

**T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**NÖTRAL SKANDİYUM VE İTRİYUMUN DÜŞÜK ENERJİ SEVİYELERİNE
VALANS-VALANS VE ÖZ-VALANS KORELASYON ETKİLERİNİN
İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fifi KARNİLA

Fizik Anabilim Dalı

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Eğitim-Öğretim Yönetmeliğine ve Yükseköğretim Kurumları Bilimsel Araştırma ve Yayın Etiği Yönergesine uygun olarak hazırlamış olduğum “NÖTRAL SKANDİYUM VE İTRİYUMUN DÜŞÜK ENERJİ SEVİYELERİNE VALANS-VALANS VE ÖZ-VALANS KORELASYON ETKİLERİNİN İNCELENMESİ”, başlıklı tezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın tüm aşamalarında yukarıda belirtilen yönetmelik ve yönergeye uygun davrandığımı, tezin içerdiği yenilik ve sonuçları başka bir yerden almadığımı, tezde kullandığım eserleri usulüne göre kaynak olarak gösterdiğimi, bu tezi başka bir bilim kuruluna akademik amaç ve unvan almak amacıyla vermediğimi ve 20.04.2016 tarihli Resmi Gazete’de yayımlanan Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin 9/2 ve 22/2 maddeleri gereğince Sakarya Üniversitesi’nin abonesi olduğu intihal yazılım programı kullanılarak Enstitü tarafından belirlenmiş ölçütlere uygun rapor alındığımı, etik kurul onay belgesi aldığımı (etik onayı gerekmiyorsa bu cümle metinden çıkartılır), çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun ortaya çıkması halinde doğabilecek her türlü hukuki sorumluluğu kabul ettiğimi beyan ederim.

(02. 02. 2023)

Fifi Karnila

Bu tez çalışması sevgili ebeveynlerim Taufik ve Sukaesih ithaf edilmiştir.

TEŐEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim boyunca değerli bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım, her konuda bilgi ve desteğini almaktan çekinmediğim, araştırmanın planlanmasından yazılmasına kadar tüm aşamalarında yardımlarını esirgemeyen, teşvik eden, aynı titizlikte beni yönlendiren değerli danışman hocam Prof. Dr. Leyla ÖZDEMİR'e teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca bugüne kadar maddi ve manevi her konuda destek veren anneme, babama ve kardeşime çok teşekkür ederim.

Fifi Karnila

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ	iv
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
KISALTMALAR	viii
SİMGELER	ix
TABLO LİSTESİ	x
ÖZET	xi
SUMMARY	xii
1. GİRİŞ	1
2. TEORİK TEMEL VE HESAPLAMA YÖNTEMİ	3
2.1. Tek Elektronlu Sistemler için Schödinger Denklemi.....	3
2.2. Çok Elektronlu Sistemler	6
2.3. Bazı Çok-Cisim Yaklaşıklıkları	8
2.4. Hartree-Fock (HF) Yöntemi ve Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF)Yöntemi	9
2.5. Elektron Korelasyonu.....	11
2.6. Konfigürasyon Hal Fonksiyonları (CSF)	12
2.7. Breit - Pauli Hamiltonyeni	12
2.8. MCHF Atomik Yapı Paketi ile Hesaplama Adımları	13
2.8.1. Konfigürasyon hal fonksiyonlarının belirlenmesi (GENCL)	14
2.8.2. Relativistik olmayan hamiltonyenin açısall integralleri hesaplanması (NONH)	14
2.8.3. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi ile hesaplama (MCHF) ..	14
2.8.4. Breit- pauli hamiltonyeninin açısall integrallerinin hesabı (BREIT).....	15
2.8.5. Konfigürasyon etkileşmesinin hesabı (CI)	15
3. HESAPLAMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA	16
3.1. Nötral Skandiyumun (Sc I) Düşük Enerji Seviyeleri	16
3.1.1. Skandiyumun (Sc I) çift pariteli seviyelerinin enerjileri	17
3.1.2. Sandiyumun (Sc I) tek pariteli seviyelerinin enerjileri	25
3.2. Nötral İtiryumun (Y I) Düşük Enerji Seviyeleri	31
3.3.1. İtiryumun (Y I) çift pariteli seviyelerinin enerjileri.....	32
3.3.2. İtiryumun (Y I) tek pariteli seviyelerinin enerjileri	40
4. SONUÇ VE ÖNERİLER	48
KAYNAKLAR	49
ÖZGEÇMİŞ	51

KISALTMALAR

A.B	: Atomik birim
MCHF	: Çok konfigürasyonlu hartree-fock (multiconfiguration hartree-fock)
NIST	: National institute of standards and technology
QED	: Kuantum elektrodinamik (quantum electrodynamic)
HF	: Hartree-fock
MC-SCF	: Çok konfigürasyonlu-öz-uyum alan
CI	: Konfigürasyon etkileşimi
CSF	: Konfigürasyon hal fonksiyonu (configuration state function)
CC	: Öz-öz
VV	: Valans-valans
CV	: Öz - valans
GRASP	: General relativistic atomic structure program
MCDHF	: Çok konfigürasyonlu dirac hartree-fock (multiconfigurational dirac hartree-fock)
MBPT	: Çok cisim pertürbasyon teorisi
GENCL	: Konfigürasyon hal fonksiyonu
NONH	: Relativistik olmayan hamiltonyenin açısal integralleri

SİMGELER

Sc I	: Nötral skandiyum
Y I	: Nötral itriyum
Z	: Atom numarası
Φ	: Slater deTeriminantı
V	: Hız
α	: Işık hızı
\hbar	: Planck sabiti
$\psi(\mathbf{r},t)$: Dalga fonksiyonu
\mathcal{H}	: Hamiltonyen

TABLO LİSTESİ

Sayfa

Tablo 3.1. Sc I'in enerji seviyeleri için kullanılan konfigürasyon setleri.	16
Tablo 3.2. Sc I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1})....	19
Tablo 3.3. Sc I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1})....	26
Tablo 3.4. Y I'in enerji seviyeleri için kullanılan konfigürasyon setleri.	31
Tablo 3.5. Y I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1})....	34
Tablo 3.6. YI'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1})....	41

NÖTRAL SKANDİYUM VE İTRİYUMUN DÜŞÜK ENERJİ SEVİYELERİNE VALANS-VALANS VE ÖZ-VALANS KORELASYON ETKİLERİNİN İNCELENMESİ

ÖZET

Sc I ($Z=21$) ve Y I ($Z=39$) için düşük enerji seviyeleri olan açık tabakalarında sırasıyla $ndn's^2$ ve $nd^2n's$ ($n=3, 4$ Sc I için ve $n'=4, 5$ Y I için) olan konfigürasyonlara sahip geçiş metal elementleridir (Grup III ve periyot 4 ve 5). Bu iki element çoğunlukla aynı cevherlerde buldukları ve atomik yapıları ve kimyasal özellikleri benzer oldukları için lantanitlerle beraber nadir toprak elementleri olarak da sınıflandırılırlar.

Bu çalışmada, Sc I ve Y I için düşük enerji seviyeleri üzerinde valans-valans (değerlik-değerlik) ve öz-valans (öz-değerlik) korelasyon etkilerini incelemek amaçlandı. Hesaplamalar konfigürasyon etkileşme modelini içeren çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) yöntem ile yapıldı. Ayrıca, hesaplamalar korelasyon etkilerinin yanı sıra Breit-Paul Hamiltonyeni çerçevesinde relativistik etkileri de içerir. Sc I ve Y I ile ilgili literatür bilgisi birinci bölümde ve kullanılan yöntem ve hesaplama stratejisi ile ilgili bilgi de ikinci bölümde verildi. Son bölümde hesaplama sonuçları tablolarda sunuldu ve sonuçların diğer mevcut çalışma sonuçları ile karşılaştırılması ve bir tartışması verildi. Genel olarak, valans-valans korelasyonlarına göre elde edilen sonuçlar, öz-valans korelasyonuna göre elde edilen sonuçlardan daha iyi olduğu görüldü. Çalışılan atomların dış tabakalarındaki üç elektronun 3d ve 4s (Sc I için) ve 4d ve 5s (Y I için) alt tabakalarına yerleşmeleri karmaşık gözükmesine de bu alt tabakaların enerjileri birbirine çok yakındır ve konfigürasyon etkileşimini zorlaştırmaktadır.

Atomik yapı verileri çok çeşitli araştırma alanları için temel bileşendir. Bu nedenle bu çalışmada nötral skandiyum ve itriyum için verilen enerji seviyelerine ait veriler gelecekte bazı seviye yapılarına ait parametrelerin araştırılması için faydalı olacaktır.

INVESTIGATION OF VALENCE-VALENCE AND CORE-VALENCE CORRELATION EFFECTS ON LOW-LYING ENERGY LEVELS OF NEUTRAL SCANDIUM AND YTTRIUM

SUMMARY

Scandium (Sc) and yttrium (Y) are two Group IIIB and Period 4 and 5 transition metals, respectively. These two elements are categorized as rare earth elements together with the lanthanides, because they are often found in the same core deposits, and they have similar atomic structures and chemical properties as the lanthanides. Scandium (Sc, $Z = 21$) has only one long-lived isotope, and has an atomic mass of 44.95591 a.m.u. The electronic configuration for Scandium is $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6] 3d^1 4s^2$.

Yttrium is a chemical element with the symbol Y ($Z = 39$), which has a single isotope and has an atomic mass of 88.90584 a.m.u. The electronic configuration for Yttrium is $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4d^6] 4d^1 5s^2$. There are research about atomic data properties such as energy levels, wavelengths, radiative lifetimes, transition probabilities, and oscillator strengths.

In some studies, recently research on atomic data related to scandium has been carried out such as Pehlivan et al. (2015) calculated the oscillator strengths of neutral scandium with combined experimental branching fractions with radiative lifetimes from the literature to derive oscillator strengths. It provides the first set of experimental Sc I lines in the near-infrared region for accurate spectral analysis of astronomical objects. In addition, Scott et al. (2015) determine the abundances of all iron group nuclei in the Sun, based on neutral and singly-ionized lines of Sc, Ti, V, Mn, Fe, Co and Ni in the solar spectrum. Lawler et al. (2019) had done the research on scandium in part of iron-group (Fe-group) abundances in metal-poor stars and the laboratory atomic transition probabilities. Liu et al. (2019) also had done the research on the radiative lifetimes of 39 excited levels of Sc I and for the best knowledge, there are no lifetime measurements on the high-lying above $40,603.933 \text{ cm}^{-1}$ in Sc I. Meanwhile, the research on atomic data related to yttrium had been done by Shang Xue et al. (2015) they calculated the radiative lifetimes, branching fractions, transition probabilities and oscillator strengths of some levels for neutral yttrium.

In this work, we calculate the valence-valence and core-valence correlation effects on the energy levels for neutral scandium and neutral yttrium using MCHF atomic structure package. In the MCHF method developed by Fischer, the electron correlations are computed by wave function expansions composed of a large set of one-electron basis functions generated by electron replacement. In addition, the relative contributions are considered in the framework of Breit-Pauli Hamiltonian. For a part from increasing the number of orthogonality constraints, the complexity of the latter is independent of the number of the electrons. There is no additional difficulty

in solving equations for large numbers of the electrons. however, the correct definition of electron correlation is highly dependent on the number of electrons and the corresponding occupied shells.

Atomic theory is based on the independent particle model, in which each electron is thought to move at an effective potential in the nucleus and the average effect of repulsive interactions between an electron and other electrons. If the interaction in the movement of electrons is neglected, it is assumed that each electron moves independently in a field determined by other electrons. These effects between electrons are called “correlation effects” and the error in energy is defined as “correlation energy” by neglecting the correlation effects. The various Φ_i Slater determinants differ in the selection of spin-orbitals occupied by electrons, and therefore correspond to different placements. This approach is known as the configuration-interaction (CI) method.

We have given various configuration sets including valence-valence and core-valence correlation effects, and the results obtained have been presented in the tables. For these atoms, there are available data based on the literature and the results that obtained in this work have been compared with the literature data from the National Institute of Standards and Technology (NIST).

For neutral scandium, there are 157 levels were obtained in this work. Energies have been separately presented for even-parity and odd-parity levels. The calculations have been indicated numbers according to various configuration sets both valence-valence and core-valence correlations. In some calculations, level energies that obtained in this work are better than others. For the example in the first even-parity level of $3d4s^2$ ($179,54 \text{ cm}^{-1}$) in the fourth calculation is close to the NIST ($168,3371 \text{ cm}^{-1}$) and another work ($173,90 \text{ cm}^{-1}$). For the other levels those are also close to the literatures are $3d^2(^3F)4s$, $3d^2(^1D)4s$, $3d^2(^3P)4s$, and $3d^2(^1G)4s$. Meanwhile for the other levels are far from the literatures. In this work the error percentage has been considered in the fourth calculation. There are 17 levels of value those are close to the NIST. For the example in the level of $3d^2(^3F)4s$ has the smallest error percentage of all the levels. Those are in ($J=3/2$) has 1.9%, ($J=5/2$) has 1.8%, ($J=7/2$) has 1.8%, and ($J=9/2$) has 1.7%. The third calculation results for odd-parity levels are better than other calculations. For the example, in the first odd-parity level of $3d4s(^3D)4p$ in tem of $4F$ is close to the literatures. For the other levels those are also close to the literatures are $3d4s(^3D)4p$, $3d4s(^1D)4p$, $3d4s(^3D)4p$, $3d^2(^3F)4p$, $3d^2(^3P)4p$, $3d^2(^1D)4p$, and $3d^2(^1G)4p$. Meanwhile for the other levels are far from the literatures. These levels belong to the part of the valence-valence correlation calculation. The calculation of the error percentage in the third calculation there are 28 levels of value those are close to the NIST. For the example in the level of $3d4s(^3D)4p$ has the smallest error percentage of all the levels. Those are in ($J=3/2$) has 1.1% ($J=3/2$) has 1.1%, ($J=5/2$) has 0.6%, and ($J=7/2$) has 0.5%).

For neutral yttrium there are 171 levels have been obtained based on the calculation and the results have been presented in the tables. For even parity levels, the values from third calculation are close to the literature. In this calculation, for the first level of $4d5s^2$ is close to the NIST. For the other levels those are also close to the NIST are in levels of $4d^2(^3F)5s$, $4d^2(^3P)5s$, $4d^2(^1D)5s$, $4d^2(^1D)5s$, $4d^2(^3P)5s$, $4d^2(^1S)5s$, $4d^3$, $5p^2(^3P)5s$, $5p^2(^3P)4d$, $5s^27s$, and $5p^2(^3P)4d$, but for the other levels are far from the literature. The calculation of the error percentage in the third calculation of the energy

level values that has the smallest error percentage is in the configuration of $5p^2 (^3P)5s$, those are in $(J=1/2)$ has 1.9%, $(J=3/2)$ has 1.8%, and $(J=3/2)$ has 1.6%. For odd parity, that has the values close to the literature are obtained in the fourth calculation. In this calculation, the first level of $5s^25p$ is close to NIST value ($10529.169 \text{ cm}^{-1}$). For the other levels those are also close to the literatures are $4d5s(^3D)5p$, $4d5s(^1D)5p$, $4d^2(^3F)5p$, $4d^2(^3P)5p$, $4d^2(^1D)5p$, $4d^2(^1G)5p$, and $4d5s(^3D)6p$. The calculation of the error percentage of the energy level values in the fourth calculation have been obtained 53 energy levels are close to the NIST. For the example in the level of $4d5s(^1D)5p$ has the smallest error percentage those are in $(J=5/2)$ has 0.4%, and $(J=7/2)$ has 0.7%.

In the general, the results obtained according to valence- valence correlation are better than according to the core-valence correlation. however, we inform that we have not widely selected configuration set for core-valence correlations because of the computational restriction for both atoms. Although these configurations are not difficult to saturate three-electron CI space, the energies of the 3d and 4s subshells are very close and mixing of configurations is stronger than usual for Sc I. We think in this case also will occur for 4d and 5s. In addition, we have not considered all interactions for Breit - Pauli Hamiltonyen due to widely interaction integrals produced, so the spin-orbit interactions only considered in some cases, particularly in the core-valence correlation calculation.

Accurate atomic structure data is an essential important for a wide range of research fields. Therefore, energy levels presented for Sc I and Y I from this work will be useful for research of some parameters belong to level structures.

1. GİRİŞ

Skandiyum (Sc) ve itriyum (Y) sırasıyla periyodik tabloda grup IIIB ve 4 ve 5 periyotlarında bulunan geçiş metallere (Hu, 2016). Bu iki element lantanitlerle beraber aynı cevherlerde buldukları için ve kimyasal ve özellikleri ve atomik yapıları benzer olduğu için nadir toprak elementleri olarak da sınıflandırılırlar (Knutson ve ark, 2016). Nötral skandiyumun (Sc I, Z=21) yalnızca bir tane uzun ömürlü izotopu vardır ve 44,95591 a.b. atom kütlesine sahiptir. Skandiyumun elektron konfigürasyonu $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6] 3d^1 4s^2$ (Pehlivan ve ark, 2015). Nötral itriyum (Y I, Z=39) da bir tane izotopu sahiptir ve atom kütlesi 88,90584 a.b. dir. İtiryumun elektron konfigürasyonu $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4d^6] 4d^1 5s^2$ (Hu, 2016).

Skandiyum ve itriyum ve bunların iyonları için enerji seviyeleri, dalga boyları, ışınım yarı ömürleri, geçiş olasılıkları ve osilator şiddetleri gibi atomik verilerin çalışılması özellikle astrofiziksel çalışmalarda faydalıdır (Pehlivan, 2018). Son zamanlarda nötral skandiyumla ve bir kez iyonlaşmış skandiyumla ilgili atomik verilerle ilgili bazı çalışmalar (ışınım yarı ömürlerle birlikte dallanma fraksiyonları hesaplarını deneyle birleştiren) mevcuttur (örneğin, Pehlivan ve ark., 2015, 2018). Sc I çizgileri üzerindeki geçiş olasılığı ölçümleri ilk olarak Lawler ve Dakin (1989) tarafından hem ızgaralı spektrometreden hem de Fourier dönüşüm spektrometresinden (FTS) elde edilen emisyon dallanma fraksiyonlarını (BP'ler) ve lazerle indüklenen floresana dayalı iki ışınım yarı ömür ölçümüyle birlikte kullanılarak rapor edildi. Çalışmalarında laboratuvar atomik geçiş olasılıkları geliştirildi. Bu proje astronomik nesnelerin doğru spektral analizi yakın kızılötesi bölgedeki ilk deneysel SC I çizgilerini sağlamıştır. Ayrıca Scott ve ark. (2015), güneş spektrumundaki Sc, Ti, V, Mn, Fe, Co ve Ni'nin nötr ve tekli iyonize çizgilerini temel alarak güneşteki tüm demir grubu çekirdeklerinin bolluklarını belirlediler. Skandiyum için dalga boyları, uyarma potansiyelleri ve geçiş

tanımlamaları Kaufman ve Sugar (1988) tarafından rapor edilmiştir. Lawler ve ark. (2019), metal bakımından fakir yıldızlardaki demir grubu (Fe grubu) bolluklarının bir kısmında skandiyum üzerine araştırma yapmışlardır. Liu ve ark. (2019) Sc I'in 39 uyarılmış seviyesinin ışınımsal ömrünü rapor ettiler. İtiryum ile ilgili atomik veriler üzerine araştırma, Shang Xue ve ark. (2015) tarafından yapılmıştır. Y I için bazı seviyelerin ışınım ömürlerini, dallanma fraksiyonlarını, geçiş olasılıklarını ve şiddetlerini hesapladılar. Çalışmalarında, zaman çözünürlü lazerle indüklenen floresan (TR-LIF) tekniğini kullanarak ömür ölçümleri 27,824.50 ve 50,254 cm⁻¹ arasındaki 34 seviyes rapor edilmiştir. Dallanma fraksiyonu için emisyon spektrumuna dayalı ölçümler bu seviyelerin 12'si için yapılmış ve 274,250 ile 670,063 nm arasında 64 çizginin sonuçları elde edilmiştir. Yarı ömür değerleri ile birleştirilerek bu çizgilerin geçiş olasılıkları ve mutlak osilatör şiddetleri belirlendi. Kullanım ömrü ve osilatör gücü sonuçları genel olarak Hannaford ve ark. (1982) verileriyle iyi bir uyum içindedir. Bu çalışmada, nötral skandiyum (Sc I, Z=21) ve itiryum (Y I, Z=39) için enerji seviyeleri üzerindeki valans-valans (değerlik-değerlik) ve öz-valans (öz-değerlik) korelasyon etkilerini çok konfigürasyonlu hartree-fock (MCHF) atomik yapı paketi kullanılarak rapor edilmektedir (Fischer, 1997). Bu hesaplama yöntemi, elektron korelasyonlarını dikkate alan konfigürasyon etkileşimi (CI) yöntemine ve relativistik düzeltmeler için Breit Pauli Hamiltonyenine dayanmaktadır. Sc I ve Y I için temel hal konfigürasyonları sırasıyla [Ar] ndn's² (n=3 ve n'=4) ve [Kr] ndn's² (n=4 ve n'=5) şeklindedir. Bazı durumlarda Breit-Pauli relativistik etkileri için yalnızca spin-yörünge etkileri vardır. Bu konfigürasyonların üç elektronlu açık tabaka CI uzayında yerleşimleri karmaşık olmasa da, 3d ve 4s alt tabakalarının enerjileri birbirine çok yakındır ve konfigürasyonların karışımı Sc I için normalden daha güçlüdür (Imanbaeva ve Kozlov, 2018). Bu durumun Y I için 4d ve 5s alt tabakaları için de ortaya çıkabileceği düşünülebilir. Bu nedenle çalışmada, valans-valans (değerlik-değerlik) ve öz-valans (öz-değerlik) korelasyonlarını içeren çeşitli konfigürasyon setleri alındı ve sonuçları rapor edildi. Bu atomlar için literatüre dayalı veriler mevcuttur. Bu çalışmadan elde edilen sonuçlar genellikle Ulusal Standartlar ve Teknoloji Enstitüsü'nün (NIST) literatür verileriyle karşılaştırıldı (Kramida ve ark, 2022).

2. TEORİK TEMEL VE HESAPLAMA YÖNTEMİ

2.1. Tek Elektronlu Sistemler için Schödinger Denklemi

Bohr'un atom modeli, gözlenen spektrumun kesikli özelliklerini açıklayan ilk model olduğu için bir devrim niteliğindedir. Bu model atomik birim (a.u.) olarak adlandırılan başka bir birim sisteminin tanımlanmasında önemli bir rol oynadı. Hatta günümüzde bu teori, bir atom modeli olarak fizikçiler tarafından kullanılmaktadır (Schiffmann, 2021). Bu atomların kuantum tanımlaması için relativistik teorinin önemini tartışmak için temel model oluşturur. Cisim (nesne) ışık hızına yakın hızlarda (ışığın vakumdaki hızı, $c = 299\,792\,458\text{ ms}^{-1}$) hareket ederse relativistiktir. Bu durumda

$$v_0 = \alpha c \quad (2.1)$$

olarak ilk Bohr yörüngesinin formunda hızı yazmak faydalıdır. Burada, $\alpha=7.297\,352\,5693(11) \times 10^{-3} \approx 1/137$ (au biriminde $c \approx 137$ alındığında) değerli boyutsuz ince-yapı sabitidir. Z çekirdek yüklü bir hidrojen benzeri sistemin Bohr hızı $v = \alpha Zc$ ile verilir. αZ çarpanı elektronun relativistik karakteri hakkında bilgi verir. Bohr'un atom modeli birkaç nedenden dolayı yetersizdi: Çok-elektronlu sistemleri temsil edememe, yörüngeni keyfi olarak dairesel seçimi, geçiş hızlarının hesaplanması için bir yöntem sağlama ve kısıtlanmasız sistemlerin tanımlanması. Bu sınırlamalar yada yetersizlikler yeni bir bakış açısının (Schrödinger kuantum teorisinin) ortaya çıkmasına neden olmuştur. Schrödingerin vizyonunun kaynağı, Newton ve Leibniz'in integral hesabından ve Lagrange ve Hamilton hesabından beri bilinen klasik mekaniğin köklerine geri dönmektir:

$$F = ma = \frac{\partial P}{\partial t} = m \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} \quad (2.2)$$

Burada $p = mv$, m kütleli ve v hızlı bir nesnenin momentumudur. Schrödinger'in kuantum dalga teorisini tasavvur etmesinde klasik mekaniğin büyük bir etkisi olmuştur. Dalga-parçacık ikilemi de Broglie tarafından ileri sürüldü:

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k, \quad (2.3)$$

Burada E , dalga-parçacık enerjisini gösterir, \hbar indirgenmiş Planck sabitidir, ω yayılan dalga ile ilgili açısal frekans, ve k ise ayılma vektörüdür. Bu klasik dalga denklemiyle ilişkili olan akustik ve optikten bilinen bir ifadeye sahiptir:

$$\nabla^2\Psi(r, t) = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2\Psi(r, t)}{\partial t^2} \quad (2.4)$$

Burada $\psi(r, t)$ uzay ve t zaman koordinatlarına bağlı dalga fonksiyonudur, ve v hızdır. Düzlem dalgalar,

$$\psi(r, t) = A \exp[i(k \cdot r - \omega t)] \quad (2.5)$$

ile ifade edilir. Burada A bir reel sayıdır. (2.3) 'ün çözümü

$$\nabla^2\Psi(r, t) = -k^2\psi(r, t) \quad (2.6)$$

ve

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -\omega^2\psi(r, t) \quad (2.7)$$

dir. De Broglie kütlesi m ve enerjisi $E = p^2/2m$ olan serbest bir parçacığı dalga karakteri ile ilişkilendirdi. (2.3) kullanılarak ve enerjinin standart alınarak dispersiyon bağıntısı elde edilir:

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (2.8)$$

De Broglie'nin dalga fonksiyonu,

$$i\hbar \frac{\partial\Psi(r, t)}{\partial t} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2\psi(r, t) \right] \quad (2.9)$$

şeklinde bir dalga denklemi önerdi.

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad p \leftrightarrow -i\hbar \nabla \quad (2.10)$$

Tanımlamaları dalga denkleminin şeklinden üretildi. Kuantum mekaniğinin güçlü bir hipotezi, bu bağıntıların düzlem olmayan dalga çözümleri sağladığını gösterir. Örneğin potansiyel enerji,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial t} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r,t) \right] \Psi(r,t) \quad (2.11)$$

şeklinde denkleme eklenir. Potansiyel zamandan bağımsız ise dalga denklemini uzay ve zaman koordinatlarına ayırarak suretiyle çözebilir. Dalga fonksiyonu

$$\Psi(r,t) = \phi(r) \exp[-iEt/\hbar], \quad (2.12)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\phi(r)$ yalnızca radial koordinatlara bağlıdır ve $\exp[-iEt/\hbar]$ zaman göre sistemin değişimini tanımlar.

$$\mathcal{H}\phi(r) = E\phi(r), \quad (2.13)$$

olarak yazılan zaman bağılı Schrödinger denkleminini yada kararlı özdeğer denkleminin çözümüdür. Burada $\mathcal{H} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right]$ sistemin hamiltonyenidir. Schrödinger, dalga teorisini gerçek dalgaların fiziksel öngörü mantığını kullanılarak tasarladı, ancak benimsenen dalga fonksiyonunun yorumu olasılığa dayanır.

$$\phi^*(r)\phi(r)dr = |\phi|^2 dr \quad (2.14)$$

Hacminde bir elektronun bulunma olasılığı 1'dir. Parçacık (\mathbb{R}^3) uzayında herhangi bir yerde olabileceğini belirtir.

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi^*(r)\phi(r)dr = 1 \quad (2.15)$$

Hidrojen benzeri atomlardaki bir tekli elektron.

$$V = -Ze^2/4\pi\epsilon_0|r| \quad (2.16)$$

Şeklinde Coulomb potansiyelinin alınmasıyla Schrödinger denklemini iyi tanımlıdır. Schrödinger iki tip çözüm tanımladı: $E > 0$ or $E < 0$. Pozitif çözümü E 'nin herhangi bir değerini alabilir ve bağımsız (sınırsız) sistemlere karşılık gelir. Negatif enerji çözümü ise yalnızca kesikli durumlar içindir (enerji kuantumlanmıştır). Schrödinger modelinin bir başarısızlığı hidrojenin ince yapısının deneysel adaptasyonu ve Zeeman bileşenidir. Bu yarım tamsayılı kuantum durumları ortaya çıkarır. Bu sorun da Uhlenbeck-Goudsmit tarafından elektronun spin hareketi ile çözüldü ve ancak bu spin hareketinin

nasıl olduğu bilinmemekle beraber mevcut teoriler çerçevesinde dikkate alınmalıdır (Schrödinger, 1926).

2.2. Çok Elektronlu Sistemler

N - elektronlu bir sistemin kararlı hali (Fischer, 1997).

$$H \psi_0 (q_1, \dots, q_N) = E_0 \psi_0 (q_1, \dots, q_N) \quad (2.17)$$

şeklinde Schrödinger denklemi ile verilir. Burada ψ sistemin durumunu belirten dalga fonksiyonudur. $\psi(r; t)$ ile belirlenen bir parçacığın 1 olasılıklı olması onun bir t zamanında $dr = dx dy dz$ hacminde bulunacağını belirtir:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(r, t)|^2 dr = 1 \quad (2.18)$$

yapılabilir.

Ayırtedilemez parçacıklar olan elektronlar için Hamiltonyen operatörü elektronun koordinatlarının değişiminden bağımsızdır. Atom sisteminin doğru bir tanımlaması antisimetrik dalga fonksiyonların lineer kombinasyonu ile yapılabilir:

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\wp} (-1)^P \wp \psi (q_1, \dots, q_N) \quad (2.19)$$

İki elektronun koordinatlarının değişimini veren operatörün paritesi permütasyon değişimi ile olur:

$$\wp_y \psi (q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N) = \psi (q_1, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, q_N) \quad (2.20)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\wp} (-1)^P \wp \quad (2.21)$$

A antisimetrik operatördür. (2.17) denkleminde elde edilen özfonksiyonlar sistemin toplam enerjisinin mümkün değerine karşılıktır (özdeğer problem). Schrödinger denklemi yalnızca tek elektronlu sistemler için çözülebilir. Çok elektronlu sistemler için detaylı çözümü çok zor olduğundan merkezi alan yaklaşıklığı kullanılarak bazı küçük etkilerin (örneğin yalnızca spin-yörünge etkileşmesini dikkate alarak) katkı

teorisi ile yaklaşık olarak çözülebilir. Dış alan yokluğunda N elektronlu atomun hamiltonyeni, kinetik enerji, çekici Coulomb potansiyel enerji ve elektronlar arası Coulomb itmesinden oluşur:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i>j}^N \frac{1}{r_{ij}} . \quad (2.22)$$

olarak ifade edilmektedir. Burada Z atomun çekirdek yükü, r_i , i elektronunun çekirdeğe olan uzaklığı ve r_{ij} , i ve j elektronları arasındaki mesafedir. (2.16) Hamiltonyen operatörü pertürbe ve pertübe olmamış şeklinde iki kısma ayrılabilir:

$$H = H_c + H_1 , \quad (2.23)$$

Burada

$$H_c = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_{ri}^2 + V(r_i) \right) = \sum_{i=1}^N h_i, \quad h_i = -\frac{1}{2} \nabla_{ri}^2 + V(r_i) \quad (2.24)$$

ve

$$H_1 = \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum \left(\frac{Z}{r_i} + V(r_i) \right) = \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_i S(r) \quad (2.25)$$

dır.

Özdeğerler ve özfonksiyonlar

$$E_0 = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.26)$$

$$\psi_0(q_1, \dots, q_N) = \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.27)$$

olarak yazılabilir. Burada bireysel spin orbitalleri

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + U(r) \right] \phi(\alpha; q) = E \phi(\alpha; q) \quad (2.28)$$

tek elektron denkleminin çözümleridir. Burada $U(r) = -\frac{Z}{r} + V(r)$ dir.

Tek elektron fonksiyonu yada spin orbital

$$\phi(\alpha; q) = \frac{1}{r} P(nl; r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) x_{m_z}(\sigma), \quad (2.29)$$

olarak yazılabilir. Burada çözüm $\alpha = nlm_l m_s$ kuantum sayısı ile karakterize edilir.

Genelde $U(r)$ potansiyeli Columb potansiyelidir ve tek elektron enerjisi de yalnızca n ve l kuantum sayılarına bağlıdır. Hamiltonyen operatörü H_0 elektronik permütasyonların değişimine göre invaryant olduğu için (2.27) ile elde edilen fonksiyonların çarpımı özfonksiyonu verir ve antisimetriktrir:

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = \mathcal{A} \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i, q_i) \quad (2.30)$$

Bu fonksiyon Slater determinant ile de gösterilebilir:

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = \mathcal{A} \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_{i,\dots}, q_i) = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \phi(\alpha_1, q_1) & \dots & \phi(\alpha_1, q_N) \\ \phi(\alpha_2, q_1) & \dots & \phi(\alpha_2, q_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \phi(\alpha_N, q_1) & \dots & \phi(\alpha_N, q_N) \end{vmatrix} \quad (2.31)$$

İki elektron dört kuantum sayılarının aynı değerlerini alırsa determinant sıfır olur. Bu da Pauli dışarlama ilkesini sağlar.

Slater determinantının paritesi

$$\pi = (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_n} = (-1)^{\sum_i l_i} \quad (2.32)$$

ile tanımlıdır. Bu yörünge kuantum sayısının tek yada çift olmasına bağlıdır.

2.3. Bazı Çok-Cisim Yaklaşıklıkları

Atomik yapı hesaplamaları için çeşitli teorilere dayandırılan çok- cisim yaklaşıklıkları vardır. Örneğin MCDHF yöntemi (Multiconfigurational Dirac Hartree-Fock) GRASP'a (General Relativistic Atomic Structure Program) uygulandı. MCDHF yöntem, enerjiyi en aza indiren temel fonksiyonları oluşturmak için varyasyon ilkelerini kullanır. Çok cisim pertürbasyon teorisi (MBPT) ve birleştirilmiş küme gibi diğer yöntemler (CC) yöntemleri, etkili Hamiltoniyeni tanımlamak için pertürbasyon teorisini kullanır. Birçok MBPT veya CC hesaplamalarını gerçekleştirmek için programlar mevcuttur, örneğin: FAC Kodu, DIRAC19 Programı, CI-MBPT Programı,

AMBIT Programı veya RCCPAC Programı. Bu programların her birinin, bazı uygulamaların yapılabilmesi için karakteristik özelliklere sahiptir. Bu programlara literatürden ulaşılabilir (Schiffmann, 2021).

Karmaşık atomik sistemleri incelerken ve bunları tanımlarken iki etki meydana gelir: Elektron korelasyonları ve görelilik etkileri (kuantum elektrodinamiği (QED) etkileri). Atomik yapı hesaplamalarında karşılaşılan güçlükler doğrudan bu iki yönün göreceli önemi üzerine olur. Elektron korelasyonu, elektron sayısına bağlıdır ve nötr ve iyonik olmayan sistemlerde hassastır: oysa relativistik düzeltmeler nükleer yük ile ilgilidir ve özellikle yüksek Z 'li atomlar ve iyonlar için önemlidir. Relativistik ve QED etkileri için anahtar parametre atomik birimlerde $\alpha \approx 1/137$ olan αZ 'dir. Yüksek oranda yüklü ağır iyonlar için, görelilik ve QED etkileri elektron korelasyonlarına göre baskındır. Bu sistemler için çekirdek polarizasyon etkilerinin sonlu çekirdek boyutu düzeltmelerinin çalışılması gereklidir (Schiffmann, 2021).

2.4. Hartree-Fock (HF) Yöntemi ve Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF)Yöntemi

Elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşim terimi relativistik olmayan yaklaşıklıkta bile çok elektronlu sistemlerin incelenmesini zorlaştırır. Her elektron çekirdeğin çekim potansiyelinde hareketi bu etkileşim terimi ile bozulur Hartree (1928) çözümünde tutarlı alan yöntemi adı verilen yinelemeli bir yöntem kullandı. Etkin potansiyel altında hareket eden elektron için türettiği Hartree denklemleri, çekirdek ve diğer elektronlardan oluşur. Fock, Hartree denklemlerini düzenleyerek radyal fonksiyonların çarpımı şeklinde küresel simetrik dalga fonksiyonu, Pauli dışarlama ilkesini sağladı. Hartree-Fock potansiyeli ve Hartree-Fock denklemi,

$$V(q_i) = -\frac{Z}{r} + \sum_{\mu}^d V(r_i) - V(q_i) \quad (2.33)$$

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2_{r_i} + V(q_i) \right] U_{\lambda}(q_i) = E U_{\lambda} \quad (2.34)$$

şeklinde ifade edildi. Burada V^d her bir tabakadan gelen simetrik katkıların toplamıdır ve

$$V^d(r_i) = \sum_{\mu}^d V(r_i) = \int^*_{\mu} v(q_j) \frac{1}{r_{ij}} u_{\mu}(q_j) dq_j = \int^*_{\mu} v(r_j) \frac{1}{r_{ij}} u_{\mu}(r_j) dr_j \quad (2.35)$$

şeklindedir. Fock tarafından türetilen takas potansiyeli

$$V^{dt}(q_i) = \sum_{\mu} \frac{dt}{\mu} V(q_i) \quad (2.36)$$

şeklinde tanımlıdır. Takas işlemi yalnızca uzay koordinatları üzerine etki eder. Hartree-Fock denklemlerindeki u_{μ} spin orbitallerin herbiri Schrödinger denkleminde ayrı ayrı gözüktür. Spin orbitaller bir özdeğer denklemi değildir çünkü potansiyel V^d potansiyel operatörleri spin orbitallere bağlıdır. Hartree-Fock integral-diferansiyel denklem sistemini çözmek için V' 'ye karşılık gelen yaklaşık Hartree-Fock potansiyeli seçilir ve yaklaşık spin orbital hesaplanır. Sonra bu spin orbital ile denklemden yaklaşık bir V potansiyeli elde edilir. Bu tekrarlamalı yöntem $V^{(n)}$ ve $V^{(n-1)}$ potansiyeller tutarlı (yada aynı) olana kadar devam eder. Bu yönteme öz-uyumlu alan yaklaşımı denilir (Fischer, 1997).

MCHF yönteminde (Fischer, 1977, 1997), elektron korelasyonları elektronların yer değiştirmesi ile üretilen geniş bir tek elektron baz fonksiyonlarının birleşimi ile elde edilen dalga fonksiyonu açılımı ile hesaplanır. Relativistik etkiler de Breit-Pauli hamiltonyeni çerçevesinde katkı teorisi ile dikkate alınır. Bu yöntemde radyal fonksiyonların değişiminden dolayı kararlılık gereksinimi Hartree-Fock diferensiyel denklem sistemine götürür. Burada dalga fonksiyonu ortonormal konfigürasyon hal fonksiyonlarının lineer birleşimi ile ifade edilir:

$$\Psi(Y LS) = \sum_{i=1}^{3d} c_i \Phi(Y LS), \quad \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1. \quad (2.37)$$

Enerji ifadesi de

$$\begin{aligned} \varepsilon(Y LS) &= \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j \langle \Phi(Y_i LS) | H | \Phi(Y_j LS) \rangle \\ &= \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j H_{ij} = \sum_{i=1}^M c_i^2 H_{ii} + 2 \sum_{1 > j}^M c_i c_j H_{ij} \end{aligned} \quad (2.38)$$

şeklindedir. Burada

$$H_{ij} = \langle \Phi(Y_i LS) | H | \Phi(Y_j LS) \rangle, \quad H_{ij} = H_{ji} \quad (2.39)$$

dir. $H_{ij} = H_{ji}$ olduğu için, toplamı i, j , $H = (H_{ij})$, matrisinin alt kısmı $H = (H_{ij})$, etkileşme matrisi olarak adlandırılır. $c = (c_1, c_2, \dots, c_M)^t$ karışım katsayıları olarak adlandırılan açılım katsayıları kolonudur.

Sistemin enerjisi

$$E = c^t H c \quad (2.40)$$

olur. Etkileşme matris elemanları radial fonksiyona bağlı olduğundan enerji fonksiyoneli hem radial fonksiyonlara hem de c 'ye bağlıdır. Açısal momentum teorisine göre Hamiltonyen operatörünün matris elemanlarını elde edilir:

$$H_{ij} = \sum_{ab} w_{ab}^{ij} I(a, b) + \sum_{abcd,k} v_{abcd,k}^{ij} R^k(ab, cd) \quad (2.41)$$

MCHF problemini çözmek, seküler ve radyal varyasyonel denklemleri aynı anda çözmeyi gerektirir. Radyal fonksiyonların verildiği varsayıldığında, yalnızca seküler olan problemin çözülmesi gerekir ve bu probleme “konfigürasyon etkileşme (CI)” denir. Radyal fonksiyonu optimize ederken yapılan hesaplama “Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) hesaplaması” denir. Bu tekrarlamalı bir yöntemdir (çok konfigürasyonlu-öz uyumlu alan (MC-SCF)). Bu yöntemde, tahmin edilen radyal fonksiyonlar ile gerekli fonksiyonlar hesaplanır. Bu hesaplamanın bir sonucu olarak, normalize edilmiş yeni radyal fonksiyonların tahmin edilenden daha iyi olması beklenir. Bu süreç tahmin ve hesaplamanın sonuçları arasında uyumluluk sağlanana kadar devam eder. Hartree-Fock denklemleri için her bir yörünge için radyal fonksiyonlar önemlidir. Bu süreç özetle üç adımda gerçekleşir:

- a) Başlangıç radial fonksiyonlar belirtilir.
- b) Her bir radial fonksiyon için doğrudan ve takas potansiyeli hesaplanır, köşegen enerji parametresi tayin edilir ve diferensiyel denklem çözülür.
- c) Son radial fonksiyonlar elde edilir ve aynı işlemler tekrarlanır.

2.5. Elektron Korelasyonu

Atom teorisi, her bir elektronun çekirdekteki etkin potansiyelinde ve diğer elektronlar arası etkileşmeden kaynaklanan ortalama itme potansiyelinde hareket ettiği bağımsız parçacık modeline dayanmaktadır. Çoğu atomların ve sistemlerin yapısı bu modele uygundur. Elektronların hareketindeki etkileşme ihmal edilirse, her bir elektronun diğer elektronlar tarafından belirlenen bir alanda bağımsız olarak hareket ettiği kabul edilir. Elektronlar arası korelasyon etkileri denilir ve bu etkilerin dikkate alınmamasından dolayı enerjide kaynaklanan hata da korelasyon enerjisi olarak

tanımlanır. Özellikle varyasyon ve katkı yöntemleri atomlarda ve iyonlarda korelasyon enerjilerini elde etmek için başarılı bir şekilde uygulanır. Varyasyon yöntemi

$$\Phi = \sum_i c_i \Phi_i \quad (2.42)$$

şeklinde Slater determinantlarının lineer birleşiminden türetilir ve Φ deneme fonksiyonu için kullanılabilir. c_i katsayıları da varyasyonel değişkenler olur. Φ_i Slater determinantları elektronlar tarafından doldurulan spin orbitallerin seçimine göre farklı olacaktır. Bu yaklaşıklık konfigürasyon etkileşim (CI) yöntemi olarak bilinir (Bransden ve Joachain, 1983).

Korelasyon etkileri enerji seviyelerini ve seviyeler arasındaki geçiş parametrelerini etkiler ve 3 farklı şekilde incelenir (Fischer, 1997):

- i. ab dış elektronlara ait orbitaller ise yerleşim dış yada valans (VV) korelasyonunu gösterir.
- ii. a öz b de öz- valans korelasyonu olarak bilinir (CV).
- iii. Her bir orbital öze ait ise yerleşim öz-öz (CC) korelasyonu olarak adlandırılır.

2.6. Konfigürasyon Hal Fonksiyonları (CSF)

Konfigürasyon hal fonksiyonu, toplam yörünge açısal momentum L^2 , L_z , ve spin açısal momentum, (S^2 ve S_z), operatörlerinin de ve parite operatörünün Π öz fonksiyonudur. CSF her bir elektronun tek elektron spin orbitallerinin çarpımlarının toplamıdır, ve atom hal fonksiyonlarının (ASF) baz fonksiyonlarıdır. Aynı konfigürasyona ait Slater determinantlarının lineer birleşimi olarak $\Phi(Y L M_L S M_S)$ or $|Y L M_L S M_S\rangle$ gösterilir (Fischer, 1997).

2.7. Breit - Pauli Hamiltonyeni

Breit- Pauli hamiltonyeni relativistik katkıları içerir ve

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \quad (2.43)$$

ifade edilir. Burada H_{NR} relativistik olmayan çok -elektron hamiltonyeni, H_{RS} relativistik kayma ve H_{FS} ince yapı işlemcileridir. H_{RS} , L ve S ile sıra değiştirir.

Toplam açısal momentumla sıra değiştiren ince yapı hamiltonyenidir. Breit-Pauli Hamiltonyeni toplam açısal momentum J (yani J^2 ve J_z) ile sıra değiştirir. Çok konfigürasyon yaklaşımında Breit –Pauli dalga fonksiyonları.

$$\Psi(Y J M_J) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(Y_i L_i J M_J), \quad (2.44)$$

şeklinde lineer birleşimden elde edilir. Burada $\Phi(Y LS J M_J)$ konfigürasyon hal fonksiyonlarının LSJ çiftlenim modeline göre, MCHF modelinde radyal fonksiyonlar relativistik olmayan hesaplamadan elde edilir ve yalnızca açılım katsayıları optimize edilir:

$$Hc = Ec \quad (2.45)$$

Burada H

$$H_{ij} = \langle Y_i L_i S_i J M_J | H_{BP} | Y_i L_i S_i J M_J \rangle \quad (2.46)$$

elemanlı Hamiltonyen matrisidir. Breit-Pauli hamiltonyeninin özdeğerlerini ve öz fonksiyonlarını bulma problem LSJ çiftlenimli CSF arasındaki matris elemanlarının oluşturulmasına indirgenir ve her bir J değeri için matris köşegenleştirilir. Breit-Pauli Hamiltonyeninin relativistik olmayan Hamiltonyene birinci mertebeden katkı (pertürbasyon) olduğuna ve daha yüksek mertebeden katkı teorisinin uygulanması nispeten yanlış sonuca gideceğine dikkat edilmelidir (Bethe ve Salpeter, 1957).

2.8. MCHF Atomik Yapı Paketi ile Hesaplama Adımları

MCHF atomik yapı paketinde, tekli bir LS terimli dalga fonksiyonu için şu adımlar izlenir (Fischer ve ark, 1997, 2007):

- a) Konfigürasyon hal fonksiyonları üretilir (GENCL modülü ile).
- b) Terim için enerji ifadesi elde edilir (radyal fonksiyonlar arasındaki integraller NONH modülü ile enerji ifadesi için çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemine göre MCHF modülünde kullanılmaktadır).
- c) Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock problem çözülür (GENCL'den elde edilen konfigürasyon listesi ve NONH'dan elde edilen radial integraller listesi kullanılarak).
- d) Kütle polarizasyon düzeltmeleri hesaplanır (BREIT ve CI modülü ile). Böylece konfigürasyon etkileşmesi ve relativistik katkılar hesap sonuçlarına eklenir.
- e) Bu verilerden değişik atomik yapı parametreleri (örneğin, seviyeler arasındaki geçiş parametreleri) hesaplanabilir.

Geniş çapta atomik yapı problemlerinin bir özelliği, pek çok etkileşme matris elemanının aynı Slater integralinden oluşmasıdır. Bu nedenle her seferinde her bir

integral bir kez oluşacak şekilde düzenlenmelidir. MCHF deki veri yapısı gerektiğinde düzenlenebilir. Her bir integral matrislerde yerleri belirleyen belirteçler çifti ile katsayılar seti için bir determinant sahip olur.

Bu kodda dalga fonksiyonu açılımında alınacak olan konfigürasyonlar GENCL ile belirlenir ve enerji ifadesi için gerekli veriler NONH ile üretilir. Radyal fonksiyonlar belirlendikten sonra bir CI hesabı ile seçili özdeğerler ve özfonksiyonlar elde edilir. Atomik yapı paketi karışım katsayılarını ve radial fonksiyonları beraber hesaplayarak optimizasyon problemini çözer. Dalga fonksiyonu belirlendikten sonra diğer atomik özellikler uygun operatörlerin beklenen değerlerini alarak belirlenir:

$$\langle \text{özellik} \rangle = \langle \Psi_i | OP | \Psi_i \rangle \quad (2.47)$$

Burada OP belirlenen dalga fonksiyonu ile hesaplanacak özelliği temsil eden operatördür. $\Psi_{i'}$ ve Ψ_i ilk ve son durumu gösteren dalga fonksiyonlarıdır. Bazı durumlarda $\Psi_i = \Psi_{i'}$ dir.

2.8.1. Konfigürasyon hal fonksiyonlarının belirlenmesi (GENCL)

Bu program verilen bir konfigürasyon listesinden konfigürasyon hal fonksiyonlarını ve onların lineer birleşimini belirler. Konfigürasyonlar referans bir set ile yada tabaka ve alt tabular arasında elektron yerleşimini tekli yada çiftli yer değiştirmeleri ile ya da verilen bir uyarılacak alt tabakalar listesi (aktif set) ile verilir (Fischer, 1997).

2.8.2. Relativistik olmayan hamiltonyenin açılmalı integralleri hesaplanması (NONH)

Relativistik olmayan hamiltonyenin açılmalı integrallerini oluşturmak için her bir konfigürasyon arasındaki elektron çifti integrallerini ve bireysel integralleri hesaplar. İntegrallerin listesi enerji ifadesini tek olacak şekilde listeler (Fischer, 1997).

2.8.3. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi ile hesaplama (MCHF)

Bu programda relativistik olmayan radial fonksiyonlar, konfigürasyon karışım katsayıları ve enerji, MCHF yaklaşıklığı ile hesaplanır (yöntem hakkında kısa bir bilgi yukarıda verilmektedir (Fischer, 1997).

2.8.4. Breit- pauli hamiltonyeninin açısai integrallerinin hesabı (BREIT)

Bu programda NONH ya benzer şekilde fakat Breit-Pauli relativistik etkileşmelerden ortaya çıkan ek açısai integralleri de hesaplar. Breit-Pauli LSJ yaklaşımında her bir farklı LS terimi konfigürasyon hal fonksiyonu daha katlı (çoklu) hale gelir. Bu programda relativistik kütle düzeltmesi, Darwin düzeltmesi, spin-spin düzeltmesi, yörünge-yörünge, çekirdek spin-yörünge, spin-diğer yörünge ve çekirdek spin-spin düzeltmesi teker-teker yada beraber hesaplanabilir (Fischer, 1997).

2.8.5. Konfigürasyon etkileşmesinin hesabı (CI)

Etkileşme matrisinin özdeğerlerini ve özvektörlerini hesaplamak için relativistik olmayan yada Breit-Pauli relativistik açısai integralleri kullanılır (Fischer, 1997).

3. HESAPLAMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

3.1. Nötral Skandiyumun (Sc I) Düşük Enerji Seviyeleri

Nötral skandiyum (Sc I) için valans-valans (değerlik-değerlik) ve öz-valans (öz-değerlik) korelasyon etkilerini içeren elde edilen enerji seviyeleri tablolarda listelenmiştir. Hesaplamalar, korelasyon etkilerinin yanı sıra Breit-Pauli relativistik katkılarını içeren çoklu konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) yöntemine dayalı MCHF atomik yapı paketi kullanılarak yapılmıştır (Fischer ve ark, 1997). Hesaplamalarda konfigürasyon setleri valanstan valansa (dış açık tabakalar arasında uyarımlardan oluşan konfigürasyonlar) ve özden valansa (hem özden ve hem de valansdan olan uyarımlardan oluşan konfigürasyonlar) göre seçilmiştir. Tablo 3.1, nötral skandiyumun çift ve tek pariteli seviyeleri için, yapılan hesaplamalarda seçilen konfigürasyon setlerini göstermektedir. Bu konfigürasyon setlerinden en fazla 157 enerji seviyesi elde edildi. Elde edilen çift ve tek pariteli enerji seviye değerleri NIST (Kramida ve ark, 2022) ve Imanbaeva ve Kozlov (2018) tarafından verilen verilerle karşılaştırma için yalnızca düşük enerjili seviyeler Tablo 3.2 ve 3.3'te verilmektedir.

Tablo 3.1. Sc I'in enerji seviyeleri için kullanılan konfigürasyon setleri.

Hesaplama	Çift parite konfigürasyonları	Tek parite konfigürasyonları
1	3d 4s ² , 3d ² 4s	3d 4s 4p
2	3d 4s ² , 3d ² 4s, 3d ³	3d 4s 4p, 3d ² 4p
3	3d 4s ² , 3d ² 4s, 3d ³ , 3d 4s 5s, 3d 4s 4d	3d 4s 4p, 3d ² 4p, 4p ³

Tablo 3.1. (Devamı) Sc I'in enerji seviyeleri için kullanılan konfigürasyon setleri.

Hesaplama	Çift parite konfigürasyonları	Tek parite konfigürasyonları
4	$3d\ 4s^2, 3d^2\ 4s, 3d^3, 3d\ 4s\ 5s, 4s^2\ 4d, 4s^2\ 5s, 3d\ 4s\ 4d, 3d^2\ 5s, 3d\ 4s\ 6s$	$3p^6\ 3d\ 4s\ 4p, 3p^6\ 3d^2\ 4p, 3p^6\ 4p^3, 3p^5\ 3d^4, 3p^5\ 3d^3\ 4s\ 3p^5, 3d^2\ 4s^2, 3p^5\ 3d^2\ 4p^2, 3p^5\ 3d\ 4s, 3p^5\ 4s^2\ 4p^2, 3p^5\ 4p^4,$
5	$3p^6\ 3d\ 4s^2, 3p^6\ 3d^3, 3p^4\ 3d^3\ 4s^2$	$3p^6\ 3d\ 4s\ 4p, 3p^6\ 4s^2\ 4p\ 3p^6\ 3d^2\ 4p, 3p^6\ 3d\ 4s^2\ 5p, 3p^5\ 3d^2\ 4s^2, 3p^5\ 3d\ 4s^2\ 4d^1, 3p^5\ 3d^2\ 4s\ 4d, 3p^5\ 3d^2\ 4s\ 5s,$
6	$3p^6\ 3d\ 4s^2, 3p^6\ 3d^2\ 4s, 3p^6\ 3d^3\ 3p^4\ 3d^5, 3p^2\ 3d^7, 3p\ 3d^9$	

Tablo 3.1'de hesaplamalar için dikkate alınan konfigürasyon setleri verilmektedir. Çift pariteli seviyeler için, 1,2,3 ve 4 numaralı hesaplamalarda seçilen konfigürasyonlar, valans-valans (değerlik-değerlik) korelasyonunun dikkate alacak şekilde seçilmiştir. 5 ve 6 hesaplamalarında seçilen konfigürasyon seti ise, öz-valans (Öz-değerlik) korelasyonunun dikkate alınması içindir. Tek-pariteli seviyelerin hesaplanmasında, sadece hesaplama 1, 2 ve 3'teki konfigürasyon setleri valans-valans korelasyonu; 4 hesaplaması, öz-valans korelasyonu hesaplamaları içindir.

3.1.1. Skandiyumun (Sc I) çift pariteli seviyelerinin enerjileri

Tablo 3.2'de, skandiyum için çift pariteli düşük enerji seviyeleri verilmektedir. Birinci ve ikinci hesaplamada, ilk uyarılmış enerji seviyesi değerleri NIST (Kramida ve ark, 2022) ve Imanbaeva ve Kozlov'un (2018) tarafından verilen değerlerle iyi bir uyum içindedir. $3d4s^2$ ($162,81\text{ cm}^{-1}$ enerjili) seviyesi için NIST ($168,3371\text{ cm}^{-1}$) ve Imanbaeva ve Kozlov'un ($173,9\text{ cm}^{-1}$) yakın olduğu görülmektedir. Benzer durum $3d4s^2$ seviyesindeki ikinci hesaplamada da görülmektedir $160,16\text{ cm}^{-1}$ enerjili bu seviye NIST'e ($168,3371\text{ cm}^{-1}$) yakındır fakat Imanbaeva ve Kozlov'un verdiği diğer çalışma sonucundan ($173,9\text{ cm}^{-1}$) bir miktar farklıdır. Diğer enerji seviyeleri için bu iki çalışmadan elde edilen değerler literatürdeki verilerle uyumu iyi değildir. Bu iki hesaplama valans-valans korelasyonu içindir. Üçüncü hesaplamada birinci uyarılmış seviye $3d4s^2$ enerjili değeri ise literatürdeki verilerden uzaktır. Diğer uyarılmış enerji seviyelerinden $3d^2(^3F)4s^4F$, 4P terimli $3d^2(^1D)4s$ ve $3d^2(^3P)4s$, 2F , 4D , 2P ve 4S

terimli $3d^2(^1G)4s$ ve $3d4s(^3D)4d$ seviyeleri literatür değerlerine yakınken diğer seviyeler uzaktır. Dördüncü hesaplamada birinci uyarılmış seviye $3d4s^2$ ($179,54 \text{ cm}^{-1}$ enerjili) değeri NIST'e ($168,3371 \text{ cm}^{-1}$) yakındır. Literatüre yakın diğer seviyeler ise 4F ve 2F terimli $3d^2(^3F)4s$, 2D terimli $3d^2(^1D)4s$, 4P ve 2P terimli $3d^2(^3P)4s$ ve 2G terimli $3d^2(^1G)4s$ seviyeleridir. Bu hesaplamadaki diğer enerji seviyeleri literatürdeki değerlerle uyumlu değildir. Beşinci hesaplamada da enerji seviye değerleri literatürlere uzak; altıncı hesaplamada ise sadece 4F terimli $3d^2(^3F)4s$ seviyesi NIST ve diğer çalışma değerine yakındır. 5 ve 6 ki hesaplamalar öz-valans korelasyonunu içermektedir.

Tablo 3.2. Sc I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5	6		
3d 4s ²	2D	3/2	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
		5/2	162,81	160,16	133,45	179,54	244,10	206,40	168,3371	173,90
3d ² (³ F) 4s	4F	3/2	22804,18	22344,55	14761,10	11295,13	51142,26	19000,26	11519,9611	11 076,7
		5/2	22858,95	22398,50	14806,55	11338,08	51215,16	19069,67	11557,6556	11 114,7
		7/2	22935,64	22474,05	14870,11	11397,91	51316,93	19166,98	11610,2357	11 168,8
		9/2	23034,20	22571,13	14951,69	11474,27	51446,77	19292,13	11677,3121	11 240,1
3d ² (³ F) 4s	2F	5/2	29605,12	29196,61	23031,19	18752,06	55412,19	25182,05	14926,061	14 464,4
		7/2	29759,12	29348,08	23159,61	18869,03	55615,68	25377,10	15041,902	14 584,8
3d ² (¹ D) 4s	2D	5/2	33759,77	33155,49	24523,19	20321,00	63264,30	30276,74	17012,753	16 963,1
		3/2	33744,14	33139,33	24513,20	20311,62	63279,00	30221,36	17025,127	16 973,1
3d ² (³ P) 4s	4P	1/2	33067,85	32493,39	23424,23	19364,61	63959,21	29925,01	17226,025	17 203,2
		3/2	33098,99	32523,99	23451,12	19388,51	64006,82	29958,32	17255,076	17 229,6
		5/2	33141,14	32565,12	23491,68	19420,49	64087,05	29976,98	17307,069	-
3d ² (¹ G) 4s	2G	9/2	38287,90	37642,61	28418,42	23917,68	69195,97	35112,28	20236,877	-
		7/2	38288,07	37642,65	28418,47	23928,88	69196,59	35112,31	20239,650	-
3d ² (³ P) 4s	2P	1/2	39836,39	38893,80	30835,34	25192,73	681210,52	35707,36	20681,410	-

Tablo 3.2. (Devamı) Sc I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5	6		
		3/2	39903,67	38960,11	30891,13	25236,56	68206,58	35793,42	20719,833	-
3d ² (¹ S)4s	2S	1/2	57453,62	56668,63	42709,30	38460,52	93469,17	55611,77	26936,971	-
3d ³	4F	3/2	-	87108,48	-	51164,08	142844,14	75084,62	33767,534	-
		5/2	-	87162,92	-	51182,98	142914,27	75161,38	33798,633	-
		7/2	-	87238,51	-	51209,05	143010,00	75267,60	33846,568	-
		9/2	-	87334,62	-	51241,92	143129,14	75402,08	33906,361	-
3d4s(³ D)5s	4D	1/2	-	-	44400,16	66712,52	-	-	34390,253	-
		3/2	-	-	44421,28	66724,17	-	-	34422,829	-
		5/2	-	-	44456,60	66743,77	-	-	34479,990	-
		7/2	-	-	44506,31	66771,59	-	-	34567,180	-
3d4s(³ D)5s	2D	3/2	-	-	-	69602,09	-	-	35671,033	-
		5/2	-	-	-	69634,18	-	-	35745,635	-
3d ³	2D	3/2	-	101890,16	-	59839,91	161582,17	89006,21	36276,607	-
		5/2	-	101963,43	-	59892,00	161685,69	89110,44	36331/237	-
3d ³	4P	1/2	-	97256,72	-	57558,48	155639,70	85108,94	36492,628	-
		3/2	-	97286,36	-	57570,13	155682,30	85149,47	36515,732	-

Tablo 3.2. (Devamı) Sc I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5	6		
3d ³	2G	5/2	-	-	-	57590,49	155762,72	85235,72	36572,741	-
		7/2	-	97297,66	-	57537,79	155820,66	86065,37	36977,491	-
		9/2	-	-	-	57565,97	155929,48	86185,37	37054,479	-
3d ³	2P	1/2	-	101110,08	-	60008,81	160125,97	88244,80	37085,800	-
		3/2	-	101152,67	-	60044,96	160196,34	88287,59	37148,196	-
3d4s(¹ D)5s	2D	3/2	-	-	58829,48	74164,39	-	-	37780,858	-
		5/2	-	-	58925,75	74146,80	-	-	37855,603	-
3d4s(³ D)4d	2F	5/2	-	-	46870,03	77905,20	-	-	38871,628	-
		7/2	-	-	46887,36	77916,79	-	-	38959,131	-
3d ³	2H	9/2	-	-	71712,02	59612,85	1600610,52	90580,09	39164,092	-
		11/2	-	-	71768,45	59635,74	160145,27	90674,91	39225,31	-
3d4s(³ D)4d	4D	1/2	-	-	46667,10	75889,77	-	-	39701,428	-
		3/2	-	-	46686,91	75921,87	-	-	39721,755	-
		5/2	-	-	46719,07	75973,90	-	-	39754,983	-
		7/2	-	-	46761,29	76043,32	-	-	39799,959	-
3d4s(³ D)4d	4G	5/2	-	-	46093,00	76964,23	-	-	39861,348	-

Tablo 3.2. (Devamı) Sc I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5	6		
		7/2	-	-	46125,30	77038,73	-	-	39902,698	-
		9/2	-	-	46166,77	77133,75	-	-	39957,75	-
		11/2	-	-	46217,34	77247,84	-	-	40028,31	-
3d4s(³ D)4d	2P	3/2	-	-	47816,52	80478,23	-	-	40063,875	-
		1/2	-	-	47810,25	80463,17	-	-	40070,288	-
3d4s(³ D)4d	2D	3/2	-	-	50407,87	135115,08	-	-	40257,516	-
		5/2	-	-	50464,93	135115,75	-	-	40334,288	-
3d4s(³ D)4d	4S	3/2	-	-	47125,88	79798,66	-	-	40282,159	-
3d4s(³ D)4d	2G	7/2	-	-	612410,58	137810,92	-	-	40418,538	-
		9/2	-	-	61225,80	137810,64	-	-	40562,044	-
3d4s(³ D)4d	4F	3/2	-	-	56223,15	124461,84	-	-	40521,261	-
		5/2	-	-	56246,24	124486,70	-	-	40554,960	-
		7/2	-	-	56278,35	124521,18	-	-	40603,933	-
		9/2	-	-	56319,20	124565,00	-	-	40670,822	-
3d ³	2F	5/2	-	110825,92	-	65684,06	172872,39	99865/24	40802,738	-
		7/2	-	110789,47	-	65669,08	172803,69	99810,94	40825,755	-

Tablo 3.2. (Devamı) Sc I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5	6		
3d4s(³ D)4d	4P	1/2	-	-	58526,84	131683,55	-	-	41446,839	-
		3/2	-	-	58540,70	131698,89	-	-	41474,854	-
		5/2	-	-	58562,10	131720,72	-	-	41501,582	-
3d(2)3F5s	4F	3/2	-	-	-	90559,12	-	-	41921,904	-
		5/2	-	-	-	90580,59	-	-	41960,949	-
		7/2	-	-	-	90610,47	-	-	420110,57	-
		9/2	-	-	-	90648,59	-	-	42085,132	-
3d4s(¹ D)4d	2F	5/2	-	-	61518,48	136129,91	-	-	42149,641	-
		7/2	-	-	61572,26	136194,88	-	-	42198,825	-
3d4s(¹ D)4d	2D	5/2	-	-	-	85093,35	-	-	42441,509	-
		3/2	-	-	-	84986,70	-	-	42466,369	-
3d4s(³ D)4d	2S	1/2	-	-	67112,46	152260,70	-	-	42877,58	-
3d ³	2D	5/2	-	124148,62	-	79268,34	189878,06	111438,62	42917,84	-
		3/2	-	124192,06	-	79241,57	189941,56	111502,81	42937,53	-
3d4s(¹ D)4d	2G	9/2	-	-	51268,43	86178,22	-	-	42942,49	-
		7/2	-	-	51161,54	85984,25	-	-	42969,76	-

Tablo 3.2. (Devamı) Sc I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5	6		
3d4s(¹ D)4d	2P	1/2	-	-	63829,84	143401,27	-	-	43429,62	-
		3/2	-	-	63855,51	143428,44	-	-	43435,390	-
4s ² 4d	2D	3/2	-	-	-	101782,81	-	-	43597,133	-
		5/2	-	-	-	101873,92	-	-	43658,502	-
3d4s(³ D),6s	4D	1/2	-	-	-	162397,83	-	-	43809,72	-
		3/2	-	-	-	162409,02	-	-	43814,472	-
		5/2	-	-	-	162428,00	-	-	43898,27	-
		7/2	-	-	-	162455,33	-	-	43988,16	-
3d4s(¹ D)4d	2S	1/2				89095,43	-	-	45514,98	-

Skandiyumun çift pariteli seviye enerjilerinin belirlenmesi için yapılan bu hesaplamalardan literatürle daha fazla uyumlu olan dördüncü hesaplama verileri için bir yüzde hata hesabı da yapıldı

$$\left(\frac{(\text{Elde edilen değeri} - \text{literatür değeri})}{\text{literatür değeri}} \right) \times 100 \quad (3.1)$$

Hata yüzdesinin hesaplanmasından, NIST verilerine yakın 17 enerji seviyesi değeri elde edildiğini ancak diğer İmanbaeva ve Kozlov'un verilerine göre 12 enerji seviye değerlerin olduğu görülebilir. Örneğin $3d4s^2 \ ^2D$ seviyesi için hata yüzdesi ($J=3/2$) için %0 ve ($J=5/2$) için %6,6'dır. $3d^2(^3P)4s$ seviyesi için ($J=3/2$) %12,4, ($J=3/2$) %12,3 ve ($J=5/2$) %12,2'ye sahiptir. ($J=9/2$) için $3d^2(^1G)4s$ seviyesi %18,1 ve ($J=7/2$) için %18,2'dir. $3d^2(^3F)4s$ en düşük hata yüzdesine sahiptir: ($J=3/2$) için %1,9, ($J=5/2$) için %1,8, ($J=7/2$) için %1,8 ve ($J=9/2$) için %1,7.

3.1.2. Sandiyumun (Sc I) tek pariteli seviyelerinin enerjileri

Tablo 3.3, nötral skandiyum için tek pariteli düşük enerji seviyelerini içermektedir. Birinci ve ikinci hesaplamalarda elde edilen değerlerin NIST verileri (Kramida ve ark, 2022) ve İmanbaeva ve Kozlov'un (2018) verileri ile uyumlu değildir. Üçüncü hesaplamada ise için 4F terimli birinci uyarılmış seviye olan $3d4s(^3D)4p$ için diğer çalışma sonuçları ile uyumlu gözükmemektedir. Ayrıca literatürlere yakın olan diğer seviyeler ise 4D terimli $3d4s(^3D)4p \ ^2D$, 2F ve 2P terimli $3d4s(^1D)4p$, 2F terimli $3d4s(^3D)4p$, 4G ve 4F terimli $3d^2(^3F)4p$, 2S , 4D , 4S , 4P terimli $3d^2(^3P)4p$, 2P terimli $3d^2(^1D)4p$, ve 2H , 2G terimli $3d^2(^1G)4p$ dir. Bu hesaplamalar valans-valans korelasyonunun dikkate alındığı hesaplamalardır. Dördüncü hesaplamada, sonuç değerleri NIST ve diğer çalışmalardan ve öz-valans korelasyonunun bir kısmından uzaktır. Öz-valans korelasyonunun dikkate alındığı beşinci hesaplama ait sonuçlar literatür sonuçlarından bir miktar uzaktır.

Tablo 3.3. Sc I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5		
3d 4s(³ D) 4p	4F	3/2	325566,6252	325566,9983	10914,96143	760130,4327	52737,21758	15672,5595	15799,3
		5/2	325566,0985	325566,4716	10970,88366	760302,4396	52791,17112	15756,5295	15874,7
		7/2	-	-	11048,9399	760552,0003	52866,83732	15881,7082	16030,3
		9/2	325832,7825	325832,4972	11148,63426	760873,7287	52964,39176	16026,5528	16178,7
3d 4s(³ D) 4p	4D	1/2	325566,6032	325566,9764	16188,59013	759993,7129	53068,91454	16009,7432	15983,5
		3/2	325566,3838	325566,7569	16210,10087	760118,7895	53102,45471	16021,7788	16004,1
		5/2	325644,2755	325644,8461	16247,06266	760323,36	53159,19558	16141,0012	16116,4
		7/2	325832,7606	325832,4753	16301,57366	760586,708	53240,67348	16210,814	16191,7
3d 4s(¹ D) 4p	2D	5/2	325833,0020	-	12605,53785	786537,8205	82774,82286	16022,7219	16014
		3/2	325755,3079	325754,825	12597,03319	759729,7679	82717,96787	16096,8834	16070,7
3d 4s(³ D) 4p	4P	1/2	325644,5608	-	-	777209,8938	55328,67742	18504,058	-
		3/2	325644,2316	-	-	777276,6691	55324,5491	18515,665	-
		5/2	-	-	-	777313,8679	55442,53447	18571,386	-
4s ² 4p	2P	1/2	-	-	1562,367903	882034,5556	-	18711,029	-
		3/2	-	-	-	792615,1908	-	18855,734	-

Tablo 3.3. (Devamı) Sc I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5		
3d 4s(¹ D) 4p	2F	5/2	325754,8470	325754,3641	23284,77434	785090,0998	60549,53116	21032,732	-
		7/2	325644,1877	325644,7583	23437,40384	785248,5914	53159,19558	21085,829	-
3d 4s(¹ D) 4p	2P	1/2	325644,3852	325644,9558	29104,48099	782356,9732	-	24656,712	-
		3/2	-	-	29031,22682	783121,8743	-	24656,866	-
3d 4s(³ D) 4p	2D	3/2	-	-	12597,03319	-	77752,57205	24866,172	-
		5/2	-	-	12605,53785	-	77808,35601	25014,190	-
3d 4s(³ D) 4p	2F	5/2	325644,6486	-	23284,77434	798408,7843	65654,13558	25584,627	-
		7/2	325754,5177	-	23437,40384	798348,7206	65831,80059	25724,658	-
3d ² (³ F) 4p	4G	5/2	-	325456,0537	33138,56098	730243,9579	85414,25336	29022,864	-
		7/2	-	325643,7268	33204,3508	730394,6341	85488,16595	29096,178	-
		9/2	-	325722,1891	33289,41931	730586,9841	85583,16571	29189,842	-
		11/2	-	-	33393,97281	730819,9569	85699,2175	29303,485	-
3d 4s(³ D) 4p	2P	1/2	-	-	-	809916,4468	-	30573,163	-
		3/2	325833,0898	-	-	810091,9587	-	30706,696	-
3d ² (³ F) 4p	4F	3/2	-	-	41137,95286	753456,604	86255,04891	31172,621	-

Tablo 3.3. (Devamı) Sc I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5		
3d ² (³ F) 4p	4D	5/2	-	-	41160,30858	753510,8384	86312,30775	31215,780	-
		7/2	-	-	41211,31237	753578,8296	86392,57634	31275,400	-
		9/2	-	-	41267,8228	753633,7115	86495,85249	31350,789	-
		1/2	-	325534,2965	46570,60656	766118,8607	87544,90788	32637,409	-
		3/2	-	325534,4721	46577,37955	766110,0817	87586,11431	32659,285	-
		5/2	-	325722,2769	46586,02687	766097,8109	87655,25552	32696,808	-
		7/2	-	325827,7127	46591,55545	766087,1312	87752,78143	32751,474	-
3d ² (³ F) 4p	2G	7/2	-	325534,3843	60535,8469	753022,2893	89044,36547	33055,957	-
		9/2	-	325826,8128	60546,5068	753181,9134	89197,20127	33151,185	-
3d ² (³ F) 4p	2F	5/2	-	-	54270,32727	742810,2755	79922,72988	33153,779	-
		7/2	-	-	-	741622,5229	79973,20474	33278,370	-
3d ² (³ F) 4p	2D	3/2	-	325456,2732	68393,62473	759931,4171	-	33614,869	-
		5/2	-	-	68467,15763	758788,6679	-	33707,034	-
3d ² (³ P) 4p	2S	1/2	-	325718,3483	41073,66863	749043,8242	-	35346,32	-
3d ² (¹ D) 4p	2F	5/2	-	325828,832	54270,32727	769878,6913	83628,11752	36666,416	-

Tablo 3.3. (Devamı) Sc I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5		
		7/2	-	-	54353,17469	769959,1333	83695,27687	36730,110	-
3d ² (³ P) 4p	4D	1/2	-	-	43206,00872	754319,3295	96167,47707	36764,195	-
		3/2	-	325648,4674	43244,22809	754402,2076	96194,67441	36793,645	-
		5/2	-	325726,82	43305,99933	754539,5595	96231,93029	36860,209	-
		7/2	-	325718,2166	43388,27831	754731,7932	96264,60354	36959,027	-
3d ² (¹ D) 4p	2D	3/2	-	-	-	776883,4642	65629,51488	36933,899	-
		5/2	-	-	-	777430,7142	65775,04655	37039,559	-
3d ² (¹ D) 4p	2P	3/2	-	325829,3148	47060,34746	775720,1919	-	37086,020	-
		1/2	-	-	-	775944,8948	-	37125,419	-
3d ² (³ P) 4p	4S	3/2	-	-	43208,99138	763925,6558	-	37486,929	-
3d ² (³ P) 4p	4P	1/2	-	325648,9064	46264,11191	762241,7954	-	37877,776	-
		3/2	-	325640,303	46301,12198	762381,219	-	37908,484	-
		5/2	-	325718,2385	46365,93515	762519,3369	-	37964,868	-
3d ² (¹ G) 4p	2H	9/2	-	325639,2275	48288,83683	763885,786	100323,1265	39153,14	-
		11/2	-	325717,7557	48441,74725	763972,066	-	39248,91	-

Tablo 3.3. (Devamı) Sc I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans(VV) ve öz-valans(CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST	Diğer araştırma (Imanbaeva ve Kozlov)
			1	2	3	4	5		
3d ² (¹ G) 4p	2G	7/2	-	-	43411,77531	777824,3579	98881,12304	39392,80	-
		9/2	-	-	43445,50423	777937,866	98886,12487	39423,36	-
3d ² (³ P) 4p	2D	3/2	-	-	56526,58953	792367,0041	-	41153,414	-
		5/2	-	-	56514,15627	792414,1561	-	41162,506	-
3d ² (¹ G) 4p	2F	5/2	-	-	71866,54006	792216,5649	106600,9235	43830,118	-
		7/2	-	-	71815,28607	792328,1768	106586,6752	43860,111	-
3d ² (³ P) 4p	2P	1/2	-	-	62725,74869	795581,2198	-	44105,430	-
		3/2	-	-	62710,572	795574,0298	-	44189,284	-

Skandiyumun tek pariteli seviyeleri için elde edilen sonuçlara göre nispeten literatürle uyumlu olan üçüncü hesaplamadan elde edilen verilerle denklem (3.1) göre yapılmıştır. Buna göre NIST'e yakın 28 enerji seviyesi değeri elde edildi, Imanbaeva ve Kozlov'un verilerine göre sadece 10 enerji seviyesi değeri ona yakındır. Örneğin Tablo 3.3'te en düşük hata yüzdesi 4D terimli $3d4s(^3D)4p$ seviyesidir: ($J=3/2$) için %1,1, ($J=3/2$) için %1,1, ($J=5/2$) için %0,6, ve ($J=7/2$) için %1,2 dir. 2F terimli $3d4s(^1D)4p$ seviye de küçük hata yüzdeleridir: ($J=5/2$) için %10,7 ve ($J=7/2$) için %11,1. 4G terimli $3d^2(^3F)4p$ seviyesinde hata yüzdesi ($J=5/2$) için %14, ($J=7/2$) için %14, ($J=9/2$) için %14, ve ($J=11/2$) için % 13,9 şeklindedir. 2F terimli $3d4s(^3D)4p$ seviyesinin hata yüzdesi ($J=5/2$) için %8,9 ve ($J=7/2$) için %8,8. 2G terimli $3d^2(^1G)4p$ seviyesi için ise hata yüzdesi ($J=7/2$) için %10 ve ($J=9/2$) için %10 dur.

3.2. Nötral İtiryumun (Y I) Düşük Enerji Seviyeleri

İtiryum için yapılan hesaplamalarda skandiyumda yapıldığı gibi seçilen konfigürasyon setleri valan-valans ve öz-valans korelasyonlarını dikkate alacak şekilde seçilmiştir. Seçilen konfigürasyon setleri Tablo 3.4 de verilmektedir. Çift pariteli seviyeler için seçilen ve tabloda 1, 2 ve 3 ile gösterilen konfigürasyon setleri valans-valans korelasyonuna göre 4 ve 5 ile gösterilenler ise öz-valans korelasyonuna göre dir. Tek pariteli seviyelerin hesaplanması için seçilen konfigürasyon setleri ise valans-valans korelasyonu için 1, 2, 3 ve 4 ile öz-valans korelasyonu için seçilen konfigürasyon setleri ise 5 ve 6 ile gösterilmektedir. Hesaplamalarda en fazla 171 seviye elde edilmiş, ancak Tablo 3.5 ve Tablo 3.6'da sadece düşük enerji seviyeleri verilmektedir. Değişik konfigürasyon setlerine göre elde edilen değerler Kramida ve ark (2022) tarafından değerlendirilen NIST verileriyle karşılaştırılmaktadır.

Tablo 3.4. Y I'in enerji seviyeleri için kullanılan konfigürasyon setleri.

Hesaplama	Çift parite konfigürasyonları	Tek parite konfigürasyonları
1	$4d\ 5s^2, 4d^2\ 5s$	$5s^2\ 5p, 4d\ 5s\ 5p\ 4d^2\ 5p\ 5s^2\ 6p, 4d\ 5s\ 6p,$
2	$4d\ 5s^2, 4d^2\ 5s\ 4d^3, 5s^2\ 6s$	$5s^2\ 5p\ 4d^2\ 4f, 4d^2\ 5p\ 4d^2\ 6p$

Tablo 3.4. (Devamı) Y I'in enerji seviyeleri için kullanılan konfigürasyon setleri.

Hesaplama	Çift parite konfigürasyonları	Tek parite konfigürasyonları
3	$4d\ 5s^2, 4d^2\ 5s\ 4d^3, 5s^2\ 6s, 5p^2\ 5s, 4d\ 5s\ 5d, 4d^2\ 6s\ 5p^2\ 4d\ 5s^2\ 7s, 4d\ 5s\ 7s$	$5s^2\ 5p\ 4d\ 5s\ 5p\ 4d^2\ 5p, 4d\ 5s\ 6p$
4	$4p^6\ 4d\ 5s^2, 4p^6\ 4d^2\ 5s, 4p^5\ 4d\ 4f\ 5s^2, 4p^5\ 4d^2\ 4f\ 5s$	$5s^2\ 5p, 4d\ 5s\ 5p, 4d^2\ 4f, 4d^2\ 5p, 4d^2\ 5f, 4d^2\ 6p$
5	$4p^6\ 4d\ 5s^2, 4p^6\ 4d^2\ 5s\ 4p^5\ 4d^2\ 4f\ 5s$	$4p^6\ 5s^2\ 5p, 4p^6\ 4d^2\ 5p, 4p^6\ 4d\ 5s\ 5p, 4p^6\ 5p^3, 4p^5\ 4d\ 5s\ 5p^2, 4p^5\ 4d^2\ 5p^2,$
6		$4p^6\ 5s^2\ 5p, 4p^6\ 4d^2\ 5p, 4p^6\ 5p^3, 4p^6\ 4d\ 5s\ 5p, 4p^5\ 4d^2\ 5p^2, 4p^5\ 4d\ 5s\ 5p^2, 4p^5\ 5s^2\ 5p^2, 4p^6\ 4d\ 4f\ 5s, 4p^6\ 4f\ 5s^2, 4p^6\ 4d^2\ 4f,$

3.3.1. İtiryumun (Y I) çift pariteli seviyelerinin enerjileri

Nötral itiryumun çift pariteli seviyelerinin valans-valans ve öz-valans korelasyonuna göre elde edilen seviye enerji değerleri Tablo 3.5 de verilmektedir. Birinci hesaplamada 2D terimli $4d5s^2$ ilk uyarılmış seviyenin enerji değeri ($522,13\text{ cm}^{-1}$ enerjili) NIST deki değerle ($530,351\text{ cm}^{-1}$) uyumludur. Diğer seviyeler için NIST verileriyle uyumlu seviyeler 4F ve 2F terimli $4d^2(^3F)5s$, 4P terimli $4d^2(^3P)5s$, 2D terimli $4d^2(^1D)5s$ seviye ve 2G terimli $4d^2(^1G)5s$ şeklindedir. İkinci hesaplamada, ilk uyarılmış seviye ise NIST deki değerden ($530,351\text{ cm}^{-1}$) farklıdır. NIST deki verilere yakın olan bu hesaplamadaki seviyeler ise 4F ve 2F terimli $4d^2(^3F)5s$, 4P ve 2P terimli $4d^2(^3P)5s$, 2D terimli $4d^2(^1D)5s$, 2G terimli $4d^2(^1G)5s$, 2S terimli $4d^2(^1S)5s$, 4F , 4P ve 2D terimli $4d^3$ ve 2S terimli $5s^2\ 6s$ dir. Üçüncü hesaplamada ilk uyarılmış seviye NIST değerine yakındır. NIST deki verilere yakın diğer seviyeler 4F ve 2F terimli $4d^2(^3F)5s$, 4P ve 2P terimli $4d^2(^3P)5s$, 2D terimli $4d^2(^1D)5s$, 2G terimli $4d^2(^1D)5s$, 4F , 4P ve 2D terimli $4d^2(^3P)5s$, $4d^2(^1S)5s$ ve $4d^3$, 4F terimli $5p^2(^3P)5s$ ve $5p^2(^3P)4d$, 4D ve 2P terimli

$5s^27s$ ve $5p^2(^3P)4d$ dir.1, 2 ve 3 ile gösterilen hesaplamalar valans-valans korelasyonunu içermektedir.

Dördüncü hesaplamada ilk uyarılmış seviyenin enerji değeri NIST'deki değerden bir miktar farklıdır. Sonra gelen seviyeler ise NIST verileri ile daha uyumludur: 4F ve 2F terimli $4d^2(^3F)5s$, 4P ve 2P terimli $4d^2(^3P)5s$, 2F terimli $4d^2(^3F)5s$, 2D terimli $4d^2(^1D)5s$ ve 2G terimli $4d^2(^1G)5s$. Beşinci hesaplamada ise ilk uyarılmış seviye değeri NIST verisi ile uyumludur. NIST deki verilere yakın diğer seviyeler ise $4F$ ve $2F$ terimli $4d^2(^3F)5s$, $4P$ ve $2P$ terimli $4d^2(^3P)5s$ seviyeleridir. Dördüncü ve beşinci hesaplamalar öz-valans korelasyonunu içermektedir.

Tablo 3.5. Y I' deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	
4d 5s ²	2D	3/2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
		5/2	522,13	402,87	596,84	642,55	519,50	530,351
4d ² (³ F)5s	4F	3/2	9476,46	6689,48	13370,92	6205,17	748,40	10937,39
		5/2	9661,32	6838,12	13532,63	6432,30	941,82	11078,614
		7/2	9919,50	7045,64	13761,67	6750,94	1207,49	11277,928
		9/2	10248,44	7310,60	14055,23	7158,02	1561,29	11532,096
4d ² (³ P)5s	4P	1/2	17121,30	13224,12	18326,47	15003,54	8907,21	15221,633
		3/2	17234,94	13316,11	18444,07	15142,99	9033,78	15328,865
		5/2	17387,62	13445,11	18569,92	15328,67	9403,41	15476,533
4d ² (³ F)5s	2F	5/2	18920,79	15683,49	17225,45	14517,40	9945,77	15326,741
		7/2	19463,02	16129,50	17704,58	15162,48	10691,66	15864,481
4d ² (¹ D)5s	2D	3/2	20240,01	16183,76	19371,44	18032,21	12906,59	15994,045
		5/2	20344,59	16318,43	19499,28	18146,14	13032,74	16158,865
4d ² (¹ G)5s	2G	9/2	22718,03	17827,09	23828,13	19906,72	13894,38	18499,315
		7/2	22726,72	17829,47	23801,14	19914,09	13903,45	18512,402
4d ² (³ P)5s	2P	1/2	26486,90	18833,80	23312,26	23186,79	18196,14	19237,608

Tablo 3.5. (Devamı) Y I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	
		3/2	26726,14	19030,98	23484,96	23490,24	18463,67	19406,146
4d ² (¹ S)5s	2S	1/2	37083,95	30608,66	29550,31	40250,81	32288,40	23465,093
4d ³	4F	3/2	-	30140,06	39022,59	-	-	29271,979
		5/2	-	30293,32	39258,32	-	-	29420,385
		7/2	-	30501,07	39567,41	-	-	29613,726
		9/2	-	30757,33	39934,49	-	-	29842,64
5s ² 6s	2S	1/2	-	57381,92	72026,01	-	-	31671,539
4d ³	4P	1/2	-	36680,04	44695,81	-	-	31977,584
		3/2	-	36758,66	44797,86	-	-	32091,016
		5/2	-	36915,35	44895,30	-	-	32366,409
4d ³	2D	3/2	-	40625,59	46084,33	-	-	32431,765
		5/2	-	40909,68	46449,92	-	-	32821,391
4d 5s(³ D) 6s	4D	1/2	-	-	67010,16	-	-	33148,432
		3/2	-	-	67113,61	-	-	33238,011
		5/2	-	-	67294,31	-	-	33415,566
		7/2	-	-	67565,84	-	-	33752,743

Tablo 3.5. (Devamı) Y I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	
4d ³	2P	1/2	-	43081,92	55805,98	-	-	33613,25
		3/2	-	43311,02	55998,99	-	-	33842,417
5p ² (³ P)5s	4P	1/2	-	-	33252,74	-	-	33911,692
		3/2	-	-	33526,52	-	-	34155,912
		5/2	-	-	33964,44	-	-	34521,221
4d 5s(³ D) 6s	2D	3/2	-	-	73233,41	-	-	36420,611
		5/2	-	-	73211,27	-	-	36431,165
4d 5s(¹ D) 6s	2D	3/2	-	-	74259,52	-	-	36860,385
		5/2	-	-	-	-	-	37074,190
4d ³	2D	5/2	-	54505,79	60840,79	-	-	37524,441
		3/2	-	54598,72	60985,33	-	-	37549,522
4d ³	2F	5/2	-	46224,84	54117,55	-	-	38156,627
		7/2	-	46143,55	54080,68	-	-	38411,771
4d 5s (³ D)5d	4D	1/2	-	-	88877,59	-	-	38469,954
		3/2	-	-	89047,63	-	-	38543,685
		5/2	-	-	89309,47	-	-	38675,424

Tablo 3.5. (Devamı) Y I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST		
			1	2	3	4	5			
4d 5s (^3D)5d	4G	7/2	-	-	89621,48	-	-	38865,618		
		5/2	-	-	89918,37	-	-	38635,481		
		7/2	-	-	90280,58	-	-	38761,956		
		9/2	-	-	90741,46	-	-	38949,421		
4d 5s (^3D)5d	4S	11/2	-	-	91289,82	-	-	39222,861		
		3/2	-	-	94087,63	-	-	39001,465		
		4d 5s (^3D)5d	2P	1/2	-	-	97346,51	-	-	39087,277
				3/2	-	-	97465,79	-	-	39209,422
4d 5s (^3D)5d	2F	5/2	-	-	92400,11	-	-	39443/291		
		7/2	-	-	92535,87	-	-	39963,658		
		4d 5s (^3D)5d	4F	3/2	-	-	108919,95	-	-	39446,322
				5/2	-	-	109191,79	-	-	39565,085
7/2	-			-	109571,52	-	-	39757,942		
4d 5s (^3D)5d	4P	9/2	-	-	110054,16	-	-	39900,541		
		1/2	-	-	118139,70	-	-	40287,757		
		3/2	-	-	118311,91	-	-	40455,071		

Tablo 3.5. (Devamı) Y I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	
4d 5s (³ D)5d	2D	5/2	-	-	118526,15	-	-	40517,03
		3/2	-	-	121641,92	-	-	41422,889
4d 5s (¹ D)5d	2D	5/2	-	-	121776,15	-	-	41503,538
		3/2	-	-	102468,12	-	-	41660,521
4d ² (³ F) 6s	4F	5/2	-	-	103031,91	-	-	41669,657
		3/2	-	-	74641,85	-	-	42106,775
		5/2	-	-	74826,96	-	-	42253,630
		7/2	-	-	75054,84	-	-	42487,974
4d 5s (¹ D)5d	2P	9/2	-	-	75390,94	-	-	42807,326
		1/2	-	-	129097,08	-	-	42655,628
		3/2	-	-	129438,27	-	-	42685,87
5p ² (³ P) 4d	4F	3/2	-	-	47564,43	-	-	43095,78
		5/2	-	-	47830,39	-	-	43337,601
		7/2	-	-	48214,87	-	-	43704,511
		9/2	-	-	48720,49	-	-	44190,205
5s ² 7s	2S	1/2	-	-	42704,42	-	-	43643,601

Tablo 3.5. (Devamı) Y I'deki çift pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu			CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	
4d 5s (¹ D)5d	2F	5/2	-	-	119476,56	-	-	43879,744
		7/2	-	-	120183,51	-	-	44186,256
4d 5s (³ D)7s	4D	5/2	-	-	35381,36	-	-	44654,8
		7/2	-	-	35658,50	-	-	44922
5p ² (³ P) 4d	4D	1/2	-	-	48863,07	-	-	44660,036
		3/2	-	-	48890,30	-	-	44748,195
		5/2	-	-	49333,82	-	-	45008,46
		7/2	-	-	4958520	-	-	45203,695
5p ² (³ P) 4d	2P	1/2	-	-	40989,50	-	-	45947,505
		3/2	-	-	41146,31	-	-	45994,176

Denklem (3.1)'e göre yüzde hata hesaplamalarını yapmak için üçüncü hesaplamadan elde edilen seviye enerji değerleri kullanıldı çünkü bu hesaplama sonuçlarının çoğu (38 enerji seviyesi) NIST verilerine daha yakındır. Örneğin 4P terimli $5p^2(^3P)5s$ seviyesi en küçük yüzde hataya sahiptir: ($J=1/2$) için %1,9, ($J=3/2$) için %1,8, ve ($J=5/2$) için %6. $4d5s^2$ ($J=5/2$) seviyesi için ise %12 ve ($J=7/2$) için %11 dir. 4F terimli $5p^2(^3P)4d$ seviyesi ($J=3/2$) için %10, ($J=5/2$) için %10, ($J=7/2$) için %10 ve ($J=9/2$) için %10 dur. 2S terimli $5s^27s$ seviyesi için yüzde hata ($J=1/2$) için %2. 4D terimli $5p^2(^3P)4d$ seviyesinin ($J=1/2$) için %9, ($J=3/2$) için %9, ($J=5/2$) için %9, ve ($J=7/2$) için %9 dir. 2P terimli $5p^2(^3P)4d$ seviyesinin yüzde hatası ($J=1/2$) için %10 ve ($J=3/2$) için %10 şeklindedir.

3.3.2. İtiryumun (Y I) tek pariteli seviyelerinin enerjileri

Tablo 3.6'da Y I için hesaplamalardan elde edilen tek pariteli düşük enerji seviyeleri listelenmektedir. Birinci hesaplamada ilk seviye $5s^25p$ ait değer NIST'deki değere yakındır ancak diğer seviyeler NIST'deki verilerle uyumlu değildir. İkinci hesaplamada bu ilk seviyenin yanı sıra sonra gelen bazı seviyelerin enerji değerleri NIST'deki değerlere yakındır: 4D ve 2D terimli $4d^2(^3F)5p$, 2S , 4D , 4S ve 4P terimli $4d^2(^3P)5p$, 2D , 2P , ve 2F terimli $4d^2(^1D)5p$. Üçüncü hesaplamada, ilk seviye ve bazı seviyelerinin enerji değerleri de NIST ile uyumlu gözükmektedir: 4G , 4F , 4D , 2F , ve 2D terimli $4d^2(^3F)5p$, 2S , 4D , 4S ve 4P terimli $4d^2(^3P)5p$, 2D , 2P ve 2F terimli $4d^2(^1D)5p$, 4D terimli $4d5s(^3D)6p$ ve $4d^2(^1G)5p$. Dördüncü hesaplamada yine ilk seviyenin enerji değeri NIST ile uyumludur. 4F , 2D , 4D ve 2F terimli $4d5s(^3D)5p$, 2F ve 2P terimli $4d5s(^1D)5p$, 4G , 4F , 4D , 2F ve 2D terimli $4d^2(^3F)5p$, 2S , 4D , 4S ve 4P terimli $4d^2(^3P)5p$, 2D , 2P ve 2F terimli $4d^2(^1D)5p$, $4d^2(^1G)5p$ ve $4d5s(^3D)6p$ seviyeleri de NIST'deki verilerle uyumlu gözükmektedir. Bu dört hesaplama valans-valans korelasyonunu içermektedir. Öz-valans korelasyonunu içeren beşinci ve altıncı hesap sonuçları ise NIST sonuçları ile uyum içinde değildir.

Tablo 3.6. Y I' deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu			NIST
			1	2	3	4	5	6		
5s ² 5p	2P	1/2	12060,897	13038,461	13059,002	6116,503	150753,087	154774,165	10529,169	
		3/2	12745,133	13573,870	13593,235	6695,133	152516,757	156689,438	11359,757	
4d 5s (³ D) 5p	4F	3/2	46793,760	-	-	14456,498	165969,220	351213,675	14948,994	
		5/2	46964,577	-	-	14641,886	166328,519	351873,482	15245,803	
		7/2	47204,529	-	-	14900,608	166872,731	352881,669	15712,522	
		9/2	47513,660	-	-	15227,698	168171,224	353855,697	16234,382	
4d 5s (³ D) 5p	2D	5/2	52023,301	-	-	17373,994		353429,055	16066,064	
		3/2	52020,052	-	-	17369,168	167611,899	353668,575	16146,138	
4d 5s (³ D) 5p	4D	1/2	54047,321	-	-	19844,655	166629,838	349366,055	16435,907	
		3/2	54032,002	-	-	19911,384	166677,321	349592,117	16597,304	
	4D	5/2	54435,770	-	-	20031,534	166741,680	350004,484	16816,641	
	4D	7/2	54402,673	-	-	20232,770	167926,720	350617,190	17116,156	
4d 5s (³ D) 5p	4P	1/2	54400,017	-	-	21022,556	172276,124	356534,344	18976,366	
		3/2	54419,551	-	-	21018,094	172067,024	356492,933	19027,593	
		5/2	54037,664	-	-	21010,056	171756,677	356628,529	19147,983	
4d 5s (³ D) 5p	2F	5/2	70868,587	-	-	34673,174	179873,535	362159,635	21528,579	

Tablo 3.6. (Devamı) Y I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	6	
4d 5s (¹ D) 5p	2D	7/2	70780,227	-	-	34581,137	179897,738	362434,617	21915,432
		3/2	70190,256	-	-		176520,663	363312,476	24131,250
		5/2	70340,706	-	-		177537,122	364647,658	24746,573
4d 5s (³ D) 5p	2P	3/2	75570,400	-	-	42788,587	184949,214	365215,390	24480,666
		1/2	75369,251	-	-	42674,004	184844,566	364897,482	24698,850
4d 5s (¹ D) 5p	2F	5/2	63212,531	-	-	24620,471	174554,088	365872,017	24518,751
		7/2	63739,798	-	-	25088,991	175683,149	367298,745	24899,632
4d 5s (¹ D) 5p	2P	1/2	69094,176	-	-	31527,011	177901,817	369940,590	27824,647
		3/2	68738,670	-	-	31346,563	177797,046	369910,754	28139,645
4d ² (³ F)5p	4G	5/2	95472,657	-	34083,396	32770,721	188655,601	563158,709	28694,040
		7/2	95668,889	-	34288,540	32965,217	189045,858	563895,147	28988,786
		9/2	95920,978	-	34546,083	33216,095	189618,216	564764,467	29364,111
		11/2	96229,516	-	34853,152	33524,644	190539,045	566370,278	29820,374
4d ² (³ F)5p	4F	3/2	104416,285	106347,467	39559,339	38497,592	190797,993	563428,811	31508,441
		5/2	104490,138	106408,437	39659,212	38600,776	190985,977	563948,255	31680,043
		7/2	104601,939	106492,672	39796,350	38742,287	191273/208	564761,327	31909,164

Tablo 3.6. (Devamı) Y I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	6	
4d ² (³ F)5p	4D	9/2	104742,710	106599,139	39976,928	38918,964	191714,413	565706,614	32188,075
		1/2	110147,501	40824,106	41612,100	41514,431	197221,695	565640,871	33215,444
		3/2	110142,080	40879,655	41665,417	41561,579	193243,800	566045,798	33265,298
		5/2	110132,138	40960,641	41738,921	41648,590	193155,288	566296,800	33357,608
4d ² (³ F)5p	2G	7/2	110113,658	41047,290	41809,022	41788,433	193063,304	565928,857	33614,445
		7/2	125109,222	-	55337,476	51208,061	203022,735	569583,120	33432,092
4d ² (³ F)5p	2F	9/2	125114,138	-	55372,998	51304,818	202777,186	570075,945	33788,956
		5/2	-	-	37435,445	43348,064	194731,320	566859,126	33608,312
4d ² (³ F)5p	2D	7/2	-	-	37775/223	43549,937	194991,668	567162,682	34029,802
		3/2	-	38077,771	38618,799	29764,657	-	565589,744	33906,761
4d ² (³ F)5p	2D	5/2	-	38249,949	38837,767	30054,674	-	-	34247,727
		1/2	103532,700	41135,694	41712,119	40188,737	190970,662	566990,166	34438,228
4d ² (³ P)5p	4D	1/2	104577,752	43336,282	44282,527	42539,055	192828,733	574064,582	35681,338
4d ² (³ P)5p	4D	3/2	104805,589	43422,053	44364,613	42636,080	197383,430	574445,547	35816,407
		5/2	104985,954	43567,675	44511,472	42816,168	197663,763	575060,099	36060,842
		7/2	105138,753	43773,191	44731,630	42949,517	198087,912	575992,503	36361,145

Tablo 3.6. (Devamı) Y I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm⁻¹).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	6	
4d ² (³ P)5p	4S	3/2	114200,678	44618,807	45582,725	43935,120	-	-	361311/267
4d ² (¹ D)5p	2D	3/2	121981,725	46865,770	48363,090	49718,471	203229,700	577150,021	36452,295
		5/2	122107,221	47024,318	48541,270	49799,709	203705,036	578067,604	36750,621
4d ² (³ P)5p	4P	1/2	107648,800	44407,386	44990,920	44398,449	-	-	37039,285
		3/2	107771,706	44431,243	45048,262	44495,075	199661,153	576876,676	37148,377
		5/2	107967,017	44652,825	45283,241	44646,507	199846,174	577267,778	37475,922
5s ² (¹ S)6p	2P	1/2	56494,884	107527,496	-	-	-	-	37 105,723
		3/2	56556,535	109007,460	-	-	-	-	37 283,886
4d ² (¹ D)5p	2P	3/2	112812,037	45789,179	46840,491	48290,889		572912,400	37243,782
4d ² (¹ D)5p	2F	5/2	117873,767	-	51879,294	49743,078	201646,429	573782,223	37279,183
		7/2	118075,794	-	47382,822	45484,284	202517,861	575297,922	37619,829
4d ² (¹ G)5p	2H	9/2	109963,252	-	47759,048	45795,463	200971,877	579837,725	37588,148
		11/2	110461,724	-	-	-	202394,758	581191,701	37967,332
4d 5s (³ D) 6p	4D	1/2	93040,105	-	-	-	-	-	38473,277
		3/2	93070,020	-	-	-	-	-	38627,009
		5/2	93120,148	-	-	-	-	-	38798,054

Tablo 3.6. (Devamı) Y I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	6	
		7/2	93191,016	-	42956,830	41241,609			39167,224
4d ² (¹ G)5p	2G	7/2	106058,858	-	43072,193	41372,324	193907,005	573961,598	38479,017
		9/2	106137,254	-	-	-	194254,689	574445,499	38597,024
4d 5s (³ D) 6p	4F	5/2	94034,590	-	-	-			38699,599
		7/2	94105,415	-	-	-	-	-	38795,241
		9/2	94193,359	-	-	-	-	-	39206,717
4d 5s (³ D) 6p	2F	5/2	99103,146	-	-	-	-	-	38888,592
		7/2	99252,894	-	-	-	-	-	39056,581
4d 5s (³ D) 6p	2D	3/2	94610,142	-	-	-	-	-	39241,468
		5/2	94665,779	-	-	-	-	581655,206	39288,253
4d 5s (³ D) 6p	4P	1/2	96022,529	-	-	-	-	-	39271,423
		3/2	96060,871	-	-	-	-	-	39418,175
		5/2	96127,021	53935,674	56921,418	42512,090		-	39727,351
4d ² (³ P)5p	2D	3/2	135155,843	53963,350	56920,868	58746,272	213012,910	581487,176	40636,545
		5/2	135229,236	-	53570,832	57207,814	213083,447		40672,369
4d ² (¹ G)5p	2F	5/2	129387,426	-	53396,507	57191,695	211438,622	585492,922	42857,855

Tablo 3.6. (Devamı) Y I'deki tek pariteli düşük enerji seviyeleri için valans-valans (VV) ve öz-valans (CV) korelasyonlarına göre elde edilen seviye enerjileri (cm^{-1}).

Seviye	Terim	J	VV korelasyonu				CV korelasyonu		NIST
			1	2	3	4	5	6	
		7/2	129189,306	-			210898,986	584685,401	42995,085

İtiryumun tekli seviye enerjileri için yapılan yüzde hata hesaplamasında diğer hesaplamalara göre daha fazla seviyelerde (53 seviye için) uyumun gözlemlendiği dördüncü hesap sonuçları kullanıldı. Örneğin 2F terimli $4d5s(^1D)5p$ seviyeleri en küçük yüzde hataya sahiptir: ($J=5/2$) için %0,4, ve ($J=7/2$) için %0,7. 2F terimli $4d5s(^3D)5p$ seviyesinin yüzde hata değerleri ($J=3/2$) için %3, ($J=5/2$) için %4, ($J=7/2$) için %5, ve ($J=9/2$) için %6 dır. 2D terimli $4d5s(^3D)5p$ seviyede ise yüzde hata ($J=5/2$) için %8 ve ($J=3/2$) için %7 kadardır. 2P terimli $4d5s(^3D)5p$ seviyede ($J=1/2$) için %10, ($J=3/2$) için %10, ve ($J=5/2$) için %9 yüzde hata vardır. 2P terimli $4d5s(^1D)5p$ seviye ($J=1/2$) için %13 ve ($J=3/2$) için %11 yüzde hataya sahiptir. 4D terimli $4d5s(^3D)6p$ seviyesinde ($J=7/2$) için %5 ve 2G terimli $4d2(^1G)5p$ seviyesinde ($J=7/2$) için %7 yüzde hata vardır. 4P terimli $4d5s(^3D)6p$ seviyesinde ise yüzde hata ($J=5/2$) için %7 dir.

4. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmanın ana amacı, Sc I ve Y I spektrumunun düşük seviyeli enerjileri için MCHF hesaplamasını yapmak ve seviyeler üzerinde elektron korelasyon (valans-valans ve öz-valans) etkilerini incelemektir. Genel olarak her iki atom için de valans-valans (değerlik-değerlik) korelasyonuna göre elde edilen sonuçlar, öz-valans korelasyonuna göre elde edilen sonuçlardan daha iyidir. Bununla birlikte, her iki atom için hesaplama kısıtlamaları nedeniyle öz-valans korelasyonu hesaplaması için konfigürasyon setininin geniş ölçekte seçilememesi bu durumu ortaya çıkarmıştır. Bu konfigürasyonların üç elektronlu CI uzayında yerleşimleri zor olmasa da 3d ve 4s alt tabakalarının enerjileri birbirine çok yakındır ve konfigürasyonların karışımı Sc I için normalden daha güçlüdür (Imanbaeva ve Kozlov, 2018). Bu durumun Y I için 4d ve 5s alt kabukları için de daha belirgin olacağı düşünülmektedir. Ayrıca bu nedenle, geniş çapta üretilen etkileşim integralleri nedeniyle Breit - Pauli Hamiltoniyeni için de tüm etkileşimleri dikkate alınamadı, çoğu hesaplamalarda (özellikle öz-valans) yalnızca spin-yörünge etkileşimleri alınabildi. Bu da hesaplamalarda özellikle itriyum için ortaya çıkan bazı uyumsuzlukların nedeni olabilir. Ayrıca daha alt tabakadan uyarılmaların alındığı konfigürasyon setleri ile çalışmakta hesaplamalara katkı sağlayabilir. Çalışmada MCHF yöntemi çerçevesinde elektron korelasyonların dikkate alınması durumunda bu iki atomun enerji seviyelerini hangi ölçüde düzelttiğinin bir analizi yapıldı. Doğru atomik yapı verileri, çok çeşitli araştırma alanları için temel bir bileşendir. Bu nedenle bu çalışmada sunulan Sc I ve Y I için sunulan enerji seviyesi verileri, gelecekte bazı enerji seviye yapılarına ait parametrelerinin araştırılması için faydalı olabilir.

KAYNAKLAR

- Bethe, H.A. and Salpeter, E.E. (1957). Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms. *Scientific Research An Academic Publisher*. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-12869-5>.
- Bransden, B.H. and Joachain, C.J. (1983). *Physics of atoms and molecules*. John Wiley and Sons, Inc., New York publication.
- Fischer, C.F. (1977). *The Hartree – Fock Metho for Atoms: A Numerical Approach*. A wiley-Interscience Publication.
- Fischer, C.F., Brage, T., and Jonsson, P. (1997). *Computational Atomic Structure: An MCHF Approach*. Institute Of Physics Publishing Bristol And Philadelphia.
- Fischer, C..F. (1991). *The MCHF Atomic-Structure Package*. Elsevier Science Publishers.
- Fischer, C.F., Tachiev, G., Gaigas, G., & Godefroid, M. (2007). An Atomic Structure Package for Large - Scale Calculations. *Computer Physics Communications*, 176:559-579. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2007.01.006>
- Hannaford, P., and Lowe, R.M. (1982). New atomic lifetime results for some Seviyes of neutral yttrium. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 15:65-68. doi:10.1088/0022-3700/15/1/013
- Hartree, D.R. (1928) The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24, 89-110. <http://dx.doi.org/10.1017/S0305004100011919>
- Hu, W. (2016). *Yttrium and scandium in solution-processed oxide electronic materials* [Doctoral Thesis]. Michigan University.
- Imanbaeva, R.T, and Kozlov, M.G. (2018). Configuration interaction and many-body perturbation theory: application to scandium, titanium, and Iodine. *Annalen der Physik*, 531(5):1800253. DOI:10.1002/andp.201800253
- Kaufman, V., and Sugar, J. (1988). Wavelengths and energy Seviye classifications of scandium spectra for all stages of ionization. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 17. <https://doi.org/10.1063/1.555815>.
- Knutson, H.K., Holmqvist, A., & Nilsson, B. (2015). Multi-objective optimization of chromatographic rare earth element separation. *Journal of Chromatography A*. <http://dx.doi.org/10.1016/j.chroma>
- Kramida, A., Ralchenko, Y., Reader, J., & NIST ASD Team. (2022). *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.10), [Online]. Available at: <https://physics.nist.gov/asd>. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>
- Lawler, J.E., Hala, Sneden ,C., Nave, G., Wood ,M.P., & Cowan, J.J. (2019). Transition probabilities of Sc I and Sc II and scandium abundances in the sun, Arcturus, and HD 84937. *The astrophysical journal supplement series*, 241:21 (19pp). <https://doi.org/10.3847/1538-4365/ab08ef>

- Lawler, J.E., and Dakin, J.T. (1989). Absolute transition probabilities in Sc I and Sc II. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol 1457-1466 (8pp). <https://doi.org/10.1364/JOSAB.6.001457>
- Liu ,C., Yu, Q., Wang, X., Yang, Y., & Dai, Z. (2019). Radiative lifetime measurements of Sc I level by time-resolved laser spectroscopy. *Journal of quantitative spectroscopy & radiative transfer*, 229: 1-3. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2019.02.029>
- Pauli, W. (1925) Magazine for physics, 31, 765-783. *Scientific Research An Academic Publisher*. <https://doi.org/10.1007/BF02980631>
- Pehlivan, A., Nilsson, H., and Hartman, H.(2015). Laboratory oscillator strengths of Sc I in the near-infrarednregion for astrophysical applications. *Astronomy & Astrophysics*, 582, A98. DOI: 10.1051/0004-6361/201526813
- Pehlivan, A. (2018). Experimental and computational atomic spectroscopy for astrophysics: oscillator strengths and lifetimes fro Mg I, Si I, Si II, Sc I, and Sc II [Doctoral Thesis]. Lund University.
- Samson, I.M., and Chasse, M. (2016). Scandium (Sc). *W. M. White Publisher: Springer International Publishing*. DOI:10.1007/978-3-319-39193-9_281-1
- Schrödinger, E. (1926). An undulatory theory of the mechanis of atoms and molecules. *Physical Review Publication*, 28:1049-1070. DOI: 10.1103/PhysRev.28.1049
- Schiffmann, S. (2021). Computational atomic structures toward heavy element research [Doctoral Thesis]. Lund university.
- Scott, P., Asplund, M., Grevesse, N., Bergeman, M., & Sauval, A.J. (2015). The elemental composition of the Sun. *Astronomy & Astrophysics*, 573, A26. DOI: 10.1051/0004-6361/201424110
- Shang, X., Wang, Q., Tian, Y., Wang, C., & Dai, Z. (2015). Radiative lifetimes, branching fractions, transition probabilities and oscillator strengths of some Seviyes for neutral yttrium. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol 48 085001 (7pp). DOI:10.1088/0953-4075/48/8/085001
- Wang, Q., Yin, J., Jiang, .L, Shang, X., Tian, Y., & Dai, Z. (2014). Experimental brancing fractions, transition probabilities and oscillator strengths in Gd I and Gd II *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 47 035003. DOI: 10.1088/0953-4075/47/3/035003

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Fifi Karnila

ÖĞRENİM DURUMU:

- **Lisans** : 2017, Muhammadiyah Riau Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü
- **Yüksek Lisans** : 2023, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimler Enstitüsü, Anabilim dalı

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLER:

- 2015-2017 yılları arasında Muhammadiyah Riau Üniversitesinde Labor Assistant olarak çalıştı.
- 2017-2018 yılları arasında PT. Envi Reksatama Engineering'da ortam veri yönetimi çalıştı.
- 2018-2019 yılları arasında PT. Esha Visioneering'da Çevre Danışmanı olarak.

TEZDEN TÜRETİLEN ESERLER:

- Karnila F., and Özdemir L. (2022, 14-16, December). Electron correlation effects for atoms including the configurations $ndn's^2$ and $nd^2n's$. *International Eurasian Conference on Science, Engineering, and Technology*, Ankara, Turkey.

DİĞER ESERLER:

- Karnila F., (2020, 5-6, December). Distribution Model of Nitrogen Concentration Change in Sail River Flow Based On Distance and Time. *International Student Symposium*, Sakarya, Turkey.
- Karnila F., Fitri Y., and Febriani N. (2017, 20, September). Model Distribusi Perubahan Konsentrasi Nitrogen Pada Aliran Sungai Sail Berdasarkan Jarak Dan Waktu. *Seminar Nasional*, Pekanbaru, Indonesia