

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

**NÖTRAL KALAYIN ENERJİ SEVİYELERİ ÜZERİNE  
İZOTOP KAYMA ETKİLERİNİN  
HESAPLANMASI**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Muhammed Serkan ŞADOĞLU**

**Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK**

**Tez Danışmanı : Prof. Dr. Leyla ÖZDEMİR**

**Ocak 2018**

T.C.  
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ


NÖTRAL KALAYIN ENERJİ SEVİYELERİ ÜZERİNE  
İZOTOP KAYMA ETKİLERİNİN  
HESAPLANMASI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

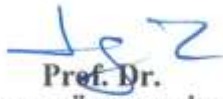
Muhammed Serkan ŞADOĞLU

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 18 /01 /2018 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği / nyçokluğu ile kabul edilmiştir.

  
Prof. Dr.  
Seda G. SAĞDINÇ  
Jüri Başkanı

  
Prof. Dr.  
Yusuf ATALAY  
Üye

  
Prof. Dr.  
Leyla ÖZDEMİR  
Üye

## **BEYAN**

Tez içindeki tüm verilerin akademik kurallar çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, görsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçların akademik ve etik kurallara uygun şekilde sunulduğunu, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğunu, tezde yer alan verilerin bu üniversite veya başka bir üniversitede herhangi bir tez çalışmasında kullanılmadığını beyan ederim.

Muhammed Serkan ŞADOĞLU

Ocak, 2018

## ÖNSÖZ

Bu çalışmada nötral kalayın (Sn) enerji seviyeleri üzerine izotop kayma etkileri çok konfigürasyonlu Hartre-Fock (Multiconfiguration Hartre-Fock-MCHF) yöntemi ile incelendi.

Yüksek lisans eğitimim boyunca 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, bana her zaman maddi ve manevi destek olan aileme teşekkür ederim.

# İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ .....	i
İÇİNDEKİLER .....	ii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ .....	iv
TABLolar LİSTESİ .....	v
ÖZET .....	vi
SUMMARY .....	vii
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ .....	1
BÖLÜM 2.	
HESAPLAMA YÖNTEMİ .....	3
2.1. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock Yöntemi (relativistik olmayan durumlar).....	3
2.2. Varyasyonel Prensipleri.....	5
2.3. Hartree-Fock Yaklaşıklığı .....	5
2.4. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock Yaklaşıklığı.....	7
2.5. Breit-Pauli Hamiltoniyeni .....	8
2.6. İzotop Etkileri.....	10
2.7. İzotop Kayma Etkileri.....	10
2.8. İzotop Kayma Etkileri Hesaplama Adımları.....	12
2.8.1. Kütle kayması.....	13
2.8.2. Alan kayması.....	15
2.8.3. Seviye izotop kayması.....	17

BÖLÜM 3.	
HESAPLAMA SONUÇLARI ve TARTIŞMA.....	18
BÖLÜM 4.	
SONUÇ ve ÖNERİLER.....	28
KAYNAKLAR .....	29
ÖZGEÇMİŞ.....	31

## SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

CI	: Konfigürasyon Etkileşim
CSF	: Konfigürasyon Hal Fonksiyonu (Configuration State Function)
D	: Dirac
E	: Enerji
H	: Hamiltonyen
HF	: Hartree-Fock
L	: Yörünge Açısal Momentum
LS	: Spin-yörünge
MCHF	: Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
N	: Nötron
S	: Spin Açısal Momentum
SCF	: Özüyümlü Alan (Self Consistent Field)
Sn	: Kalay
SS	: Spin-spin
Z	: Atom numarası

## TABLolar LİSTESİ

Tablo 1.1. Kalayın doğal izotopları .....	2
Tablo 3.1. Kalay için çekirdek Parametreleri ( $\lambda (\approx \delta(r^2))$ ).....	19
Tablo 3.2. $f(Z)$ değerleri ( Zimmermann'a göre).....	20
Tablo 3.3. Nötral kalayın (Sn I) temel hal konfigürasyonuna ait seviyeler için izotop kayma etkileri: Normal kütle kayması (NMS), spesifik kütle kayması (SMS) ve alan kayması (FS) katkıları ( $\text{cm}^{-1}$ birimlerinde). Not: NMS ve SMS değerleri negatif değerlidir.....	22
Tablo 3.4. Nötral kalayın (Sn I) temel hal konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri için relativistik olmayan enerji ( $E_0$ ), relativistik enerji ( $E_{\text{rel}}$ ) ve her bir izotoptan ileri gelen izotop katkıları (normal kütle+spesifik kütle+alan kayması) ( $E_{\text{katki}}$ ) değerleri (a.b. birimlerinde).....	26
Tablo 3.5. Nötral kalayın (Sn I) temel hal konfigürasyonuna ait seviyelerin izotop etkilerinin katıldığı enerji değerlerinin ( $E_{\text{rel}}+E_{\text{katki}}$ ) ( $\text{cm}^{-1}$ biriminde) mevcut çalışmalarla (NIST; Sharma ve ark.) karşılaştırılması.....	27



## ÖZET

Anahtar Kelimeler: MCHF yöntemi, Breit-Pauli relativistik düzeltmeler, izotop etkileri, ince yapı seviyeleri.

Bu çalışmada, nötral kalayın (Sn I, Z=50) temel hal konfigürasyonuna ait  $^3P_{2,1,0}$ ,  $^1D_2$  ve  $^1S_0$  seviyeleri üzerine relativistik ve izotop kayma etkileri çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) yöntemi ile incelenmektedir. Nötral kalayın seviye yapısı ve seviyeler arasındaki geçişlere ait çalışmalar olmasına rağmen, izotop etkileri ilk defa bu çalışmada sunulmaktadır.

Birinci bölümde, nötral kalay (Sn I) ile ilgili yapılmış bazı çalışmalar, ikinci bölümde, MCHF yöntemi, Breit-Pauli relativistik düzeltmeler ve izotop kayma etkileri hakkında bilgiler verilmektedir. Son bölümde bu çalışmadan elde edilen sonuçlar ve bu sonuçların bir tartışması verilmektedir.

# CALCULATION OF ISOTOPE SHIFT EFFECTS ON ENERGY LEVELS FOR NEUTRAL TIN

## SUMMARY

Keywords: MCHF method, Breit-Pauli relativistic corrections, isotope effects, fine structure levels.

In this study, the relativistic and isotope shift effects on the levels of  $^3P_{2,1,0}$ ,  $^1D_2$  and  $^1S_0$  for the ground state configuration of neutral tin (Sn I,  $Z=50$ ) have been investigated using multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF) method. Although there are some works on the level structure and transitions between levels for neutral tin, isotope effects on levels have been here presented first time.

In the first chapter, some studies on Sn I in the literature have been reported. An information on MCHF method, Breit-Pauli relativistic corrections and isotope effects has been given in second chapter. In the last chapter, the results obtained from this work and a discussion about them have been given.

## BÖLÜM 1. GİRİŞ

Relativistik olmayan Hamiltonyen, çekirdeğin sonsuz ağır bir nokta yük davrandığı kabullenimi üzerine kuruludur. Çekirdek proton ve nötronlardan oluşur ve bir sonlu kütle ve genişletilmiş bir yük dağılımına sahiptir. Çekirdeğin bu özellikleri bir atomik sistemin enerji seviye yapısını etkiler ve geçiş enerjilerinin ve diğer atomik özelliklerin belirlenmesinde dikkate alınması gereklidir. Çoğunlukla çekirdeğin etkileri elektronlar arası korelasyon katkısının hesabındaki belirsizlikten daha küçüktür. Hafif atomlar için sonlu çekirdek kütlesi önemli iken ağır atomlar için genişletilmiş yük dağılımı daha önemlidir (Fischer ve ark., 1997).

İzotop kayma etkisi, iki etkene bağlıdır: Kütle kayması ve alan kayması. Kütle kayması, çekirdek hareketini hesaba katar ve her atomik seviye kesin değişmez bir açıl momentum değerine sahiptir. Bu nedenle atomik çekirdeğin kütlesi değişirse, seviye enerjisi, açıl momentumun aynı kalabilmesi için değişmek zorunda olacaktır. Enerjideki bu değişim kütle kayması olarak adlandırılır. Alan kayması ise çekirdek yük değerlerindeki değişikliklerden dolayı ortaya çıkar ve atom seviyesinin enerjisi, elektrik yük dağılımının boyut ve şekline bağlı olduğu için ortaya çıkar. Farklı izotoplar aynı sayıda protona sahiptir, ancak yük dağılımı çekirdekteki nötron sayısından etkilenir ve elektronların enerjisini belirleyen bir elektrik alan verir. Bu alanla izotoplar arasındaki farklılıktan kaynaklanan seviyenin enerjisindeki değişime alan kayması denir. İyi bir yaklaşım için toplam izotop kayması bu iki etkinin toplamıdır (King, 1984).

Bu çalışmada, nötral kalayın (Sn I,  $Z=50$ ) enerji seviyeleri üzerine izotop kayma etkileri çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) yöntemi (Fischer, 1997) ile incelenmektedir. Nötral kalayın doğal 10 izotopu bulunmaktadır (Tablo 1.1.). Sn I, [Pd]  $5s^25p^2$  temel hal konfigürasyonuna sahip ikinci ağır karbon grubu elementtir. Sn I'in enerji seviyeleri ve bazı diğer atomik özelliklerini belirlemeye ait çalışmalar literatürde mevcuttur (örneğin; Oliver ve Hibbert, 2008; Kieft ve ark., 2004, 2005; Adelman ve ark., 1979; Allen, 1978; Miller ve ark., 1979; Bieron ve ark., 1991; Gorshkov ve Verolainen, 1985). Bu çalışmalar değişik deney ve teorilerle relativistik

kuantum elektrodinamik etkiler ya da enerji seviyeleri arasında ışımali geçişler üzerinedir. Sn I için izotop etkilerinin dikkate alındığı çalışmaya literatürde rastlanmamıştır. Bu çalışmada enerji seviyeleri üzerine izotop etkilerini hesaplamak için korelasyon katkılarını da dikkate alarak  $5s^25p^2$ ,  $5s^25p^2$ ,  $5s5p^25d$ ,  $5s^25d^2$ ,  $5p^25d^2$ ,  $5s^25p5f$ ,  $5p^4$ ,  $5s^25p4f$ ,  $5p^24f^2$ ,  $5p^34f$ ,  $5p^35f$ ,  $5p^25f^2$ ,  $5s^24f^2$  ve  $5s5p^26s$  konfigürasyonları alındı. Konfigürasyonlar, sadece valans elektronlarının üst tabakalara uyarıldığı valans korelasyonuna göre seçildi. Bu konfigürasyonların tümü çift paritelidirler. Bu çalışmada çift pariteli uyarılmış seviyelere ait sonuçlar da elde edilmesine rağmen daha çok temel hal konfigürasyon seviyeleri üzerine etkilere yoğunlaşıldı. Sn I'in temel hal konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri  $^3P_{2,1,0}$ ,  $^1D_2$ , ve  $^1S_0$  şeklindedir. Hesaplamalarda izotop etkilerinin hesabından önce relativistik ve korelasyon etkilerini içeren enerji seviyeleri elde edildi. Hesaplamalar MCHF yöntemini esas alan MCHF atomik yapı paketi (Fischer, 2000) ile yapıldı.

Tablo 1.1 Kalayın doğal izotopları

İzotop	Kütle	Bolluk	Spin	Manyetik Moment
$^{112}\text{Sn}$	111,904826	0,97%	0	
$^{114}\text{Sn}$	113,902784	0,65%	0	
$^{115}\text{Sn}$	114,903348	0.36%	1/2	-0,918
$^{116}\text{Sn}$	115,901747	14,53%	0	
$^{117}\text{Sn}$	116,902956	7,68%	1/2	-1,000
$^{118}\text{Sn}$	117,901609	24,22%	0	
$^{119}\text{Sn}$	118,903310	8,58%	1/2	-1,046
$^{120}\text{Sn}$	119,902220	32,59%	0	
$^{122}\text{Sn}$	121,903440	4,63%	0	
$^{124}\text{Sn}$	123,905724	5,79%	0	

## BÖLÜM 2. HESAPLAMA YÖNTEMİ

### 2.1. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock Yöntemi (relativistik olmayan durumlarda)

Relativistik olmayan atomik sistemler için hamiltonyen

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.1)$$

şeklinde ifade edilir. Burada  $Z$ ,  $N$  elektronlu atomun çekirdek yükü,  $r_i$ ,  $i$ .elektronun çekirdeğe olan uzaklığı ve  $r_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  elektronları arasındaki uzaklıktır.

Bir atoma ait her bir konfigürasyon birçok enerji seviyesine karşılık gelir. Bu enerji seviyeleri, o atoma ait dış elektronların momentlerinin toplamıyla belirlenebilir. Bu toplam elektronların yörünge açısai momentum ( $L$ ) ve spin açısai momentum ( $S$ ) değerlerinin toplamına eşittir:

$$L = \sum_i^N l_i \quad (2.2)$$

$$S = \sum_i^N s_i \quad (2.3)$$

Atomik dalga fonksiyonu, konfigürasyon hal fonksiyonlarının (CSF-configuration state function) çok konfigürasyonlu açılımı olarak inşa edilir. Her bir CSF, relativistik olmayan Hamiltonyenle birlikte, spin- ve yörünge- açısai momentum  $S^2$ ,  $S_z$ ,  $L^2$ ,  $L_z$  ve herbiri arasındaki deęiş tokuş inversiyon operatörü

$\Psi(\gamma LM_L SM_S; q_1, \dots, q_N)$  kümesinin bir özfonksiyonudur. Burada  $\gamma$  ek kuantum sayılarını gösterir. İlgili kuantum sayıları  $S$ ,  $M_S$ ,  $L$ ,  $M_L$  ve  $\pi$  simetri durumunu belirler.  $\pi^2 = \pm 1$  değere sahiptir.  $\pi$ 'nin +1 durumu için fonksiyonlar çift, -1 durumu için tek paritelidir. CSF'ler,  $\{P_{nl}\}$  radyal dağılımları tespit edilmesi gereken

$$\Phi_{nlm_l m_s} = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) X_{m_s} \quad (2.4)$$

tek-elektronlu spin orbitallerin üzerine kurulu Slater determinantlarının lineer kombinasyonlara simetrik uyarlanmasıdır. Varyasyon prensibini uygulayarak, radyal dağılımdaki herhangi bir sonsuz küçük varyasyonla ilgili beklenen değer kararlılığı araştırılarak,  $P_{nl}(r)$  radyal dağılımları bilinmeyenler için

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} [Z - Y_{nl}(r)] - \epsilon_{nl, nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} P_{nl}(r) = \frac{2}{r} X_{nl}(r) + \sum_{n'} \epsilon_{nl, n'l} P_{n'l}(r) \quad (2.5)$$

şeklinde çok konfigürasyonlu Hartree-Fock denklemleri (MCHF-multiconfiguration Hartree-Fock) elde edilir. Bu denklemler aynı  $l$  alt uzayındaki kısıtlamalar ve,  $(X)$  ve  $(Y)$  potansiyellerinin değiş-tokuşu sayesinde doğrudan birbirlerine bağlıdır. Potansiyellerin açık bir şekilde ayrıca girildiği görülen konfigürasyon etkileşim katsayıları  $\{c_i\}$ , çoklu konfigürasyon genişlemesi için varyasyon yönteminin uygulanmasıyla ilişkili radyal dağılımlarının geçerli kümesi için konfigürasyon etkileşim (CI-configuration interaction) problemi çözülerek belirlenebilir:

$$HC = EC \quad (2.6)$$

MCHF ve CI problemleri seçilen CI özvektör ve radyal dağılımlar için kendi kendine tutarlılığa ulaşıncaya kadar çözülür.

## 2.2. Varyasyonel Prensibi

Varyasyonel teorisi dalga  $(H - E)\Psi = 0$  denkleminin çözümleri ve bir fonksiyonelin kararlı çözümleri arasındaki eşitliği gösterir. Bağ halleri için yaklaşık çözümler integrallenebilir bir alt uzaya sınırlandırılır.

$$\mathcal{E}(\Psi) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (2.7)$$

enerji fonksiyoneli kararlıdır.  $\delta\mathcal{E}(\Psi) = 0$  Şartı

$$\langle \delta\Psi | H - E | \Psi \rangle = 0, \quad \delta\Psi \in \tilde{H}, \quad E = \mathcal{E}(\Psi) \quad (2.8)$$

verir. H'nın özdeğerleri

$$E_0 \leq \mathcal{E}(\Psi), \quad \Psi \in \tilde{H}. \quad (2.9)$$

şartına göre elde edilir. Böylece herhangi bir yaklaşık dalga fonksiyonu için hesaplanan enerji gerçek en düşük özdeğer için bir üst sınırdır.

## 2.3. Hartree-Fock Yaklaşıklığı

Hartree-Fock yaklaşıklığında yaklaşık dalga fonksiyonu yalnızca bir konfigürasyon hal fonksiyonu içerir. Her spin-yörüngemsinin radyal fonksiyonun  $nl$  kuantum sayılarına bağlı olduğu kabul edilir. Bunlar varyasyon prensibini ve relativistik olmayan Schrödinger denklemini kullanarak belirlenir. Enerji fonksiyoneli  $\langle \Phi(\gamma LS) | H | \Phi(\gamma LS) \rangle$  matrisi elemanı için bir enerji ifadesi olarak yazılabilir. Racah cebiri spin açılmal katkıları göstermek için kullanılabilir. Bu iki tip radyal integral ortaya çıkarır: Bu radyal integraller,

$$L = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (2.10)$$

şeklinde bir-cisim radyal integraller ve

$$I(nl, n'l') = -\frac{1}{2} \int_0^{\infty} P(nl; r) \times L P(n'l'; r) dr \quad (2.11)$$

dir. Diğer tip integraller

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_k \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P^k(\cos\theta) \quad (2.12)$$

Burada  $\theta$ ,  $r_1$  ve  $r_2$  vektörleri arasındaki açığı,  $r_{<}$  ve  $r_{>}$ ,  $r_1$  ve  $r_2$ 'den daha küçük ve daha büyük olanı gösterir. a, b, c ve d, nl kuantum sayılarını temsil etmek üzere bu integraller

$$R^k(ab, cd) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} P(a; r_1) P(b; r_2) \times \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P(c; r_1) P(d; r_2) dr_1 dr_2 \quad (2.13)$$

olarak ifade edilir. Bu integraller Slater integralleri olarak adlandırılır. Hartree-Fock yaklaşıklığında Slater integralleri kuantum sayılarının yalnızca iki setine bağlı oluşur. Bu özel durumlar

$$F^k(a, b) \equiv R^k(ab, ab) \text{ ve } G^k(a, b) \equiv R^k(ab, ba) \quad (2.14)$$

olarak ayrı ayrı belirtilirler. Bu ifadelerden birincisi bir orbital çifti arasındaki doğrudan etkileşimden, diğeri ise takas operatöründen ortaya çıkar. Böylece enerji ifadesi



$$\begin{aligned}
\varepsilon(\gamma LS) = & \sum_i^m q_i \left[ I(n_i l_i, n_i l_i) + \frac{q_i - 1}{2} \sum_{k=0}^{2l_i} f_k(i, i) F^k(n_i l_i, n_i l_i) \right] \\
& + \sum_{j < i} q_i q_j \left[ \sum_{k=0}^{2\min(l_i, l_j)} f_k(i, i) F^k(n_i l_i, n_j l_j) \right] \\
& + \left[ \sum_{k=|l_i - l_j|}^{l_i + l_j} g_k(i, j) G^k(n_i l_i, n_j l_j) \right] \tag{2.15}
\end{aligned}$$

olur. Genelde  $f_k(i, j)$  ve  $g_k(i, j)$  katsayıları yalnızca konfigürasyona değil aynı zamanda çiftlenime de bağlıdır. Çok daha genel olarak Slater tarafından önerilen “bir konfigürasyonun ortalama enerji”  $\varepsilon(av)$  kavramıdır. Bu tüm mümkün LS terimlerinin ağırlıklı bir ortalamasıdır. (ağırlık çarpanı  $(2L+1)(2S+1)$ )

#### 2.4. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock Yaklaşıklığı

Hartree-Fock yöntemi çoğu atomik özellikleri istenilen düzeyde iyi verir. Fakat dikkatli bir şekilde analiz yapıldığında farklılıklar gözlenebilir. Gözlenen veriler relativistik etkiler, sonlu kütle ve çekirdeğin hacmi gibi etkiler içerebilir. Küçük sistemler için bu etkiler küçüktür. Bu tip sistemler için farklılığın en büyük kaynağı Hartree-Fock çözümünün Schrödinger denkleminin gerçek çözümü için bağımsız parçacık yaklaşıklığı temeline dayanmasındandır. Elektronların karşılıklı etkileşmesinin ihmal edilmesi her bir elektronun diğer elektronlar tarafından belirlenen bir alanda bağımsız olarak hareket etmesi demektir. Bu nedenle Löwdin tarafından

$$E^{\text{Kor}} = E^{\text{Tam}} - E^{\text{HF}} \tag{2.16}$$

şeklinde korelasyon enerjisi tanımlanmıştır. Bu tanımda  $E^{\text{Tam}}$  gözlenen enerji değil bir dizi kabullenimleri temel alan Schrödinger denkleminin gerçek çözümüdür.

MCHF yönteminde dalga fonksiyonu ortogonal konfigürasyon hallerinin lineer kombinasyonu ile ifade edilir:

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_i^m c_i \Phi(\gamma_i LS) \quad (2.17)$$

Enerji ifadesi de

$$\mathcal{E}[\Psi(\gamma LS)] = \sum_i^m \sum_j^m c_i c_j H_{ij} \quad (2.18)$$

Burada hamiltonyen matris elemanı

$$H_{ij} = \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \quad (2.19)$$

dır.

## 2.5. Breit-Pauli Hamiltoniyeni

Atomik bir sistemdeki parçacıklar arası etkileşme, relativistik ve relativistik olmayan şekilde iki kısma ayrılır (Fontana ve Meath, 1968). Breit-Pauli hamiltoniyeni çekirdeğin Coulomb alanında hareket eden elektronların etkileşmesini tanımlar.  $\alpha$  ince yapı sabiti olmak üzere

$$H = H_e + \alpha^2 H_{rel} \quad (2.20)$$

şeklinde yazılır. Burada  $H_e$  sistemin bilinen relativistik olmayan hamiltoniyeni,  $H_{rel}$  ise sistemin relativistik hamiltoniyenidir.

Relativistik Hamiltonyen

$$H_{\text{rel}} = H_{\text{LL}} + H_{\text{SS}} + H_{\text{SL}} + H_{\text{P}} + H_{\text{D}} \quad (2.21)$$

şeklinde katkılardan oluşur. Burada  $H_{\text{LL}}$  yörünge-yörünge etkileşme terimi,  $H_{\text{SS}}$  spin-spin etkileşme terimi,  $H_{\text{SL}}$  spin-yörünge etkileşme terimi,  $H_{\text{P}}$  kütleinin hıza bağlı olarak değişimine karşılık gelen relativistik düzeltme,  $H_{\text{D}}$  Dirac teoreminin karakteristik terimidir.

$$H_{\text{LL}} = -\frac{1}{2} \sum_{k>j} \frac{1}{r_{jk}^3} [r_{jk}^2 \vec{p}_j \cdot \vec{p}_k + \vec{r}_{jk} \cdot (\vec{r}_{jk} \cdot \vec{p}_j) \vec{p}_k] \quad (2.22)$$

$$H_{\text{SS}} = \sum_{k>j} \left\{ -\frac{8\pi}{3} (\vec{s}_j \cdot \vec{s}_k) \delta^{(3)}(\vec{r}_{jk}) + \frac{1}{r_{jk}^5} [r_{jk}^2 \vec{s}_j \cdot \vec{s}_k - 3(\vec{s}_j \cdot \vec{r}_{jk})(\vec{s}_k \cdot \vec{r}_{jk})] \right\} \quad (2.23)$$

$$H_{\text{SL}} = \frac{1}{2} \sum_{\beta,j} \frac{Z_{\beta}}{r_{j\beta}^3} (\vec{r}_{j\beta} \times \vec{p}_j) \cdot \vec{s}_j - \frac{1}{2} \sum_{k \neq j} \frac{1}{r_{jk}^3} [(\vec{r}_{jk} \times \vec{p}_j) \cdot \vec{s}_j - 2(\vec{r}_{jk} \cdot \vec{p}_k) \cdot \vec{s}_j] \quad (2.24)$$

$$H_{\text{P}} = -\frac{1}{8} \sum_j p_j^4 \quad (2.25)$$

$$H_{\text{D}} = \frac{\pi}{2} \left[ \sum_{\beta,j} Z_{\beta} \delta^{(3)}(\vec{r}_{j\beta}) - 2 \sum_{k>j} \delta^{(3)}(\vec{r}_{jk}) \right] \quad (2.26)$$

Relativistik olmayan etkileşimler elektrik yük etkileşmeleriyle ilgilidir. Bu nedenle elektrostatik etkileşmeler dikkate alınarak Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. Bu terimler atomik sistemlerin özelliklerini belirlemede daha önemli olurlar. Relativistik etkiler ise manyetik özelliğe sahip olduğundan zayıf etkileşimlerdir ve bu etkileşimler kuantum mekaniğinin pertürbasyon teorisi uygulanarak incelenebilir. Genellikle elektron sayısı birden fazla olan sistemler için kuantum mekaniğinin dalga denklemlerinin çözümü mümkün olmadığından bu sistemler için yaklaşık yöntemler kullanılır.

## 2.6. İzotop Etkileri

Atomik geçişlerde gözlenen izotop kaymaları, kütle kayması ve alan kaymasına ayrıştırılabilir. Kütle kayması, izotopların çekirdek kütlelerindeki farklılıklarından dolayıdır ve bunlar daha çok hafif atomlar için etkilidir. Hacim kayması çekirdek yük dağılımının sonlu hacminden dolayı ortaya çıkar ve bu da ağır atomlar için önemlidir. Alan kayması, fiziksel anlamda daha ilginçtir. Çünkü alan kayması izotoplar arasındaki çekirdek yük dağılımındaki farklılıklar hakkında bilgi sağlar. Bir geçişteki izotop kayması üst ve alt seviyelere ait kayma arasındaki farklar olarak verilir. Bireysel kaymalar oldukça büyüktür fakat ihmal edilir. Bu nedenle farklar için güvenilir değerler elde edilmesi bunları çok duyarlı bir şekilde hesaplamayı gerektirir. Enerji kaymaları  $H_0$  sıfırıncı mertebeye Schrödinger hamiltonyeninden elde edilen dalga fonksiyonları ile birinci mertebeye pertürbasyon teorisinden sağlanır.

## 2.7. İzotop kayma Etkileri

Çekirdekdeki protonlar sonlu bir çekirdek hacmi içinde dağıldıkları için içteki elektrostatik potansiyel  $1/r$  yasasından ayrılır ve çekirdek içinde protonun dağılımına bağlı olur. . Bu hacim etkisinin bir hesabını elde etmek için çekirdeğin basit modeli gözönüne alınabilir. Çekirdek yükü,

$$R = r_0 A^{1/3} \quad (2.27)$$

yarıçaplı küre içine düzgün bir biçimde dağılmıştır. Burada  $A$ , çekirdeğin kütle numarası ve  $r_0$ , değeri yaklaşık  $1.2 \times 10^{-15}$  m ile verilen bir sabittir. Bu modelde çekirdek yüzünden doğan elektrostatik  $V(r)$  potansiyel,

$$V(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)2R} \left( \frac{r^2}{R^2} - 3 \right) & r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} & r \geq R \end{cases} \quad (2.28)$$

şeklindedir. Problemi,  $H_0$  perturbe olmamış hamiltonyenin hidrojenik hamiltonyen olduğunu ve  $H'$  perturbasyonunun (2.28) etkileşmesi ile  $-\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r}$  etkileşmesi arasındaki fark olduğu varsayılarak basitleştirilebilir. Bu durumda, relativistik düzeltmeler gibi diğer tüm etkiler ihmal edilir ve

$$H' = \begin{cases} \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)2R} \left( \frac{r^2}{R^2} + \frac{2R}{r} - 3 \right) & r \leq R \\ 0 & r \geq R \end{cases} \quad (2.29)$$

olarak ifade edilir. Perturbasyondan ileri gelen birinci mertebe enerji kayması ise

$$\Delta E = \langle \Psi_{nlm} | H' | \Psi_{nlm} \rangle = \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)2R} \int_0^R |R_{nl}(r)|^2 \left( \frac{r^2}{R^2} + \frac{2R}{r} - 3 \right) r^2 dr \quad (2.30)$$

dir.  $r \leq R$  bölgesi içinde  $R_{nl}(r) \cong R_{nl}(0)$  yazılabilir. Ayrıca  $R_{nl}(0)$ ,  $s$  durumları ( $l = 0$ ) dışında sıfır olduğu için

$$\Delta E \cong \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{R^2}{10} |R_{n0}(0)|^2 \cong \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\pi}{5} R^2 |\Psi_{n00}(0)|^2, \quad l = 0 \quad (2.31)$$

elde edilir ve  $l \neq 0$  olan durumlar için ise  $\Delta E \approx 0$  olur.  $|\Psi_{n00}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_\mu^3 n^3}$  kullanıldığında (2.31)

$$\Delta E \cong \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{5} R^2 \frac{Z^4}{a_\mu^3 n^3}, \quad l = 0 \quad (2.32)$$

olur. Deneysel olarak ölçülen büyüklük, yük dağılımları sırasıyla  $R$  ve  $R + \delta R$  yarıçapına sahip olan iki izotop arasındaki enerji kaymasının farkı  $\delta E'$  dir. Böylece  $R'$  ye göre birinci mertebeden,

$$\delta E \cong \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi}{5} R^2 |\Psi_{n00}(0)|^2 \frac{\delta R}{R} \cong \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{5} R^2 \frac{Z^4}{a_\mu^3 n^3} \frac{\delta R}{R} \quad (2.33)$$

düzeltilmesi elde edilir. Büyük yarıçaplı izotoplar daha büyük enerji değerine sahiptirler ve bu deneyle doğrulanmıştır. Z arttığında ve n azaldığında  $\delta E$ 'nin arttığı, böylece Z değerine sahip hidrojen tipi atomların düşük s-durumları (ve özellikle taban durumu) için en önemli hacim etkilerinin olduğu görünür.

## 2.8. İzotop Kayma Etkileri Hesaplama Adımları

Sonsuz kütleli çekirdek yaklaşıklığındaki özfonksiyonları MCHF ve CI yöntemleri kullanılarak elde edilir. Bir  $\Psi(\gamma LS)$  MCHF dalga fonksiyonu farklı elektronik konfigürasyonlardan ( $c_i \Phi(\gamma_i LS)$ ) oluşturulan aynı L,  $M_L$ , S,  $M_S$  ve  $\pi$  simetriye sahip  $\pi \Psi(\gamma L M_L S M_S; q_1, \dots, q_N)$  konfigürasyon hal fonksiyonları cinsinden ifade edilir:

$$\Phi_{n l m_l m_s} = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_{l m_l}(\theta, \varphi) X_{m_s} \quad (2.34)$$

CSF'ler,

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} [Z - Y_{nl}(r)] - \epsilon_{nl, nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} P_{nl}(r) = \frac{2}{r} X_{nl}(r) + \sum_{n'} \epsilon_{nl, n'l} P_{n'l}(r) \quad (2.35)$$

şeklinde bir-elektron spin-yörüngemsi fonksiyonlarından oluşturulur.

MCHF yönteminde,  $P_{nl}(r)$  radyal fonksiyonlar seti ve  $c_i$  karışım katsayılarının heriki seti sayısal çözüm olan öz-uyumlu alan (SCF-Self Consistent Field) yöntemi ile iyileştirilir.  $P_{nl}(r)$  radyal fonksiyonlar için çok konfigürasyonlu Hartree-Fock diferansiyel denklemleri iteratif olarak ve karışım katsayıları  $c_i$  için konfigürasyon etkileşme yöntemi ile elde edilir. Radyal fonksiyonlar belirlenir belirlenmez bir konfigürasyon etkileşme hesabı konfigürasyon hallerinin bir seti üzerinden oluşturulur.

### 2.8.1. Kütle kayması

M sonlu çekirdek kütleli N elektronlu bir atom (N + 1) parçacıklı bir sistem olarak düşünülmelidir. Çekirdeğin koordinatı sabit bir orijin noktasına göre  $R_0$  koordinatları ile gösterirsek, elektronlarınkini de  $R_i$  olarak alırsak sistemin Hamiltonyeni

$$H_m = -\frac{\nabla R_0^2}{2m} \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\nabla^2 R_i}{2m} \right) + V \quad (2.36)$$

olarak yazılabilir. Burada V, yalnızca görelî uzaklıklara bağılı olan, sistemdeki N + 1 parçacık arasındaki Coloumb etkileşmelerinin toplamıdır. Koordinatların kütle merkezine bir dönüşümü,

$$R = \frac{1}{M + N_m} (MR_0 + mR_1 + \dots + mR_N) \quad (2.37)$$

ve

$$r_i = R_i - R_0 \quad i = 1, \dots, N \quad (2.38)$$

görelî koordinatlar alındığında Hamiltonyen

$$H_M = -\frac{\nabla^2 R}{2M_{\text{tot}}} + \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\nabla^2 R_i}{2\mu} \right) - \frac{1}{M} \sum_{i<j}^N \nabla_{r_i} \cdot \nabla_{r_j} + V \quad (2.39)$$

olur. Burada  $M_{\text{Top}}$  sistemin toplam kütlesi ve  $\mu = M.m/(M + m)$  ise sistemin indirgenmiş kütlesidir. Denklemdaki birinci terim, kütle merkezinin kinetik enerjisini tanımlar ve eğer R önemli bir koordinat değilse bu terim ihmal edilebilir. Böylece, çekirdeğe göre koordinatlar cinsinden çözülecek olan denklem

$$\left[ \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\nabla^2 R_i}{2\mu} - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} - \frac{1}{M} \sum_{i<j}^N \nabla_{r_i} \cdot \nabla_{r_j} \right] \Psi_M(r) = E_M \Psi_M(r) \quad (2.40)$$

Belirli kütle kayması terimi (kütle polarizasyon terimi olarak da ifade edilir) alınmazsa,

$$H_M^{\text{sms}} = -\frac{\mu}{Mm} \sum_{i<1}^N \nabla_{\rho_i} \cdot \nabla_{\rho_j} \quad (2.41)$$

olur ve karşılık gelen enerji katkısı ve dalga fonksiyonu

$$E_M = \frac{m}{\mu} E_0 = \left( \frac{M}{M+m} \right) E_0 \quad (2.42)$$

ve

$$\Psi_M \left( \frac{m}{\mu} \rho \right) = \Psi_0(\rho) \quad (2.43)$$

olarak elde edilir. Bu denklemlerde  $E_0$  ve  $\Psi_0$  sırasıyla sonsuz kütle için özdeğer ve özfonksiyon değerleridir. Böylece, hafif çekirdekli atomlar için dalga fonksiyonu, sonsuz ağır çekirdekli dalga fonksiyonuna kıyasla daha fazla genişlemiş olur. Dalga fonksiyonun ölçeklendirilmesiyle ortaya çıkan enerji kayması normal kütle kayması olarak adlandırılır ve

$$E_M^{\text{nms}} = E_M - E_0 = \left( \frac{M}{M+m} - 1 \right) E_0 = -\frac{m}{M+m} E_0 \quad (2.44)$$

ile verilir.

Spesifik kütle kayması, sıfırıncı derece dalga fonksiyonu olarak alındığında,

$$E_M^{\text{nms}} = \Psi_0 \left| -\frac{\mu}{Mm} \sum_{i<1}^N \nabla_{r_i} \cdot \nabla_{r_j} \right| \Psi_0 \quad (2.45)$$

olarak elde edilir. Normal ve spesifik kütle kayma düzeltmeleri



$$E_M = E_0 + E_M^{nms} + E_M^{sms} \quad (2.46)$$

olarak yazılabilir. Dalga fonksiyonunun uzaysal açılımı nedeniyle sonlu çekirdek kütlesi diğer özellikleri de etkiler. Spesifik kütle kayma operatörü dalga fonksiyonu açılımındaki CSF'lerin karışım katsayılarını etkilediğinden bir CI hesabında alınabilir.

Kütle kayması, normal ve spesifik kütle kaymasının toplamıdır ve kütle merkezine göre çekirdek hareketinin kinetik enerjisi olarak yorumlanır. Normal kütle kayması tüm seviyeleri aynı biçimde etkiler ve enerjiyi  $\frac{-m}{M+m}E_0$  kadar artırır. Spesifik kütle kayması ise elektronik hale bağlı olarak pozitif ya da negatif etkili olabilir. Eğer atom içindeki elektronlar birbirlerinden tamamıyla bağımsız hareket ediyorsa o zaman spesifik kütle kayması ortadan kalkar. Eğer elektronlar baskın olarak aynı yönde hareket ediyorsa çekirdek dengeyi sağlamak için kendi çevresinde döner. Her bir elektron elektrostatik etkileşme ile bir diğerini etkiler. Ayrıca, dalga fonksiyonu için antisimetriklik gerekliliği elektronlar arasındaki harekette korelasyonu tanımlar.

### 2.8.2. Alan kayması

Potansiyel çekirdeğin sonlu boyutundan dolayı, Z noktasal yükün Coulomb potansiyelinden farklı olur. s elektronları çekirdek hacminde sonlu olasılıkla bulunacağından, potansiyeldeki sapma toplam enerji kaymasına sebep olur.  $V(r)$ , M kütleli bir izotopun genişletilmiş çekirdek yük dağılımından ortaya çıkan potansiyeli gösterirse, Coulomb potansiyelinde hareket eden elektronlar yerine çekirdek potansiyelinde hareket eden elektronlar için enerji düzeltilmesi

$$E_M^{fs} = - \int_{R^3} \left( V(r) - \frac{Z}{r} \right) \rho_e(r) d^3r \quad (2.47)$$

olarak yazılabilir. Burada  $\rho_e(r)$  elektron yük dağılımıdır. İntegral alma tüm uzay üzerindedir; fakat potansiyeldeki fark  $(V(r) - \frac{Z}{r})$ 'deki sıfırdan farklıdır. Elektron

yük dağılımı sabit olduğundan,  $\rho_e(r)$ ,  $r = 0$  değeri ile yer değiştirebilir ve integral dışına alınabilir.  $\nabla^2 r^2 = G$  tanımını kullanarak enerji kayması

$$E_M^{fs} = -\frac{1}{6}\rho_e(0) \int_{R^3} \left( V(r) - \frac{Z}{r} \right) \nabla^2 r^2 d^3r \quad (2.48)$$

ile ifade edilebilir. Buradaki son ifade kısmi integrasyonla ve sonsuzda sıfır sınır şartı ile elde edilir:

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi\delta(r) \quad (2.49)$$

ve

$$\nabla^2 V(r) = -4\pi\rho_n(r) \quad (2.50)$$

Poisson denklemini kullanarak

$$E_M^{fs} = -\frac{2\pi}{3}\rho_e(0) \int_{R^3} r^2 \rho_n(r) d^3r \quad (2.51)$$

olduğu görülür. Burada  $\rho_n(r)$  çekirdek yük dağılımıdır.

Sonuç olarak, çekirdeğin kare ortalama yarıçapı denilen

$$r_M^2 = \frac{\int r^2 \rho_n(r) d^3r}{\int \rho_n(r) d^3r} \quad (2.52)$$

ifadesini kullanarak

$$E_M^{fs} = -\frac{2}{3}\pi Z \rho_e(0) r_M^2 \quad (2.53)$$

ifadesi elde edilir. Çoğunlukla yük dağılımı bilinmez ve onun yerine, R yarıçaplı bir küredeki tek tip dağılmış çekirdek yükü şeklinde basit bir model kullanılır. Bu dağılım (2.53)'e yazıldığında

$$R^2 = \frac{5}{3} r_M^2 \quad (2.54)$$

elde edilir.

### 2.8.3. Seviye izotop kayması

Sonlu çekirdek kütlesi ve genişletilmiş yük dağılımının etkileri hesaba katıldığında, bir elementin izotopları (nötron sayıları farklı fakat proton sayıları aynı olan element ile) tümüyle çok farklı enerji seviyelerine sahip olacaktır. İki farklı izotopun enerji seviyeleri arasındaki kayma (aynı kuantum sayılı) seviye izotop kayması olarak adlandırılır.

M kütleli ve  $\langle r_M^2 \rangle$  çekirdek yarıçaplı bir izotop düzeltilmiş enerji, kütle ve alan kayması ile verilir

$$\begin{aligned} E_M &= E_0 + E_M^{nms} + E_M^{sms} + E_M^{fs} \\ &= E_0 - \frac{m}{M+m} E_0 + \frac{\mu}{Mm} S + \frac{2\pi}{3} Z r_M^2 \rho_e(0) \end{aligned} \quad (2.55)$$

Burada  $E_0$ , sıfırıncı mertebeye Hamiltonyenin enerjisidir. İki  $M'$  ve  $M$  izotopu arasındaki  $\Delta E_{M'M}$  seviye izotop kayması

$$\begin{aligned} E_{M'M} &= E_{M'} - E_M \\ &= E_0 \left( \frac{m}{M+m} - \frac{m}{M'+m} \right) + S \left( \frac{\mu}{M'm} - \frac{\mu}{Mm} \right) \\ &\quad + \frac{2\pi}{3} Z \rho_e(0) (r_{M'}^2 - r_M^2) \end{aligned} \quad (2.56)$$

şeklinde elde edilir. Kare-ortalama yarıçaptaki farkların değerleri Aufmuth ve diğerleri (1987) tarafından oluşturulan tablodan bulunabilir.

### **BÖLÜM 3. HESAPLAMA SONUÇLARI ve TARTIŞMA**

MCHF yöntemi çok elektronlu atomların yapılarının araştırılmasında oldukça iyi sonuçlar verir. Bölüm 2.'de teorik temeli verilen MCHF yöntemine (Fischer ve ark., 1997) dayanan MCHF atomik yapı kodu (Fischer, 2000), verilen bir atoma ait konfigürasyon hal listesinin oluşturulması, terim ifadelerinin türetilmesi, enerji seviyelerinin belirlenmesi, MCHF ve Breit-Pauli yaklaşıklığındaki açısız ve radyal integrallerin hesaplanması, matris elemanlarının oluşturulması, izotop etkilerinin hesaplanması gibi birçok özelliği belirlemeye imkan verir.

Bu çalışmada kalay atomuna (Sn I, Z=50) ait düşük enerji seviyelerine (temel hal konfigürasyonuna ait) izotop etkileri MCHF yöntemi ile incelendi. Kalay atomu için bu etkileri hesaplama adımları aşağıdaki gibidir.

1) İlk olarak konfigürasyon hal fonksiyonları elde edildi. Bunun için Sn I'e ait kapalı dolu tabakalar [Pd,  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10}$ ] ve  $5s^2 5p^2$  açık tabakalar girildi. Korelasyon etkisini dikkate almak için de  $5s^2 5p^2$ ,  $5s^2 5p^2$ ,  $5s 5p^2 5d$ ,  $5s^2 5d^2$ ,  $5p^2 5d^2$ ,  $5s^2 5p 5f$ ,  $5p^4$ ,  $5s^2 5p 4f$ ,  $5p^2 4f^2$ ,  $5p^3 4f$ ,  $5p^3 5f$ ,  $5p^2 5f^2$ ,  $5s^2 4f^2$  ve  $5s 5p^2 6s$  konfigürasyon takımı seçildi. Her bir konfigürasyon için mümkün tüm LS-çiftlenim modeline göre terim ifadeleri oluşturulur. Bu şekilde konfigürasyon seti seçilerek korelasyon etkileri de dikkate alınmış oldu. LS-çiftlenim modeline göre elde edilen konfigürasyon hal fonksiyonları spektroskopik notasyonla bir çıktı dosyasına depolanır.

2) Bir önceki adımda elde edilen konfigürasyon hal listesi giriş verisi olarak alınarak (2.1)'de verilen relativistik olmayan hamiltonyen için gerekli olan matris elemanlarının açısız integralleri hesaplanır ve integral listesi oluşturulur.

3) MCHF yöntemi ile konfigürasyon hal fonksiyonları listesi ve 2.adımda elde edilen integraller listesi kullanılarak Sn I için dalga fonksiyonları ve enerji hesabı yapılır ve elde edilen sonuçlar kaydedilir.

4) Hesaplamalarda relativistik etkiler de (Breit-Pauli hamiltonyeni çerçevesinde) dikkate alınmak istendiğinden (2.21)'de belirtilen katkılar için gerekli açılal integraller hesaplanır.

5) LS- veya jj-çiftlenim modeline göre etkileşim matrisinin özdeğer ve özvektörleri hesaplanır. Bu aşamada enerji seviyeleri hem LS-çiftlenim (relativistik katkıları içermeyen) hem de jj-çiftlenim (relativistik katkıları içeren) modellerine göre ayrı ayrı enerji seviyeleri sonuçları elde edilir.

6) Yukardaki adımlardan elde edilen sonuçları ve yaklaşımları dikkate alarak kütle kayması ve alan kayması gibi izotop etkileri hesaplanarak enerji seviyeleri belirlenir. Sn I için  $^3P_{2,1,0}$ ,  $^1D_2$ , ve  $^1S_0$  temel hal enerji seviyelerine izotop etkileri Tablo 3.3.'de verilmektedir. Giriş kısmında da belirtildiği gibi kalayın 10 doğal izotopu bulunmaktadır. Tablo 3.1. ve 3.2.'de izotop etkilerini hesaplamak için gerekli olan bazı sabitler ve parametre değerleri ( $\lambda (\approx \delta(r^2))$  ve  $f(Z)$ ) (Aufmuth ve ark., 1987) verilmektedir (Tablo 3.1. ve Tablo 3.2.).

Tablo 3.1. Kalay için çekirdek Parametreleri ( $\lambda (\approx \delta(r^2))$ )

Element	A	A'	$\lambda_{rel}$	$\lambda[fm^2]$
Sn	110	120	4,924 (31)	0,630 (33)
	111	120	4,560 (71)	0,584 (36)
	112	114	1	0,128 (6)
	112	120	3,833 (5)	0,491 (24)
	113	120	3,390 (15)	0,434 (23)
	114	115	0,34 (6) <sup>a</sup>	0,043 (5)
	114	116	0,99 (9) <sup>a</sup>	0,127 (6)
	114	120	2,833 (4)	0,363 (18)

Tablo 3.1. (Devamı)

115	120	2,517 (14)	0,322 (17)
116	117	0,37 (4) <sup>a</sup>	0,047 (3)
116	118	0,95 (9) <sup>a</sup>	0,121 (6)
116	120	1,815 (3)	0,232 (11)
117	120	1,475 (8)	0,189 (10)
117m	120	1,509 (15)	0,193 (11)
118	119	0,34 (5) <sup>a</sup>	0,043 (4)
118	120	0,855 (4)	0,109 (6)
119	120	0,556 (7)	0,071 (4)
120	121	0,298 (18)	0,038 (4)
120	121m	0,244 (18)	0,031 (4)
120	122	0,751 (8)	0,096 (6)
120	123	0,965 (27)	0,123 (9)
120	124	1,415 (20)	0,181 (11)
120	125	1,631 (55)	0,209 (17)
122	124	0,69 (7) <sup>a</sup>	0,089 (5)

Tablo 3.2.  $f(Z)$  değerleri (Zimmermann'a göre)

A	$f(Z)$
112	297,12
114	296,86
115	296,73
116	296,60
117	296,48
118	296,35
120	296,11
122	295,86

Yukarda bahsedilen adımları takip ederek, atomik kalayın temel hal konfigürasyonuna ait seviyeler üzerine izotop etkileri hesaplama sonuçları Tablo 3.3.'de verilmektedir. Tablo 3.3.'de her bir seviye için spesifik kütle (SMS), normal kütle (NMS), alan kayması (FS) katkıları ve katkıların toplamı ( $E_{katki}$ ) verilmektedir. Tablo 3.4.'de izotop katkılarının atomik birimler (a. b.) cinsinden değerlerini içermektedir. Tablo 3.5.'de ise izotop etkilerinin enerji seviyelerine katkılarının dikkate alınmış şekli ile, literatürde mevcut çalışma sonuçları ile bir karşılaştırması yapılmaktadır. Tabloda  $E_0$  olarak gösterilen enerji değerleri relativistik olmayan enerji değerlerini,  $E_{rel}$  konfigürasyon etkileşme modeline göre korelasyon etkisini ve Breit-Pauli etkilerinin dikkate alındığı relativistik enerji değerlerini göstermektedir. Bölüm 2.'de de belirtildiği gibi çekirdek etkileri çoğunlukla korelasyon katkısının hesaplanmasındaki belirsizlikten daha küçüktür. Fakat en azından teoride geçiş etkilerinin ve atomik özelliklerin belirlenmesinde yine de dikkate alınmalıdır. Tablolardan görüldüğü gibi çekirdek hacim etkisi (alan kayması, FS), çekirdek kütle etkisine (spesifik kütle+normal kütle, SMS+NMS) göre daha baskındır. Bu durum zaten ağır atomlarda beklenen bir durumdur (Fischer ve diğ., 1997). Tablo 3.4.'de yapılan karşılaştırmadan enerji seviyelerinin çok az miktarda değişmekte olduğu görülmektedir.

Tablo 3.3. Nötral kalayın (Sn I) temel hal konfigürasyonuna ait seviyeler için izotop kayma etkileri: Normal kütle kayması (NMS), spesifik kütle kayması (SMS) ve alan kayması (FS) katkıları ( $\text{cm}^{-1}$  birimlerinde). Not: NMS ve SMS değerleri negatif değerlidir.

	$^3P_0$	$^3P_1$	$^3P_2$	$^1D_2$	$^1S_0$
<b>NMS</b>					
112-120	441,72881565	441,72835578	441,72784476	441,72603461	441,72298043
114-120	325,48441844	325,48407960	325,48370305	325,48236926	325,48011881
115-120	268,87844388	268,87816396	268,87785290	268,87675108	268,87489201
116-120	213,24842978	213,24820777	213,24796107	213,24708721	213,24561277
117-120	158,56935163	158,56918655	158,56900310	158,56835331	158,56725693
118-120	104,81703321	104,81692409	104,81680283	104,81637330	104,81564858
119-120	51,968110933	51,968056833	51,967996712	51,967783755	51,967424431
122-120	101,38042462	101,38031908	101,38020179	101,37978635	101,37908539
124-120	199,49052743	199,49031975	199,49008897	199,48927148	199,48789217



Tablo 3.3. (Devamı)

<b>SMS</b>					
112-120	134,30148214	134,29985513	134,29844993	134,29557246	134,2926840
114-120	98,95898680	98,95778795	98,95675253	98,95463232	98,95250403
115-120	81,74872823	81,74773787	81,74688253	81,74513105	81,74337289
116-120	64,83519825	64,83441279	64,83373442	64,83234531	64,83095092
117-120	48,21078844	48,21020438	48,20969995	48,20866703	48,20763017
118-120	31,86814829	31,86776222	31,86742878	31,86674600	31,86606062
119-120	15,80017436	15,79998295	15,79981763	15,79947911	15,79913930
122-120	30,82329097	30,82291756	30,82259505	30,82193466	30,82127175
124-120	60,65228223	60,65154745	60,65091284	60,64961336	60,64830892

Tablo 3.3. (Devamı)

<b>FS</b>					
112-120	6293,42835317	6293,43064396	6293,43163538	6293,43210765	6293,42367831
114-120	4647,44841441	4647,45010606	4647,45083819	4647,45118694	4647,44496220
115-120	4127,25078676	4127,25228907	4127,25293925	4127,25324897	4127,24772097
116-120	2974,84483187	2974,84591471	2974,84638334	2974,84660658	2974,84262211
117-120	2416,59482363	2416,59570327	2416,59608396	2416,59626531	2416,59302855
118-120	556,801162952	556,801365624	556,801453334	556,801495122	556,800749347
119-120	909,796775641	909,797106802	909,797250125	909,797318405	909,796099836
122-120	1228,88017717	1228,88062447	1228,88081806	1228,88091028	1228,87926433
124-120	2315,40006750	2315,40091029	2315,40127505	2315,40144880	2315,39834758

Tablo 3.3. (Devamı)

<b>E<sub>katkı</sub> (NMS+SMS+FS)</b>					
112-120	5766,81265759	5766,80646761	5766,80129987	5766,79712225	5766,87654241
114-120	4259,41576865	4259,41121131	4259,40740509	4259,40653816	4259,46253408
115-120	3806,89969580	3806,69886191	3806,69534152	3791,66299082	3791,68509519
116-120	2720,61652902	2720,61351769	2720,61101293	2720,61043968	2720,64741704
117-120	2227,55325873	2227,55110394	2227,54926367	2227,54885275	2227,57607477
118-120	457,628346396	457,627397091	457,626642724	457,626361560	457,639870482
119-120	844,841972953	847,841306387	847,840715080	847,840603763	847,849363063
122-120	1102,34698972	1108,01603770	1107,90491158	1108,01451227	1108,03233997
124-120	2055,25731184	2055,25904309	2055,26027324	2055,26256396	2055,26214649

Tablo 3.4. Nötral kalayın (Sn I) temel hal konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri için relativistik olmayan enerji ( $E_0$ ), relativistik enerji ( $E_{rel}$ ) ve her bir izotoptan ileri gelen izotop katkıları (normal kütle+spesifik kütle+alan kayması) ( $E_{katki}$ ) değerleri (a.b. birimlerinde)

	$^3P_0$	$^3P_1$	$^3P_2$	$^1D_2$	$^1S_0$
112-120	0,0262754877	0,0262754595	0,0262754359	0,0262754169	0,0262757788
114-120	0,0194072936	0,0194072729	0,0194072555	0,0194072516	0,0194075067
115-120	0,0173454822	0,0173445671	0,0173445512	0,0172760903	0,0172761594
116-120	0,0123960202	0,0123960064	0,0123959951	0,0123959924	0,0123961609
117-120	0,0101494624	0,0101494526	0,0101494442	0,0101494423	0,0101495664
118-120	0,0020851047	0,0020851003	0,0020850969	0,0020850956	0,0020851572
119-120	0,0038493768	0,0038630427	0,0038630401	0,0038630395	0,0038630795
122-120	0,0050226542	0,0050484841	0,0050479777	0,0050484771	0,0050485583
124-120	0,0093644256	0,0093644335	0,0093644391	0,0093644495	0,0093644476

Tablo 3.5. Nötral kalayın (Sn I) temel hal konfigürasyonuna ait seviyelerin izotop etkilerinin katıldığı enerji değerlerinin ( $E_{\text{rel}}+E_{\text{katkı}}$ ) ( $\text{cm}^{-1}$  biriminde) mevcut çalışmalarla (NIST; Sharma ve ark.) karşılaştırılması.

	$^3P_0$	$^3P_1$	$^3P_2$	$^1D_2$	$^1S_0$
$E_0$	0,0	0,0	0,0	5831,129	15153,572
$E_{\text{rel}}$	0,0	1408,322	2973,328	8516,881	17870,282
112-120	0,0	1408,316	2973,317	8516,865	17870,346
114-120	0,0	1408,318	2973,320	8516,871	17870,328
115-120	0,0	1408,121	2973,141	8501,651	17855,067
116-120	0,0	1408,319	2973,323	8516,874	17870,312
117-120	0,0	1408,320	2973,332	8516,876	17870,304
118-120	0,0	1408,321	2974,076	8516,878	17870,293
119-120	0,0	1411,322	2976,321	8519,879	17873,289
122-120	0,0	1413,991	2978,886	8522,548	17875,967
124-120	0,0	1408,324	2973,331	8516,886	17870,286
NIST	0,0	1685	3428	8606	17164
Sharma ve ark., 2017	0,0	1605	3411	8275	17365

## BÖLÜM 4. SONUÇ ve ÖNERİLER

Atomik sistemlerde çekirdeğin sonsuz bir nokta yük gibi davranışının dikkate alınmadığı durumlarda relativistik olmayan yaklaşıma bazı ek katkılar gelecektir. Çekirdeğin sonlu kütle ve yük dağılımına sahip olması özellikleri atomik seviyelere ve bu seviyeler arasındaki geçişlere etkisi relativistik etkilere ve elektronlar arası karşılıklı etkileşmelere (korelasyon etkileri) göre küçük olmasına rağmen özellikle yük etkisi ağır atomlarda dikkate alınması gereken bir etkidir. Çekirdek etkileri literatürde kütle etkisi ve alan kayma etkisi olarak incelenmektedir. Genellikle atomik sistemler için yapılan çalışmalarda relativistik olmayan enerji seviyeleri üzerine izotop etkileri çalışılmaktadır.

Nötral kalayın (Sn I,  $Z=50$ ) on doğal izotopu bulunmaktadır. Bu izotopların nötral kalayın seviyeleri üzerine nasıl etki ettiği bu çalışmada amaçlanmıştır. Çalışma sadece  $[Pd]5s^25p^2$  temel hal konfigürasyonuna ait seviyeler üzerine kısıtlanmıştır. Nötral kalayın temel hal seviyelerine izotop etkilerinin dikkate alınmasından önce Breit-Pauli hamiltonyeni çerçevesinde relativistik etkiler hesaplandı ve daha sonra bu ince yapı seviyeleri üzerine izotop etkileri (ya da çekirdek etkileri) incelendi. Sn I'in atomik yapı özellikleri ile ilgili çalışmalar olmasına rağmen izotop etkilerinin dikkate alındığı bir çalışmaya rastlanmamıştır. Sn I ikinci ağır karbon grubu elementi olması nedeni ile seviyelerde bu izotop etkilerinin ne kadar etkili olduğunun bilinmesi önemlidir. Relativistik katkılara göre izotop etkilerinin daha küçük olduğu gözlenmiştir. Fakat bu elde edilen veriler nötral kalay için diğer atomik özelliklerin (özellikle seviyeler arası izinli ve yasaklı geçişler için) belirlenmesine katkı yapacaktır.

## KAYNAKLAR

- Adelman, S., Bidelman, W. P., Pyper, D. 1979. The peculiar a star gamma Equulei - a line identification study of lambda lambda 3086-3807. *Astrophys. J. Suppl.*, 40, 371.
- Allen, M. S. 1978. Tin in the ultraviolet solar spectrum. *The Astrophysical Journal*, 219, 307–313.
- Aufmuth, P., Heilig, K., Steudel, A. 1987. Atomic data and nuclear data tables. Vol. 37, No. 3.
- Bieron, J. R., Marcinek, R., Migdaek, J., 1991. Relativistic oscillator strengths for the np<sup>2</sup>-np (n+1)s transitions, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 24, 31–43.
- Bransden, B. H., Joachain, C. J., 1999. Atom ve molekül fiziği, Çevirenler: Köksal, F., Gümüş, H., Bilim yayıncılık, Ankara, 1-687.
- Drake, Gordon W. F. 2005. Springer handbook of atomic, molecular, and optical physics, 307-315.
- Fischer, C.F., Smentek-Mieleczarek, L., Vaeck, N., Miecznik, G. 1993. A Program to compute isotope shift in atomic spectra, *comp. phys. comm.*, 74, 415-431.
- Fischer, C.F., Brage, T., Jönsson, P. 1997. Computational atomic structure-an MCHF approach, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, England and USA.
- Fischer, C.F. 2000. The MCHF atomic-structure package, *Comp. Phys. Commun.*, 128, 635.
- Fontana, P., Meathe, W. 1968. *Journal of mathematical physic.* 9, 9, 1357.
- Gorshkov, V. N., Verolainen, Y. F. 1985. Radiative lifetimes of Sn I and Sn II excited states. *Opt. Spectrosc.*, 59, 694.
- Karaoğlu, B. 2008. Kuantum mekaniğine giriş. 6.Baskı, Şeçkin Yayıncılık, Ankara, 1-279.
- Kramida, A., Ralchenko, Y., Reader, J., NIST ASD Team (2015). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.3), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2017, May 18]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

- Kieft, E. R., van der Muller, J.J.A.M., Kroesen, G.M.W., Banine, V., Koshelev, K. W. 2004. Star broadening experiments on a vacuum arc discharge in tin vapour, physical review E 70 (066402) 8 pp.
- Kieft, E. R., van der Muller, J.J.A.M., Kroesen, G.M.W., Banine, V., Koshelev, K. W. 2005. Characterization of a vacuum arc discharge in vapour using time-resolved plasma imaging and extreme ultraviolet spectrometry, physical review E 71 (026409) 7 pp.
- King, W.H. 1984. İso-top shift in atomic spectra. Plenum Press. New York.
- Miller, M. H., Roig, R. A., Bengtson, R. D. 1979. Experimental transition probabilities and Stark broadening parameters of neutral and singly ionized tin, physical review A 20, 499–506.
- Oliver, P., Hibbert, A. 2008. Energy level classifications and Breit–Pauli oscillator strengths in neutral tin, Journal of Physics B: Atomic, molecular and optical physics 41 (1165003) 13 pp.
- Sharma, L., Bharti, S. ve Srivastava, R. 2017. Electron impact excitation of tin, Eur. Phys. J. D., 71, 121.
- Tuna, Ş., 2014. Yarı dolu p tabakalı bazı atomların ve negatif iyonlarının izotop kayma hesaplamaları. Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, Yüksek Lisans Tezi.
- Zengin, M. D., Aygün, E. 2009. Atom ve molekül fiziği, Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, Bilim Yayınları, Ankara, 1-273.



## ÖZGEÇMİŞ

Muhammed Serkan Şadođlu, 12.09.1989'da İstanbul'da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini İstanbul'da tamamladı. 2007 yılında Şişli Teknik Lisesi'nden mezun oldu. 2007-2009 yıllarında İstanbul Üniversitesi Elektronik Teknolojisi bölümünde okudu. 2011 yılında başladığı Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nü 2014 yılında bitirdi. 2014 yılında Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nde yüksek lisans eğitimine başladı. Halen Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nde yüksek lisans eğitimine devam etmektedir.