. JK çiftlenimine aynı zamanda JL çiftlenimi de denmektedir. Bu çiftlenim biçiminde dış elektronun spin-yörünge etkileşmesi

elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşmeden daha büyüktür. Kapalı kabuk dışındaki kor elektronları atomik kor için L, S, J 'yi verecek şekilde normal olarak çiftlenim yaparlar. Dış elektronun açısal momentumu $l_{dış}$, atomik korun toplam açısal momentumu j_1 vektör toplamı ile çiftlenim yapar. Bu durumda yeni bir K kuantum sayısı tanımlanır.

$$K = j_1 + l_{dış}, j_1 + l_{dış} - 1, \dots, |j_1 - l_{dış}| \quad (3.40)$$

Sistemin toplam açısal momentumu vektör toplamı yardımıyla K kuantum sayısı ile dış elektronun spininin çiftlenimi ile elde edilir.

$$J = K \pm s_{dış} \quad (3.41)$$

JK çiftleniminin terim sembolü ise $j_i[K]_J$ şeklindedir.

Bir diğer ara çiftlenim biçimi ise LK çiftlenimidir. Bu çiftlenim biçiminde (iki elektron konfigürasyonlarında) Coulomb etkileşmesi her bir elektronun spin-yörünge etkileşmesinden daha büyüktür ve iç elektronların spin-yörünge etkileşmesi en önemli ikinci faktördür. İlk iki elektronun açısal momentumu l_1 ve $l_{dış}$, toplam açısal momentum L 'yi vermek üzere çiftlenim yaparlar. Daha sonra L , iç elektronların spini s ile çiftlenim yapar ve K kuantum sayısını oluştururlar. Bu K toplamı da, dış elektronların spini $s_{dış}$ ile çiftlenim yaparak toplam açısal momentum J 'yi oluştururlar.

$$\begin{aligned} L &= l_1 + l_{dış}, l_1 + l_{dış} - 1, \dots, |l_1 - l_{dış}| \\ K &= L \pm s \\ J &= K \pm s_{dış} \end{aligned} \quad (3.42)$$

LK çiftleniminin terim gösterimi ise $L[K]_J$ ile verilir (Agaker, 2006).

İki kez uyarılmış bir durumda, tek elektron dışında diğer elektronlar çekirdekten çok uzakta yüksek yörüngelerde olması beklenirken, dış elektron çekirdeğe yakın olarak kalır. Ara çiftlenim elektronlar çekirdekten farklı uzaklıklarda buldukları durumlarda kullanılır. Böylece elektronların kendi aralarındaki veya kendi spin ve yörüngeleri arasındaki etkileşimin şiddeti de farklı olacaktır.

$npn'p$ konfigürasyonu için çiftlenim biçimlerinin gösterimlerini ifade edecek olursak,

LS çiftlenimi için seviye gösterimi $^{2s+1}L_J$:

$$^1S_0, ^1P_1, ^1D_2, ^3S_1, ^3P_{0,1,2}, ^3D_{1,2,3} \quad (3.43)$$

LK çiftlenimi için seviye gösterimi $L[K]_J$:

$$S \left[\begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \right]_{0,1}, P \left[\begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \right]_{0,1}, P \left[\begin{matrix} 3 \\ 2 \end{matrix} \right]_{0,1}, D \left[\begin{matrix} 3 \\ 2 \end{matrix} \right]_{1,2}, D \left[\begin{matrix} 5 \\ 2 \end{matrix} \right]_{2,3} \quad (3.44)$$

JK çiftlenimi için seviye gösterimi $j[K]_J$:

$$\frac{1}{2} \left[\begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \right]_{0,1}, \frac{3}{2} \left[\begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \right]_{0,1}, \frac{1}{2} \left[\begin{matrix} 3 \\ 2 \end{matrix} \right]_{1,2}, \frac{3}{2} \left[\begin{matrix} 3 \\ 2 \end{matrix} \right]_{1,2}, \frac{3}{2} \left[\begin{matrix} 5 \\ 2 \end{matrix} \right]_{2,3} \quad (3.45)$$

jj çiftlenimi için seviye gösterimi $[j_1 j_2]_J$:

$$\left[\begin{matrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right]_{0,1}, \left[\begin{matrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right]_{1,2}, \left[\begin{matrix} 3 & 1 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right]_{1,2}, \left[\begin{matrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right]_{0,1,2,3} \quad (3.46)$$

şeklinindedir. Toplam açısal momentum J için, alt seviyelerin sayısı çiftlenim biçimlerinin bütün tipleri için aynıdır.

Elektrostatik ve spin-yörünge etkileşmesi aynı büyüklükteyse, yani $V_{es} \approx V_{sy}$ ise enerji seviyeleri ara (intermediate) çiftlenim tarafından tanımlanır. Sistemin toplam dalga fonksiyonu ψ , saf LS ya da jj çiftleniminde verilen \emptyset dalga fonksiyonları ile belirlenir.

$$\psi = \sum_i C_i \emptyset_i(LS(jj)) \quad (3.47)$$

Ara çiftlenim, saf çiftlenim biçimi uygulanmadığında kullanılır (Beyer ve Shevelko, 2003).

3.3. Işımalı Geçişler

Bir atomun bağlı seviyeleri arasındaki ışımalı geçiş; bir elektron foton salınımı vasıtasıyla bir düşük seviyeye geçtiğinde (radyoaktif bozunma ya da de-eksitasyon) ya da foton soğurarak bir üst seviyeye yani uyarılmış seviyeye geçtiğinde meydana gelir. Bir atom için bu süreç aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$X + h\nu = X^* \quad (3.48)$$

Burada üst indis (*) uyarılmış bir seviyeyi ifade eder. Uyarılmış seviyeler sonsuz hayat süresine sahip olduğu kabul edilen temel seviyeye göre, sonlu hayat süresine sahiptirler. Işımalı süreçler bir spektrumdaki salma ve soğurma çizgileri ile birlikte bahsedilir. Gözlenen salma ve soğurma çizgilerinin şiddeti hem atomun iç özelliklerine hem de atomik sistemin mevcut olduğu dış ortamın şartlarına bağlıdır. Bir spektrumu analiz etmek için, gözlenen özelliklerin doğasını ve de onların ölçülen nicel şiddetlerini anlamaya gerek vardır. Bu bölümde spektral oluşumu sağlayan kuralları ve ışımalı geçişlerin iç atomik fiziğini tanımlayacağız.

Yaygın olarak kullanılan astrofiziksel ve spektroskopik deyimde geçişler, “izinli”, “yasak” ya da “iç sistem” olarak sınıflandırılır. Örneğin çoğu astrofiziksel kaynaklarda, en önemli gözlenen çizgilerin bazıları “yasak” olarak sınıflandırılır. Fakat bu tam olarak ne ifade eder? Bu sorunun cevabı fiziksel temellerini ve de geçişin her bir tipinin şiddetini belirleyen kuantum mekaniksel kuralları iyi anlamamızı gerektirir. “Yasak geçiş” ifadesi tam olarak geçişin olmadığı anlamına gelmez. Yasak çizgilerin geçiş oranları izinli çizgilere göre çok daha küçüktür. Bu yüzden, laboratuvar deneyleri gözlemlendiğinde yasak çizgilerin, izinli çizgilerden çok daha zayıf olduğu görülmüştür. Fakat çoğu astrofiziksel kaynaklarda özellikle H II bölgeleri (gazlar, nebula, süpernova kalıntıları, yıldızlar arası ortam) iç fiziksel şartları küçük olmasına rağmen, yasak geçişler, uyarma ve radyoaktif bozunma durumunda baskındır. Yani yasak çizgiler fiziksel şartlara bağlı olarak izinli çizgilere benzeyebilir.

Işımalı geçişlerin sınıflandırılması, sadece iç atomik özelliklere bağlı olan Einstein katsayıları A ve B tarafından tanımlanan geçiş oranlarına dayanır. Bu katsayılar kuantum mekaniksel olarak hesaplanır ya da laboratuvar ortamında ölçülür. Einstein geçiş olasılıkları ya da oranları, kaynaklardaki sıcaklık ya da yoğunluk gibi dış faktörlerden bağımsızdır. Atomik geçişler Einstein bağıntıları ile ilgili olan soğurma ve

salma çizgilerinin oluşumu ile ifade edilir. Astrofiziksel uygulamalarda birinci derece kuantum mekaniksel düzeltme kullanılır. Kuantum elektrodinamik (KED) gibi etkileri içeren daha ayrıntılı düzeltmeler istisnai durumlar da kullanılır. Burada bu sınırlama göz önünde bulundurularak ışımalı geçişler tartışılacaktır.

Radyasyon alanını çevreleyen fotonlar, atomda çeşitli geçişlere sebep olabilir. Kuantum mekaniksel olarak bu olasılık, ilk ve son seviyelerin dalga fonksiyonları, radyasyon alanının uygun momente göre bir operatöre bağlı olan geçiş matris elemanı yardımıyla hesaplanır. Bu moment genellikle izinli geçişlerle ilgili olan dipol momentlerle veya yasak geçişler ya da dipol olmayan yüksek mertebe multipoller olarak karakterize edilir. Ek olarak, ışımalı geçişler ilk ve son seviyelerin spin ve açısal momentleri tarafından sınıflandırıldığı gibi atomik seviyelerin simetrisi tarafından ifade edilir. Geçişin tipine göre bu simetrisinin özelliği seçim kuralları ile belirlenir. Geçiş matris elemanının hesaplanmasında, ışımalı geçişler için olasılıklar ve oranlar bu bölümde açıklanacaktır (Pradhan ve Nahar, 2011).

3.3.1. Einstein A ve B Katsayıları

Atomlar ile elektromanyetik radyasyonun etkileşimi ilk kuantumlaşma olayı olarak muamele görülür; enerji seviyeleri ayrılır, fakat radyasyon alanı sürekli kalır. İkinci kuantumlaşma da, burada radyasyon alanı da kuantumlaşır ve KED oluşturur, bu da yüksek doğruluğu mümkün kılar, fakat çok fazla ayrıntılı bir hesaplama gerektirir. KED seviyelerindeki doğruluk çoğu astrofiziksel durumlar için gerekli değildir. Burada ikinci kuantumlaşma olayı konu dışında tutulacaktır.

Seviyelerin enerjisinin $E_2 > E_1$ şeklinde sıralandığı iki atomik seviyeyi göz önüne alalım. Bu seviyeler arasındaki geçiş enerjisi;

$$E_{21} = E_2 - E_1 = hv \quad (3.49)$$

şeklinde verilir. Bu iki seviye arasında üç türlü geçiş gözlemlenir. Bunlar kendiliğinden salma, soğurma ve etkilemeli salmadır. Bu süreçlerin ifadesi olan katsayılar sırasıyla, A_{21} , ρB_{12} ve ρB_{21} şeklindedir. Kendiliğinden salma olayı üst seviyedeki bir elektronun, o seviyedeki hayat süresini doldurduktan sonra hv enerjili bir foton salarak alt seviyeye geçmesiyle meydana gelir. Soğurma; alt seviyede bulunan bir elektronun yine hv enerjili bir foton ile etkileşerek üst seviyeye geçmesidir. Bu olay için ρ yoğunluklu bir

radyasyon kaynağına ihtiyaç vardır. Etkilemeli salma da ise, soğurma olayının tersidir. Üst seviyede bulunan atomun, o seviyedeki hayat süresinin tamamlamadan ρ radyasyon yoğunluklu bir kaynaktan çıkan $h\nu$ enerjili bir foton ile etkileşerek alt seviyeye geçişini ifade eder.

Seviye popülasyonunu N_i , radyasyon yoğunluğunu ρ_i ile ifade edersek, bu süreçler için oranlar A ve B katsayılarına bağlıdır. N_2 üst seviyenin popülasyonu, N_1 alt seviyenin popülasyonu olmak üzere zamana bağlı popülasyon oranları,

$$-\frac{dN_2}{dt} = \frac{dN_1}{dt} = A_{21}N_2 - B_{12}\rho_{12}N_1 + B_{21}\rho_{21}N_2 \quad (3.50)$$

şeklindedir. Yani, 2 numaralı seviyenin popülasyonu azalırken, 1 numaralı seviyenin popülasyonu artar. Kararlı bir seviye için $(dN_2)/dt = (dN_1)/dt = 0$ olduğundan, iki seviyenin popülasyon oranı,

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}\rho_{12}}{A_{12} + B_{21}\rho_{21}} \quad (3.51)$$

şeklindedir. Dış radyasyon alanı yokluğunda $\rho_{\nu} = 0$ olur. Böylece denklem,

$$\frac{dN_2}{N_2} = -A_{21}dt \quad (3.52)$$

şekline dönüşür. Denk. (3.52)'yi çözdüğümüzde,

$$N_2(t) = N_2(0)e^{-A_{21}t} \quad (3.53)$$

denklemini elde ederiz. Burada uyarılmış bir seviye popülasyonunun A_{21} ile verilen bir oranda zamanla eksponansiyel olarak değiştiği görülür. Bu oran 2 seviyesinin τ_2 hayat süresini belirler.

$$A_{21} = \frac{1}{\tau_2} \quad (3.54)$$

Denklem (3.54)'den görüldüğü gibi Einstein katsayısı A, zamanın tersidir. Örneğin hidrojenik $L_{y\alpha}$ çizgisi için geçiş, saniyede 10^9 geçiş mertebesindedir, yani $A_{2p,1s} =$

$6,25 \cdot 10^8 \text{ sn}^{-1}$ 'dir. Denk. (3.54)'de bu değer yerine yazıldığında $\tau_{2p} = 1,6 \text{ ns}$ hayat süresi elde edilir.

Şimdi ise birim zamanda atom başına salma ve soğurma; P_{21} ve P_{12} olasılıklarını tanımlayalım:

$$\frac{dN_2}{dt} = P_{21}N_2 - P_{12}N_1 \quad (3.55)$$

Bu durumda salma ve soğurma olasılıkları;

$$P_{sal} = A_{12} + B_{21}\rho_\nu \text{ ve } P_{soğ} = B_{12}\rho_\nu \quad (3.56)$$

şeklinde ifade edilir. Kararlı seviye şartı durumunda $(dN_2)/dt = 0$ ise;

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}\rho_\nu}{A_{12} + B_{21}\rho_\nu} \quad (3.57)$$

şeklinde olduğunu söylemiştik. Bu ifadeyi iki seviyeden daha fazla seviyeler için genelleştirirsek;

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{B_{ij}\rho(v_{ij})}{A_{ij} + B_{ji}(v_{ij})} \quad (3.58)$$

formuna dönüşür. Eğer radyasyon alanı yoksa denklem (3.52) ve denklem (3.53), bütün $i < j$ seviyeleri için genelleştirilir.

$$-\frac{dN_{ij}}{dt} = \sum_{i < j} A_{ji}N_j \quad (3.59)$$

$$N_j(t) = N_j(0)e^{-\sum_i A_{ji}t} \quad (3.60)$$

Şimdi ise herhangi bir i seviyesine radyoaktif bozunmaya karşı j seviyelerinin hayat süresi ifadesi,

$$\tau_j = (\sum_i A_{ji})^{-1} \quad (3.61)$$

şeklindedir. Hidrojen için, nl seviyesinin hayat süresi n^3 ile orantılıdır: $\tau_{nl} \propto n^3$. Yine bu seviyenin hayat süresi;

$$\tau_n = \left(\frac{1}{n^2} \sum_l \frac{2l+1}{\tau_{nl}} \right)^{-1} \propto n^5 \quad (3.62)$$

ile ifade edilir. A ve B katsayıları, seviyelerin popülasyonundan ve sıcaklık, yoğunluk ve radyasyon alanı gibi dış parametrelerden bağımsızdır. Einstein katsayıları sadece, nükleer yük, atomik elektron sayısı ve elektronik yapı gibi atomun iç özelliğine ve uyarma seviyesine bağlıdır (Pradhan ve Nahar, 2011).

3.3.2. Osilatör Şiddeti, Geçiş Olasılığı ve Hayat Süresi

Çizgi ve multipler şiddeti ifadesi elektronik geçişlerin teorik hesaplamalarında oldukça kullanışlıdır, çünkü her ikisi de enerji parametrelerine bağlı değildir. Ancak bu nicelikler, deneysel olarak ölçülen niceliklerden uzaktırlar (Sobelman, 1979). Bu yüzden deneysel niceliklerle orantılı olan geçiş olasılığı, hayat süresi gibi ifadelerin kullanılması daha uygundur.

Bir atom ya da bir molekül, bir seviyeden başka bir seviyeye geçiş yapabilir ve foton soğurabilir. Osilatör şiddeti ifadesi verilen bir spektroskopik geçiş için soğurmaya karşılık gelen atom başına elektronların sayısı olarak tanımlanabilir. Kısaca osilatör şiddeti, geçişin şiddetini ifade etmek için kullanılan boyutsuz bir niceliktir.

$\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ geçişi için osilatör şiddeti $S(\gamma J \rightarrow \gamma' J')$ çizgi şiddetine bağlı olarak,

$$f(\gamma J \rightarrow \gamma' J') = \frac{8\pi^2 m c a_0^2}{3h(2J+1)} \sigma S(\gamma J \rightarrow \gamma' J') = \frac{E_{J'} - E_J}{3(2J+1)} S(\gamma J \rightarrow \gamma' J') \quad (3.63)$$

ifadesi ile verilir. $E_{J'} - E_J$, Rydberg birimlerinde geçiş enerjisidir. $(2J + 1) = g_J$ ifadesi ise alt seviyenin istatistiksel ağırlığıdır. Salma ve soğurma osilatör şiddetleri arasında ise aşağıdaki denklemlerde görüldüğü gibi bir bağıntı vardır.

$$(2J + 1)f(\gamma J, \gamma' J') = -f(\gamma' J', \gamma J)(2J' + 1) \quad (3.64)$$

$$f_{J,J} = -f_{J',J'} \frac{g_J}{g_{J'}} \quad (3.65)$$

Geçiş olasılığı, i enerji seviyeli g_i durumlarının herhangi birine bir geçiş yapan j durumundaki bir atomun birim zaman başına toplam geçiş olasılığı olarak tanımlanır ve $S(\gamma J \rightarrow \gamma' J')$ çizgi şiddeti ifadesine bağlı olarak (Cowan, 1981),

$$A_{JJ'} = \frac{64\pi^4 e^2 a_o^2 \sigma^3}{3h} \frac{1}{2J'+1} S(\gamma J \rightarrow \gamma' J') \quad (3.66)$$

ile verilir. Geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti ifadesi birbirlerine bağlı olarak ifade edilebilmektedir. Bu bağıntı,

$$A_{JJ'} = \frac{2\pi e^2}{m_e c \epsilon_0 \lambda^2} \frac{g_J}{g_{J'}} f_{JJ'} = \frac{16\pi^3}{3h \epsilon_0 \lambda^3 g_{J'}} S \quad (3.67)$$

şeklinde tanımlanır (Cowan, 1981).

Herhangi bir atom ya da iyon için uyarılmış seviye,

$$-\left(\frac{dN_j}{dt}\right) = N_j \sum_{(i<j)} A_{ji} \quad (3.68)$$

ifadesi ile verilen ayırt edici bir yaşam süresine sahip olacaktır. Burada N_j , j uyarılmış durumdaki seviyenin nüfus yoğunluğudur ve A_{ji} ise Einstein kendiliğinden salma katsayısıdır. Üst seviyeye uyarılan elektronlar, bu uyarılmış seviye de kısıtlı bir yaşam süresine sahip olacaklardır ve bu seviyeden kendiliğinden salma yaparak bir alt seviyeye geri döneceklerdir (Cowan, 1981). Denklem (3.68)'in integrali alınarak uyarılmış seviyenin hayat süresi;

$$\tau_j = \frac{1}{\sum_{(i<j)} A_{ji}} \quad (3.69)$$

ifadesi ile tanımlanır. Güçlü atomik geçişlerde hayat süreleri, 1 ile 10 ns arasındadır.

3.3.3. Elektrik dipol ışıması

ψ dalga fonksiyonu için r 'nin ortalama değerinin kuantum mekaniksel ifadesi,

$$\langle r \rangle = \langle \psi | r | \psi' \rangle \quad (3.70)$$

şeklindedir. ψ ve ψ' gibi iki durum arasındaki ışımali geçişleri ele almak için, dalga fonksiyonunun zamana bağlı kısmı kullanılmalıdır.

$$\psi = \psi_0 e^{-iEt/\hbar} \quad (3.71)$$

Işıma zamanı boyunca r' nin beklenen değeri,

$$\langle \psi | r | \psi' \rangle = \langle \psi_0 | r | \psi'_0 \rangle e^{-iEt/\hbar} \quad (3.72)$$

ile gösterilir. Klasik açısal frekans $\omega = 2\pi\nu = |E' - E|/\hbar$ şeklinde ifade edilir. denklem (3.72)'nin karesini aldığımızda denklem (3.72)'deki ifadeyi elde ederiz.

$$|\langle \psi | r | \psi' \rangle|^2 = |\langle \psi_0 | r | \psi'_0 \rangle|^2 \quad (3.73)$$

Tüm ışımali zamanı üzerinden $|r|^2$ nin ortalaması alınarak, bozunma oranı elde edilir.

$$a = \frac{4e^2\omega^4}{3c^3h\nu} |\langle \psi_0 | r | \psi'_0 \rangle|^2 = \frac{64\pi e^2\nu^3}{3c^3h} |\langle \psi_0 | r | \psi'_0 \rangle|^2 \quad (3.74)$$

Tensör operatörü olarak, r_i vektör pozisyonunu a_0 Bohr yarıçapı cinsinden yazalım.

$$r_i^2 = a_0^2 \sum_q |r_q^{(1)}(i)|^2 \quad (3.75)$$

Uyarılmış bir seviye $\gamma'J'M'$ 'den düşük seviye γJM 'ye birim zaman başına kendiliğinden salma geçiş olasılığı,

$$a = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} \sum_q |\langle \gamma JM | P_q^{(1)} | \gamma'J'M' \rangle|^2 \quad (3.76)$$

ile verilir. Burada;

$$P_q^{(1)} \equiv \sum_{i=1}^N r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^N r_i C_q^{(1)}(i) \quad (3.77)$$

$(-e \cdot a_0)$ biriminde ölçülen atomun klasik dipol momentidir.

Elektrik dipol matris elemanının birçok alternatif şekli vardır: (Bethe and Salpeter, 1957; Cowan, 1981)

$$\begin{aligned} & \left\langle \gamma JM \left| \sum_i r(i) \right| \gamma' J' M' \right\rangle \\ & 2(E' - E)^{-1} \langle \gamma JM | \sum_i \nabla_i | \gamma' J' M' \rangle \\ & 2(E' - E)^{-2} \left\langle \gamma JM \left| \sum_i \nabla_i V \right| \gamma' J' M' \right\rangle \end{aligned} \quad (3.78)$$

Burada E ve E' Rydberg biriminde γJM ve $\gamma' J' M'$ durumlarının enerjileridir. V , Rydberg biriminde merkezci potansiyel enerjidir ve tüm mesafeler Bohr birimindedir. Wigner-Eckart teoremine göre elektrik dipol matris elemanı;

$$\langle \gamma JM | P_q^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle = (-1) \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \langle \gamma J || P_q^{(1)} || \gamma' J' \rangle \quad (3.79)$$

olarak ifade edilir. Burada $\langle \gamma J || P_q^{(1)} || \gamma' J' \rangle$ indirgenmiş matris elemanıdır. Ayrıca 3-j sembolünün özelliklerinden geçişlerin, sadece $(J1J')$ 'nin üç açı bağıntısı sağlanırsa meydana gelebileceği görülür. Yani,

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1 \quad J = J' = 0 \text{ izinli değil} \quad (3.80)$$

olmalıdır. Ayrıca $-M + q + M' = 0$ olmalıdır (Cowan, 1981).

3.3.4. Elektrik dipol çizgi şiddeti

Bu bölümde hem elektrik hem de manyetik multipol geçişler için yaygın olarak kullanılan ifadelere yer vereceğiz. Enerji spektrumunu göz önüne aldığımızda, serbest atomların enerji seviyeleri toplam açısal momentum J manyetik kuantum sayısı M' ye göre dejenere olur. Kendiliğinden elektronik geçiş ifadeleri bu değerlere bağlı değildir (Sobelman, 1979).

Çizgi şiddeti, matris elemanının karesi ve multipolariteliği k 'ya bağlı olarak aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$S(\gamma J; \gamma' J') = S(\gamma' J'; \gamma J) = \sum_{MM'} |\langle \gamma JM | P_q^{(k)} | \gamma' J' M' \rangle|^2 \quad (3.81)$$

Burada, k ifadesi elektrik dipol çizgi şiddeti ifadesinde 1 değerinin alırken, kuadropol çizgi şiddeti ifadesinde 2 gibi değerler alır.

Bu durumda elektrik dipol şiddeti ifadesi;

$$S(\gamma J; \gamma' J') = S(\gamma' J'; \gamma J) = \sum_{MM'} |\langle \gamma JM | P_q^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle|^2 = |\langle \gamma J || P_q^{(1)} || \gamma' J' \rangle|^2 \quad (3.82)$$

şekline dönüşür (Cowan, 1981). Elektrik dipol çizgi şiddeti ifadesi atom ya da iyonun açısal momentum ifadelerinin yapmış olduğu çiftlenim biçimine göre farklılık göstermektedir. Bölüm 3.2'de açıkladığımız gibi farklı çiftlenim biçimleri mevcuttur. Burada LS, JK, LK ve jj çiftlenim biçimleri için elektrik dipol çizgi şiddeti ifadelerini açıklayacağız.

3.3.4.1. LS çiftleniminde çizgi şiddeti ifadesi

İki uyarılmış seviye arasındaki tek elektron geçişinde çizgi şiddeti ifadesi;

$$\begin{aligned} \sqrt{S_{LS}} &\equiv \langle [(\dots \alpha_1 L_1, l_2) L (\dots S_1 S_2) S] J || r_N^{(1)} || [(\dots \alpha'_1 L'_1, l'_2) L' (\dots S'_1 S'_2) S'] J' \rangle \\ &= \delta_{S_1 S'_1} \delta_{S_2 S'_2} (-1)^{L+S+J'+1} [J, J']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{matrix} \right\} \langle (\dots \alpha_1 L_1, l_2) L || r_N^{(1)} || (\dots \alpha'_1 L'_1, l'_2) L' \rangle \quad (3.83) \\ &= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1 \alpha'_1 L'_1 S'_1} \delta_{S_2 S'_2} (-1)^{S+J'+L_1+l'_2} [J, J', L, L']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & L' & l'_2 \end{matrix} \right\} P_{l_2 l'_2}^{(1)} \end{aligned}$$

ifadesi ile verilir. Burada $P_{l_2 l'_2}^{(1)}$ operatörü elektrik dipol geçiş için radyal geçiş integrali (veya geçiş matris elemanı) olup, genel ifadesi;

$$P_{ll'}^{(1)} = \delta_{l', l \pm 1} (-1)^{l+l'} (l_>)^{1/2} \int_0^\infty P_{nl} r P_{n'l'} dr = (-1)^{l-l'} P_{ll'}^{(1)} = -P_{l'l}^{(1)} \quad (3.84)$$

şeklindedir. Burada P_{nl} ilk seviyenin radyal dalga fonksiyonu, $P_{n'l'}$ son seviyenin radyal dalga fonksiyonu olup, $l > l'$ ifadesi l ve l' ifadelerinden büyük olan için kullanılır (Cowan, 1981).

LS çiftleniminde çizgi şiddeti denklemindeki ifadeleri LS çiftlenim biçimine sahip iki ayrı seviyedeki tek elektron geçişini göz önüne alarak açıklayalım.

$$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3s ({}^4P_{1/2}) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p ({}^4P_{3/2}) \quad (3.85)$$

Burada azot (N) atomunun iki farklı seviyesindeki geçiş görülmektedir. Elektrik dipol çizgi şiddeti ifadesine göre geçişin gerçekleştiği ilk ve son seviyeler arasındaki kuantum sayılarını ve açısal momentum ifadelerini yazalım.

İlk seviye için kuantum sayıları;

$$L_1 = 1 \text{ (Kor teriminin terim sembolü } P \text{ dir.)}$$

$$l_2 = 0 \text{ (Açık kabuktaki elektronların yörünge kuantum sayısı } s \text{ den gelir.)}$$

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

$$S_1 = 1 \text{ (Kor teriminin çok katlılığı } 2S_1 + 1 = 3 \text{ dür.)}$$

$$s_2 = 1/2 \text{ (Açık kabuktaki elektronların spin kuantum sayısıdır.)}$$

$$S = 3/2 \text{ (Terim sembolünün çok katlılığından gelir.)}$$

Son seviyenin açısal momentum ve kuantum sayıları;

$$L'_1 = 1 \text{ (Kor teriminin terim sembolü } P \text{ dir.)}$$

$$l'_2 = 1 \text{ (Açık kabuktaki elektronların yörünge kuantum sayısı } p \text{ dir.)}$$

$$L' = 1 \text{ (Son seviyenin terim sembolü } P \text{ dir.)}$$

$$S'_1 = 1 \text{ (Kor teriminin çok katlılığı } 2S_1 + 1 = 3 \text{ dür.)}$$

$$s'_2 = 1/2 \text{ (Açık kabuktaki elektronların spin kuantum sayısıdır.)}$$

$$S' = 3/2 \text{ (Terim sembolünün çok katlılığından gelir.)}$$

ifadeleriyle belirtildiği gibidir.

3.3.4.2. jj çiftleniminde çizgi şiddeti ifadesi

jj çiftleniminde spin ve yörünge kuantum sayıları öncelikle kendi aralarında çiftlenim yapma eğilimindedirler. Daha sonra ise spin ve yörünge kuantum sayılarının oluşturduğu toplam açısal kuantum sayıları kendi aralarında çiftlenim yaparak, atom ya

da iyonun toplam açısai momentum ifadelerini oluştururlar. jj çiftleniminde, tek elektron geçişleri için çizgi şiddeti ifadesi;

$$\begin{aligned}
\sqrt{S_{jj}} &\equiv \langle [(\dots \alpha_1 L_1 S_1) J_1, (l_2 s_2) j_2] J \| r_N^{(1)} \| [(\dots \alpha'_1 L'_1 S'_1) J'_1, (l'_2 s'_2) j'_2] J' \rangle \\
&= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1 \alpha'_1 L'_1 S'_1} \delta_{J_1 J'_1} (-1)^{J_1 + j'_2 + J + 1} [J, J']^{1/2} \begin{Bmatrix} J_1 & j_2 & J \\ 1 & j' & j'_2 \end{Bmatrix} \langle (l_2 s_2) j_2 \| r_N^{(1)} \| (l'_2 s'_2) j'_2 \rangle \quad (3.86) \\
&= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1 \alpha'_1 L'_1 S'_1} \delta_{J_1 J'_1} (-1)^{J_1 + J - l_2 - s} [J, J', j_2, j'_2]^{1/2} \begin{Bmatrix} J_1 & j_2 & J \\ 1 & j' & j'_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_2 & s & j_2 \\ j'_2 & 1 & l'_2 \end{Bmatrix} P_{l_2 l'_2}^{(1)}
\end{aligned}$$

ifadeleriyle verilir. jj çiftleniminde elektrik dipol seçim kuralları ise;

$$\begin{aligned}
\nabla j_2 &= 0, \pm 1 & j_2 = j'_2 = 0 \text{ izinli değildir.} & (3.87) \\
\nabla J_1 &= 0
\end{aligned}$$

olacak şekilde belirlenir (Cowan, 1981).

jj çiftleniminde iki ayrı seviyedeki bir geçişi göz önüne alarak çizgi şiddeti denklemindeki ifadeleri tanımlayalım.

$$4f^{11} ({}^4I_{15/2}) 6s_{1/2} \left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2} \right)_8 \rightarrow 4f^{11} ({}^4I_{15/2}) 6p_{1/2} \left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2} \right)_8 \quad (3.88)$$

Burada bir kez iyonlaşmış holmiyum (Ho II) için temel seviyeden uyarılmış bir seviyeye olan geçiş görülmektedir. Bu geçiş için çizgi şiddeti ifadesindeki kuantum ve açısai momentum sayılarını yazalım.

İlk seviye için;

$L_1 = 6$ (Kor teriminin terim sembolü I' dır.)

$S_1 = 3/2$ (Kor teriminin çok katlılığından gelir.)

$J_1 = 15/2$ (Spin ve yörünge kuantum sayılarının çiftleniminden gelen ifadedir.)

$l_2 = 0$ (Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısıdır.)

$s_2 = 1/2$ (Açık kabuktaki elektronun spin kuantum sayısıdır.)

$j_2 = 1/2$ (Açık kabuktaki spin ve yörünge kuantum sayılarının çiftleniminden gelen ifadedir.)

$J = 8$ (Kor teriminin ve açık kabuğun toplam açısai kuantum sayılarının çiftleniminden gelen ifadedir.)

Son seviye için;

$$L'_1 = 6 \text{ (Kor teriminin terim sembolü } I' \text{ dir.)}$$

$$S'_1 = 3/2 \text{ (Kor teriminin çok katlılığından gelen ifadedir.)}$$

$$J'_1 = 15/2 \text{ (Spin ve yörünge kuantum sayılarının çiftleniminden gelen ifadedir.)}$$

$$l'_2 = 1 \text{ (Açık kabuktaki elektronun yörünge kuantum sayısıdır.)}$$

$$s'_2 = 1/2 \text{ (Açık kabuktaki elektronun spin kuantum sayısıdır.)}$$

$$j'_2 = 1/2 \text{ (Açık kabuktaki spin ve yörünge kuantum sayılarının çiftleniminden gelen ifadedir.)}$$

$$J' = 8 \text{ (Kor teriminin ve açık kabuğun toplam açısız kuantum sayılarının çiftleniminden gelen ifadedir.)}$$

$$s = 1/2 \text{ (Tek elektron geçişinden kaynaklanır.)}$$

3.3.4.3. LK çiftleniminde çizgi şiddeti ifadesi

Tek elektron geçişi için LK çiftleniminde çizgi şiddeti ifadesi;

$$\begin{aligned} \sqrt{S_{LK}} &\equiv \langle [(\dots \alpha_1 L_1, l_2) L, S_1] K, s_2 J || r_N^{(1)} || [(\dots \alpha'_1 L'_1, l'_2) L', S'_1] K', s'_2 J' \rangle \quad (3.89) \\ &= (-1)^{K+s+J'+1} [J, J']^{1/2} \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K \end{Bmatrix} \langle [(\alpha_1 L_1, l_2) L, S_1] K || r_N^{(1)} || [(\alpha'_1 L'_1, l'_2) L', S'_1] K' \rangle \\ &= \delta_{S_1 S'_1} (-1)^{K+s+J'+L+S_1+K'} [J, J', K, K']^{1/2} \\ &\quad \times \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & S_1 & K \\ K' & 1 & L' \end{Bmatrix} \langle [(\alpha_1 L_1, l_2) L] || r_N^{(1)} || [(\alpha'_1 L'_1, l'_2) L'] \rangle \\ &= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1 \alpha'_1 L'_1 S'_1} (-1)^{K+s+J'+L+S_1+K'+L_1+l'_2+1} [J, J', K, K', l, l']^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \begin{Bmatrix} K & s & J \\ J' & 1 & K \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & S_1 & K \\ K' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & l' & l'_2 \end{Bmatrix} P_{l_2 l'_2}^{(1)} \end{aligned}$$

ile verilir. J , $l'_2 = l_2 + 1$ ve $\alpha_1 L_1, l_2$ üzerindeki seçim kurallarına ek olarak, 6-j sembolleri için seçim kuralları aşağıda gösterildiği gibidir (Cowan, 1981).

$$\Delta K = 0, \pm 1 \quad (K = K' = 0 \text{ izinli değildir}) \quad (3.90)$$

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (L = L' = 0 \text{ izinli değildir}) \quad (3.91)$$

3.3.4.4. JK çiftleniminde çizgi şiddeti ifadesi

JK çiftleniminde çizgi şiddeti ifadesi aşağıdaki denklemlerle ifade edildiği gibidir.

$$\begin{aligned}
\sqrt{S_{JK}} &= \langle [(\dots \alpha_1 L_1 S_1) J_1, l_2], K, s_2 J \parallel r_N^{(1)} \parallel [(\dots \alpha'_1 L'_1 S'_1) J'_1, l'_2], K', s'_2 J' \rangle \\
&= (-1)^{K+s+J'+1} [J, J']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} K & s & J \\ J' & 1 & K \end{matrix} \right\} \langle [(\alpha_1 L_1 S_1) J_1, l_2], K \parallel r_N^{(1)} \parallel [(\alpha'_1 L'_1 S'_1) J'_1, l'_2], K' \rangle \\
&= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1 \alpha'_1 L'_1 S'_1} \delta_{S_1 S'_1} (-1)^{s+J'-J_1-l'_2} [J, J', K, K']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} K & s & J \\ J' & 1 & K \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J_1 & l_2 & K \\ 1 & K' & l'_2 \end{matrix} \right\} P_{l_2 l'_2}^{(1)}
\end{aligned} \quad (3.92)$$

JK çiftlenimi için seçim kuralları aşağıdaki ifadelerle belirlenir (Cowan, 1981).

$$\begin{aligned}
\Delta j_2 &= 0, \pm 1 & j_2 = j'_2 = 0 \text{ izinli değildir.} \\
\Delta J_1 &= 0
\end{aligned} \quad (3.93)$$

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

Atomik ya da moleküler yapıların kuantum mekaniksel hesaplamaları için geliştirilmiş birçok yaklaşım yöntemi vardır. Bu yaklaşım yöntemlerinin çoğu atomların yüksek uyarılmış seviyeleri ve yüksek iyonlaşmış seviyelerin çalışılmasında birçok zorlukla karşılaşmaktadır. Kolay bir hesaplama sürecine sahip olan en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ilk olarak Zheng tarafından ortaya atılmıştır (Zheng, 1986; Zheng ve ark, 2000-a; 2001-a,b,c). En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile çok elektronlu sistemlerde çeşitli atomik hesaplamalar yapılabilir. Bu teori dinamik ardışık iyonlaşma, sıfır enerji seçimi ve çok elektronlu bir sistemdeki elektronları en zayıf bağlı elektron ve en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak ayırma düşüncesi üzerine kurulmuştur. Bu teori de en zayıf bağlı elektronun kabulü serbest bir parçacığın iyonlaşma potansiyelinin tanımlanmasıyla başlamaktadır (Thewlis, 1961). Atomik ya da moleküler bir sistemdeki serbest bir parçacık için iyonlaşma potansiyeli temel seviyede bulunan en zayıf bağlı elektronu tamamen koparmak için gerekli olan enerji olarak tanımlanır. Sistemdeki en zayıf bağlı elektronu uyarmak ve iyonlaştırmak en kolaydır. Bir atomun toplam dalga fonksiyonu, toplam enerjisi ve atomik enerji seviyeleri arasındaki geçişler gibi birçok özellik, sisteme en zayıf bağlı elektronun davranışıyla

ilgilidir. Böylelikle karmaşık çok elektron problemi sisteme en zayıf bağlı olan tek bir elektronun basit analitik tek elektron problemine indirgenebilmektedir (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

Bir atom veya iyondaki tüm elektronlar aynı ve ayırt edilemez olmalarına rağmen, bu elektronlar ardışık iyonlaşma süreciyle teker teker iyonlaştırılabilir. Birinci iyonlaşma işleminde sistemden sadece tek bir elektron yani sisteme en zayıf bağlı elektron koparılabilir. Sistemdeki diğer elektronlar sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak adlandırılırlar. Bu yüzden iyonlaşma sürecine katılan sisteme en zayıf bağlı elektronun davranışı diğerlerinden farklı olacaktır. Bunun için sistemdeki tüm elektronları sisteme en zayıf bağlı elektron ve sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak ayırmak çok daha uygun olacaktır.

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisine göre verilen birçok elektronlu sistemdeki en zayıf bağlı elektron, çekirdek ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronların oluşturduğu,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{\beta}{r_i^2} \quad (3.94)$$

şeklinde verilen merkezsiz bir potansiyel alanın etkisinde kalır. Bu potansiyel alan iki kısma ayrılabilir. İlk kısım Coulomb potansiyelidir. Sisteme en zayıf bağlı elektronun dışındaki diğer elektronların perdelemesi en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisinden dolayı tam değildir. Bu sebeple, bu yöntemde potansiyel fonksiyonunun Coulomb teriminde bir etkin çekirdek yükü, Z^* kullanılır. Potansiyel alanın ikinci kısmı dipol potansiyelidir. En zayıf bağlı elektron atomik çekirdeği kutupladığından bir elektrik dipol moment oluşur. Oluşan bu elektrik dipol moment en zayıf bağlı elektronun davranışını etkiler (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

En zayıf bağlı elektronun toplam potansiyeli Schrödinger denkleminde kullanılarak,

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r_i) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (3.95)$$

ifadesi elde edilir. Toplam potansiyel içerisinde bazı dönüşümler yapılarak ve radyal denklemin çözümünden β parametresi için,

$$\beta = \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2} \quad (3.96)$$

ifadesi yazılabilir. β parametresinin yeni şekli kullanılarak potansiyel yeniden yazılacak olursa,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2r_i^2} \quad (3.97)$$

elde edilir. Bu potansiyel Schrödinger denkleminde kullanılırsa,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{-Z^*}{r_i} + \frac{d(d+1) + 2dl}{2r_i^2} \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (3.98)$$

elde edilir. Bu denkleminde ilk terim en zayıf bağlı elektronun kinetik enerjisini, ikinci terim Coulomb potansiyelini, üçüncü terim ise kutuplanma etkisinden kaynaklanan elektrik dipol potansiyelini göstermektedir. İfadedeki r_i ; en zayıf bağlı elektron ile çekirdek arasındaki uzaklık, l ; yörünge açısız momentum kuantum sayısı, Z^* ; sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronların perdeleme etkisi ile en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisini göz önüne alan etkin çekirdek yükü ve d ise kuantum kusurunun belirlenmesinde kullanılan bir parametredir. d parametresi; n , l , n^* ve l^* kuantum sayıları kullanılarak belirlenmektedir.

En zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonunu radyal ve açısız kısım şeklinde ayırarak,

$$\psi_i(r_i, \theta_i, \varphi_i) = R_{n^*l^*}(r_i) Y_{l,m}(\theta_i, \varphi_i) \quad (3.99)$$

şeklinde yazılır. Dalga fonksiyonunun en genel şekli

$$\Psi = \left(\frac{2Z^*}{n^*} \right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!} \Gamma(n^* - l^* + 1) \right]^{-1/2} \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*} \right) r^{l^*} L_{n-l-1}^{2l^*+1} \left(\frac{2Z^* r}{n^*} \right) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (3.100)$$

olarak yazılır (Zheng, 2000-b; Çelik, 2005; Ateş, 2010). Burada n^* , l^* ve ε ,

$$l^* = l + d \quad (3.101)$$

$$n^* = n + d \quad (3.102)$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (3.103)$$

şeklinde tanımlanmaktadır (Zheng, 1986; Zheng ve Li, 1994; Zheng ve ark., 2000-a,d, 2001-a,b,c). $L_{n-l-1}^{2l^*+1} \left(\frac{2Z^* r}{n^*} \right)$ niceliği, Laguer polinomunu ve $\Gamma(\cdot)$ niceliği, gama fonksiyonunu göstermektedir. Denk. (3.103) ile tanımlanan ε , en zayıf bağlı elektronun enerjisi olup buradaki n^* ise en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisinden kaynaklanan etkin baş kuantum sayısını göstermektedir. Sonuç olarak WBEPM teoriye göre, yarıçapın beklenen değerleri ve deneysel enerji verileri kullanılarak belirlenen bazı parametrelere göre Laguerre polinomunun bir fonksiyonu olarak ifade edilen elektronik radyal dalga fonksiyonu,

$$R = \left(\frac{2Z^*}{n^*} \right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n-l-1)!} \Gamma(n^* - l^* + 1) \right]^{-1/2} \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*} \right) r^{l^*} L_{n-l-1}^{2l^*+1} \left(\frac{2Z^* r}{n^*} \right) \quad (3.104)$$

ile verilir (Zheng ve ark., 2000-a,d). Radyal fonksiyon için,

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (3.105)$$

normalizasyon şartı kullanılarak ve iki Laguerre polinomunun integral formülünden,

$$\int_0^{\infty} t^{\lambda} e^{-t} L_m^{\mu}(t) L_m^{\mu'}(t) dt = (-1)^{m+m'} \Gamma(\lambda+1) \times \sum_k \binom{\lambda-\mu}{m-k} \binom{\lambda-\mu'}{m'-k} \binom{\lambda+k}{k} \quad (3.106)$$

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

$$\begin{aligned} \langle n_i, l_i | r^k | n_f, l_f \rangle &= \int_0^{\infty} r^{k+2} R_{n_i, l_i}(r) R_{n_f, l_f}(r) dr \\ &= (-1)^{n_f+n_i+l_f+l_i} \left(\frac{2Z_f^*}{n_f^*} \right)^{l_f^*} \left(\frac{2Z_i^*}{n_i^*} \right)^{l_i^*} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*} \right)^{-l_f^*-l_i^*-k-3} \times \left[\frac{n_f^{*4} \Gamma(n_f^* + l_f^* + 1)}{4Z_f^{*3} (n_f - l_f - 1)!} \right]^{-1/2} x \\ &\left[\frac{n_i^{*4} \Gamma(n_i^* + l_i^* + 1)}{4Z_i^{*3} (n_i - l_i - 1)!} \right]^{-1/2} \times \sum_{m_1=0}^{n_f-l_f-1} \sum_{m_2=0}^{n_i-l_i-1} \frac{(-1)^{m_2}}{m_1! m_2!} \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*} \right)^{m_1+m_2} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} + \frac{Z_i^*}{n_i^*} \right)^{-m_1-m_2} x \\ &\Gamma(l_f^* + l_i^* + m_1 + m_2 + k + 3) \times \sum_{m_3=0}^S \binom{l_i^* - l_f^* + k + m_2 + 1}{n_f^* - l_f^* - 1 - m_1 - m_3} \times \binom{l_f^* - l_i^* + k + m_1 + 1}{n_i^* - l_i^* - 1 - m_2 - m_3} \times \\ &\binom{l_i^* + l_f^* + k + m_1 + m_2 + m_3 + 2}{m_3} \end{aligned} \quad (3.107)$$

şeklinde verilir (Zheng, 2000-a,b,c,d; Çelik 2005; Ateş, 2010).

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

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^*+1)}{2Z^*} \quad (3.108)$$

olarak bulunur. Denk. (3.103)'de verilen en zayıf bağlı elektronun ε enerjisinin negatifi, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisine eşit olup

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (3.109)$$

olarak tanımlanır. Denk. (3.107)'de verilen radyal geçiş integrali kullanılarak atomik sistemlere ait osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve hayat süreleri gibi fiziksel özellikler hesaplanabilir. Radyal geçiş integralinin hesaplanmasında Z^* , n^* ve l^* parametrelerini belirlemek yeterlidir. Deneysel enerji değerleri günümüzde modern tekniklerle ölçülebildiğinden, literatürdeki değerler arasında önemli farklılıklar bulunmamaktadır. Seviyelerin yarıçaplarının beklenen değerleri ise NCA, Roothan-Hartree-Fock yöntemi "RHF", Multikonfigürasyonel Hartree-Fock yöntemi "MCHF", Hartree-Slater yöntemi "HS", Hartree-Kohn-Sham yöntemi "HKS" ve Zamana bağlı Hartree-Fock "TDHF" yöntemi gibi birçok teorik yöntemle belirlenebilir (Çelik, 2005; Ateş, 2010).

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

4.1. Araştırma Sonuçları

4.1.1. Ağır atomlarda Osilatör Şiddeti, Geçiş Olasılığı ve Hayat Süresi Hesaplamaları

Atomik yapı hesaplamalarındaki her spektroskopik parametre, göz önüne alınan çiftlenim biçimine ve elektronun geçiş tipine göre tanımlanan S çizgi şiddeti ifadesi ile belirlenir. Atom veya iyonların seviyelerinde görülen çiftlenim biçimindeki sınırlama elektronlar arasındaki etkileşimin spin-yörünge etkileşimine ya da elektrostatik etkileşmeye bağlı olmasından ileri gelir. Ağır atomlarda genel olarak jj çiftlenim biçimi baskın olsa da konfigürasyondaki elektronların sıralanış biçimlerinden dolayı, bazı ağır atomlarda LS çiftlenim biçimleri de görülmektedir. Bu çalışmada jj çiftlenim biçiminin baskın olduğu holmiyum atomu ve bazı holmiyum iyonları gibi ağır sistemlerde atomik yapı hesaplamaları yapılmıştır. Atomik yapı hesaplamaları; osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve hayat süreleri gibi nicelikleri içerir. Herhangi iki seviye arasındaki geçiş olasılığı,

$$A_{JJ'} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} \frac{1}{2J'+1} S(\gamma J \rightarrow \gamma' J') \quad (4.1)$$

ile verilir. İki seviye arasındaki osilatör şiddeti,

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

ve uyarılmış bir seviyenin hayat süresi,

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

biçiminde tanımlanır. Bu nicelikler Bölüm 3.3.2'de belirtildiği gibi çizgi şiddeti ifadesine bağlı olarak verilir. jj çiftlenim biçiminde çizgi şiddeti ifadesi, açılal katsayılarına ve radyal geçiş integraline bağlı olarak ifade edilir. Bu ifade Bölüm 3.3.4'de ayrıntılı olarak verilmiştir. Bu tez çalışmasında çizgi şiddeti ifadesindeki 6-j katsayıları

için tam ve yarım tam sayı durumunda hesaplanabilen bir kod kullanılmıştır. Yine çizgi şiddeti ifadesindeki radyal geçiş integrali genel olarak,

$$P_{l_i l_f}^{(1)} = \delta_{l', l \pm 1} (-1)^{l+l'} (l_>)^{1/2} \int_0^\infty P_{n_i l_i} r P_{n_f l_f} dr = (-1)^{l-l'} P_{l' l}^{(1)} = -P_{l' l}^{(1)} \quad (4.4)$$

biçiminde ifade edilir. Matris elemanın radyal kısmı pek çok yöntemle hesaplanabilmektedir. Bu çalışmada radyal geçiş integralinin hesaplanmasında WBEPM teori kullanılmıştır. WBEPM teori ile ilgili ayrıntılı bilgi Bölüm 3.4'de verilmiştir.

Tüm hesaplamalar için Fortran 77 programlama dilinde real*8 aritmetiğinde (çift hassasiyet) bilgisayar programı kullanılmıştır. WBEPM teoride, radyal geçiş integrallerinin hesaplanması için gerekli olan Z^* , n^* , l^* parametrelerin belirlenmesinde enerji değerleri için NIST' den (National Institute of Standards and Technology) alınan deneysel enerji değerleri kullanılmıştır. Seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri için Nümerik Coulomb yaklaşımı (Lindgrad ve Nielsen, 1977) kullanılmıştır.

4.1.2. Atom ve İyonlarda Yapılan Hesaplamalar

4.1.2.1. Atomik holmiyumda yapılan hesaplamalar

Holmiyum atomu için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır. Holmiyum atomunun açık kabukları arasında yapılacak olan tek elektron geçişi için jj çiftlenim biçimine sahip seviyeler belirlenmiştir. Seçilen bu seviyeler belirlendikten sonra bir veri dosyası hazırlanmıştır. Bu veri dosyasında holmiyum atomunun uyarılmış seviyeleri, o seviyelerin deneysel enerji değerleri ve ilgili açısal momentum kuantum sayıları mevcuttur. Seviyeler arasındaki geçişler üzerinde hesaplama yapabilmek için Z^* , n^* , l^* parametrelerinin belirlenmesinde yarıçapların beklenen değerleri NCA yöntemiyle hesaplanmıştır. Holmiyum atomunun kapalı konfigürasyonu ksenon (Xe, $Z=54$) soygazına benzerdir: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$. jj çiftlenim biçimine sahip $[Xe]4f^{10} 6s^2 5d \rightarrow [Xe]4f^{10} 6s^2 6p$ ve $[Xe]4f^{11} 6s 6p \rightarrow [Xe]4f^{11} 6s 7s$ seviyeleri arasında görülen geçişler için osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıklarının hesaplanmasında seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri için NCA yöntemi kullanılmıştır.

Hesaplanan osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları çizelge 4.1’de verilmiştir. Elde edilen geçiş olasılıkları değerlerinden $[Xe]4f^{10}6s^26p$ ve $[Xe]4f^{11}6s7s$ konfigürasyonlarına ait uyarılmış seviyelerin hayat süreleri de hesaplanmıştır. Holmiyum atomu için hesaplanan hayat süreleri çizelge 4.2’de verilmiştir. Hesapladığımız bazı değerler literatürde veri bulunamadığı için herhangi bir karşılaştırma yapılmamıştır.

Çizelge 4.1. Holmiyum atomunda elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji farkı (cm ⁻¹)	Geçiş olasılığı (10 ⁸ sn ⁻¹)	Osilatör şiddeti
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	10193.37	3.06E-03	4.41E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	10358.88	5.33E-03	7.45E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	12999.63	3.35E-04	2.97E-04
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	13106.11	9.84E-04	8.58E-04
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	13303.99	1.34E-03	1.13E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	10145.17	5.80E-03	8.45E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	10310.68	2.50E-03	3.53E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	12951.43	1.46E-03	1.30E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	13255.79	5.72E-05	4.88E-05
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	13597.09	1.18E-03	9.53E-04
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	9425.2	8.11E-03	1.37E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	12535.82	1.38E-03	1.31E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	12877.12	1.55E-03	1.40E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	8996.29	8.06E-03	1.49E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	11637.04	9.36E-04	1.04E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	11743.52	1.87E-03	2.04E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{21/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	10162.71	1.57E-02	2.27E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	9847.98	8.35E-03	1.29E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	9954.46	1.08E-03	1.63E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	10152.34	5.96E-03	8.66E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	9688.77	9.76E-03	1.56E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	9795.25	5.08E-03	7.93E-03

Çizelge 4.1. Holmiyum atomunda elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji farkı (cm ⁻¹)	Geçiş olasılığı (10 ⁸ sn ⁻¹)	Osilatör şiddeti
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	9039.5	3.12E-03	5.72E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	9343.86	9.08E-03	1.56E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	9685.16	2.24E-03	3.57E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	5086.77	4.60E-03	2.66E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	11473.99	5.23E-03	5.95E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	11598.16	1.31E-02	1.46E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	14112.17	2.56E-03	1.93E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	14320.12	1.94E-03	1.42E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	14329.17	7.70E-05	5.62E-05
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	10859.78	1.74E-02	2.22E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	13581.74	2.34E-03	1.90E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	13590.79	2.27E-03	1.85E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	8688.23	1.29E-02	2.56E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{1}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	11326.41	1.38E-03	1.61E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	11507.51	2.86E-03	3.24E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	8682.48	8.02E-03	1.60E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	8806.65	5.03E-03	9.71E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	11320.66	5.78E-04	6.76E-04
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	11501.76	1.58E-03	1.79E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	11537.66	2.10E-03	2.37E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{5}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	10018.71	1.48E-02	2.21E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{5}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	10199.81	7.49E-03	1.08E-02

Çizelge 4.1. Holmiyum atomunda elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji farkı (cm ⁻¹)	Geçiş olasılığı (10 ⁸ sn ⁻¹)	Osilatör şiddeti
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(7, \frac{5}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	9954.3	2.21E-02	3.34E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{11/2}$	10923.51	2.11E-02	2.65E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	13426.53	2.28E-03	1.90E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	13426.53	2.36E-03	1.97E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{13/2}$	8858.89	1.01E-02	1.92E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{11/2}$	9078.23	6.56E-03	1.19E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	11464.46	1.66E-03	1.89E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	11464.46	6.83E-04	7.79E-04
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	11581.25	2.20E-03	2.46E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{13/2}$	8667.57	1.58E-02	3.16E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	11273.14	3.06E-03	3.61E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	11273.14	1.44E-03	1.70E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{5}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	9954.47	7.95E-03	1.20E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{5}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	9954.47	1.69E-02	2.56E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{5}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	9788.05	1.54E-03	2.41E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{5}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	9788.05	1.33E-02	2.08E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)5d(1)	$(6, \frac{5}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	9904.84	9.85E-03	1.51E-02
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)6p(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{17/2}$	[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{17/2}$	14406.4	1.83E-01	1.32E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)6p(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{17/2}$	[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{15/2}$	14733.44	1.44E-01	9.96E-02
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)6p(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{15/2}$	[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{17/2}$	14233.94	1.60E-01	1.18E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)6p(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{15/2}$	[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{15/2}$	14560.98	2.53E-03	1.79E-03
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)6p(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{15/2}$	[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{13/2}$	14933.98	1.59E-01	1.07E-01

Çizelge 4.2. Holmiyum atomunda uyarılmış seviyelerinin hayat süreleri

Uyarılmış seviye	Terim	Enerji (cm ⁻¹)	Hayat süresi (ns)
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	18572.28	5.89E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	18737.79	6.29E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	21378.54	4.17E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	21485.02	4.05E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	21682.9	5.62E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	22024.2	1.05E-06
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	23818.54	3.82E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	23942.71	2.81E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	26456.72	5.17E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	26664.67	2.34E-06
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	26673.72	2.25E-06
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	26637.82	2.94E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{11/2}$	27643.13	3.62E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	30146.15	4.39E-06
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	30146.15	6.94E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{13/2}$	27423.79	3.86E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	30029.36	7.04E-07
[Xe]4f(10)(5I)6s(2)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	30029.36	3.10E-07
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{17/2}$	31116.22	1.13E-08
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{15/2}$	31443.26	1.13E-08
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{15}{2}, 1)_{13/2}$	31816.26	1.13E-08
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{13}{2}, 1)_{15/2}$	36731.23	9.29E-08
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{13}{2}, 1)_{13/2}$	36873.76	9.54E-08
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)7s(1)	$(\frac{13}{2}, 1)_{11/2}$	37029.7	1.09E-07

4.1.2.2. Bir kez iyonlaşmış holmiyumda yapılan hesaplamalar

Bir kez iyonlaşmış holmiyumun temel ve uyarılmış seviyeleri arasındaki osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır. Ho II iyonunun temel ve uyarılmış seviyeleri jj çiftlenim biçimine sahiptir. Tüm bu seviyeler için yarıçapların beklenen değerleri NCA yöntemi ile hesaplanmıştır. Elde edilen osilatör şiddeti değerleri; $[Xe]4f^{11}6s \rightarrow [Xe]4f^{11}6p$ tipi geçişler için hesaplanmış ve Migdalek (1984) tarafından verilen RMP+CP yöntemiyle hesaplanan osilatör şiddeti sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır.

Çizelge 4.3. Bir kez iyonlaşmış holmiyumda elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji farkı (cm ⁻¹)	Geçiş olasılığı (10 ⁸ sn ⁻¹)	Osilatör şiddeti	Osilatör şiddeti (RMP+CP) (Migdalek 1984)
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	26234.19	9.17E-01	2.00E-01	1.94E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	26330.85	5.56E-01	1.20E-01	1.17E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{3}{2}\right)_8$	29412.38	1.24E+00	2.14E-01	2.16E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{3}{2}\right)_9$	28926.7	2.12E+00	3.80E-01	3.81E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	31556.3	1.46E+00	2.20E-01	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{3}{2}\right)_7$	34779.1	7.35E-01	9.11E-02	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	34802.8	1.79E+00	2.21E-01	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	25596.79	4.05E-01	9.25E-02	8.94E-02
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	25693.45	9.92E-01	2.25E-01	2.18E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{3}{2}\right)_8$	28774.98	8.02E-01	1.45E-01	1.46E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_6$	30867.6	0.00E+00	0.00E+00	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	30918.9	6.55E-01	1.03E-01	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{3}{2}\right)_7$	34141.7	1.96E+00	2.52E-01	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{3}{2}\right)_8$	34165.4	1.18E+00	1.51E-01	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	20617.15	3.13E-01	1.10E-01	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_8$	20713.81	0.00E+00	0.00E+00	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{3}{2}\right)_8$	23795.34	1.40E+00	3.71E-01	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_6$	25887.96	9.59E-01	2.14E-01	1.90E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	25939.26	5.93E-01	1.32E-01	1.17E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{3}{2}\right)_7$	29162.06	1.29E+00	2.26E-01	2.13E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{3}{2}\right)_8$	29185.76	2.36E+00	4.15E-01	3.91E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_6$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{15}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	20384.45	5.71E-01	2.06E-01	
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_6$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_6$	25655.26	4.34E-01	9.88E-02	8.74E-02
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_6$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_7$	25706.56	1.09E+00	2.47E-01	2.19E-01
[Xe]4f(11)(4I)6s(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{1}{2}\right)_6$	[Xe]4f(11)(4I)6p(1)	$\left(\frac{13}{2}, \frac{3}{2}\right)_7$	28929.36	8.98E-01	1.61E-01	1.51E-01

4.1.2.3. İki kez iyonlaşmış holmiyumda yapılan hesaplamalar

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak iki kez iyonlaşmış holmiyum (Ho III) için osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri hesaplanmıştır. Bu hesaplamalarda gerekli olan enerji değerleri NIST tarafından verilen deneysel enerji değerlerinden alınmıştır ve bu enerji değerleri ile birlikte, bu hesaplamalarda gerekli olan Z^* , n^* , l^* parametreleri NCA yöntemiyle elde edilen yarıçapların beklenen değerleri kullanılarak belirlenmiştir. Bu hesaplamalar $[Xe]4f^{10}5d \rightarrow [Xe]4f^{10}6p$ ve $[Xe]4f^{10}6s \rightarrow [Xe]4f^{10}6p$ tipi geçişler için yapılmış ve $[Xe]4f^{10}6p$ konfigürasyonuna ait uyarılmış seviyeler için hayat süreleri hesaplanmıştır. Literatür araştırması yapıldığında iki kez iyonlaşmış holmiyum için hesaplama sonuçlarımızı karşılaştırabileceğimiz osilatör şiddeti ve geçiş olasılıkları sonuçlarını içeren çalışmaların çok fazla olmadığı görülmektedir. Literatür eksikliğinin nedeni iyon durumundaki holmiyumun karmaşık konfigürasyonu ve hesaplama sürecinin zorluğu olabilir. Ho III iyonuna ait hayat süreleri Biemont (2001) tarafından zaman çözümlenmeli lazer indüklü florasan tekniği kullanılarak ölçülen deneysel sonuçlar ve kor polarizasyon etkilerini de içeren multiconfigurational pseudo-relativistic Haertree-Fock hesaplamaları (HFR+CP) ile karşılaştırılmıştır. Çizelge 4.5’de verilen hayat süresi sonuçlarının literatürle uyumlu olduğu görülmüştür.

Çizelge 4.4. İki kez iyonlaşmış holmiyumda elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri

İlk seviye	terim	Son seviye	terim	Enerji farkı (cm^{-1})	Geçiş olasılığı (10^8 sn^{-1})	Osilatör şiddeti
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	39464.32	3.88E-01	3.73E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	39819.74	1.64E-01	1.55E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	44771.29	7.51E-02	5.62E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	45435.22	2.90E-03	2.11E-04
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	46082.46	5.86E-02	4.13E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	39398.58	2.04E-01	1.97E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	39754	3.49E-01	3.31E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	44705.55	1.73E-02	1.30E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	44813.49	5.04E-02	3.76E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	45369.48	6.80E-02	4.95E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	38487.63	5.27E-01	5.33E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	44458.53	6.40E-02	4.86E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	45105.77	7.07E-02	5.21E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	37912.67	5.15E-01	5.37E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	42864.22	4.28E-02	3.49E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	42972.16	8.45E-02	6.86E-03
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	35673.57	1.76E+00	2.08E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	36028.99	1.08E+00	1.24E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	40980.54	2.54E+00	2.26E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	41088.48	4.52E+00	4.01E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	41644.47	1.09E+00	9.45E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	34503.74	7.57E-01	9.53E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{1}{2})_{17/2}$	34859.16	1.87E+00	2.31E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	39810.71	1.56E+00	1.48E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	40474.64	2.71E+00	2.48E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(8, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	41121.88	3.42E+00	3.03E-01
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{21/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	40758.84	7.09E-01	6.40E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	40561.63	3.92E-01	3.57E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	40669.57	4.96E-02	4.50E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{15/2}$	41225.56	2.69E-01	2.37E-02

Çizelge 4.4. İki kez iyonlaşmış holmiyumda elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji farkı(cm ⁻¹)	Geçiş olasılığı (10 ⁸ sn ⁻¹)	Osilatör şiddeti
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{17/2}$	40300.61	4.62E-01	4.27E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{19/2}$	40408.55	2.36E-01	2.17E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(8, \frac{5}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(8, \frac{3}{2})_{13/2}$	35306.57	5.69E-01	6.84E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	40053.38	4.09E-01	3.82E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	40413.01	1.69E-01	1.55E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	45465.2	7.69E-02	5.58E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	45834.93	2.32E-03	1.65E-04
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	46324.83	5.89E-02	4.12E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	39272.19	5.58E-01	5.42E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	45053.74	6.68E-02	4.93E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	45543.64	6.97E-02	5.03E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	37286.36	5.15E-01	5.55E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	42338.55	4.15E-02	3.47E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	42547.12	8.50E-02	7.04E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	36403.01	1.87E-01	2.11E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	36762.64	3.13E-01	3.47E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	41814.83	1.71E-02	1.47E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	42023.4	4.62E-02	3.93E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	42184.56	6.16E-02	5.19E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{11/2}$	40154.93	4.20E-01	3.90E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{13/2}$	40520.22	1.67E-01	1.53E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	45525.9	7.69E-02	5.56E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	45638.44	1.59E-03	1.15E-04
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	46117.25	5.85E-02	4.12E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5G)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{11/2}$	54217.12	4.99E-01	2.55E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	[Xe]4f(10)(5G)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{13/2}$	54386.81	1.96E-01	9.92E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{11/2}$	39525.26	5.71E-01	5.48E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	45008.77	6.86E-02	5.08E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	45487.58	6.68E-02	4.84E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5G)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{11/2}$	53587.45	6.95E-01	3.63E-02

Çizelge 4.4. İki kez iyonlaşmış holmiyumda elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri

İlk seviye	Terim	Son seviye	Terim	Enerji farkı(cm ⁻¹)	Geçiş olasılığı (10 ⁸ sn ⁻¹)	Osilatör şiddeti
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{11/2}$	37261.09	2.01E-01	2.17E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{13/2}$	37626.38	3.27E-01	3.46E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	42632.06	1.92E-02	1.58E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{11/2}$	42744.6	6.16E-02	5.06E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	42917.16	4.68E-02	3.81E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5G)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{11/2}$	51323.28	2.65E-01	1.51E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5G)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{13/2}$	51492.97	4.24E-01	2.40E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{13/2}$	37331.05	5.25E-01	5.65E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{13/2}$	42336.73	4.04E-02	3.37E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	42621.83	8.64E-02	7.13E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(6, \frac{3}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5G)6p(1)	$(6, \frac{1}{2})_{13/2}$	51197.64	6.88E-01	3.93E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{5}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	40821.91	3.97E-01	3.57E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{5}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	41030.48	4.86E-02	4.32E-03
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{5}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	41191.64	2.79E-01	2.47E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{5}{2})_{17/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	40636.04	4.80E-01	4.36E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{5}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	40844.61	2.38E-01	2.14E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(7, \frac{5}{2})_{19/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	40438.1	7.12E-01	6.52E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	35304.36	1.52E+00	1.82E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	35663.99	8.90E-01	1.05E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	40716.18	2.92E+00	2.64E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{17/2}$	40924.75	5.34E+00	4.78E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	41085.91	1.21E+00	1.07E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	34748.54	6.38E-01	7.92E-02
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{1}{2})_{15/2}$	35108.17	1.44E+00	1.76E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{15/2}$	40160.36	1.96E+00	1.82E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{13/2}$	40530.09	3.29E+00	3.01E-01
[Xe]4f(10)(5I)6s(1)	$(7, \frac{1}{2})_{13/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(7, \frac{3}{2})_{11/2}$	41019.99	4.07E+00	3.63E-01
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(5, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(5, \frac{1}{2})_{9/2}$	40105.12	4.27E-01	3.98E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(5, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$(5, \frac{1}{2})_{11/2}$	40464.91	1.62E-01	1.49E-02
[Xe]4f(10)(5I)5d(1)	$(5, \frac{3}{2})_{9/2}$	[Xe]4f(10)(5F)6p(1)	$(5, \frac{1}{2})_{9/2}$	44295.58	4.81E-01	3.67E-02

Çizelge 4.5. İki kez iyonlaşmış holmiyumda uyarılmış seviyelerinin hayat süreleri (ns)

Uyarılmış Seviye	Terim	Enerji (cm ⁻¹)	Bu Çalışma	HFR+CP Deneysel (Biemont ve ark., 2001)	
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(8, \frac{1}{2}\right)_{15/2}$	57497.72	2.75E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(8, \frac{1}{2}\right)_{17/2}$	57853.14	2.52E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(8, \frac{3}{2}\right)_{17/2}$	62804.69	1.97E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(8, \frac{3}{2}\right)_{15/2}$	63468.62	2.38E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(8, \frac{3}{2}\right)_{13/2}$	64115.86	2.43E-09	1.7E-09	1.9E-09
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(8, \frac{3}{2}\right)_{19/2}$	62912.63	1.77E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(7, \frac{1}{2}\right)_{13/2}$	62484.48	3.02E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(7, \frac{1}{2}\right)_{15/2}$	62844.11	3.00E-09	2.0E-09	2.0E-09
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(7, \frac{3}{2}\right)_{15/2}$	67896.3	1.70E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(7, \frac{3}{2}\right)_{13/2}$	68266.03	2.04E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(7, \frac{3}{2}\right)_{11/2}$	68755.93	2.38E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(7, \frac{3}{2}\right)_{17/2}$	68104.87	1.55E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(6, \frac{1}{2}\right)_{11/2}$	66128.33	2.07E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(6, \frac{1}{2}\right)_{11/2}$	66493.62	1.89E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(6, \frac{3}{2}\right)_{13/2}$	71499.3	1.50E-09	1.50E-09	1.70E-09
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(6, \frac{3}{2}\right)_{11/2}$	71611.84	1.96E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(6, \frac{3}{2}\right)_{9/2}$	72090.65	2.41E-09		
[Xe]4f(10)(5G)6p(1)	$\left(6, \frac{1}{2}\right)_{11/2}$	80190.52	9.57E-10		
[Xe]4f(10)(5G)6p(1)	$\left(6, \frac{1}{2}\right)_{13/2}$	80360.21	9.02E-10		
[Xe]4f(10)(5G)6p(1)	$\left(6, \frac{1}{2}\right)_{11/2}$	80190.52	9.57E-10		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(6, \frac{3}{2}\right)_{15/2}$	71784.4	1.16E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(5, \frac{1}{2}\right)_{9/2}$	68788.48	1.60E-09		
[Xe]4f(10)(5I)6p(1)	$\left(5, \frac{1}{2}\right)_{11/2}$	69148.27	1.24E-09	2.0E-09	2.0E-09
[Xe]4f(10)(5F)6p(1)	$\left(5, \frac{1}{2}\right)_{9/2}$	72978.94	1.22E-09		

4.2. Tartışma

Geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri gibi spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde ilk iş; söz konusu seviyeler arasındaki çizgi şiddeti ifadesinin belirlenmesidir. Çizgi şiddeti, özellikle söz konusu atomda yada iyonda baskın olan çiftlenime göre hesaplanır. Bu çalışmada jj çiftlenimine iyi bir örnek oluşturan bazı nadir toprak elementleri göz önüne alınmıştır. Bu tez çalışmasında jj çiftlenimine göre dizayn edilen elektron konfigürasyonlarından kuantum sayılarının ve gerekli niceliklerin elde edilebildiği veri dosyaları oluşturulmuştur. Bu veri dosyalarını kullanarak jj çiftlenimine göre hesap yapabilen bir bilgisayar programı tasarlanmıştır. Tasarlanan bilgisayar programı yardımı ile tek bir veri dosyası kullanılarak seçilen çok elektronlu sistemde geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri gibi spektroskopik parametreler birlikte hesaplanabilmektedir. Elde edilen sonuçlar Çizelge 4.1-5 de verilmiştir. Ağır atomlar karmaşık elektron konfigürasyonlarına sahip olduklarından dolayı, spektroskopik parametrelerin hesaplama sürecinde birçok zorlukla karşılaşılır ve literatür incelendiğinde teorik verilerden ziyade deneysel verilere ulaşılmaktadır. Bu nedenle elde edilen sonuçlar sadece Ho II için hesaplanan osilatör şiddeti değerleri, Migdalek (1984) tarafından RMP+CP yöntemiyle hesaplanan osilatör şiddetleri ile karşılaştırılmıştır. Ho III için hesaplanan hayat süreleri değerleri Biemont ve ark. (2001) tarafından HFR+ CP yöntemi ile hesaplanan ve zaman çözümümlü lazer indüklü florasan yöntemi ile deneysel olarak ölçülen hayat süreleri ile karşılaştırılmıştır. Karşılaştırılan sonuçlar arasında iyi bir uyum elde edilmiştir.

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori yarı deneysel bir yöntemdir. Geçiş olasılıklarının hesaplanması için Z^* , n^* ve l^* parametrelerinin belirlenmesi yeterlidir. Bu parametreler deneysel enerjiler ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri kullanılarak belirlenir. Bu nedenle bu yöntemle elde edilen sonuçların hassasiyeti deneysel enerji değerlerine ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerlerine bağlıdır. Yarı deneysel yöntemlerle uyarılmış ve yüksek uyarılmış seviyeleri çalışmak saf teorik yöntemler kadar karmaşık değildir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori çok sayıda elektrona sahip ağır atomlarda deneysel enerji değerlerini ve yarıçaplara ait beklenen değerleri kullanarak geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri gibi spektroskopik parametreleri diğer yöntemlere göre daha basit bir hesaplama süreci içerisinde belirleyebilmektedir. Hesaplamalarda daha duyarlı

enerji deęerleri ve daha duyarlı seviyelere ait yarıçapların beklenen deęerlerinin kullanılması en zayıf baęlı elektron potansiyel model teoriyle elde edilen sonuçların duyarlılığını arttırması beklenmektedir.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

5.1 Sonuçlar

Nadir toprak elementlerinin, özellikle yüksek uyarılmış seviyelerine ait geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri gibi spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde literatürde önemli eksiklikler bulunmaktadır. Saf teorik yöntemler tarafından verilen sonuçların birçoğu yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçişlerden ziyade düşük uyarılmış seviyeler arasındaki geçişleri içermektedir. Bu çalışmada atomik holmiyum, bir kez ve iki kez iyonlaşmış holmiyumda ilk kez en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak elektrik dipol geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin hayat süreleri karmaşık bir hesaplama sürecine girmeden belirlenmiştir. Bu tez çalışmasından elde edilen sonuçların literatürle uyumlu çıkması literatürde olmayan, ilk kez bu çalışmayla elde edilen bazı geçişlere ait geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve hayat sürelerinin güvenilirliğini kuvvetlendirmektedir.

5.2 Öneriler

Bu tez çalışmasında kullanılan en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisinin, karmaşık elektron konfigürasyonlarına sahip ağır atomlarda spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde daha avantajlı olduğu söylenebilir. Bu çalışma sonucunda tasarlanan jj çiftleniminin baskın olduğu ağır atomlar için hesap yapabilen bir paket programın oluşturulması diğer ağır atom ve iyonlarda yapılacak hesaplamaları önemli ölçüde kolaylaştıracaktır. Ayrıca en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride seviyelere ait yarıçapların farklı yöntemlerle daha doğru olarak belirlenmesinin araştırılması bu yöntemi kullanan araştırmacılar için her zaman önemli bir çalışma alanı oluşturacaktır.

KAYNAKLAR

- Agaker, M., 2006, Double excitations in helium atoms and lithium compounds, ph.D. Thesis, *Uppsala University*, Uppsala, Sweden.
- Apaydın, F., 2004, Kuantum fiziği, *Hacettepe Üniv. Yayınları*, Ankara.
- Ateş, Ş., 2010, Çok elektronlu sistemlerde atomik yapı hesaplamaları, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.
- Aygün, E. ve Zengin, M., 1998, Kuantum fiziği, *Ankara Üniversitesi 4. Baskı Bilim Yayınları*, Ankara.
- Başar, B., 2000, Fizikçiler ve Kimyacılar için kuantum kimyası, *Birsen Yayınevi*, İstanbul.
- Bethe, H.A., and Salpeter, E. E., 1957, Quantum mechanics of one and two-electron atoms, *Springer-Verlag*, Berlin.
- Beyer, H. F. and Shevelko, V. P., 2003, Introduction to the physics of highly charged ions, *P. N. Lebedev Physical Institute*, Moscow, Russia.
- Biemont, E., Palmeri, P., Quinet, P., Paquin, G., Zhang, Z. G., Somesfalean, G. and Swanberg, S., 2001, Measurements of radiative lifetimes and determination of transition probabilities of astrophysical interest in Ho III, *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 328, 1085-1090.
- Biemont, E. and Quinet P., 2003, Recent advances in the study of lanthanide atoms and ions, *Physica Scripta*, T105, 38-54.
- Blagoev, K. B., Valter, A. K. and Komarovskii, V. A., 1978, Relative oscillator strengths of the spectral lines of holmium, *Optics & Spectroscopy*, 45 (6), 932-933.
- Blagoev, K. B. and Komarovskii, V. A., 1994, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 56, 1-40.
- Burkhardt, C. E. and Leventhal, J. J., 2006, Topics in atomic physics, *Springer Science Business Media, LLC*, New York.
- Castor, S. B. and Hedrick, J. B., 2006, Rare earth elements, *Industrial Minerals and Rocks*, 769-792.
- Cowan, R. D., 1973, The theory of rare earth energy levels and spectra, *Nuclear Instruments and Methods*, 110, 173-182.
- Çelik, G., 2005, Çok elektronlu atomlarda elektronik geçişler, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.

- Den Hartog, E. A., Wiese, L. M. and Lawler, J. E., 1999, *J. Opt. Soc. Am. B.*, 16 (12), 2278-2284.
- Goldschmidt, Z. B., Gschneidner, K. A. and Eyring, L., 1978, Handbook on the Physics and chemistry of rare earths, *North Holland Publ. Co.*, Amsterdam, I.
- Gorshkov, V. N. and Komarovskii, V. A., 1979, Lifetimes of excited levels and oscillator strengths of Ho I and Ho II spectral lines, *Optics & Spectroscopy*, 47 (4), 350-351.
- Hill, W. T. and Lee, C. H., 2007, Light-matter interaction, *WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA*, Weinheim.
- Komarovskii, V. A., 1991, Oscillator strengths of spectral lines and electronic transition probabilities of atoms and singly charged ions of lanthanides: A review, *Opt. Spektrosk.*, 71, 558-592.
- Lawler, J. E., Sneden, C. and Cowan, J. J., 2004, Improved atomic data for Ho II and new holmium abundances for the sun and three metal-poor stars, *The Astrophysical Journal*, 604, 850-860.
- Lindgrad, A. and Neilsen, S. E., 1977, Transition Probabilities for the alkali isoelectronic sequences Li I, Na I, K I, Rb I, Cs I, Fr I sequences, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 19(6), 533-633.
- Martin, W. C., 1972, *Opt. Pura. Y. Apl.*, 181.
- Migdalek, J., 1984, Relativistic model-potential oscillator strengths and transition probabilities for $4f^n6s-4f^n6p$ transitions in Eu(II), Tb(II) and Ho (II) in J_{ij} coupling, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 32(1), 103-108.
- Nave, G., 2003, Atomic transition rates for neutral holmium (Ho I), *J. Opt. Soc. Am. B.*, 20 (10), 2193-2202.
- Okur, İ., 2000, Atom ve molekül fiziği, *Değişim Yayınları*, Sakarya.
- Pradhan, A. K. and Nahar, S. N., 2011, Atomic astrophysics and spectroscopy, *Cambridge University Press*, Cambridge.
- Ralchenko, Y., Kramida, A. E., Reader, J. and NIST ASD Team, (2011), NIST Atomic Spectra Database (ver. 4.1.0), URL: <http://physics.nist.gov/asd>, *Institute of Standards and Technology*, Gaithersburg, MD.
- Silfvast, W. T., 2004, Laser fundamentals, *Cambridge University Press*, Cambridge.
- Sobelman, I. I., 1979, Atomic Spectra and Radiative Transitions, *Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York*.
- Tektunalı, H. G. ve Kuli-Zade, C. F., 1995, Atom spektroskopisinin temelleri, *İstanbul Üniv. Basımevi*, İstanbul.

- Tennyson, J., 2005, *Astronomical spectroscopy*, University College London, UK, Imperial College Press Advanced Physics Texts,
- Thewlis, J., 1961, *Encyclopedic dictionary of physics*, Pergamon Press, Oxford, 2 (60).
- Worm, T., Shi, P. and Poulsen, O., 1990, Lifetimes and hyperfine structures in Ho II, *Physica Scripta*, 42, 569-573.
- Wyart, J. F., 1978, Analysis of lanthanide atomic spectra: Present state and trends, *J. Opt. Soc. Am.*, 68 (2), 197-205.
- Wybourne, B. G., 1965, *Spectroscopic properties of rare earths*, Interscience, New York.
- Zhang, Z. G., Somesfalean, G., Swanberg, S., Palmeri, P., Quinet, P. and Biemont, E., 2002, Radiative lifetimes measurements and oscillator strengths of astrophysical interest in Ho III, *Astronomy and Astrophysics*, 384, 364-370.
- Zheng, N. W., 1986, A new theoretical model for many-electron atom and ion systems I., *Chinese Science Bulletin*, 31, 1238-1242.
- Zheng, N. W. and Li, G. S., 1994, Electronegativity-average nuclear-potential of the valence electron, *J. Phys. Chem.-Us*, 98 (15), 3964-3966.
- Zheng, N. W., Ma, D. X., Yang, R., Zhou, T., Wang. T. and Han, S., 2000-a, An efficient calculation of the energy levels of the carbon group, *Journal of Chemical Physics*, 113(5), 1681-1687.
- Zheng, N. W., Sun, Y. J., Wang. T., Ma, D. X., Zhang, Y. and Su, W., 2000-b, Transition probability of lithium atom and lithium like ions with weakest bound electron wave functions and coupled equations, *International Journal of Quantum Chemistry*, 76, 51-61.
- Zheng, N. W., Wang. T. and Yang, R., 2000-c, Transition probability of Cu I, Ag I and Au I from weakest bound electron potential model theory, *Journal of Chemical Physics*, 113(15), 6169.
- Zheng, N. W., Zhou, T., Yang, R., Wang. T. and Ma, D. X., 2000-d, Analysis of bound odd-parity spectrum of krypton by weakest bound electron potential model theory, *Chemical Physics*, 258,37-46.
- Zheng, N. W., Sun, Y. J., Ma, D. X., Yang, R., Zhou, T. and Wang. T., 2001-a, Theoretical study on regularity of changes in quantum defects in rydberg state series of many-valence electron atoms within WBEPM theory, *International Journal of Quantum Chemistry*, 81, 232-237.
- Zheng, N. W., Wang, T., Yang R., Zhou, T., Ma, D. X., Wu, Y. G. and Xu, H. T., 2001-b, Transition probabilities for Be I, Be II, Mg I, and Mg II. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 79(1), 109-141(33).

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

Zheng, N. W., Wang, T., Yang, R. Y., Zhou, T., Ma, D. X., Wu, Y. G., Xu, H. T. 2001-d Transition probabilities Be I, Be II, Mg I, and Mg II, *At. Data and Nucl. Data Tabl.* 79, 109.

Zheng, N. W. and Wang, T., 2004-a, Calculation of excited-state ionization potential for boron-like sequence, *Int. J. Quant. Chem.*, 98, 495.

Zheng, N. W., Li, Z., Ma, D. X., Zhou, T. and Fan, J., 2004-b, *Theoretical study of energy levels of atomic Ga*, *Canadian Journal of Physics*, 82, 523-529.

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

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Selma Özarslan
Uyruğu : T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi : Tortum-1986
Telefon : 0326 245 5845- 1637
Faks :
e-mail : selmaozarslan35@gmail.com

EĞİTİM

Derece	Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise	: Kemalpaşa Lisesi, Kemalpaşa, İzmir	2003
Üniversite	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2009
Yüksek Lisans :		

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görevi
-----	-------	--------

UZMANLIK ALANI: Atom ve Molekül Fiziği

YABANCI DİLLER: İngilizce

YAYINLAR