

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**YARI DOLU s VE p TABAKALI BAZI ATOMLARIN
NEGATİF İYONLARININ SEVİYE YAPILARININ
İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Nurgül ATİK

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR

Mayıs 2012

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**YARI DOLU s VE p TABAKALI BAZI ATOMLARIN
NEGATİF İYONLARININ SEVİYE YAPILARININ
İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Nurgül ATİK

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 31/05/2012 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Salih Zeki YILDIZ Prof. Dr. İbrahim OKUR Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR

Jüri Başkanı


Jüri Üyesi


Jüri Üyesi


ÖNSÖZ

Bu çalışmada, yarı dolu s tabakalı lityum (Li) ve sodyum (Na) ve yarı dolu p tabakalı azot (N) ve fosfor (P) atomlarının elektron ilgileri ve bunların negatif iyonlarının temel hal enerjileri ve ayrıca azot ve fosforun negatif iyonlarının ince yapı seviyeleri Breit-Pauli Hamiltoniyeni çerçevesinde çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock-MCHF) yöntemi ile incelendi.

Bu çalışmanın 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.

Ayrıca hazırlanma sürecinde yardımlarını hiçbir zaman esirgemeyen arkadaşım ve hocam olan Yrd. Doç. Dr. Betül KARAÇOBAN'a ve Öğr. Gör. Dr. GüldemÜRER'e teşekkür ederim.

Aynı zamanda maddi manevi desteğini hep hissettiren eşim Yılmaz ATİK ve oğlum Yiğit Zafer ATİK'e de teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	v
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	vi
TABLolar LİSTESİ.....	vii
ÖZET.....	viii
SUMMARY.....	ix
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
1.1. Li ⁻ ve Na ⁻ için Yapılmış Çalışmalar.....	5
1.2. N ⁻ ve P ⁻ için Yapılmış Çalışmalar.....	7
BÖLÜM 2.	
HESAPLAMA YÖNTEMLERİ.....	9
2.1. Hartree-Fock Problemi.....	9
2.1.1. Bireysel spin fonksiyonları ve Slater determinantı.....	10
2.1.2. Değişim (varyasyon) yöntemi.....	12
2.1.3. Yaklaşık değişim çözümleri.....	14
2.1.4. Matris özdeğer denklemi.....	15
2.2. Elektronlar Arası Karşılıklı Etkileşme (Korelasyon).....	16
2.3. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock Yöntemi (relativistik olmayan durumlarda).....	17
2.4. Relativistik Etkiler ve Breit-Pauli Hamiltonyeni.....	22
2.5. MCHF Yöntemi ile Hesaplama Adımları.....	27
2.5.1. MCHF atomik yapı paketi.....	27

2.6. MCHF Atomik Yapı Paketinde Hesaplama Adımları.....	29
2.6.1. Konfigürasyon hal fonksiyonlarının üretilmesi.....	29
2.6.2. Relativistik olmayan hamiltonyenin açısal integrallerinin hesaplanması.....	30
2.6.3. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemiyle hesaplama (MCHF)	30
2.6.4. Breit-Pauli Hamiltonyeninin açısal integrallerinin hesaplanması.....	31
2.6.5. Konfigürasyon etkileşmesinin hesaplanması (CI).....	32
2.7. Elektron İlgisinin Hesaplanması (EA).....	32
BÖLÜM 3.	
SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR.....	33
3.1. Lityum için Elektron İlgisi (EA) Hesapları.....	34
3.2. Azot için Hesaplama Sonuçları.....	35
3.2.1. Azot için elektron ilgisi (EA) hesapları.....	35
3.2.2. Azot iyonu (N^-) için ince yapı hesapları.....	37
3.3. Sodyum için Hesaplama Sonuçları.....	37
3.4. Fosfor için Hesaplama Sonuçları.....	38
3.4.1. Fosfor için elektron ilgisi (EA) hesapları.....	38
3.4.2. Fosfor iyonu (P^-) için ince yapı hesapları.....	39
3.5. Sonuç.....	40
KAYNAKLAR.....	42
EKLER.....	49
Ek A.Li, N, Na ve P'ye ait Ek Tablolar.....	49
ÖZGEÇMİŞ.....	59

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

BP	: Breat-Pauli
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)
DFT	: Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (Density Function Theory)
EA	: Elektron İlgisi (Electron Afinity)
FS	: İnce Yapı (Fine Structre)
HF	: Hartree-Fock
IR	: Kızılötesi (Infrared)
MBPT	: Çok-cisim Pertürbasyon Teorisi (Many-body Perturbation Theory)
MC	: Kütle Düzeltmesi (Mass Correction)
MCHF	: Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
MC-SCF	: Çok Konfigürasyonlu Özuyumlu Alan (Multiconfiguration Self-Consistent Field)
MRSD-CI	: Tekli ve Çiftli Uyarılmış Konfigürasyon Etkileşme Yöntemi (Multireference Single and Double Excitation Configuration Calculation)
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)

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1.	Konfigürasyon hal fonksiyonlarının üretilmesi.....	30
Şekil 2.2.	Relativistik olmayan Hamiltonyenin açısai integrallerinin hesaplanması.....	30
Şekil 2.3.	Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock programı.....	31
Şekil 2.4.	Breit-Pauli Hamiltonyeninin açısai integrallerinin hesaplanması.	31
Şekil 2.5.	Konfigürasyon etkileşmesinin hesaplanması.....	32

TABLolar LİSTESİ

Tablo 3.1.	Li ve Li ⁻ için temel hallerinin enerjileri (E) ve elektron ilgisi (EA).....	35
Tablo 3.2.	N ve N ⁻ için temel hallerinin enerjileri (E) ve elektron ilgisi (EA).	36
Tablo 3.3.	N için temel hallerinin ince yapı seviyeleri.....	37
Tablo 3.4.	Na ve Na ⁻ için temel hallerinin enerjileri (E) ve elektron ilgisi (EA).....	38
Tablo 3.5.	P ve P ⁻ için temel hallerinin enerjileri (E) ve elektron ilgisi (EA).	39
Tablo 3.6.	P için temel hallerinin ince yapı seviyeleri.....	40
Tablo A.1.	Li ve Li ⁻ 'ye ait hesaplamalar için alınan konfigürasyon setleri.....	49
Tablo A.2.	N ve N ⁻ 'ye ait hesaplamalar için alınan konfigürasyon setleri.....	53
Tablo A.3.	Na ve Na ⁻ 'ye ait hesaplamalar için alınan konfigürasyon setleri...	55
Tablo A.4.	P ve P ⁻ 'ye ait hesaplamalar için alınan konfigürasyon setleri.....	56

ÖZET

Anahtar kelimeler: MCHF Yöntemi, Breit-Pauli Relativistik Düzeltmeler, Elektron İlgisi, İnce Yapı Seviyeleri.

Negatif iyonlar elektron karşılıklı etkileşmeleri çalışmak için ideal sistemlerdir. Bu tür iyonların seviye yapıları için incelemeler, çok-cisim hareketinin temel problemine önemli bir görüş sağlar.

Bu çalışmada yarı dolu s tabakalı lityum (Li, $Z=3$) ve sodyum (Na, $Z=11$) atomlarının elektron ilgileri ve yarı dolu p tabakalı azot (N, $Z=7$) ve fosfor (P, $Z=15$) atomlarının elektron ilgileri çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi (MCHF) ile hesaplanmaktadır. Ayrıca azot ve fosforun negatif iyonlarının (N^- ve P^-) temel hal ince yapı seviyelerindeki geçiş enerjileri elde edilmektedir. Hesaplamalarda elektronlar arası karşılıklı etkileşme ve Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri de dikkate alınmaktadır.

Birinci bölümde, Li^- , N^- , Na^- ve P^- iyonları ile ilgili yapılmış bazı çalışmalar, ikinci bölümde, MCHF yöntemi ve Breit-Pauli relativistik düzeltmeler hakkında bilgiler verilmektedir. Son bölümde de elde edilen sonuçlar tablolar halinde sunulmaktadır ve diğer çalışma sonuçları ile karşılaştırılmaktadır.

INVESTIGATION FOR THE LEVEL STRUCTURES OF NEGATIVE IONS OF SOME ATOMS WITH HALF-FILLED s AND p SHELL

SUMMARY

Key Words: MCHF Method, Breit-Pauli Relativistic Corrections, Electron Affinity, Fine Structure Levels.

Negative ions are ideal systems for studies of electron correlation effects. Investigations for the level structures of these ions provide valuable insight into the fundamental problem of many-body motion.

In this study, electron affinities for lithium (Li, $Z=3$) and sodium (Na, $Z=11$) with half-filled s shell and nitrogen (N, $Z=7$) and phosphorus (P, $Z=15$) with half-filled p shell have been calculated using multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF) method. In addition the ground state fine structure levels for negative ions of nitrogen and phosphorus (N^- and P^-) have been obtained. In these calculations, the correlation and Breit-Pauli relativistic corrections have been also considered.

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

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Negatif iyonlar, atom fiziğinin özel bir kısmını temsil eder. Kısa-aralık potansiyel altında nötral bir atoma fazladan elektron bağlanmasıyla karakterize olan sistemlerde, atomik yapı, dinamik ve etkileşme çalışmaları için de mükemmel fırsatlar sunar. Nötral atomlarda ve pozitif yüklü iyonlarda elektronlar uzun-aralık Coulomb potansiyeli altında bağlanırken (çekirdek ile elektron arasındaki mesafe r olmak üzere r^{-1} ile orantılı), H^- iyonu hariç negatif iyonlarda, elektronlar kısa-aralık potansiyeli altında bağlanır (r^{-4} mertebesinde). Kısa-aralık potansiyel, nötral atomların ve pozitif iyonların aksine, negatif iyonların bir dizi farklı özelliklerinin ortaya çıkmasına neden olur. Atomların %90'ına yakını elektron konfigürasyonunun temel halinden bir elektron çekerek gaz fazında kararlı negatif iyonlar oluşturabilirken, kısa-aralık potansiyeli genellikle temel hal teriminin ince veya aşırı ince-yapı hallerine veya enerji bakımından en düşük hallerinden birine bağlanabilir. Tersine Coulomb potansiyeli iyonlaşma eşiğinde Rydberg serisine dönüşen sonsuz sayıda bağ halini sağlar (Andersen, 2004). Negatif atomik bir iyonda elektronik olarak uyarılmış haller, esas nötral atomun temel hali üzerinde enerjiler olarak yerleşmeleri beklenir. Böyle uyarılmış iyonlar (tekli, ikili veya üçlü uyarılmış) elektron sökülmesi işlemine göre kararsız oldukları için geçici anyonlar olarak adlandırılırlar. Bunların yarı ömürleri genellikle çok kısadır (10^{-11} – 10^{-16} sn aralığında) ve bunlar kendiliğinden elektron sökülmesi rezonansı olarak ortaya çıkarlar (Bilodeau ve Haugen, 2000).

Kısa-aralık potansiyelinin bir diğer iyi bilinen sonucu, enerji ile foton sökme tesir kesitinin değişimidir. Nötral atomların, eşikte sıfır olmayan kendiliğinden iyonlaşma tesir kesitinin aksine tesir kesiti eşikte sıfırdır ve sadece sökülen elektronun açısal momentumuna bağlı olarak ortaya çıkar (Wigner, 1948, Hotop ve arkadaşları, 1973). Bu eşik davranışı doğru bağlanma enerjisi ölçümleri için tasarlanan deneysel yöntemler için önemlidir (sökülme süreciyle üretilen uyarılmış nötral atomunun

rezonans iyonlaşma tespitini sağlayan lazer foton sökme yöntemi gibi) (Petrunin ve arkadaşları, 1995, 1996, Andersen ve arkadaşları, 1997a). Aynı zamanda eşikte sıfır tesir kesiti değeri, hızlandırıcı ışıması ile bir serbest negatif iyonda 1s elektronunun foton sökme tesir kesitinin ilk mutlak ölçümlerini sağlar (Kjeldsen ve arkadaşları, 2001, Berrah ve arkadaşları, 2001).

Negatif iyonların bir başka özelliği, elektronik alt tabakalarının doldurulmasının nötral atomlardaki sıralamaya sahip olmamasıdır. Buna Bates tarafından dikkat çekilmiştir (Bates, 1947). Ca^- iyonu ve Sc atomu farklı dolma kurallarına iyi örneklerdir. Ca^- iyonu için valans konfigürasyonu $4s^2 4p$ iken benzer elektron sayısına sahip Sc atomu için $4s^2 3d$ 'dir (Pegg ve arkadaşları, 1987, Fischer ve arkadaşları, 1987).

Az sayıda atomlar kapalı tabaka veya alt tabakaları nedeniyle kararlı negatif iyonları oluşturamayabilirler. Fakat bu atomların bazıları uyarılmış hal konfigürasyonuna fazladan bir elektron bağlanmak suretiyle negatif iyonların yarı kararlı hallerini oluşturabilirler. Yarı ömürleri 10^{-3} - 10^{-6} sn mertebesinde olan He^- veya Be^- benzeri yarı kararlı iyonlarla deneysel olarak çalışılabilmektedir (Pedersen ve arkadaşları, 2001, Petrunin ve arkadaşları, 2003, Pedersen ve arkadaşları, 2002).

Nötral atomların ve pozitif yüklü iyonların aksine elektron korelasyon etkileri atomik negatif iyonlardaki bağlanma enerjisinin çoğunda dikkate alınır. Temel hallerin bağlanma enerjisini deneysel olarak karşılaştırmak, uyarılmış hallerin enerji durumları (rezonansları) veya yarı kararlı negatif iyonların yarı ömürlerinin gelişmiş teorik modelleri, atomik sistemlerdeki korelasyon modelleri için oldukça güvenilir bir yoldur. Son zamanlarda negatif iyon araştırmacılarının bu görüşü, deneyçiler ve teorikçilerden yoğun ilgi görmektedir. Öncekilere nazaran yeni deneysel teknikler daha doğru veriler sağlamaktadır. Bu da değişik teorik yaklaşımlar arasındaki ayrımı mümkün kılar.

Korelasyon etkileri, negatif iyonlarda, atom veya pozitif iyonlara göre daha önemlidir. Bu, atomik elektronlar tarafından çekirdeğin daha fazla perdelenmesinin bir sonucudur. İç elektronik etkileşmelerle elde edilen korelasyon, elektron-çekirdek

etkileşmeleri için çok önemli olmaktadır. Negatif iyon gibi zayıf bağlı sistemde bu itici ve çekici etkileşmelerin esas rolü genel bir ilgidir ve bağımsız elektron modelinin sınırlarını anlamada yardım eder.

Negatif iyonlar zayıf iyonlaşmış gazlar ve plazmalar içeren bir dizi fizik ve kimya alanlarında çok önemli bir rol oynar. Negatif atom iyonları, astrofizik, atmosferik fizik ve plazma fiziğinden yüzey fiziğine ve hızlandırıcı fiziğine kadar fiziğin değişik alanlarında önemli rol oynamaktadır. Ayrıca negatif iyonlar, oldukça duyarlı hızlandırıcı kütle spektroskopisi gibi ileri analitik yöntemler için temel oluştururlar ve ayrıca arkeolojik numune tespitleri için, jeofizik alanında, aynı zamanda okyanus bilimi, su bilimi veya biyotıpta kullanılmaktadırlar (Fifield, 1999).

Serbest negatif iyonların fiziği üzerine araştırma 1913'te pozitif ve negatif iyonların kütle spektrumlarının öncü çalışmaları sayılan Thomson'un (1913) çalışmaları ile uzun bir tarihsel başlangıca sahiptir. Negatif iyonların fiziğini araştırmak için jeofizik ve astrofizik önemli bir adım attı (Massey, 1938). Üst atmosferin iyonlaşma tabakaları ve O^- iyonunun keşfi önemli bir olay oldu. Bu iyonun, N^- iyonun tersine kararlı bir negatif iyon olarak deneysel çalışmalar kadar teorik çalışmalarda da O^+ veya N_2^+ ile reaksiyonlarda önemli bir rol oynayabileceği bilinmekteydi. Bu reaksiyonlar gece gökyüzünde ışımaya olarak gözlenmekteydi. Güneş fotosferindeki atomik negatif hidrojenin varlığı için 1939 yılında bir öneri verildi (Wildt, 1939) ve daha sonra bunun doğruluğu ispatlandı. Buna benzer örnekler gösterdi ki, negatif atomik iyonlar yalnızca akademik ilginin ürünü değil, aynı zamanda günlük bir olay gibi fizik ve kimyanın değişik branşlarında önemli bir rol oynamaktadır. Doğada negatif iyonlar astrofiziksel ve meteorolojik çevrelerde buldukları kadar seyrek plazmalarda da mevcut oldukları bilinmektedir. Örneğin, negatif iyon kimyası dünyanın iyonosferinin D bölgesinde önemli bir rol oynar (Massey, 1976). O^- ve O_2^- gibi negatif iyonlar radyo frekanslarını ve diğer havasal olayları etkileyen serbest elektronların yoğunluğunu belirlemede önemli bir rol oynar. Negatif iyonlar ve atomlar ve moleküller arasındaki düşük enerji çarpışmaları yıldız içi boşlukta ve gezegen atmosferinde yeniden düzenlemeye götürür.

Negatif iyon fiziğine deęişik zamanlarda yoğun ilgi olmuştur. Wildt (1939) kırmızı ve kırmızı altı (IR) dalga boylarında Güneşin atmosferindeki matlığın ana kaynağının H⁻ iyonları tarafından soęurulması olduğunu önerdi. Solar radyasyonun spektral dağılımı zaman içerisinde o kadar şaşırtıcı gözükte ki, dünya üzerindeki yaşam için önemi, negatif iyonlar gibi kırılğan bir sistemle belirlenebildi. H⁻ den elektron sökülmesi için tesir kesitinin hesaplamaları (Massey ve Bates, 1940, Chandrasekhar, 1945) ve deneyleri (Branscomb ve Smith, 1955), Wildt'in tahminini destekledi. Wildt'in önerisi başka bir şekilde de önemliydi. Bu öneri genel anlamda negatif iyonlara dikkat çekti, öyle ki bu konu 20. yüzyılın başlarında Thomson (1907) tarafından keşfedilene kadar ihmal edilmişti. Artık doğal olarak oluşan elementlerin %80'ninden fazlasının kararlı atomik negatif iyonlar olabildiği bilinmektedir (Andersen ve arkadaşları 1999). 1970'lerde Schulz (1973) "Atomlarda elektron etkisindeki rezonanslar" adlı bir makale yayınladı. Massey (1976) ve Smirnov (1982) genel negatif iyonlar hakkında yayınlar yaptılar. Massey (1976, 1979) "Negatif iyonlar" kitabında 1979 yılına kadar yapılan çalışmalarını güncelledi. Bu hala faydalı bir bilgi kaynağı olarak kullanılmaktadır. Bates (1991) atomik ve moleküler iyonların teoriksel kabullenimleri hakkında bir inceleme makalesi yayınladı. 1980'lerde olan ilerlemelerde, Bates (1991) tarafından atomik yapı ve spektrumlar konusu incelendi. Çarpışmalar hakkındaki makaleler Esaulov (1986) tarafından verildi ve 1970'lerin başından itibaren Schulz (1973) tarafından seçilen makaleler "Atomik negatif iyon rezonansları" makalesi ile Buckman ve Clark (1994) tarafından güncellendi.

Atomik negatif iyon özelliklerinin özel konuları (baęlanma enerjileri ve temel hallerin ince yapı yarılmaları gibi) 1975 ve 1985'de Hotop ve Lineberger (1975, 1985) tarafından incelendi ve daha sonra bunlar güncellendi (Andersen ve arkadaşları 1999). Bryant ve Halka (1996) tarafından negatif hidrojen iyonunu anlama süreci, Nicolaides ve arkadaşları (1989) tarafından negatif iyonlardaki yarı kararlı uyarılmış haller ile devam etti. Ivanov (1999) da negatif iyon foton sökülmelerinde çok cisim etkilerini inceledi. Negatif atomik iyonların yapı, spektrum, yarı ömür veya dięer özelliklerinin anlaşılması için özel incelemeler 1990'larda (Blonde, 1995, Andersen, 1991, Haugen, 1994, Muller ve Gavrilu, 1994, Andersen, 1995, Andersen, 1998, Starace, 1998, Ivanov, 1993, Ivanov, 1996, Andersen ve arkadaşları, 1997a, Andersen ve arkadaşları, 1997b) ortaya çıktı.

Çalışmalar yeni yüzyılda da devam etti (Bilodeau ve diğerleri, 2002, Andersen, 2002, Bryant, 2002, Sullivan ve diğerleri, 2003).

Bu bölümün alt kısımlarında, lityum, sodyum, azot ve fosfor'un negatif iyonları ile ilgili özellikle son yıllara ait teorik ve deneysel çalışmalardan bahsedilmektedir. Önceki yıllara ait çalışmalar ise Andersen (2004) ve Pegg (2004) tarafından yapılan incelemelerde ve NIST web sitesinden bulunabilir. Gelecek bölümlerde, kullanılan hesaplama yöntemi hakkında bilgi verildikten sonra hesaplama sonuçları ve sonuçların bir tartışması verilmektedir.

1.1. Li⁻ ve Na⁻ için Yapılmış Çalışmalar

Negatif lityum iyonu (Li⁻) için şimdiye kadar çok sayıda çeşitli çalışmalar yapılmıştır. Ljungblad ve arkadaşları (1996), Li⁻ iyonun iki kez uyarılmış hallerini deneysel olarak incelediler. Haeffler ve çalışma grubu (1996) lityumun elektron ilgisini ölçtüler. Li⁻ iyonunun rezonans hallerinin enerjileri Lee ve arkadaşları (1996) tarafından sunuldu. Relativistik ve kütle düzeltmeleri ile lityumun iyonlaşma potansiyeli ve elektron ilgisi Koga ve arkadaşları (1997) tarafından hesaplandı. Gutsev ve arkadaşları (1998) katlı-küme yöntemiyle Li atomunun elektron ilgisini hesapladılar. Yoğunluk fonksiyon teorisiyle (DFT) lityumun elektron ilgisi Chen ve arkadaşları (1998) tarafından sunuldu. Li⁻ iyonunun iyonlaşma enerjisi relativistik çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemiyle Biémont ve arkadaşları (1999) tarafından hesaplandı. Borovik ve Krasilinec (1999), Li⁻ iyonun 1s2s2p², 1s2s2p3s, 1s2s2p3p ve 1s2p³ düşük seviyelerinin kendiliğinden iyonlaşma hallerini çalıştılar. Zatsarinny (1999), Li⁻ iyonunda kısa ömürlü özden-uyarılmış hallerin ilk teorik çalışmasını yaptı. Negatif lityumun bağlanma enerjisi ve elektron ilgisi Andersen ve arkadaşları (1999) tarafından sunuldu. Negatif lityumun taban hali ve bazı uyarılmış seviyeleri için model potansiyel hesapları Magnier ve arkadaşları (2001) tarafından sunuldu. Berrah ve arkadaşları (2001), Li⁻'nin K-tabakası foton sökmesini teorik ve deneysel olarak çalıştılar. Negatif iyonların iç tabaka foton sökmesi Li⁻ iyonu için Zhou ve arkadaşları (2001) tarafından sunuldu. Haeffler ve arkadaşları (2001) Li⁻ iyonun güçlü korelasyon hallerini incelediler. Abbadi ve arkadaşları (2001), 2p² hali için lityum negatif iyonun bağlanma enerjisini tanımlamak için varyasyonel dalga

fonksiyonunu kullandılar. Komasa ve arkadaşları (2002), negatif lityumun relativistik olmayan enerjisini, korelasyon enerjisini ve spesifik kütle kaymasını çalıştılar. Liaw (2003) da lityum iyonun $2s^2 2p^2 \ ^3P$ ve $2s^2 p^3 \ ^5S$ rezonanslarının Auger genişliklerini ve dallanma oranlarını eyer-noktası kompleks-dönme yöntemi ile hesapladı. Sandström ve arkadaşları (2004) lityum iyonunun foton sökme eşik seviyesi üzerine polarizasyon etkilerini incelediler. Lindroth ve Sanz-Vicario (2004), aralarında lityum iyonunun da bulunduğu birkaç atom için foton sökme etkisini teorik olarak çalıştılar. Lindgren (2005), çok-cisim pertürbasyon teorisiyle (MBPT) lityumun bağlanma enerjisini hesapladı. Wang ve arkadaşları (2006), Li^- iyonun özden uyarılmış hallerinin enerjilerini, ince ve aşırı ince yapısını teorik olarak incelediler. Klopper ve arkadaşları (2010) lityumun iyonlaşma potansiyelini ve elektron ilgisini katlı-küme yöntemiyle hesapladılar. Jose ve arkadaşları (2011) relativistik çok cisim tekniğini kullanarak negatif lityum için valans foton sökme çalışmasını yaptılar.

Sodyum atomunun elektron ilgisi, Gutsev ve arkadaşları (1998) tarafından katlı-küme yöntemiyle ve Chen ve arkadaşları (1998) tarafından yoğunluk fonksiyon teorisiyle (DFT) hesaplandı. Na^- iyonunun iyonlaşma enerjisi relativistik çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemiyle Biémont ve arkadaşları (1999) tarafından hesaplandı. Haeffler ve arkadaşları (1999), Na^- iyonun foton sökme tesir kesitlerindeki rezonans yapısını incelediler. Negatif sodyumun bağlanma enerjisi ve elektron ilgisi Andersen ve arkadaşları (1999) tarafından sunuldu. Na^- iyonunun tekli ve çoklu foton sökme oranları teorik olarak Vinci ve arkadaşları (2000) tarafından hesaplandı. Na^- 'nin taban hali ve bazı uyarılmış seviyeleri için model potansiyel hesapları, Magnier ve diğerleri (2001) tarafından sunuldu. Covington ve çalışma arkadaşları (2001) Na^- iyonun foton sökmesi için toplam tesir kesitlerini ölçtüler. De Groote ve Masili (2004), katlı-kanal hiperküresel yaklaşıklıkları ile sodyumun elektron ilgisini çalıştılar. Lindgren (2005), çok-cisim pertürbasyon teorisiyle sodyumun bağlanma enerjisini hesapladı. Borovik ve arkadaşları (2009, 2008), sodyum iyonunun iç-tabaka foton sökmesini ve kendiliğinden iyonlaşma hallerini incelediler. Jiao ve arkadaşları (2010), yavaş elektron-sodyum çarpışmaları için toplam tesir kesitlerinde negatif iyon rezonanslarını incelediler. Jose ve arkadaşları

(2011) relativistik çok cisim tekniğini kullanarak negatif sodyumun (Na^-) foton sökme çalışmasını yaptılar.

1.2. N^- ve P^- için Yapılmış Çalışmalar

Atomik negatif azot iyonun bağlanma enerjisi ve temel halinin ince yapı yarılmaları Hotop ve Lineberger (1975) tarafından rapor edildi. Davidson ve arkadaşları (1991) azotun taban halinin korelasyon enerjisini sundular. Hızlandırıcı kütle spektroskopisiyle ilgili olan atomlardan N^- iyonun teorik çalışması Wijesundera ve Litherland (1997) tarafından rapor edildi. Relativistik ve kütle düzeltmeleri ile N^- iyonun potansiyeli ve elektron ilgisi Koga ve arkadaşları (1997) tarafından hesaplandı. Cowan ve arkadaşları (1997) negatif azotun seviye enerjilerini ve yarı ömürlerini hesapladılar. Gutsev ve arkadaşları (1998), katlı-küme yöntemiyle azotun elektron ilgisini hesapladılar. Yoğunluk fonksiyon teorisiyle (DFT) azotun elektron ilgisi Chen ve arkadaşları tarafından sunuldu (1998). Wijesundera ve Parpia (1998), çok konfigürasyonlu Dirac-Fock yöntemiyle negatif azotun elektron ilgisini tahmin ettiler. Piangos ve Nicolaidis (1998), N^- iyonun çok yüksek uyarılmış seviyesinin bağlı hallerini sundular. Biémont ve arkadaşları (1999) azotun iyonlaşma enerjisini relativistik çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemiyle hesapladılar. Negatif azotun bağlanma enerjisi ve elektron ilgisi Andersen ve arkadaşları (1999) tarafından sunuldu. Klopper ve arkadaşları (2010) aralarında azotun da bulunduğu H'den Ne'na kadar olan atomların iyonlaşma potansiyellerini ve elektron ilgilerini katlı-küme yöntemiyle hesapladılar.

Katlı referans tekli ve çiftli uyarılmış konfigürasyon etkileşme (MRSD-CI) yöntemiyle fosforun elektron ilgisi Woon ve Dunning (1993) tarafından hesaplandı. Wang ve Smith (1995) fosforun elektron ilgisi sundular. Gutsev ve arkadaşları (1998) katlı-küme yöntemiyle fosforun elektron ilgisini hesapladılar. Yoğunluk fonksiyon teorisiyle (DFT) fosforun elektron ilgisi Chen ve arkadaşları tarafından sunuldu (1998). Çok konfigürasyonlu Dirac-Fock yöntemiyle negatif fosforun elektron ilgisi Wijesundera ve Parpia (1998) tarafından verildi. Relativistik ve kütle düzeltmeleri ile P^- iyonun iyonlaşma potansiyeli ve elektron ilgisi Koga ve diğerleri (1997) tarafından hesaplandı. Biémont ve arkadaşları (1999) fosforun iyonlaşma

enerjisini relativistik çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemiyle hesapladılar. Negatif fosforun bağlanma enerjisi ve elektron ilgisi Andersen ve arkadaşları (1999) tarafından sunuldu. Andersson ve arkadaşları (2007) negatif fosforun ince yapı enerjilerini lazer foton sökme eşik spektroskopisini kullanarak ölçtüler. Peláez ve arkadaşları (2011) fosforun elektron ilgisini ve uyarılmış spektral terimini foton sökme çalışmalarını yaptılar.

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 ϕ 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 adımıdır. Hartree-Fock yönteminin uygulanması, 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,

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

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 açısai 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 yörüngesilerin 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, ψ dalga fonksiyonlarını bulmaya eş değerdir. Enerji fonksiyonu,

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

şeklindedir. Bu enerji, sınır şartlarında ψ '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, ψ , H'nin bir özfonksiyonu olduğu durumlarda ise, $\delta\mathcal{E} = 0$ olur ve $\mathcal{E}(\psi)$ normalleşme koşuluyla kararlıdır. (2.13) denkleminle ifade edilen enerji fonksiyonu, normalleşmemiş ψ 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, ψ normalleşme zorunluluğu altında optimizasyon (en iyiyi bulma) problemi için bir çözüm ise, sınır şartlarını sağlayan ψ '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 λ '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 ψ_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, λ 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 ψ_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 ışık 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 ψ 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)

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

şeklinindedir. 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 alınması 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 Π 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 ± 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 $\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{l}_i$ ve toplam spin açısal momentum işlemcisi $\mathbf{S} = \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i$ ile sıra değiştirir. Yani ,

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

dır. Buna göre $H, \mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2$ ve S_z aralarında sıra değiştiren işlemciler takımı oluşur. ψ, H 'nin özfonksiyonu olduğu için ve $H; \mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2$ ve S_z ile sıra değiştirme özelliğine sahip olduğu için ψ bu işlemcilerin de özfonksiyonudur. Bu işlemcilerin eş zamanlı özfonksiyonları, $\psi(\gamma L M_L S M_S; q_1, \dots, q_N)$ olarak gösterilir. γ 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 γLS durumu için $\Psi_{\gamma LS}$, M tane antisimetrik CSF'nin bir açılımı olarak yazılır:

$$\Psi_{\gamma LS}(\{X_j\}) = \sum_{i=1}^M c_i \phi(\gamma_i LS, \{r_j\}) \quad (2.37)$$

$\phi(\gamma_i LS)$ 'lerin her biri \mathbf{S} toplam spin ve \mathbf{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 , θ_j , ϕ_j üç boyutlu uzay küresel koordinatlarıdır. σ_j , j elektronu için spin uzay koordinatı ve LS hallerinin tam belirlenmesi için ihtiyaç duyulan γ herhangi bir kuantum sayısını temsil etmektedir. Her bir CSF, terimlerin lineer bir birleşimidir:

$$\prod_{j=1}^N \frac{1}{r_j} P_{n_j l_j}(r_j) Y_{l_j m_j}(\theta_j, \phi_j) \chi_{m_j}(\sigma_j) \quad (2.38)$$

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

$$E = \langle \psi_{\gamma LS} | H | \psi_{\gamma LS} \rangle \quad (2.39)$$

ile verilir. $1/r_{ij}$ için çoklu açılımı ve (2.37)'i kullanarak

$$\frac{1}{r_{ij}} = \sum_k \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_k(\cos \theta) \quad (2.40)$$

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 θ , r_i ve r_j arasındaki açı değeridir.

Enerji;

$$E = \sum_{ij} c_i c_j H_{ij} \quad (2.41)$$

$$= \sum_{ij} c_i c_j \left(\sum_{stuv;k} A_{stuv;k}^{ij} R^k(s,t;u,v) - \frac{1}{2} \sum_{qw} C_{qw}^{ij} L_{qw} \right) \quad (2.42)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada R^k Slater integralleri,

$$R^k(st;u,v) = \int_0^\infty \int_0^\infty dr dr' P_s(r) P_l(r') \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_u(r) P_v(r) \quad (2.43)$$

ve L_{qw} bir elektron integralleri,

$$L_{qw} = \int_0^\infty dr P_q(r) \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] P_w(r) \quad (2.44)$$

şeklinindedir. 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 integrale gösterilen birinci dereceden bir diferansiyel denklem çiftini çözmekle elde edilir. Böylece bu integraller çözümsüz değildir.

$$H_{ij} = \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \quad (2.45)$$

elemanlı $M \times M$ simetrik matrisi, etkileşim matrisi olarak isimlendirilir. (2.41) denkleminde değişim şartları uygulandığında ve çözümde (tüm i değerleri için $\partial E / \partial c_i = 0$ olacak şekilde) katkılarla gösterilen kararlı enerjiyi alarak

$$(H - E)c = 0, \quad H = (H_{ij}) \quad (2.46)$$

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:

$$\frac{d^2 P_{nl}(r)}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r} [Z - Y_{nl}(r)] + \varepsilon_{nl,nl} \right] P_{nl}(r) + G_{nl}(r) \quad (2.47)$$

P_{nl} için MCHF denklemleri 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 denklemlerde

$$Y_i(r) = r \sum_{jk} a_{ijk} \int_0^\infty dr' P_j(r') \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_j(r') \quad (2.48)$$

ve

$$G_i(r) = \sum_{j \neq i} b_{ii'jj'k} P_j(r) \int_0^{\infty} dr P_i(r') \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_j(r') + \sum_{j \neq i} [\varepsilon_{ij} P_j(r) + c_{ij} L P_j] \quad (2.49)$$

dir. Sabitler, $\varepsilon_{nl,nl}$ (köşegen parametreleri) ve $\varepsilon_{nl,nl}$ (köşegen dışı parametreler) radyal fonksiyonların ortonormalliğini sağlayan Lagrange çarpanları ile ilişkilidir ve L , (2.49)'daki köşeli parantez içindeki operatördür. a_{ijk} , $b_{ii'jj'k}$ 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, α^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 Hamiltoniyeni,

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \quad (2.50)$$

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

$$H_{RS} = H_{MC} + H_{D1} + H_{D2} + H_{OO} + H_{SSC} \quad (2.51)$$

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:

$$H_{MC} = -\frac{\alpha^2}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2)^t \nabla_i^2 \quad (2.52)$$

$$H_{D1} = -\frac{\alpha^2 Z}{8} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \left(\frac{1}{r_i} \right) \quad (2.53)$$

$$H_{D2} = -\frac{\alpha^2}{4} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \left(\frac{1}{r_{ij}} \right) \quad (2.54)$$

$$H_{OO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \left[\frac{p_i \cdot p_j}{r_{ij}} + \frac{r_{ij} (r_{ij} \cdot p_i) p_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.55)$$

$$H_{SSC} = -\frac{8\pi\alpha^2}{3} \sum_{i<j}^N (s_i \cdot s_j) \delta(r_i, r_j) \quad (2.56)$$

H_{FS} işlemcisi spin ve yörünge açısıl momentumları arasındaki etkileşimi tanımlamaktadır. Bu işlemci bir etkileşme terimi olduğu için \mathbf{L} ve \mathbf{S} ile sıra

değiştirmemektedir. Ancak, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ toplam açısal momentumla sıra değiştirmektedir. İnce yapı işlemcisi,

$$H_{FS} = H_{SO} + H_{SOO} + H_{SS} \quad (2.57)$$

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

$$H_{SO} = \frac{\alpha^2 Z}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i^3} l_i \cdot s_i \quad (2.58)$$

$$H_{SOO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \frac{r_{ij} \times p_i}{r_{ij}^3} (s_i + 2s_j) \quad (2.59)$$

$$H_{SS} = \alpha^2 \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[s_i \cdot s_j - 3 \frac{(s_i \cdot r_{ij})(s_j \cdot r_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \quad (2.60)$$

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

$$\psi(\gamma JM_j) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i L_i S_i JM_j) \quad (2.61)$$

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

$$\Phi(\gamma LSJM_J) = \sum_{M_L M_S} \langle LM_L SM_S | LSJM_J \rangle \Phi(\gamma LM_L SM_S) \quad (2.62)$$

şeklinde. 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

$$Hc = Ec \quad (2.63)$$

şeklinde matris özdeğer problemi elde edilir. Burada H ,

$$H_{ij} = \langle \gamma_i L_i S_i J M_J | H_{BP} | \gamma_j L_j S_j J M_J \rangle \quad (2.64)$$

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

$$E = E_{NR} + E_{RS} + E_{FS} \quad (2.65)$$

olarak elde edilir. Burada E_{NR} ,

$$E_{NR} = \langle \gamma LSJM_J | H_{NR} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.66)$$

şeklinde hesaplanan relativistik olmayan enerjidir. E_{RS} ,

$$E_{RS} = \langle \gamma LSJM_J | H_{RS} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.67)$$

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

$$E_{FS} = \langle \gamma LSJM_J | H_{FS} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.68)$$

$$E_{FS} = E_{SO} + E_{SOO} + E_{SS} \quad (2.69)$$

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

$$J = |L-S|, |L-S|+1, \dots, |L+S| \quad (2.70)$$

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

$$\Delta E_{FS} = 2\xi J \quad (2.71)$$

dır. Burada $\xi = \xi_{SO} + \xi_{SOO}(\gamma LS)$ olur. Bu ince yapı için Lande aralık kuralı olarak bilinir. ξ pozitif ve ince yapı enerjisi J ile artıyorsa ince yapının normal olduğu, ξ 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. MCHF Yöntemi ile Hesaplama Adımları

2.5.1. 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:

$$E = \sum_{stuv;k} R^k(s,t;u,v) \left(\sum_{ij} A_{stuv;k}^{ij} c_i c_j \right) - \frac{1}{2} \sum_{qw} L_{qw} \left(\sum_{ij} C_{qw}^{ij} c_i c_j \right) \quad (2.72)$$

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:

$$\langle \text{özellik} \rangle = \langle \Psi_i | OP | \Psi_i \rangle \quad (2.73)$$

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

(2.42) denklemi (2.98) denkleminde yerine yazılırsa

$$\langle \text{özellik} \rangle = \sum_{ii} c_i c_i \langle \Phi(\gamma_i LS) | OP | \Phi(\gamma_i LS) \rangle \quad (2.74)$$

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

$$\langle \Phi(\gamma_i LS) | OP | \Phi(\gamma_i LS) \rangle = \sum_{j,j,k} \text{Coeff}(k, a_j, a_j)_{ii} RI^k(a_j, a_j) \quad (2.75)$$

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 (2.74) denklem (2.75)'de yerine yazılırsa

$$\langle \text{özellik} \rangle = \sum_{ii} c_i c_i \sum_{j,j,k} \text{Coeff}(k, a_j, a_j) RI^k(a_j, a_j) \quad (2.76)$$

$$= \sum_{a_j, a_j, k} RI^k \left(a_j, a_j \sum_{ii} c_i c_i \text{Coeff}(k, a_j, a_j)_{ii} \right) \quad (2.77)$$

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

$$\langle \text{özellik} \rangle = RI^k(a_j, a_j) CF(a_j, a_j, k) \quad (2.78)$$

açıkça enerji açılımı için denklem (2.41)'e benzer bir şekilde integraller üzerinden toplam gibi yeniden yazılabilir.

Böylece, matris elemanlarının hesaplanması ve (2.78) denkleminin toplamları atomik özelliklerin tahmininde elde edilir. Bu matrisler simetriktir böylece köşegen altı ya da köşegen üstü kısmının hesaplanması gerekli olabilmektedir.

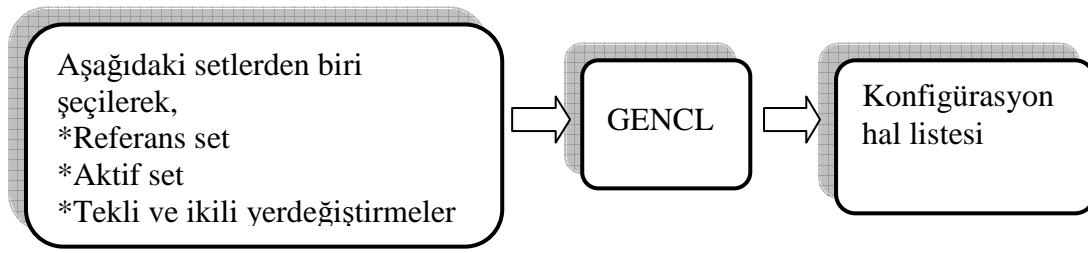
2.6. MCHF Atomik Yapı Paketinde Hesaplama Adımları

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.

2.6.1. Konfigürasyon hal fonksiyonlarının üretilmesi

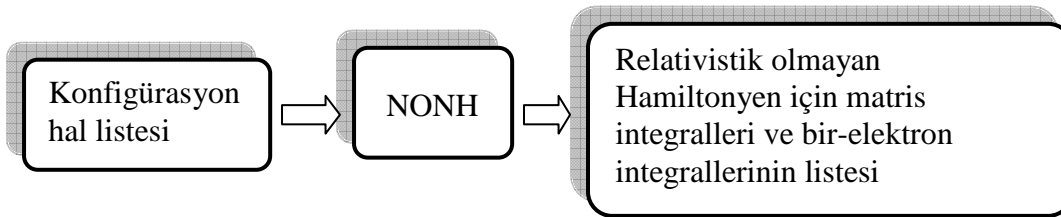
Bu program, verilen bir atomun kapalı alt tabakalarını okuyarak LS çiftlenim kuralına göre çiftlenmiş konfigürasyon hal listesi üretir. Verilen konfigürasyonların paritesini kontrol eder ve bu konfigürasyon için mümkün olan tüm çiftlenimleri oluşturur. Verilen çeşitli setleri, 'referans set', 'aktif set' ya da 'tekli ve ikili yerdeğişirmeler' 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

2.6.2. Relativistik olmayan hamiltonyenin açılal integrallerinin hesaplanması

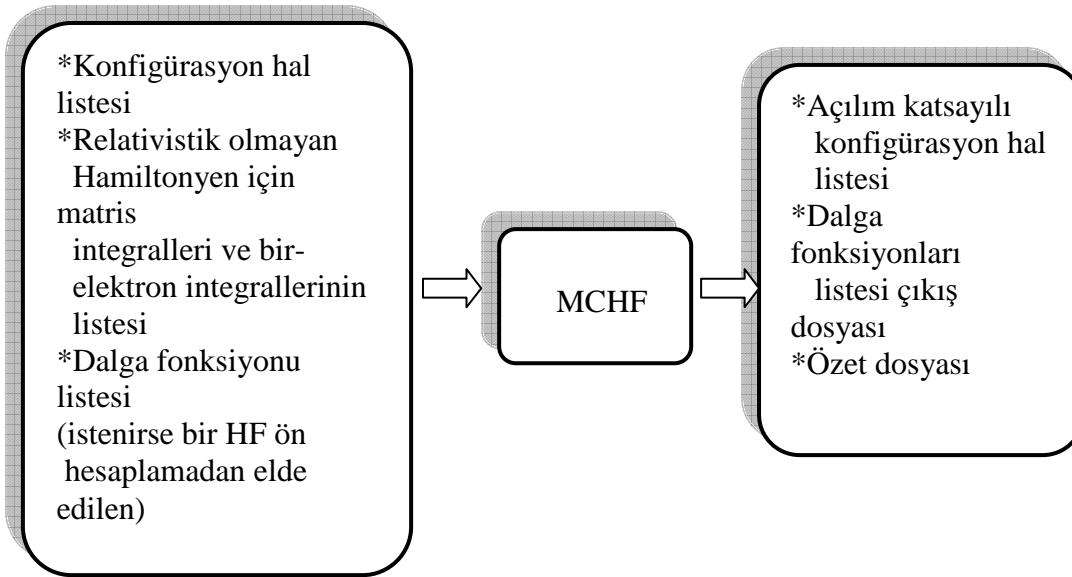
NONH ile Slater integralleri ve kinetik integrallerin lineer birleşimi olarak relativistik olmayan hamiltonyenin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açılal integraller hesaplanır. Verilen bir konfigürasyon hal listesi için tüm matris elemanları veya seçilenler hesaplanabilir. Bir tabakada 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

2.6.3. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemiyle hesaplama (MCHF)

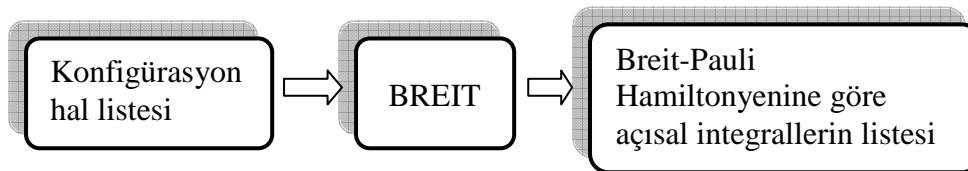
MCHF programıyla, MCHF yaklaşıklığında relativistik olmayan radyal fonksiyonları, konfigürasyon açılım katsayıları ve enerji hesaplanır. Radyal dalga fonksiyonlarını ve açılım katsayılı konfigürasyon hal listesini oluşturur (Şekil 2.3).



Şekil 2.3. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock programı

2.6.4. Breit-Pauli Hamiltonyeninin açılal integrallerinin hesaplanması

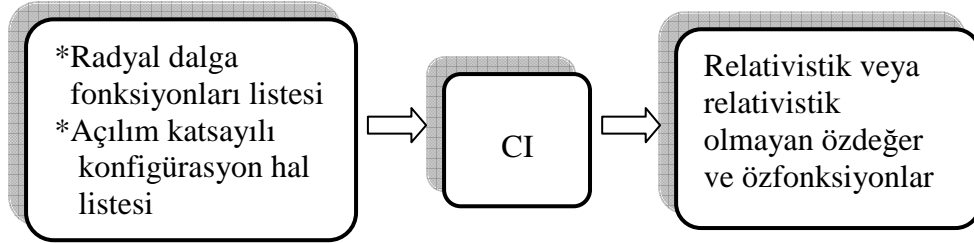
Bu program, radyal integrallerin lineer kombinasyonu olarak Breit-Pauli Hamiltonyeninin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açılal integralleri hesaplar. Verilen bir konfigürasyon hal listesi için tüm matris elemanları veya seçilen etkileşimler hesaplanabilir. Yörüngeler ortogonal olarak kabul edilir. Breit-Pauli LSJ yaklaşığında, 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 bağlı katkılar için SO, SOO ve SS katkılarını hesaplar. H_{BP} için indirgenmiş integrallerin listesini oluşturur (Şekil 2.4).



Şekil 2.4. Breit-Pauli Hamiltonyeninin açılal integrallerinin hesaplanması

2.6.5. 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. Elektron İlgisinin Hesaplanması (EA)

Bir nötral atomun taban hali enerjisi ile aynı atomun iyonunun taban hali enerjisi arasındaki farka elektron ilgisi denir.

$$E_{EA} = E_{NÖTRAL} - E_{İYON} \quad (2.79)$$

BÖLÜM 3. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR

Bu çalışmada, yarı dolu s-tabakalı atom olan lityum ($Z = 3$) ve sodyum ($Z = 11$), ve yarı dolu p-tabakalı atom olan azot ($Z = 7$) ve fosfor ($Z = 15$) atomlarının elektron ilgisi hesapları çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi (Fischer 2000) ile yapıldı. Ayrıca azot ve fosforun negatif iyonlarının temel hal ince yapı seviyeleri de incelendi. Kullanılan yöntem bir konfigürasyon etkileşme yöntemidir ve negatif iyonlar için de önemli olan elektron korelasyonunu dikkate almaktadır. Yöntem aynı zamanda Breit-Pauli relativistik katkıları da dikkate almaktadır. Böylece yöntemin uygulanabilirliğinin ölçüsü özellikle kararlı negatif iyonu olmayan azot ve aynı grupta bulunan fosfor için de incelendi. Benzer inceleme s-tabakalı lityum ve sodyum için de yapıldı. Bu çalışmada elde edilen sonuçlar, 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 seviye enerjileri hesaplandı. Bu seviye enerjilerinin temel halleri kullanılarak elektron ilgileri belirlendi. Lityum, azot, sodyum ve fosfor için elektron ilgileri sırasıyla Tablo 3.1, Tablo 3.2, Tablo 3.4 ve Tablo 3.5'te verilmektedir. Tabloların birinci sütununda yukarıda belirtilen atomların temel hal enerjilerinin, relativistik etkilerin dikkate alınmadığı MCHF hesabı, ikinci sütunda relativistik etkilerin de dikkate alındığı MCHF+BP hesabı yer almaktadır. Bu hesap sonuçları atomik birim sisteminde verilmektedir. Aynı hesaplamalar iyon halleri için üçüncü ve dördüncü sütunda bulunmaktadır. Beşinci ve altıncı sütunda ise elektron ilgisi değerlerinin MCHF ve MCHF+BP hesapları verilmektedir. Bu tablolarda karşılaştırma kolaylığı açısından

enerji birimi eV olarak verilmiştir. Ayrıca tabloların alt kısmında karşılaştırma için, diğer yapılan çalışmalar bulunmaktadır.

Azot ve fosfor negatif iyonlarının temel hal ince yapıları sırasıyla Tablo 3.3 ve Tablo 3.6'da verilmektedir. Bu tablolarda ilk sütunda terimler, ikinci sütunda enerji farkları ve üçüncü sütunda karşılaştırma değerleri bulunmaktadır. Fakat azot için karşılaştırma değeri bulunmamaktadır. Enerji değerleri eV biriminde verilmektedir.

3.1. Lityum için Elektron İlgisi (EA) Hesapları

Nötral lityum (Li) atomunun temel hali $1s^2 2s^2 \ ^2S_{1/2}$ 'dir. Değişik konfigürasyon takımları ile Breit-Pauli relativistik etkileşmeler çerçevesinde çok konfigürasyonlu Hartree-Fock hesabı yapıldı.

Lityum negatif iyonunun (Li^-) temel hali $1s^2 2s^2 \ ^1S_0$ 'dır. Lityumda olduğu gibi Li^- içinde kapalı tabaka alınmadı ve değişik konfigürasyonlar kullanılarak Breit-Pauli relativistik etkileşmeler çerçevesinde çok konfigürasyonlu Hartree-Fock hesabı yapıldı. Li temel hal enerjisi ile Li^- temel hal enerjisi kullanılarak elektron ilgisi (EA) hesaplandı. Li için yapılan hesaplamalar tablolarda A, B, C, D üst indisyle; Li^- için yapılan hesaplamalar 1, 2, 3, 4 üst indisyle gösterildi.

Li için yapılan hesaplamalarda üretilen konfigürasyonlar Ekler kısmındaki Tablo A.1'de verilmektedir. Hesaplanan elektron ilgisi değerleri ve temel hal enerjileri Tablo 3.1'de bulunmaktadır.

A çalışmasına ait elektron ilgisi değerlerinde (A-1, A-2, A-3, A-4) karşılaştırma değerlerine en yakın A-1 değeri olmuştur. Bunun nedeni 1 ile gösterilen hesapta konfigürasyon sayısının (651) diğerlerine göre daha fazla olmasıdır. B, C ve D hesaplamaları için de karşılaştırma değerlerine en yakın olan 1 ile gösterilen (B-1, C-1, D-1) hesaplamalardır. Bunların içinden de 2011 yılında Jose ve arkadaşları tarafından hesaplanmış olan 0,621 eV değerine en yakın C-1 çalışması olmuştur.

Tablo 3.1. Li ve Li⁻ için temel hallerinin enerjileri (E) ve elektron ilgisi (EA)

Li (ab)		Li ⁻ (ab)		EA (eV)	
E _{MCHF}	E _{MCHF+BP}	E _{MCHF}	E _{MCHF+BP}	MCHF	MCHF+BP
-7,4767193 ^A	-7,4767193 ^A	-7,4941964 ¹	-7,4941964 ¹	0,475 ^{A-1}	0,475 ^{A-1}
		-7,4882246 ²	-7,4882246 ²	0,313 ^{A-2}	0,313 ^{A-2}
		-7,4558543 ³	-7,4558543 ³	-0,568 ^{A-3}	-0,568 ^{A-3}
		-7,4773233 ⁴	-7,4773233 ⁴	0,016 ^{A-4}	0,016 ^{A-4}
-7,4745117 ^B	-7,4745117 ^B	-7,4941964 ¹	-7,4941964 ¹	0,535 ^{B-1}	0,535 ^{A-5}
		-7,4882246 ²	-7,4882246 ²	0,373 ^{B-2}	0,373 ^{A-6}
		-7,4558543 ³	-7,4558543 ³	-0,019 ^{B-3}	-0,019 ^{B-3}
		-7,4773233 ⁴	-7,4773233 ⁴	0,076 ^{B-4}	0,076 ^{B-4}
-7,4737805 ^C	-7,4737805 ^C	-7,4941964 ¹	-7,4941964 ¹	0,555 ^{C-1}	0,555 ^{C-1}
		-7,4882246 ²	-7,4882246 ²	0,393 ^{C-2}	0,393 ^{C-2}
		-7,4558543 ³	-7,4558543 ³	-0,488 ^{C-3}	-0,488 ^{C-3}
		-7,4773233 ⁴	-7,4773233 ⁴	0,096 ^{C-4}	0,096 ^{C-4}
-7,4773233 ^D	-7,4773233 ^D	-7,4941964 ¹	-7,4941964 ¹	0,459 ^{D-1}	0,459 ^{D-1}
		-7,4882246 ²	-7,4882246 ²	0,297 ^{D-2}	0,297 ^{D-2}
		-7,4558543 ³	-7,4558543 ³	-0,570 ^{D-3}	-0,570 ^{D-3}
		-7,4773233 ⁴	-7,4773233 ⁴	0,014 ^{D-4}	0,014 ^{D-4}

Diğer Çalışmalar EA (eV) 0,624^a; 0,618^b; 0,621^c; 0,617^d; 0,618^e; 0,62^f; 0,613^g; 0,614^h

a: Chen ve arkadaşları 1998; b: Hotop ve arkadaşları 1975; c: Jose ve arkadaşları 2011; d: Bae ve Peterson 1985; e: Feldman 1976; f: Weiss 1968; g: Fung ve Matese 1972; h: Grun 1972

3.2. Azot için Hesaplama Sonuçları

3.2.1. Azot için elektron ilgisi (EA) hesapları

Nötral azot atomunun (N) temel hali $1s^2 2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2}$, azot negatif iyonunun (N⁻) temel hali $1s^2 2s^2 2p^4 \ ^3P_2$ 'dir. Azot atomu için yapılan çalışmalarda öncelikle 1s tabakası dolu alınarak bir Hartree-Fock hesabı yapıldı. Bu hesaplardan elde edilen dalga fonksiyonları daha sonra MCHF hesaplamalarında kullanıldı. Lityumda olduğu gibi değişik konfigürasyon takımları seçilerek temel hal enerjileri hesaplandı. Bu hesaplamalar tablolarda N için A, B, C, D, E üst indisiyle verilirken N⁻ için 1, 2, 3, 4, 5, 6 üst indisiyle verilmektedir.

Nötral azot ve azot negatif iyonu için yapılan hesaplamalarda kullanılan konfigürasyonlar Ekler kısmındaki Tablo A.2'de verilmektedir. Hesaplanan elektron ilgisi değerleri ve temel hal enerjileri de Tablo 3.2'de bulunmaktadır.

Azot negatif iyonu kararsız bir yapıya sahip olduğundan dolayı EA değerleri genel olarak negatif çıkmaktadır. Sonuçlar içerisinde karşılaştırma değerlerine en yakın olan E-6 olmuştur.

Tablo 3.2. N ve N⁻ için temel hallerinin enerjileri (E) ve elektron ilgisi (EA)

N (ab)		N ⁻ (ab)		EA (eV)	
E _{MCHF}	E _{MCHF+BP}	E _{MCHF}	E _{MCHF+BP}	MCHF	MCHF+BP
-54,4496357 ^A	-54,4496373 ^A	-54,3564275 ¹	-54,3565514 ¹	-2,535 ^{A-1}	-2,532 ^{A-1}
		-54,3958049 ²	-54,3959147 ²	-1,464 ^{A-2}	-1,461 ^{A-2}
		-54,3941060 ³	-54,3942300 ³	-1,51 ^{A-3}	-1,507 ^{A-3}
		-54,3940641 ⁴	-54,3941882 ⁴	-1,512 ^{A-4}	-1,508 ^{A-4}
		-54,5212759 ⁵	-54,5212759 ⁵	1,949 ^{A-5}	1,949 ^{A-5}
		-54,5200748 ⁶	-54,5200748 ⁶	1,916 ^{A-6}	1,916 ^{A-6}
-54,4856334 ^B	-54,4856343 ^B	-54,3564275 ¹	-54,3565514 ¹	-3,514 ^{B-1}	-3,511 ^{B-1}
		-54,3958049 ²	-54,3959147 ²	-2,443 ^{B-2}	-2,440 ^{B-2}
		-54,3941060 ³	-54,3942300 ³	-2,490 ^{B-3}	-2,486 ^{B-3}
		-54,3940641 ⁴	-54,3941882 ⁴	-2,491 ^{B-4}	-2,487 ^{B-4}
		-54,5212759 ⁵	-54,5212759 ⁵	0,969 ^{B-5}	0,969 ^{B-5}
		-54,5200748 ⁶	-54,5200748 ⁶	0,937 ^{B-6}	0,938 ^{B-6}
-54,4851636 ^C	-54,4851647 ^C	-54,3564275 ¹	-54,3565514 ¹	-3,502 ^{C-1}	-3,498 ^{C-1}
		-54,3958049 ²	-54,3959147 ²	-2,431 ^{C-2}	-2,428 ^{C-2}
		-54,3941060 ³	-54,3942300 ³	-2,477 ^{C-3}	-2,473 ^{C-3}
		-54,3940641 ⁴	-54,3941882 ⁴	-2,478 ^{C-4}	-2,475 ^{C-4}
		-54,5212759 ⁵	-54,5212759 ⁵	0,982 ^{C-5}	0,982 ^{C-5}
		-54,5200748 ⁶	-54,5200748 ⁶	0,950 ^{C-6}	0,950 ^{C-6}
-54,4248177 ^D	-54,4248186 ^D	-54,3564275 ¹	-54,3565514 ¹	-1,860 ^{D-1}	-1,857 ^{D-1}
		-54,3958049 ²	-54,3959147 ²	-0,789 ^{D-2}	-0,786 ^{D-2}
		-54,3941060 ³	-54,3942300 ³	-0,835 ^{D-3}	-0,832 ^{D-3}
		-54,3940641 ⁴	-54,3941882 ⁴	-0,836 ^{D-4}	-0,833 ^{D-4}
		-54,5212759 ⁵	-54,5212759 ⁵	2,624 ^{D-5}	2,624 ^{D-5}
		-54,5200748 ⁶	-54,5200748 ⁶	2,591 ^{D-6}	2,591 ^{D-6}
-54,5220708 ^E	-54,5220708 ^E	-54,3564275 ¹	-54,3565514 ¹	-4,505 ^{E-1}	-4,505 ^{E-1}
		-54,3958049 ²	-54,3959147 ²	-3,434 ^{E-2}	-3,434 ^{E-2}
		-54,3941060 ³	-54,3942300 ³	-3,481 ^{E-3}	-3,481 ^{E-3}
		-54,3940641 ⁴	-54,3941882 ⁴	-3,482 ^{E-4}	-3,482 ^{E-4}
		-54,5212759 ⁵	-54,5212759 ⁵	-0,022 ^{E-5}	-0,022 ^{E-5}
		-54,5200748 ⁶	-54,5200748 ⁶	-0,054 ^{E-6}	-0,054 ^{E-6}
Diğer Çalışmalar EA (eV)		-0,067^a; -0,27^b; -0,07^c; -0,56^d; 0,05^e			

a: Chen ve arkadaşları 1998; b: Pekeris 1958 1975; c: Hotop ve arkadaşları 1975; d: Glockler 1934; e: Edlén 1960

3.2.2. Azot iyonu (N⁻) için ince yapı hesapları

Azot negatif iyonunun temel halinin ince yapısı hesaplanmıştır. Terimleri ve karşılık gelen ince yapı hesaplamaları Tablo 3.3'te verilmektedir. Azot iyonu için mevcut çalışmalarda kararlı bir hali elde edilemediğinden karşılaştırma yapılamamaktadır.

Tablo 3.3. N⁻ için temel hallerinin ince yapı seviyeleri

Terim	Enerji(meV)
³ P ₀ – ³ P ₁	2,93 ¹
	2,56 ²
	2,93 ³
	2,92 ⁴
³ P ₁ – ³ P ₂	6,82 ¹
	6,03 ²
	6,80 ³
	6,81 ⁴
³ P ₀ – ³ P ₂	9,75 ¹
	8,59 ²
	9,73 ³
	9,73 ⁴

3.3. Sodyum için Hesaplama Sonuçları

Nötrül sodyum atomunun (Na) temel hali $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 S_{1/2}$, sodyum iyonunun (Na⁻) temel hali $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 S_0$ 'dır. Sodyum atomu için yapılan çalışmalarda Hartree-Fock hesabı 1s tabakası dolu alınarak yapıldı. Daha sonra relativistik etkilerinde dikkate alındığı çok konfigürasyonlu Hartree-Fock hesabı yapıldı. Bu hesaplama sonuçları tablolarda Na için A, B, C, D üst indisiyle ve Na⁻ için 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 üst indisiyle belirtilmektedir.

Nötrül sodyum negatif iyonu için yapılan hesaplamalarda kullanılan konfigürasyonlar Ekler kısmındaki Tablo A.3'te verilmektedir. Hesaplanan elektron ilgisi değerleri ve temel hal enerjileri de Tablo 3.4'te sunulmaktadır.

Tablo 3.4. Na ve Na⁻ için temel hallerinin enerjileri (E) ve elektron ilgisi (EA)

Na (ab)		Na ⁻ (ab)		EA (eV)	
E _{MCHF}	E _{MCHF+BP}	E _{MCHF}	E _{MCHF+BP}	MCHF	MCHF+BP
-162,2303209 ^A	-162,2303209 ^A	-161,9994462 ¹	-161,9994462 ¹	-6,280 ^{A-1}	-6,280 ^{A-1}
		-162,1990212 ²	-162,1989994 ²	-0,852 ^{A-2}	-0,851 ^{A-2}
		-162,0541244 ³	-162,0541244 ³	-4,054 ^{A-3}	-4,054 ^{A-3}
		-162,0540974 ⁴	-162,0540974 ⁴	-4,793 ^{A-4}	-4,793 ^{A-4}
		-162,0544041 ⁵	-162,0544041 ⁵	-4,785 ^{A-5}	-4,785 ^{A-5}
		-162,0628613 ⁶	-162,0628613 ⁶	-4,555 ^{A-6}	-4,555 ^{A-6}
		-162,0544957 ⁷	-162,0544957 ⁷	-4,782 ^{A-7}	-4,782 ^{A-7}
-162,3273791 ^B	-162,3273791 ^B	-161,9994462 ¹	-161,9994462 ¹	-8,920 ^{B-1}	-8,920 ^{B-1}
		-162,1990212 ²	-162,1989994 ²	-3,492 ^{B-2}	-3,491 ^{B-2}
		-162,0541244 ³	-162,0541244 ³	-7,433 ^{B-3}	-7,433 ^{B-3}
		-162,0540974 ⁴	-162,0540974 ⁴	-7,433 ^{B-4}	-7,433 ^{B-4}
		-162,0544041 ⁵	-162,0544041 ⁵	-7,425 ^{B-5}	-7,425 ^{B-5}
		-162,0628613 ⁶	-162,0628613 ⁶	-7,195 ^{B-6}	-7,195 ^{B-6}
		-162,0544957 ⁷	-162,0544957 ⁷	-7,422 ^{B-7}	-7,422 ^{B-7}
-162,0624460 ^C	-162,0624460 ^C	-161,9994462 ¹	-161,9994462 ¹	-1,714 ^{C-1}	-1,714 ^{C-1}
		-162,1990212 ²	-162,1989994 ²	3,714 ^{C-2}	3,715 ^{C-2}
		-162,0541244 ³	-162,0541244 ³	-0,226 ^{C-3}	-0,226 ^{C-3}
		-162,0540974 ⁴	-162,0540974 ⁴	-0,227 ^{C-4}	-0,227 ^{C-4}
		-162,0544041 ⁵	-162,0544041 ⁵	-0,219 ^{C-5}	-0,219 ^{C-5}
		-162,0628613 ⁶	-162,0628613 ⁶	0,011 ^{C-6}	0,011 ^{C-6}
		-162,0544957 ⁷	-162,0544957 ⁷	-0,216 ^{C-7}	-0,216 ^{C-7}
-162,0563893 ^D	-162,0563684 ^D	-161,9994462 ¹	-161,9994462 ¹	-1,548 ^{D-1}	-1,548 ^{D-1}
		-162,1990212 ²	-162,1989994 ²	3,880 ^{D-2}	3,880 ^{D-2}
		-162,0541244 ³	-162,0541244 ³	-0,061 ^{D-3}	-0,061 ^{D-3}
		-162,0540974 ⁴	-162,0540974 ⁴	-0,062 ^{D-4}	-0,062 ^{D-4}
		-162,0544041 ⁵	-162,0544041 ⁵	-0,053 ^{D-5}	-0,053 ^{D-5}
		-162,0628613 ⁶	-162,0628613 ⁶	0,333 ^{D-6}	0,333 ^{D-6}
		-162,0544957 ⁷	-162,0544957 ⁷	-0,051 ^{D-7}	-0,051 ^{D-7}
Diğer Çalışmalar EA (eV)		0,528^a; 0,548^b; 0,547^c; 0,550^d; 0,539^e; 0,357^f; 0,539^g; 1,199^h; 0,544ⁱ			

a: Chen ve arkadaşları 1998; b: H.Hotop ve arkadaşları 1975; c: Groote ve arkadaşları 2004; d: Londov ve arkadaşları 2001; e: Vinci ve arkadaşları 2000; f: Ryzhikh ve arkadaşları 1998; g: Weiss ve arkadaşları 1968; h: Thaler 1951; i: Jose ve arkadaşları 2011

3.4. Fosfor için Hesaplama Sonuçları

3.4.1. Fosfor için elektron ilgisi (EA) hesapları

Nötral fosfor atomunun (P) temel hali $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3 \ ^4S_{3/2}$, fosfor negatif iyonunun (P⁻) temel hali $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 \ ^3P_2$ 'dir. Fosfor atomu için yapılan çalışmalarda Hartree-Fock hesabı 1s, 2s, 2p tabakası dolu alınarak yapıldı. Daha sonra relativistik

etkilerinde dikkate alındığı çok konfigürasyonlu Hartree-Fock hesabı yapıldı. Bu hesaplama sonuçları tablolarda P için A, B, C, D ve E üst indisiyle ve P⁻ için 1, 2, 3 ve 4 üst indisiyle belirtilmektedir.

Fosfor için yapılan hesaplamalarda kullanılan konfigürasyonlar Ekler kısmındaki Tablo A.4'te verilmektedir. Hesaplanan elektron ilgisi değerleri ve temel hal enerjileri de Tablo 3.5'te sunulmaktadır.

Tablo 3.5. P ve P⁻ için temel hallerinin enerjileri (E) ve elektron ilgisi (EA)

P (ab)		P ⁻ (ab)		EA (eV)	
E _{MCHF}	E _{MCHF+BP}	E _{MCHF}	E _{MCHF+BP}	MCHF	MCHF+BP
-341,5953742 ^A	-341,5953742 ^A	-341,6162729 ¹	-341,6166351 ¹	0,568 ^{A-1}	0,578 ^{A-1}
		-341,6208966 ²	-341,6212691 ²	0,694 ^{A-2}	0,704 ^{A-2}
		-341,5917156 ³	-341,5921254 ³	-0,099 ^{A-3}	-0,088 ^{A-3}
		-341,5606668 ⁴	-341,5611449 ⁴	-0,944 ^{A-4}	-0,931 ^{A-4}
-341,5947962 ^B	-341,5947962 ^B	-341,6162729 ¹	-341,6166351 ¹	0,584 ^{B-1}	0,594 ^{B-1}
		-341,6208966 ²	-341,6212691 ²	0,710 ^{B-2}	0,720 ^{B-2}
		-341,5917156 ³	-341,5921254 ³	-0,084 ^{B-3}	-0,073 ^{B-3}
		-341,5606668 ⁴	-341,5611449 ⁴	-0,928 ^{B-4}	-0,915 ^{B-4}
-341,6052196 ^C	-341,6052196 ^C	-341,6162729 ¹	-341,6166351 ¹	0,301 ^{C-1}	0,311 ^{C-1}
		-341,6208966 ²	-341,6212691 ²	0,426 ^{C-2}	0,437 ^{C-2}
		-341,5917156 ³	-341,5921254 ³	-0,367 ^{C-3}	-0,356 ^{C-3}
		-341,5606668 ⁴	-341,5611449 ⁴	-1,212 ^{C-4}	-1,199 ^{C-4}
-341,5729046 ^D	-341,5729229 ^D	-341,6162729 ¹	-341,6166351 ¹	1,180 ^{D-1}	1,189 ^{D-1}
		-341,6208966 ²	-341,6212691 ²	1,305 ^{D-2}	1,315 ^{D-2}
		-341,5917156 ³	-341,5921254 ³	0,512 ^{D-3}	0,522 ^{D-3}
		-341,5606668 ⁴	-341,5611449 ⁴	-0,333 ^{D-4}	-0,320 ^{D-4}
-341,5739804 ^E	-341,5739940 ^E	-341,6162729 ¹	-341,6166351 ¹	1,150 ^{E-1}	1,160 ^{E-1}
		-341,6208966 ²	-341,6212691 ²	1,276 ^{E-2}	1,286 ^{E-2}
		-341,5917156 ³	-341,5921254 ³	0,482 ^{E-3}	0,493 ^{E-3}
		-341,5606668 ⁴	-341,5611449 ⁴	-0,362 ^{E-4}	-0,350 ^{E-4}

Diğer Çalışmalar EA (eV) 0,748^a; 0,7465^b; 0,7468^c; 0,7464^d; 0,7465^e; 0,7467^f

a: Chen ve arkadaşları 1998; b: H.Hotop ve arkadaşları 1975; c: Feldman 1976 ; d: Slater ve Lineberger 1977; e: Andersen ve arkadaşları 1999; f: Andersson ve arkadaşları 2007

3.4.2. Fosfor negatif iyonu (P⁻) için ince yapı hesapları

Fosfor negatif iyonunun temel halinin ince yapısı hesaplanmıştır. Terimleri ve karşılık gelen ince yapı hesaplamaları Tablo 3.6'da verilmektedir. Fosfor iyonu için

ince yapı hesaplamaları diğer çalışmalarla karşılaştırıldığında oldukça uyumlu olduğu görülmektedir.

Tablo 3.6. P^- için temel hallerinin ince yapı seviyeleri

Terim	Enerji(meV)	Karşılaştırma (meV)
${}^3P_0 - {}^3P_1$	9,71 ¹	12,29 ^a
	10,06 ²	10,25 ^b
	11,02 ³	10,29 ^c
	10,96 ⁴	
${}^3P_1 - {}^3P_2$	19,69 ¹	24,57 ^a
	20,24 ²	22,48 ^b
	22,30 ³	22,43 ^c
	25,05 ⁴	22,40 ^d
${}^3P_0 - {}^3P_2$	29,40 ¹	36,86 ^a
	30,30 ²	32,73 ^b
	33,32 ³	32,72 ^c
	36,01 ⁴	32,60 ^d

a: Oliveria ve arkadaşları (1999); b: Andersson ve arkadaşları (2007); c: Pelaez ve arkadaşları (2011); d: Andersen ve arkadaşları (1999)

3.5. Sonuç

Çalışmada, yarı dolu s ve yarı dolu p tabakalarına sahip sırayla Li ve Na ve N ve P atomlarının elektron ilgisi hesapları korelasyon ve Breit-Pauli relativistik etkileri dikkate alan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemiyle (Fischer, 2000) hesaplandı. Ayrıca N ve P atomlarının temel hal seviyeleri arasındaki ince yapı geçiş enerjileri belirlendi. P için elde edilen hesaplama sonuçları mevcut diğer çalışmalarla karşılaştırıldığında oldukça iyi uyumun olduğu görülmüştür. N için ise elde edilen ince yapıya ait hesaplama sonuçları mevcut çalışma olmadığı için karşılaştırma yapılamadı. Bunun nedeninin kararlı bir N^- iyonuna ait mevcut çalışmaların birbirinden oldukça farklı olması ve kararlı bir N^- iyonunun elde edilememesi olabilir. Biz bu çalışmada N^- için yaptığımız hesaplamalarda kararlı iyon halini gösteren pozitif elektron ilgisi değeri elde edebildik. Çok yakın olmamakla beraber bir pozitif elektron ilgisi değeri de mevcuttur (Edlén, 1960).

Li ve Na'un negatif iyon hallerinde s tabakası tam dolu olduğu için bu iyonların ince yapı seviyeleri oluşmamaktadır. Bu nedenle bu atomların sadece elektron ilgisi hesapları yapılmıştır.

Negatif iyonlar konusu zaman zaman yoğun ilgi çekmektedir. Negatif iyonlar astrofizik atmosfer fiziđi ve plazma fiziđinden yüzey fiziđine ve hızlandırıcı fiziđine kadar fiziđin deđişik alanlarında önemli rol oynamaktadırlar. Ayrıca negatif iyonlar arkeolojik numune tespitlerinde jeofizikte okyanus ve su biliminde ve biyotıpta kullanılmaktadırlar. Böylece bu çalışmada elde edilen hesaplama sonuçlarının bu alandaki çalışmalar için faydalı olacağını söyleyebiliriz.

KAYNAKLAR

ABBADI, M.A., BANI-HANI, N.M., KHALIFEH, J.M., A variational wave function for $2p^2$ -orbitals in atomic negative ions, *Int. J. Theor. Phys.*, 40(11), 2053–2066, 2001.

ANDERSEN, H.H., PETRUNIN, V.V., KRISTENSEN, P., ANDERSEN, T., Structural properties of the negative strontium ion: Binding energy and fine-structure splitting, *Phys. Rev. A*, 55, 3247–3249, 1997a.

ANDERSEN, L.H., Photonic, electronic and atomic collisions, proceedings of XXII international conference, USA, Burgdorfer, J., Cohen, J.S., Datz, S., Vane, C.R. (Eds.), 292, 2002.

ANDERSEN, T., ANDERSEN, H.H., BALLING, P., KRISTENSEN, P., PETRUNIN, V.V., Structure and dynamics of the negative alkaline-earth ions, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 30, 3317–3332, 1997b.

ANDERSEN, T., Atomic negative ions: Structure, dynamics and collisions, *Phys. Rep.* 394, 157–313, 2004.

ANDERSEN, T., HAUGEN, H.K., HOTOP, H., Binding energies in atomic negative ions: III, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 28, 1511–1533, 1999.

ANDERSEN, T., Lifetimes of negative ions determined in a storage ring, *Phys. Scr.*, T59, 230–235, 1995.

ANDERSEN, T., Photonic, electronic and atomic collisions, proceedings of XX international conference, Vienna, Austria, Aumayr, F., Winter H. (Eds.), 401, 1998.

ANDERSEN, T., Spectroscopy of negative ions, *Phys. Scr.*, T34, 23–35, 1991.

ANDERSSON, P., LINDAHL, A.O., ALFREDSSON, C., ROGSTRÖM, L., DIEHL, C., PEGG, D.J., HANSTORP, D., The electron affinity of phosphorus, *J. Phys. B* 40, 4097–4107, 2007.

BAE, Y.K., PETERSON, J.R., Effect of a virtual state near an s-wave threshold: absolute Li^- photodetachment cross section near the $\text{Li} (2^2\text{P})$ threshold, *Phys. Rev. A* 32, 1917–1920, 1985.

BATES, D.R., Negative ions: structure and spectra, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, 27, 1–80, 1991.

BATES, D.R., *Proc. R. Ir. Acad. A*, 51, 151, 1947.

BERRAH, N., BOZEK, J.D., WILLS, A. A., TURRI, G., ZHOU, H.-L., MANSON, S.T., AKERMAN, G., RUDE, B., GIBSON, N.D., WALTER, C.W., VOKY, L. HIBBERT, A., FERGUSON, S.M., *K*-shell photodetachment of Li^- : Experiment and theory, *Phys. Rev. Lett.* 87, 253002–253005, 2001.

BIÉMONT, E., FRÉMAT, Y., QUINET, P., Ionization potentials of atoms and ions from lithium to tin ($Z = 50$), *At. Data Nucl. Data Tables*, 71, 117–146, 1999.

BILODEAU, R.C., HAUGEN, H.K, Experimental studies of Os^- : Observation of a bound-bound electric dipole transition in an atomic negative ion, *Phys. Rev. Lett.*, 85, 534–537, 2000.

BILODEAU, R.C., HAUGEN, H.K., Photonic, electronic and atomic collisions, proceedings of XXII international conference, USA, Burgdworfer, J., Cohen, J.S., Datz, S., Vane, C.R. (Eds.), Rinton Press, 127, 2002.

BLONDEL, C., Recent experimental achievements with negative ions, *Phys. Scr. T*, 58, 31–42, 1995.

BOROVIK, A., ZATSARINNY, O., BARTSCHAT, K., Near-threshold electron-impact excitation of the $(2p^5 3s^2)^2P_{3/2,1/2}$ autoionizing states in sodium, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 41, 035206–0352010, 2008.

BOROVIK, A., ZATSARINNY, O., BARTSCHAT, K., Resonance effects in electron and photon impact excitation of the p^6 subvalence subshell in alkali atoms, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 42, 044010–044020, 2009.

BOROVIK, A.A., KRASILINEC, V.N., Ejected-electron excitation functions of autoionizing states in lithium atoms, *J. Phys. B* 32, 1941–1947, 1999.

BRANSCOMB, L.M., SMITH, S.J., Experimental cross section for photodetachment of electrons from H^- and D^- , *Phys. Rev.*, 98, 1028–1034, 1955.

BRYANT, H.C., HALKA, M., Coulomb Interactions in nuclear atomic few-body collisions, New York, Levin, F.S., Micha, D.A., (Eds.), 221, 1996.

BUCKMAN, S.J., CLARK, C.W., Atomic negative-ion resonances, *Rev. Mod. Phys.*, 66, 539–655, 1994.

CHANDRASEKHAR, S., On the continuous absorption coefficient of the negative hydrogen ion, *Astrophys. J.*, 102, 223–231, 1945.

CHEN, G.-X., ONG, P.P., TING, L., DFT approach for electron affinity of negative atomic ions, *Chem. Phys. Lett.*, 290, 211–215, 1998.

COVINGTON, A.M., AGUILAR, A., DAVIS, V.T., ALVAREZ, I., BRYANT, H.C., CISNEROS, C., HALKA, M., HANSTORP, D., HINOJOSA, G., SCHLACHTER, A.S., THOMPSON, J.S., PEGG, D.J., Correlated processes in inner-shell photodetachment of the Na^- ion, *J. Phys. B* 34, L735–L740, 2001.

COWAN, R.D., FISCHER, C.F., HANSEN, J.E., KEMPTER, V., Excited states of the negative nitrogen ion: energies and lifetimes, *J. Phys. B* 30, 1457–1466, 1997.

DAVIDSON, E.R., HAGSTROM, S.A., CHAKRAVORTY, S.J., UMAR, V.M., FISCHER, C.F., Ground-state correlation energies for two- to ten-electron atomic ions, *Phys. Rev. A*, 44, 7071–7083, 1991.

DE GROOTE, J.J., MASILI, M., Electron affinity of the sodium atom within the coupled-channel hyperspherical approach, *J. Chem. Phys.*, 120, 2767–2773, 2004.

DE OLIVERIA, G., MARTIN, J.M.L., DE PROFT, F., GEERLINGS, P., Electron affinities of the first and second-row atoms: benchmark ab initio and destiny-functional calculations, *Phys. Rev. A*, 60, 1034–1045, 1999.

EDLÉN, B., isoelectronic extrapolation of electron affinities, *J. Chem. Phys.*, 33, 98–101, 1960.

ESAULOV, V.A., Electron detachment from atomic negative ions, *Ann. Phys. (Paris)* 11, 493–592, 1986.

FELDMAN, D., Infra red photodetachment threshold measurements: Li^- and P^- , *Z. Phys. A*, 277, 19–25, 1976.

FIFIELD, L.K., Accelerator mass spectrometry and its applications, *Rep. Prog. Phys.*, 62, 1223–1274, 1999.

FISCHER, C.F., LAGOWSKI, J.B., VOSKO, S.H., Ground states of Ca^- and Sc^- from two theoretical points of view, *Phys. Rev. Lett.*, 59, 2263–2266, 1987.

FISCHER, C.F., The MCHF atomic-structure package, *Comput. Phys. Commun.*, 128, 635–636, 2000.

FUNG, A.C., MATESE, J., Autoionization States of Li^- and Na^- , *Phys. Rev. A*, 5, 22–26, 1972.

GLOCKLER, G., Estimated electron affinities of the light elements, *Phys. Rev.*, 46, 111–115, 1934.

GRUN, N., *Z. Naturf.* 27a, 843, 1972.

GUTSEV, G.L., JENA, P., BARTLETT, R.J., Electric quadrupole moments and electron affinities of atoms from H to Cl: A coupled-cluster study, *Chem. Phys. Lett.*, 291, 547–552, 1998.

HAEFFLER, G., HANSTORP, D., KIYAN, I., KLINKMÜLLER, A.E., LJUNGBLAD, U., PEGG, D.J., Electron affinity of Li: A state-selective measurement, *Phys. Rev. A*, 53, 4127–4131, 1996.

HAEFFLER, G., KIYAN, I.YU., BERZINSH, U., HANSTORP, D., BRANDEFELT, N., LINDROTH, E., PEGG, D.J., Strongly correlated states in the Li^- ion, *Phys. Rev. A*, 63, 053409–053412, 2001.

HAEFFLER, G., KIYAN, I.YU., HANSTORP, D., DAVIES, B.J., PEGG, D.J., Observation of resonance structure in the Na^- photodetachment cross section, *Phys. Rev. A*, 59, 3655–3659, 1999.

HOTOP, H., LINEBERGER, W.C., Binding energies in atomic negative ions, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 4, 539–576, 1975.

HOTOP, H., LINEBERGER, W.C., Binding energies in atomic negative ions: II, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 14, 731–750, 1985.

HOTOP, H., PATTERSON, T.A., LINEBERGER, W.C., High-resolution photodetachment study of Se^- ions, *Phys. Rev. A*, 8, 762–774, 1973.

IVANOV, V.K., Correlations in clusters and related systems new perspectives on the many-body problem, Connerade, J.-P. (Ed.), World Scientific, Singapore, 73, 1996.

IVANOV, V.K., Many-body effects in negative ion photodetachment, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 32, R67–R101, 1999.

IVANOV, V.K., Proceedings of 10th vuv conference, France, Wuilleumier, F.J., Petroe, Y., Nenner, I. (Eds.), World Scientific, Singapore, 178, 1993.

JIAO, L., ZHOU, Y., WANG, Y., Negative-ion resonances in total cross sections for slow electron-sodium collisions, *Phys. Rev. A*, 81, 042713–042717, 2010.

JOSE, J., PRADHAN, G.B., RADOJEVIĆ, V., MANSON, S.T., DESHMUKH, P.C., Valence photodetachment of Li^- and Na^- using relativistic many-body techniques, *Phys. Rev. A*, 83, 053419, 2011.

KJELDSSEN, H., ANDERSEN, P., FOLKMANN, F., KRISTENSEN, B., ANDERSEN, T., Inner-shell photodetachment of Li^- , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 34, L353–L357, 2001.

KLOPPER, W., BACHORZ, R.A., TEW, D.P., HÄTTIG, C., Sub-meV accuracy in first-principles computations of the ionization potentials and electron affinities of the atoms H to Ne, *Phys. Rev. A*, 81, 022503–022508, 2010.

KOGA, T., AOKI, H., GARCIA DE LA VEGA, J.M., TATEWAKI, H., Atomic ionization potentials and electron affinities with relativistic and mass corrections, *Theor. Chem. Accounts*, 96, 248–255, 1997.

- KOMASA, J., RYCHLEWSKI, J., JANKOWSKI, K., Benchmark energy calculations on Be-like atoms, *Phys. Rev. A*, 65, 042507–0425011, 2002.
- LEE, D.H., BRANDON, W.D., HANSTORP, D., PEGG, D.J., Resonance states in Li^- and B^- , *Phys. Rev. A*, 53, R633–R636, 1996.
- LIAW, S.-S., Auger width and branching ratios for beryllium-like $2s^2 2p^2 \ ^3\text{P}$ and $2s 2p^3 \ ^5\text{S}$ resonances, *Phys. Rev. A*, 67, 062707–062711, 2003.
- LINDGREN, I., Calculation of electron binding energies and affinities, *Phys. Scr.*, T120, 15–18, 2005.
- LINDROTH, E., SANZ-VICARIO, J.L., Photodetachment of few-electron negative ions, *Radiat. Phys. Chem.*, 70, 387–405, 2004.
- LJUNGBLAD, U., HANSTORP, D., BERZINSH, U., PEGG, D.J., Observation of doubly excited states in Li^- , *Phys. Rev. Lett.*, 77, 3751–3754, 1996.
- LONDOV, A., ELIAV, E., ISHIKAWA, Y., KALDOR U., Benchmark calculations of electron affinities of the alkali atoms sodium to eka-francium (element 119), *J. Chem. Phys.* 115, 2389–2392, 2001.
- MAGNIER, S., AUBERT-FRÉCON, M., LE SECH, C., Model potential calculations for various electronic excited states of Li^- and Na^- , *J. Phys. Chem. A*, 105, 11069–11072, 2001.
- MASSEY, H.S.W., BATES, D.R., The continuous absorption of light by negative hydrogen ions, *Astrophys. J.* 91, 202–214, 1940.
- MASSEY, H.S.W., *Negative Ions*, 3rd Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 1976.
- MASSEY, H.S.W., *Negative ions*, *Adv. At. Mol. Phys.* 15, 1–36, 1979.
- MASSEY, H.S.W., *Negative ions*, Cambridge University Press, Cambridge, 1938, 2nd Edition, 1950.
- NICOLAIDES, C.A., ASPROMALLIS, G., BECK, D.R., Bound excited states of atomic negative ions, *J. Mol. Struct. (Theochem.)*, 199, 283–302, 1989.
- PEDERSEN, U.V., HYDE, M., MHLER, S.P., ANDERSEN, T., Lifetime measurement of He^- utilizing an electrostatic ion storage ring, *Phys. Rev. A*, 64, 012503–0120508, 2001.
- PEDERSEN, U.V., SVENDSEN, A., BLÆSILD, P., ANDERSEN, T., Lifetime measurement of the metastable Be^- ion using and electrostatic ion storage ring, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 35, 2811–2816, 2002.

PEGG, D.J., THOMPSON, J.S., COMPTON, R.N., WALTON, G., Evidence for a stable negative ion of calcium, *Phys. Rev. Lett.*, 59, 2267–2270, 1987.

PEGG, D.J., Structure and Dynamics of negative ions, *Rep. Prog. Phys.*, 67, 857–905, 2004.

PELÁEZ, R.J., BLONDEL, C., VANDEVRAÏE, M., DRAG, C., DELSART, C., Photodetachment microscopy to an excited spectral term and the electron affinity of phosphorus, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 44, 195009–195016, 2011.

PEKERIS, C.E., Ground state of two-electron atoms, *Phys. Rev.*, 112, 1649–1658, 1958.

PETRUNIN, V.V., ANDERSEN, H.H., BALLING, P., ANDERSEN, T., Structural properties of the negative calcium ion: binding energies and fine-structure splitting, *Phys. Rev. Lett.*, 76, 744–747, 1996.

PETRUNIN, V.V., JACOBSEN, M.H., MADSEN, L.B., ASEYEV, S.A., ANDERSEN, T., Photodetachment of He^- in the vicinity of the two-electron escape threshold, *Phys. Rev. Lett.*, 90, 013002–013005, 2003.

PETRUNIN, V.V., VOLDSTAD, J.D., BALLING, P., KRISTENSEN, P., ANDERSEN, T., HAUGEN, H.K., Resonant ionization spectroscopy of Ba^- : metastable and stable ions, *Phys. Rev. Lett.*, 75, 1911–1914, 1995.

PIANGOS, N.A., NICOLAIDES, C.A., Very highly excited bound states of atomic negative ions having all their electrons with unpaired spins, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 31, L147–L154, 1998.

RYZHIKH, G., MITROY, J., VARGA K., The stability of the ground state for positronic sodium, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 31, L265–L271, 1998.

SANDSTRÖM, J., HAEFFLER, G., KIYAN, I., BERZINSH, U., HANSTORP, D., PEGG, D.J., HUNNELL, J.C., WARD, S.J., Effect of polarization on photodetachment thresholds, *Phys. Rev. A*, 70, 052707–052717, 2004.

SLATER, J., LINEBERGER, W.C., Relaxation calculation of the electrostatic properties of compensated Penning traps with hyperbolic electrodes, *Phys. Rev. A*, 15, 2277–2290, 1977.

SCHULZ, G.J., Resonances in electron impact on atoms, *Rev. Mod. Phys.*, 45, 378–422, 1973.

SMIRNOV, B.M., Negative ions, New York, Wiley, 1982.

STARACE, A.F., Photonic, electronic and atomic collisions, proceedings of XX international conference, Austria, Aumayr, F., Winter, H. (eds.), World Scientific, 107, 1998.

SULLIVAN, J.P., BURROW, P.D., NEWMAN, D.S., BARTSCHAT, K., AMICHEJDA, J., PANAJOTOVIC, R., MOGHBELALHOSSEIN, M., MCEACHRAN, R.P., BUCKMAN, S.J., An experimental and theoretical study of transient negative ions in Mg, Zn, Cd and Hg, *New J. Phys.* 5, 159.1-159.26, 2003.

THALER, R.M., A calculation of the electron affinity of sodium, *Phys. Rev.*, 83, 131-133, 1951.

THOMSON, J.J., Bakerian lecture: rays of positive electricity, *Proc. R. Soc. A*, 89, 1-20, 1913.

THOMSON, J.J., On rays of positive electricity, *Phil. Mag.* 13, 561-575, 1907.

VINCI, N., GLASS, D.H., TAYLOR, K.T., BURKE, P.G., Single and multiphoton detachment of Na⁻, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 33, 4799-4813, 2000.

WANG, J., SMITH, Jr.V.H., 1/Z Expansions for isoelectronic systems from He through Ar, *Phys. Rev. A* 52, 1060-1066, 1995.

WANG, Z.B., GOU, B.C., CHEN, F., Energy, fine structure, and hyperfine structure of the core-excited states $1s2s2pnp\ ^5P$ (N=2-5) and $1s2p^2mp\ ^5S$ (M=2-5) for Li⁻ Ion, *Eur. Phys. J. D*, 37, 345-349, 2006.

WEISS, A., Theoretical electron affinities for some of the alkali and alkaline-earth elements, *Phys. Rev.* 166, 70-74, 1968.

WIGNER, E.P., On the behavior of cross sections near thresholds, *Phys. Rev.*, 73, 1002-1009, 1948.

WIJESUNDERA, W.P., LITHERLAND, A.E., A theoretical study of some negative ions of interest to accelerator mass spectrometry, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, 123, 527-531, 1997.

WIJESUNDERA, W.P., PARPIA, F.A., Negative ions of carbon, nitrogen, and phosphorus, *Phys. Rev. A*, 57, 3462-3468, 1998.

WILDT, R., Electron affinity in astrophysics, *Astrophys. J.*, 89, 295-301, 1939.

WOON, D.E., DUNNING, Jr.T.H., Calculation of the electron affinities of the second row atoms: Al-Cl, *J. Chem. Phys.*, 99, 3730-3737, 1993.

www.nist.gov/phylab/data/asd.cfm, Eriřim Tarihi: Mayıs 2012.

ZATSARINNY, O., R-Matrix calculations of core-excited negative-ion states in Li, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 32, L565-L571, 1999.

ZHOU, H.-L., MANSON, S.T., VOKY, L., FEAUTRIER, N., HIBBERT, A., Dramatic structure in the photodetachment of inner shells of negative ions: Li⁻, *Phys. Rev. Lett.*, 87, 023001-023004, 2001.

EKLER

Ek A.Li, N, Na ve P'ye ait Ek Tablolar

Li, N, Na ve P için çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) hesaplamalarında alınan konfigürasyonlar bu kısımda sunulmuştur.

Tablo A.1. Li ve Li'ye ait hesaplamalar için alınan konfigürasyon setleri

Konfigürasyonlar			
Li			
A	B	C	D
1s(2)2s(1)	1s(2)2s(1)	1s(2)2s(1)	1s(2)2s(1)
1s(1)2s(1)3s(1)	1s(1)2s(2)	1s(1)2s(2)	1s(2)3s(1)
1s(1)2s(1)3d(1)	1s(1)2s(1)3s(1)	1s(1)2s(1)3s(1)	1s(2)4s(1)
1s(1)2s(1)4s(1)	1s(1)2s(1)3d(1)	1s(1)2s(1)3d(1)	1s(1)2s(2)
1s(1)2s(1)4d(1)	1s(1)2s(1)4s(1)	1s(2)3s(1)	1s(1)2s(1)3s(1)
1s(2)3s(1)	1s(1)2s(1)4d(1)	1s(1)2p(1)3p(1)	1s(1)2s(1)4s(1)
1s(2)4s(1)	1s(2)3s(1)	1s(1)2p(2)	1s(1)2p(2)
1s(1)2p(1)3p(1)	1s(2)4s(1)	1s(1)3s(2)	1s(1)2p(1)3p(1)
1s(1)2p(1)4p(1)	1s(1)2p(1)3p(1)	1s(1)3p(2)	1s(1)2p(1)4p(1)
1s(1)3s(1)4s(1)	1s(1)2p(1)4p(1)	1s(1)3d(2)	1s(1)3s(2)
1s(1)3p(1)4p(1)	1s(1)3s(1)4s(1)	2s(2)3s(1)	1s(1)3s(1)4s(1)
1s(1)3d(1)4d(1)	1s(1)3p(1)4p(1)	2s(1)2p(1)3p(1)	1s(1)3p(2)
1s(1)2p(2)	1s(1)3d(1)4d(1)	2s(1)2p(2)	1s(1)3p(1)4p(1)
1s(1)3s(2)	1s(1)2p(2)	2s(1)3s(2)	1s(1)3d(2)
1s(1)3p(2)	1s(1)3s(2)	2s(1)3p(2)	1s(1)3d(1)4d(1)
1s(1)3d(2)	1s(1)3p(2)	2s(1)3d(2)	1s(1)4s(2)
1s(1)4s(2)	1s(1)3d(2)		1s(1)4p(2)
1s(1)4p(2)	1s(1)4s(2)		1s(1)4d(2)
1s(1)4d(2)	1s(1)4p(2)		1s(1)4f(2)
1s(1)4f(2)	1s(1)4d(2)		2s(2)3s(1)
2s(2)3s(1)	1s(1)4f(2)		2s(2)4s(1)
2s(2)4s(1)	2s(2)3s(1)		2s(1)2p(2)
2s(1)2p(1)3p(1)	2s(2)4s(1)		2s(1)2p(1)3p(1)
2s(1)2p(1)4p(1)	2s(1)2p(1)3p(1)		2s(1)2p(1)4p(1)
2s(1)3s(1)4s(1)	2s(1)2p(1)4p(1)		2s(1)3s(2)
2s(1)3p(1)4p(1)	2s(1)3s(1)4s(1)		2s(1)3s(1)4s(1)
2s(1)3d(1)4d(1)	2s(1)3p(1)4p(1)		2s(1)3s(1)4s(1)
2s(1)2p(2)	2s(1)3d(1)4d(1)		2s(1)3p(2)
2s(1)3s(2)	2s(1)2p(2)		2s(1)3p(1)4p(1)
2s(1)3p(2)	2s(1)3s(2)		2s(1)3d(2)
2s(1)3d(2)	2s(1)3p(2)		2s(1)3d(1)4d(1)
2s(1)4s(2)	2s(1)3d(2)		2s(1)4s(2)
2s(1)4p(2)	2s(1)4s(2)		2s(1)4p(2)
2s(1)4d(2)	2s(1)4p(2)		2s(1)4d(2)

2s(1)4f(2)	2s(1)4d(2) 2s(1)4f(2)		2s(1)4f(2) 2p(2)3s(1) 2p(2)3d(1) 2p(2)4s(1) 2p(2)4d(1) 2p(1)3s(1)3p(1) 2p(1)3s(1)4p(1) 2p(1)3p(1)3d(1) 2p(1)3p(1)4s(1) 2p(1)3p(1)4d(1) 2p(1)3d(1)4f(1) 2p(1)4s(1)4p(1) 2p(1)4p(1)4d(1) 2p(1)4d(1)4f(1) 3s(2)4s(1) 3s(1)3p(2) 3s(1)3p(1)4p(1) 3s(1)3d(2) 3s(1)3d(1)4d(1) 3s(1)4s(2) 3s(1)4p(2) 3s(1)4f(2) 3p(2)4s(1) 3p(2)4d(1) 3p(1)3d(1)4p(1) 3p(1)3d(1)4f(1) 3p(1)4s(1)4p(1) 3p(1)4p(1)4d(1) 3p(1)4d(1)4f(1) 3d(2)4s(1) 3d(2)4d(1) 3d(1)4s(1)4d(1) 3d(1)4p(2) 3d(1)4p(1)4f(1) 3d(1)4d(2) 3d(1)4f(2) 4s(1)4p(2) 4s(1)4f(2) 4p(2)4d(1) 4p(1)4d(1)4f(1) 4d(1)4f(2)
Li			
1	2	3	4
1s(2)2s(2) 1s(2)2s(1)3s(1) 1s(2)2s(1)4s(1) 1s(2)2p(2) 1s(2)2p(1)3p(1) 1s(2)2p(1)4p(1) 1s(2)3s(2) 1s(2)3s(1)4s(1) 1s(2)3p(2) 1s(2)3p(1)4p(1) 1s(2)3d(2) 1s(2)4s(2) 1s(2)4p(2)	1s(2)2s(2) 1s(2)2s(1)3s(1) 1s(2)2p(2) 1s(2)2p(1)3p(1) 1s(2)3s(2) 1s(2)3p(2) 1s(2)3d(2) 1s(1)2s(2)3s(1) 1s(1)2s(1)2p(2) 1s(1)2s(1)2p(1)3p(1) 1s(1)2s(1)3s(2) 1s(1)2s(1)3s(1)3d(1) 1s(1)2s(1)3p(2)	2s(2) 2p(2) 2s(1)3s(1) 2s(1)4s(1) 2s(1)5s(1) 2p(1)3p(1) 2p(1)4p(1) 2p(1)5p(1) 2s(1)3d(1) 2s(1)4d(1) 3s(2) 3p(2) 4p(2)	1s(2)2s(2) 1s(2)2p(2) 1s(1)2s(2)3s(1) 1s(1)2s(2)3d(1) 1s(2)2s(1)3s(1) 1s(2)2s(1)3d(1) 1s(1)2s(1)3s(2) 1s(1)2s(1)3p(2) 1s(1)2s(1)3d(2) 2s(2)3s(2) 2s(2)3d(2) 1s(2)3s(2) 1s(2)3d(2)

1s(1)2s(2)3s(1)	1s(1)2s(1)3d(2)	5p(2)	1s(1)2p(2)3s(1)
1s(1)2s(2)4s(1)	1s(1)2p(2)3s(1)	3d(2)	1s(1)2p(2)3d(1)
1s(1)2s(1)2p(2)	1s(1)2p(2)3d(1)	4d(2)	1s(1)2p(1)3s(1)3p(1)
1s(1)2s(1)2p(1)3p(1)	1s(1)2p(1)3s(1)3p(1)		1s(1)2p(1)3p(1)3d(1)
1s(1)2s(1)2p(1)4p(1)	1s(1)2p(1)3p(1)3d(1)		2p(2)3s(2)
1s(1)2s(1)3s(2)	1s(1)3s(1)3p(2)		2p(2)3p(2)
1s(1)2s(1)3s(1)3d(1)	1s(1)3s(1)3d(2)		2p(2)3d(2)
1s(1)2s(1)3s(1)4s(1)	1s(1)3p(2)3d(1)		
1s(1)2s(1)3p(2)	1s(1)3d(3)		
1s(1)2s(1)3p(1)4p(1)	2s(2)2p(2)		
1s(1)2s(1)3d(2)	2s(2)2p(1)3p(1)		
1s(1)2s(1)4s(2)	2s(2)3s(2)		
1s(1)2s(1)4p(2)	2s(2)3p(2)		
1s(1)2p(2)3s(1)	2s(2)3d(2)		
1s(1)2p(2)3d(1)	2s(1)2p(2)3s(1)		
1s(1)2p(2)4s(1)	2s(1)2p(2)3d(1)		
1s(1)2p(1)3s(1)3p(1)	2s(1)2p(1)3s(1)3p(1)		
1s(1)2p(1)3s(1)4p(1)	2s(1)2p(1)3p(1)3d(1)		
1s(1)2p(1)3p(1)3d(1)	2s(1)3s(1)3p(2)		
1s(1)2p(1)3p(1)4s(1)	2s(1)3s(1)3d(2)		
1s(1)2p(1)3d(1)4p(1)	2s(1)3p(2)3d(1)		
1s(1)3s(2)4s(1)	2s(1)3d(3)		
1s(1)3s(1)3p(2)	2p(4)		
1s(1)3s(1)3p(1)4p(1)	2p(3)3p(1)		
1s(1)3s(1)3d(2)	2p(2)3s(2)		
1s(1)3s(1)4s(2)	2p(2)3s(1)3d(1)		
1s(1)3s(1)4p(2)	2p(2)3p(2)		
1s(1)3p(2)3d(1)	2p(2)3d(2)		
1s(1)3p(2)4s(1)	2p(1)3s(2)3p(1)		
1s(1)3p(1)3d(1)4p(1)	2p(1)3s(1)3p(1)3d(1)		
1s(1)3p(1)4s(1)4p(1)	2p(1)3p(3)		
1s(1)3d(3)	2p(1)3p(1)3d(2)		
1s(1)3d(2)4s(1)	3s(2)3p(2)		
1s(1)3d(1)4p(2)	3s(2)3d(2)		
1s(1)4s(1)4p(2)	3s(1)3p(2)3d(1)		
2s(2)2p(2)	3s(1)3d(3)		
2s(2)2p(1)3p(1)	3p(4)		
2s(2)2p(1)4p(1)	3p(2)3d(2)		
2s(2)3s(2)	3d(4)		
2s(2)3p(2)			
2s(2)3p(1)4p(1)			
2s(2)3d(2)			
2s(2)4s(2)			
2s(2)4p(2)			
2s(1)2p(2)3s(1)			
2s(1)2p(2)3d(1)			
2s(1)2p(2)4s(1)			
2s(1)2p(1)3s(1)3p(1)			
2s(1)2p(1)3s(1)4p(1)			
2s(1)2p(1)3p(1)3d(1)			
2s(1)2p(1)3p(1)4s(1)			
2s(1)2p(1)3d(1)4p(1)			
2s(1)3s(2)4s(1)			
2s(1)3s(1)3p(2)			
2s(1)3s(1)3p(1)4p(1)			
2s(1)3s(1)3d(2)			
2s(1)3s(1)3d(1)4s(1)			

2s(1)3s(1)4s(2) 2s(1)3s(1)4p(2) 2s(1)3p(2)3d(1) 2s(1)3p(2)4s(1) 2s(1)3p(1)3d(1)4p(1) 2s(1)3p(1)4s(1)4p(1) 2s(1)3d(3) 2s(1)3d(2)4s(1) 2s(1)3d(1)4p(2) 2p(4) 2p(3)3p(1) 2p(3)4p(1) 2p(2)3s(2) 2p(2)3s(1)3d(1) 2p(2)3s(1)4s(1) 2p(2)3p(2) 2p(2)3p(1)4p(1) 2p(2)3d(2) 2p(2)3d(1)4s(1) 2p(2)4s(2) 2p(2)4p(2) 2p(1)3s(2)3p(1) 2p(1)3s(2)4p(1) 2p(1)3s(1)3p(1)3d(1) 2p(1)3s(1)3p(1)4s(1) 2p(1)3s(1)3d(1)4p(1) 2p(1)3s(1)4s(1)4p(1) 2p(1)3p(3) 2p(1)3p(2)4p(1) 2p(1)3p(1)3d(2) 2p(1)3p(1)3d(1)4s(1) 2p(1)3p(1)4s(2) 2p(1)3p(1)4p(2) 2p(1)3d(2)4p(1) 2p(1)3d(1)4s(1)4p(1) 2p(1)4s(2)4p(1) 2p(1)4p(3) 3s(2)3p(2) 3s(2)3p(1)4p(1) 3s(2)3d(2) 3s(2)4s(2) 3s(2)4p(2) 3s(1)3p(2)3d(1) 3s(1)3p(2)4s(1) 3s(1)3p(1)3d(1)4p(1) 3s(1)3p(1)4s(1)4p(1) 3s(1)3d(3) 3s(1)3d(2)4s(1) 3s(1)3d(1)4p(2) 3p(4) 3p(3)4p(1) 3p(2)3d(2) 3p(2)3d(1)4s(1) 3p(2)4s(2) 3p(2)4p(2) 3p(1)3d(2)4p(1) 3p(1)3d(1)4s(1)4p(1)			
---	--	--	--

3p(1)4s(2)4p(1) 3p(1)4p(3) 3d(4) 3d(3)4s(1) 3d(2)4p(2) 3d(1)4s(1)4p(2) 4s(2)4p(2) 4p(4)			
--	--	--	--

TabloA.2.NveN⁻yeaithesaplamalarıçınalnankonfigürasyonsetleri

Konfigürasyonlar				
N				
A	B	C	D	E
1s(2) 2s(2)2p(3) 2s(1)2p(3)3s(1) 2s(1)2p(3)3d(1) 2s(2)2p(2)3p(1) 2s(1)2p(2)3s(1)3p(1) 2s(1)2p(2)3p(1)3d(1) 2p(4)3p(1) 2s(0)2p(5) 2p(3)3s(2) 2p(3)3p(2) 2p(3)3d(2) 2s(2)2p(1)3s(1)3d(1) 2s(2)2p(1)3s(2) 2s(2)2p(1)3p(2) 2s(2)2p(1)3d(2)	1s(2) 2s(2)2p(3) 2s(1)2p(3)3s(1) 2s(1)2p(3)3d(1) 2s(1)2p(3)4s(1) 2s(1)2p(3)4d(1) 2s(2)2p(2)3p(1) 2s(2)2p(2)4p(1) 2s(2)2p(2)4f(1)	1s(2) 2s(2)2p(3) 2s(1)2p(3)3s(1) 2s(1)2p(3)3d(1) 2s(1)2p(3)4s(1) 2s(1)2p(3)4d(1) 2s(1)2p(3)5s(1) 2s(1)2p(3)5d(1) 2s(2)2p(2)3p(1) 2s(2)2p(2)4p(1) 2s(2)2p(2)4f(1) 2s(2)2p(2)5p(1) 2s(2)2p(2)5f(1)	1s(2) 2s(2)2p(3) 2s(1)2p(3)3s(1) 2s(1)2p(3)3d(1) 2s(2)2p(2)3p(1) 2s(1)2p(2)3s(1)3p(1) 2s(1)2p(2)3p(1)3d(1) 2p(4)3p(1) 2p(3)3s(2) 2p(3)3p(2) 2p(3)3d(2) 2s(2)2p(1)3p(2) 2s(2)2p(1)3d(2)	1s(2) 2s(2)2p(3) 2s(1)2p(3)3s(1) 2s(1)2p(3)3d(1) 2s(2)2p(2)3p(1) 2s(1)2p(2)3s(1)3p(1) 2s(1)2p(2)3p(1)3d(1) 2p(4)3p(1) 2p(3)3s(2) 2p(3)3p(2) 2p(3)3d(2) 2s(2)2p(1)3p(2) 2s(2)2p(1)3d(2)
N⁻				
1	2	3	4	5
1s(2) 2s(2)2p(4) 2s(2)2p(3)3p(1) 2s(2)2p(3)4p(1) 2s(2)2p(3)4f(1) 2s(2)2p(3)5p(1) 2s(2)2p(3)5f(1)	1s(1)2s(1) 2p(4) 2p(3)3p(1) 2p(3)3p(1) 2p(3)3p(1) 2p(3)4p(1) 2p(3)4f(1) 2p(2)3p(2) 2p(2)4p(2) 2p(3)5p(1)	1s(2) 2s(2)2p(4) 2s(2)2p(3)3p(1) 2s(2)2p(3)4p(1) 2s(2)2p(3)4f(1) 2s(2)2p(3)5p(1) 2s(2)2p(3)5f(1) 2s(2)2p(2)3p(2) 2s(2)2p(2)4p(2) 2s(2)2p(2)5p(2)	1s(2) 2s(2)2p(4) 2s(2)2p(3)3p(1) 2s(2)2p(3)4p(1) 2s(2)2p(3)5p(1) 2s(2)2p(3)4f(1) 2s(2)2p(3)5f(1) 2s(2)2p(2)3p(2) 2s(2)2p(2)4p(2) 2p(6)	1s(2) 2s(2)2p(4) 2s(1)2p(4)3s(1) 2s(1)2p(4)3d(1) 2s(1)2p(4)4s(1) 2s(1)2p(4)4d(1) 2s(2)2p(3)3p(1) 2s(2)2p(3)4p(1) 2s(2)2p(3)4f(1) 2s(1)2p(3)3s(1)3p(1) 2s(1)2p(3)3s(1)4p(1) 2s(1)2p(3)3p(1)3d(1) 2s(1)2p(3)3p(1)4s(1) 2s(1)2p(3)3p(1)4d(1) 2s(1)2p(3)3d(1)4p(1) 2s(1)2p(3)3d(1)4f(1) 2s(1)2p(3)4s(1)4p(1) 2s(1)2p(3)4p(1)4d(1) 2s(1)2p(3)4d(1)4f(1) 2p(5)3p(1)

6				<p>2p(5)4p(1) 2p(4)3s(1)4s(1) 2p(4)3p(1)4p(1) 2p(4)3d(1)4d(1) 2p(4)3s(2) 2p(4)3p(2) 2p(4)3d(2) 2p(4)4s(2) 2p(4)4p(2) 2p(4)4d(2) 2p(4)4f(2) 2s(2)2p(2)3s(1)3d(1) 2s(2)2p(2)3s(1)4s(1) 2s(2)2p(2)3s(1)4d(1) 2s(2)2p(2)3p(1)4p(1) 2s(2)2p(2)3p(1)4f(1) 2s(2)2p(2)3d(1)4s(1) 2s(2)2p(2)3d(1)4d(1) 2s(2)2p(2)4p(1)4f(1) 2s(2)2p(2)3s(2) 2s(2)2p(2)3p(2) 2s(2)2p(2)3d(2) 2s(2)2p(2)4s(2) 2s(2)2p(2)4p(2) 2s(2)2p(2)4d(2) 2s(2)2p(2)4f(2)</p>
<p>1s(2)</p> <p>2s(2)2p(4) 2s(1)2p(4)3s(1) 2s(1)2p(4)3d(1) 2s(1)2p(4)4s(1) 2s(1)2p(4)4d(1) 2s(2)2p(3)3p(1) 2s(2)2p(3)4p(1) 2s(2)2p(3)4f(1) 2s(1)2p(3)3s(1)3p(1) 2s(1)2p(3)3s(1)4p(1) 2s(1)2p(3)3p(1)3d(1) 2s(1)2p(3)3p(1)4s(1) 2s(1)2p(3)3p(1)4d(1) 2s(1)2p(3)3d(1)4p(1) 2s(1)2p(3)3d(1)4f(1) 2s(1)2p(3)4s(1)4p(1) 2s(1)2p(3)4p(1)4d(1) 2s(1)2p(3)4d(1)4f(1) 2p(5)3p(1) 2p(5)4p(1) 2p(4)3s(1)4s(1) 2p(4)3p(1)4p(1) 2p(4)3d(1)4d(1) 2s(0)2p(6) 2p(4)3s(2) 2p(4)3p(2) 2p(4)3d(2) 2p(4)4s(2) 2p(4)4p(2) 2p(4)4d(2) 2p(4)4f(2) 2s(2)2p(2)3s(1)3d(1) 2s(2)2p(2)3s(1)4s(1) 2s(2)2p(2)3s(1)4d(1) 2s(2)2p(2)3p(1)4p(1) 2s(2)2p(2)3p(1)4f(1) 2s(2)2p(2)3d(1)4s(1) 2s(2)2p(2)4s(1)4d(1) 2s(2)2p(2)4p(1)4f(1) 2s(2)2p(2)3s(2) 2s(2)2p(2)3p(2) 2s(2)2p(2)3d(2) 2s(2)2p(2)4s(2) 2s(2)2p(2)4d(2) 2s(2)2p(2)4f(2)</p>				

TabloA.3.NaveNa⁺yeaithesaplamalarıçınalnankonfigürasyonsetleri

Konfigürasyonlar			
Na			
A	B	C	D
1s(2)	1s(2)	1s(1)2s(1)	1s(1)2s(1)
2s(2)2p(6)3s(1)	2s(2)2p(6)3s(1)	2p(6)3s(1)	2p(6)3s(1)
2s(2)2p(5)3s(1)3p(1)	2s(1)2p(6)3s(1)4s(1)	2p(6)4s(1)	2p(6)4s(1)
2s(1)2p(6)3p(2)	2s(2)2p(5)3s(1)3p(1)	2p(6)5s(1)	2p(6)5s(1)
2s(1)2p(6)3d(2)	2s(2)2p(5)3s(1)4p(1)	2p(6)6s(1)	2p(6)6s(1)
2s(2)2p(5)3p(1)3d(1)	2s(2)2p(6)4s(1)	2p(6)7s(1)	2p(5)3s(1)3p(1)
2p(6)3s(1)3p(2)	2s(1)2p(5)3s(2)3p(1)	2p(6)8s(1)	2p(5)3s(1)4p(1)
2p(6)3s(1)3d(2)	2s(1)2p(5)3s(2)4p(1)	2p(6)9s(1)	2p(5)3s(1)5p(1)
2s(2)2p(4)3s(2)3d(1)	2s(1)2p(5)3s(1)3p(1)3d(1)	2p(5)3s(1)3p(1)	2p(5)3s(1)6p(1)
2s(2)2p(4)3s(1)3p(2)	2s(1)2p(5)3s(1)3p(1)4s(1)	2p(5)3s(1)4p(1)	2p(4)3s(2)4s(1)
2s(2)2p(4)3s(1)3d(2)	2s(1)2p(5)3s(1)3p(1)4d(1)	2p(5)3s(1)5p(1)	2p(4)3s(2)3d(1)
	2s(1)2p(5)3s(1)3d(1)4p(1)	2p(5)3s(1)6p(1)	
	2s(1)2p(5)3s(1)3d(1)4f(1)	2p(5)3s(1)7p(1)	
	2s(1)2p(5)3s(1)4s(1)4p(1)	2p(5)3s(1)8p(1)	
	2s(1)2p(5)3s(1)4p(1)4d(1)	2p(5)3s(1)9p(1)	
	2s(1)2p(5)3s(1)4d(1)4f(1)	2p(5)3p(1)3d(1)	
	2s(1)2p(6)3p(1)4p(1)	2p(5)3p(1)4d(1)	
	2s(1)2p(6)3d(1)4d(1)	2p(5)3p(1)5d(1)	
	2s(1)2p(6)3p(2)	2p(5)3p(1)6d(1)	
	2s(1)2p(6)3d(2)	2p(5)3p(1)7d(1)	
	2s(1)2p(6)4s(2)	2p(5)3p(1)8d(1)	
	2s(1)2p(6)4p(2)	2p(5)3p(1)9d(1)	
	2s(1)2p(6)4d(2)	2p(5)3d(1)4p(1)	
	2s(1)2p(6)4f(2)	2p(5)3d(1)4f(1)	
	2s(2)2p(5)3p(1)3d(1)		
	2s(2)2p(5)3p(1)4s(1)		
	2s(2)2p(5)3p(1)4d(1)		
	2s(2)2p(5)3d(1)4p(1)		
	2s(2)2p(5)3d(1)4f(1)		
	2s(2)2p(5)4s(1)4p(1)		
	2s(2)2p(5)4p(1)4d(1)		
	2s(2)2p(5)4d(1)4f(1)		
	2p(6)3s(2)4s(1)		
	2p(6)3s(1)3p(1)4p(1)		
	2p(6)3s(1)3d(1)4d(1)		
	2p(6)3s(1)3p(2)		
	2p(6)3s(1)3d(2)		
	2p(6)3s(1)4s(2)		
	2p(6)3s(1)4p(2)		
	2p(6)3s(1)4d(2)		
	2p(6)3s(1)4f(2)		
	2s(2)2p(4)3s(2)3d(1)		
	2s(2)2p(4)3s(2)4s(1)		
	2s(2)2p(4)3s(2)4d(1)		
	2s(2)2p(4)3s(1)3p(1)4p(1)		
	2s(2)2p(4)3s(1)3p(1)4f(1)		
	2s(2)2p(4)3s(1)3d(1)4s(1)		
	2s(2)2p(4)3s(1)3d(1)4d(1)		
	2s(2)2p(4)3s(1)4p(1)4f(1)		
	2s(2)2p(4)3s(1)3p(2)		
	2s(2)2p(4)3s(1)3d(2)		

	2s(2)2p(4)3s(1)4s(2) 2s(2)2p(4)3s(1)4p(2) 2s(2)2p(4)3s(1)4d(2) 2s(2)2p(4)3s(1)4f(2)		
Na⁻			
1	2	3	4
1s(2) 2s(2)2p(6)3s(2) 2s(2)2p(5)3s(2)3p(1) 2s(1)2p(5)3s(2)3p(1)3d(1) 2s(1)2p(6)3s(1)3p(2) 2s(1)2p(6)3s(1)3d(2) 2s(2)2p(5)3s(1)3p(1)3d(1) 2p(6)3s(2)3p(2) 2p(6)3s(2)3d(2) 2s(2)2p(4)3s(2)3p(2) 2s(2)2p(4)3s(2)3d(2) 2s(2)2p(6)3p(2) 2s(2)2p(6)3d(2)	1s(2) 2s(2)2p(6)3s(2) 2s(2)2p(5)3s(2)3p(1) 2s(1)2p(5)3s(2)3p(1)3d(1) 2s(1)2p(6)3s(1)3p(2) 2s(1)2p(6)3s(1)3d(2) 2s(2)2p(5)3s(1)3p(1)3d(1) 2p(6)3s(2)3p(2) 2p(6)3s(2)3d(2) 2s(2)2p(4)3s(2)3p(2) 2s(2)2p(4)3s(2)3d(2) 2s(2)2p(6)3p(2) 2s(2)2p(6)3d(2)	1s(2)2s(2)2p(6) 3s(2) 3s(1)4s(1)	1s(2)2s(2)2p(6) 3s(2) 3s(1)4s(1) 3s(1)3d(1)
5	6	7	
1s(2)2s(2)2p(6) 3s(2) 3s(1)4s(1) 3s(1)3d(1) 3s(1)5s(1)	1s(2)2s(2)2p(6) 3s(2) 3s(1)4s(1) 3s(1)3d(1) 3s(1)5s(1) 3s(1)4d(1) 3p(2)	1s(2)2s(2)2p(6) 3s(2) 3s(1)4s(1) 3s(1)3d(1) 3s(1)5s(1) 3s(1)4d(1) 3s(1)6s(1) 3s(1)5d(1) 3p(2)	

Tablo A.4. PveP⁻ yeaithesaplamalarıçınalnankonfigürasyonsetleri

Konfigürasyonlar			
P			
A	B	C	D
1s(2)2s(2)2p(6)	1s(2)2s(2)2p(6)	1s(2)2s(2)	1s(2)2s(2)2p(6)
3s(2)3p(3)	3s(2)3p(3)	2p(6)3s(2)3p(3)	3s(2)3p(3)
3s(2)3p(2)4p(1)	3s(1)3p(3)3d(1)	2p(5)3s(2)3p(4)	3s(2)3p(2)4p(1)
3s(2)3p(1)3d(2)	3s(1)3p(3)4s(1)	2p(6)3s(1)3p(3)3d(1)	3s(2)3p(2)5p(1)
3s(2)3p(1)4p(2)	3s(1)3p(3)4d(1)	2p(4)3s(2)3p(5)	3s(2)3p(2)6p(1)
3s(2)4p(3)	3s(2)3p(2)4p(1)	2p(4)3s(2)3p(3)3d(2)	3s(2)3p(1)4p(2)
3s(1)3p(3)3d(1)	3s(1)3p(2)3d(1)4p(1)	2p(4)3s(2)3p(3)3d(2)	3s(2)3p(1)5p(2)
3s(1)3p(3)4s(1)	3s(1)3p(2)4s(1)4p(1)	2p(6)3p(3)3d(2)	3s(2)3p(1)4s(2)
3s(1)3p(2)3d(1)4p(1)	3s(1)3p(2)4p(1)4d(1)	2p(6)3s(2)3p(1)3d(2)	3s(2)3p(1)5s(2)
3s(1)3p(2)4s(1)4p(1)	3p(4)4p(1)		3s(2)3p(1)6s(2)
3s(1)3p(1)3d(3)	3p(3)3d(1)4d(1)		3p(5)
3s(1)3p(1)3d(2)4s(1)	3p(3)3d(2)		3p(4)4p(1)
3s(1)3p(1)3d(1)4p(2)	3p(3)4s(2)		3p(4)5p(1)

3s(1)3p(1)4s(1)4p(2) 3s(1)3d(3)4p(1) 3s(1)3d(2)4s(1)4p(1) 3s(1)3d(1)4p(3) 3s(1)4s(1)4p(3) 3p(4)4p(1) 3p(3)3d(2) 3p(3)3d(1)4s(1) 3p(3)4s(2) 3p(3)4p(2) 3p(2)3d(2)4p(1) 3p(2)3d(1)4s(1)4p(1) 3p(2)4s(2)4p(1) 3p(2)4p(3) 3p(1)3d(4) 3p(1)3d(3)4s(1) 3p(1)3d(2)4p(2) 3p(1)3d(1)4s(1)4p(2) 3p(1)4s(2)4p(2) 3p(1)4p(4) 3d(3)4s(1)4p(1) 3d(2)4p(3) 3d(1)4s(1)4p(3) 4s(2)4p(3)	3p(3)4p(2) 3p(3)4d(2) 3s(2)3p(1)3d(1)4d(1) 3s(2)3p(1)3d(2) 3s(2)3p(1)4p(2) 3s(2)3p(1)4d(2)		3s(1)3p(3)3d(1) 3s(1)3p(3)4d(1) 3s(2)3p(2)4f(1) 3s(2)3p(2)5f(1) 3s(2)3p(2)6f(1) 3s(2)3p(1)3d(2) 3s(2)3p(1)4d(2) 3s(2)3p(1)5d(2)
E			
1s(2)2s(2)2p(6) 3s(2)3p(3) 3s(2)3p(2)4p(1) 3s(2)3p(2)5p(1) 3s(2)3p(2)6p(1) 3s(2)3p(2)4f(1) 3s(2)3p(2)5f(1) 3s(2)3p(2)6f(1) 3s(2)3p(1)4p(2) 3s(2)3p(1)5p(2) 3s(2)3p(1)6p(2) 3p(5) 3s(2)3p(1)4s(2) 3s(2)3p(1)5s(2) 3s(2)3p(1)6s(2) 3s(2)3p(1)4d(2) 3s(2)3p(1)5d(2) 3s(2)3p(1)6d(2) 3s(1)3p(3)4s(1) 3s(1)3p(3)5s(1) 3s(1)3p(3)6s(1) 3s(1)3p(3)4d(1) 3s(1)3p(3)5d(1) 3s(1)3p(3)6d(1)			
P'			
1	2	3	4
1s(2)2s(2)2p(6)	1s(2)2s(2)2p(6)	1s(2)2s(2)	1s(2)2s(2)
3s(2)3p(3)	3s(2)3p(3)	2p(6)3s(2)3p(4)	2p(6)3s(2)3p(4)

3s(2)3p(2)4p(1)	3s(1)3p(4)3d(1)	2p(5)3s(2)3p(5)	2p(5)3s(2)3p(5)
3s(2)3p(1)3d(2)	3s(1)3p(4)4s(1)	2p(6)3s(1)3p(4)3d(1)	2p(5)3s(2)3p(4)4p(1)
3s(2)3p(1)4p(2)	3s(1)3p(4)4d(1)	2p(6)3s(1)3p(4)4s(1)	2p(6)3s(1)3p(4)3d(1)
3s(2)4p(3)	3s(1)3p(4)5s(1)	2p(5)3s(1)3p(5)3d(1)	2p(6)3s(1)3p(4)4s(1)
3s(1)3p(3)3d(1)	3s(2)3p(3)4p(1)	2p(5)3s(1)3p(5)4s(1)	2p(6)3s(1)3p(4)4d(1)
3s(1)3p(3)4s(1)	3s(2)3p(3)4f(1)	2p(5)3s(2)3p(3)3d(1)4s(1)	2p(6)3s(2)3p(3)4p(1)
3s(1)3p(2)3d(1)4p(1)	3s(2)3p(3)5p(1)	2p(5)3s(2)3p(3)3d(2)	
3s(1)3p(2)4s(1)4p(1)	3s(1)3p(3)3d(1)4p(1)	2p(5)3s(2)3p(3)4s(2)	
3s(1)3p(1)3d(3)	3s(1)3p(3)3d(1)4f(1)	2p(4)3s(2)3p(4)3d(1)4s(1)	
3s(1)3p(1)3d(2)4s(1)	3s(1)3p(3)3d(1)5p(1)	2p(4)3s(2)3p(6)	
3s(1)3p(1)3d(1)4p(2)	3s(1)3p(3)4s(1)4p(1)	2p(4)3s(2)3p(4)3d(2)	
3s(1)3p(1)4s(1)4p(2)	3s(1)3p(3)4s(1)5p(1)	2p(4)3s(2)3p(4)4s(2)	
3s(1)3d(3)4p(1)	3s(1)3p(3)4p(1)4d(1)	2p(6)3p(4)3d(2)	
3s(1)3d(2)4s(1)4p(1)	3s(1)3p(3)4p(1)5s(1)	2p(6)3p(4)4s(2)	
3s(1)3d(1)4p(3)	3s(1)3p(3)4d(1)4f(1)	2p(6)3s(2)3p(2)3d(1)4s(1)	
3s(1)4s(1)4p(3)	3s(1)3p(3)4d(1)5p(1)	2p(6)3s(2)3p(2)3d(2)	
3p(4)4p(1)	3s(1)3p(3)5s(1)5p(1)	2p(6)3s(2)3p(2)4s(2)	
3p(3)3d(2)	3p(5)4p(1)		
3p(3)4s(2)	3p(5)5p(1)		
3p(3)4p(2)	3p(4)3d(1)4d(1)		
3p(2)3d(2)4p(1)	3p(4)4s(1)5s(1)		
3p(2)3d(1)4s(1)4p(1)	3p(4)4p(1)5p(1)		
3p(2)4s(2)4p(1)	3p(4)3d(2)		
3p(2)4p(3)	3p(4)4s(2)		
3p(1)3d(4)	3p(4)4d(2)		
3p(1)3d(3)4s(1)	3p(4)4f(2)		
3p(1)3d(2)4p(2)	3p(4)5s(2)		
3p(1)3d(1)4s(1)4p(2)	3p(4)5p(2)		
3p(1)4s(2)4p(2)	3s(2)3p(2)3d(1)4s(1)		
3p(1)4p(4)	3s(2)3p(2)3d(1)4d(1)		
3d(3)4s(1)4p(1)	3s(2)3p(2)3d(1)5s(1)		
3d(2)4p(3)	3s(2)3p(2)4s(1)4d(1)		
3d(1)4s(1)4p(3)	3s(2)3p(2)4s(1)5s(1)		
4s(2)4p(3)	3s(2)3p(2)4p(1)4f(1)		
	3s(2)3p(2)4p(1)5p(1)		
	3s(2)3p(2)4d(1)5s(1)		
	3s(2)3p(2)4f(1)5p(1)		
	3s(2)3p(2)3d(2)		
	3s(2)3p(2)4s(2)		
	3s(2)3p(2)4p(2)		
	3s(2)3p(2)4d(2)		
	3s(2)3p(2)4f(2)		
	3s(2)3p(2)5s(2)		
	3s(2)3p(2)5p(2)		

ÖZGEÇMİŞ

Nurgül ATİK, 1982 yılında Sakarya'da doğdu. İlköğrenimini Vali Mustafa Uygur İlköğretim okulunda tamamladı. Lise öğrenimini ise Adapazarı İmam Hatip Lisesi'nde bitirdi. 2000 yılında Sakarya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde Lisans öğrenimine başladı. 2004 yılında Fizik bölümünden mezun oldu. Şu anda Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalında yüksek lisans öğrenimine devam etmektedir.