

T.C.  
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**$p^3$  VE  $d^5$  TABAKALI BAZI ATOMLARIN  
SPEKTRUMLARININ MCHF YÖNTEMİ İLE  
İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Selda KABAKÇI**

**Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK**

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

**Haziran 2011**

T.C.  
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

$p^3$  VE  $d^5$  TABAKALI BAZI ATOMLARIN  
SPEKTRUMLARININ MCHF YÖNTEMİ İLE  
İNCELENMESİ

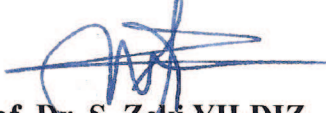
YÜKSEK LİSANS TEZİ

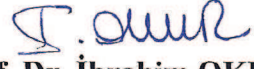
Selda KABAKÇI

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 24/06/2011 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.

  
Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR  
Jüri Başkanı

  
Prof. Dr. S. Zeki YILDIZ  
Üye

  
Prof. Dr. İbrahim OKUR  
Üye

## ÖNSÖZ

Bu çalışmada, yarı dolu p tabakalı nötral azot (N I) ve fosfor (P I) ve yarı dolu d tabakalı mangan (Mn I) için seviye yapıları çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock-MCHF) yöntemi ile incelendi. Bu atomlar için uyarılma enerjileri ve düşük seviyeler arasında elektrik dipol geçiş parametreleri hesaplandı.

$p^3$  ve  $d^5$  tabakalı bu atomların spektrumlarının incelenmesi konusundaki çalışmamın seçimi, planlanması ve yürütülmesi süresince bana yardımcı olan, yol gösteren bilgi birikimi ve yardımlarını benden esirgemeyen değerli hocam Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR'e teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışmanın hazırlanma sürecinde, edindikleri tecrübe ve bilgi birikimiyle katkıda bulunan, motivasyonumu hep yüksek tutmamı sağlayan hocalarım Arş. Gör. Dr. Betül KARAÇOBAN'a ve Arş. Gör. Dr. Güldem ÜRER'e teşekkür ederim.

Ayrıca, bir insan başka biri için bu kadar fedakarlığı nasıl yapar dediğim ve bunun cevabının 'Annelik' olduğunu düşündüğüm anneme ve her zaman arkamda duran, ayağım takılsa ben buradayım diye kendini hissettiren babama her sıkıntılı anımda ve bu stresli süreç içerisinde sonsuz şefkatli yürekleriyle beni sardıkları, beni bugünlere getirdikleri, maddi ve manevi olarak hep yanımda oldukları için çok teşekkür ederim.

Bu çalışma SAÜ Bilimsel Araştırma Projeleri Komisyonu tarafından desteklenmiştir (Proje no: 2011-50-01-012).

## İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	vi
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	viii
TABLolar LİSTESİ.....	ix
ÖZET.....	x
SUMMARY.....	xi
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
1.1. Nötral Azot'un (N I) Spektrum Çalışmaları.....	2
1.2. Nötral Fosfor'un (P I) Spektrum Çalışmaları.....	5
1.3. Nötral Mangan'ın (Mn I) Spektrum Çalışmaları.....	8
BÖLÜM 2.	
HESAPLAMA YÖNTEMLERİ.....	11
2.1. Hartree-Fock problemi.....	11
2.1.1. Bireysel spin fonksiyonları ve Slater determinantı.....	12
2.1.2. Değişim (varyasyon) yöntemi.....	14
2.1.3. Yaklaşık değişim çözümleri.....	16
2.1.4. Matris özdeğer denklemi.....	17
2.2. Elektronlar Arası Karşılıklı etkileşme (Korelasyon).....	18
2.3. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock Yöntemi (relativistik olmayan durumlarda).....	19
2.4. Relativistik Etkiler ve Breit-Pauli Hamiltonyeni.....	24
2.5. Enerji Seviyeleri Arasındaki Geçişler.....	29

2.5.1. Geçişler ve geçiş özellikleri.....	29
2.5.2. Kesin ve yaklaşık seçim kuralları.....	32
2.6. MCHF Yöntemi ile Hesaplama Adımları.....	33
2.6.1. MCHF atomik yapı paketi.....	33
2.7. MCHF Atomik Yapı Paketinde Hesaplama Adımları.....	35
2.7.1. Konfigürasyon hal fonksiyonlarının üretilmesi.....	36
2.7.2. Relativistik olmayan hamiltonyenin açısıl integrallerinin hesaplanması.....	36
2.7.3. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemiyle hesaplama (MCHF) .....	37
2.7.4. Breit-Pauli Hamiltonyeninin açısıl integrallerinin hesaplanması .....	37
2.7.5. Konfigürasyon etkileşmesinin hesaplanması (CI) .....	38
2.7.6. Geçiş işlemcileri için açısıl integrallerin hesaplanması (MLTPOL).....	38
2.7.7. MCHF dalga fonksiyonlarından LSJ geçişlerinin hesaplanması (LSJTR).....	39

### BÖLÜM 3.

SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR.....	40
3.1. Nötral Azot (N I) için Hesaplama Sonuçları.....	41
3.1.1. N I'in seviye enerjileri.....	41
3.1.2. N I'de elektrik dipol geçişleri.....	51
3.1.2.1. N I'de 2p–3s geçişleri.....	51
3.1.2.2. N I'de 3s–3p geçişleri.....	54
3.1.2.3. N I'de 2s–2p geçişleri.....	57
3.2. Nötral Fosfor (P I) için Hesaplama Sonuçları.....	58
3.2.1. P I'in seviye enerjileri.....	58
3.2.2. P I'de elektrik dipol geçişleri.....	67
3.2.2.1. P I'de 3p–4s geçişleri.....	67
3.2.2.2. P I'de 4s–4p geçişleri.....	70
3.2.2.3. P I'deki 3s–3p geçişleri.....	72

3.3. Nötral Mangan (Mn I) için Hesaplama Sonuçları.....	74
3.3.1. Mn I'in seviye enerjileri.....	75
3.3.2. Mn I'de elektrik dipol geçişleri.....	79
KAYNAKLAR.....	86
ÖZGEÇMİŞ.....	94

## SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

CA	: Coulomb Yaklaşıklığı (Coulomb Approximation)
CI	: Konfigürasyon Etkileşmesi (Configuration Interaction)
CSF	: Konfigürasyon Hal fonksiyonu (Configuration State Function)
D1	: Bir-Cisim Darwin Terimi (One-Body Darwin Term)
D2	: İki-Cisim Darwin Terimi (Two-Body Darwin Term)
EUV	: Uzak Mor ötesi
GRASP	: Genel Relativistik Atomik Yapı Paketi (General Relativistic Atomic Structure Package)
HF	: Hartree-Fock
HFR	: Relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock)
IC	: Ara Çiftlenim (Intermediate Coupling)
IR	: Kızılötesi (Infrared)
MC	: Kütle Düzeltmesi (Mass Correction)
MCDF	: Çok Konfigürasyonlu Dirac-Fock (Multiconfiguration Dirac-Fock)
MCHF	: Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
MC-SCF	: Çok Konfigürasyonlu Özuyumlu Alan (Multiconfiguration Self-Consistent Field)
NCA	: Sayısal Coulomb Yaklaşımı (Numerical Coulomb Approach)
NIST	: Ulusal Standartlar ve Teknoloji Enstitüsü (National Institute of Standards and Technology)
NR	: Relativistik Olmayan (non-Relativistic)
OO	: Yörünge-Yörünge Terimi (Orbit-Orbit Term)
RS	: Relativistik Kayma (Relativistic Shift)
SO	: Çekirdek Spin-Yörünge Terimi (Spin-Orbit Term)
SOO	: Spin-Diğer Yörünge Terimi (Spin-Other Orbit Term)
SS	: Çekirdek Spin-Spin Terimi (Spin-Spin Term)
SSC	: Spin-Spin Terimi (Spin-Spin Contact Term)

SST : SUPERSTRUCTURE  
SUMER : UV Spektrometresi  
UV : Morötesi (ultraviolet)



## ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1.	Konfigürasyon hal fonksiyonlarının üretilmesi.....	36
Şekil 2.2.	Relativistik olmayan Hamiltonyenin açısai integrallerinin hesaplanması.....	37
Şekil 2.3.	Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock programı.....	37
Şekil 2.4.	Breit-Pauli Hamiltonyeninin açısai integrallerinin hesaplanması	38
Şekil 2.5.	Konfigürasyon etkileşmesinin hesaplanması.....	38
Şekil 2.6.	Geçiş işlemcileri için açısai integrallerin hesaplanması.....	38
Şekil 2.7.	MCHF dalga fonksiyonlarından LSJ geçişlerinin hesaplanması...	39

## TABLolar LİSTESİ

Tablo 3.1.	Nötral azot (N I) için E (cm <sup>-1</sup> ) enerji seviyeleri.....	42
Tablo 3.2.	N I'e ait 2p–3s elektrik dipol (E1) geçişleri için $\lambda$ dalga boyları (Å), log( <i>gf</i> ) logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A <sub>ki</sub> geçiş olasılıkları (sn <sup>-1</sup> ).....	52
Tablo 3.3.	N I'e ait 3s–3p elektrik dipol (E1) geçişleri için $\lambda$ dalga boyları (Å), log( <i>gf</i> ) logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A <sub>ki</sub> geçiş olasılıkları (sn <sup>-1</sup> ).....	54
Tablo 3.4.	N I'e ait 2s–2p elektrik dipol (E1) geçişleri için $\lambda$ dalga boyları (Å), log( <i>gf</i> ) logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A <sub>ki</sub> geçiş olasılıkları (sn <sup>-1</sup> ).....	57
Tablo 3.5.	Nötral fosfor (P I) için E (cm <sup>-1</sup> ) enerji seviyeleri.....	59
Tablo 3.6.	P I'e ait 3p–4s elektrik dipol (E1) geçişleri için $\lambda$ dalga boyları (Å), log( <i>gf</i> ) logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A <sub>ki</sub> geçiş olasılıkları (sn <sup>-1</sup> ).....	68
Tablo 3.7.	P I'e ait 4s–4p elektrik dipol (E1) geçişleri için $\lambda$ dalga boyları (Å), log( <i>gf</i> ) logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A <sub>ki</sub> geçiş olasılıkları (sn <sup>-1</sup> ).....	70
Tablo 3.8.	P I'e ait 3s–3p elektrik dipol (E1) geçişleri için $\lambda$ dalga boyları (Å), log( <i>gf</i> ) logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A <sub>ki</sub> geçiş olasılıkları (sn <sup>-1</sup> ).....	73
Tablo 3.9.	Nötral mangan (Mn I) için E (cm <sup>-1</sup> ) enerji seviyeleri.....	76
Tablo 3.10.	Mn I'e ait elektrik dipol (E1) geçişleri için $\lambda$ dalga boyları (Å), log( <i>gf</i> ) logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A <sub>ki</sub> geçiş olasılıkları (sn <sup>-1</sup> ).....	80

## ÖZET

Anahtar kelimeler: MCHF yöntemi, seviye enerjileri, Breit-Pauli relativistik düzeltmeler, dalga boyları, ağırlıklı salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları.

Bu çalışmada, konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden biri olan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock-MCHF) yaklaşığı kullanılarak yarı dolu p ve d tabakalı bazı atomların seviye yapıları incelenmektedir. Bunun için  $np^3$  tabakalı nötral azot (N I) ve fosfor (P I) (azot için  $n=2$ , fosfor için  $n=3$ ) ve  $3d^5$  tabakalı nötral mangan (Mn I) için seviye enerjileri ve düşük seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları, ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplanmaktadır. Bu hesaplamalarda elektronlar arası karşılıklı etkileşme ve Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri dikkate alınmaktadır.

Birinci bölümde, N I, P I ve Mn I atomları ile ilgili yapılmış çalışmalar, ikinci bölümde, MCHF yöntemi, Breit-Pauli relativistik düzeltmeler ve seviyeler arasındaki geçişler hakkında bilgiler verilmektedir. Son bölümde de elde edilen sonuçlar tablolar halinde sunulmakta ve diğer çalışma sonuçları ile karşılaştırılmaktadır.

# INVESTIGATION OF THE SPECTRA FOR SOME ATOMS OF $p^3$ AND $d^5$ SHELL USING MCHF METHOD

## SUMMARY

Key Words: MCHF method, energy levels, Breit-Pauli relativistic corrections, wavelengths, weighted oscillator strengths, transition probabilities.

In this study, the level structures of some atoms with half-filled p and d shell have been investigated using the multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF) method. Therefore, the level energies and the electric dipole transitions parameters such as wavelengths, weighted oscillator strengths and transition probabilities between low-lying levels for neutral nitrogen (N I) and phosphorus (P I) of  $np^3$  shell ( $n=2$  for nitrogen and  $n=3$  for phosphorus), and neutral manganese (Mn I) of  $3d^5$  shell have been calculated. In these calculations, the correlation and Breit-Pauli relativistic corrections have been also considered.

In the first chapter, previous works on N I, P I and Mn I in the literature have been given. Second chapter deals with the concept of MCHF method, Breit-Pauli relativistic corrections, and the transitions between levels. In the last chapter, the obtained results have been presented in tables and compared with other works.

## BÖLÜM 1. GİRİŞ

Bilimsel çalışma alanlarının birçoğunda atomik verilere gereksinim duyulmaktadır. Atomik veriler, astrofiziksel plazmalarda sıcaklık, yoğunluk ve bolluk gibi fiziksel süreç ve şartların çalışılmasında önemlidir. Enerji seviye yapıları, kendiliğinden iyonlaşma hızları, iyonlaşma, uyarılma tesir kesitleri, yük değişimi ve kontrollü termonükleer fisyonlar için yapılan model hesaplamalarında atomik verilere ihtiyaç duyulmaktadır. Oldukça duyarlıklı veriler kaydeden Hubble Uzay Teleskop'u ile elde edilen verilerin yorumu ve analizleri için daha doğru teoriksel hesaplamalar gerekmektedir. Lazer teknolojisinin gelişimi için lazer araştırmasında geçiş verileri ve enerji seviyelerine de gereksinim vardır. Çünkü atomlar katıların ve moleküllerin yapı taşlarıdır ve atomların çalışılmasında elde edilen bilgi metallere, yüzeyler ve diğer çok elektronlu sistemlere aktarılabilir. Astrofiziksel objelerin kimyasal analizindeki gelişmeler, tuhaf yıldızların ve bulanık gezegenlerin spektrumlarında atomik çizimleri daha detaylı ortaya koymaktadır. Fakat yine de, gerekli olan veriler genellikle hesaplama yoluyla belirlenebilmektedir. Çünkü çoğu atomlar için deneysel çalışmalar zor olmakta ve bu nedenle gözlemlerin yorumlanmasında teorik çalışma sonuçlarına ihtiyaç oldukça fazladır.

Yarı dolu bir tabaka, hallerin en geniş sayısına sahiptir.  $N$  tane elektrona sahip elektronik tabaka,  $N$  tane boşluk ya da  $4l+2-N$  tane elektrona sahip tabaka ile ilişkilidir. Elektron-boşluk simetrisine,  $l^{2l+1}$  şeklinde doluluk-boşluk simetrisine sahiptir. Kendi simetrisi sonucunda böyle bir tabakanın dalga fonksiyonu iki sınıfa ayrılabilir ve tekli elektron operatörlerinin matris elemanları için ek seçim kuralları ortaya çıkar.  $l^{2l+1}$  tabakasının bu özellikleri yarı spinli uzay ve karşılık gelen işlemciyi kullanarak ortaya çıkar.

Temel seviyeden uyarılmış  $l^{2l+1}$  tabakalı atomların spektrumlarının bazı basit özellikleri, sıfır yörünge momentumu ile ve spin-kutuplu model yaklaşımının geçerliliği ile belirlenir. Özdeş elektronlu tabaka, aşağı ve yukarı spin yönelimleriyle iki alt tabakaya bölünebilir. Genellikle bu çok doğru değildir. Fakat dolu bir tabakada yapıldığı gibi, yarı dolu bir tabakanın oluşumuna başarıyla uygulanabilir. Yarı dolu tabakalı atomların çeşitli spektrumları dikkate alınarak (özellikle fotoelektron ve fotoabsorbsiyon ile elde edilen) tekli-konfigürasyon yaklaşıklığından hesaplanan sonuçlar ile deneysel olarak elde edilen veriler arasında oldukça iyi bir uyum elde edilir. Ancak yine de  $p^3$ ,  $d^5$  ve  $f^7$  tabakalı atomların belirli özellikleri genellikle dikkate alınmaz ve bunların spektrumları sadece komşu elementler için yapılan sayısal hesaplamalar kapsamında dikkate alınır. Tek konfigürasyon modelinin geçerliliği yarı dolu bir tabakanın kararlılığı ile oldukça iyi bir şekilde açıklanır [1].

Bu çalışmada, konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden biri olan ve Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri içeren MCHF yaklaşıklığı [2] ile nötral azotun, nötral fosforun ve nötral manganın seviye yapılarına ait bazı atomik özellikler incelenmektedir. MCHF atomik yapı paketini [3] kullanarak ve çeşitli konfigürasyon seçimleri yaparak seviye enerjileri, dalga boyları, ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplanmaktadır. Nötral azot ve nötral fosfor için dört farklı konfigürasyon seti, nötral mangan için üç farklı konfigürasyon seti seçilerek yapılan değişik hesaplama sonuçlarının yorumlanması, benzer verileri içeren diğer teorik, deneysel çalışma sonuçları ve NIST (National Institute of Standards and Technology-Ulusal Standartlar ve Teknoloji Enstitüsü) [4] ile beraber yapılmaktadır.

### 1.1. Nötral Azot'un (N I) Spektrum Çalışmaları

N I'in seviye yapısına ait bilgiler (güvenilir geçiş olasılıkları ve elektron uyarılmalarına ait veriler), yere ve uzaya dayalı gözlemlerle elde edilen gezegen ve yıldız atmosferine ait spektrumların yorumlanması ve analizi için önemlidir. Spektral çizgilerin yoğunlukları, düşük sıcaklıklı plazmaların teşhisi amacıyla geniş ölçüde uygulanmaktadır. Elektriksel deşarjların alevlerinden ve değişik çeşitlikteki astrofiziksel nesnelere kadar olan pek çok plazma kaynaklarında, atomik (nötral) azot

mevcuttur. Bu nedenle, sıcaklık belirleme için nötral azotun güvenilir geçiş olasılıkları bilgisine ihtiyaç vardır.

Son yıllarda, atomik azotun çizgi şiddetlerini içeren geçiş verileri ile ilgili deneysel ve teorik çalışmalar yayınlanmıştır. Bu tür atomik verilerin doğru bilgisi, oldukça önemlidir. Örneğin, astrofiziksel objelere ait çalışmalar ve laboratuvar plazmalarının teşhisi için gereklidirler. N I'in çizgi şiddetlerinin geniş hesaplama sonuçları verilmektedir [5–7]. Yine, daha az sayıda veriler sunan çalışmalar da vardır [8–10].

Azot ve benzer elektronik dizilişe sahip atomların ince yapı enerji seviyeleri için deneysel gözlemler [11, 12] ve teorik hesaplamalar [13] yapılmıştır. Titan atmosferinin (Jüpiter'in uydusu) Voyager EUV yayınlanma spektrumunda 1134–1493 Å arasında çeşitli dalga boylarında N I'in emisyon çizgileri [14, 15] ve Noval Araştırma Laboratuvarı'nda güneş diski (halkası) spektrumunda 1134 Å ve 1164–1170 Å aralığında  $2s^22p^3-2s^22p^23d$ 'ye ait çeşitli çokluklar gözlemlendi [16].  $2s^22p^3^4S^0 - 2s2p^4^4P$  çokluklu çizgiler EUV spektrometre SUMER [17, 18] ile güneş taçı spektrumunda gözlemlendi.  $2s^22p^3^4S^0 - ^2D^0$  yasak geçiş nedeniyle N I'in 5200, 1200 ve 1135 Å çizgili ve  $2s^22p^3^4S^0 - 2s^22p^23s^4P$  rezonansı ve  $2s2p^4^4P$  geçişleri dünyanın üst atmosferinde gözlemlendi. Baclowski, Wujec ve Musielok atomik azotun belirgin çokluklarının hesaplama sonuçlarını ark emisyon ölçümleri ile karşılaştırarak onbir kızılötesi çokluğun şiddetlerini ölçtüler ve kararlı ark sıcaklık değerleri uygulayarak çoklu güç değerlere dönüştürdüler [19]. Baclowski ve Musielok, astrofiziksel spektrum analizinde önemli rol oynayan bazı seçilmiş kızılötesi geçişler üzerinde çalıştılar [20]. Emisyon yöntemini kullanarak  $3s-np$  ( $n=3, 4, 5$ ) geçiş dizilerinden kaynaklanan 15 çokluğa ait nötral azotun 60 spektral çizgisinin şiddetlerini ölçtüler [21]. Boltzman uyarılma enerjilerinde oldukça önemli olan yayılma seviyelerinden kaynaklanan ark plazmalarının sıcaklıklarını belirlediler [22]. Bridges ve Wiese nötral azotun bazı güçlü ve zayıf olan  $3s-3p$  ve  $3p-3d$  çizgileri için bağıl atomik geçiş olasılıklarını ölçtüler [23]. Uyarılma enerjileri ve salıncı şiddetlerinin CI (Configuration Interaction-konfigürasyon etkileşim) hesaplamaları yapılmıştır [8, 10, 24, 25]. Hibbert ve çalışma arkadaşları [8], dörütlü ve ikili simetri halleri arasında bir dizi dipol izinli çizgiler arası geçişler için salıncı şiddetini rapor ettiler. Ayrıca, Tong ve çalışma arkadaşları [25], dörütlü simetrilerin düşük çizgi halleri arasında izinli

dipol geçişlerinin salıncı şiddetlerini verdiler. Robinson ve Hibbert [10],  $2s^22p^34s^0-2s2p^44P$ ,  $2s2p^44P$ ,  $2s^22p^24s4P$  ve  $2s^22p^23d4P$  geçişlerinin salıncı şiddetlerini hesaplamak için ortogonal olmayan orbitaller tekniğini kullandılar. Bell ve Berrington [26], bu geçişler için salıncı şiddetlerini R-matris yöntemini kullanarak elde ettiler. Elektron etkisi ve uyarılması ile elde edilen, çeşitli izinli ve yasak geçişlere ait tesir kesitleri verileri R-matris yöntemi kullanılarak elde edildi [27–29]. Çelik ve Ateş nötral azotun bazı uyarılmış p–d ve d–p geçiş dizileri ile s–p ve p–s geçiş dizileri için geçiş olasılıklarını zayıf bağlanmış elektron potansiyel modeli teorisini kullanarak yarıçapın beklenen değerlerinin etkisinin araştırılması için hesapladılar [30, 31]. Yarıçapın beklenen değerlerinin hesaplanması için hem sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA- Numerical Coulomb Approach) dalga fonksiyonları hem de sayısal relativistik olmayan Hartree-Fock dalga fonksiyonlarını kullandılar. Wiese ve Fuhr nötral ve bir kez iyonlaşmış karbon ve azotun önemli çizgileri için geçiş olasılıkları hesaplamalarını ve bunların değerlendirmesini MCHF yöntemini kullanarak yaptılar [32]. Garcia, Kollman ve Witthoeft, hem radyasyon hem de K tabakasının difüzyonuna yol açan Auger geçişini dikkate alarak Breit-Pauli R-matris yöntemi ile fotoabsorbsiyon hesabı yaptılar [33]. Wang ve çalışma arkadaşları tarafından, GRASP (General Relativistic Atomic Structure Package-Genel relativistik atomik yapı paketi) kodu ile yapılan kuantum elektrodinamik düzeltmeler ile relativistik konfigürasyon etkileşim yöntemi ve çok konfigürasyonlu Dirac-Fock öz-uyumlu alan yöntemini kullanarak atom numarası 22’den büyük olan Z’li atomlar için LS çiftlenim modeline göre azota benzer elektronik dizilişe sahip  $1s^22s^22p^3$  temel hal konfigürasyonunun ince yapı enerji seviyelerini hesapladılar [34].

Bu çalışmada, N I için birinci hesaplamada; tek parite için  $2s^22p^3$ ,  $2s^22p^2np$  (n=3-7),  $2s^22p^24f$ ,  $2s2p^33s$  ve çift parite için  $2s^22p^2ns$  (n=3-7),  $2s2p^4$ ,  $2s^22p^2nd$  (n=3-6), ikinci hesaplamada; tek parite için  $2s^22p^3$ ,  $2s^22p^2np$  (n=3-6),  $2s^22p^2nf$  (n=4,5) ve çift parite için  $2s^22p^2ns$  (n=3-6),  $2s2p^4$ ,  $2s^22p^2nd$  (n=3,4), üçüncü hesaplamada; tek parite için  $2p^3$ ,  $2p^2np$  (n=3-5),  $2p3p^2$ ,  $2p^2nf$  (n=4,5) ve çift parite için  $2s^22p^2ns$  (n=3,5),  $2s2p^4$ ,  $2s^22p^2nd$  (n=3,4), dördüncü hesaplamada; tek parite için  $2p^3$ ,  $2p^2np$  (n=3-5),  $2pnp^2$  (n=3-5),  $2p^2nf$  (n=4-6) ve çift parite için  $2s^22p^2ns$  (n=3,5),  $2s2p^4$ ,  $2s^22p^2nd$  (n=3,4) konfigürasyon setleri kullanılarak seviyelere ait enerji değerleri hesaplandı. Bu konfigürasyon takımlarına göre yapılan hesaplamalar sırasıyla A, B, C, ve D olarak



belirtilmektedir. Ayrıca  $2p-3s$ ,  $3s-3p$  ve  $2s-2p$  elektrik dipol (E1) geçişlerine ait geçiş olasılıkları, dalga boyları ve ağırlıklı salınıcı şiddetleri de hesaplanmaktadır.

## 1.2. Nötral Fosfor'un (P I) Spektrum Çalışmaları

Elektronların karşılıklı etkileşimi (korelasyonu) ve çiftlenim etkileri nedeniyle açık tabakalı iyon ve atomların son yıllardaki fotoabsorpsiyon çalışmalarındaki artışa paralel olarak, atomik fosforun fotoiyonlaşma çalışması dinamik etkilerin anlaşılmasında önemli bilgi sağlamaktadır. Fosforun fotoiyonlaşma tesir kesiti, yıldız içi ve galaksi içi gazların metal verimliliği analizi için yerel olmayan termodinamik dengede gereklidir. Fosforun kızılötesi ve uzak morötesi bölgesinde bazı çizgileri rapor edildi [35]. Galaksi içi gazdaki materyalin kompozisyonu, iyonlaşması ve dağılımı galaksi oluşumu ve gelişiminin anlaşılması için önemlidir. Atomik fosforun deneysel foto iyonlaşması Berkowitz ve arkadaşları tarafından elde edildi [36]. Yine Mendoza ve Zeippen atomik fosforun temel halinin fotoiyonlaşma tesir kesitlerini hesapladılar [37].

Atomik temel hal seviyeleri kararlılıkları nedeniyle standart atomik yapı teknikleri ile iyi belirlenir. Bu beklenti daha çok düşük ve artan Z-değerlikli elementlerin temel hal enerjilerinin hesaplanmasında geçerlidir. Atomik fosforun bir dizi spektral çizgisi astrofiziksel objelerde (örneğin, yıldız bulutlarında, tabakalarında ve güneş fotosferinde) gözlenmektedir. Astrofiziksel olarak gözlenen fosfor çizgilerinin salınıcı şiddetleri bu objelerdeki fosfor verimliliğini belirlemek için gereklidir. Çizgilerle bu tür belirlemeler, teoriksel olarak elde edilen verilere dayanmaktadır. Çünkü deneysel sonuçlar oldukça eksik ya da çoğu belirsizdir. Fosfor atomunun spektroskopik incelemeleri, element molekül olarak buharlaştığından ve rezonans spektral çizgileri VUV bölgesinde yerleştiğinden zordur. Ayrıca, yaygın olarak kullanılan termal buharlaşma ve difüzyon yöntemleri farklı yapısal formlar arasındaki geçişler ve sıvı hale geçmeksizin katıdan gaza doğrudan geçişi kontrol altında tutmak pratikte imkansızdır.  $3p-4s$  rezonans geçişi deneysel olarak elektron uyarma ve faz kayma teknikleri kullanılarak elde edilmiştir [38]. Güneş fotosferinin spektrumunda gözlenen  $4s-4p$  çizgilerinin geçiş olasılıkları deneysel ve teoriksel olarak incelenmiştir.

Nötral fosfor, lazer alanlarındaki çalışmalarda da ilgi çekmektedir. Bu nedenle tam ve güvenilir atomik özellikler hakkındaki bilgi önemlidir. Atomik tesir kesitleri ve bir gazda elektron enerji depolama gibi uygulamalı atom fiziğindeki problemler için giriş verisi olarak gereklidir. Böyle elastik ve elastik olmayan tesir kesitleri gibi problemlerde (uyarılma, iyonlaşma, difüzyon, çoklu iyonlaşma vs.) gereklidir. Atomik tesir kesitleri hakkında çok az deneysel bilgi vardır ve sonuçta işin çoğu teoriye düşmektedir.

Atomik fosforun spektrumu ilk kez Veseth tarafından incelenmiştir [39]. Daha sonra, Kiess, Robinson, Martin, Svendenius, Svendenius ve Verges tarafından yapılan gözlem ve analizler ile  $3s3p^4$  ve  $3s^23p^2nl$  ( $nl = 9s, 6p, 9d, 9f, 6g$ ) seviyeleri belirlendi [40–44]. Carrol ve arkadaşları N I'deki  $2s^22p^3(^5S)np^4P$  serisine benzeyen serileri gözlemlədiler [45]. Mitchell, Carroll ve Kampen  $3s3p^3(^5S)np^4^4P$  ( $5 \leq n \leq 14$ ) geçişlerini bildirdiler [46]. Nötral fosfor UV (ultravioleto-morötesi)'den IR (infrared-kızılötesi)'ye kadar geniş bir aralıkta bir dizi astrofiziksel anlamda ilginç çizgiler sergiler.  $3p-4s$  geçişleri yıldız bulutları ve tabakalarında gözlemlendi [47].  $4s-4p$  çizgileri de yakın IR bölgesinde, güneş fotosferinde bulunmaktadır [48, 49]. Fosfordaki enerji seviyelerine ait bir derleme Martin ve çalışma arkadaşları tarafından yapıldı [50]. Güneşe ait çizgilerin geniş bir listesi de Swensson tarafından yayınlandı [51]. Salıncı şiddetleri ( $^3P)nl - (^3P)n'l'$  geçişleri için [45, 49] ve  $3p^3^4S - 4s^4P$  geçişleri için [52] Coulomb yaklaşıklığında (CA-Coulomb Approximation) hesaplandı.  $3s^23p^n-3s3p^{n+1}$  geçişleri genelleştirilmiş hidrojenik yörüngeler yardımıyla Kuplyauskis ile Kupliauskene tarafından ve ara çiftlenim modeli kullanılarak ve ayrıca Aymar tarafından incelendi [53, 54]. Svendenius ve arkadaşları ile Martin ve çalışma arkadaşları  $3s3p^3^5S^2$  seviyesinin P II'nin temel hali olduğunu buldular [55, 50]. Teorik olarak relativistik olmayan HF hesaplamaları için Cowan kodlarını kullanarak  $3s3p^4$  ve  $3s3p^3np$  ( $4 \leq n \leq 16$ ) uyarılmış hal konfigürasyonları hesaplandı [56]. Martin, Zalubas ve Musgrove enerji seviyeleri ve IP değerlerini derlediler [57]. Fawcett'in relativistik Hartree – Fock hesaplamaları ikiden daha fazla olan çokluklar için bilgi vermektedir [58]. Hibbert yarı ömür hesaplamasında gerekli olan teoriksel inceliği tartıştı [59]. Livigston ve çalışma arkadaşları BF (beam-foil) yarıömürlerini hesapladılar [60]. Savage ve Lawrence'in faz kayması yarı ömürleri ve Curtis ile çalışma arkadaşlarının BF sonuçları kabul

edilen hesaplamalardan oldukça farklıdır [61, 62]. Froese Fischer, Na benzeri atomlar ( $Z = 11, \dots, 26$ )'dan Ar benzeri atomlara ( $Z = 18, \dots, 30$ ) kadar tüm atomların seviyeler arasındaki geçişler için geçiş olasılıkları, yarıömürler ve enerji seviyelerini belirledi [63]. Geçişlerin enerjileri için QED katkıları ( $n, l = n-1, 2 \leq n \leq 13$ ) Santos ve çalışma arkadaşları tarafından mevcut dünya ortalama kaon kütlesi kullanılarak periyodik tablo boyunca bazı kaonik atomlar için hesaplandı [64]. Rodrigues ve çalışma arkadaşları Lityumdan (3 elektron) Dubnium'a (105 elektron) kadar benzer elektronik dizilişe sahip seriler için Dirac–Fock yaklaşımında atomik bağlanma enerjilerinin sistematik bir çalışmasını sundular [65]. Tayal,  $3s^23p^3 - 4S^0$  temel durumundan  $3p$  ya da  $3s$  elektronunu fırlatmak için atomik fosforun fotoiyonlaşmasındaki rezonans yapılarını ve uyarılmış yarı kararlı  $^2D^0$  ve  $^2P^0$  durumlarını R-matris yaklaşımı ile inceledi [66]. Fritzsche, doğal fosfor benzeri iyonlar için  $3s^23p^3$  temel hal seviyeleri arasındaki yasak geçişleri araştırmak için, sistematik olarak büyütülmüş çok konfigürasyonlu Dirac-Fock (MCDF-Multiconfiguration Dirac-Fock) dalga fonksiyonlarını kullanmıştır [67]. Mazzoni ve Ricci, temel seviyedeki doğal fosforun en düşük iki  $^4P$  teriminin dallanma oranlarını tespit ettiler [68]. Berzinch, doğal fosfordaki  $3s^23p^24p$  konfigürasyonlarının enerjileri için ışınımlı yarıömürleri teorik ve ilk kez deneysel olarak belirledi [69]. Ganas, atomik bağımsız parçacık modelini doğal fosfor atomunun değerlik ve uyarılmış seviyelerini oluşturmak için kullandı ve elde ettiği bu dalga fonksiyonlarını Born yaklaşımında elde edilen tesir kesiti nicelikleri ve genelleştirilmiş salıncı şiddetlerini hesaplamada kullandı [70]. Biemont ve arkadaşları, PI'daki ilgi çekici astrofiziksel  $4s-4p$  geçişleri için geçiş olasılığı ölçümünün doğruluğunu, relativistik Hartree-Fock (HFR) ve SUPERSTRUCTURE (SST) kodları ile gösterdiler [71].

Bu çalışmada P I için yapılan birinci hesaplamada; tek parite için  $3p^3, 3p^2np$  ( $n=4-6$ ),  $3pnp^2$  ( $n=4-6$ ),  $3p^2nf$  ( $n=4-6$ ), ikinci hesaplamada; tek parite için  $3p^3, 3p^2np$  ( $n=4-6$ ),  $3p4p^2, 3p^2nf$  ( $n=4-6$ ), üçüncü hesaplamada; tek parite için  $3s^23p^3, 3s^23p^2np$  ( $n=4,5$ ),  $3s^23p^2nf$  ( $n=4,5$ ),  $3p^4np$  ( $n=4,5$ ), dördüncü hesaplamada; tek parite için  $3s^23p^3, 3p^5, 3s^23p^24p, 3p^4p$  konfigürasyonları ve bu hesaplamaların tümünde çift parite için  $3s^23p^2ns$  ( $n=4,5$ ),  $3s3p^4, 3s^23p^2nd$  ( $n=3,4$ ) konfigürasyon setleri kullanılarak bu seviyelere ait enerji değerleri hesaplandı. Bu hesaplama sonuçları tablolarda yine sırasıyla A, B, C ve D ile gösterildiler. Ayrıca  $3s-3p, 4s-4p$  ve  $3p-4s$  elektrik dipol

(E1) geçişlere ait geçiş olasılıkları, dalga boyları ve ağırlıklı salıncı şiddetleri hesaplandı.

### 1.3. Nötral Mangan'ın (Mn I) Spektrum Çalışmaları

Mangan, çok karmaşık fakat bir o kadar da ilginç atomik yapıya sahip demir grubu elementlerine aittir. Bir yıldızın yapay spektrumundaki çizgiler, kabul edilen atom modeline dayalı olduğundan ve alınan geçişlere ait analizler, elektronların ve seviyelerin artan sayısıyla çok daha karmaşık olmaktadır.

Mangan, galaksimizde ayın ve güneşin etrafında görülen ışıklı dairenin (hale) kimyasal gelişiminin incelenmesinde yaygın olarak kullanılır. Hassas atomik salıncı şiddetleri ( $f$ -değerleri ve  $\log(gf)$ ) yıldızlar ve yıldız altı cisimlerin süreçlerinin ve fiziksel özelliklerinin doğru yorumlanması için gereklidir. Özellikle, kızılötesi spektral bölgede atomik çizgiler için salıncı şiddetleri soğumuş cüce yıldızların, yaşlı yıldızların ve görünmeyen toz cisimlerinin (galaksinin merkezindeki genç yıldızlar gibi) spektrumlarının çalışılması için gereklidir. Hassas salıncı şiddetleri yaşlı yıldızların ve soğumuş cüce yıldızların çalışılmasında özel bir öneme sahiptir. Son on yıl içinde, uydu kaynaklı teleskoplar ve temelde yeni kızılötesi spektrografların gelişimiyle astrofiziksel cisimlerin kızılötesi bölgesinde spektral gözlemlerde bir artış olmuştur. Ancak, literatürde mevcut olan görünür spektral çizgiler için ölçülen salıncı şiddetlerinin sayısı oldukça azdır. Atomik veri sitelerinde salıncı şiddetlerinin durumu incelenmektedir [72–75]. Daha geniş IR ölçümleri Lyubchik [76] ve Bigot ile Thevenin [77] tarafından sunuldu. Mn I salıncı şiddetleri için laboratuvar atomik verileri UV ve görünür bölgedeki geçişlerce baskındır. Both ve çalışma arkadaşları Mn I için  $3d^5(^6S)4s4p z^4P^o_j$  ve  $3d^5(^6S)4s4p z^6P^o_j$  seviyelerinden 58 salıncı şiddeti değerlerini içeren UV ve görünür geçişleri bildirdiler [78]. Blackwell-Whitehead bilinen seviye yarı ömürleri ile yüksek çözünürlüklü Fourier dönüşüm spektrometresi ile dallanma kesirlerini birleştirerek  $z^4P^o_j$  ve  $z^6P^o_j$  seviyelerinin daha üstünden olan geçişler için Mn I salıncı şiddetlerini ölçtüler [79]. Bunlar Lyubchik ve arkadaşları tarafından çalışılan 12889 Å ve 12875 Å arasındaki spektral çizgileri içeren soğumuş cüce yıldızların spektrumlarının güçlü özellikleri olarak görülür [80]. Bergemen ve Gehren spektrum sentez yöntemini

kullanarak çizgi sentezlerinin Van der Waals açılımını hesapladılar [81]. Blackwell-Whitehead ve Bergemen, 2384 Å–17744 Å dalga boyu aralığını kapsayan 94 Mn I geçişleri için deneysel salınıcı şiddetlerini ölçtüler ve karmaşık olmayan 22 Mn I geçişlerini kullanarak manganın fotosferdeki bolluğunu hesapladılar [82]. Morton, hidrojenen galyuma kadar olan hafif elementlerin atomik verilerinin bir derlemesini yaptı [83]. Melendez, Mn I'e ait 17744 Å'da güneş absorpsiyon çizgilerini tespit etti[84].

Martin, Fuhr ve Wiese Mn I için f-değerlerinin en son derlemesini NIST'de [4] yaptılar [85]. Bu derlemeye en büyük katkı, Woodgate tarafından yapılan absorpsiyon ölçümleridir [86]. Woodgate'in ölçümleri kapsamlıdır, fakat %50'nin üzerinde belirsizliğe sahiptir. Daha hassas ölçümler Booth ile çalışma arkadaşları tarafından yapıldı ve Blackwell ile Collins de absorpsiyon tekniğini kullanarak salınıcı şiddetlerini elde ettiler [87, 88]. Ayrıca, Ostrovskii ile Penkin, Hook yöntemini kullandılar ve Greenlee ile Whaling'in dallanma kesirlerini yarı ömür ölçümleri ile birleştirdiler [89, 90]. Salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıklarını ölçmek için kullanılan tekniklerin en kapsamlı bir incelemesi Huber ve Sandeman tarafından verildi [91]. Mn I'in atomik enerji seviye yapıları, mümkün geçişlerin binlercesi ve enerji seviyelerinin yüzlercesi ile karışmış olduğu belirtilmektedir. Mn I'in temel seviyesi  $3d^5(^6S)4s^2 \ ^6S_{5/2}$ 'dir. Fakat 4s ve 3d tabakaları ve  $3d^5nl$ ,  $3d^6nl$  ve  $3d^7$  konfigürasyonları için Mn I'in terim yapılarındaki tüm özellikler birbirine çok yakındır.

Blackwell ve arkadaşları dalga boyu 209–2780 nm aralığını kapsayan Mn I spektrumundaki 44 geçiş için salınıcı şiddetlerinin laboratuvar ölçümlerini yaptılar [92]. Melendez ve Barbuy, laboratuvar ve hesaplama çizgi listelerinin bir araya getirilmesiyle J ve H bantlarının (1,00-1,34, 1,49-1,80  $\mu\text{m}$ ) kızılötesi bölge yakınında bir çizgi listesi oluşturduğunu gösterdiler [93].

Bu çalışmada Mn I için yapılan birinci hesaplamada; çift parite için  $3d^54s^2$ ,  $3d^64s$ ,  $3d^54sns$  (n=5-8), ikinci hesaplamada;  $3d^5ns^2$  (n=4,5),  $3d^6ns$  (n=4,5) ve her iki hesaplamada da tek parite için  $3d^54snp$  (n=4,5),  $3d^64p$  konfigürasyon takımı kullanılmıştır. Üçüncü hesaplamada ise çift parite için  $3d^5ns^2$  (n=4,5),  $3d^6ns$  (n=4,5),

$3d^5 4s 5s$  ve tek parite için  $3d^5 4snp$  ( $n=4, 5$ ),  $3d^6 np$  ( $n=4,5$ ) ve  $3d^5 4s4f$  konfigürasyon setleri kullanılarak bu seviyelere ait enerji değerleri hesaplandı. Ayrıca  $3d-4p$  ve  $4s-4p$  elektrik dipol (E1) geçişlere ait geçiş olasılıkları, dalga boyları ve ağırlıklı salınıcı şiddetleri hesaplandı.

## BÖLÜM 2. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

### 2.1. Hartree-Fock Problemi

Hartree tarafından formüle edilen yaklaşımın başlangıç noktası zamandan bağımsız parçacık modelidir. Bu modele göre her elektron, çekirdeğin çekici alanı ve diğer elektronlar nedeniyle itme etkileşmelerinin ortalama etkisini hesaba katan bir etkin potansiyelde hareket ettiği için bu potansiyelin seçimi önemlidir. Çok elektronlu bir sistemdeki her elektron kendi dalga fonksiyonu ile tanımlanır. Bu varsayımlar altında Hartree, Hartree denklemleri olarak bilinen denklemleri türetti. Bu denklemler, bir elektronun bir diğerine bağlı yük dağılımı şeklinde katlı radyal denklemlerdir. Hartree bu denklemlerin 'özuyumlu alan' (self-consistent) denilen tekrarlamalı bir yöntem ile çözülebileceğini önerdi.

Hartree toplam dalga fonksiyonu, atom ya da iyon için elektron koordinatlarına göre antisimetrik değildir. Pauli'nin dışarlama ilkesi ile getirilen bu antisimetri gereğini dikkate alan Hartree yönteminin geliştirilmesi 1930 yılında Fock ve Slater tarafından yapıldı. Bu yöntem Hartree kuramının genel bir hali olarak bilinen Hartree-Fock yöntemidir.

Hartree-Fock yaklaşımında bağımsız parçacık yaklaşıklığı ve Pauli'nin dışarlama ilkesine uygun olarak N elektronlu dalga fonksiyonunun bir  $\phi$  Slater determinantı veya başka bir deyişle, bireysel elektron spin-yörüngemsilerinin antisimetrik bir çarpımı olduğu varsayılır. En iyi bireysel elektron spin-yörüngemsilerini bulmak için, Slater determinantının en iyi şekli değişim (varyasyon) yöntemi kullanılarak elde edilir. Bu nedenle, Hartree-Fock yöntemi değişim yönteminin özel bir halidir. Buna göre Hartree-Fock yöntemi atomların dalga fonksiyonu ve enerjilerini belirlemenin bir ilk adımındır. Hartree-Fock yönteminin uygulanması, atomlara ya da

atomlara ya da iyonlara sınırlandırılmamakta ve bir molekül veya katıdaki elektronlar gibi başka sistemlere de uygulanabilmektedir.

### 2.1.1. Bireysel spin fonksiyonları ve Slater determinanı

Merkezi alan yaklaşıklığında, tam Hamiltonyen, ayrıştırılabilir  $H_0$  Hamiltonyen ile yer değiştirir:

$$H \approx H_0 = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + V(r_i) \right) \quad (2.1)$$

Tam Hamiltonyen gibi, yaklaşık Hamiltonyen  $H_0; \mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2$  ve  $S_z$  toplam açısal momentum işlemcileri ile sıra değiştirir ve daima  $H_0$ 'ın özfonksiyonları, bu işlemcilerin özfonksiyonları olarak seçilebilir.

$$H_0 \psi_0(q_1, \dots, q_n) = E_0 \psi_0(q_1, \dots, q_N) \quad (2.2)$$

olduğundan ve  $H_0$  ayrıştırılabildiği için özdeğer ve özfonksiyonlar sırasıyla

$$E_0 = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.3)$$

ve

$$\psi_0(q_1, \dots, q_N) = \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.4)$$

olarak yazılır.  $\phi(\alpha_i; q_i)$  ile temsil edilen bireysel spin-yörüngemeleri, bir-elektron denklemlerinin çözümleridir. Tek elektron fonksiyonu veya spin yörüngemsi,

$$\phi(\alpha; q) = \frac{1}{r} P(nl; r) Y_{lm}(\theta, \varphi) X_{m_s}(\sigma) \quad (2.5)$$



olarak ifade edilir. Burada çözümler  $\alpha = nlm_l m_s$  kuantum sayıları ile gösterilir. Coulomb görüşünün aksine genel potansiyeli  $U(r)$  olan tek elektron enerjisi  $E$ , hem  $n$  hem de  $l$ 'ye bağlıdır. Burada  $Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$  küresel harmonikler ve  $\chi_{m_s}(\sigma)$  spin fonksiyonları, sırasıyla yörünge ve spin açısal momentum işlemcilerinin öz fonksiyonlarıdır:

$$l^2 Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \quad (2.6)$$

$$l_z Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) = m_l Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \quad (2.7)$$

$$s^2 Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) = s(s+1) Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \quad (2.8)$$

$$s_z \chi_{m_s}(\sigma) = m_s \chi_{m_s}(\sigma) \quad (2.9)$$

$H_0$  Hamiltonyeni, elektron koordinatlarının yer değişiminden bağımsız olduğu için (2.4) çarpım fonksiyonundaki koordinatların yer değişimi ile bir özfonksiyon elde edilir. Yer değiştirmiş çarpım fonksiyonları birleştirilerek antisimetrik bir fonksiyon oluşturulur:

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = A \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.10)$$

Bu fonksiyon,

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi(\alpha_1; q_1) & \phi(\alpha_1; q_2) & \dots & \phi(\alpha_1; q_N) \\ \phi(\alpha_2; q_1) & \phi(\alpha_2; q_2) & \dots & \phi(\alpha_2; q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi(\alpha_N; q_1) & \phi(\alpha_N; q_2) & \dots & \phi(\alpha_N; q_N) \end{vmatrix} \quad (2.11)$$

ile verilen bir Slater determinantıdır. Bu gösterimde, iki elektronun  $\alpha = nlm_l m_s$  dört kuantum sayıları aynı değerlere sahipse  $\Phi(q_1, \dots, q_N)$  toplam dalga fonksiyonunun

özdeş olarak yok olduğu görülür. Böylece, atomun izinli durumları için iki elektron aynı kuantum sayılarına sahip olamaz. Bu, Pauli tarafından ileri sürülen dışarlama ilkesidir. Determinant  $q_i = q_j$  olduğunda, yani aynı spinli iki elektron aynı uzay koordinatlarına sahip ise sıfır olur.

Slater determinantının paritesini belirlemek için, paritesi  $(-1)^l$  olan spin yörüngelerinin her biri yazılır. Böylece Slater determinantının paritesi,

$$\pi = (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_N} = (-1)^{\sum l_i} \quad (2.12)$$

olur. Burada paritenin çift veya tek olması, yörünge açısal momentum kuantum sayılarının toplamının tek veya çift olup olmadığına bağlıdır.

### 2.1.2. Değişim (varyasyon) yöntemi

Schrödinger denklemini çözmek için değişim yöntemleri, özdeğer problemlerinin yeniden biçimlendirilmesi için gerekmektedir. Bağ halleri için Schrödinger denkleminin çözümünü bulmak,  $\psi$  dalga fonksiyonlarını bulmaya eş değerdir. Enerji fonksiyonu,

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.13)$$

şeklinindedir. Bu enerji, sınır şartlarında  $\psi$ 'deki  $\delta\psi$  değişimlerine göre birinci dereceden kararlı bir enerjidir. Sınır şartlarına ilave olarak, bu değişimin beklenen değerinin integrallenebilir olması gerekir yani süreklilik ve farklılık özelliklerine de sahip olmalıdır. İki problemin özdeş olduğunu göstermek için,  $\mathcal{E}$ 'nin  $\delta\mathcal{E}$  değişiminin hesaplanması gerekir. Bu değişim,

$$\mathcal{E}(\psi + \delta\psi) - \mathcal{E}(\psi) = \delta\mathcal{E} + O((\delta\mathcal{E})^2) \quad (2.14)$$

şeklindedir. (2.13) denklemindeki enerji ifadesini kullanarak ve  $\delta\psi$ 'nin birinci mertebeden terimleri  $\langle\psi|\psi\rangle$  ile çarpıldığında,

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{E}\langle\psi|\psi\rangle &= \langle\delta\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\psi\rangle + \langle\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\delta\psi\rangle \\ &= 2\langle\delta\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\psi\rangle\end{aligned}\quad (2.15)$$

eşitliği elde edilir. Burada H, bağ halleri için hermityen olmalıdır. (2.15) ifadesinde  $\mathcal{E}(\psi)$  kararlı ise  $\delta\mathcal{E}$  değişimi sıfır olmaktadır ve bunun sonucunda da

$$\langle\delta\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\psi\rangle = 0 \quad (2.16)$$

elde edilir. Buradan

$$(H - \mathcal{E}(\psi))|\psi\rangle = 0 \quad (2.17)$$

eşitliği elde edilir. Bunun tersine,  $\psi$ , H'nin bir özfonksiyonu olduğu durumlarda ise,  $\delta\mathcal{E} = 0$  olur ve  $\mathcal{E}(\psi)$  normalleşme koşuluyla karardır. (2.13) denkleminle ifade edilen enerji fonksiyonu, normalleşmemiş  $\psi$  fonksiyonları cinsinden tanımlanır. Birçok durumda, değişimleri normalleşmiş fonksiyonlar uzayına kısıtlamak uygun olmaktadır:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi + \delta\psi|\psi + \delta\psi\rangle = 1 \quad (2.18)$$

Bu değişim probleminin çözümü,  $\psi$  normalleşme zorunluluğu altında optimizasyon (en iyiyi bulma) problemi için bir çözüm ise, sınır şartlarını sağlayan  $\psi$ 'deki tüm  $\delta\psi$  değişimlerine göre birinci dereceden kararlı olan

$$F(\psi) = \mathcal{E}(\psi) + \lambda\langle\psi|\psi\rangle \quad (2.19)$$

bir fonksiyonu sağlayacak şekilde bir  $\lambda$  'Lagrange çarpanı' ortaya çıkar.

### 2.1.3. Yaklaşık değişim çözümleri

(2.19) değişim problemi tam olarak çözülemediği için bunun yerine, yaklaşık çözümlerin bulunması gerekmektedir. Bunun için izlenebilecek yollardan biri  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$  parametrelerine bağlı olarak seçilen  $\psi_v$  değişim fonksiyonunu seçmektir:

$$\psi_v = \psi_v(\alpha; q_1, \dots, q_N) \quad (2.20)$$

Bu parametreler, parametreler değişimine göre,

$$F(\alpha) = \mathcal{E}(\psi_v) + \lambda \langle \psi_v | \psi_v \rangle \quad (2.21)$$

fonksiyonelinin kararlılık şartlarından belirlenir. Bu şartlar,  $\lambda$  ile,  $\langle \psi_v | \psi_v \rangle = 1$  sağlayacak şekilde,

$$\frac{\partial F(\alpha)}{\partial \alpha_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.22)$$

ifadesinden elde edilir. Bu, lineer olmamasına rağmen bilgisayarda çözülebilen sonlu bir problemdir ve  $\psi_v$  ve  $\mathcal{E}(\psi_v)$  değişim fonksiyonu içeren fonksiyon uzayı için de gerçek özfonksiyon ve özdeğerin en iyi tahminlerini gösterir. Değişim fonksiyonu gerçek özfonksiyon gibi açısız simetriye ve aynı pariteye sahip olmalıdır. Ayrıca, değişim fonksiyonu değişken olmalı ve uygun özfonksiyonun özelliklerini içermelidir. (2.18) nomalleşme şartına ek olarak, değişim parametrelerinin bundan başka sınırlandırmaları da vardır. Bu sınırlandırmalar genel olarak,

$$C_i(\alpha) = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (2.23)$$

şeklinde yazılır. Burada  $C_i$  kısıtlama fonksiyonları olarak isimlendirilir. Bu durumda Lagrange çarpanları, kısıtlamaların her biri için bilgi verir ve problem, izinli değişimlere göre kararlı olan

$$F(\alpha) = \varepsilon(\psi_v) + \sum_{i=1}^m \lambda_i C_i(\alpha) \quad (2.24)$$

fonksiyonu sonucunda ortaya çıkan parametreleri bulmaktır. Ayrıca, Lagrange çarpanları kararlı çözümün tüm sınırlandırmalarını sağlayacak şekilde olmalıdır.

#### 2.1.4. Matris özdeğer denklemi

Basit fakat çok önemli olan değişim fonksiyonu,

$$\psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^N c_i \Phi(\gamma_i LS) \quad (2.25)$$

şeklinde verilir. Burada  $\Phi(\gamma_i LS)$  konfigürasyon hal fonksiyonlarının bilindiği kabul edilir ve sadece  $c_i$  katsayılarının belirlenmesi gerekir. Bir çok durumda CSF (Konfigürasyon Hal Fonksiyonları-Configuration State Function) ortonormaldir. Normalleşme şartı,

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1 \quad (2.26)$$

olarak verilir. Bu ifade (2.21)'de yerine yazılırsa ve katsayılardaki değişimlere göre kararlı olacak şekilde fonksiyon,

$$\mathbf{Hc} = -\lambda \mathbf{c} \quad (2.27)$$

ile verilir. Burada  $\mathbf{H}$ , elemanları

$$H_{ij} = \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \quad (2.28)$$

olan Hamiltonyen matrisidir ve  $-\lambda$  açılım katsayılarının sütun vektörüdür. Yalnızca,  $-\lambda$  için,  $\mathbf{H}$ 'nin bir özdeğeri olduğunda normalize olmuş çözüm mevcuttur. Böylece sınırlandırılmış değişim problemi bir matris özdeğer problemini verir. Hamiltonyen matrisi hermityen olduğu için, özdeğer denkleminin karşılık gelen

$$-\lambda_1 \leq \dots \leq -\lambda_k \dots \leq -\lambda_M \quad (2.29)$$

gerçek özdeğerlere ve  $M$  tane

$$c_k = (c_{1k}, \dots, c_{Mk})^t, \quad c_k^t c_l = \delta_{kl} \quad (2.30)$$

ortonormal çözümlere sahiptir.  $M$  çözümlerinin dışında, bir veya birkaç tane gerçek dalga fonksiyonlarına göre iyi yaklaşıklıklar vardır. Farklı çözümler için  $\mathcal{E}(\psi)$  değişim enerjileri, matris özdeğerlerini elde etmeye eşdeğerdir. Bunun kolaylıkla  $-\lambda$ 'ya eşit olduğu gösterilebilir. Normalleşme kısıtlaması ile elde edilen Lagrange çarpanı çoğunlukla  $E$  ile gösterilir:

$$\mathcal{E}(\psi) = E \quad (2.31)$$

Yaklaşık dalga fonksiyonlarının elde edildiği bu yöntem 'konfigürasyon etkileşme yöntemi' olarak isimlendirilir.

## 2.2. Elektronlar Arası Karşılıklı Etkileşme (Korelasyon)

Hartree-Fock yöntemi pek çok atomik özelliğin oldukça iyi tahminlerini verir. Fakat, analizler dikkatli bir şekilde yapıldığında, bazı sistematik farklılıkların olduğu gözlenebilir. Gözlenen veriler relativistik etkiler, sonlu kütle ve çekirdek hacmi gibi diğer etkileri içerir ve ışıyan atomlar için küçük değerlere sahiptirler. Böyle sistemler için farklılığın en büyük kaynağı, Hartree-Fock çözümünün Schrödinger denkleminin gerçek çözümüne bir yaklaşıklık olması gerçeğinden ve elektronların hareketindeki

karşılıklı etkileşme (korelasyon) fikrinin ihmalinden ortaya çıkar. Hartree-Fock yönteminde, her bir elektronun diğer elektronlar tarafından belirlenen bir alanda bağımsız olarak hareket ettiği kabul edilir. Bu nedenle enerjideki hata Löwdin tarafından 'korelasyon enerjisi' olarak tanımlanır:

$$E^{Kor} = E^{Tam} - E^{HF} \quad (2.32)$$

Burada  $E^{Tam}$ , gözlenen enerji değildir, bir dizi kabullenimleri esas alan Schrödinger denkleminin çözümüdür ve  $E^{HF}$  Hartree-Fock enerjisidir.

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

Çok elektronlu bir sistemin durumu bir kısmi diferansiyel denklemin çözümü olan ve dalga denklemi olarak isimlendirilen bir  $\psi$  dalga fonksiyonu ile tanımlanır:

$$(H - E)\psi = 0 \quad (2.33)$$

Burada H sistemin hamiltonyen işlemcisi ve E toplam enerjidir. H işlemcisi atomik, moleküler ve katı durumlar gibi sistemlerin yanı sıra kuantum mekaniksel durumlara da (relativistik olmayan, Dirac-Coulomb ya da Dirac-Breit gibi) bağlıdır. Relativistik olmayan atomik sistemler için Hamiltonyen (atomik birimlerde)

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \nabla_i^2 + \frac{2Z}{r_i} \right) + \sum_{ij} \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.34)$$

şekindedir. Burada Z, N elektronlu atomun çekirdek yükü;  $r_i$ ,  $i$ . elektronun çekirdeğe olan uzaklığı ve  $r_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  elektronları arasındaki uzaklıktır. Bu denklem sonsuz kütleli bir nokta çekirdeğin varsayımı altında türetilmiştir. H işlemcisi hem kesikli hem de sürekli spektruma sahiptir. Birinci durum için kesikli spektruma sahip olan  $\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$  dalga fonksiyonları veya özfonksiyonlar bir olasılık yorumuna

sahiptir. Yani karesi integrallenebilir olmalıdır. Bu fonksiyonların çoğunlukla normalleşmiş oldukları kabul edilir. İntegralinin alınmıyor olması ise tüm uzay koordinatları üzerinden integral alma ve tüm spin koordinatları üzerinden toplam anlamındadır. İkinci durumda ise bu kısıtlama geçerli değildir. Schrödinger denkleminde elektron spini bilgisi dahil değildir; fakat spin fonksiyonları belirtildiğinde fiziksel olarak anlamlı çözümler, herhangi iki elektronun tüm koordinatlarının yer değişiminde antisimetrik özellik gösterir. Ayrıca  $L, M_L, S,$  ve  $M_S$  açısal momentum kuantum sayılarına ek olarak, Hamiltonyen işlemcisinin özfonksiyonları bunların pariteleri ile gösterilir. Parite işlemcisi  $\Pi$  ise,

$$\Pi \psi(r_1, \sigma_1, \dots, r_N, \sigma_N) = \psi(-r_1, \sigma_1, \dots, -r_N, \sigma_N) \quad (2.35)$$

bağıntısı ile tanımlanır. Parite işlemcisinin tanımından  $\Pi^2 = 1$  ve özdeğerinin  $\pm 1$  olduğu açıktır. Parite işlemcisinin  $+1$  özdeğerine ait özfonksiyonlar çift,  $-1$  özdeğerine ait özfonksiyonlar ise tek parite olarak isimlendirilir. Relativistik olmayan Hamiltonyen, toplam açısal momentum işlemcisi  $\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N l_i$  ve toplam spin açısal momentum işlemcisi  $\mathbf{S} = \sum_{i=1}^N s_i$  ile sıra değiştirir. Yani ,

$$[H, \mathbf{L}] = [H, \mathbf{S}] = 0 \quad (2.36)$$

dır. Buna göre  $H, L^2, L_z, S^2$  ve  $S_z$  aralarında sıra değiştiren işlemciler takımı oluşur.  $\psi, H$ 'nin özfonksiyonu olduğu için ve  $H; L^2, L_z, S^2$  ve  $S_z$  ile sıra değiştirme özelliğine sahip olduğu için  $\psi$  bu işlemcilerin de özfonksiyonudur. Bu işlemcilerin eş zamanlı özfonksiyonları,  $\psi(\gamma L M_L S M_S; q_1, \dots, q_N)$  olarak gösterilir.  $\gamma$  ise ek kuantum sayılarını gösterir.

Atomlar için Schrödinger denklemi çok elektronlu sistemler için en basit denklemler arasında yer almaktadır. Schrödinger denkleminin çözümü için hesaplama modelleri,



diğer çok elektronlu sistemlere ait çözüm modelleri ile ortak birçok özelliğe sahiptir ve burada gelişen fikirler onlara da uygulanabilir.

Atomik özelliklerin tahmini, teoriksel fizik ve hesaplamalı teknikler arasındaki etkileşim ilgi çekicidir. Çok cisim problemi olarak daha fazla fiziksel etkilerin dahil edilmesiyle daha yüksek doğruluklu çözümler elde edilir. Örneğin, çekirdeğin sonlu kütlesi ve sonlu hacminin etkisinin alınmasıdır. Fakat mevcut fiziksel araştırmaya konu olan gerçek sistem kadar daha doğru hamiltonyenin kullanımına da ihtiyaç vardır.

Dalga denkleminin yüksek boyutlu olması nedeniyle yaklaşık yöntemlerin kullanılması gerekir. Dalga fonksiyonundaki konfigürasyon etkileşme modeli çok başarılı bir modeldir. Belirli bir  $\gamma LS$  durumu için  $\Psi_{\gamma LS}$ ,  $M$  tane antisimetrik CSF'nin bir açılımı olarak yazılır:

$$\Psi_{\gamma LS}(\{X_j\}) = \sum_{i=1}^M c_i \phi(\gamma_i LS, \{r_j\}) \quad (2.42)$$

$\phi(\gamma_i LS)$ 'lerin her biri  $S$  toplam spin ve  $L$  toplam açısal momentumun bir özfonksiyonudur. Burada  $\{r_j\} = \{r_1, \theta_1, \phi_1, \sigma_1, \dots, r_N, \theta_N, \phi_N, \sigma_N\}$ 'dir.  $r_j$ ,  $\theta_j$ ,  $\phi_j$  üç boyutlu uzay küresel koordinatlarıdır.  $\sigma_j$ ,  $j$  elektronu için spin uzay koordinatı ve  $LS$  hallerinin tam belirlenmesi için ihtiyaç duyulan  $\gamma$  herhangi bir kuantum sayısını temsil etmektedir. Her bir CSF, terimlerin lineer bir birleşimidir:

$$\prod_{j=1}^N \frac{1}{r_j} P_{n_j l_j}(r_j) Y_{l_j m_j}(\theta_j, \phi_j) \chi_{m_j}(\sigma_j) \quad (2.43)$$

Burada  $Y_{lm}$ , küresel harmonikler ve  $\chi_{ms}$ , spin fonksiyonu (spinor) olarak adlandırılır. Uygun bir cebir kullanarak, yörünge ve spin momentlerinin çiftlenimleri belirlenir.

$\gamma_i$  tarafından, çiftlenim gibi kuantum sayılarının  $\{n_j l_j\}_{j=1}^N$  seti belirtilir. Radyal

fonksiyonlar,  $P_{nl}(r)$ , bilinen fonksiyonlar olabilir ya da belirlenmesi gerekebilir.

$\langle \Psi_{\gamma LS} | \Psi_{\gamma LS} \rangle = 1$  olduğunu varsayarak (2.32)'den atomun toplam enerjisi

$$E = \langle \Psi_{\gamma LS} | H | \Psi_{\gamma LS} \rangle \quad (2.44)$$

ile verilir.  $1/r_{ij}$  için çoklu açılımı ve (2.42)'i kullanarak

$$\frac{1}{r_{ij}} = \sum_k \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_k(\cos \theta) \quad (2.45)$$

elde edilir. Burada  $r_{<}$  ve  $r_{>}$  sırasıyla  $r_i$  ve  $r_j$ 'den daha küçük ve daha büyük değere sahiptir anlamındadır.  $P^k(\cos \theta)$ ,  $\cos \theta$ 'ya ait bir Legendre polinomudur. Burada  $\theta$ ,  $r_i$  ve  $r_j$  arasındaki açı değeridir.

Enerji;

$$E = \sum_{ij} c_i c_j H_{ij} \quad (2.46)$$

$$= \sum_{ij} c_i c_j \left( \sum_{stuv;k} A_{stuv;k}^{ij} R^k(s,t;u,v) - \frac{1}{2} \sum_{qw} C_{qw}^{ij} L_{qw} \right) \quad (2.47)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada  $R^k$  Slater integralleri,

$$R^k(st;u,v) = \int_0^\infty \int_0^\infty dr dr' P_s(r) P_t(r') \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_u(r) P_v(r) \quad (2.48)$$

ve  $L_{qw}$  bir elektron integralleri,

$$L_{qw} = \int_0^{\infty} dr P_q(r) \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] P_w(r) \quad (2.49)$$

şeklindedir. Ayrıca burada  $P_i = P_{n_i, l_i}$  kısaltması kullanılmıştır.  $A^{ij}$  ve  $C_{qw}^{ij}$  açısıl katsayılar olarak isimlendirilir ve Racah cebirini kullanarak hesaplanabilir. Çünkü (2.48) denkleminin integralindeki üst sınır nedeniyle Slater integralleri genellikle bir boyutlu integrallerle gösterilen birinci dereceden bir diferansiyel denklem çiftini çözmekle elde edilir. Böylece bu integraller çözümsüz değildir.

$$H_{ij} = \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \quad (2.50)$$

elemanlı  $M \times M$  simetrik matrisi, etkileşim matrisi olarak isimlendirilir. (2.46) denkleminde değişim şartları uygulandığında ve çözümde (tüm  $i$  değerleri için  $\partial E / \partial c_i = 0$  olacak şekilde) katkılarla gösterilen kararlı enerjiyi alarak

$$(H - E)c = 0, \quad H = (H_{ij}) \quad (2.51)$$

matris özdeğer problemi elde edilir. Böylece toplam enerji etkileşim matrisinin bir özdeğeridir ve dalga fonksiyonunun açılım katsayıları ilgili özvektörü oluşturur. Fakat etkileşim matrisini hesaplamak için radyal fonksiyonlar biliniyor olmalıdır.

MCHF yöntemi, yalnızca açılım katsayılarındaki değişimlerin uyumu ile değil aynı zamanda enerjisinin de kararlı olmasını gerektirir. Ayrıca radyal fonksiyonlardaki varyasyonlar için de uyumlu olmalıdır. Bu şartlar katlı integrallenebilen diferansiyel denklem sistemini verir:

$$\frac{d^2 P_{nl}(r)}{dr^2} = \left[ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r} [Z - Y_{nl}(r)] + \epsilon_{nl, nl} \right] P_{nl}(r) + G_{nl}(r) \quad (2.52)$$

$P_{nl}$  için MCHF denklemini olarak isimlendirilir ve  $P_{nl}$ 'nin sağlayacağı sınır koşulları ( $P_{nl} = 0, \lim_{r \rightarrow \infty} P_{nl}(r) = 0$ ) için çözümün olması gerekir. Bu denklemde

$$Y_i(r) = r \sum_{jk} a_{ijk} \int_0^{\infty} dr' P_j(r') \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_j(r') \quad (2.53)$$

ve

$$G_i(r) = \sum_{j \neq i} b_{ii'jjk} P_j(r) \int_0^{\infty} dr' P_i(r') \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_j(r') + \sum_{j \neq i} [\varepsilon_{ij} P_j(r) + c_{ij} L P_j] \quad (2.54)$$

dir. Sabitler,  $\varepsilon_{nl,nl}$  (köşegen parametreleri) ve  $\varepsilon_{nl,n'l}$  (köşegen dışı parametreler) radyal fonksiyonların ortonormalliğini sağlayan Lagrange çarpanları ile ilişkilidir ve  $L$ , (2.49)'daki köşeli parantez içindeki operatördür.  $a_{ijk}$ ,  $b_{ii'jjk}$  ve  $c_{ij}$  açılım katsayıları sırasıyla  $R^k(i, j : i, j)$ ,  $R^k(i, j : i', j')$  ve  $L_{ij}$  integrallerinin açılma katsayılarının basit çarpanlarıdır.

MCHF problemi tekrarlamalı olarak çözülür ki bu da MC-SCF (multiconfiguration self-consistent field-çok konfigürasyonlu özuyumlu alan) yöntemi olarak bilinir. Tahmini radyal fonksiyon kullanarak açılım katsayıları belirlenir. Sonra radyal fonksiyonlar güncellenir ve böylece kararlı enerji elde edilene kadar yeni bir etkileşim matrisi hesaplanır ve son olarak açılım vektörü elde edilir. Bu süreç 'öz uyumlu alan' olarak adlandırılır ve öz uyum sağlanana kadar tekrarlanır.

#### 2.4. Relativistik Etkiler ve Breit-Pauli Hamiltoniyeni

Relativistik olmayan kuantum mekaniği hafif (düşük  $Z$ 'li) atomlar için oldukça doğru sonuçlar verir. Ancak, relativistik etkiler de teorik tahminlerin deneyler ile iyi bir uyum sağlaması için dikkate alınırsa daha iyi olur. Büyük atomlara ve yüksek iyonlaşmış sistemlere doğru bu etkilerin öneminin daha da arttığı bilinmektedir.

Relativistik etkileri dikkate almak için, çok elektronlu bir sistem için Dirac denklemini çözmek yerine Schrödinger denklemine en düşük mertebeden relativistik katkıları almak yeterlidir. Bu katkılar,  $\alpha^2$  mertebesinde alındığında oluşan Hamiltonyen, Breit-Pauli Hamiltoniyeni olarak bilinir. Bu Hamiltonyen daha iyi bir

uyum sağlamak için izlenecek yaklaşıklık için bir temel oluşturmaktadır. Bu Hamiltonyen, relativistik olmayan bir Hamiltonyene birinci derece düzeltmedir. Ancak, yüksek derece katkı teorisinde yanlış sonuçlar verebilmektedir.

Breit-Pauli Hamiltonyeni,

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \quad (2.55)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada  $H_{NR}$  relativistik olmayan (Non-Relativistic) çok elektron Hamiltonyenidir.  $\mathbf{L}$  ve  $\mathbf{S}$  ile sıra değişirme özelliğine sahip olan  $H_{RS}$ , işlemcisi relativistik kayma işlemcisidir. Bu işlemci,

$$H_{RS} = H_{MC} + H_{D1} + H_{D2} + H_{OO} + H_{SSC} \quad (2.56)$$

şeklinindedir. Burada  $H_{MC}$  kütle düzeltmesi,  $H_{D1}$  ve  $H_{D2}$  tek ve iki cisim Darwin terimleridir,  $H_{OO}$  yörünge-yörünge etkileşme terimi (Orbit-Orbit),  $H_{SSC}$  spin-spin (Spin-Spin Contact) etkileşme terimidir:

$$H_{MC} = -\frac{\alpha^2}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2)' \nabla_i^2 \quad (2.57)$$

$$H_{D1} = -\frac{\alpha^2 Z}{8} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \left( \frac{1}{r_i} \right) \quad (2.58)$$

$$H_{D2} = -\frac{\alpha^2}{4} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \left( \frac{1}{r_{ij}} \right) \quad (2.59)$$

$$H_{OO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i < j}^N \left[ \frac{p_i \cdot p_j}{r_{ij}} + \frac{r_{ij} (r_{ij} \cdot p_i) p_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.60)$$

$$H_{SSC} = -\frac{8\pi\alpha^2}{3} \sum_{i<j}^N (s_i \cdot s_j) \delta(r_i \cdot r_j) \quad (2.61)$$

$H_{FS}$  işlemcisi spin ve yörünge açısal momentumları arasındaki etkileşimi tanımlamaktadır. Bu işlemci bir etkileşme terimi olduğu için  $L$  ve  $S$  ile sıra değiştirmemektedir. Ancak,  $J = L + S$  toplam açısal momentumla sıra değiştirmektedir. İnce yapı işlemcisi,

$$H_{FS} = H_{SO} + H_{SOO} + H_{SS} \quad (2.62)$$

şeklinindedir. Burada  $H_{SO}$  çekirdek spin-yörünge etkileşme terimi,  $H_{SOO}$  spin-diğer yörünge etkileşme terimi,  $H_{SS}$  spin-spin etkileşme terimidir:

$$H_{SO} = \frac{\alpha^2 Z}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i^3} l_i \cdot s_i \quad (2.63)$$

$$H_{SOO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \frac{r_{ij} \times p_i}{r_{ij}^3} (s_i + 2s_j) \quad (2.64)$$

$$H_{SS} = \alpha^2 \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[ s_i \cdot s_j - 3 \frac{(s_i \cdot r_{ij})(s_i \cdot r_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \quad (2.65)$$

(2.55) Breit-Pauli Hamiltonyeni,  $J$  toplam açısal momentum işlemcisi ile sıra değiştirir. Böylece karşılık gelen dalga fonksiyonları  $J^2$  ve  $J_z$ 'nin de özfonksiyonlarıdır. Çok konfigürasyon yaklaşımında, Breit-Pauli dalga fonksiyonları

$$\psi(\gamma JM_j) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i L_i S_i JM_j) \quad (2.66)$$

şeklinde elde edilir. Burada  $\Phi(\gamma LSJM_j)$  LSJ çiftlenmiş CSF'lerdir. Yani,

$$\Phi(\gamma LSJM_J) = \sum_{M_L M_S} \langle LM_L SM_S | LSJM_J \rangle \Phi(\gamma LM_L SM_S) \quad (2.67)$$

şeklindedir. Artık  $L$  ve  $S$  iyi kuantum sayıları olmadığından farklı  $LS$ 'li CSF'lerin (2.65) açılımına dahil edilmesi gerekir ve farklı  $LS$  terimlerin bir karışımı elde edilir. Bu durumda, dalga fonksiyonu ara çiftlenimde verilmektedir.

CSF'leri oluşturan radyal fonksiyonlar önceki relativistik olmayan MCHF gösteriminden alınır ve sadece açılım katsayıları iyileştirilir. Daha önce tanımlandığı gibi

$$Hc = Ec \quad (2.68)$$

şeklinde matris özdeğer problemi elde edilir. Burada  $H$ ,

$$H_{ij} = \langle \gamma_i L_i S_i J M_J | H_{BP} | \gamma_j L_j S_j J M_J \rangle \quad (2.69)$$

matris elemanlı Hamiltonyen matrisidir. Böylece Breit-Pauli Hamiltonyen'inin özdeğer ve özfonksiyon problemi her  $J$  değeri için köşegen bir matris ve CSF'lerin çiftlenmiş  $LSJ$  arasındaki matris elemanlarını azaltır.

Breit-Pauli Hamiltonyeni, relativistik olmayan Hamiltonyen'e birinci dereceden pertürbasyon düzeltmesidir. Breit-Pauli relativistik düzeltmeler çerçevesinde bir seviyenin enerjisi

$$E = E_{NR} + E_{RS} + E_{FS} \quad (2.70)$$

olarak elde edilir. Burada  $E_{NR}$ ,

$$E_{NR} = \langle \gamma LSJM_J | H_{NR} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.71)$$

şeklinde hesaplanan relativistik olmayan enerjidir.  $E_{RS}$ ,

$$E_{RS} = \langle \gamma LSJM_J | H_{RS} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.72)$$

olarak hesaplanan relativistik kayma enerjisidir. Bu kayma enerjisi LS terim enerjisinin kaymasını gösterir. İnce yapı enerjisi  $E_{FS}$ ,

$$E_{FS} = \langle \gamma LSJM_J | H_{FS} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.73)$$

$$E_{FS} = E_{SO} + E_{SOO} + E_{SS} \quad (2.74)$$

olarak yazılır. Burada  $E_{SO}$ ,  $E_{SOO}$  ve  $E_{SS}$  sırayla spin-yörünge, spin diğer yörünge ve spin-spin işlemcilerine karşılık gelen enerjilerdir. İnce yapı enerjisi  $J$  kuantum sayısına bağlıdır ve  $E_{NR}$  relativistik olmayan terim enerjisinin LS yarılmasını etkiler. Belirli  $L$  ve  $S$ 'ye karşılık gelen mümkün  $J$  değerleri

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, |L + S| \quad (2.75)$$

şeklinindedir. Spin-spin terimleri ihmal edildiğinde ardışık iki  $J$  ince yapı seviyeleri arasındaki enerji farkı

$$\Delta E_{FS} = 2\xi J \quad (2.76)$$

dır. Burada  $\xi = \xi_{SO} + \xi_{SOO}(\gamma LS)$  olur. Bu ince yapı için Lande aralık kuralı olarak bilinir.  $\xi$  pozitif ve ince yapı enerjisi  $J$  ile artıyorsa ince yapının normal olduğu,  $\xi$  negatif ise aksi söylenir. Çoğunlukla spin-spin terimi önemli bir katkı sağlar ve ihmal edilemez. Bu durumda Lande aralık kuralı bozulur ve ince yapı düzensiz bir davranış gösterir.



## 2.5. Enerji Seviyeleri Arasındaki Geçişler

### 2.5.1. Geçişler ve geçiş özellikleri

Bir atomik sistemin enerji seviyeleri genellikle yarı ömrü sonsuz olan haller olarak kabul edilir. Bir elektromanyetik alan varlığında bu durum değişebilir. Soğurulan foton, atomu veya iyonu yüksek seviyelere uyarır, uyarılmış iyon elektromanyetik alan yokluğunda kendiliğinden yayma ile bozunur.

İki hal arasındaki elektromanyetik geçiş, açısal momentum ve fotona eşlik eden parite ile tanımlanır. Soğurulan veya yayımlanan fotonun paritesi  $\pi=(-1)^k$  ( $k$  açısal momentum) ise geçişe elektrik çok-kutuplu ( $E_k$ ) geçiş, paritesi  $\pi=(-1)^{k+1}$  ise manyetik çok-kutuplu ( $M_k$ ) geçiş denir. Her geçiş paritesi  $\pi$  ve rankı  $k$  olan  $O_q^{\pi(k)}$  küresel tensör işlemcisi ile tanımlanır. Bu, elektrik ve manyetik geçişler için sırasıyla,

$$E_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^k(i) C_q^{(k)}(i) \quad (2.77)$$

ve

$$M_q^{(k)} = \alpha \sqrt{k(2k-1)} \left[ \frac{1}{k} MA_q^{(k)} + \frac{1}{2} g_s MB_q^{(k)} \right] \quad (2.78)$$

şeklindedir. Burada  $MA_q^{(k)}$  ve  $MB_q^{(k)}$

$$MA_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{k-1}(i) \left[ C^{(k-1)}(i) \times l^{(1)}(i) \right]_q^{(k)} \quad (2.79)$$

$$MB_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{k-1}(i) \left[ C^{(k-1)}(i) \times s^{(1)}(i) \right]_q^{(k)} \quad (2.80)$$

şeklinde tanımlanır.

Bir  $\gamma' J' M'$  üst seviye ve bir  $\gamma JM$  alt seviye arasındaki geçişi tanımlamak için geçiş integrali;

$$I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \quad (2.81)$$

ve bileşen şiddeti  $S^{\pi k}$

$$S^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \sum_q \left| I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') \right|^2 \quad (2.82)$$

şeklinde tanımlanır. Çizgi şiddeti ise

$$S^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \sum_{M, M', q} \left| \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2 \quad (2.83)$$

dir. Çizgi şiddeti, indirgenmiş matris elemanlarının karesidir:

$$S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \sum_{M, M', q} \left| \langle \gamma J || O_q^{\pi(k)} || \gamma' J' \rangle \right|^2. \quad (2.84)$$

Bir üst seviyeden bir alt seviyeye yayınlama için geçiş oranı (veya olasılığı)

$$A^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J) = 2C_k [\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J})]^{2k+1} \frac{S^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J)}{g_{J'}} \quad (2.85)$$

ile verilir. Burada  $g_{J'}$  üst seviyenin istatistiksel ağırlığıdır:

$$g_{J'} = 2J' + 1 \quad (2.86)$$

$C_k$ , ise

$$C_k = \frac{(2k+1)(k+1)}{k((2k+1)!!)^2} \quad (2.87)$$

şeklinde tanımlanır. Ağırlıklı salıncı şiddeti soğurma ya da yaymadaki geçişi temsil eder. Düşük halde bir atom, foton soğurarak üst seviyeye uyarıldığında salıncı şiddeti

$$f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \frac{1}{\alpha} c_k [\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J})]^{2k-1} \frac{S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J')}{g_J} \quad (2.88)$$

dir. Yayınlanma salıncı şiddeti de benzer ifadeye sahiptir (işareti hariç). Esas olan ağırlıklı salıncı şiddeti veya gf-değeridir. Ağırlıklı salıncı şiddeti

$$gf^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = g_J f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') \quad (2.89)$$

ile verilir.

Çoğu deneyler ölçümlerin kolaylığından dolayı üst seviyenin yarı ömrünü verir. Bu durumda, tüm düşük seviyelere göre çok kutuplu geçişler üzerinden toplam alınmalıdır.  $\gamma' J'$  seviyesinin yarı ömrü

$$\tau_{\gamma' J'} = \frac{1}{\sum_{\pi k, \gamma J} A^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J)} \quad (2.90)$$

dir.

### 2.5.2. Kesin ve yaklaşık seçim kuralları

Kesin seçim kuralları tüm konfigürasyon hal fonksiyonları için uygulanır. Bir atomik hal fonksiyonu açılımındaki tüm konfigürasyon hal fonksiyonları aynı paritelidir. Manyetik dipol işlemcileri  $(-1)^{k-1}$ , elektrik dipol işlemcileri  $(-1)^k$  paritelidir. İki halin paritesi  $\pi$  ve  $\pi'$  ile gösterilirse;

$$E^{(k)}; \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^k \quad (2.91)$$

şeklinde. Bir atomik hal fonksiyonu açılımındaki CSF'lerin diğer bir özelliği toplam  $J$  ile ilgilidir:

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1, \dots, \pm k \quad k \leq J + J' \quad (2.92)$$

$J = J' = 0$  ise izinli değildir.

CSF'lerin açısal momentumları aktif veya pasif olarak sınıflandırılabilir. Pasif momentumlar, aktifler (2.85)'deki kurala göre oluşurken değişmeyecektir. Dikkate alınacak ilk kural, uzaysal ve spin uzayını temsil eden farklı işlemcilerin ranklarına bağlıdır. Spin için  $E^{(k)}$  işlemcisinin spininden bağımsızdır ve spinler daima elektrik çok-kutuplu geçişler için pasiftir. Seçim kuralı,

$$E^{(k)}: \quad \Delta S = 0 \quad (2.93)$$

olarak özetlenebilir. Aynı seçim kuralı  $MA_q^{(k)}$  işlemcisi için de geçerlidir.

Uzaysal açısal momentumlarına ait seçim kurallarını elde etmek için,  $E^{(k)}$  işlemcisine karşılık gelen tensörün rankının  $k$  olmasına dikkat edilmelidir ve seçim kuralı

$$E^{(k)}: \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, k \quad k \leq L + L' \quad (2.94)$$

dir. Uzay tensörü  $MA^{(k)}$ ,  $k$  ranklı ve  $MB^{(k)}$ ,  $k-1$  ranklı ise uzay ve spin momentumları için seçim kuralları;

$$MA^{(k)}: \quad \Delta S = 0 \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, k \quad k \leq L + L' \quad (2.95)$$

$$MB^{(k)}: \quad \Delta S = 0, \pm 1 \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, (k-1) \quad k-1 \leq L + L' \quad (2.96)$$

şeklindedir.

## 2.6. MCHF Yöntemi ile Hesaplama Adımları

### 2.6.1. MCHF atomik yapı paketi

Büyük atomik yapı problemlerinin bir özelliği de, birçok diferansiyel etkileşim matris elemanının aynı Slater integralinden oluşabilmesidir. Bunun için her bir integral yalnızca bir kez oluşacak şekilde veri yapısının düzenlenmesi gerekmektedir. Aynı zamanda  $G_i(r)$  fonksiyonu istendiğinde, integrallerin listesi,  $P_i$  radyal fonksiyonunu içeren integraller için taranması gerekir. Eğer bunlardan biri bulunursa enerjiye olan katkısı kolayca hesaplanabilmelidir. MCHF'deki veri yapısı bu ihtiyaçları karşılayan integrallerin listesidir. Her bir integralin, matrislerde yer belirleyen göstergelerin bir çifti ile katsayıların bir seti için bir belirleyiciliği vardır. Bu veri yapısı (2.47)'nin yeniden düzenlenmesine karşılık gelir:

$$E = \sum_{stuv;k} R^k(s, t; u, v) \left( \sum_{ij} A_{stuv;k}^{ij} c_i c_j \right) - \frac{1}{2} \sum_{qw} L_{qw} \left( \sum_{ij} C_{qw}^{ij} c_i c_j \right) \quad (2.97)$$

Burada  $A_{qw}^{ij}$  ya da  $C_{qw}^{ij}$  integralde görünmeyen matris elemanları için sıfırdır. Alternatif olarak  $i$  ve  $j$  üzerinden toplam belirli integralden gelecek olan katkıları içeren matris elemanları ile sınırlı olabilir.

MCHF atomik yapı paketinde, bir interaktif program olan GENCL, bazı basit kuralları kullanarak konfigürasyon listesini oluşturmak için kullanılır. NONH programı, etkileşim matrisi ve enerji açılımını tanımlamada kullanılan integralle ilgili listeyi ve açılma katsayıları oluşturur. Eğer radyal fonksiyonlar önceden belirlenirse bir CI programı seçilen özdeğerleri ve özvektörleri belirler. Özel bir durum için radyal fonksiyonu iyileştirerek elde edilenden daha iyi bir sonuca ulaşılabilir. Atomik yapı paketi, hem karışım katsayılarını hem de radyal fonksiyonları hesaplayarak iyileştirme (optimizasyon) problemini çözer.

Dalga fonksiyonu bir kez belirlendikten sonra, diğer atomik özellikler uygun operatörlerin beklenen değerleri gibi belirlenebilir:

$$\langle \text{özellik} \rangle = \langle \Psi_i | OP | \Psi_i \rangle \quad (2.98)$$

Burada OP hesaplanacak olan özellik ile ilişkili operatör ve  $\Psi_i$  ile  $\Psi_i$ , sırasıyla ilk ve son durumdaki dalga fonksiyonlarıdır. Bazı durumlarda enerji gibi,  $\Psi_i \equiv \Psi_i$  olur.

(2.42) denklemini (2.98) denkleminde yerine yazılırsa

$$\langle \text{özellik} \rangle = \sum_{ii} c_i c_i \langle \Phi(\gamma_i LS) | OP | \Phi(\gamma_i LS) \rangle \quad (2.99)$$

sonucu elde edilir. Operatör matris elemanı daha da genişletilmiş olabilir:

$$\langle \Phi(\gamma_i LS) | OP | \Phi(\gamma_i LS) \rangle = \sum_{j,j,k} \text{Coeff}(k, a_j, a_j)_{ii} RI^k(a_j, a_j) \quad (2.100)$$

Burada  $a_j$  ve  $a_j$  sırasıyla ilk ve son durumların bir ya da daha çok elektron setleridir. RI bir radyal integraldir ve mevcut olan herhangi bir ek parametredir. Denklem (2.99) denklem (2.100)'de yerine yazılırsa

$$\langle \text{özellik} \rangle = \sum_{i,i'} c_i c_{i'} \sum_{j,j',k} \text{Coeff}(k, a_j, a_{j'}) RI^k(a_j, a_{j'}) \quad (2.101)$$

$$= \sum_{a_j, a_{j'}, k} RI^k \left( a_j, a_{j'} \sum_{i,i'} c_i c_{i'} \text{Coeff}(k, a_j, a_{j'})_{ii'} \right) \quad (2.102)$$

elde edilir. Burada  $i$  ve  $i'$  üzerinden toplam, katsayıları sıfır olmayan tüm radyal integral çiftleri üzerindedir. Bu toplam radyal integral özellikleri için katkı faktörüdür. (2.102) denklemi içerisinde bu kısaltmaların kullanılmasıyla

$$\langle \text{özellik} \rangle = RI^k(a_j, a_{j'}) CF(a_j, a_{j'}, k) \quad (2.103)$$

açıkça enerji açılımı için denklem (2.46)'ya benzer bir şekilde integraller üzerinden toplam gibi yeniden yazılabilir.

Böylece, matris elemanlarının hesaplanması ve (2.102) denkleminin toplamları atomik özelliklerin tahmininde elde edilir. Bu matrisler simetriktir böylece köşegen altı ya da köşegen üstü kısmının hesaplanması gerekli olabilmektedir.

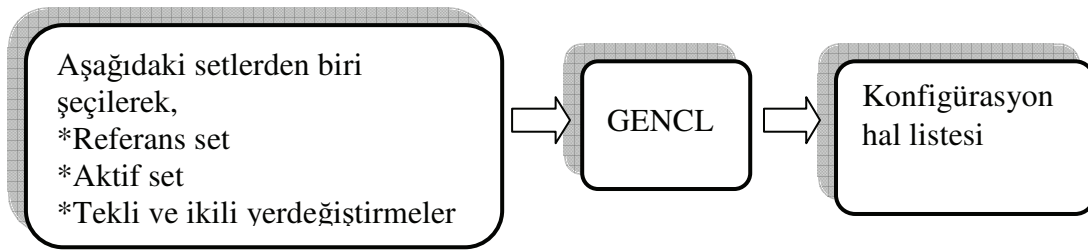
## 2.7. MCHF Atomik Yapı Paketinde Hesaplama Adımları

Aynı LS terimli dalga fonksiyonunu elde etmek için izlenecek hesaplama adımları şöyledir:

- a) Konfigürasyon hal fonksiyonları üretilir.
- b) Terim için enerji ifadesi elde edilir.
- c) Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock problemi çözülür.
- d) Breit-Pauli ve kütle polarizasyon düzeltmeleri eklenir (istenirse).
- e) Çeşitli atomik yapı hesaplamaları oluşturulur.

### 2.7.1. Konfigürasyon hal fonksiyonlarının üretilmesi

Bu program, verilen bir atomun kapalı alt tabakalarını okuyarak LS çiftlenim kuralına göre çiftlenmiş konfigürasyon hal listesi üretir. Verilen konfigürasyonların paritesini kontrol eder ve bu konfigürasyon için mümkün olan tüm çiftlenimleri oluşturur. Verilen çeşitli setleri, 'referans set', 'aktif set' ya da 'tekli ve ikili yerdeğıştirmeler' işlemlerinden birinin tercih edilmesiyle oluşturur.  $l$  tamsayı değerini spektroskopik sembole çevirir ve istenilen son LS terimine göre bir konfigürasyonun çiftlenimlerini yazar (Şekil 2.1).

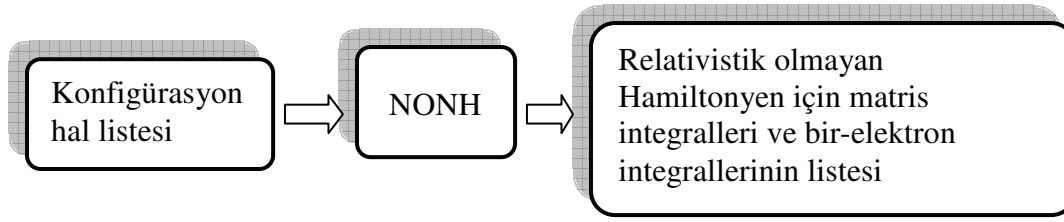


Şekil 2.1. Konfigürasyon hal fonksiyonlarının üretilmesi

### 2.7.2. Relativistik olmayan hamiltonyenin açısız integrallerinin hesaplanması

NONH ile Slater integralleri ve kinetik integrallerin lineer birleşimi olarak relativistik olmayan hamiltonyenin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açısız integraller hesaplanır. Verilen bir konfigürasyon hal listesi için tüm matris elemanları veya seçilenler hesaplanabilir. Bir tabakada s, p ve d elektronlarının herhangi bir sayısı izinliyen  $l \geq 3$  olduğu tabaka için iki elektrondan fazlası izinli değildir. Bu integral listesi kullanılarak, relativistik olmayan radyal fonksiyonlar ve açılım katsayıları hesaplanır. Yani, konfigürasyon hal listesini okur ve relativistik olmayan Hamiltonyen için  $F^k$ ,  $G^k$  ve  $R^k$  ve bir-elektron integrallerini okuyarak integral listesini oluşturur (Şekil 2.2).

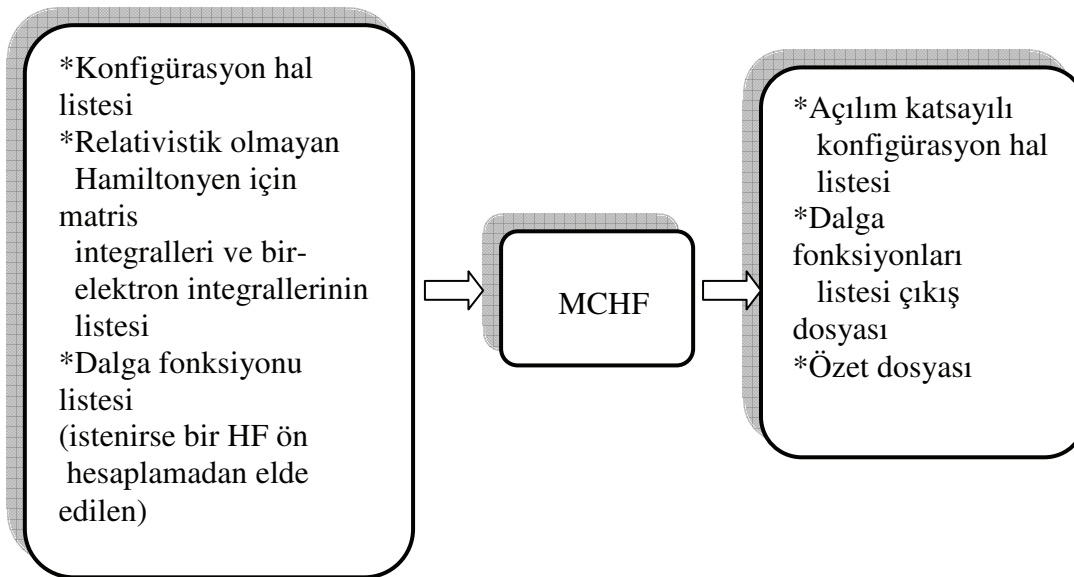




Şekil 2.2. Relativistik olmayan Hamiltonyenin açılal integrallerinin hesaplanması

### 2.7.3. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemiyle hesaplama (MCHF)

MCHF programıyla, MCHF yaklaşıklığında relativistik olmayan radyal fonksiyonları, konfigürasyon açılım katsayıları ve enerji hesaplanır. Radyal dalga fonksiyonlarını ve açılım katsayılı konfigürasyon hal listesini oluşturur (Şekil 2.3.).

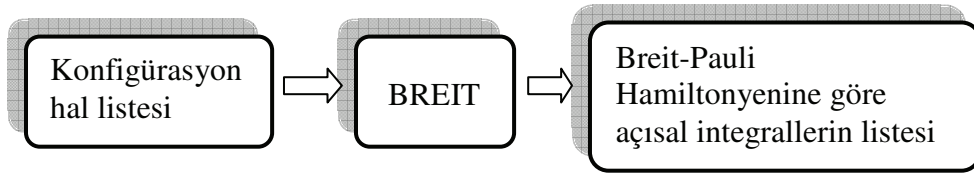


Şekil 2.3. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock programı

### 2.7.4. Breit-Pauli Hamiltonyeninin açılal integrallerinin hesaplanması

Bu program, radyal integrallerin lineer kombinasyonu olarak Breit-Pauli Hamiltonyeninin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açılal integralleri hesaplar. Verilen bir konfigürasyon hal listesi için tüm matris elemanları veya seçilen etkileşimler hesaplanabilir. Yörüngeler ortogonal olarak kabul edilir. Breit-Pauli  $LSJ$  yaklaşıklığında, dalga fonksiyonu farklı  $LS$  terimli konfigürasyon hal fonksiyonlarına açılır. Yani,  $J$  den bağımsız katkılar için kütle düzeltmesi, Darwin düzeltmesi, SSC

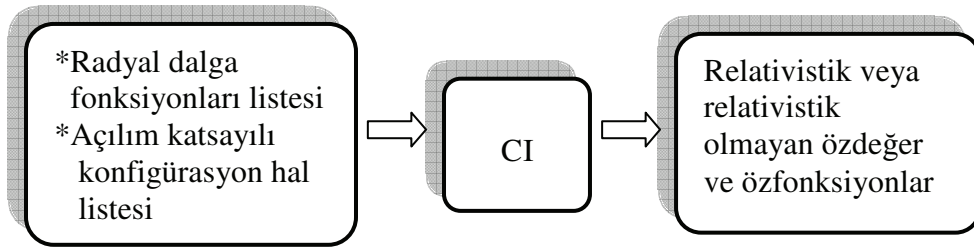
ve  $OO'$ 'yu hesaplar ya da  $J'$ 'ye bağılı katkıları için  $SO$ ,  $SOO$  ve  $SS$  katkılarını hesaplar.  $H_{BP}$  için indirgenmiş integrallerin listesini oluşturur (Şekil 2.4).



Şekil 2.4. Breit-Pauli Hamiltonyeninin açısıl integrallerinin hesaplanması

### 2.7.5. Konfigürasyon etkileşmesinin hesaplanması (CI)

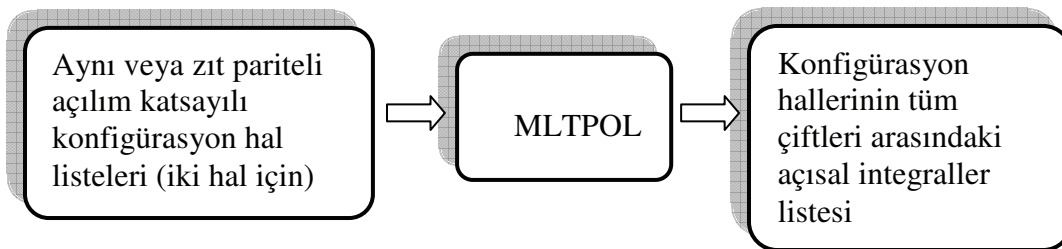
CI ile hem relativistik olmayan hem de Breit-Pauli yaklaşıklığında bir etkileşme matrisinin özdeğer ve özvektörleri hesaplanır (Şekil 2.5).



Şekil 2.5. Konfigürasyon etkileşmesinin hesaplanması

### 2.7.6. Geçiş işlemcileri için açısıl integrallerin hesaplanması (MLTPOL)

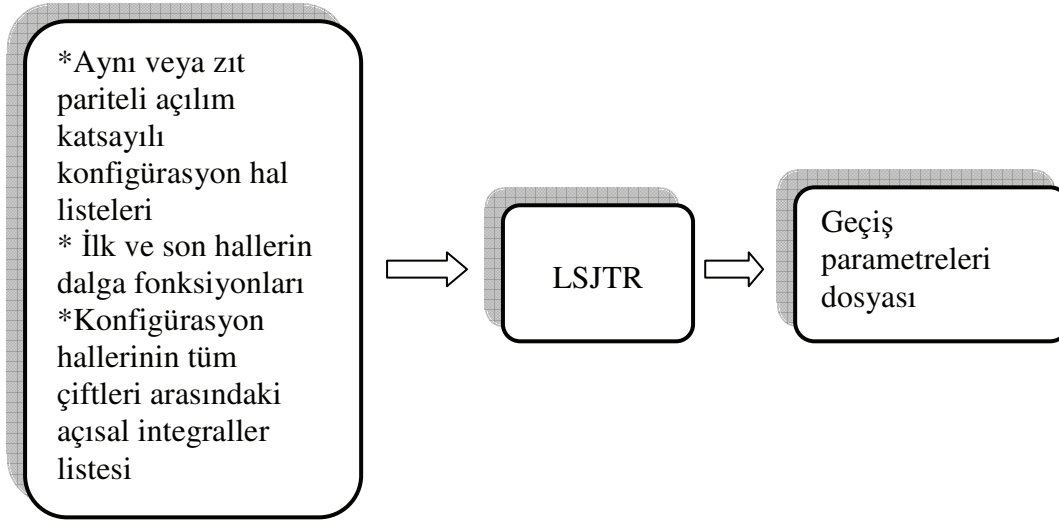
MLTPOL programı ile radyal integrallerin lineer birleşimi olarak  $E1$ ,  $E2$ ,...,  $M1$ ,  $M2$ ,... geçiş işlemcilerinin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açısıl integraller hesaplanır. İki konfigürasyon hali arasındaki geçiş için tüm matris elemanları elde edilir (Şekil 2.6).



Şekil 2.6. Geçiş işlemcileri için açısıl integrallerin hesaplanması

### 2.7.7. MCHF dalga fonksiyonlarından LSJ geçişlerinin hesaplanması (LSJTR)

Bu program, ilk ve son haller arasındaki  $E_1, E_2, \dots, M_1, M_2, \dots$  çok kutup geçişleri için dalga boyu, salınıcı şiddetleri, çizgi şiddetleri ve geçiş olasılıkları gibi geçiş verilerini elde eder (Şekil 2.7).



Şekil 2.7. MCHF dalga fonksiyonlarından LSJ geçişlerinin hesaplanması

### BÖLÜM 3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, yarı dolu p ve d alt tabakalı nötral azot, fosfor ve mangan için seviye yapıları çok-konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi [2] ile incelenmektedir. Bu atomların seviye yapılarını incelemek için uyarılma enerjileri ve bazı düşük seviyeler arasındaki elektrik dipol geçiş parametreleri hesaplandı. Bu tür veriler özellikle astrofizikte ve lazer çalışmalarında önemlidir.

Bu atomlar için hesaplamalar, Fischer tarafından geliştirilen ve konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden biri olan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yönteminin kullanıldığı çok konfigürasyonlu Hartree-Fock atomik yapı paketi [3] ile yapıldı. Bu yöntemle, çok elektronlu sistemler için elektronların karşılıklı etkileşmesinden ve Breit-Pauli Hamiltonyeni çerçevesinde relativistik düzeltmelerden ortaya çıkan katkılar dikkate alındı. Bu çalışmada elde edilen sonuçlar, çoğu NIST [4]'den olmak üzere daha önce yayınlanmış diğer çalışma sonuçları ile karşılaştırılarak tablolarda verildi.

Önce MCHF yöntemini kullanarak, seçilen konfigürasyonlar için elde edilen dalga fonksiyonlarının baskınlığını belirleyen karışım katsayıları ve relativistik olmayan enerjiler hesaplandı. Elde edilen bu dalga fonksiyonları ile Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri hesaba katmak için Breit-Pauli Hamiltonyeni ile köşegenleştirilerek karışım katsayıları yeniden belirlendi. Bu relativistik katkılarla beraber elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları, geçiş enerjileri, ağırlıklı salıncı şiddetleri, geçiş olasılıkları ve seviye enerjileri hesaplandı. Azot, fosfor ve mangana ait çift ve tek pariteli haller için enerji seviyeleri sırasıyla Tablo 3.1, Tablo 3.5 ve Tablo 3.9'da verilmektedir. Enerji tablolarının ikinci sütununda relativistik etkilerin dikkate alınmadığı MCHF hesabı, beşinci sütunda ise relativistik etkilerin de dikkate alındığı MCHF+BP hesabı yer almaktadır. Tablolarda birinci sütunda tek pariteli haller 'o'

üst indisi ile belirtildi. Bu tablolarda kullanım kolaylığı ve karşılaştırma kolaylığı açısından enerji birimi  $\text{cm}^{-1}$  olarak verildi. Altıncı sütunda ise karşılaştırma değerleri verildi. Ayrıca, sonuçların sunumunda kısalık açısından konfigürasyonlar genellikle kapalı tabakalar belirtilmedi.

Nötral azot, fosfor ve mangan için mümkün elektrik dipol (E1) geçişlerine ait dalga boyları, ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıklarına ait sonuçlar N I için Tablo 3.2, Tablo 3.3 ve Tablo 3.4'te, P I için Tablo 3.6, Tablo 3.7 ve Tablo 3.8'de, Mn I için Tablo 3.10 ve Tablo 3.11'de verilmektedir. Bu tablolarda, ikinci sütun bu çalışmaya ait dalga boylarını göstermekte olup, üçüncü sütunda karşılaştırma değerleri ile birlikte Å olarak verilmektedir. Dördüncü sütunda ise logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ( $\log(gf)$ ) ve beşinci sütunda karşılaştırma değerleri verilmektedir. Geçiş olasılıklarına ait hesap sonuçları  $\text{sn}^{-1}$  biriminde altıncı sütunda ve karşılaştırma değerleri de yedinci sütunda verilmektedir. Tablolarda parantez içinde verilen değerler ise 10'un kuvvetlerini göstermektedir.

### 3.1. Nötral Azot (N I) için Hesaplama Sonuçları

Azot (N I) atomunun temel hali  $[\text{He}]2s^22p^3\ ^4S_{3/2}$ 'dir. N I için önce dolu 1s tabakası için bir tek konfigürasyonlu bir HF hesabı yapıldı. Daha sonra konfigürasyon etkileşme katkılarını dikkate almak için değişik konfigürasyon takımları seçilerek Breit-Pauli relativistik etkileşmeler çerçevesinde çok konfigürasyonlu Hartree-Fock hesabı yapıldı.

#### 3.1.1. N I'in seviye enerjileri

Değişik konfigürasyon takımları ile yapılan hesaplar tablolarda A, B, C ve D olarak gösterildi. N I için A ile gösterilen hesaplamada; tek parite için  $2s^22p^3$ ,  $2s^22p^2np$  ( $n=3-7$ ),  $2s^22p^24f$ ,  $2s2p^33s$  ve çift parite için  $2s^22p^2ns$  ( $n=3-7$ ),  $2s2p^4$ ,  $2s^22p^2nd$  ( $n=3-6$ ), B ile gösterilen hesaplamada; tek parite için  $2s^22p^3$ ,  $2s^22p^2np$  ( $n=3-6$ ),  $2s^22p^2nf$  ( $n=4,5$ ) ve çift parite için  $2s^22p^2ns$  ( $n=3-6$ ),  $2s2p^4$ ,  $2s^22p^2nd$  ( $n=3,4$ ), C ile gösterilen hesaplamada; tek parite için  $2p^3$ ,  $2p^2np$  ( $n=3-5$ ),  $2p3p^2$ ,  $2p^2nf$  ( $n=4,5$ ) ve çift parite için  $2s^22p^2ns$  ( $n=3,5$ ),  $2s2p^4$ ,  $2s^22p^2nd$  ( $n=3,4$ ), ve D ile gösterilen hesaplamada; tek

parite için  $2p^3$ ,  $2p^2np$  ( $n=3-5$ ),  $2pnp^2$  ( $n=3-5$ ),  $2p^2nf$  ( $n=4-6$ ) ve çift parite için  $2s^22p^2ns$  ( $n=3,5$ ),  $2s2p^4$ ,  $2s^22p^2nd$  ( $n=3,4$ ) konfigürasyon setleri kullanılarak bu seviyelere ait enerji değerleri hesaplandı. Bu hesaplama sonuçları Tablo 3.1'de verilmektedir.

Tablo 3.1. Nötral azot (N I) için E ( $\text{cm}^{-1}$ ) enerji seviyeleri

Seviyeler		E ( $\text{cm}^{-1}$ )							
Konf.	Terim	$E_{\text{MCHF}}$	J	$E_{\text{MCHF+BP}}$	$E_{\text{Diğer Çalışmalar[4]}}$				
$2s^22p^3$	$4S^0$	0,00 <sup>A,B,C,D</sup>	3/2	0,00 <sup>A,B,C,D</sup>	0,00				
$2s^22p^3$	$2D^0$	22291,11 <sup>A</sup>	5/2	22286,65 <sup>A</sup>	19224,464				
		21848,13 <sup>B</sup>		21844,36 <sup>B</sup>					
		19285,83 <sup>C</sup>		19282,85 <sup>C</sup>					
		20866,30 <sup>D</sup>		20863,87 <sup>D</sup>					
			3/2	22297,69 <sup>A</sup>		19233,177			
				21853,65 <sup>B</sup>					
				19290,17 <sup>C</sup>					
				20869,94 <sup>D</sup>					
			1/2	37557,85 <sup>A</sup>			28838,920		
				37044,36 <sup>B</sup>					
		32315,23 <sup>C</sup>							
		34306,78 <sup>D</sup>							
$2s^22p^3$	$2P^0$		3/2	37559,76 <sup>A</sup>	28839,306				
				37040,12 <sup>B</sup>					
				32317,06 <sup>C</sup>					
				34306,68 <sup>D</sup>					
		$2s^22p^2(^3P)3s$	$4P$	81454,70 <sup>A</sup>		1/2	81387,09 <sup>A</sup>	83284,070	
				72140,91 <sup>B</sup>			72076,88 <sup>B</sup>		
				54868,71 <sup>C</sup>			54804,68 <sup>C</sup>		
				4631,06 <sup>D</sup>			4567,03 <sup>D</sup>		
						3/2	81430,28 <sup>A</sup>		83317,830
							72117,46 <sup>B</sup>		
				54845,27 <sup>C</sup>					
				4607,62 <sup>D</sup>					
	5/2			81494,54 <sup>A</sup>	83364,620				
				72177,33 <sup>B</sup>					
		54905,12 <sup>C</sup>							
		4667,48 <sup>D</sup>							
$2s^22p^2(^3P)3s$	$2P$	84129,85 <sup>A</sup>	1/2	84076,38 <sup>A</sup>	86137,350				
		75566,13 <sup>B</sup>		75513,24 <sup>B</sup>					
		58293,93 <sup>C</sup>		58241,04 <sup>C</sup>					
		8056,29 <sup>D</sup>		8003,40 <sup>D</sup>					
			3/2	84157,93 <sup>A</sup>		86220,510			
				75592,55 <sup>B</sup>					
				58320,35 <sup>C</sup>					
				8082,70 <sup>D</sup>					
		$2s2p^4$	$4P$	104673,73 <sup>A</sup>			5/2	104627,02 <sup>A</sup>	88107,260
				90462,42 <sup>B</sup>				90416,30 <sup>B</sup>	
73190,22 <sup>C</sup>				73144,10 <sup>C</sup>					
22952,57 <sup>D</sup>				22906,45 <sup>D</sup>					
	3/2			104708,12 <sup>A</sup>	88151,170				
				90496,27 <sup>B</sup>					
				73224,07 <sup>C</sup>					
				22986,42 <sup>D</sup>					

Tablo 3.1. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )				
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3p	<sup>2</sup> S <sup>0</sup>	111705,59 <sup>A</sup> 98423,96 <sup>B</sup> 100217,92 <sup>C</sup> 85052,79 <sup>D</sup>	1/2	104749,03 <sup>A</sup> 90536,70 <sup>B</sup> 73264,50 <sup>C</sup> 23026,85 <sup>D</sup>	88170,570	
			1/2	111705,10 <sup>A</sup> 98422,83 <sup>B</sup> 100217,54 <sup>C</sup> 85052,74 <sup>D</sup>	93581,550	
			1/2	114783,67 <sup>A</sup> 101642,40 <sup>B</sup> 102608,53 <sup>C</sup> 86770,49 <sup>D</sup>	114711,73 <sup>A</sup> 101535,84 <sup>B</sup> 102547,27 <sup>C</sup> 86754,16 <sup>D</sup>	94770,880
				3/2	114736,32 <sup>A</sup> 101571,99 <sup>B</sup> 102568,23 <sup>C</sup> 86759,63 <sup>D</sup>	94973,490
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3p	<sup>4</sup> D <sup>0</sup>	116164,83 <sup>A</sup> 103799,43 <sup>B</sup> 104137,34 <sup>C</sup> 87877,41 <sup>D</sup>	5/2	114776,40 <sup>A</sup> 101631,22 <sup>B</sup> 102602,35 <sup>C</sup> 86768,74 <sup>D</sup>	94830,890	
			7/2	114830,50 <sup>A</sup> 101712,41 <sup>B</sup> 102648,19 <sup>C</sup> 86780,87 <sup>D</sup>	94881,820	
			1/2	116127,16 <sup>A</sup> 103743,10 <sup>B</sup> 104105,70 <sup>C</sup> 87869,20 <sup>D</sup>	116148,78 <sup>A</sup> 103775,59 <sup>B</sup> 104123,75 <sup>C</sup> 87873,74 <sup>D</sup>	95475,310
				3/2	116148,78 <sup>A</sup> 103775,59 <sup>B</sup> 104123,75 <sup>C</sup> 87873,74 <sup>D</sup>	95493,690
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3p	<sup>4</sup> P <sup>0</sup>	120543,61 <sup>A</sup> 109327,52 <sup>B</sup> 108360,73 <sup>C</sup> 86864,05 <sup>D</sup>	5/2	116188,26 <sup>A</sup> 103834,53 <sup>B</sup> 104157,28 <sup>C</sup> 87882,70 <sup>D</sup>	95532,150	
			3/2	120500,33 <sup>A</sup> 109306,99 <sup>B</sup> 108319,43 <sup>C</sup> 86855,00 <sup>D</sup>	120500,33 <sup>A</sup> 109306,99 <sup>B</sup> 108319,43 <sup>C</sup> 86855,00 <sup>D</sup>	96787,680
				5/2	120573,08 <sup>A</sup> 109342,34 <sup>B</sup> 108388,70 <sup>C</sup> 86870,51 <sup>D</sup>	98864,050
			1/2	123416,70 <sup>A</sup> 114010,04 <sup>B</sup> 111109,05 <sup>C</sup>	123418,02 <sup>A</sup> 114039,90 <sup>B</sup> 111103,73 <sup>C</sup>	123418,02 <sup>A</sup> 114039,90 <sup>B</sup> 111103,73 <sup>C</sup>
3/2	123416,56 <sup>A</sup> 113996,02 <sup>B</sup> 111112,02 <sup>C</sup>	123416,56 <sup>A</sup> 113996,02 <sup>B</sup> 111112,02 <sup>C</sup>		97805,840		

Tablo 3.1. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )			
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> D)3s	<sup>2</sup> D	104673,73 <sup>A</sup>	5/2	99602,88 <sup>A</sup>	99663,427
		90234,39 <sup>B</sup>		90233,27 <sup>B</sup>	
		72962,19 <sup>C</sup>		72961,08 <sup>C</sup>	
		22724,54 <sup>D</sup>			
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> D)3s	<sup>2</sup> D		3/2	99603,00 <sup>A</sup>	99663,912
				90234,68 <sup>B</sup>	
				72962,48 <sup>C</sup>	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4s	<sup>4</sup> P	111662,62 <sup>A</sup>	1/2	111586,63 <sup>A</sup>	103622,51
		103948,62 <sup>B</sup>		103867,77 <sup>B</sup>	
		86676,41 <sup>C</sup>		86595,56 <sup>C</sup>	
		36438,77 <sup>D</sup>		36357,91 <sup>D</sup>	
		3/2		111629,57 <sup>A</sup>	103667,16
			103911,95 <sup>B</sup>		
			86639,75 <sup>C</sup>		
			36402,11 <sup>D</sup>		
		5/2		111701,99 <sup>A</sup>	103735,48
			103987,77 <sup>B</sup>		
			86715,56 <sup>C</sup>		
			36477,91 <sup>D</sup>		
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4s	<sup>2</sup> P	111702,97 <sup>A</sup>	1/2	111657,05 <sup>A</sup>	104144,82
		103957,40 <sup>B</sup>		103916,83 <sup>B</sup>	
		86685,20 <sup>C</sup>		86644,62 <sup>C</sup>	
	36447,55 <sup>D</sup>	36406,98 <sup>D</sup>			
		3/2		111740,04 <sup>A</sup>	104221,63
			103995,22 <sup>B</sup>		
	91704,72 <sup>C</sup>				
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>2</sup> P	107088,40 <sup>A</sup>	3/2	107074,08 <sup>A</sup>	104615,47
		101704,45 <sup>B</sup>		101673,34 <sup>B</sup>	
		84432,25 <sup>C</sup>		84401,13 <sup>C</sup>	
	34194,60 <sup>D</sup>	34163,49 <sup>D</sup>			
		1/2		107108,78 <sup>A</sup>	104654,03
			101721,14 <sup>B</sup>		
	84448,94 <sup>C</sup>				
			34211,29 <sup>D</sup>		
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>4</sup> F	107125,16 <sup>A</sup>	3/2	107055,82 <sup>A</sup>	104664,13
		101738,99 <sup>B</sup>		101687,12 <sup>B</sup>	
		84466,80 <sup>C</sup>		84414,91 <sup>C</sup>	
		34229,14 <sup>D</sup>		34177,27 <sup>D</sup>	
		5/2		107078,59 <sup>A</sup>	104683,06
			101702,20 <sup>B</sup>		
			84430,01 <sup>C</sup>		
			34192,36 <sup>D</sup>		
		7/2		107111,53 <sup>A</sup>	104716,95
			101731,24 <sup>B</sup>		
			84459,05 <sup>C</sup>		
			34221,39 <sup>D</sup>		
	9/2		107166,13 <sup>A</sup>	104765,77	
		101778,13 <sup>B</sup>			
		84505,94 <sup>C</sup>			
		34268,29 <sup>D</sup>			



Tablo 3.1. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )				
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>2</sup> F	107181,02 <sup>A</sup>	5/2	107145,05 <sup>A</sup>	104810,36	
		101855,16 <sup>B</sup>		101819,19 <sup>B</sup>		
		84582,95 <sup>C</sup>		84546,99 <sup>C</sup>		
		34345,31 <sup>D</sup>		34309,34 <sup>D</sup>		
			7/2	107212,88 <sup>A</sup>		104881,35
				101882,88 <sup>B</sup>		
				84610,67 <sup>C</sup>		
				34373,02 <sup>D</sup>		
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>4</sup> P	107396,12 <sup>A</sup>	5/2	107388,82 <sup>A</sup>	104825,11	
		101710,94 <sup>B</sup>		101680,97 <sup>B</sup>		
		84438,70 <sup>C</sup>		84408,77 <sup>C</sup>		
		34201,09 <sup>D</sup>		34171,12 <sup>D</sup>		
			3/2	107419,65 <sup>A</sup>		104859,73
				101725,45 <sup>B</sup>		
				84453,25 <sup>C</sup>		
				34215,61 <sup>D</sup>		
			1/2	107437,12 <sup>A</sup>		104886,10
				101748,27 <sup>B</sup>		
				84476,07 <sup>C</sup>		
				34238,42 <sup>D</sup>		
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>4</sup> D	107238,48 <sup>A</sup>	1/2	107226,05 <sup>A</sup>	104984,37	
		101950,37 <sup>B</sup>		101937,05 <sup>B</sup>		
		84678,17 <sup>C</sup>		84664,86 <sup>C</sup>		
		34440,52 <sup>D</sup>		34427,21 <sup>D</sup>		
			3/2	107223,59 <sup>A</sup>		204996,27
				101945,39 <sup>B</sup>		
				84673,20 <sup>C</sup>		
				34435,54 <sup>D</sup>		
			5/2	107230,88 <sup>A</sup>		105008,55
				101957,70 <sup>B</sup>		
				84685,50 <sup>C</sup>		
				34447,86 <sup>D</sup>		
			7/2	107264,16 <sup>A</sup>		105017,60
				101970,80 <sup>B</sup>		
				84698,60 <sup>C</sup>		
				34460,95 <sup>D</sup>		
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>2</sup> D	107304,93 <sup>A</sup>	3/2	107303,30 <sup>A</sup>	105119,88	
		102113,88 <sup>B</sup>		102106,27 <sup>B</sup>		
		84841,67 <sup>C</sup>		84834,07 <sup>C</sup>		
		34604,03 <sup>D</sup>		34596,43 <sup>D</sup>		
			5/2	107320,18 <sup>A</sup>		105143,71
				102127,84 <sup>B</sup>		
				84855,65 <sup>C</sup>		
				34618,00 <sup>D</sup>		
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>2</sup> S <sup>0</sup>	161503,02 <sup>A</sup>	1/2	161502,70 <sup>A</sup>	106477,80	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>4</sup> D <sup>0</sup>	165658,03 <sup>A</sup>	1/2	165584,94 <sup>A</sup>	106758,73	
		217706,33 <sup>B</sup>		217661,20 <sup>B</sup>		
		131432,97 <sup>D</sup>	3/2	131411,78 <sup>D</sup>	106778,34	
				165609,92 <sup>A</sup>		
	217663,80 <sup>B</sup>					
		131419,22 <sup>D</sup>				

Tablo 3.1. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )				
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>4</sup> D <sup>0</sup>		5/2	165650,78 <sup>A</sup> 217687,64 <sup>B</sup> 131431,08 <sup>D</sup>	106814,46	
			7/2	165705,53 <sup>A</sup> 217728,50 <sup>B</sup> 131446,56 <sup>D</sup>		106868,64
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>4</sup> P <sup>0</sup>	168000,28 <sup>A</sup> 217708,27 <sup>B</sup> 133593,42 <sup>D</sup>	1/2	167960,75 <sup>A</sup> 217685,06 <sup>B</sup> 133582,22 <sup>D</sup>	106980,48	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>4</sup> P <sup>0</sup>		3/2	167983,45 <sup>A</sup> 133588,44 <sup>D</sup>	106996,03	
			5/2	168024,61 <sup>A</sup> 217730,09 <sup>B</sup> 133600,47 <sup>D</sup>		107037,07
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>2</sup> D <sup>0</sup>	172898,92 <sup>A</sup> 217719,81 <sup>B</sup> 406446,75 <sup>C</sup> 137624,61 <sup>D</sup>	3/2	153004,67 <sup>A</sup> 217696,73 <sup>B</sup> 406442,09 <sup>C</sup> 137613,25 <sup>D</sup>	107182,79	
			5/2	153071,33 <sup>A</sup> 217741,20 <sup>B</sup> 406454,22 <sup>C</sup> 137632,25 <sup>D</sup>		107253,11
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>4</sup> S <sup>0</sup>	152863,23 <sup>A</sup> 217719,78 <sup>B</sup> 386013,12 <sup>C</sup>	3/2	152865,97 <sup>A</sup> 217736,31 <sup>B</sup> 386013,66 <sup>C</sup>	107445,62	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>2</sup> P <sup>0</sup>	219643,38 <sup>A</sup> 217726,50 <sup>B</sup> 88321,48 <sup>D</sup>	1/2	219650,38 <sup>A</sup> 217735,89 <sup>B</sup> 88315,21 <sup>D</sup>	107588,47	
			3/2	219640,72 <sup>A</sup> 217694,69 <sup>B</sup> 88324,75 <sup>D</sup>		107628,28
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5s	<sup>4</sup> P	117851,08 <sup>A</sup> 108937,56 <sup>B</sup> 91665,37 <sup>C</sup> 41427,72 <sup>D</sup>	1/2	117766,40 <sup>A</sup> 108854,23 <sup>B</sup> 91582,02 <sup>C</sup> 41344,38 <sup>D</sup>	109812,23	
			3/2	117813,04 <sup>A</sup> 108899,62 <sup>B</sup> 91627,41 <sup>C</sup> 41389,77 <sup>D</sup>		109856,52
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5s	<sup>2</sup> P	117851,41 <sup>A</sup> 103957,40 <sup>B</sup> 91665,55 <sup>C</sup> 41427,90 <sup>D</sup>	1/2	117813,20 <sup>A</sup> 108899,70 <sup>B</sup> 86644,62 <sup>C</sup> 41389,86 <sup>D</sup>	110035,72	
			3/2	117892,40 <sup>A</sup> 108976,92 <sup>B</sup> 91704,72 <sup>C</sup> 41467,07 <sup>D</sup>		110103,83

Tablo 3.1. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )			
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>4</sup> F	110238,02 <sup>A</sup>	3/2	110170,94 <sup>A</sup>	110194,65
		98338,46 <sup>B</sup>		98270,08 <sup>B</sup>	
		81066,26 <sup>C</sup>		80997,88 <sup>C</sup>	
		30828,61 <sup>D</sup>		30760,23 <sup>D</sup>	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>4</sup> F	30828,61 <sup>D</sup>	5/2	110200,12 <sup>A</sup>	110212,39
				98290,52 <sup>B</sup>	
				81018,33 <sup>C</sup>	
				30780,68 <sup>D</sup>	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>4</sup> F	30828,61 <sup>D</sup>	7/2	110225,00 <sup>A</sup>	110247,28
				98322,41 <sup>B</sup>	
				81050,20 <sup>C</sup>	
				30812,56 <sup>D</sup>	
			9/2	110279,01 <sup>A</sup>	110303,23
				98377,61 <sup>B</sup>	
				81105,41 <sup>C</sup>	
				30867,76 <sup>D</sup>	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>2</sup> P	30828,61 <sup>D</sup>	3/2	110191,38 <sup>A</sup>	110220,11
				98291,09 <sup>B</sup>	
				81018,89 <sup>C</sup>	
				30781,24 <sup>D</sup>	
			1/2	110226,52 <sup>A</sup>	110245,18
				98324,51 <sup>B</sup>	
				81052,30 <sup>C</sup>	
				30814,66 <sup>D</sup>	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>2</sup> F	30828,61 <sup>D</sup>	5/2	110261,33 <sup>A</sup>	110286,30
				98358,69 <sup>B</sup>	
				81086,49 <sup>C</sup>	
				30848,84 <sup>D</sup>	
			7/2	110327,85 <sup>A</sup>	110362,46
				98424,21 <sup>B</sup>	
				81152,02 <sup>C</sup>	
				30914,37 <sup>D</sup>	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>4</sup> P	30828,61 <sup>D</sup>	5/2	110178,84 <sup>A</sup>	110299,97
				98490,85 <sup>B</sup>	
				81218,65 <sup>C</sup>	
				30981,00 <sup>D</sup>	
			3/2	110230,63 <sup>A</sup>	110322,72
				98528,22 <sup>B</sup>	
				81256,02 <sup>C</sup>	
				31018,37 <sup>D</sup>	
			1/2	110258,05 <sup>A</sup>	110350,01
				98539,41 <sup>B</sup>	
				81267,20 <sup>C</sup>	
				31029,55 <sup>D</sup>	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>4</sup> D	30828,61 <sup>D</sup>	1/2	110350,84 <sup>A</sup>	110385,79
				98408,96 <sup>B</sup>	
				81136,77 <sup>C</sup>	
				30899,12 <sup>D</sup>	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>4</sup> D	30828,61 <sup>D</sup>	3/2	110359,65 <sup>A</sup>	110395,46
				98401,06 <sup>B</sup>	
				81128,87 <sup>C</sup>	
				30891,22 <sup>D</sup>	

Tablo 3.1. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )									
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]						
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>2</sup> D	110443,48 <sup>A</sup> 98487,01 <sup>B</sup> 81214,80 <sup>C</sup> 30977,16 <sup>D</sup>	5/2	110372,95 <sup>A</sup> 98403,45 <sup>B</sup> 81131,25 <sup>C</sup> 30893,60 <sup>D</sup>	110401,35						
			7/2	110383,98 <sup>A</sup> 98448,77 <sup>B</sup> 81176,57 <sup>C</sup> 30938,92 <sup>D</sup>	110403,22						
			3/2	110441,30 <sup>A</sup> 98485,76 <sup>B</sup> 81213,55 <sup>C</sup> 30975,91 <sup>D</sup>	110447,03						
			5/2	110462,20 <sup>A</sup> 98519,77 <sup>B</sup> 81247,58 <sup>C</sup> 31009,93 <sup>D</sup>	110470,24						
			2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> D)3p	<sup>2</sup> D <sup>0</sup>	142799,66 <sup>A</sup> 152081,75 <sup>B</sup> 165600,83 <sup>C</sup> 99224,74 <sup>D</sup>	3/2	142804,81 <sup>A</sup> 152085,72 <sup>B</sup> 165607,58 <sup>C</sup> 99220,98 <sup>D</sup>	110521,05			
						5/2	142796,80 <sup>A</sup> 152079,34 <sup>B</sup> 165596,52 <sup>C</sup> 99227,30 <sup>D</sup>	110544,85			
						2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> D)3p	<sup>2</sup> F <sup>0</sup>	131446,55 <sup>A</sup> 120492,36 <sup>B</sup> 119373,56 <sup>C</sup> 101953,98 <sup>D</sup>	5/2	131434,61 <sup>A</sup> 120427,98 <sup>B</sup> 119368,22 <sup>C</sup> 101954,38 <sup>D</sup>	110710,74
									7/2	131456,27 <sup>A</sup> 120541,48 <sup>B</sup> 119378,20 <sup>C</sup> 101953,77 <sup>D</sup>	110715,15
			2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>2</sup> S <sup>0</sup>	5450182,50 <sup>A</sup> 182853,97 <sup>B</sup> 126558,17 <sup>C</sup> 100055,88 <sup>D</sup>	1/2	5449472,50 <sup>A</sup> 182838,75 <sup>B</sup> 126557,79 <sup>C</sup> 100055,80 <sup>D</sup>	111060,90			
						2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>4</sup> D <sup>0</sup>	5460963,50 <sup>A</sup> 182860,45 <sup>B</sup> 127859,15 <sup>C</sup> 100832,06 <sup>D</sup>	1/2	5456941,50 <sup>A</sup> 182815,78 <sup>B</sup> 127803,83 <sup>C</sup> 100816,10 <sup>D</sup>	111143,56
									3/2	5457601,00 <sup>A</sup> 182818,05 <sup>B</sup> 127822,68 <sup>C</sup> 100821,70 <sup>D</sup>	111165,16
			2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>4</sup> D <sup>0</sup>		5/2	5459100,00 <sup>A</sup> 182842,23 <sup>B</sup> 127853,49 <sup>C</sup> 100830,60 <sup>D</sup>	111204,02			
7/2	5463436,50 <sup>A</sup> 182883,09 <sup>B</sup> 127895,05 <sup>C</sup> 100842,16 <sup>D</sup>	111260,87									

Tablo 3.1. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )				
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]	
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>2</sup> P <sup>0</sup>	5475643,50 <sup>A</sup>	1/2	5476401,00 <sup>A</sup>	111198,84	
		182889,28 <sup>B</sup>		182893,73 <sup>B</sup>		
		136613,33 <sup>C</sup>		136609,95 <sup>C</sup>		
		101190,99 <sup>D</sup>		101187,82 <sup>D</sup>		
		3/2	5501023,00 <sup>A</sup>	111213,27		
			182907,56 <sup>B</sup>			
			136615,73 <sup>C</sup>			
			101192,59 <sup>D</sup>			
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>4</sup> P <sup>0</sup>	5468162,50 <sup>A</sup>	1/2	5466758,50 <sup>A</sup>	111271,59	
		182864,92 <sup>B</sup>		182852,23 <sup>B</sup>		
		101407,20 <sup>C</sup>		128785,99 <sup>C</sup>		
				101399,16 <sup>D</sup>		
			3/2	5468968,00 <sup>A</sup>		111285,64
				128802,77 <sup>C</sup>		
			101403,68 <sup>D</sup>			
		5/2	5469943,00 <sup>A</sup>	111326,79		
			182886,28 <sup>B</sup>			
			128833,73 <sup>C</sup>			
	2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>4</sup> S <sup>0</sup>	5464450,50 <sup>A</sup>	3/2	5462593,00 <sup>A</sup>	111501,36
			182867,14 <sup>B</sup>		182888,36 <sup>B</sup>	
112715,20 <sup>C</sup>				112715,23 <sup>C</sup>		
99496,11 <sup>D</sup>				99496,05 <sup>D</sup>		
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>2</sup> D <sup>0</sup>	5486156,50 <sup>A</sup>	3/2	5486339,50 <sup>A</sup>	111853,06	
		182874,47 <sup>B</sup>		182851,92 <sup>B</sup>		
		121322,09 <sup>C</sup>		121319,34 <sup>C</sup>		
		101703,32 <sup>D</sup>		101696,59 <sup>D</sup>		
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> D)3p	<sup>2</sup> P <sup>0</sup>	140490,31 <sup>A</sup>	1/2	140449,89 <sup>A</sup>	112294,00	
		122687,77 <sup>B</sup>		122671,69 <sup>B</sup>		
				122671,69 <sup>C</sup>		
		3/2	140510,95 <sup>A</sup>	112319,80		
			122696,80 <sup>C</sup>			
2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)6s	<sup>4</sup> P	99573,95 <sup>A</sup>	1/2	99489,94 <sup>A</sup>	112565,47	
		112951,28 <sup>B</sup>		91451,42 <sup>B</sup>		
		95679,08 <sup>C</sup>		95607,27 <sup>C</sup>		
		45441,43 <sup>D</sup>		45369,62 <sup>D</sup>		
			3/2	99536,27 <sup>A</sup>		112609,61
				91493,12 <sup>B</sup>		
			95648,96 <sup>C</sup>			
			45411,32 <sup>D</sup>			
		5/2	99615,22 <sup>A</sup>	112681,38		
			91562,23 <sup>B</sup>			
			95718,07 <sup>C</sup>			
	2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)6s	<sup>2</sup> P	99577,23 <sup>A</sup>	1/2	89314,08 <sup>A</sup>	112691,96
113056,97 <sup>B</sup>				91579,49 <sup>B</sup>		
95784,77 <sup>C</sup>				95735,34 <sup>C</sup>		
45547,12 <sup>D</sup>			45497,69 <sup>D</sup>			
		3/2	89393,71 <sup>A</sup>	112736,96		
			91660,34 <sup>B</sup>			
		95816,19 <sup>C</sup>				
		45578,54 <sup>D</sup>				

A çalışmasında, tek pariteli terimlere sahip seviyelerin enerjileri karşılaştırma değerlerine biraz uzak çıkarken çift pariteli terimlere sahip enerji seviyelerinde iyi bir uyum elde edilmiştir. Bu hesaplamada  $2s^22p^3 \ ^2D^o_{5/2}$  seviyesine bakıldığında karşılaştırma değeri  $19224,464 \text{ cm}^{-1}$  iken bu çalışmada  $22286,65 \text{ cm}^{-1}$  olduğu görülmektedir. Çift pariteli terimlerden  $2s^22p^2(^3P)3s \ ^4P_{1/2}$  seviyesine bakıldığında karşılaştırma değeri  $83284,070 \text{ cm}^{-1}$  iken bu çalışmada  $81387,09 \text{ cm}^{-1}$  olduğu görülmektedir. Daha üst seviyelere bakıldığında tek pariteli terimlerde uyumsuzluğun arttığı gözlenirken çift pariteli terimlerde daha iyi uyumlar olduğu görülmektedir. Örneğin;  $2s^22p^2(^3P)4d \ ^4F_{5/2}$  seviyesi ele alındığında karşılaştırma değeri  $110194,65 \text{ cm}^{-1}$  iken bu çalışmada  $110170,94 \text{ cm}^{-1}$  olarak elde edildi.  $2s^22p^2(^3P)3d \ ^2D_{3/2}$  seviyesine bakıldığında karşılaştırma değeri  $105119,88 \text{ cm}^{-1}$  iken bu çalışmada bu enerji seviyesinin değeri  $107303,30 \text{ cm}^{-1}$  olmaktadır. Ancak, çift pariteli terimlerde böyle iyi sonuçlar elde edilmiş olmasına rağmen  $2s2p^4$  seviyesinde beklendiği kadar iyi bir uyum sağlanamamıştır. Bu seviyeye ait  $^4P_{5/2}$  teriminin karşılaştırma değeri  $88107,26 \text{ cm}^{-1}$  iken bu çalışmada  $104627,02 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplanmıştır.  $2s2p^4$  seviyelerinin iyileştirilmesi için daha fazla özden uyarılmış konfigürasyonlar alınabilir.

B çalışmasında, A'daki sonuçları daha da iyileştirmek için tek paritede seçilen konfigürasyon takımına  $2s^22p^25f$  konfigürasyonu eklenirken,  $2s^22p^27p$  ve  $2s2p^33s$  konfigürasyonları çıkarıldı. Yapılan bu değişiklik sonucunda yine tek pariteli terimler karşılaştırma terimleri ile biraz uyumsuz çıkarken, çift pariteli terimlerin enerji seviyelerinin değerlerinde A çalışmasına göre daha uyumsuz sonuçlar elde edilmiştir.  $2s^22p^3 \ ^2D^o_{5/2}$  seviyesinin enerjisi  $21844,36 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplanmıştır ve A çalışmasına göre karşılaştırma değeri ile daha uyumludur.  $2s^22p^2(^3P)3p \ ^2S^o_{1/2}$  seviyesinin karşılaştırma değeri  $93581,550 \text{ cm}^{-1}$  iken bu çalışmada A hesabında  $111705,10 \text{ cm}^{-1}$  ve B hesabında  $98422,83 \text{ cm}^{-1}$  bulunmuştur. Üst seviyelere doğru gidildikçe B hesabının tek pariteli terimlerine ait enerji değerlerinde A hesabına göre daha iyi olduğu görülmektedir. Çift pariteli terimlerde ise B hesabının enerji seviyelerinde bozulmalar görüldü. Örneğin;  $2s^22p^2(^3P)3s \ ^4P_{1/2}$  seviyesinin enerjisi  $72076,88 \text{ cm}^{-1}$  ve  $2s^22p^2(^3P)4d \ ^4F_{5/2}$  seviyesinin enerjisinin de  $98270,08 \text{ cm}^{-1}$  değerine düştüğü görüldü. Ancak  $2s2p^4$  seviyesine ait enerji seviyeleri diğer çift pariteli terimlerin enerji seviyelerinin aksine A hesabına göre daha iyi uyumlu

olduğu görüldü. Örneğin;  $2s2p^4 \ ^4P_{5/2}$  seviyesinin enerjisi  $90416,30 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplandı.

Daha iyi uyum elde edebilmek için yapılan C hesabında, Hartree-Fock hesabı 1s ve 2s tabakaları dolu girilerek hesaplama yapıldı. Diğerlerinden farklı olarak  $2p3p^2$  konfigürasyonu eklendi. Ancak, alt seviyelerdeki tek pariteli terimlerin enerji seviyelerinde diğer iki hesaba göre daha iyi bir uyum elde edilirken çift pariteli terimlerin enerji seviyelerinde ve üst seviyelerdeki tek pariteli terimlerin enerjilerinde bozulmalar görüldü.  $2s^22p^3 \ ^2D^o_{5/2}$  seviyesinin enerjisi  $19282,85$  olarak hesaplandı ve iyi bir uyum elde edildi. Ancak, çift pariteli terimlerin enerjilerinde düşüşler olduğu görülmektedir. Örneğin;  $2s^22p^2(^3P)3s \ ^4P_{1/2}$  seviyesinin enerjisi  $54804,68 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplandı.

D hesabında ise Hartree-Fock hesabında yine 1s ve 2s tabakaları dolu girildi ve MCHF hesabı için  $2p4p^2$ ,  $2p5p^2$  konfigürasyonları eklendi. Ancak, yapılan bu değişiklik ile tek pariteli terimlerde A hesabına göre daha uyumlu çıkarken çift pariteli terimler için elde edilen sonuçların uyumsuz olduğu görüldü.

### 3.1.2. N I’de elektrik dipol geçişleri

N I atomu için elde edilen seviyeler arasındaki tüm mümkün elektrik dipol geçişleri de hesaplandı. Bu geçişlerden sadece  $2s^22p^3$  seviyesinden  $2s^22p^23s$  seviyesine ( $2p-3s$ ),  $2s^22p^23s$  seviyesinden  $2s^22p^23p$  seviyesine ( $3s-3p$ ) ve  $2s^22p^3$  seviyesinden  $2s2p^4$  seviyesine ( $2s-2p$ ) olan elektrik dipol (E1) geçişlerine ait geçiş olasılıkları, dalga boyları ve ağırlıklı salınıcı şiddetlerine ait sonuçlar sırasıyla Tablo 3.2, Tablo 3.3 ve Tablo 3.4’te verilmektedir. Bu elektrik dipol geçişlerine ait farklı çalışmalar “A, B, C ve D” üst indisleriyle gösterilmiştir. Ancak bu gösterim enerji seviyeleri için yapılan çalışmalardan farklıdır.

#### 3.1.2.1. N I’de 2p–3s geçişleri

Azotun 2p–3s elektrik dipol geçişleri için Tablo 3.2’de A, B ve C üst indisli üç farklı çalışma verildi ve bunlar [4] ve [94] ile karşılaştırıldı.

Tablo 3.2. N I atomuna ait 2p–3s elektrik dipol (E1) geçişleri için  $\lambda$  dalga boyları (Å),  $\log(gf)$  logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve  $A_{ki}$  geçiş olasılıkları ( $\text{sn}^{-1}$ )

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$2s^2 2p^3 \ ^4S^{\circ}_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^4P_{3/2}$	1214,46 <sup>A</sup>	1 200,22 <sup>a</sup>	-1,83 <sup>A</sup>	-0,459 <sup>a</sup>	1,63(7) <sup>A</sup>	4,03(8) <sup>a</sup>
	1205,13 <sup>B</sup>	1200,22 <sup>b</sup>	-2,16 <sup>B</sup>	-0,389 <sup>b</sup>	7,82(6) <sup>B</sup>	4,93(8) <sup>b</sup>
	675,77 <sup>C</sup>		-1,73 <sup>C</sup>		6,68(7) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^4S^{\circ}_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^4P_{5/2}$	1213,58 <sup>A</sup>	1199,55 <sup>a</sup>	-1,65 <sup>A</sup>	-0,278 <sup>a</sup>	1,66(7) <sup>A</sup>	4,07(8) <sup>a</sup>
	1204,20 <sup>B</sup>	1199,56 <sup>b</sup>	-1,98 <sup>B</sup>	-0,210 <sup>b</sup>	7,94(6) <sup>B</sup>	5,00(8) <sup>b</sup>
	675,53 <sup>C</sup>		-1,75 <sup>C</sup>		4,24(7) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^4S^{\circ}_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^4P_{1/2}$	1215,06 <sup>A</sup>	1200,71 <sup>a</sup>	-2,14 <sup>A</sup>	-0,762 <sup>a</sup>	1,61(7) <sup>A</sup>	4,00(8) <sup>a</sup>
	1205,76 <sup>B</sup>	1200,71 <sup>b</sup>	-2,47 <sup>B</sup>	-0,690 <sup>b</sup>	7,75(6) <sup>B</sup>	4,88(8) <sup>b</sup>
	675,98 <sup>C</sup>		-2,03 <sup>C</sup>		6,76(7) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2D^{\circ}_{5/2} - 2s^2 2p^2(^1D) 3s \ ^2D_{5/2}$	1279,26 <sup>A</sup>	1243,17 <sup>a</sup>	-2,37 <sup>A</sup>	-0,349 <sup>a</sup>	2,86(6) <sup>A</sup>	3,22(8) <sup>a</sup>
	1240,59 <sup>B</sup>	1243,18 <sup>b</sup>	-2,60 <sup>B</sup>	-0,571 <sup>b</sup>	1,81(6) <sup>B</sup>	2,94(8) <sup>b</sup>
	681,65 <sup>C</sup>		-0,84 <sup>C</sup>		3,39(8) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2D^{\circ}_{5/2} - 2s^2 2p^2(^1D) 3s \ ^2D_{3/2}$	1279,24 <sup>A</sup>	1243,71 <sup>a</sup>	-3,52 <sup>A</sup>	-1,511 <sup>a</sup>	3,00(5) <sup>A</sup>	3,33(7) <sup>a</sup>
	1240,59 <sup>B</sup>	1243,18 <sup>b</sup>	-3,75 <sup>B</sup>	-1,698 <sup>b</sup>	1,89(5) <sup>B</sup>	3,07(7) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^3 \ ^2D^{\circ}_{5/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^2P_{3/2}$	1574,07 <sup>A</sup>	1492,62 <sup>a</sup>	-3,16 <sup>A</sup>	-0,381 <sup>a</sup>	4,64(5) <sup>A</sup>	3,11(8) <sup>a</sup>
	1534,65 <sup>B</sup>	1492,63 <sup>b</sup>	-3,34 <sup>B</sup>	-0,335 <sup>b</sup>	3,18(5) <sup>B</sup>	3,17(8) <sup>b</sup>
	735,08 <sup>C</sup>		-1,86 <sup>C</sup>		4,23(7) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2D^{\circ}_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^2P_{3/2}$	1574,35 <sup>A</sup>	1492,82 <sup>a</sup>	-4,11 <sup>A</sup>	-1,360 <sup>a</sup>	5,17(4) <sup>A</sup>	3,26(7) <sup>a</sup>
	1534,86 <sup>B</sup>	1492,83 <sup>b</sup>	-4,29 <sup>B</sup>	-1,318 <sup>b</sup>	3,57(4) <sup>B</sup>	3,34(7) <sup>b</sup>
	735,14 <sup>C</sup>		-2,72 <sup>C</sup>		5,74(6) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2D^{\circ}_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^2P_{1/2}$	1576,31 <sup>A</sup>	1494,67 <sup>a</sup>	-3,42 <sup>A</sup>	-0,634 <sup>a</sup>	5,07(5) <sup>A</sup>	3,46(8) <sup>a</sup>
	1536,79 <sup>B</sup>	1494,69 <sup>b</sup>	-3,60 <sup>B</sup>	-0,591 <sup>b</sup>	3,48(5) <sup>B</sup>	3,53(8) <sup>b</sup>
	735,60 <sup>C</sup>		-2,12 <sup>C</sup>		4,63(7) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2D^{\circ}_{3/2} - 2s^2 2p^2(^1D) 3s \ ^2D_{5/2}$	1279,44 <sup>A</sup>	1243,31 <sup>a</sup>	-3,53 <sup>A</sup>	-1,484 <sup>a</sup>	1,98(5) <sup>A</sup>	2,36(7) <sup>a</sup>
	1240,74 <sup>B</sup>	1243,32 <sup>b</sup>	-3,76 <sup>B</sup>	-1,552 <sup>b</sup>	1,24(5) <sup>B</sup>	2,15(7) <sup>b</sup>
	681,70 <sup>C</sup>		-2,00 <sup>C</sup>		2,35(7) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2D^{\circ}_{3/2} - 2s^2 2p^2(^1D) 3s \ ^2D_{3/2}$	1279,26 <sup>A</sup>	1243,30 <sup>a</sup>	-4,74 <sup>A</sup>	-0,541 <sup>a</sup>	2,86(6) <sup>A</sup>	3,00(8) <sup>a</sup>
	1240,73 <sup>B</sup>	1243,32 <sup>b</sup>	-2,79 <sup>B</sup>	-0,059 <sup>b</sup>	1,75(6) <sup>B</sup>	2,84(8) <sup>b</sup>
	681,72 <sup>C</sup>		-1,03 <sup>C</sup>		3,27(8) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2P^{\circ}_{1/2} - 2s^2 2p^2(^1D) 3s \ ^2D_{3/2}$	1589,81 <sup>A</sup>	1411,93 <sup>a</sup>	-3,04 <sup>A</sup>	-1,273 <sup>a</sup>	5,88(5) <sup>A</sup>	4,46(7) <sup>a</sup>
	1500,70 <sup>B</sup>	1411,94 <sup>b</sup>	-3,19 <sup>B</sup>	-1,251 <sup>b</sup>	4,68(5) <sup>B</sup>	5,03(7) <sup>b</sup>
	760,87 <sup>C</sup>		-1,44 <sup>C</sup>		1,03(8) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2P^{\circ}_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^2P_{1/2}$	2075,59 <sup>A</sup>	1745,24 <sup>a</sup>	-3,72 <sup>A</sup>	-1,11 <sup>a</sup>	1,47(5) <sup>A</sup>	8,35(7) <sup>a</sup>
	1956,60 <sup>B</sup>	1745,25 <sup>b</sup>	-3,85 <sup>B</sup>	-0,966 <sup>b</sup>	1,22(5) <sup>B</sup>	9,47(7) <sup>b</sup>
	828,62 <sup>C</sup>		-1,71 <sup>C</sup>		9,25(7) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2P^{\circ}_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^2P_{3/2}$	2072,18 <sup>A</sup>	1742,72 <sup>a</sup>	-4,01 <sup>A</sup>	-1,414 <sup>a</sup>	3,74(4) <sup>A</sup>	2,21(7) <sup>a</sup>
	1953,48 <sup>B</sup>	1742,72 <sup>b</sup>	-4,14 <sup>B</sup>	-1,267 <sup>b</sup>	3,10(4) <sup>B</sup>	2,40(7) <sup>b</sup>
	828,03 <sup>C</sup>		-2,05 <sup>C</sup>		2,13(7) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2P^{\circ}_{3/2} - 2s^2 2p^2(^1D) 3s \ ^2D_{5/2}$	1589,90 <sup>A</sup>	1411,95 <sup>a</sup>	-2,79 <sup>A</sup>	-1,019 <sup>a</sup>	7,02(5) <sup>A</sup>	5,34(7) <sup>a</sup>
	1500,78 <sup>B</sup>	1411,94 <sup>b</sup>	-2,94 <sup>B</sup>	-1,000 <sup>b</sup>	5,63(5) <sup>B</sup>	6,02(7) <sup>b</sup>
	760,86 <sup>C</sup>		-1,19 <sup>C</sup>		1,23(8) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2P^{\circ}_{3/2} - 2s^2 2p^2(^1D) 3s \ ^2D_{3/2}$	1589,86 <sup>A</sup>	1411,93 <sup>a</sup>	-3,75 <sup>A</sup>	-1,916 <sup>a</sup>	1,15(5) <sup>A</sup>	1,01(7) <sup>a</sup>
	1500,78 <sup>B</sup>	1411,94 <sup>b</sup>	-3,90 <sup>B</sup>	-1,920 <sup>b</sup>	9,26(4) <sup>B</sup>	1,11(7) <sup>b</sup>
	760,88 <sup>C</sup>		-2,17 <sup>C</sup>		1,93(7) <sup>C</sup>	



Tablo 3.2. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$2s^2 2p^3 \ ^2P^o_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^2P_{3/2}$	2072,26 <sup>A</sup>	1742,73 <sup>a</sup>	-3,32 <sup>A</sup>	-0,717 <sup>a</sup>	1,83(5) <sup>A</sup>	1,05(8) <sup>a</sup>
	1953,62 <sup>B</sup>	1742,72 <sup>b</sup>	-3,45 <sup>B</sup>	-0,585 <sup>b</sup>	1,93(5) <sup>B</sup>	1,19(8) <sup>b</sup>
	828,04 <sup>C</sup>		-1,32 <sup>C</sup>		1,16(8) <sup>C</sup>	
$2s^2 2p^3 \ ^2P^o_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3s \ ^2P_{1/2}$	2075,68 <sup>A</sup>	1745,260 <sup>a</sup>	-4,02 <sup>A</sup>	-1,436 <sup>a</sup>	7,35(4) <sup>A</sup>	4,01(7) <sup>a</sup>
	1956,74 <sup>B</sup>	1745,25 <sup>b</sup>	-4,15 <sup>B</sup>	-1,283 <sup>b</sup>	6,10(4) <sup>B</sup>	4,56(7) <sup>b</sup>
	828,63 <sup>C</sup>		-2,03 <sup>C</sup>		4,47(7) <sup>C</sup>	

<sup>a</sup>NIST [4], <sup>b</sup>Tayal [94]. (Bu kaynaktaki  $f$  değeri karşılaştırma için  $\log(gf)$ 'ye dönüştürüldü.)

A çalışmasında enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalardan 3.1.1'deki A çalışmasının tek paritesi için alınan konfigürasyon ile B çalışmasının çift paritesi için alınan konfigürasyon takımları seçildi. Bu hesaplama sonucunda 2p–3s elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları ile diğer çalışmalara ait değerlerin oldukça iyi uyumlu olduğu görüldü. Ancak logaritmik salınıcı şiddeti ve geçiş olasılığı değerlerinin ise iyi uyumlu olmadığı görüldü.

B çalışmasında ise enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalarda C çalışmasının tek paritesi için hesaplanan konfigürasyon ile A çalışmasının çift paritesi için hesaplanan konfigürasyon takımları seçildi. Bu hesaplamalar sonucunda 2p–3s elektrik dipol geçişlerine ait dalga boylarının karşılaştırılan diğer çalışmalar ile daha iyi uyumlu olduğu görüldü ve A çalışmasına göre daha iyi sonuçlar elde edildi. Ancak logaritmik salınıcı şiddeti değerlerinin ve geçiş olasılığı değerlerinin daha da kötüleştiği görüldü.

C çalışmasında ise enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalardan A çalışmasının tek paritesi için seçilen konfigürasyonu ile C çalışmasının çift paritesi için hesaplanan konfigürasyon takımları seçildi. Bunun sonucunda da 2p–3s elektrik dipol geçişlerine ait dalga boylarının A ve B hesaplamalarından daha iyi olmasına rağmen bu hesap sonucunda elde edilen değerlerin [4] ve [94] değerleriyle uyumsuz olduğu görüldü. Ancak logaritmik salınıcı şiddetlerinin ve geçiş olasılıklarının ise A ve B çalışmalarına göre daha iyi uyumludur.

### 3.1.2.2. N I'de 3s–3p geçişleri

Azotun 3s–3p elektrik dipol geçişleri için Tablo 3.3'de A,B,C ve D üst indisli dört farklı çalışma verildi ve bunlar [4] ve [94] çalışmalarını ile karşılaştırıldı.

A çalışmasında enerji seviyeleri için seçilen konfigürasyonlardan A çalışmasının çift paritesi için hesaplanan konfigürasyon ile B çalışmasının tek paritesi için hesaplanan konfigürasyon takımları seçildi. Bu hesaplama sonucunda elde edilen 3s–3p elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyu, logaritmik salıncı şiddeti ve geçiş olasılığı değerlerinin çok iyi uyumlu olmadığı görüldü.

Tablo 3.3. N I atomuna ait 3s–3p elektrik dipol (E1) geçişleri için  $\lambda$  dalga boyları (Å),  $\log(gf)$  logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve  $A_{ki}$  geçiş olasılıkları ( $\text{sn}^{-1}$ )

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{5/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 S^o_{3/2}$	1146,11 <sup>A</sup>	7468,31 <sup>a</sup>	-3,92 <sup>A</sup>	-0,183 <sup>a</sup>	1,49(5) <sup>A</sup>	1,96(7) <sup>a</sup>
	929,60 <sup>B</sup>	7470,02 <sup>b</sup>	-7,88 <sup>B</sup>		2,50(1) <sup>B</sup>	1,86(7) <sup>b</sup>
	1146,11 <sup>C</sup>		0,42 <sup>C</sup>		3,34(9) <sup>C</sup>	
	929,60 <sup>D</sup>		0,06 <sup>D</sup>		2,25(9) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 S^o_{3/2}$	1145,27 <sup>A</sup>	7442,298 <sup>a</sup>	-4,10 <sup>A</sup>	-0,401 <sup>a</sup>	9,88(4) <sup>A</sup>	1,19(7) <sup>a</sup>
	929,13 <sup>B</sup>	7444,38 <sup>b</sup>	-7,93 <sup>B</sup>		2,24(1) <sup>B</sup>	1,12(7) <sup>b</sup>
	1145,27 <sup>C</sup>		0,245 <sup>C</sup>		2,23(9) <sup>C</sup>	
	929,13 <sup>D</sup>		0,08 <sup>D</sup>		2,33(9) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 S^o_{3/2}$	1144,70 <sup>A</sup>	7423,64 <sup>a</sup>	-4,41 <sup>A</sup>	-0,729 <sup>a</sup>	4,91 (4) <sup>A</sup>	5,64(6) <sup>a</sup>
	928,75 <sup>B</sup>	7425,58 <sup>b</sup>	-8,23 <sup>B</sup>		1,13 (1) <sup>B</sup>	5,26(6) <sup>b</sup>
	1144,70 <sup>C</sup>		-0,05 <sup>C</sup>		1,13(9) <sup>C</sup>	
	928,75 <sup>D</sup>		-0,216 <sup>D</sup>		1,17(9) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{5/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 P^o_{5/2}$	1852,12 <sup>A</sup>	8216,33 <sup>a</sup>	-13,22 <sup>A</sup>	0,138 <sup>a</sup>	1,91(-5) <sup>A</sup>	2,26(7) <sup>a</sup>
	2880,86 <sup>B</sup>	8218,50 <sup>b</sup>	-9,08 <sup>B</sup>	0,080 <sup>b</sup>	1,09(-1) <sup>B</sup>	1,91(7) <sup>b</sup>
	1852,12 <sup>C</sup>		0,395 <sup>C</sup>		8,04(8) <sup>C</sup>	
	2880,86 <sup>D</sup>		-1,65 <sup>D</sup>		2,94(6) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 P^o_{5/2}$	1849,91 <sup>A</sup>	8184,86 <sup>a</sup>	-12,81 <sup>A</sup>	-0,305 <sup>a</sup>	4,98(-5) <sup>A</sup>	8,21(6) <sup>a</sup>
	2885,37 <sup>B</sup>	8187,49 <sup>b</sup>	-9,19 <sup>B</sup>	-0,468 <sup>b</sup>	1,29(-1) <sup>B</sup>	5,53(6) <sup>b</sup>
	1849,91 <sup>C</sup>		0,04 <sup>C</sup>		3,62(8) <sup>C</sup>	
	2885,37 <sup>D</sup>		-1,86 <sup>D</sup>		2,73(6) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{5/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 P^o_{3/2}$	1854,14 <sup>A</sup>	8242,38 <sup>a</sup>	-8,41 <sup>A</sup>	-0,272 <sup>a</sup>	1,87 <sup>A</sup>	1,31(7) <sup>a</sup>
	2877,32 <sup>B</sup>	8244,53 <sup>b</sup>	-8,95 <sup>B</sup>	-0,341 <sup>b</sup>	1,47(-1) <sup>B</sup>	1,04(7) <sup>b</sup>
	1854,14 <sup>C</sup>		0,03 <sup>C</sup>		5,20(8) <sup>C</sup>	
	2877,32 <sup>D</sup>		-2,03 <sup>D</sup>		1,23(6) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 P^o_{3/2}$	1851,93 <sup>A</sup>	8210,71 <sup>a</sup>	-8,58 <sup>A</sup>	-0,675 <sup>a</sup>	1,25 <sup>A</sup>	5,23(6) <sup>a</sup>
	2881,82 <sup>B</sup>	8213,31 <sup>b</sup>	-9,29 <sup>B</sup>	-0,673 <sup>b</sup>	1,01(-1) <sup>B</sup>	4,93(6) <sup>b</sup>
	1851,93 <sup>C</sup>		-0,51 <sup>C</sup>		1,50(8) <sup>C</sup>	
	2881,82 <sup>D</sup>		-2,34 <sup>D</sup>		9,14(5) <sup>D</sup>	

Tablo 3.3. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 P^o_{3/2}$	1850,45 <sup>A</sup> 2885,50 <sup>B</sup> 1850,45 <sup>C</sup> 2885,50 <sup>D</sup>	8188,01 <sup>a</sup> 8190,43 <sup>b</sup>	-8,89 <sup>A</sup> -9,68 <sup>B</sup> 0,006 <sup>C</sup> -1,88 <sup>D</sup>	-0,298 <sup>a</sup> -0,413 <sup>b</sup>	6,13(-1) <sup>A</sup> 8,18(-2) <sup>B</sup> 4,94(8) <sup>C</sup> 5,21(6) <sup>D</sup>	1,25(7) <sup>a</sup> 9,32(6) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 P^o_{1/2}$	1853,05 <sup>A</sup> 2879,91 <sup>B</sup> 1853,05 <sup>C</sup> 2879,91 <sup>D</sup>	8223,13 <sup>a</sup> 8225,17 <sup>b</sup>	-15,18 <sup>A</sup> -11,46 <sup>B</sup> -0,002 <sup>C</sup> -1,87 <sup>D</sup>	-0,275 <sup>a</sup> -0,341 <sup>b</sup>	6,37(-7) <sup>A</sup> 6,92(-4) <sup>B</sup> 9,65(8) <sup>C</sup> 2,68(6) <sup>D</sup>	2,62(7) <sup>a</sup> 2,13(7) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 P^o_{1/2}$	1851,57 <sup>A</sup> 2883,59 <sup>B</sup> 1851,57 <sup>C</sup> 2883,59 <sup>D</sup>	8200,36 <sup>a</sup> 8202,22 <sup>b</sup>	-14,51 <sup>A</sup> -10,07 <sup>B</sup> -0,69 <sup>C</sup> -2,59 <sup>D</sup>	-1,025 <sup>a</sup> -1,154 <sup>b</sup>	2,99(-6) <sup>A</sup> 3,39(-2) <sup>B</sup> 1,97(8) <sup>C</sup> 1,02(6) <sup>D</sup>	4,68(6) <sup>a</sup> 1,39(4) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 D^o_{5/2}$	1930,91 <sup>A</sup> 2753,96 <sup>B</sup> 1930,91 <sup>C</sup> 2753,96 <sup>D</sup>	8718,84 <sup>a</sup> 8721,09 <sup>b</sup>	-9,36 <sup>A</sup> -6,32 <sup>B</sup> 0,03 <sup>C</sup> -2,06 <sup>D</sup>	-0,349 <sup>a</sup> -0,514 <sup>b</sup>	1,29(-1) <sup>A</sup> 6,95(1) <sup>B</sup> 3,20(8) <sup>C</sup> 1,25(6) <sup>D</sup>	6,54(6) <sup>a</sup> 3,59(6) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 D^o_{5/2}$	1928,52 <sup>A</sup> 2758,08 <sup>B</sup> 1928,52 <sup>C</sup> 2758,08 <sup>D</sup>	8683,40 <sup>a</sup> 8686,18 <sup>b</sup>	-8,99 <sup>A</sup> -5,66 <sup>B</sup> 0,38 <sup>C</sup> -1,47 <sup>D</sup>	0,105 <sup>a</sup> 0,064 <sup>b</sup>	3,02(-1) <sup>A</sup> 4,74(2) <sup>B</sup> 7,19(8) <sup>C</sup> 7,30(6) <sup>D</sup>	1,88(7) <sup>a</sup> 5,53(6) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{5/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 D^o_{3/2}$	1933,12 <sup>A</sup> 2750,70 <sup>B</sup> 1933,12 <sup>C</sup> 2750,70 <sup>D</sup>	8747,36 <sup>a</sup> 8749,56 <sup>b</sup>	-10,303 <sup>A</sup> -7,25 <sup>B</sup> -0,916 <sup>C</sup> -3,04 <sup>D</sup>	-1,354 <sup>a</sup> -0,619 <sup>b</sup>	2,21(-2) <sup>A</sup> 8,12 <sup>B</sup> 5,41(7) <sup>C</sup> 1,33(5) <sup>D</sup>	9,65(5) <sup>a</sup> 4,41(5) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 D^o_{3/2}$	1930,73 <sup>A</sup> 2754,80 <sup>B</sup> 1930,73 <sup>C</sup> 2754,80 <sup>D</sup>	8711,70 <sup>a</sup> 8714,42 <sup>b</sup>	-9,29 <sup>A</sup> -5,96 <sup>B</sup> 0,09 <sup>C</sup> -3,78 <sup>D</sup>	-0,233 <sup>a</sup> -0,167 <sup>b</sup>	2,27(-1) <sup>A</sup> 2,35(2) <sup>B</sup> 5,57(8) <sup>C</sup> 3,57(6) <sup>D</sup>	1,29(7) <sup>a</sup> 8,58(6) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 D^o_{3/2}$	1929,12 <sup>A</sup> 2758,17 <sup>B</sup> 1929,12 <sup>C</sup> 2758,17 <sup>D</sup>	8686,15 <sup>a</sup> 8688,66 <sup>b</sup>	-9,39 <sup>A</sup> -6,06 <sup>B</sup> -0,02 <sup>C</sup> 0,12 <sup>D</sup>	-0,284 <sup>a</sup> -0,337 <sup>b</sup>	1,79(-1) <sup>A</sup> 3,77(2) <sup>B</sup> 4,26(8) <sup>C</sup> 5,89(6) <sup>D</sup>	1,15(7) <sup>a</sup> 9,19(6) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^4 P_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^4 D^o_{1/2}$	1930,46 <sup>A</sup> 2756,16 <sup>B</sup> 1930,46 <sup>C</sup> 2756,16 <sup>D</sup>	8703,24 <sup>a</sup> 8705,26 <sup>b</sup>	-9,39 <sup>A</sup> -10,07 <sup>B</sup> -0,01 <sup>C</sup> -1,88 <sup>D</sup>	-0,310 <sup>a</sup> -0,368 <sup>b</sup>	3,56(-1) <sup>A</sup> 3,76(2) <sup>B</sup> 8,62(8) <sup>C</sup> 5,76(6) <sup>D</sup>	2,16(7) <sup>a</sup> 1,59(7) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 P^o_{3/2}$	1626,27 <sup>A</sup> 2740,27 <sup>B</sup> 1626,27 <sup>C</sup> 2740,27 <sup>D</sup>	8629,23 <sup>a</sup> 8631,88 <sup>b</sup>	-5,94 <sup>A</sup> -5,20 <sup>B</sup> 0,08 <sup>C</sup> -1,76 <sup>D</sup>	0,077 <sup>a</sup> 0,101 <sup>b</sup>	7,15(2) <sup>A</sup> 1,37(3) <sup>B</sup> 7,65(8) <sup>C</sup> 3,78(6) <sup>D</sup>	2,67(7) <sup>a</sup> 3,31(7) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 P^o_{3/2}$	1624,12 <sup>A</sup> 2746,68 <sup>B</sup> 1624,12 <sup>C</sup> 2746,68 <sup>D</sup>	8567,73 <sup>a</sup> 8570,18 <sup>b</sup>	-6,65 <sup>A</sup> -5,95 <sup>B</sup> -0,63 <sup>C</sup> -2,45 <sup>D</sup>	-0,670 <sup>a</sup> -0,612 <sup>b</sup>	1,39(2) <sup>A</sup> 4,91(2) <sup>B</sup> 1,48(8) <sup>C</sup> 1,53(6) <sup>D</sup>	4,86(6) <sup>a</sup> 6,45(6) <sup>b</sup>
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 P^o_{1/2}$	1625,11 <sup>A</sup> 2740,58 <sup>B</sup> 1625,11 <sup>C</sup> 2740,58 <sup>D</sup>	8655,88 <sup>a</sup> 8658,12 <sup>b</sup>	-6,63 <sup>A</sup> -5,92 <sup>B</sup> -0,62 <sup>C</sup> -2,46 <sup>D</sup>	-0,619 <sup>a</sup> -0,591 <sup>b</sup>	2,92(2) <sup>A</sup> 2,60(2) <sup>B</sup> 3,05(8) <sup>C</sup> 7,67(5) <sup>D</sup>	1,07(7) <sup>a</sup> 1,33(7) <sup>b</sup>

Tablo 3.3. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 P^o_{1/2}$	1622,96 <sup>A</sup>	8594,00 <sup>a</sup>	-6,63 <sup>A</sup>	-0,335 <sup>a</sup>	5,81(2) <sup>A</sup>	2,09(7) <sup>a</sup>
	761,44 <sup>B</sup>	8596,05 <sup>b</sup>	-4,99 <sup>B</sup>	-0,304 <sup>b</sup>	5,79(4) <sup>B</sup>	2,64(7) <sup>b</sup>
	1622,96 <sup>C</sup>		-0,32 <sup>C</sup>		6,08(8) <sup>C</sup>	
	761,44 <sup>D</sup>		-0,20 <sup>D</sup>		3,58(9) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 D^o_{5/2}$	1759,43 <sup>A</sup>	9392,79 <sup>a</sup>	-6,41 <sup>A</sup>	0,300 <sup>a</sup>	1,37(2) <sup>A</sup>	2,51(7) <sup>a</sup>
	2504,60 <sup>B</sup>	9395,47 <sup>b</sup>	-4,76 <sup>B</sup>	0,174 <sup>b</sup>	4,51(3) <sup>B</sup>	1,68(7) <sup>b</sup>
	2412,06 <sup>C</sup>		-2,21 <sup>C</sup>		1,16(6) <sup>C</sup>	
	2504,60 <sup>D</sup>		-1,60 <sup>D</sup>		6,65(6) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P_{3/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 D^o_{3/2}$	1760,52 <sup>A</sup>	9460,67 <sup>a</sup>	-7,32 <sup>A</sup>	-0,699 <sup>a</sup>	2,53(1) <sup>A</sup>	3,73(6) <sup>a</sup>
	2499,27 <sup>B</sup>	9463,78 <sup>b</sup>	-5,71 <sup>B</sup>	-0,806 <sup>b</sup>	5,11(2) <sup>B</sup>	2,63(6) <sup>b</sup>
	1760,52 <sup>C</sup>		-3,17 <sup>C</sup>		1,89(5) <sup>C</sup>	
	2499,27 <sup>D</sup>		-2,54 <sup>D</sup>		7,58(5) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P_{1/2} - 2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 D^o_{3/2}$	1758,00 <sup>A</sup>	9386,80 <sup>a</sup>	-6,66 <sup>A</sup>	0,052 <sup>a</sup>	1,17(2) <sup>A</sup>	2,13(7) <sup>a</sup>
	2504,60 <sup>B</sup>	9389,66 <sup>b</sup>	-5,02 <sup>B</sup>	-0,075 <sup>b</sup>	5,02(3) <sup>B</sup>	1,42(7) <sup>b</sup>
	1758,00 <sup>C</sup>		0,09 <sup>C</sup>		6,73(8) <sup>C</sup>	
	2504,60 <sup>D</sup>		-1,85 <sup>D</sup>		7,41(6) <sup>D</sup>	

<sup>a</sup> NIST [4], <sup>b</sup> Tayal [94] (Salıncı şiddeti  $f'$  den  $\log(gf)$ 'ye dönüştürülerek alındı.)

B çalışmasında ise 3.1.1'deki enerji seviyeleri için seçilen konfigürasyonlardan C çalışmasının tek ve çift konfigürasyon takımları seçildi. Bu hesaplama sonucunda elde edilen dalga boyu, logaritmik salıncı şiddeti ve geçiş olasılığı değerlerinin yine iyi uyumlu olmadığı görüldü.

C çalışmasında ise A çalışmasındaki konfigürasyon takımlarının aynısı seçildi. Ancak geçiş integralleri hesabında ilk ve son hallerde ait orbitallerden ortak olanlar ortanormal seçildi. Bunun sonucunda 2p–3s elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyu değerleri A çalışmasındaki ile aynı kalırken logaritmik salıncı şiddeti ve geçiş olasılığı değerleri A ve B çalışmalarına göre daha iyi uyumlu olarak elde edildi.

D çalışmasında ise 3.1.1'deki B çalışmasındaki konfigürasyon takımlarının aynısı seçildi. Yalnızca C çalışmasında yapıldığı gibi yine ilk ve son hallerdeki ortak orbitaller ortanormal seçildi. 3s–3p elektrik dipol geçişine ait dalga boyu değeri B çalışması ile aynı kalırken logaritmik salıncı şiddeti ve geçiş olasılığı değerleri için daha iyi sonuçlar elde edildi.

### 3.1.2.3. N I'de 2s–2p geçişleri

Azotun 2s–2p elektrik dipol geçişleri için Tablo 3.3'de A, B, C ve D üst indisli dört farklı çalışma verildi ve bunlar [4] ve [94] çalışma sonuçları ile karşılaştırıldı.

Tablo 3.4. N I atomuna ait 2s–2p elektrik dipol (E1) geçişleri için  $\lambda$  dalga boyları (Å),  $\log(gf)$  logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve  $A_{ki}$  geçiş olasılıkları ( $\text{sn}^{-1}$ )

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$2s^2 2p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 2s2p^4 4P_{1/2}$	954,67 <sup>A</sup>	1134,16 <sup>a</sup>	-0,746 <sup>A</sup>	-1,234 <sup>a</sup>	6,56(8) <sup>A</sup>	1,51(8) <sup>a</sup>
	977,43 <sup>B</sup>	1134,16 <sup>b</sup>	-0,552 <sup>B</sup>	-1,318 <sup>b</sup>	9,77(8) <sup>B</sup>	1,29(8) <sup>b</sup>
	1447,01 <sup>C</sup>		-0,71 <sup>C</sup>		3,05(8) <sup>C</sup>	
	1447,01 <sup>D</sup>		-0,75 <sup>D</sup>		2,80(8) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 2s2p^4 4P_{3/2}$	955,04 <sup>A</sup>	1134,41 <sup>a</sup>	-0,44 <sup>A3</sup>	-0,941 <sup>a</sup>	6,58(8) <sup>A</sup>	1,49(8) <sup>a</sup>
	977,82 <sup>B</sup>	1134,42 <sup>b</sup>	-0,25 <sup>B</sup>	-0,920 <sup>b</sup>	9,75(8) <sup>B</sup>	1,26(8) <sup>b</sup>
	1447,85 <sup>C</sup>		-0,41 <sup>C</sup>		3,04(8) <sup>C</sup>	
	1447,85 <sup>D</sup>		-0,454 <sup>D</sup>		2,79(8) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 2s2p^4 4P_{5/2}$	955,78 <sup>A</sup>	1134,98 <sup>a</sup>	-0,263 <sup>A</sup>	-0,779 <sup>a</sup>	6,64(8) <sup>A</sup>	1,44(8) <sup>a</sup>
	978,59 <sup>B</sup>	1134,98 <sup>b</sup>	-0,07 <sup>B</sup>	-0,920 <sup>b</sup>	9,67(8) <sup>B</sup>	1,20(8) <sup>b</sup>
	1449,53 <sup>C</sup>		-0,24 <sup>C</sup>		3,01(8) <sup>C</sup>	
	1449,53 <sup>D</sup>		-0,28 <sup>D</sup>		2,76(8) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^3 2D^{\circ}_{5/2} - 2s2p^4 2D_{5/2}$	756,41 <sup>A</sup>	4107,90 <sup>a</sup>	0,07 <sup>A</sup>	-1,729 <sup>a</sup>	2,29(9) <sup>A</sup>	3,33(8) <sup>a</sup>
	768,19 <sup>B</sup>		0,19 <sup>B</sup>		2,96(9) <sup>B</sup>	
	1045,20 <sup>C</sup>		0,06 <sup>C</sup>		1,18(9) <sup>C</sup>	
	1045,20 <sup>D</sup>		0,05 <sup>D</sup>		1,16(9) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^3 2D^{\circ}_{3/2} - 2s2p^4 2D_{5/2}$	756,48 <sup>A</sup>	4095,05 <sup>a</sup>	-1,08 <sup>A</sup>	-2,915 <sup>a</sup>	1,60(8) <sup>A</sup>	2,29(7) <sup>a</sup>
	768,25 <sup>B</sup>		-0,95 <sup>B</sup>		2,06(8) <sup>B</sup>	
	1045,31 <sup>C</sup>		-1,09 <sup>C</sup>		8,27(7) <sup>C</sup>	
	1045,31 <sup>D</sup>		-1,09 <sup>D</sup>		8,10(7) <sup>D</sup>	
$2s^2 2p^3 2P^{\circ}_{3/2} - 2s2p^4 2D_{5/2}$	855,21 <sup>A</sup>	1082,706 <sup>a</sup>	-0,49 <sup>A</sup>	-0,877 <sup>a</sup>	4,83(8) <sup>A</sup>	1,26(8) <sup>a</sup>
	860,58 <sup>B</sup>		-0,36 <sup>B</sup>		6,42(8) <sup>B</sup>	
	1242,67 <sup>C</sup>		-0,516 <sup>C</sup>		2,19(8) <sup>C</sup>	
	1242,67 <sup>D</sup>		-0,43 <sup>D</sup>		2,65(8) <sup>D</sup>	

<sup>a</sup>NIST [4], <sup>b</sup>Tayal [94] (Salıncı şiddeti  $f^{\circ}$  den  $\log(gf)^{\circ}$  ye dönüştürülerek alındı.)

A çalışmasında 3.1.1'de enerji seviyeleri için seçilen konfigürasyonlardan A hesabının tek ve çift pariteli konfigürasyon takımı seçildi. Bunun sonucunda elde edilen 2s–2p elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları, logaritmik salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları değerleri ile karşılaştırma değerleri arasında oldukça iyi uyum elde edildi.

B çalışmasında 3.1.1'de enerji seviyeleri için seçilen konfigürasyonlardan C hesabının tek paritesi için hesaplanan konfigürasyon ile B hesabının çift paritesi için

hesaplanan konfigürasyon takımları seçildi. Bunun sonucunda elde edilen 2s-2p elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları, logaritmik salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları değerleri ile [4] ve [94] ile verilen karşılaştırma değerleri arasında oldukça iyi bir uyum olduğu görüldü.

C çalışmasında ise 3.1.1'de enerji seviyeleri için seçilen konfigürasyonlardan B hesabının tek ve çift konfigürasyon takımları seçildi. Elde edilen sonuçların karşılaştırılan değerler ile oldukça iyi uyumlu olduğu görüldü.

D çalışmasında C çalışmasındaki konfigürasyon takımlarının aynısı seçildi. Ancak geçiş integralleri hesabında ilk ve son hallere ait orbitallerden ortak olanlar ortanormal seçildi. Bunun sonucunda elde edilen sonuçların karşılaştırma değerleri ile iyi uyumlu olduğu görüldü.

### 3.2. Nötral Fosfor (P I) için Hesaplama Sonuçları

P I atomunun temel hali  $[\text{Ne}]3s^23p^3^4S_{3/2}$ 'dir. P I için yapılan çalışmalarda önce bir Hartree-Fock hesabı 1s, 2s ve 2p seviyeleri dolu girilerek yapıldı. Azota ait hesaplamalarda olduğu gibi karşılıklı elektronlar arası etkileşmeyi dikkate almak için değişik konfigürasyon takımları seçildi. Fosfor için seviye enerjileri ve mümkün elektrik dipol (E1) geçişlerine ait dalga boyları, ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı. Bu hesaplamalar Tablolarda yine A, B, C ve D olarak gösterildi.

#### 3.2.1. P I'in seviye enerjileri

P I için yapılan hesaplamalarda, A ile gösterilen hesaplamada; tek parite için  $3p^3$ ,  $3p^2np$  (n=4-6),  $3pnp^2$  (n=4-6),  $3p^2nf$  (n=4-6), B hesaplamasında; tek parite için  $3p^3$ ,  $3p^2np$  (n=4-6),  $3p4p^2$ ,  $3p^2nf$  (n=4-6), C ile gösterilen hesaplamada; tek parite için  $3s^23p^3$ ,  $3s^23p^2np$  (n=4,5),  $3s^23p^2nf$  (n=4,5),  $3p^4np$  (n=4,5), ve D hesabında; tek parite için  $3s^23p^3$ ,  $3p^5$ ,  $3s^23p^24p$ ,  $3p^44p$  konfigürasyonları ve bu hesaplamaların tümünde çift parite için  $3s^23p^2ns$  (n=4,5),  $3s3p^4$ ,  $3s^23p^2nd$  (n=3,4) konfigürasyon setleri

kullanılarak bu seviyelere ait enerji değerleri hesaplandı ve bu hesaplama sonuçları Tablo 3.5’de verildi.

Tablo 3.5. Nötral fosfor (P I) için E (cm<sup>-1</sup>) enerji seviyeleri

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )				
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]	
3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	4S <sup>o</sup>	0,00	3/2	0,00	0,00	
		13543,20 <sup>A</sup>	3/2	13537,01 <sup>A</sup>	11361,01	
		13482,00 <sup>B</sup>		13475,52 <sup>B</sup>		
		13752,42 <sup>C</sup>		13746,98 <sup>C</sup>		
	2D <sup>o</sup>	14752,70 <sup>D</sup>			14742,62 <sup>D</sup>	
			5/2	13546,57 <sup>A</sup>	11376,63	
				13485,59 <sup>B</sup>		
				13755,57 <sup>C</sup>		
	2P <sup>o</sup>	23644,77 <sup>A</sup>	1/2	14755,56 <sup>D</sup>		
		23687,90 <sup>B</sup>		23636,44 <sup>A</sup>	18722,71	
		24683,12 <sup>C</sup>		23677,68 <sup>B</sup>		
		19986,37 <sup>D</sup>		24677,39 <sup>C</sup>		
		3/2	19992,49 <sup>D</sup>			
			23658,55 <sup>A</sup>	18748,01		
			23702,52 <sup>B</sup>			
			24695,07 <sup>C</sup>			
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4s	4P	55437,50 <sup>A</sup>	1/2	20001,24 <sup>D</sup>		
		55390,61 <sup>B</sup>		55237,23 <sup>A</sup>	55939,42	
		55310,24 <sup>C</sup>		55190,35 <sup>B</sup>		
		55973,32 <sup>D</sup>		55103,28 <sup>C</sup>		
	3/2		55773,05 <sup>D</sup>		55773,05 <sup>D</sup>	
			5/2	55360,04 <sup>A</sup>	56090,62	
				55313,16 <sup>B</sup>		
				55226,09 <sup>C</sup>		
	2P	57788,42 <sup>A</sup>	1/2	55895,86 <sup>D</sup>		
		57741,54 <sup>B</sup>		55562,86 <sup>A</sup>	56339,65	
		57661,16 <sup>C</sup>		55515,98 <sup>B</sup>		
		58324,23 <sup>D</sup>		55428,91 <sup>C</sup>		
3/2		5/2	56098,68 <sup>D</sup>			
			57634,26 <sup>A</sup>	57876,57		
			57587,37 <sup>B</sup>			
			57500,30 <sup>C</sup>			
3s3p <sup>4</sup>	4P	66166,63 <sup>A</sup>	5/2	58170,07 <sup>D</sup>		
		66119,75 <sup>B</sup>		58170,07 <sup>D</sup>		
		66039,37 <sup>C</sup>		57875,80 <sup>A</sup>	58174,36	
		66702,45 <sup>D</sup>		57828,91 <sup>B</sup>		
	3/2		5/2	57741,84 <sup>C</sup>		
				58411,62 <sup>D</sup>		
				66075,37 <sup>A</sup>	59534,54	
				66028,48 <sup>B</sup>		
		65941,41 <sup>C</sup>				
		66611,19 <sup>D</sup>				
		66233,53 <sup>A</sup>	59715,92			
		66186,65 <sup>B</sup>				
		66099,58 <sup>C</sup>				
		66769,35 <sup>D</sup>				

Tablo 3.5. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )			
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>2</sup> S <sup>o</sup>	77233,12 <sup>A</sup> 74719,06 <sup>B</sup> 66926,05 <sup>C</sup> 125107,70 <sup>D</sup>	1/2	66326,70 <sup>A</sup> 66279,81 <sup>B</sup> 66192,74 <sup>C</sup> 66862,52 <sup>D</sup>	59820,37
			1/2	77224,80 <sup>A</sup> 74712,56 <sup>B</sup> 66921,20 <sup>C</sup> 125104,45 <sup>D</sup>	64239,59
			3/2	67150,89 <sup>A</sup> 67104,00 <sup>B</sup> 67686,70 <sup>D</sup>	65156,24
			5/2	67154,54 <sup>A</sup> 67107,66 <sup>B</sup> 67690,36 <sup>D</sup>	65157,12
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> D)4s	<sup>2</sup> D	67143,77 <sup>A</sup> 67096,89 <sup>B</sup> 67016,52 <sup>C</sup> 67679,59 <sup>D</sup>	3/2	67150,89 <sup>A</sup> 67104,00 <sup>B</sup> 67686,70 <sup>D</sup>	65156,24
			5/2	67154,54 <sup>A</sup> 67107,66 <sup>B</sup> 67690,36 <sup>D</sup>	65157,12
			1/2	79221,04 <sup>A</sup> 76794,34 <sup>B</sup> 69020,91 <sup>C</sup> 129953,16 <sup>D</sup>	65 373,55
			3/2	79308,99 <sup>A</sup> 76873,04 <sup>B</sup> 69089,88 <sup>C</sup> 130043,63 <sup>D</sup>	65450,12
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>4</sup> D <sup>o</sup>	79491,77 <sup>A</sup> 77040,66 <sup>B</sup> 69226,54 <sup>C</sup> 130222,11 <sup>D</sup>	5/2	79457,45 <sup>A</sup> 77007,21 <sup>B</sup> 69203,97 <sup>C</sup> 130193,58 <sup>D</sup>	65585,13
			7/2	79668,24 <sup>A</sup> 77200,37 <sup>B</sup> 69361,77 <sup>C</sup> 130402,09 <sup>D</sup>	65788,45
			1/2	80916,95 <sup>A</sup> 78552,12 <sup>B</sup> 70665,81 <sup>C</sup> 133477,53 <sup>D</sup>	66343,43
			3/2	80987,69 <sup>A</sup> 78623,12 <sup>B</sup> 70726,30 <sup>C</sup> 133558,48 <sup>D</sup>	66360,28
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>4</sup> P <sup>o</sup>	81056,62 <sup>A</sup> 78679,75 <sup>B</sup> 70772,49 <sup>C</sup> 133619,55 <sup>D</sup>	5/2	81143,20 <sup>A</sup> 78760,48 <sup>B</sup> 70835,94 <sup>C</sup> 133691,39 <sup>D</sup>	66544,24
			3/2	80987,69 <sup>A</sup> 78623,12 <sup>B</sup> 70726,30 <sup>C</sup> 133558,48 <sup>D</sup>	66360,28
			1/2	80916,95 <sup>A</sup> 78552,12 <sup>B</sup> 70665,81 <sup>C</sup> 133477,53 <sup>D</sup>	66343,43
			3/2	80987,69 <sup>A</sup> 78623,12 <sup>B</sup> 70726,30 <sup>C</sup> 133558,48 <sup>D</sup>	66360,28
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>2</sup> D <sup>o</sup>	83397,32 <sup>A</sup> 81020,34 <sup>B</sup> 72673,13 <sup>C</sup> 178590,09 <sup>D</sup>	3/2	83218,23 <sup>A</sup> 80842,80 <sup>B</sup> 72565,46 <sup>C</sup> 178591,92 <sup>D</sup>	66813,27
			5/2	83524,91 <sup>A</sup> 81146,56 <sup>B</sup> 72753,31 <sup>C</sup> 178592,45 <sup>D</sup>	67113,87
			3/2	83218,23 <sup>A</sup> 80842,80 <sup>B</sup> 72565,46 <sup>C</sup> 178591,92 <sup>D</sup>	66813,27
			5/2	83524,91 <sup>A</sup> 81146,56 <sup>B</sup> 72753,31 <sup>C</sup> 178592,45 <sup>D</sup>	67113,87



Tablo 3.5. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )			
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>4</sup> S <sup>o</sup>	86200,09 <sup>B</sup>	3/2	86213,15 <sup>B</sup>	66834,65
		73911,39 <sup>C</sup>		73913,09 <sup>C</sup>	
		164919,28 <sup>D</sup>			
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>2</sup> P	69398,64 <sup>A</sup>	3/2	69358,80 <sup>A</sup>	67909,13
		69271,39 <sup>C</sup>		69311,91 <sup>B</sup>	
		69934,46 <sup>D</sup>		69224,84 <sup>C</sup>	
			1/2	69894,62 <sup>D</sup>	68126,61
				69473,18 <sup>A</sup>	
				69426,30 <sup>B</sup>	
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4p	<sup>2</sup> P <sup>o</sup>	86362,34 <sup>B</sup>	1/2	86329,52 <sup>B</sup>	67971,07
		75143,35 <sup>C</sup>		75121,13 <sup>C</sup>	
		188822,05 <sup>D</sup>		188813,44 <sup>D</sup>	
			3/2	86391,12 <sup>B</sup>	68088,07
				75159,61 <sup>C</sup>	
				188832,98 <sup>D</sup>	
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>4</sup> F	69511,34 <sup>A</sup>	3/2	69332,63 <sup>A</sup>	68183,18
		69464,45 <sup>B</sup>		69285,75 <sup>B</sup>	
		69384,08 <sup>C</sup>		69198,68 <sup>C</sup>	
		70047,16 <sup>D</sup>	5/2	69868,45 <sup>D</sup>	68262,15
				69402,02 <sup>A</sup>	
				69355,13 <sup>B</sup>	
			7/2	69268,06 <sup>C</sup>	68377,47
				69937,84 <sup>D</sup>	
				69495,40 <sup>A</sup>	
			9/2	69495,40 <sup>B</sup>	68532,65
				69361,45 <sup>C</sup>	
				70031,22 <sup>D</sup>	
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>4</sup> D	70105,52 <sup>A</sup>	1/2	70063,48 <sup>A</sup>	69878,03
		70058,63 <sup>B</sup>		70016,60 <sup>B</sup>	
		69978,27 <sup>C</sup>		69929,53 <sup>C</sup>	
		70641,34 <sup>D</sup>	3/2	70599,30 <sup>D</sup>	69894,31
				70079,64 <sup>A</sup>	
				70032,76 <sup>B</sup>	
			5/2	69945,69 <sup>C</sup>	69924,45
				70615,46 <sup>D</sup>	
				70097,95 <sup>A</sup>	
			7/2	70051,07 <sup>B</sup>	69980,07
				69964,00 <sup>C</sup>	
				70633,77 <sup>D</sup>	
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>2</sup> F	70257,23 <sup>A</sup>	5/2	70158,54 <sup>A</sup>	70391,80
		70210,34 <sup>B</sup>		70111,66 <sup>B</sup>	
		70129,98 <sup>C</sup>		70024,59 <sup>C</sup>	
		70793,05 <sup>D</sup>		70687,66 <sup>D</sup>	
				70694,36 <sup>D</sup>	

Tablo 3.5. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )									
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]						
3s3p <sup>4</sup>	<sup>2</sup> D	102874,28 <sup>A</sup> 102827,40 <sup>B</sup> 102747,02 <sup>C</sup> 103410,10 <sup>D</sup>	7/2	70368,66 <sup>A</sup> 70321,77 <sup>B</sup> 70234,70 <sup>C</sup> 70904,48 <sup>D</sup>	70689,50						
			5/2	102880,93 <sup>A</sup> 102834,04 <sup>B</sup> 102746,97 <sup>C</sup> 71620,29 <sup>D</sup>	71168,23						
			3/2	102882,41 <sup>A</sup> 102835,52 <sup>B</sup> 102748,45 <sup>C</sup> 71556,42 <sup>D</sup>	71202,98						
			3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5s	<sup>4</sup> P	72230,88 <sup>A</sup> 72183,99 <sup>B</sup> 72103,62 <sup>C</sup> 72766,70 <sup>D</sup>	1/2	72041,41 <sup>A</sup> 71994,52 <sup>B</sup> 71907,45 <sup>C</sup> 72577,23 <sup>D</sup>	72378,00			
						3/2	72158,55 <sup>A</sup> 72111,66 <sup>B</sup> 72024,59 <sup>C</sup> 72694,37 <sup>D</sup>	72572,40			
						5/2	72345,16 <sup>A</sup> 72298,27 <sup>B</sup> 72211,20 <sup>C</sup> 72880,98 <sup>D</sup>	71807,20			
						3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)3d	<sup>2</sup> D	71043,05 <sup>A</sup> 70996,17 <sup>B</sup> 70915,80 <sup>C</sup> 71578,87 <sup>D</sup>	3/2	71020,60 <sup>A</sup> 70973,72 <sup>B</sup> 70886,65 <sup>C</sup> 71556,42 <sup>D</sup>	72741,81
									5/2	71084,47 <sup>A</sup> 71037,59 <sup>B</sup> 70950,52 <sup>C</sup> 71620,29 <sup>D</sup>	72884,86
									3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5s	<sup>2</sup> P	74156,45 <sup>A</sup> 74109,56 <sup>B</sup> 74029,20 <sup>C</sup> 74692,27 <sup>D</sup>
			3/2	74230,35 <sup>A</sup> 74183,47 <sup>B</sup> 74096,40 <sup>C</sup> 74766,17 <sup>D</sup>	73249,80						
			3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> D)4p	<sup>2</sup> D <sup>o</sup>	94356,19 <sup>A</sup> 83073,35 <sup>C</sup> 134802,94 <sup>D</sup>	3/2	94388,79 <sup>A</sup> 83081,73 <sup>C</sup> 134728,25 <sup>D</sup>	74271,69			
						5/2	94345,26 <sup>A</sup> 83070,03 <sup>C</sup> 134879,16 <sup>D</sup>	74301,47			
5/2	93078,83 <sup>A</sup> 90082,70 <sup>B</sup> 80972,21 <sup>C</sup> 144346,52 <sup>D</sup>	74717,63									
<sup>2</sup> F <sup>o</sup>	93112,13 <sup>A</sup> 90089,24 <sup>B</sup> 81010,19 <sup>C</sup> 144467,19 <sup>D</sup>	5/2		93078,83 <sup>A</sup> 90082,70 <sup>B</sup> 80972,21 <sup>C</sup> 144346,52 <sup>D</sup>	74717,63						

Tablo 3.5. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )			
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>2</sup> S <sup>o</sup>	134214,44 <sup>A</sup> 190476,95 <sup>B</sup> 153313,80 <sup>C</sup>	7/2	93146,62 <sup>A</sup> 90104,56 <sup>B</sup> 81046,01 <sup>C</sup> 144565,72 <sup>D</sup>	74739,78
			1/2	134198,22 <sup>A</sup> 190447,52 <sup>B</sup> 153312,42 <sup>C</sup>	75104,42
			1/2	136434,77 <sup>A</sup> 194652,83 <sup>B</sup> 157618,64 <sup>C</sup>	75291,25
				3/2	139236,31 <sup>A</sup> 194590,06 <sup>B</sup> 157680,22 <sup>C</sup>
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>4</sup> D <sup>o</sup>	136809,69 <sup>A</sup> 195284,64 <sup>B</sup> 157801,19 <sup>C</sup>	5/2	136768,58 <sup>A</sup> 195194,16 <sup>B</sup> 157781,89 <sup>C</sup>	75484,46
			7/2	137054,25 <sup>A</sup> 195698,48 <sup>B</sup> 157922,16 <sup>C</sup>	75705,60
			1/2	97738,70 <sup>A</sup> 99593,96 <sup>B</sup> 75121,13 <sup>C</sup> 139575,92 <sup>D</sup>	75455,77
				3/2	97872,59 <sup>A</sup> 99772,40 <sup>B</sup> 75159,61 <sup>C</sup> 139564,69 <sup>D</sup>
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>2</sup> P	77079,50 <sup>A</sup> 77032,62 <sup>B</sup> 76952,24 <sup>C</sup> 77615,32 <sup>D</sup>	3/2	77025,65 <sup>A</sup> 76978,77 <sup>B</sup> 76891,70 <sup>C</sup> 77561,46 <sup>D</sup>	75676,09
			1/2	77220,84 <sup>A</sup> 77173,96 <sup>B</sup> 77086,89 <sup>C</sup> 77756,66 <sup>D</sup>	75813,72
			3/2	139236,31 <sup>A</sup> 198958,34 <sup>B</sup> 161419,48 <sup>C</sup>	75689,28
				1/2	139125,09 <sup>A</sup> 198786,02 <sup>B</sup> 161362,39 <sup>C</sup>
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>4</sup> P <sup>o</sup>	139326,42 <sup>A</sup> 199111,88 <sup>B</sup> 161463,47 <sup>C</sup>	5/2	139436,27 <sup>A</sup> 199254,69 <sup>B</sup> 161513,56 <sup>C</sup>	75905,11
			1/2	76877,62 <sup>A</sup> 76877,62 <sup>B</sup> 76790,55 <sup>C</sup> 77460,32 <sup>D</sup>	75833,18
				7/2	77075,27 <sup>A</sup> 77075,27 <sup>B</sup> 76988,20 <sup>C</sup> 77657,97 <sup>D</sup>

Tablo 3.5. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )				
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]	
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>4</sup> F	76800,04 <sup>A</sup>	3/2	76624,56 <sup>A</sup>	75949,47	
		76753,16 <sup>B</sup>		76577,68 <sup>B</sup>		
		76672,78 <sup>C</sup>		76490,61 <sup>C</sup>		
		77335,86 <sup>D</sup>		77160,38 <sup>D</sup>		
			5/2	76699,41 <sup>A</sup>		76045,99
				76652,53 <sup>B</sup>		
				76565,46 <sup>C</sup>		
				77235,23 <sup>D</sup>		
			7/2	76765,29 <sup>A</sup>		76173,35
				76718,41 <sup>B</sup>		
				76631,34 <sup>C</sup>		
				77301,11 <sup>D</sup>		
	9/2	76926,22 <sup>A</sup>	76318,01			
		76879,34 <sup>B</sup>				
		76792,27 <sup>C</sup>				
		77462,04 <sup>D</sup>				
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>4</sup> S <sup>o</sup>	143550,53 <sup>A</sup>	3/2	143549,27 <sup>A</sup>	76021,60	
		224194,86 <sup>B</sup>		200530,64 <sup>B</sup>		
		169556,28 <sup>C</sup>		169559,95 <sup>C</sup>		
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>2</sup> D <sup>o</sup>	141527,22 <sup>A</sup>	3/2	141423,12 <sup>A</sup>	76192,20	
		162538,11 <sup>C</sup>		162447,98 <sup>C</sup>		
			5/2	141619,62 <sup>A</sup>		76425,22
				200822,36 <sup>B</sup>		
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>4</sup> D	77176,42 <sup>A</sup>	1/2	77068,86 <sup>A</sup>	76566,49	
		77129,54 <sup>B</sup>		77021,98 <sup>B</sup>		
		77049,16 <sup>C</sup>		76934,91 <sup>C</sup>		
		77712,23 <sup>D</sup>	3/2	77604,68 <sup>D</sup>		76585,71
				77188,75 <sup>A</sup>		
				77141,86 <sup>B</sup>		
				77054,79 <sup>C</sup>		
			5/2	77724,56 <sup>D</sup>		76627,90
				77222,87 <sup>A</sup>		
				77175,98 <sup>B</sup>		
				77088,91 <sup>C</sup>		
			7/2	77758,69 <sup>D</sup>		76709,42
	77258,55 <sup>A</sup>					
	77211,67 <sup>B</sup>					
	77124,60 <sup>C</sup>					
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)5p	<sup>2</sup> P <sup>o</sup>	146344,02 <sup>A</sup>	1/2	146399,81 <sup>A</sup>	76762,28	
		253426,62 <sup>B</sup>		206822,19 <sup>B</sup>		
		167716,45 <sup>C</sup>		167695,70 <sup>C</sup>		
			3/2	146325,23 <sup>A</sup>		76875,25
				206996,38 <sup>B</sup>		
				167731,14 <sup>C</sup>		
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S)4s	<sup>2</sup> S	83888,83 <sup>A</sup>	1/2	83899,43 <sup>A</sup>	76912,25	
		83841,95 <sup>B</sup>		83852,55 <sup>B</sup>		
		83761,57 <sup>C</sup>		83765,48 <sup>C</sup>		
		84424,65 <sup>D</sup>		84435,25 <sup>D</sup>		

Tablo 3.5. Devam

Seviyeler		E (cm <sup>-1</sup> )				
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]	
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)4d	<sup>4</sup> P	76766,80 <sup>A</sup>	5/2	76649,81 <sup>A</sup>	77733,68	
		76719,92 <sup>B</sup>		76602,93 <sup>B</sup>		
		76639,55 <sup>C</sup>	3/2	76515,86 <sup>C</sup>		
		77302,62 <sup>D</sup>		77185,63 <sup>D</sup>		
				76772,57 <sup>A</sup>		
			76725,69 <sup>B</sup>	77888,81		
			76638,62 <sup>C</sup>			
			77308,39 <sup>D</sup>			
			1/2	76851,97 <sup>A</sup>		77965,50
				76805,09 <sup>B</sup>		
	76718,02 <sup>C</sup>					
3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> ( <sup>3</sup> P)6p	<sup>4</sup> S <sup>o</sup>	82453,14 <sup>B</sup>	3/2	82450,95 <sup>B</sup>	79621,43	
		379532,69 <sup>A</sup>	1/2	378879,00 <sup>A</sup>	79129,64	
			84502,27 <sup>B</sup>	3/2	84247,99 <sup>B</sup>	79100,12
		<sup>4</sup> D <sup>o</sup>		5/2	379091,72 <sup>A</sup>	79229,97
				84294,67 <sup>B</sup>		
			7/2	379443,12 <sup>A</sup>		
				84413,43 <sup>B</sup>		
				379926,72 <sup>A</sup>	79484,84	
			84656,47 <sup>B</sup>			

A çalışmasında, tek parite için yapılan hesaplamada 1s, 2s ve 2p tabakaları Hartree-Fock hesabında dolu alındı. Tek pariteli terimlere sahip seviyelerin enerjileri karşılaştırma değerlerine biraz uzak çıkarken çift pariteli terimlere ait enerji seviyelerinde iyi bir uyum elde edildi. Bu hesaplamada 3s<sup>2</sup>3p<sup>3</sup> <sup>2</sup>D<sup>o</sup><sub>3/2</sub> seviyesine bakıldığında karşılaştırma değeri 11361,01 cm<sup>-1</sup> iken bu çalışmada 13537,01 cm<sup>-1</sup> olduğu görülmektedir. Çift pariteli terimlerden 3s<sup>2</sup>3p<sup>2</sup>(<sup>3</sup>P)4s <sup>4</sup>P<sub>1/2</sub> seviyesine bakıldığında karşılaştırma değeri 55939,42 cm<sup>-1</sup> iken bu çalışmada 55237,23 cm<sup>-1</sup> bulundu ve çok iyi bir uyum elde edildi. Daha üst seviyelere bakıldığında tek pariteli terimlerde uyumsuzluğun arttığı gözlenirken çift pariteli terimlerde yine çok iyi uyum elde edilmiştir. Örneğin; 3s<sup>2</sup>3p<sup>2</sup>(<sup>3</sup>P)4d <sup>4</sup>P<sub>5/2</sub> seviyesi ele alındığında karşılaştırma değeri 77733,68 cm<sup>-1</sup> iken bu çalışmada 76649,81 cm<sup>-1</sup> olduğu görülmektedir. Ancak, çift pariteli terimlerde böyle çok iyi uyumlu sonuçlar elde edilmiş olmasına rağmen 3s3p<sup>4</sup> seviyesinde beklendiği kadar iyi bir uyum sağlanamamıştır. Bu seviyeye ait <sup>4</sup>P<sub>5/2</sub> teriminin karşılaştırma değeri 59534,54 cm<sup>-1</sup> iken bu çalışmada 66075,37 cm<sup>-1</sup> olarak hesaplandı. 3s3p<sup>4</sup> seviyelerinin iyileştirilmesi için daha fazla özden uyarılmış konfigürasyonlar alınabilir.

B çalışmasında, tek parite için yapılan hesaplamada 1s, 2s ve 2p tabakaları Hartree-Fock hesabında dolu girilerek hesaplama yapılmıştır. A'daki sonuçları daha da iyileştirmek için tek paritede seçilen konfigürasyon takımından  $3p5p^2$  ve  $3p6p^2$  konfigürasyonları çıkarıldı. Yapılan bu değişiklik sonucunda yine tek pariteli seviyeler karşılaştırma değerleri ile biraz uyumsuz çıkarken, çift pariteli terimlerin karşılaştırma değerleri ile oldukça uyumlu olduğu görüldü.  $3s^23p^3 \ ^2D^0_{3/2}$  seviyesine bakıldığında enerji seviyesi  $13475,52 \text{ cm}^{-1}$  elde edildi ve A hesabına göre daha iyi bir sonuç bulundu. Çift pariteli terimlerden  $3s^23p^2(^3P)4s \ ^4P_{1/2}$  seviyesinin enerjisi ise  $55190,35 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplanmış ve çift paritede yine çok iyi bir uyum elde edilmiştir.  $3s3p^4$  seviyesinin enerji değerlerinde ise yine A hesabında olduğu gibi istenilen derecede iyi bir uyum sağlanamadı.

Tek parite seviyelerindeki bu uyumsuzluğu iyileştirmek için yapılan C hesabında diğerlerinden farklı olarak Hartree-Fock hesabı yapılırken 1s, 2s ve 2p tabakaları dolu girildi. Sonuçları daha da iyileştirmek için B hesabına  $3p^44p$  ve  $3p^45p$  konfigürasyonları eklenirken  $3p4p^2$ ,  $3p^26p$  ve  $3p^26f$  konfigürasyonları çıkarıldı. Yapılan bu değişiklik sonucunda yine tek pariteli terimler karşılaştırma terimleri ile biraz uyumsuz çıkmış ancak ilk iki hesaba göre alt seviyelerin enerjilerinde biraz artış olmasına rağmen üst seviyelerdeki enerjiler daha iyi uyum elde edilmiştir. Çift pariteli terimlerin karşılaştırma değerleri ile son derece uyumlu olduğu görüldü.  $3s^23p^3 \ ^2D^0_{3/2}$  seviyesine bakıldığında enerji seviyesinin değeri  $13746,98 \text{ cm}^{-1}$  bulundu. Çift pariteli terimlerden  $3s^23p^2(^3P)4s \ ^4P_{1/2}$  seviyesinin enerjisi  $55103,28 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplanmış ve çift paritede yine çok iyi bir uyum elde edilmiştir.  $3s3p^4$  seviyesinin enerji değerlerinde ise yine A ve B hesabında olduğu gibi iyi bir uyum sağlanamadı.

D hesabında ise Hartree-Fock hesabı yapılırken yine 1s, 2s ve 2p tabakaları dolu girildi. Sonuçları daha da iyileştirmek için C hesabına  $3p^5$  ve  $3p^44p$  konfigürasyonları eklendi ve  $3s^23p^25p$ ,  $3s^23p^25f$ ,  $3s^23p^24f$ ,  $3p^44p$  ve  $3p^45p$  konfigürasyonları çıkarıldı. Bunun sonucunda tek pariteli seviyelerdeki uyumsuzluk daha da arttı. Çift pariteli seviyelerde ise enerji değerleri biraz artmasına rağmen yine de iyi uyumludur.

### 3.2.2. P I'de elektrik dipol geçişleri

P I atomuna ait elde edilen seviyeler arasındaki tüm mümkün elektrik dipol geçişleri de hesaplandı. Bu geçişlerden sadece  $3s^23p^3$  seviyesinde  $3s^23p^24s$  seviyesine,  $3s^23p^24s$  seviyesinden  $3s^23p^24p$  seviyesine ve  $3s^23p^3$  seviyesinden  $3s3p^4$  seviyesine olan elektrik dipol (E1) geçişlerine ait geçiş olasılıkları, dalga boyları ve ağırlıklı salıncı şiddetlerine ait sonuçlar sırasıyla Tablo 3.6, Tablo3.7 ve Tablo3.8'de verilmektedir.

#### 3.2.2.1. P I'de 3p–4s geçişleri

Fosfor'un 3p–4s elektrik dipol geçişleri için Tablo 3.6'da A, B ve C üst indisli üç farklı çalışma verildi ve bunlar [4], [58] ve [63] referans değerleri ile karşılaştırıldı.

A çalışmasında 3.2.1'de enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalardan A hesabının tek ve çift konfigürasyon takımları seçildi. Bu hesaplamalar sonucunda 3p–4s elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları karşılaştırma değerleri ile çok iyi bir uyum içerisinde. Ancak logaritmik salıncı şiddeti değerleri ve geçiş olasılıkları iyi değildir.

B çalışmasında 3.2.1'de enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalardan D hesabının tek ve çift konfigürasyon takımları seçilerek yapılan hesaplama sonucunda 3p–4s elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları A hesabına göre biraz kötüleşirken logaritmik salıncı şiddeti değerleri ile geçiş olasılığı değerlerinde iyileşme görüldü ve [4], [58] ve [63] çalışmaları ile iyi uyumlu olduğu görüldü.

C hesabında ise enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalardan B hesabının tek ve çift konfigürasyon takımları seçilerek yapılan hesaplama sonucunda 3p–4s elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları B hesabına göre karşılaştırma değerleri ile çok iyi bir uyum içinde olduğu görüldü.

Tablo 3.6. P I atomuna ait 3p–4s elektrik dipol (E1) geçişleri için  $\lambda$  dalga boyları (Å),  $\log(gf)$  logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve  $A_{ki}$  geçiş olasılıkları ( $\text{sn}^{-1}$ )

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^4P_{3/2}$	1778,34 <sup>A</sup> 1518,91 <sup>B</sup> 1807,24 <sup>C</sup>	1782,829 <sup>a</sup> 1750,560 <sup>b</sup> 1802,04 <sup>c</sup>	-2,48 <sup>A</sup> -0,33 <sup>B</sup> -0,40 <sup>C</sup>	-0,38 <sup>a</sup> -0,404 <sup>b</sup> -1,008 <sup>c</sup>	1,70(6) <sup>A</sup> 3,37(8) <sup>B</sup> 2,02(8) <sup>C</sup>	2,14(8) <sup>a</sup> 2,01(8) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^2P_{3/2}$	1702,18 <sup>A</sup> 1463,00 <sup>B</sup> 1728,64 <sup>C</sup>	1718,970 <sup>a</sup>	-5,09 <sup>A</sup> -3,37 <sup>B</sup> -3,52 <sup>C</sup>	-3,34 <sup>a</sup>	4,61(3) <sup>A</sup> 3,26(5) <sup>B</sup> 1,65(5) <sup>C</sup>	2,60(5) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^1D) ^2D_{3/2}$	1470,09 <sup>A</sup> 1288,20 <sup>B</sup> 1489,78 <sup>C</sup>	1534,772 <sup>a</sup>	-5,32 <sup>A</sup> -4,57 <sup>B</sup> -4,61 <sup>C</sup>	-4,94 <sup>a</sup>	3,68(3) <sup>A</sup> 2,64(4) <sup>B</sup> 1,80(4) <sup>C</sup>	8,20(3) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^4P_{5/2}$	1771,95 <sup>A</sup> 1514,24 <sup>B</sup> 1800,64 <sup>C</sup>	1774,949 <sup>a</sup> 1743,929 <sup>b</sup> 1795,07 <sup>c</sup>	-2,29 <sup>A</sup> -0,152 <sup>B</sup> -0,222 <sup>C</sup>	-0,211 <sup>a</sup> -0,236 <sup>b</sup> -0,829 <sup>c</sup>	1,81(6) <sup>A</sup> 3,41(8) <sup>B</sup> 2,05(8) <sup>C</sup>	2,17(8) <sup>a</sup> 2,043(8) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^1D) ^2D_{5/2}$	1470,01 <sup>A</sup> 1288,14 <sup>B</sup> 1489,70 <sup>C</sup>	1534,752 <sup>a</sup>	-4,41 <sup>A</sup> -3,65 <sup>B</sup> -3,69 <sup>C</sup>	-4,03 <sup>a</sup>	1,96(4) <sup>A</sup> 1,49(5) <sup>B</sup> 9,99(4) <sup>C</sup>	4,40(4) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^4P_{1/2}$	1782,23 <sup>A</sup> 1521,75 <sup>B</sup> 1811,26 <sup>C</sup>	1787,648 <sup>a</sup> 1754,591 <sup>b</sup> 1806,18 <sup>c</sup>	-2,80 <sup>A</sup> -0,63 <sup>B</sup> -0,70 <sup>C</sup>	-0,69 <sup>a</sup> -0,701 <sup>b</sup> -1,348 <sup>c</sup>	1,65(6) <sup>A</sup> 3,34(8) <sup>B</sup> 2,01(8) <sup>C</sup>	2,13(8) <sup>a</sup> 1,99(8) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^2P_{1/2}$	1709,21 <sup>A</sup> 1468,19 <sup>B</sup> 1735,89 <sup>C</sup>	1727,815 <sup>a</sup>	-5,73 <sup>A</sup> -3,98 <sup>B</sup> -4,12 <sup>C</sup>	-3,87 <sup>a</sup>	2,08(3) <sup>A</sup> 1,60(5) <sup>B</sup> 8,26(4) <sup>C</sup>	1,50(5) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 4D^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^4P_{5/2}$	2324,48 <sup>A</sup> 1907,42 <sup>B</sup> 2370,86 <sup>C</sup>	2222,586 <sup>a</sup>	-9,40 <sup>A</sup> -4,93 <sup>B</sup> -4,97 <sup>C</sup>	-4,62 <sup>a</sup>	8,06(-2) <sup>A</sup> 3,58(3) <sup>B</sup> 2,07(3) <sup>C</sup>	5,40(3) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 4D^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^1D) ^2D_{5/2}$	1831,10 <sup>A</sup> 1562,04 <sup>B</sup> 1859,76 <sup>C</sup>	1858,871 <sup>a</sup> 1816,403 <sup>b</sup> 1884,01 <sup>c</sup>	-4,597 <sup>A</sup> -1,21 <sup>B</sup> -1,28 <sup>C</sup>	-1,14 <sup>a</sup> -1,236 <sup>b</sup> -1,845 <sup>c</sup>	8,37(3) <sup>A</sup> 2,80(7) <sup>B</sup> 1,67(7) <sup>C</sup>	2,32(7) <sup>a</sup> 1,789(7) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 4D^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^4P_{3/2}$	2335,49 <sup>A</sup> 1914,82 <sup>B</sup> 2382,32 <sup>C</sup>	2234,961 <sup>a</sup>	-7,34 <sup>A</sup> -3,72 <sup>B</sup> -3,73 <sup>C</sup>	-3,41 <sup>a</sup>	1,39(1) <sup>A</sup> 8,59(4) <sup>B</sup> 5,45(4) <sup>C</sup>	1,30(5) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 4D^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^2P_{3/2}$	2205,88 <sup>A</sup> 1826,82 <sup>B</sup> 2247,61 <sup>C</sup>	2135,469 <sup>a</sup> 2198,266 <sup>b</sup> 2179,30 <sup>c</sup>	-4,60 <sup>A</sup> -1,17 <sup>B</sup> -1,16 <sup>C</sup>	-1,24 <sup>a</sup> -1,26 <sup>b</sup> -1,82 <sup>c</sup>	8,53(3) <sup>A</sup> 3,36(7) <sup>B</sup> 2,24(7) <sup>C</sup>	2,11(7) <sup>a</sup> 2,116(7) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 4D^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^1D) ^2D_{3/2}$	1831,22 <sup>A</sup> 1562,13 <sup>B</sup> 1859,88 <sup>C</sup>	1858,901 <sup>a</sup> 1816,801 <sup>b</sup> 1884,01 <sup>c</sup>	-3,34 <sup>A</sup> -0,27 <sup>B</sup> -0,35 <sup>C</sup>	-0,28 <sup>a</sup> -0,332 <sup>b</sup> -0,936 <sup>c</sup>	2,26(5) <sup>A</sup> 3,58(8) <sup>B</sup> 2,12(8) <sup>C</sup>	2,54(8) <sup>a</sup> 2,174(8) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 4D^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^4P_{1/2}$	2342,21 <sup>A</sup> 1919,34 <sup>B</sup> 2389,31 <sup>C</sup>	2242,543 <sup>a</sup>	-7,39 <sup>A</sup> -3,60 <sup>B</sup> -3,58 <sup>C</sup>	-3,22 <sup>a</sup>	2,46(1) <sup>A</sup> 2,25(5) <sup>B</sup> 1,51(5) <sup>C</sup>	4,00(5) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 4D^{\circ}_{3/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^2P_{1/2}$	2217,70 <sup>A</sup> 1834,92 <sup>B</sup> 2259,88 <sup>C</sup>	2149,142 <sup>a</sup> 2211,124 <sup>b</sup> 2191,65 <sup>c</sup>	-4,03 <sup>A</sup> -0,39 <sup>B</sup> -0,38 <sup>C</sup>	-0,356 <sup>a</sup> -0,422 <sup>b</sup> -1,002 <sup>c</sup>	6,27(4) <sup>A</sup> 4,02(8) <sup>B</sup> 2,71(8) <sup>C</sup>	3,18(8) <sup>a</sup> 2,763(8) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 4D^{\circ}_{5/2} - 3s^2 3p^2 4s(^3P) ^4P_{5/2}$	2325,12 <sup>A</sup> 1907,56 <sup>B</sup> 2371,50 <sup>C</sup>	2223,358 <sup>a</sup>	-7,61 <sup>A</sup> -3,75 <sup>B</sup> -3,80 <sup>C</sup>	-3,41 <sup>a</sup>	5,00 <sup>A</sup> 5,38(4) <sup>B</sup> 3,09(4) <sup>C</sup>	8,80(4) <sup>a</sup>



Tablo 3.6. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$3s^2 3p^3 2D_{5/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^1D) 2D_{5/2}$	1831,49 <sup>A</sup> 1562,15 <sup>B</sup>	1859,410 <sup>a</sup> 1884,51 <sup>c</sup>	-3,138 <sup>A</sup> -0,08 <sup>B</sup>	-0,086 <sup>a</sup> -0,920 <sup>c</sup>	2,40(5) <sup>A</sup> 3,72(8) <sup>B</sup>	2,64(8) <sup>a</sup> 2,255(8) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 2D_{5/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^3P) 4P_{3/2}$	2336,13 <sup>A</sup> 1914,97 <sup>B</sup> 2382,96 <sup>C</sup>	2235,742 <sup>a</sup>	-6,829 <sup>A</sup> -3,08 <sup>B</sup> -3,06 <sup>C</sup>	-2,73 <sup>a</sup>	4,52(1) <sup>A</sup> 3,75(5) <sup>B</sup> 2,53(5) <sup>C</sup>	6,20(5) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 2D_{5/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^3P) 2P_{3/2}$	2206,46 <sup>A</sup> 1826,96 <sup>B</sup> 2248,18 <sup>C</sup>	2136,182 <sup>a</sup> 2198,85 <sup>b</sup> 2179,93 <sup>c</sup>	-3,73 <sup>A</sup> -0,138 <sup>B</sup> -0,13 <sup>C</sup>	-0,111 <sup>a</sup> -0,177 <sup>b</sup> -0,929 <sup>c</sup>	6,28(4) <sup>A</sup> 3,62(8) <sup>B</sup> 2,44(8) <sup>C</sup>	2,83(8) <sup>a</sup> 2,478(8) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 2D_{5/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^1D) 2D_{3/2}$	1831,62 <sup>A</sup> 1562,23 <sup>B</sup> 1860,27 <sup>C</sup>	1859,441 <sup>a</sup> 1884,48 <sup>c</sup>	-4,36 <sup>A</sup> -1,28 <sup>B</sup> -1,36 <sup>C</sup>	-1,329 <sup>a</sup> -2,15 <sup>c</sup>	2,13(4) <sup>A</sup> 3,53(7) <sup>B</sup> 2,06(7) <sup>C</sup>	2,26(7) <sup>a</sup> 1,973(7) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{3/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^3P) 4P_{1/2}$	3143,84 <sup>A</sup> 2406,22 <sup>B</sup> 3160,75 <sup>C</sup>	2687,995 <sup>a</sup>	-7,84 <sup>A</sup> -4,27 <sup>B</sup> -4,18 <sup>C</sup>	-4,05 <sup>a</sup>	4,79 <sup>A</sup> 3,03(4) <sup>B</sup> 2,17(4) <sup>C</sup>	4,10(4) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{3/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^3P) 2P_{1/2}$	2923,53 <sup>A</sup> 2275,00 <sup>B</sup> 2938,14 <sup>C</sup>	2554,911 <sup>a</sup> 2492,228 <sup>b</sup>	-3,93 <sup>A</sup> -1,286 <sup>B</sup> -1,17 <sup>C</sup>	-1,231 <sup>a</sup> -1,397 <sup>b</sup>	4,51(4) <sup>A</sup> 3,33(7) <sup>B</sup> 2,55(7) <sup>C</sup>	3,00(7) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{3/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^3P) 4P_{3/2}$	3131,75 <sup>A</sup> 2399,13 <sup>B</sup> 3148,52 <sup>C</sup>	2677,110 <sup>a</sup>	-5,98 <sup>A</sup> -3,65 <sup>B</sup> -3,49 <sup>C</sup>	-3,25 <sup>a</sup>	1,77(2) <sup>A</sup> 6,36(4) <sup>B</sup> 5,39(4) <sup>C</sup>	1,30(5) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{3/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^3P) 2P_{3/2}$	2903,03 <sup>A</sup> 2262,57 <sup>B</sup> 2917,44 <sup>C</sup>	2535,612 <sup>a</sup> 2475,904 <sup>b</sup> 2183,04 <sup>c</sup>	-3,23 <sup>A</sup> -0,547 <sup>B</sup> -0,411 <sup>C</sup>	-0,44 <sup>a</sup> -0,588 <sup>b</sup> -1,422 <sup>c</sup>	1,15(5) <sup>A</sup> 9,22(7) <sup>B</sup> 7,08(7) <sup>C</sup>	9,50(7) <sup>a</sup> 3,525(7) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{3/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^1D) 2D_{3/2}$	2287,19 <sup>A</sup> 1870,11 <sup>B</sup> 2296,12 <sup>C</sup>	2154,113 <sup>a</sup> 2002,376 <sup>b</sup>	-3,57 <sup>A</sup> -1,616 <sup>B</sup> -1,645 <sup>C</sup>	-1,317 <sup>a</sup> -1,677 <sup>b</sup>	8,43(4) <sup>A</sup> 1,15(7) <sup>B</sup> 7,16(6) <sup>C</sup>	1,73(7) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{3/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^3P) 4P_{5/2}$	3111,99 <sup>A</sup> 2387,51 <sup>B</sup> 3128,55 <sup>C</sup>	2659,374 <sup>a</sup>	-6,56 <sup>A</sup> -6,88 <sup>B</sup> -5,98 <sup>C</sup>	-6,58 <sup>a</sup>	3,10(1) <sup>A</sup> 2,54(1) <sup>B</sup> 1,16(2) <sup>C</sup>	4,10(1) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{3/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^1D) 2D_{5/2}$	2287,00 <sup>A</sup> 1869,99 <sup>B</sup> 2295,93 <sup>C</sup>	2154,072 <sup>a</sup> 2001,892 <sup>b</sup>	-2,66 <sup>A</sup> -0,80 <sup>B</sup> -0,83 <sup>C</sup>	-0,62 <sup>a</sup> -0,946 <sup>b</sup>	4,58(5) <sup>A</sup> 4,99(7) <sup>B</sup> 3,07(7) <sup>C</sup>	5,80(7) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{1/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^3P) 4P_{3/2}$	3129,55 <sup>A</sup> 2399,27 <sup>B</sup> 3145,62 <sup>C</sup>	2675,297 <sup>a</sup>	-7,096 <sup>A</sup> -4,36 <sup>B</sup> -4,22 <sup>C</sup>	-3,94 <sup>a</sup>	1,36(1) <sup>A</sup> 1,24(4) <sup>B</sup> 9,97(3) <sup>C</sup>	2,70(4) <sup>a</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{1/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^3P) 2P_{3/2}$	2901,14 <sup>A</sup> 2262,70 <sup>B</sup> 2914,94 <sup>C</sup>	2533,986 <sup>a</sup> 2475,595 <sup>b</sup> 2588,52 <sup>c</sup>	-3,89 <sup>A</sup> -1,23 <sup>B</sup> -1,12 <sup>C</sup>	-1,113 <sup>a</sup> -1,28 <sup>b</sup> -1,535 <sup>c</sup>	2,53(4) <sup>A</sup> 1,90(7) <sup>B</sup> 1,45(7) <sup>C</sup>	2,00(7) <sup>a</sup> 1,45(7) <sup>c</sup>
$3s^2 3p^3 2P_{1/2}^o - 3s^2 3p^2 4s(^1D) 2D_{3/2}$	2286,01 <sup>A</sup> 2294,57 <sup>C</sup>	2152,939 <sup>a</sup> 2002,173 <sup>b</sup>	-2,90 <sup>A</sup> -1,10 <sup>C</sup>	-0,87 <sup>a</sup> -1,200 <sup>b</sup>	3,99(5) <sup>A</sup> 2,49(7) <sup>C</sup>	4,85(7) <sup>a</sup>

<sup>a</sup>NIST [4], <sup>b</sup>Fawcett, [58], <sup>c</sup>Fischer, Tachiev, Irimia [63]

### 3.2.2.2. P I'de 4s–4p geçişleri

Fosforun 4s–4p elektrik dipol geçişleri için Tablo 3.7'de A ve B üst indisli iki farklı çalışma verildi ve bunlar [4], [58] ve [63] çalışmaları ile karşılaştırıldı.

A çalışmasında 3.2.1'de enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalardan C hesabının tek ve çift konfigürasyon takımları seçilerek yapılan hesaplama sonucunda 4s-4p elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları, logaritmik salıncı şiddeti ve geçiş olasılığı değerleri karşılaştırma değerleri ile kıyaslandığında iyi değildir.

Tablo 3.7. P I atomuna ait 4s–4p elektrik dipol (E1) geçişleri için  $\lambda$  dalga boyları (Å),  $\log(gf)$  logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve  $A_{ki}$  geçiş olasılıkları ( $\text{sn}^{-1}$ )

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 2S^o_{1/2}$	6021,01 <sup>A</sup> 6021,01 <sup>B</sup>	11998,70 <sup>c</sup>	-12,11 <sup>A</sup> -2,55 <sup>B</sup>	-2,967 <sup>c</sup>	7,09(-5) <sup>A</sup> 2,56(5) <sup>B</sup>	9,981(4) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 4D^o_{1/2}$	5270,53 <sup>A</sup> 5270,53 <sup>B</sup>	10769,51 <sup>a</sup> 10588,58 <sup>c</sup>	-7,39 <sup>A</sup> -0,77 <sup>B</sup>	-0,94 <sup>a</sup> -1,01 <sup>b</sup> -1,619 <sup>c</sup>	4,83 <sup>A</sup> 1,99(7) <sup>B</sup>	3,3(6) <sup>a</sup> 2,859(6) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 4P^o_{1/2}$	4782,74 <sup>A</sup> 4782,74 <sup>B</sup>	9750,748 <sup>a</sup> 9661,03 <sup>c</sup>	-10,37 <sup>A</sup> -0,00 <sup>B</sup>	-0,20 <sup>a</sup> -0,17 <sup>b</sup> -0,781 <sup>c</sup>	6,19(-3) <sup>A</sup> 1,45(8) <sup>B</sup>	2,2(7) <sup>a</sup> 2,364(7) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 4S^o_{3/2}$	3755,88 <sup>A</sup> 3755,88 <sup>B</sup>	9304,948 <sup>a</sup> 9214,92 <sup>c</sup>	-4,03 <sup>A</sup> -0,004 <sup>B</sup>	-0,30 <sup>a</sup> -1,087 <sup>c</sup>	1,09(4) <sup>A</sup> 1,17(8) <sup>B</sup>	9,6(6) <sup>a</sup> 6,418(6) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 4P^o_{3/2}$	4765,90 <sup>A</sup> 4765,90 <sup>B</sup>	9734,755 <sup>a</sup> 9637,55 <sup>c</sup>	-7,31 <sup>A</sup> -0,38 <sup>B</sup>	-0,70 <sup>a</sup> -0,874 <sup>c</sup>	3,54774 <sup>A</sup> 3,000(7) <sup>B</sup>	3,5(6) <sup>a</sup> 9,586(6) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 4D^o_{3/2}$	5247,92 <sup>A</sup> 5247,92 <sup>B</sup>	10681,40 <sup>a</sup> 10514,12	-6,56 <sup>A</sup> 0,06 <sup>B</sup>	-0,12 <sup>a</sup> -0,15 <sup>b</sup> -0,760 <sup>c</sup>	1,64(1) <sup>A</sup> 6,95(7) <sup>B</sup>	1,1(7) <sup>a</sup> 1,048(7) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 4D^o_{5/2}$	5210,35 <sup>A</sup> 5210,35 <sup>B</sup>	10529,52 <sup>a</sup> 10385,94 <sup>c</sup>	-6,28 <sup>A</sup> 0,41 <sup>B</sup>	0,18 <sup>a</sup> -0,353 <sup>c</sup>	2,13(1) <sup>A</sup> 1,05(8) <sup>B</sup>	1,5(7) <sup>a</sup> 1,825(7) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 4P^o_{5/2}$	4735,34 <sup>A</sup> 4735,34 <sup>B</sup>	9563,444 <sup>a</sup> 9497,79 <sup>c</sup>	-8,73 <sup>A</sup> -0,05 <sup>B</sup>	-0,18 <sup>a</sup> -0,928 <sup>c</sup>	9,04(-2) <sup>A</sup> 4,38(7) <sup>B</sup>	8,1(6) <sup>a</sup> 5,813(6) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{3/2}-3s^23p^24p(^1D) \rightarrow 2D^o_{5/2}$	4195,20 <sup>A</sup> 4195,20 <sup>B</sup>	8942,80 <sup>c</sup>	-9,70 <sup>A</sup> -4,81 <sup>B</sup>	-0,684 <sup>c</sup>	1,25(-2) <sup>A</sup> 9,56(2) <sup>B</sup>	7,669(4) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 2S^o_{1/2}$	5976,82 <sup>A</sup> 5976,82 <sup>B</sup>	11818,53 <sup>c</sup>	-11,43 <sup>A</sup> -3,07 <sup>B</sup>	-3,125 <sup>c</sup>	3,46(-4) <sup>A</sup> 7,86(4) <sup>B</sup>	3,578(4) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 4P^o_{1/2}$	5236,63 <sup>A</sup> 5236,63 <sup>B</sup>	9609,037 <sup>a</sup> 9543,89 <sup>c</sup>	-6,69 <sup>A</sup> -0,01 <sup>B</sup>	-0,91 <sup>a</sup> -1,304 <sup>c</sup>	2,44(1) <sup>A</sup> 1,18(8) <sup>B</sup>	3,633(6) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) \rightarrow 4P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) \rightarrow 4S^o_{3/2}$	3738,64 <sup>A</sup> 3738,64 <sup>B</sup>	9175,813 <sup>a</sup> 9108,29 <sup>c</sup>	-4,34 <sup>A</sup> -0,32 <sup>B</sup>	-0,60 <sup>a</sup> -1,362 <sup>c</sup>	5,41(3) <sup>A</sup> 5,65(7) <sup>B</sup>	5,0(6) <sup>a</sup> 1,745(6) <sup>c</sup>

Tablo 3.7. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$3s^23p^24s(^3P) ^4P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4D^o_{3/2}$	5214,31 <sup>A</sup>	10511,58 <sup>a</sup>	-6,71 <sup>A</sup>	-0,23 <sup>a</sup>	1,19(1) <sup>A</sup>	8,8(6) <sup>a</sup>
	5214,31 <sup>B</sup>	10375,53 <sup>c</sup>	0,02 <sup>B</sup>	-0,42 <sup>c</sup>	6,42(7) <sup>B</sup>	1,156(7) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) ^4P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4P^o_{3/2}$	4738,17 <sup>A</sup>	9593,505 <sup>a</sup>	-7,40 <sup>A</sup>	-0,22 <sup>a</sup>	2,93 <sup>A</sup>	1,1(7) <sup>a</sup>
	4738,17 <sup>B</sup>	9520,97 <sup>c</sup>	-0,006 <sup>B</sup>	-0,453 <sup>c</sup>	6,79(7) <sup>B</sup>	1,296(7) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) ^4P_{5/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4D^o_{3/2}$	5304,38 <sup>A</sup>	10973,37 <sup>a</sup>	-7,69 <sup>A</sup>	-1,16 <sup>a</sup>	1,19 <sup>A</sup>	9,5(5) <sup>a</sup>
	5304,38 <sup>B</sup>	10758,01 <sup>c</sup>	-1,08 <sup>B</sup>	-2,176 <sup>c</sup>	4,87(6) <sup>B</sup>	5752(5) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) ^4P_{5/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4P^o_{3/2}$	4781,26 <sup>A</sup>	9842,07 <sup>c</sup>	-6,99 <sup>A</sup>	-0,70 <sup>b</sup>	7,34 <sup>A</sup>	5,246(6) <sup>c</sup>
	4781,26 <sup>B</sup>		0,42 <sup>B</sup>	-1,294 <sup>c</sup>	1,28(8) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^4P_{5/2}-3s^23p^24p(^1D) ^2D^o_{3/2}$	4284,49 <sup>A</sup>	9334,61 <sup>c</sup>	-11,59 <sup>A</sup>	-2,53 <sup>c</sup>	2,32(-4) <sup>A</sup>	3,332(5) <sup>c</sup>
	4284,49 <sup>B</sup>		-3,31 <sup>B</sup>		4,38(4) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^4P_{5/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4S^o_{3/2}$	3784,71 <sup>A</sup>	9525,741 <sup>a</sup>	-3,83 <sup>A</sup>	-0,12 <sup>a</sup>	1,68(4) <sup>A</sup>	1,4(7) <sup>a</sup>
	3784,71 <sup>B</sup>	9401,73 <sup>c</sup>	0,202 <sup>B</sup>	-0,01 <sup>b</sup>	1,85(8) <sup>B</sup>	2,34(7) <sup>c</sup>
				-0,684 <sup>c</sup>		
$3s^23p^24s(^3P) ^4P_{5/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4D^o_{5/2}$	5266,00 <sup>A</sup>	10813,14 <sup>a</sup>	-6,64 <sup>A</sup>	-0,20 <sup>a</sup>	9,00 <sup>A</sup>	6,06(6) <sup>a</sup>
	5266,00 <sup>B</sup>	10623,86 <sup>c</sup>	-0,06 <sup>B</sup>	-0,35 <sup>b</sup>	3,41(7) <sup>B</sup>	4,455(6) <sup>c</sup>
				-1,122 <sup>c</sup>		
$3s^23p^24s(^3P) ^4P_{5/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4P^o_{5/2}$	4781,26 <sup>A</sup>	9796,828 <sup>a</sup>	-9,05 <sup>A</sup>	0,19 <sup>a</sup>	4,27(-2) <sup>A</sup>	1,8(7) <sup>a</sup>
	4781,26 <sup>B</sup>	9696,36 <sup>c</sup>	0,42 <sup>B</sup>	0,26 <sup>c</sup>	1,28(8) <sup>B</sup>	2,137(7) <sup>c</sup>
				-0,521 <sup>c</sup>		
$3s^23p^24s(^3P) ^4P_{5/2}-3s^23p^24p(^1D) ^2D^o_{5/2}$	4231,21 <sup>A</sup>	9118,63 <sup>c</sup>	-9,58 <sup>A</sup>	-2,491 <sup>c</sup>	1,61(-2) <sup>A</sup>	2,587(5) <sup>c</sup>
	4231,21 <sup>B</sup>		-2,21 <sup>B</sup>		3,79(5) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4D^o_{5/2}$	5996,35 <sup>A</sup>	–	-8,38 <sup>A</sup>	0,27 <sup>b</sup>	1,27(-1) <sup>A</sup>	–
	5996,35 <sup>B</sup>		-2,79 <sup>B</sup>		4,98(4) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4P^o_{5/2}$	5375,75 <sup>A</sup>	11877,39 <sup>c</sup>	-8,48 <sup>A</sup>	-2,26 <sup>c</sup>	1,25(-1) <sup>A</sup>	1,699(5) <sup>c</sup>
	5375,75 <sup>B</sup>		-2,55 <sup>B</sup>		1,07(5) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^1D) ^2D^o_{5/2}$	4690,21 <sup>A</sup>	11021,99 <sup>c</sup>	-6,55 <sup>A</sup>	0,34 <sup>b</sup>	1,41(1) <sup>A</sup>	1,967(7) <sup>c</sup>
	4690,21 <sup>B</sup>		0,44 <sup>B</sup>	-0,269 <sup>c</sup>	1,40(8) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4P^o_{3/2}$	5415,17 <sup>A</sup>	–	-8,63 <sup>A</sup>	–	1,30(-1) <sup>A</sup>	–
	5415,17 <sup>B</sup>		-3,21 <sup>B</sup>		3,49(4) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4D^o_{3/2}$	6046,16 <sup>A</sup>	–	-9,05 <sup>A</sup>	–	4,07(-2) <sup>A</sup>	–
	6046,16 <sup>B</sup>		-3,50 <sup>B</sup>		1,41(4) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^1D) ^2D^o_{3/2}$	4755,77 <sup>A</sup>	11339,12 <sup>c</sup>	-7,58 <sup>A</sup>	-1,318 <sup>c</sup>	1,90 <sup>A</sup>	2,492(6) <sup>c</sup>
	4755,77 <sup>B</sup>		-0,47 <sup>B</sup>		2,45(7) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4S^o_{3/2}$	4147,80 <sup>A</sup>	–	-8,78 <sup>A</sup>	–	1,57(-1) <sup>A</sup>	–
	4147,80 <sup>B</sup>		-1,34 <sup>B</sup>		4,41(6) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) ^2S^o_{1/2}$	7095,85 <sup>A</sup>	16064,70 <sup>c</sup>	-9,84 <sup>A</sup>	-0,999 <sup>c</sup>	9,37(-3) <sup>A</sup>	5,175(6) <sup>c</sup>
	7095,85 <sup>B</sup>		-0,17 <sup>B</sup>		4,38(7) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4D^o_{1/2}$	6076,19 <sup>A</sup>	–	-10,55 <sup>A</sup>	–	2,53(-3) <sup>A</sup>	–
	6076,19 <sup>B</sup>		-6,56 <sup>B</sup>		2,43(1) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{3/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4P^o_{1/2}$	5436,92 <sup>A</sup>	12133,79 <sup>c</sup>	-9,76 <sup>A</sup>	-3,057 <sup>c</sup>	1,94(-2) <sup>A</sup>	7,932(4) <sup>c</sup>
	5436,92 <sup>B</sup>		-2,52 <sup>B</sup>		3,34(5) <sup>B</sup>	
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4D^o_{3/2}$	5959,13 <sup>A</sup>	–	-8,96 <sup>A</sup>	-0,10 <sup>b</sup>	5,12(-2) <sup>A</sup>	–
	5959,13 <sup>B</sup>		-3,30 <sup>B</sup>		2,31(4) <sup>B</sup>	

Tablo 3.7. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4P^o_{3/2}$	5345,25 <sup>A</sup> 5345,25 <sup>B</sup>	–	-8,73 <sup>A</sup> -4,00 <sup>B</sup>	–	1,07(-1) <sup>A</sup> 5,74(3) <sup>B</sup>	–
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{1/2}-3s^23p^24p(^1D) ^2D^o_{3/2}$	4701,76 <sup>A</sup> 4701,76 <sup>B</sup>	11016,21 <sup>c</sup>	-6,89 <sup>A</sup> 0,187 <sup>B</sup>	-0,207 <sup>c</sup>	9,71 <sup>A</sup> 1,16(8) <sup>B</sup>	1,704(7) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4S^o_{3/2}$	4106,66 <sup>A</sup> 4106,66 <sup>B</sup>	11109,80 <sup>c</sup>	-8,78 <sup>A</sup> -1,99 <sup>B</sup>	-2,283 <sup>c</sup>	1,63(-1) <sup>A</sup> 1,09(6) <sup>B</sup>	1,406(5) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) ^2S^o_{1/2}$	6976,28 <sup>A</sup> 6976,28 <sup>B</sup>	15424,16 <sup>c</sup>	-9,57 <sup>A</sup> -0,44 <sup>B</sup>	-0,924 <sup>c</sup>	1,88(-2) <sup>A</sup> 2,44(7) <sup>B</sup>	3,340(6) <sup>c</sup>
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4D^o_{1/2}$	5988,30 <sup>A</sup> 5988,30 <sup>B</sup>	–	-10,11 <sup>A</sup> -3,82 <sup>B</sup>	-0,17 <sup>b</sup>	7,14(-3) <sup>A</sup> 1,38(4) <sup>B</sup>	–
$3s^23p^24s(^3P) ^2P_{1/2}-3s^23p^24p(^3P) ^4P^o_{1/2}$	5366,45 <sup>A</sup> 5366,45 <sup>B</sup>	11764,77 <sup>c</sup>	-9,48 <sup>A</sup> -3,01 <sup>B</sup>	-2,923 <sup>c</sup>	3,75(-2) <sup>A</sup> 1,12(5) <sup>B</sup>	5,746(4) <sup>c</sup>

<sup>a</sup>NIST [4], <sup>b</sup>Biemont, Martin, Quinet and Zeippen [71], <sup>c</sup>Fischer, Tachiev, Irimia [63]

B çalışmasında A çalışmasındaki konfigürasyon takımı seçildi. Geçiş integralleri hesaplandığında ilk ve son hallere ait ortak tabakalı orbitaller ortonormal seçildi. Bunun sonucunda da 4s–4p elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları değerleri karşılaştırma değerleri ile iyi uyumlu değildir. Ancak logaritmik salınıcı şiddeti değerleri ve geçiş olasılığı değerleri A hesabına göre daha iyidir.

### 3.2.2.3. P I'deki 3s–3p geçişleri

Fosforun 3s–3p elektrik dipol geçişleri için Tablo 3.8'de A, B ve C üst indisli üç farklı çalışma verildi ve bunlar [4], [58] ve [63] referans değerleri ile karşılaştırıldı.

A çalışmasında enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalardan C hesabının tek ve çift konfigürasyon takımları seçilerek yapılan hesaplama sonucunda 3s–3p elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları, logaritmik salınıcı şiddeti değerleri ve geçiş olasılığı değerleri karşılaştırma değerleri ile biraz uyumlu olmasına rağmen beklendiği kadar iyi sonuçlar değildir.

B çalışmasında enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalardan B hesabının tek ve çift konfigürasyon takımları seçildi ve Geçiş integralleri hesaplandığında ilk ve son hallere ait ortak tabakalı orbitaller ortonormal seçildi. Bunun sonucunda 3s–3p

elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyu değeri, logaritmik salıncı şiddeti değeri ve geçiş olasılığı değerleri karşılaştırılan diğer hesaplamalar ile oldukça iyi uyumlu olarak elde edildi.

Tablo 3.8. P I atomuna ait 3s–3p elektrik dipol (E1) geçişleri için  $\lambda$  dalga boyları (Å),  $\log(gf)$  logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve  $A_{ki}$  geçiş olasılıkları ( $\text{sn}^{-1}$ )

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s3p^4 4P_{3/2}$	1490,18 <sup>A</sup>	1674,595 <sup>a</sup>	-0,686 <sup>A</sup>	-1,17 <sup>a</sup>	1,54(8) <sup>A</sup>	4,0(7) <sup>a</sup>
	1510,43 <sup>B</sup>	1660,953 <sup>b</sup>	-0,85 <sup>B</sup>	-0,958 <sup>b</sup>	1,03(8) <sup>B</sup>	4,332(5) <sup>c</sup>
	1497,74 <sup>C</sup>	1707,84 <sup>c</sup>	-1,18 <sup>C</sup>	-3,722 <sup>c</sup>	5,66(8) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s3p^4 4P_{5/2}$	1493,70 <sup>A</sup>	1679,697 <sup>a</sup>	-0,489 <sup>A</sup>	-1,00 <sup>a</sup>	1,58(8) <sup>A</sup>	3,9(7) <sup>a</sup>
	1514,04 <sup>B</sup>	1665,294 <sup>b</sup>	-0,65 <sup>B</sup>	-0,665 <sup>b</sup>	1,06(8) <sup>B</sup>	6,229(5) <sup>c</sup>
	1501,30 <sup>C</sup>	1712,49 <sup>c</sup>	-0,92 <sup>C</sup>	-3,386 <sup>c</sup>	5,90(7) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 4S^{\circ}_{3/2} - 3s3p^4 4P_{1/2}$	1488,12 <sup>A</sup>	1671,671 <sup>a</sup>	-1,49 <sup>A</sup>	-0,99 <sup>a</sup>	1,52(8) <sup>A</sup>	3,9(7) <sup>a</sup>
	1508,30 <sup>B</sup>	1658,394 <sup>b</sup>	-1,16 <sup>B</sup>	-1,200 <sup>b</sup>	1,01(8) <sup>B</sup>	3,57(5) <sup>c</sup>
	1495,65 <sup>C</sup>	1705,18 <sup>c</sup>	-1,13 <sup>C</sup>	-4,10 <sup>c</sup>	5,53(7) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 2D^{\circ}_{5/2} - 3s3p^4 4P_{3/2}$	1868,42 <sup>A</sup>	2142,92 <sup>c</sup>	-4,59 <sup>A</sup>	-5,50 <sup>c</sup>	8,12(3) <sup>A</sup>	4,566(3) <sup>c</sup>
	1898,25 <sup>B</sup>		-4,52 <sup>B</sup>		9,31(3) <sup>B</sup>	
	1928,51 <sup>C</sup>		-4,65 <sup>C</sup>		6,62(3) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 2D^{\circ}_{5/2} - 3s3p^4 4P_{3/2}$	1862,92 <sup>A</sup>	–	-5,83 <sup>A</sup>	–	7,00(2) <sup>A</sup>	–
	1892,57 <sup>B</sup>		-5,66 <sup>B</sup>		1,01(3) <sup>B</sup>	
	1695,40 <sup>C</sup>		-4,33 <sup>C</sup>		2,68(4) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 2D^{\circ}_{3/2} - 3s3p^4 4P_{3/2}$	1862,51 <sup>A</sup>	–	-5,36 <sup>A</sup>	–	2,07(3) <sup>A</sup>	–
	1892,17 <sup>B</sup>		-5,14 <sup>B</sup>		1,81(3) <sup>B</sup>	
	1922,17 <sup>C</sup>		-5,39 <sup>C</sup>		1,79(3) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 2D^{\circ}_{3/2} - 3s3p^4 4P_{1/2}$	1859,28 <sup>A</sup>	–	-6,11 <sup>A</sup>	–	7,48(2) <sup>A</sup>	–
	1888,84 <sup>B</sup>		-5,99 <sup>B</sup>		9,49(2) <sup>B</sup>	
	1918,73 <sup>C</sup>		-5,62 <sup>C</sup>		2,15(3) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 2P^{\circ}_{3/2} - 3s3p^4 4P_{1/2}$	2331,13 <sup>A</sup>	–	-6,40 <sup>A</sup>	–	2,44(2) <sup>A</sup>	–
	2340,41 <sup>B</sup>		-5,08 <sup>B</sup>		5,02(3) <sup>B</sup>	
	2134,06 <sup>C</sup>		-5,90 <sup>C</sup>		9,11(2) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 2P^{\circ}_{3/2} - 3s3p^4 4P_{3/2}$	2336,20 <sup>A</sup>	–	-4,72 <sup>A</sup>	–	5,74(3) <sup>A</sup>	–
	2015,90 <sup>B</sup>		-3,89 <sup>B</sup>		5,23(4) <sup>B</sup>	
	2138,31 <sup>C</sup>		-4,25 <sup>C</sup>		2,02(4) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 2P^{\circ}_{3/2} - 3s3p^4 4P_{5/2}$	2344,87 <sup>A</sup>	–	-4,60 <sup>A</sup>	–	4,97(3) <sup>A</sup>	–
	2354,26 <sup>B</sup>		-3,82 <sup>B</sup>		2,10(4) <sup>B</sup>	
	2145,56 <sup>C</sup>		-4,12 <sup>C</sup>		1,79(4) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 2D^{\circ}_{5/2} - 3s3p^4 2D_{5/2}$	1107,09 <sup>A</sup>	1172,759 <sup>b</sup>	0,43 <sup>A</sup>	0,519 <sup>b</sup>	2,47(9) <sup>A</sup>	8,508(8) <sup>c</sup>
	1117,50 <sup>B</sup>	1690,50 <sup>c</sup>	0,47 <sup>B</sup>	-2,438 <sup>c</sup>	2,67(9) <sup>B</sup>	
	1127,90 <sup>C</sup>		-0,71 <sup>C</sup>		2,53(8) <sup>C</sup>	
$3s^2 3p^3 2D^{\circ}_{5/2} - 3s3p^4 2D_{3/2}$	1107,07 <sup>A</sup>	1172,757 <sup>b</sup>	-0,272 <sup>A</sup>	-0,642 <sup>b</sup>	2,54(8) <sup>A</sup>	8,458(5) <sup>c</sup>
	1117,48 <sup>B</sup>	1690,25 <sup>c</sup>	-0,684 <sup>B</sup>	-3,61 <sup>c</sup>	2,75(8) <sup>B</sup>	
$3s^2 3p^3 2D^{\circ}_{3/2} - 3s3p^4 2D_{5/2}$	1106,95 <sup>A</sup>	1172,593 <sup>b</sup>	-0,758 <sup>A</sup>	0,328 <sup>b</sup>	1,58(8) <sup>A</sup>	6,56(5) <sup>c</sup>
	1117,36 <sup>B</sup>	1690,12 <sup>c</sup>	-0,719 <sup>B</sup>	-3,375 <sup>c</sup>	1,69(8) <sup>B</sup>	
	1127,75 <sup>C</sup>		-0,790 <sup>C</sup>		1,41(8) <sup>C</sup>	

Tablo 3.8. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$3s^23p^3^2D_{3/2}^o-3s3p^4^2D_{3/2}$	1106,93 <sup>A</sup>	1172,591 <sup>b</sup>	0,250 <sup>A</sup>	0,339 <sup>b</sup>	2,42(9) <sup>A</sup>	7,460(6) <sup>c</sup>
	1117,34 <sup>B</sup>	1689,87 <sup>c</sup>	0,293 <sup>B</sup>	-2,495 <sup>c</sup>	2,62(9) <sup>B</sup>	
	1127,73 <sup>C</sup>		0,269 <sup>C</sup>		2,43(9) <sup>C</sup>	
$3s^23p^3^2P_{3/2}^o-3s3p^4^2D_{3/2}$	1258,62 <sup>A</sup>	1247,194 <sup>b</sup>	0,084 <sup>A</sup>	-0,059 <sup>b</sup>	8,52(8) <sup>A</sup>	1,07(5) <sup>c</sup>
	1261,32 <sup>B</sup>	1926,87 <sup>c</sup>	0,127 <sup>B</sup>	-4,049 <sup>c</sup>	9,37(8) <sup>B</sup>	
	1198,85 <sup>C</sup>		-0,013 <sup>C</sup>		7,49(8) <sup>C</sup>	
$3s^23p^3^2P_{3/2}^o-3s3p^4^2D_{3/2}$	1258,60 <sup>A</sup>	1247,192 <sup>b</sup>	-0,926 <sup>A</sup>	-1,251 <sup>b</sup>	1,24(8) <sup>A</sup>	3,992(4) <sup>c</sup>
	1261,30 <sup>B</sup>	1926,54 <sup>c</sup>	-0,888 <sup>B</sup>	-4,653 <sup>c</sup>	1,35(8) <sup>B</sup>	
	1198,83 <sup>C</sup>		-1,157 <sup>C</sup>		8,08(7) <sup>C</sup>	
$3s^23p^3^2P_{1/2}^o-3s3p^4^2D_{3/2}$	1258,24 <sup>A</sup>	1247,11 <sup>b</sup>	0,082 <sup>A</sup>	-0,341 <sup>b</sup>	6,96(8) <sup>A</sup>	6,348(4) <sup>c</sup>
	1260,83 <sup>B</sup>	1925,97 <sup>c</sup>	-0,136 <sup>B</sup>	-4,151 <sup>c</sup>	7,66(8) <sup>B</sup>	
	1198,70 <sup>C</sup>		-0,287 <sup>C</sup>		5,98(8) <sup>C</sup>	

<sup>a</sup>NIST [4], <sup>b</sup>Fawcett, [58], <sup>c</sup>Fischer, Tachiev, Irimia [63]

C çalışmasında enerji seviyeleri için yapılan hesaplamalardan D hesabının konfigürasyon takımları seçildi ve geçiş integralleri hesaplandığında ilk ve son hallere ait ortak tabakalı orbitaller ortonormal seçildi. Bunun sonucunda 3s–3p elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyu değeri, logaritmik salınıcı şiddeti değeri ve geçiş olasılığı değerleri karşılaştırılan diğer hesaplamalar ile oldukça iyi uyumlu olduğu görüldü.

Ancak genel olarak, tüm geçişlerde [4] ve [58] çalışmaları ile iyi uyum elde edilmesine rağmen [63] ile çok iyi bir uyum sağlanamamıştır.

### 3.3. Nötr Mangan (Mn I) için Hesaplama Sonuçları

Mn I atomunun temel hali  $[Ar]4s^23d^5^6S_{5/2}$ 'dir. Mn I için yapılan çalışmalarda Hartree-Fock hesabı 1s, 2s, 2p ve 3s tabakaları dolu alınarak yapıldı. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock hesaplamaları üç değişik konfigürasyon takımı alınarak yapıldı. Bu hesaplama sonuçları Tablolarda A, B ve C olarak gösterildi.

### 3.3.1. Mn I'in seviye enerjileri

Mn I için yapılan A hesabında; çift parite için  $3d^5 4s^2$ ,  $3d^6 4s$ ,  $3d^5 4s ns$  ( $n=5-8$ ), B hesabında;  $3d^5 ns^2$  ( $n=4,5$ ),  $3d^6 ns$  ( $n=4,5$ ) ve her iki hesaplamada da tek parite için  $3d^5 4s np$  ( $n=4,5$ ),  $3d^6 4p$  konfigürasyon takımı alındı. C hesabında ise çift parite için  $3d^5 ns^2$  ( $n=4,5$ ),  $3d^6 ns$  ( $n=4,5$ ),  $3d^5 4s 5s$  ve tek parite için  $3d^5 4s np$  ( $n=4,5$ ),  $3d^6 np$  ( $n=4,5$ ) ve  $3d^5 4s 4f$  konfigürasyon setleri kullanılarak bu seviyelere ait enerji değerleri hesaplandı ve Tablo 3.9'da verilmektedir.

A hesabında çift pariteli terimlerin tek pariteli terimlere göre karşılaştırma değerleri ile daha iyi uyumludur. Örneğin;  $3d^6(^5D)4s^6D$  seviyesine ait enerji değeri  $23206,19 \text{ cm}^{-1}$  ve karşılaştırma değeri de  $17052,29 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplandı. Tek pariteli terimlerden ise  $3d^5(^6S)4s4p(^3P^0)$  seviyesine ait enerji değeri  $32130,37$  ve karşılaştırma değeri de  $18402,46 \text{ cm}^{-1}$  olarak verildi. Öyleyse hem çift terimli hem de tek terimli seviyelerin enerjilerinde çok iyi bir uyum olduğunu söylemek mümkün değildir.

Uyumsuzluğu giderebilmek için B hesabına  $3d^5 5s^2$  ve  $3d^6 5s$  konfigürasyonları eklenmiş ve bazı konfigürasyonlar çıkarılmıştır. Bu yapılan değişiklik sonucunda da A hesabına göre daha iyi uyum sağlanmıştır. Örneğin;  $3d^6(^5D)4s^6D_{9/2}$  terimine ait enerji seviyesinin değeri  $20306,24 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplanmıştır.  $3d^5(^6S)4s4p(^3P^0)^8P^0_{5/2}$  seviyesinin enerjisi ise  $30067,45 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplanmış ve A hesabına göre elde edilen değerden daha iyidir.

C hesabında ise istenilen doğrulukta sonuçlar elde edebilmek için B hesabına  $3d^5 4s 5s$  konfigürasyonu eklenmiş ve diğer iki hesapta farklı bir tek konfigürasyon seti olarak hesaplama yapıldı. Çift pariteli terimler için enerji değerleri çok artarken tek pariteli terimler için daha iyi uyum elde edilmiştir.  $3d^5(^6S)4s4p(^3P^0)^8P^0_{5/2}$  seviyesinin enerjisi  $18131,18 \text{ cm}^{-1}$  olarak hesaplanmıştır.

Mn I için seçilen konfigürasyon setleri çok geniş tutulamamıştır. Çünkü açık tabaka elektronları fazla olduğu için konfigürasyon etkileşiminden dolayı çok fazla seviye ortaya çıkmaktadır. Hesaplamalar genellikle açılım katsayıları sıfır gelen seviyeler

elenerek yapıldı. Aksi takdirde bilgisayar sınırlamaları ile ilgili problemler ortaya çıkmaktadır.

Tablo 3.9. Nötral mangan (Mn I) için E (cm<sup>-1</sup>) enerji seviyeleri

Seviyeler		E(cm <sup>-1</sup> )							
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]				
3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> S	0,00 <sup>A,B,C</sup>	5/2	0,00 <sup>A,B,C</sup>	0,00				
3d <sup>6</sup> ( <sup>5</sup> D)4s	<sup>6</sup> D	23449,40 <sup>A</sup> 20592,43 <sup>B</sup> 26194,87 <sup>C</sup>	9/2	23206,19 <sup>A</sup> 20360,24 <sup>B</sup> 25957,01 <sup>C</sup>	17052,29				
			7/2	23429,50 <sup>A</sup> 20573,58 <sup>B</sup> 26175,40 <sup>C</sup>	17282,00				
			5/2	23596,91 <sup>A</sup> 20733,67 <sup>B</sup> 26337,98 <sup>C</sup>	17451,52				
					3/2	23713,57 <sup>A</sup> 20845,28 <sup>B</sup> 26450,71 <sup>C</sup>	17568,48		
					1/2	23782,49 <sup>A</sup> 20911,26 <sup>B</sup> 26517,21 <sup>C</sup>	17637,15		
					5/2	32130,37 <sup>A</sup> 30067,45 <sup>B</sup> 18131,18 <sup>C</sup>	18402,46		
		3d <sup>5</sup> ( <sup>6</sup> S)4s4p( <sup>3</sup> P <sup>0</sup> )	<sup>8</sup> P <sup>0</sup>	32104,08 <sup>A</sup> 30067,96 <sup>B</sup> 18146,21 <sup>C</sup>	5/2	32130,37 <sup>A</sup> 30067,45 <sup>B</sup> 18131,18 <sup>C</sup>	18402,46		
					7/2	32130,48 <sup>A</sup> 30067,57 <sup>B</sup> 18142,48 <sup>C</sup>	18531,64		
					9/2	32131,48 <sup>A</sup> 30068,57 <sup>B</sup> 18158,21 <sup>C</sup>	18705,37		
							7/2	36545,86 <sup>A</sup> 35312,14 <sup>B</sup> 40692,57 <sup>C</sup>	23296,67
							5/2	36745,91 <sup>A</sup> 35477,58 <sup>B</sup> 40897,47 <sup>C</sup>	23549,20
							3/2	36884,74 <sup>A</sup> 35594,46 <sup>B</sup> 41034,69 <sup>C</sup>	23719,52
3d <sup>6</sup> ( <sup>5</sup> D)4s	<sup>4</sup> D	36721,15 <sup>A</sup> 35461,10 <sup>B</sup> 40858,32 <sup>C</sup>	7/2	36545,86 <sup>A</sup> 35312,14 <sup>B</sup> 40692,57 <sup>C</sup>	23296,67				
			5/2	36745,91 <sup>A</sup> 35477,58 <sup>B</sup> 40897,47 <sup>C</sup>	23549,20				
			3/2	36884,74 <sup>A</sup> 35594,46 <sup>B</sup> 41034,69 <sup>C</sup>	23719,52				
					1/2	36967,69 <sup>A</sup> 35667,50 <sup>B</sup> 41114,79 <sup>C</sup>	23818,87		
					3/2	42400,96 <sup>A</sup> 40341,96 <sup>B</sup>	24779,32		
					5/2	42403,43 <sup>A</sup> 40340,51 <sup>B</sup>	24788,05		
3d <sup>5</sup> ( <sup>6</sup> S)4s4p( <sup>3</sup> P <sup>0</sup> )	<sup>6</sup> P <sup>0</sup>	42375,87 <sup>A</sup> 40339,75 <sup>B</sup>	3/2	42400,96 <sup>A</sup> 40341,96 <sup>B</sup>	24779,32				
			5/2	42403,43 <sup>A</sup> 40340,51 <sup>B</sup>	24788,05				
			7/2	42400,96 <sup>A</sup> 40338,05 <sup>B</sup>	24802,25				
3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> G	23883,63 <sup>A</sup> 23023,34 <sup>B</sup> 24139,29 <sup>C</sup>	11/2	23857,31 <sup>A</sup> 22997,38 <sup>B</sup> 24113,43 <sup>C</sup>	25265,74				



Tablo 3.9. Devam

Seviyeler		E(cm <sup>-1</sup> )						
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]			
3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	4P	27171,70 <sup>A</sup> 25988,37 <sup>B</sup> 27371,11 <sup>C</sup>	7/2	23900,42 <sup>A</sup> 23040,12 <sup>B</sup> 24155,79 <sup>C</sup>	25285,43			
			5/2	23907,35 <sup>A</sup> 23047,34 <sup>B</sup> 24162,79 <sup>C</sup>	25287,74			
			5/2	27055,46 <sup>A</sup> 25804,46 <sup>B</sup> 27262,87 <sup>C</sup>	27201,54			
			3/2	27113,11 <sup>A</sup> 25883,93 <sup>B</sup> 27318,05 <sup>C</sup>	27248,00			
			1/2	27172,44 <sup>A</sup> 25980,09 <sup>B</sup> 27375,07 <sup>C</sup>	27281,85			
			4D	28196,61 <sup>A</sup> 26393,34 <sup>B</sup> 28484,14 <sup>C</sup>	7/2	28136,69 <sup>A</sup> 26320,41 <sup>B</sup> 28440,06 <sup>C</sup>	30354,21	
	5/2	28296,10 <sup>A</sup> 26558,38 <sup>B</sup> 28576,17 <sup>C</sup>		30419,61				
	3/2	28327,29 <sup>A</sup> 26587,38 <sup>B</sup> 28596,89 <sup>C</sup>		30425,71				
	1/2	28313,48 <sup>A</sup> 26548,12 <sup>B</sup> 28578,56 <sup>C</sup>		30411,74				
	3d <sup>6</sup> ( <sup>3</sup> P2)4s	4P		43897,87 <sup>A</sup> 41335,21 <sup>B</sup> 47015,76 <sup>C</sup>	5/2	43571,45 <sup>A</sup> 41031,04 <sup>B</sup> 46695,60 <sup>C</sup>	33825,49	
					3/2	44125,06 <sup>A</sup> 41548,45 <sup>B</sup> 47239,02 <sup>C</sup>	34463,37	
			1/2		44440,33 <sup>A</sup> 41840,93 <sup>B</sup>	34845,26		
3d <sup>6</sup> ( <sup>3</sup> H)4s			4H		41646,41 <sup>A</sup> 38777,55 <sup>B</sup> 44843,36 <sup>C</sup>	11/2	41623,36 <sup>A</sup> 38756,75 <sup>B</sup> 44820,98 <sup>C</sup>	34250,52
						9/2	41716,81 <sup>A</sup> 38846,73 <sup>B</sup> 44913,54 <sup>C</sup>	34343,90
						7/2	41790,89 <sup>A</sup> 38918,32 <sup>B</sup> 44990,38 <sup>C</sup>	34423,27
	3d <sup>6</sup> ( <sup>3</sup> F2)4s	4F		44731,52 <sup>A</sup> 42580,33 <sup>B</sup> 47620,21 <sup>C</sup>		9/2	44621,79 <sup>A</sup> 42481,71 <sup>B</sup> 47511,26 <sup>C</sup>	34938,70
7/2			44735,69 <sup>A</sup> 42597,84 <sup>B</sup> 47603,44 <sup>C</sup>		35041,37			

Tablo 3.9. Devam

Seviyeler		E(cm <sup>-1</sup> )						
Konf.	Terim	E <sub>MCHF</sub>	J	E <sub>MCHF+BP</sub>	E <sub>Diğer Çalışmalar</sub> [4]			
3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>2</sup> I	34335,21 <sup>A</sup> 33344,76 <sup>B</sup> 34836,67 <sup>C</sup>	5/2	44796,75 <sup>A</sup> 42645,89 <sup>B</sup> 47673,17 <sup>C</sup>	35114,98			
			3/2	44833,86 <sup>A</sup> 42670,18 <sup>B</sup> 47722,30 <sup>C</sup>	35165,05			
			11/2	34342,06 <sup>A</sup> 33351,22 <sup>B</sup> 34843,40 <sup>C</sup>				
			13/2	33338,48 <sup>B</sup> 34829,84 <sup>C</sup>				
			3d <sup>6</sup> ( <sup>3</sup> G)4s	<sup>4</sup> G	46212,75 <sup>A</sup> 43453,12 <sup>B</sup> 49261,56 <sup>C</sup>	11/2	46078,09 <sup>A</sup> 43329,22 <sup>B</sup> 49131,05 <sup>C</sup>	37420,24
						9/2	46249,41 <sup>A</sup> 43494,57 <sup>B</sup> 49295,86 <sup>C</sup>	37630,62
						7/2	46358,11 <sup>A</sup> 43596,65 <sup>B</sup> 49401,48 <sup>C</sup>	37737,22
						5/2	46425,10 <sup>A</sup> 43658,19 <sup>B</sup> 49467,00 <sup>C</sup>	37789,93
						3d <sup>6</sup> ( <sup>3</sup> P2)4s	<sup>2</sup> P	50231,22 <sup>A</sup> 47786,32 <sup>B</sup> 54034,06 <sup>C</sup>
1/2	50719,34 <sup>A</sup> 48253,05 <sup>B</sup> 54477,71 <sup>C</sup>	38351,78						
3d <sup>6</sup> ( <sup>3</sup> H)4s	<sup>2</sup> H	48940,43 <sup>A</sup> 46808,89 <sup>B</sup> 52994,18 <sup>C</sup>	11/2	48854,62 <sup>A</sup> 46726,74 <sup>B</sup> 52903,38 <sup>C</sup>	38008,70			
			9/2	49031,77 <sup>A</sup> 46894,62 <sup>B</sup> 53081,45 <sup>C</sup>	38120,18			
			3d <sup>6</sup> ( <sup>3</sup> F2)4s	<sup>2</sup> F	53431,43 <sup>A</sup> 51960,98 <sup>B</sup> 57240,19 <sup>C</sup>	7/2	53463,11 <sup>A</sup> 51951,71 <sup>B</sup> 57234,91 <sup>C</sup>	38669,60
5/2	53504,78 <sup>A</sup> 52027,08 <sup>B</sup> 57315,70 <sup>C</sup>	38934,94						
3d <sup>6</sup> ( <sup>3</sup> G)4s	<sup>2</sup> G	52076,95 <sup>A</sup> 52839,35 <sup>B</sup> 58330,78 <sup>C</sup>				9/2	52092,72 <sup>A</sup> 63324,38 <sup>B</sup> 58284,12 <sup>C</sup>	41031,48
			7/2	52041,67 <sup>A</sup> 52942,12 <sup>B</sup> 58457,82 <sup>C</sup>	41230,30			

### 3.3.2. Mn I'de elektrik dipol geçişleri

Mn I atomuna ait elde edilen seviyeler arasındaki tüm mümkün elektrik dipol geçişleri de hesaplandı. Bu geçişlerden sadece  $3d^6 4s$  seviyesinden  $3d^6 4p$  seviyesine olan elektrik dipol (E1) geçişlerine ait geçiş olasılıkları, dalga boyları ve ağırlıklı salınıcı şiddetlerine ait sonuçlar Tablo 3.10'da verilmektedir. Ayrıca geçiş olasılığı  $10^6$ 'dan büyük olan düşük seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişleri de Tablo 3.10'da verilmektedir.

Nötral mangan için  $3d^5 4s^2-3d^5 4s 4p$ ,  $3d^6 4s-3d^6 4p$ ,  $3d^6 4s-3d^5 4s 4p$  ve  $3d^5 4s^2-3d^6 4p$  geçişlerine ait elektrik dipol parametreleri Tablo 3.10'da verilmektedir. Nötral mangan için çok fazla enerji seviyeleri elde edildiğinden, Tablo 3.9'da verilen enerji değerleri, kısıtlı sayıda terimlere göre elde edilmiştir. Bu nedenle mevcut kaynaklardaki bazı geçişler olmadı. Bunlar için tekrar bu terimleri dikkate alınacak şekilde hesaplamalar yapılabilir. Bu nedenle yalnızca 3.3.1 kesiminde enerji seviyeleri hesabında dikkate alınan A hesabı için seçilen konfigürasyon takımının tek ve çift pariteli hallerin arasındaki geçişler, bir elektron geçiş integralleri hesabında her iki haldeki ortak dolu tabakalardaki yörüngeler ortonormal seçildi. Bu geçişler için tabloda yalnızca geçiş olasılığı  $10^6$ 'dan büyük eşit olan geçiş verileri verildi. Diğer çalışmalarla karşılaştırma yapıldığında genellikle  $3d^6(^3D)4s \ ^4D_{7/2}-3d^6(^4D)4s 4p$  ( $^3P^o$ )  $^4D^o_{7/2}$ ,  $3d^6(^5D)4s \ ^4D_{7/2}-3d^6(^4D)4s 4p$  ( $^3P^o$ )  $^6D^o_{5/2}$ ,  $3d^6(^5D)4s \ ^6D_{7/2}-3d^5(^4P)4s 4p$  ( $^3P^o$ )  $^6P^o_{5/2}$ ,  $3d^5(^6S)4s^2 \ ^6S_{5/2}-3d^5(^6S)4s 4p$  ( $^3P^o$ )  $^6P^o_{5/2}$ ,  $3d^6(^5D)4s \ ^6D_{5/2}-3d^5(^4P)4s 4p$  ( $^3P^o$ )  $^6D^o_{5/2}$  ve  $3d^5(^4D)4s^2 \ ^4D_{3/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^o_{5/2}$  geçişleri hariç iyidir.

Tablo 3.10. Mn I atomuna ait elektrik dipol (E1) geçişleri için  $\lambda$  dalga boyları ( $\text{\AA}$ ),  $\log(gf)$  logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve  $A_{ki}$  geçiş olasılıkları ( $\text{sn}^{-1}$ )

Geçişler	$\lambda$ ( $\text{\AA}$ )		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6D^{\circ}_{7/2}$	4867,93	4055,544	0,0799	-0,070	4,22(7)	4,31(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{7/2}$	4354,74	4451,586	0,2229	0,278	7,34(7)	7,98(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{7/2}-3d^6(^3F)4p \ ^4F^{\circ}_{7/2}$	2820,75	4709,712	-1,4354	-0,339	3,84(6)	1,72(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p \ ^4F^{\circ}_{7/2}$	2240,56	–	-1,3612	–	7,22 (6)	–
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4F^{\circ}_{5/2}$	4801,47	4671,672	-1,7081	-1,67	9,44 (5)	1,1(6)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{5/2}$	4326,67	–	-0,7234	–	1,12 (7)	–
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{5/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4F^{\circ}_{7/2}$	4891,29	4766,418	0,16807	0,10	5,13 (7)	4,6(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{5/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{7/2}$	4397,74	4502,213	-0,4300	-0,344	1,60 (7)	1,86(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{5/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4F^{\circ}_{5/2}$	4853,79	4727,461	-0,4169	-0,47	1,80(7)	1,7(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{5/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{5/2}$	4369,11	4414,89	-0,2678	-0,289	3,14(7)	2,93(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{5/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4F^{\circ}_{3/2}$	4826,95	4701,130	-1,6215	-1,65	1,71(6)	1,7(6)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{5/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{3/2}$	4340,99	4436,357	-0,4918	-0,287	2,85(7)	4,37(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{3/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4F^{\circ}_{5/2}$	4916,45	4765,846	-0,0256	-0,08	4,33(7)	4,1(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{3/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{5/2}$	4419,81	4498,902	-0,5613	-0,343	1,56(7)	2,49(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{3/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4F^{\circ}_{3/2}$	4888,91	4739,087	-0,5643	-0,490	1,90(7)	2,40(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{3/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{3/2}$	4391,04	4470,144	-0,4570	-0,444	3,01(7)	3,00(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{3/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{1/2}$	4378,40	4453,012	-0,6069	-0,490	4,30(7)	5,44(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{1/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4F^{\circ}_{3/2}$	4917,62	4761,512	-0,2234	-0,138	4,12(7)	5,35(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{1/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{3/2}$	4414,18	4490,090	-0,5768	-0,521	2,26(7)	2,49(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^4D_{1/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{1/2}$	4401,41	4472,806	-0,6088	-0,583	4,23 (7)	4,35(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6D^{\circ}_{7/2}$	4867,93	4055,544	0,07995	-0,070	4,22(7)	4,31(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6F^{\circ}_{7/2}$	4491,65	3809,592	-0,3125	-0,604	2,01(7)	1,43(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6P^{\circ}_{7/2}$	3838,71	3607,526	-0,5129	-0,44	1,73 (7)	2,3(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6D^{\circ}_{5/2}$	4832,22	–	-0,0677	–	4,07(7)	–
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6F^{\circ}_{5/2}$	4473,48	3799,252	-1,3470	-1,756	2,49(6)	1,35(6)
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6P^{\circ}_{5/2}$	3801,40	–	-0,3358	–	3,55(7)	–
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{7/2}-3d^6(^5D)4p \ ^4D^{\circ}_{5/2}$	3284,75	3488,315	-1,8365	-3,18	1,50(6)	6,0(4)
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{5/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6D^{\circ}_{7/2}$	4912,99	4083,628	-0,2002	-0,25	2,17(7)	2,8(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{5/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6F^{\circ}_{7/2}$	4529,99	3834,362	0,12063	-0,121	5,36(7)	4,29(7)
$3d^6(^5D)4s \ ^6D_{5/2}-3d^6(^5D)4p \ ^6P^{\circ}_{7/2}$	3866,68	3629,731	-1,2471	-1,35	3,15(6)	2,8(6)

Tablo 3.10. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{5/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6F^o_{5/2}$	4511,51	3823,887	-0,2486	-0,517	3,08(7)	2,31(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{5/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6P^o_{5/2}$	3828,82	3608,481	-0,4305	-0,37	2,81(7)	3,6(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{5/2}-3d^6(^5D)4p\ ^4D^o_{5/2}$	3305,21	3509,073	-0,9547	-3,16	1,12(7)	6,2(4)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{5/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6D^o_{3/2}$	4850,29	4048,743	-0,1074	-0,13	5,53(7)	7,5(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{5/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6F^o_{3/2}$	4498,86	3816,741	-1,0986	-1,436	6,56(6)	4,19(6)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{5/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6P^o_{3/2}$	3803,91	3595,107	-0,7792	-0,86	1,91(7)	1,8(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6D^o_{5/2}$	4908,83	4063,528	-0,2038	-0,600	2,88(7)	1,69(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6F^o_{5/2}$	4539,06	3841,071	-0,1249	-0,36	4,04(7)	3,3(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6P^o_{5/2}$	3848,65	3623,780	-0,8823	-0,94	9,83(6)	9,7(6)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^4D^o_{5/2}$	3319,97	3523,538	-0,9608	-3,50	1,10(7)	2,8(4)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6D^o_{3/2}$	4882,15	4068,012	-1,6688	-1,86	1,49(6)	1,4(6)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6F^o_{3/2}$	4526,25	3833,861	-0,2981	-0,558	4,09(7)	3,14(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6P^o_{3/2}$	3823,47	3610,292	-0,5649	-0,48	3,10(7)	4,2(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	3303,71	3505,873	-1,5473	-3,69	4,33(6)	2,8(4)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6D^o_{1/2}$	4865,98	4058,93	-0,3082	-0,446	6,92(7)	7,25(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6F^o_{1/2}$	4518,80	3829,718	-1,0556	-1,344	1,43(7)	1,03(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{1/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6D^o_{3/2}$	4901,44	4079,412	-0,3667	-0,42	2,98(7)	3,8(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{1/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6F^o_{3/2}$	4542,83	3843,984	-0,4958	-0,728	2,57(7)	2,11(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{1/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6P^o_{3/2}$	3835,29	–	-0,6910	–	2,30(7)	–
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{1/2}-3d^6(^5D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	3312,53	–	-1,8186	–	2,30(6)	–
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{1/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6D^o_{1/2}$	4885,14	4070,278	-0,9038	-0,94	1,74(7)	2,3(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{1/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6F^o_{1/2}$	4535,31	3839,819	-0,4413	-0,688	5,86(7)	4,64(7)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{1/2}-3d^6(^5D)4p\ ^4D^o_{1/2}$	3305,34	3503,739	-2,0122	-2,88	2,96(6)	3,6(5)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{9/2}-3d^5(^4G)4s4p\ (^3P^o)\ ^6F^o_{9/2}$	4359,88	–	-1,4507	–	1,24(6)	–
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{9/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6F^o_{9/2}$	4524,12	3790,207	-0,5474	-0,915	9,23(6)	5,65(6)
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{9/2}-3d^5(^4P)4s4p\ (^3P^o)\ ^6P^o_{7/2}$	4979,02	12899,76	-0,7345	-1,07	4,95(6)	–
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{7/2}-3d^5(^4F)4s4p\ (^3P^o)\ ^4F^o_{9/2}$	2377,46	–	-1,4648	–	4,04(6)	–
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{7/2}-3d^5(^2G)4s4p\ (^3P^o)\ ^4F^o_{9/2}$	2121,03	–	-1,8374	–	2,15(6)	–
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{9/2}$	1343,10	–	-1,6996	–	7,38(6)	–
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{7/2}-3d^5(^4G)4s4p\ (^3P^o)\ ^6F^o_{9/2}$	4367,09	–	-0,8371	–	6,36(6)	–
$3d^6(^5D)4s\ ^6D_{7/2}-3d^5(^4D)4s4p\ (^3P^o)\ ^6F^o_{9/2}$	5400,83	–	-1,1550	–	2,00(6)	–

Tablo 3.10. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4G)4s4p(^3P^o)^4F^o_{9/2}$	4155,33	3696,540	-1,1299	-0,793	3,58(6)	7,86(6)
$3d^6(^5D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p^4F^o_{9/2}$	2242,86	3701,723	-1,2287	-1,75	7,83(6)	8,6(5)
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4G)4s4p(^3P^o)^6F^o_{9/2}$	1792,75	-	-2,1327	-	1,91(6)	-
$3d^5(^4D)4s^2^4D_{7/2}-3d^6(^3P)4p^4D^o_{7/2}$	951,60	-	-2,5445	-	2,62(6)	-
$3d^6(^5D)4s^6D_{7/2}-3d^5(^4G)4s4p(^3P^o)^6F^o_{7/2}$	4371,81	-	-1,3291	-	2,04(6)	-
$3d^6(^3D)4s^6D_{7/2}-3d^5(^4P)4s4p(^3P^o)^6P^o_{7/2}$	4988,43	3066,028	-1,3691	-0,74	1,43(6)	1,6(7)
$3d^6(^5D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3F)4p^4F^o_{7/2}$	2820,75	-	-1,4354	-	3,84(6)	-
$3d^6(^5D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3P)4p^4D^o_{7/2}$	2697,84	-	-1,1225	-	8,63(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^2D)4s4p(^3P^o)^4D^o_{7/2}$	2423,68	-	-1,5084	-	4,40(6)	-
$3d^6(^5D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p^4D^o_{7/2}$	1777,83	-	-1,8502	-	3,72(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4G)4s4p(^3P^o)^6F^o_{7/2}$	1793,54	-	-2,2465	-	1,46(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4P)4s4p(^3P^o)^6D^o_{7/2}$	1822,34	-	-1,9795	-	2,63(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4P)4s4p(^3P^o)^6P^o_{7/2}$	1889,35	-	-2,1374	-	1,70(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4D)4s4p(^3P^o)^6F^o_{7/2}$	1944,25	-	-1,5052	-	6,89(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4D)4s4p(^3P^o)^6D^o_{7/2}$	2003,07	-	-1,6539	-	4,61(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4G)4s4p(^3P^o)^4F^o_{7/2}$	2015,89	-	-1,9811	-	2,14(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4P)4s4p(^3P^o)^4D^o_{7/2}$	2205,91	-	-1,7629	-	2,95(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^5(^4D)4s4p(^3P^o)^4D^o_{7/2}$	2293,45	3142,671	-1,3184	-1,31	7,61(6)	4,1(6)
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p^4F^o_{7/2}$	5240,80	-	-1,4009	-	1,20(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p^4D^o_{7/2}$	3257,58	-	-0,1612	-	5,41(7)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p^4F^o_{7/2}$	3233,26	-	-0,0584	-	6,97(7)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3F)4p^4D^o_{7/2}$	2606,45	-	-1,680	-	2,56(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3P)4p^4D^o_{7/2}$	2013,40	-	-1,3815	-	8,54(6)	-
$3d^6(^3D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3F)4p^4F^o_{7/2}$	1964,68	-	-2,3210	-	1,03(6)	-
$3d^6(^5D)4s^6D_{7/2}-3d^5(^6S)4s4p(^3P^o)^6P^o_{5/2}$	2258,38	5420,355	-0,9496	-1,46	1,83(7)	1,31(6)
$3d^6(^5D)4s^6D_{7/2}-3d^5(^4P)4s4p(^3P^o)^6P^o_{5/2}$	5043,93	3054,366	-1,0317	-0,41	3,04(6)	4,6(7)
$3d^6(^5D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p^4D^o_{5/2}$	2299,50	-	-2,0089	-	2,05(6)	-
$3d^6(^5D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p^4F^o_{5/2}$	2239,09	-	-2,0595	-	1,93(6)	-
$3d^6(^5D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p^4D^o_{5/2}$	1778,70	-	-2,2436	-	2,00(6)	-
$3d^6(^5D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p^4F^o_{5/2}$	1769,78	-	-2,2425	-	2,03(6)	-
$3d^6(^5D)4s^4D_{7/2}-3d^6(^3P)4p^4D^o_{5/2}$	1332,45	-	-1,9352	-	7,26(6)	-

Tablo 3.10. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{7/2}-3d^5(^4P)4s4p(^3P^o)\ ^6P^o_{5/2}$	1819,15	-	-2,2927	-	1,28(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{7/2}-3d^5(^4P)4s4p(^3P^o)\ ^6P^o_{5/2}$	1897,26	-	-2,0534	-	2,04(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{7/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{5/2}$	3230,64	-	-1,0727	-	9,00(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{7/2}-3d^6(^3P)4p\ ^4D^o_{5/2}$	2020,25	-	-2,1484	-	1,93(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^6D_{5/2}-3d^5(^4D)4s4p(^3P^o)\ ^6F^o_{7/2}$	5336,10	-	-1,361	-	1,70(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{7/2}$	2251,89	-	-1,8601	-	2,26(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3P)4p\ ^4D^o_{7/2}$	1333,45	-	-1,9041	-	5,84(6)	-
$3d^5(^6S)4s^2\ ^6S_{5/2}-3d^5(^6S)4s4p(^3P^o)\ ^6P^o_{5/2}$	5720,03	2798,081	-0,7218	-0,34	6,44(6)	3,7(8)
$3d^5(^6S)4s^2\ ^6S_{5/2}-3d^6(^3P)4p\ ^4D^o_{5/2}$	693,76	-	-2,6189	-	5,55(6)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{5/2}$	1098,50	-	-2,3222	-	4,38(6)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3P)4p\ ^4D^o_{5/2}$	910,23	-	-2,9167	-	1,62(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^6D_{5/2}-3d^5(^4P)4s4p(^3P^o)\ ^6P^o_{5/2}$	4996,44	3070,268	-1,2424	-0,79	2,54(6)	1,9(7)
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3P)4p\ ^4D^o_{5/2}$	2708,25	-	-1,3877	-	6,20(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{5/2}$	2250,40	-	-1,3658	-	9,45(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{5/2}$	5124,24	-	-1,3013	-	2,11(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3P)4p\ ^4D^o_{5/2}$	2003,86	-	-1,6845	-	5,72(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3F)4p\ ^4F^o_{5/2}$	1949,19	-	-2,3875	-	1,19(6)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^5(^4F)4s4p(^3P^o)\ ^4F^o_{3/2}$	2123,37	-	-2,1455	-	2,64(6)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	1098,45	-	-2,9667	-	1,49(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	1785,71	-	-1,9899	-	5,35(6)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^4D^o_{5/2}$	1888,59	6443,50	-1,5106	-1,76	9,61(6)	4,7(5)
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{5/2}$	1342,32	-	-2,3559	-	2,71(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3P)4p\ ^4D^o_{5/2}$	1341,16	-	-1,8211	-	9,33(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{5/2}$	5553,45	-	-1,4402	-	1,30(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{5/2}$	5553,45	-	-1,4402	-	1,30(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{5/2}$	5213,72	-	-0,7556	-	7,17(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3F)4p\ ^4F^o_{5/2}$	1962,00	-	-2,4157	-	1,10(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	2321,88	-	-1,6372	-	7,13(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{3/2}$	2263,22	-	-1,599	-	8,19(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	1794,12	-	-2,4326	-	1,91(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{3/2}$	5210,76	-	-1,4223	-	2,32(6)	-

Tablo 3.10. Devam

Geçişler	$\lambda$ (Å)		$\log(gf)$		$A_{ki}$	
	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]	Bu çalışma	Diğer çalışmalar [4]
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	5532,57	-	-1,3369	-	2,50(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{3/2}$	5210,76	-	-1,4223	-	2,32(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3F)4p\ ^4D^o_{3/2}$	2611,13	-	-2,1465	-	1,74(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3F)4p\ ^4D^o_{3/2}$	2022,31	-	-1,9647	-	4,42(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3F)4p\ ^4F^o_{3/2}$	1962,06	-	-2,6128	-	1,05(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3P)4p\ ^4D^o_{1/2}$	2716,17	-	-1,9406	-	5,18(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{1/2}$	2319,60	-	-2,2962	-	3,13(6)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{3/2}$	1342,35	-	-2,6152	-	2,24(6)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3F)4p\ ^4F^o_{3/2}$	940,98	-	-3,0971	-	1,50(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	1797,97	-	-1,3944	-	2,07(7)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3G)4p\ ^4F^o_{3/2}$	1789,08	-	-1,5337	-	1,52(7)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3F)4p\ ^4D^o_{3/2}$	1345,48	-	-1,9754	-	9,74(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{3/2}$	5205,88	-	-0,9485	-	6,92(6)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	3250,77	-	-0,4059	-	6,19(7)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3F)4p\ ^4D^o_{3/2}$	2609,91	-	-2,3644	-	1,05(6)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{1/2}$	1797,50	-	-1,957	-	1,13(7)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^5D)4p\ ^4F^o_{9/2}$	1986,54	-	-0,6012	-	4,23(7)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3P)4p\ ^4D^o_{7/2}$	1329,47	-	-1,1658	-	3,22(7)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{7/2}$	3233,26	-	-0,0584	-	6,97(7)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^5D)4p\ ^6P^o_{7/2}$	1868,05	-	-1,1747	-	1,59(7)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^5D)4p\ ^4F^o_{7/2}$	1802,40	-	-0,7626	-	4,43(7)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{5/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4F^o_{5/2}$	3188,95	-	-0,2486	-	6,16(7)	-
$3d^5(^4D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^5D)4p\ ^4F^o_{5/2}$	1973,78	-	-0,9369	-	3,29(7)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{5/2}$	1794,25	-	-1,0842	-	2,84(7)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{3/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	3252,67	-	-0,6585	-	3,46(7)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{3/2}$	1797,97	-	-1,3944	-	2,07(7)	-
$3d^6(^5D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3F)4p\ ^4D^o_{1/2}$	1346,79	-	-1,9943	-	1,86(7)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{1/2}$	3249,24	-	-0,6340	-	7,33(7)	-
$3d^6(^3D)4s^2\ ^4D_{1/2}-3d^6(^3D)4p\ ^4D^o_{1/2}$	3249,24	-	-0,6340	-	7,33(7)	-



Bu çalışmada incelenen  $p^3$  tabakalı azot ve fosfor ve  $d^5$  tabakalı mangan için elde edilen seviyeler oldukça fazladır. Burada yalnızca düşük enerji seviyeleri ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişleri için dalga boyu, salıncı şiddeti ve geçiş olasılıkları verildi. Özellikle mangan için çok fazla sayıda seviye elde edildi. Hesaplamanın yürütülebilmesi için terim kısıtlaması yapıldı. Özellikle bu atomlar için elde edilen veriler plazma incelemeleri, astrofizik, lazer geliştirme ve analitik kimyada geniş ölçüde uygulama alanı bulmaktadır. Bu alanda pek çok teoriksel yöntem geliştirilmiştir. Bu yöntemlerden biri olan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi atomların ve iyonların seviye yapılarını incelemede yaygın olarak kullanılmaktadır. Burada bu yöntem Breit-Pauli relativistik katkılarla beraber kullanıldı. Yapılan hesaplamaların ve elde edilen verilerin yarı dolu p ve d tabakalı diğer atomların seviye yapılarını incelemeye yardımcı ve yol gösterici olacağı düşünülmektedir.

## KAYNAKLAR

- [1] KARAZIJA, R., MOMKAUSKAITE, A., Some peculiarities of the energy level, photoelectron and photoexcitation spectra of the atoms with a half-filled shell, *Phys. Scr.*, 78, 065301, 2008.
- [2] FISCHER, C. F., The MCHF Atomic-structure Package, *Comput. Phys. Commun.*, 128, 635–636, 2000.
- [3] FISCHER, C. F., BRAGE, T., JOHNSON, P., *Computational Atomic Structure-an MCHF*, Bristol and Philadelphia, Institute of Physics Publishing, 1997.
- [4] NIST: Available: <http://physics.nist.gov/asd3>, Mayıs, 2011.
- [5] BERRINGTON, K. A., BURKE, P., BUTLER, K., SEATON, M. J., STOREY, P.J., TAYLOR, K.T., YAN, Y., Atomic data for opacity calculations. II. Computational methods, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 20, 6379–6397, 1987.
- [6] THE OPACITY PROJECT TEAM, *The Opacity Project*, Institute of Physics, Bristol, 1995.
- [7] KURUCZ, R. L., BELL, B., *Atomic Line Data Kurucz CD-ROM No.23*, Smithsonian Astrophysical Observatory, Cambridge Mass., 1995.
- [8] HIBBERT, A., BIEMONT, E., GODEFROID, M., VAECK, N., New accurate transition probabilities for astrophysically important spectral lines of neutral nitrogen, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, 88, 505–524, 1991.
- [9] HIBBERT, A., BIEMONT, E., GODEFROID, M., VAECK, N., E1 Transitions of Astrophysical Interest in Neutral Oxygen, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 3943–3958, 1991.
- [10] ROBINSON, D. J. R., HIBBERT, A., Quartet transitions in neutral nitrogen, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 30, 4813–4825, 1997.
- [11] EDLEN, B., Accurate values of the energy intervals in the configurations  $1s^2 2s^2 2p^k$  ( $k=1-5$ ), *Phys. Scripta*, 26, 71, 1982.
- [12] EDLEN, B., Comparison of theoretical and experimental level values of the  $n=2$  configurations in the nitrogen isoelectronic sequence, *Phys. Scripta*, 30, 135, 1984.

- [13] TACHIEV, G. I., FISCHER, F. C., Breit-Pauli energy levels and transitions rates for nitrogen- like and oxygen-like sequences, *Astron. Astrophys.*, 385, 716–723, 2002.
- [14] BROADFOOT, A. L., ATREYA, S. K, BERTAUX, J. L., BLAMONT, J. E., DESSLER, A. J., DONAHUE, T. M., FORRESTER, W. T., HALL, D. T., HERBERT, F., HOLBERG, J. B., HUNTER, D. M., KRASNOPOLSKY, V. A., LINICK, S., LUNINE, J. I., MCCONNELL, J. C., MOOS, H. W., SANDEL, B. R., SCHNEIDER, N. M., SHEMANSKY, D. E., SMITH, G. R., STROBEL, D. F., YELLE, R. V., Ultraviolet spectrometer observations of Neptune and triton, *Science*, 246, 1459–1466, 1989.
- [15] HALL, D. T., SHEMANSKY, D. E., TRIPP, T. M., A reanalysis of Voyager UVS observations of Titan, *Proc. Sympon Titan*, 67, 1992.
- [16] FELDMAN, U., DOSCHEK, G.A., The solar spectrum between 914 and 1177 Å, *The Astrophysical J. Supplement Series*, 75, 925–934, 1991.
- [17] FELDAMAN, U., BEHRING, W. E., CURDT, W., SCHUHLE, U., WILHELM, K., LEMAIRE, P., MORAN, T. M., A Coronal Spectrum in the 500–1610 Angstrom Wavelength Range Recorded at a Height of 21,000 Kilometers above the West Solar Limb by the SUMER Instrument on Solar and Heliospheric Observatory, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 113, 195, 1997.
- [18] WARREN, H. P., MARISKA, J.T., WILHELM, K., High- resolution observations of the solar hydrogen Lyman lines in the quiet Sun with the SUMER instrument on SOHO, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 119, 105, 1998.
- [19] BACLOWSKI, A., WUJEC, T., MUSIELOK, J., Measurements of selected N I multiplet strength ratios and comparison with recent calculations, *Eur. Phys. J. D.*, 44, 427–431, 2007.
- [20] BACLOWSKI, A., MUSIELOK, J., Testing recent calculations of astrophysical relevant infrared N I line strengths by arc emission measurements, *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, 144, 221–225, 2007.
- [21] BACLOWSKI, A., MUSIELOK, J., Measurements of relative line strengths in N I multiplets for transition arrays 3s-np ( $n = 3, 4, 5$ ), *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 109, 2537–2545, 2008.
- [22] BACLOWSKI, A., MUSIELOK, J., Measurements of transition probabilities for two N I infrared transitions and their application for diagnostics of low temperature plasmas, *Spectrochim. Acta. Part B*, 65, 113–119, 2009.

- [23] BRIDGES, J. M., WIESE, W.L., Transition probability measurements for some strong and weak lines of N I, *Phys. Rev. A*, 82, 024502, 2010.
- [24] TAYAL, S. S., BEATTY, C. A., Oscillator strengths and electron-excitation cross sections for atomic nitrogen, *Phys. Rev. A*, 59, 3622–3631, 1999.
- [25] TONG, M., FISCHER F. C., STURESSON, L., Systematic transition probability studies for neutral nitrogen, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 27, 4819, 1994.
- [26] BELL, K. L., BERRINGTON, K. A., Photoionization of the  $^4S^0$  ground state of atomic nitrogen and atomic nitrogen  $^4S^0-^4P$  oscillator strengths, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 24, 933, 1991.
- [27] DOERING, J. P., GOEMBEL, L., Absolute differential and integral electron excitation cross sections for atomic nitrogen I - The  $^4S^0 - 3s\ ^4P$  ( $\lambda$  1200 Å) transition from 30 to 100 eV, *JGR*, 96, 16021, 1991.
- [28] DOERING, J. P., GOEMBEL, L., Absolute differential and integral electron excitation cross sections for atomic nitrogen II - The  $^4S^0 - 2p\ ^4P$  (1135 Å) transition from 30 to 100 eV, *JGR*, 97, 4295, 1992.
- [29] HENRY, RONALD, J., BURKE, P. G., Scattering of electrons by C, N, O,  $N^+$ ,  $O^+$  and  $O^{++}$ , *Phys. Rev.*, 178, 218–225, 1969.
- [30] ÇELİK, G., AKIN, E., KILIÇ, H.S., Comparison of transition probabilities calculated using different parameters on WBEPM theory for some p-d and d-p transitions in excited atomic nitrogen, *Journal of Astrophys. and Astronomy*, 107, 495–500, 2007.
- [31] ÇELİK, G., ATEŞ, S., Investigation of the effects of expectation values for radii on the determination of transition probabilities using WBEPM theory, *Journal of Astrophys. and Astronomy*, 29, 367–378, 2008.
- [32] WIESE, W. L., FUHR, J. R., Improved critical compilations of selected atomic transition probabilities for neutral and singly ionized carbon and nitrogen, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 36, 1287–1345, 2007.
- [33] GARCIA, J., KALLMAN, M., WITTHOEFT, M., BEHAR, E., MENDOZA, C., Nitrogen K-shell photoabsorption, *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, 185, 477–485, 2009.
- [34] WANG, X. L., CHEN, S. H., HAN, X. Y., LI, M. J., Fine-Structure Splittings of Nitrogen Isoelectronic Sequence: Competitions Among Spin-Orbit Interactions, Breit Interactions and Electron Correlations, *Chin. Phys. Lett.*, 903–905, 2008.

- [35] OLIVA, E., MARCONI, A., MAIOLINO, R., TESTI, L., MANNUCCI, F., GHINASSI, F., LICANDRO, J., ORIGLIA, L., BAFFA, C., NICS-TNG infrared spectroscopy of NGC 1068: The first extragalactic measurement of [P II] and a new tool to constrain the origin of [Fe II] line emission in galaxies, *Astronomy and Astrophysics*, 369, L5–L8, 2001.
- [37] MENDOZA, C., ZEIPPEN, C. J., Photoionisation cross sections of the ground states of neutral Si, P and S, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 21, 259, 1988.
- [38] SAVAGE, BLAIR, D., LAWRENCE, G.M., Radiative Lifetimes of Ultraviolet Multiplets in Si, P, S, O, Ne II, and Ar II, *Astrophysical Journal*, 146, 940, 1966.
- [39] VESETH, L., Many-body Calculations of Atomic properties: spin-orbit coupling, *J. Phys. B: At. Mol. Phys*, 16, 2713–2921, 1983.
- [40] KIESS, C. C., *J. Res. Natl Bureau Standards*, 8, 393–401, 1932.
- [41] ROBINSON, H. A., The Spectra of Phosphorus. Part I. The Spectra of Neutral and Singly Ionized Phosphorus, *Phys. Rev.*, 49, 297–305, 1936.
- [42] MARTIN, W. C., Atomic energy levels and spectra of neutral and singly ionized phosphorus (P I and P II), *J. Opt. Soc. Am.*, 49, 1071–1085, 1959.
- [43] SVENDENIUS, N., The spectrum and term analysis of neutral phosphorus, P I, *Phys. Scr.*, 22, 240–287, 1980.
- [44] SVENDENIUS, N., VERGÈS, J., The P I Spectrum in the Region 1-4  $\mu\text{m}$ , *Phys. Scr.*, 22, 288–293, 1980.
- [45] CARROLL, P. K. , HUFFMAN, R. E., LARRABEE, J. C. , TANAKA, Y. Absorption by atomic nitrogen in the extreme ultraviolet, *Astrophys. J.*, 146, 553, 1966.
- [46] MITCHELL, P. I., CARROLL, P. K., KAMPEN, P. V. , The  $3s^23p^3\ ^4S \rightarrow 3s3p^3(^5S)np\ ^4P$  transitions in atomic phosphorus, *J. Phys. B: Atomic and Mol. Phys.*, 29, L411, 1996.
- [47] MORTON, DONALD, C., Atomic data for resonance absorption lines. I - Wavelengths longward of the Lyman limit, *Astrophys. J. Suppl. Series*, 77, 119–202, 1991.
- [48] LAMBERT, D. L., WARNER, B., The abundances of the elements in the solar photosphere-II. Sodium, aluminium, phosphorous, sulphur and potassium, *The Royal Astronomical Society* 138, 181, 1968.
- [49] LAMBERT, D. L., LUCK, R. E., The abundances of the elements in the solar photospheres. IX - NA to CA, *The Royal Astronomical Society*, 183, 79-100, 1978.

- [50] MARTIN, W. C., ZALUBAS, R., MUSGROVE, A., Energy Levels of Phosphorus, P i through P xv, Journal of Physical and Chemical Reference Data, 14, 751–802, 1985.
- [51] SWENSSON, J. W., Phosphorus lines in the solar spectrum, Zeitschrift für Astrophysik, 64, 11, 1966.
- [52] BIEMONT, E., GREVESSE, N., Infrared wavelengths and transition probabilities for atoms,  $3 \leq Z \leq 20$ , Atomic Data and Nuclear Data Tables, 12, 217, 1973.
- [53] KUPLYAUSKIS, Z. I., KUPLYAUSKENE, A. V, Oscillator strengths of  $3s^2 3p^N - 3s 3p^{N+1}$  transitions in neutral and singly and doubly ionized atoms, Optics and Spectroscopy, 42, 345–346, 1977.
- [54] AYMAR, M., Cancellation effects in computed lifetimes of  $3s 3p n$  levels for third-row atoms and ions, Nuclear Instruments and Methods, 110, 211–217, 1973.
- [55] SVENDENIUS, N., MAGNUSSON, C. E., ZETTERBERG, P. O., The spectrum of singly ionized phosphorus, P II, Phys. Scr., 27, 339–363, 1983.
- [56] COWAN, R. D., The Theory of Atomic Structure and Spectra (Berkeley, CA: University of California Press) 1981.
- [57] MARTIN, W. C. , ZALUBAS, R. , MUSGROVE, A., Energy levels of phosphorus, P I through P XV, J. Phys. Chem. Data, 14, 751–802, 1985.
- [58] FAWCETT, B. C. , Calculated wavelengths, oscillator strengths, and energy levels for allowed 3-3 and 3-4 transitions for ions in the P-like isoelectronic sequence between P I and NI XIV, At. Data Nucl. Data Tables, 35, 203, 1986.
- [59] HIBBERT, A., Radiative lifetime of the  $3s 3p^3 \ ^5S_2^0$  state of P II, J. Phys. B: Atomic and Mol. Phys., 26, L91–L95, 1993.
- [60] LIVINGSTON, A. E., KERNAHAN, J. A., IRWIN, D. J. G., PINNINGTON, E. H, Beam-foil studies of phosphorus in the vacuum ultraviolet, Phys. Scr., 12, 223, 1975.
- [61] SAVAGE, B. D., LAWRENCE, G. M., Radiative Lifetimes of Ultraviolet Multiplets in Si, P, S, O, Ne II, and Ar II, Astrophys. J., 146, 940, 1966.
- [62] CURTIS, L. J., MARTINSON, I., BURCHTA, R., Lifetimes of Excited Levels in PI-PV, Phys. Scr., 3, 197, 1971.

- [63] FISCHER, F. C. , TACHIEV, G. I. , IRIMIA, A., Relativistic energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the sodium-like to argon-like sequences, *At. Data Nucl. Data Tables*, 92, 607–812, 2006.
- [64] SANTOS, J. P., PARENTE, F., BOUCARD, S., INDELICATO, P., DESCLAUX, J. P., X-ray energies of circular transitions and electron screening in kaonic atoms, *Phys. Rev. A*, 71, 03251, 2005.
- [65] RODRIGUES, G. C., INDELICATO, P., SANTOS, J. P., PATTE, P., PARENTE, F., Systematic calculation of total atomic energies of ground state configurations, *At. Data Nucl. Data Tables*, 86, 117–233, 2004.
- [66] TAYAL, S. S., Photoionization of atomic phosphorus from ground and excited states, *J. Phys. B*, 37, 3593–3607, 2004.
- [67] FRITZSCHE, S., FRICKE, B., GESCHKE, D., HEITMANN, A., SIENKIEWICZ, J. E., Forbidden transitions in the ground-state configuration of low-Z phosphorus-like ions, *Astrophys. J.*, 518, 994–1001, 1999.
- [68] MAZZONI, M., RICCI, E., Revised branching ratios for the lowest  $4P$  terms of neutral phosphorus, *Astron. Astrophys.*, 311, 340, 1996.
- [69] BERZINSH, U., SVANBERG, S., BIEMONT, E., Radiative lifetimes for the 4p excited states of phosphorus and the oscillator strengths of solar lines<sup>7</sup>, *Astron. Astrophys.*, 326, 412–416, 1997.
- [70] GANAS, P. S., Electron impact excitation cross sections for phosphorus, *Eur. Phys. J. D*, 1, 165, 1998.
- [71] BIEMONT, E., MARTIN, F., QUINET, P., ZEIPPEN, C. J., The 4s-4p transitions in neutral phosphorus, *Astron. Astrophys.*, 283, 339–343, 1993.
- [72] WAHLGREN, G. M., JOHANSSON, S., GAIA ,Spectroscopy, *Science and Technology*, ASP Conf. Proc., 298, 481, 2003.
- [73] JOHANSSON, S., Atomic Data in the 1–5 Micron Region, Present Status in High Resolution Infrared Spectroscopy in Astronomy (Berlin: Springer), 62, 2005.
- [74] BRICKHOUSE, N., FEDERMAN, S., KWONG, V., SALAMA, F., SAVIN, D., Laboratory Astrophysics White Paper, Proceedings of the NASA LAW, 2006.
- [75] BLACKWELL-WHITEHEAD, R. J., Infrared atomic oscillator strengths for the study of brown dwarfs and extra solar planets, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 130, 012002, 2008.

- [76] LYUBCHIK, Y., JONES, H. R. A., PAVLENKO, Y. V., VITI, S., Atomic lines in infrared spectra for ultracool dwarfs, *Astron. and Astrophys.*, 416, 655–659, 2004.
- [77] BIGOT, L., THEVENIN, F., Atomic oscillator strengths in the spectral domain of Gaia, *Astron. Astrophys.*, 372, 1365–2966, 2006.
- [78] BOTH, A. J., BLACKWELL, D. E., PETFORD, A. D., SHALLIS, M. J., Measurement of relative oscillator strengths for MN I Transitions from levels in the range  $\chi$  between 0 eV and 3 eV, *Royal Astronomical Society*, 208, 147–159, 1984.
- [79] BLACKWELL-WHITEHEAD, R., PAVLENKO, Y. V., NAVE, G., PICKERING, J. C., JONES, H. R. A., LYUBCHIK, Y., NILSSON, H., Infrared Mn I laboratory oscillator strengths for the study of late type stars and ultracool dwarfs, *Astron. Astrophys.*, 525, A44, 2010.
- [80] LYUBCHIK, Y., JONES, H. R. A., PAVLENKO, Y. V., Spectral analysis of high resolution near-infrared spectra of ultra cool dwarfs, *Astron. Astrophys.*, 473, 257–264, 2007.
- [81] BERGEMANN, M., GEHREN, T., Formation of Mn I lines in the solar atmosphere, *Astron. Astrophys.*, 473, 291–302, 2007.
- [82] BLACKWELL-WHITEHEAD, R., BERGEMANN, M., A revision of the solar manganese abundance using new and premeasured laboratory oscillator strengths, *Astron. Astrophys.*, 472, L43–L46, 2007
- [83] MORTON, D. C., Atomic data for resonance absorption lines. III. Wavelengths longward of the Lyman limit for the elements hydrogen to gallium, *Astrophys. J., Suppl. Ser.* 149, 205–238, 2003.
- [84] MELENDEZ, J., Mn I hyperfine structure in the near-infrared, *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 307, 197–202, 1999.
- [85] MARTIN, G. A., FUHR, J. R., WIESE, W. L., Atomic Transition Probabilities - Scandium through Manganese, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 17, 415, 1988.
- [86] WOODGATE, B., Transition probabilities from solid vortex arcs, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 134, 287, 1966.
- [87] BOOTH, A. J., BLAKWELL, D. E., PETFORD, A. D., SHALLIS, M. J., Measurement of relative oscillator strengths for MN I Transitions from levels in the range  $\chi$  between 0 eV and 3 eV, *Royal Astronomical Society*, 208, 147–159, 1984.



- [88] BLACKWELL, D. E., COLLINS, B. S., Precision measurement of relative oscillator strengths-1. Fundamental technique: A first application to MN I, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 157, 255, 1972.
- [89] OSTROVSKII, Y. I., PENKIN, N. P., Absolute oscillator strengths for the lines of chromium, manganese, and copper, *Opt. Spektrosk.*, 3, 193, 1957.
- [90] GREENLEE, T. R., WHALING, W., Mn I transition probabilities and the manganese solar abundance, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 21, 55–63, 1979.
- [91] HUBER, M. C. E., SANDEMAN, R. J., The measurement of oscillator strengths, *Reports on Progress in Physics*, 49, 397–490, 1986.
- [92] BLACKWELL-WHITEHEAD, R. J., XU, H. L., PICKERING, J. C., NAVE, G., LUNDBERG, H., Experimental oscillator strengths for the spectrum of neutral manganese, *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 34, 1559–2259, 2005.
- [93] MELENDEZ, J., BARBUY, B., Oscillator strengths and damping constants for atomic lines in the J and H bands, *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, 124, 527–546, 1999.
- [94] TAYAL, S. S., New accurate oscillator strengths and electron excitation collision strengths for N I, *Astrophys. J., Suppl. Ser.* 163, 207–223, 2006.

## ÖZGEÇMİŞ

Selda KABAKÇI, 1986 yılında Sakarya'da doğdu. İlk öğrenimini Cemal Gürsel İlköğretim okulunda tamamladı. Lise öğrenimini ise Geyve Lisesi'nde bitirdi. 2005 yılında Sakarya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde Lisans öğrenimine başladı. 2006 yılında Çift Anadal Programı'ndan faydalanarak Sakarya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümü'nde öğrenim görmeye başladı. 2009 yılında Fizik ve 2010 yılında Matematik bölümünden mezun oldu. Şu anda Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalında yüksek lisans öğrenimine devam etmekte ve aynı zamanda Sakarya Üniversitesi Eğitim Fakültesi'nde Pedagojik Formasyon eğitimi almaktadır.