

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**GÜMÜŞ ATOMUNUN KONFIGÜRASYON
ETKİLEŞME YÖNTEMİ İLE BAZI ATOMİK
HESAPLAMALARI**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Betül KARAÇOBAN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK
Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR

Mayıs 2006

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**GÜMÜŞ ATOMUNUN KONFIGÜRASYON
ETKİLEŞME YÖNTEMİ İLE BAZI ATOMİK
HESAPLAMALARI**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Betül KARAÇOBAN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 09 / 06 /2006 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.

**Yrd. Doç. Dr. Leyla
ÖZDEMİR
Jüri Başkanı**

**Doç. Dr. İbrahim
OKUR
Üye**

**Doç. Dr. Mustafa
KÜÇÜKİSLAMOĞLU
Üye**

ÖNSÖZ

Bu çalışmada nötral gümüş (Ag I) için seçilen tek pariteli ve çift pariteli konfigürasyonlara ait enerji seviyeleri ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1) geçişleri için geçiş enerjileri, dalga boyları, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı. Bu hesaplamalar için çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) yöntemi kullanıldı.

Bu tezin hazırlanmasında yardımlarını esirgemeyen ve öncülük eden değerli hocam Yrd. Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR'e, aileme ve Araş. Gör. Güldem ÜRER'e teşekkür ederim.

Mayıs 2006

Betül KARAÇOBAN

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
KISALTMALAR LİSTESİ.....	v
TABLolar LİSTESİ.....	vi
ÖZET.....	vii
SUMMARY.....	viii
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2.	
ÇOK-ELEKTRONLU ATOMLARIN DALGA FONKSİYONLARI VE ENERJİ SEVİYELERİ.....	4
2.1. Çok-Elektronlu Atomlar için Relativistik Olmayan Hamiltonyen	4
2.2. Dalga Fonksiyonunun Özellikleri.....	5
2.2.1. Normalleşme.....	5
2.2.2. Antisimetriklik.....	5
2.2.3. Parite.....	6
2.2.4. Açısız Özellikler.....	6
2.3. Bir-Elektronlu Sistemler.....	7
2.3.1. Sınır hali çözümleri.....	9
2.4. Çok-Elektronlu Sistemler.....	11
2.4.1. Merkezi alan yaklaşıklığı.....	11
2.4.2. Elektron konfigürasyonu.....	13
2.4.3. Konfigürasyon hal fonksiyonları.....	14

2.4.4. <i>LS</i> terimleri.....	15
2.4.5. Çok konfigürasyonlu açılımlar.....	16
2.5. Değişim Yöntemi.....	16
2.5.1. Yaklaşık değişim çözümleri.....	18
2.5.2. Matris özdeğer denklemi.....	19
2.5.3. Hartree-Fock problemi.....	20
2.5.4. Çok-elektronlu atomlarda korelasyon	21
2.6. Relativistik Etkiler.....	22
2.6.1. Breit-Pauli Hamiltonyeni ve dalga fonksiyonu.....	22
2.6.2. İnce yapı seviyeleri.....	25
2.7. Enerji Seviyeleri Arasındaki Geçişler.....	26
2.7.1. Geçişler ve geçiş özellikleri.....	26
2.7.2. Kesin ve yaklaşık seçim kuralları.....	28
BÖLÜM 3.	
SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	31
KAYNAKLAR.....	43
ÖZGEÇMİŞ.....	47

KISALTMALAR LİSTESİ

MCHF	: Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
CSF	: Konfigürasyon Hal Fonksiyonu (Configuration State Function)
NR	: Relativistik Olmayan (Non-Relativistic)
RS	: Relativistik Kayma (Relativistic Shift)
FS	: İnce Yapı (Fine Structure)
MC	: Kütle Düzeltmesi (Mass Correction)
D1	: Bir-Cisim Darwin Terimi (One-Body Darwin Term)
D2	: İki-Cisim Darwin Terimi (Two-Body Darwin Term)
OO	: Yörünge-Yörünge Terimi (Orbit-Orbit Term)
SSC	: Spin-Spin Terimi (Spin-Spin Contact Term)
SO	: Çekirdek Spin-Yörünge Terimi (Spin-Orbit Term)
SOO	: Spin-Diğer Yörünge Terimi (Spin-Other Orbit Term)
SS	: Spin-Spin Terimi (Spin-Spin Term)

TABLolar LİSTESİ

Tablo 3.1.	Ag I'in ns ($n=5,6,7$), nd ($n=5,6$) ve $5g$ çift pariteli halleri için seviye enerjileri (cm^{-1}).....	34
Tablo 3.2.	Ag I'in np ($n=5,6$) ve nf ($n=4,5$) tek pariteli halleri için seviye enerjileri (cm^{-1}).....	35
Tablo 3.3.	Ag I'in tek ve çift pariteli seviyeler arasındaki elektrik dipol(E1) geçişleri için ΔE geçiş enerjileri (cm^{-1}), λ dalga boyları (\AA), gf ağırlıklı osilatör şiddetleri ve A_{ki} geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	36

ÖZET

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

Bu çalışmada, konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden biri olan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) yaklaşıklığı kullanılarak nötral gümüşün (Ag I) bazı uyarılmış seviyelerinin enerjileri ve bu seviyeler arasındaki geçiş enerjileri, dalga boyları, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Relativistik düzeltmeler için Breit-Pauli Hamiltonyeni alınmaktadır. İlk bölümde; Ag I ile ilgili yapılmış çalışmalar, ikinci bölümde; çok-elektronlu atomlar, çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi, Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri ve geçiş olasılıkları hakkında özet bilgiler verilmektedir. Dalga fonksiyonları ve bazı relativistik düzeltmeler MCHF atomik yapı paketi kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar diğer çalışmalar ile karşılaştırmalı olarak son bölümde sunulmuştur.

SOME ATOMIC CALCULATIONS FOR SILVER ATOM BY USING THE CONFIGURATION INTERACTION METHOD

SUMMARY

Keywords: MCHF method, Breit-Pauli relativistic corrections, energy levels, transition energies, wavelengths, weighted oscillator strengths, transition probabilities

In this study, level and transition energies, wavelengths, weighted oscillator strengths and transition probabilities for neutral silver (Ag I) have been calculated using multiconfiguration Hartree-Fock approximation which is a configuration interaction method. In addition, Breit-Pauli Hamiltonian was taken for relativistic corrections. In the first chapter previous works on Ag I have been given. Second chapter deals with the concept of many electron atoms multiconfiguration Hartree-Fock method, Breit-Pauli relativistic corrections and transition probabilities. Wavefunctions and some relativistic corrections have been calculated using MCHF atomic package. In the last chapter results obtained have been compared with the experiments and other theoretical calculations.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Bu bölümde, bu çalışmada ele alınan enerji seviyeleri ve bazı seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1) geçişlerine ait hesaplamaları verilen nötral gümüş ile ilgili olarak şu ana kadar yapılmış teorik ve deneysel çalışmalar kısaca özetlenecektir.

Migdalek ve çalışma arkadaşları tarafından Ag I ile ilgili geniş çapta değişik hesaplamalar yapılmıştır. Bu çalışmalar; değişik potansiyellerle iyonlaşma enerjileri, bazı geçişlere ait yarı deneysel parametrelerden faydalanarak özün kutuplanmasını içeren, özellikle düşük seviyelere ait relativistik Hartree-Fock ve Dirac-Fock yöntemleri kullanılarak osilatör şiddetleri hesaplarıdır[1-10]. Gümüş tipi bazı iyonlara ait uyarılma enerjileri ve düşük seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişleri için osilatör şiddetleri, relativistik Hartree-Fock dalga fonksiyonlarını kullanarak Cheng ve Kim tarafından verilmiştir[11]. $ns_{1/2} - np_{1/2,3/2}$ ($n = 5$) geçişlerine ait üçüncü mertebeden relativistik çok-cisim katkı teorisi hesapları Chou ve Johnson tarafından sunulmuştur[12]. Nötral gümüş ve çekirdek yükü $Z = 48 - 100$ olan Ag benzeri iyonların $4f_j$ ve $5l_j$ ($l = s, p, d, f, g$) seviyelerinin enerjileri üçüncü mertebeden relativistik çok-cisim katkı teorisi kullanılarak, mümkün $5l_j - 5l'_j$ ve $4f_j - 5l_j$ elektrik dipol geçişleri için indirgenmiş matris elemanları, osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yarı ömürleri Safronova ve çalışma arkadaşları tarafından hesaplanmıştır[13].

Nötral gümüşün değişik seviyelerine ait ilk deneysel veriler Blair'e aittir[14]. Soğurma spektrumunu Paul tarafından incelenmiştir[15]. Shenstone gümüşün bazı uyarılmış hallerine ait enerji seviyelerini ve 1250-40000 Å dalga boyu aralığındaki spektrumunu incelemiştir[16]. Gümüşün 3784,1 – 8704,9 Å dalga boyu aralığındaki çizgilerin analizi Rasmussen tarafından yapılmıştır[17]. Hinnov ve Kohn aralarında

gümüşün bulunduğu nötral on dört elementin spektrum çizgilerine göre optik tesir kesitlerini belirlemişlerdir[18]. Ag I'in 3280 ve 3382 Å rezonans çiftlerinin osilatör şiddetlerinin mutlak değerleri Penkin ve Slavenas tarafından ölçülmüştür[19]. Lawrence ve çalışma arkadaşları çekirdek yükü $Z = 24, 27, 28, 31, 46, 47, 49, 50, 79$ ve 81 olan nötral on elementin spekturumunun mutlak osilatör şiddeti ölçümlerini atomik-demet tekniği ile yapmışlardır[20]. Gümüşün 3280 ve 3383 Å dalga boyundaki $^2S-^2P^o$ çiftleniminin geçiş olasılıkları Moise tarafından verilmiştir[21]. Andersen ve çalışma arkadaşları gümüş atomunun da içinde bulunduğu, periyodik tablonun birinci, ikinci ve üçüncü gruplarına ait nötral atomların ilk uyarılmış seviyelerinin yarı ömür ölçümlerini demet yaprak tekniği ile yapmışlar ve deneysel yöntemlerle elde edilen diğer bazı sonuçlarla karşılaştırmışlardır[22]. Nötral gümüşün $5p\ ^2P_{3/2}$ rezonans seviyesinin yarı ömrüne ait ölçümler Klose, Selter ve Kunze tarafından sunulmuştur[23,24]. Plekhotkina Ag I ve Ag II'nin bazı uyarılmış hallerinin ışımali yarı ömürlerine ait deneysel çalışmaları sistematik olarak derlemiştir[25]. Verner ve çalışma arkadaşları, gümüşe ait verilerin de aralarında bulunduğu, dalga boyu 228 Å'dan büyük olan temel halden soğurma çizgilerine ait atomik verileri listeler halinde sunmuşlardır[26].

Bu çalışmada, konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden biri olan ve Breit-Pauli relativistik düzeltmelerini içeren çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock-MCHF) yaklaşıklığı[27] ile nötral gümüşün bazı atomik özellikleri incelendi. MCHF atomik yapı paketi[28] kullanılarak ve değişik konfigürasyon seçimleri yapılarak seviye enerjileri ve incelenen seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1) geçişleri için geçiş enerjileri, dalga boyları, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı. Dört farklı hesaplama sonuçlarının yorumlanması benzer verileri içeren diğer teorik ve deneysel çalışma sonuçları ile karşılaştırılarak yapıldı.

Ag I için $[Kr]4d^{10}$ özü dışında birinci hesaplamada; çift parite için ns ($n = 5, 6, 7$), nd ($n = 5, 6$) ve $5g$, tek parite için $5p, 6p, 4f$ ve $5f$, ikinci hesaplamada; çift parite için $5s, 5d$ ve $5g$, tek parite için $5p, 4f$ ve $5f$, üçüncü hesaplamada; çift parite için

$ns (n = 5, 6, 7)$, $5d$ ve $6d$, tek parite için $5p$ ve $6p$, ve dördüncü hesaplamada; çift parite için $5s$, $6s$ ve $7s$, tek parite için $5p$ ve $6p$ konfigürasyonları kullanıldı.

BÖLÜM 2. ÇOK-ELEKTRONLU ATOMLARIN DALGA FONKSİYONLARI VE ENERJİ SEVİYELERİ

2.1. Çok-Elektronlu Atomlar için Relativistik Olmayan Hamiltonyen

Kuantum mekaniğinde N-elektronlu bir atomun kararlı hali $\psi(q_1, \dots, q_N)$ dalga fonksiyonu ile tanımlanır. Burada $q_i = (r_i, \sigma_i)$, i . elektronun uzay ve spin koordinatlarını gösterir. Dalga fonksiyonunun uzay değişkenlerine göre sürekli olduğu ve

$$H\psi(q_1, \dots, q_N) = E\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.1)$$

dalga denkleminin bir çözümü olduğu kabul edilir. Burada H atomik sistemin Hamiltonyen işlemcisidir. Dalga denklemi bir özdeğer problemidir ve çözümleri yalnızca belirli E değerleri için vardır. Tüm özdeğerler takımı işlemcinin özdeğer spektrumunu olarak bilinir.

H işlemcisi belirli kuantum mekaniksel yapı kadar atomik sisteme de bağlıdır. Relativistik olmayan hesaplamalar için başlama noktası, Hamiltonyeni atomik birimlerde

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i>j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.2)$$

şeklinde verilen Schrödinger denklemdir. Burada Z atomun çekirdek yükü, r_i , i elektronunun çekirdekten uzaklığı ve r_{ij} , i ve j elektronları arasındaki uzaklıktır. Bu Hamiltonyen, relativistik etkilerin ihmal edilebilmesi ve atomik çekirdeğin sonsuz kütleli bir nokta yük gibi davranabilmesi kabulleniimleri altında geçerlidir.

2.2. Dalga Fonksiyonunun Özellikleri

2.2.1. Normalleşme

Hamiltonyen işlemcisi (2.2) kesikli ve sürekli spektrumun her ikisine de sahiptir. Kesikli spektruma ait olan dalga fonksiyonları veya özfonksiyonlar, karesi integrallenir ve bağ hallerini gösterirler. Bu fonksiyonların çoğunlukla normalleşmiş oldukları kabul edilir:

$$\int_q |\psi(q_1, \dots, q_N)|^2 dq_1 \dots dq_N \equiv \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (2.3)$$

Burada integral işareti, tüm uzay koordinatları üzerinden integral alma ve tüm spin koordinatları üzerinden toplam anlamındadır.

2.2.2. Antisimetriklilik

Elektronlar ayırt edilemez parçacıklar oldukları için Hamiltonyen işlemcisi, elektronların koordinat değişimlerinden bağımsız olmalıdır. $\psi(q_1, \dots, q_N)$, E özdeğerli H 'nin bir özfonksiyonu ise,

$$\wp_{ij} \psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N) = \psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, q_N) \quad (2.4)$$

olur. Burada \wp_{ij} , q_i ve q_j elektron koordinatlarını değiştiren işlemcidir. E özdeğerli H 'nin genel özfonksiyonu koordinatların yer değiştirmesine göre elde edilen fonksiyonların lineer birleşimidir. Bir atomik sistemin doğru tanımı, tamamen antisimetrik olan özfonksiyonların lineer birleşimi ile yapılır. Böyle bir antisimetrik özfonksiyonun mümkün gösterimi,

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\wp} (-1)^p \wp \psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.5)$$

lineer birleşimi ile verilir. Burada p permütasyonun (sıra deęiştirme) paritesidir ve \wp toplamı, tüm $N!$ permütasyonları üzerindedir. Böylece antisimetri işlemcisi A

$$A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\wp} (-1)^p \wp \quad (2.6)$$

şeklinde tanımlanır. Bir antisimetrik dalga fonksiyonu, uzayda aynı yeri işgal eden aynı spinli iki elektron olduğunda özdeş olarak sıfırdır. Uzaysal deęişkenlere göre dalga fonksiyonunun sürekliliğinden dolayı dalga fonksiyonun mutlak deęeri, aynı spinli iki elektron birbirlerine yakın olduklarında küçüktür.

2.2.3. Parite

L , M_L , S ve M_S açısal momentum kuantum sayılarına ek olarak, Hamiltonyen işlemcisinin özfonksiyonları bunların pariteleri ile gösterilir. Parite işlemcisi Π ise,

$$\Pi \psi(r_1, \sigma_1, \dots, r_N, \sigma_N) = \psi(-r_1, \sigma_1, \dots, -r_N, \sigma_N) \quad (2.7)$$

bağıntısı ile tanımlanır. Parite işlemcisinin tanımından $\Pi^2 = 1$ ve özdeęerinin ± 1 olduğu açıktır. Parite işlemcisi, Hamiltonyen ve açısal momentum işlemcisi ile sıra deęiştirir ve bundan dolayı atomik öz fonksiyonlar Π 'nin özfonksiyonları olarak da alınabilir. Parite işlemcisinin $+1$ ve -1 özdeęerlerine ait özfonksiyonları sırasıyla çift ve tek olarak adlandırılır.

2.2.4. Açısal özellikler

Relativistik olmayan Hamiltonyen, toplam yörünge açısal momentum işlemcisi

$$L = \sum_{i=1}^N l_i \quad \text{ve toplam spin açısal momentum işlemcisi } S = \sum_{i=1}^N s_i \quad \text{ile sıra deęiştirir:}$$

$$[H, L] = [H, S] = 0 \quad (2.8)$$

Buna göre H , L^2 , L_z , S^2 ve S_z aralarında sıra değiştiren işlemciler takımı olur. Bu, bahsi geçen işlemcilerin eş zamanlı olarak özfonksiyonlarının ortaya çıktığını gösterir:

$$H\psi(q_1, \dots, q_N) = E\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.9)$$

$$L^2\psi(q_1, \dots, q_N) = L(L+1)\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.10)$$

$$L_z\psi(q_1, \dots, q_N) = M_L\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.11)$$

$$S^2\psi(q_1, \dots, q_N) = S(S+1)\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.12)$$

$$S_z\psi(q_1, \dots, q_N) = M_S\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.13)$$

Bu işlemcilerin eş zamanlı özfonksiyonları, $\psi(\gamma L M_L M_S; q_1, \dots, q_N)$ olarak gösterilebilir. γ , halin tam olarak belirlenmesi için gereken ek kuantum sayılarını gösterir.

2.3. Bir-Elektronlu Sistemler

Bir-elektronlu sistemler Schrödinger denkleminin tam olarak çözüldüğü sistemlerdir. Bu sisteme ait sonuçların dikkate alınması daha karmaşık çok-elektronlu sistemler için yaklaşık yöntemlerin çoğunun temelini oluşturur. Küresel koordinatlarda, genel küresel bir potansiyel $U(r)$ 'deki tek bir elektron için Schrödinger denklemi

$$H\phi(r, \theta, \varphi, \sigma) = E\phi(r, \theta, \varphi, \sigma) \quad (2.14)$$

olarak yazılabilir. Burada Hamiltonyen

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + U(r) \equiv -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2(rR(r))}{\partial r^2} - \frac{l^2}{r^2}\right) + U(r) \quad (2.15)$$

şeklinde radyal kısma ait Hamiltonyendir. Z yüklü bir çekirdeğin Coulomb alanında hareket eden bir elektron için küresel potansiyel

$$U(r) = -\frac{Z}{r} \quad (2.16)$$

dir. (2.15) Hamiltonyeni açısal momentum işlemcileri l ve s ile sıra değiştirir ve böylece H , l^2 , l_z , s^2 ve s_z birbirleri ile sıra değiştiren bir takım oluştururlar. Bu işlemcilerin eş zamanlı özfonksiyonları

$$\phi(q) = R(r)Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)\chi_{m_s}(\sigma) = \frac{1}{r}P(r)Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)\chi_{m_s}(\sigma) \quad (2.17)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$ küresel harmonikler ve $\chi_{m_s}(\sigma)$ spin fonksiyonları, sırasıyla yörünge ve spin açısal momentum işlemcilerinin özfonksiyonlarıdır:

$$l^2 Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) = l(l+1)Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \quad (2.18)$$

$$l_z Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) = m_l Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \quad (2.19)$$

$$s^2 \chi_{m_s}(\sigma) = s(s+1)\chi_{m_s}(\sigma) \quad (2.20)$$

$$s_z \chi_{m_s}(\sigma) = m_s \chi_{m_s}(\sigma) \quad (2.21)$$

Küresel koordinatlarda, $r \rightarrow -r$ tersinirliği

$$(r, \theta, \varphi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \varphi + \pi) \quad (2.22)$$

şeklinde verilir. Küresel harmonikler de

$$Y_l^{m_l}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \quad (2.23)$$

ifadesini sağlar. Bu, bir-elektron özfonksiyonlarının, çift l için çift pariteye ve tek l için tek pariteye sahip olduğunu gösterir.

Radyal fonksiyonları belirlemek için

$$\phi(q) = \frac{1}{r} P(r) Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \chi_{m_s}(\sigma) \quad (2.24)$$

fonksiyonu Schrödinger denkleminde yerine yazılır. (2.18) ve (2.19) denklemleri kullanılarak, $P(r)$ 'nin

$$\left(\frac{d}{dr^2} - 2U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2E \right) P(r) = 0 \quad (2.25)$$

radyal denklemi için bir çözüm olduğu gösterilebilir. $\phi(q)$ her yerde sonlu olduğu için $P(r)$, $P(0)=0$ sınır şartını sağlamalıdır.

2.3.1. Sınır hali çözümleri

Orjinde sınır şartını sağlayan (2.25) radyal denklemi için karesi integrallenebilir çözümler, yalnızca $E < 0$ kesikli değerleri için ortaya çıkar. Bu enerji değerlerine ait farklı $P(r)$ çözümleri, bunlara karşılık gelen l değerleri ile ve orjinden uzaktaki düğümlerinin sayısı ile ayırt edilebilir. Genellikle spektroskopik gösterimde, yörünge açısal momentumlar

$$\begin{array}{l} l=0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7 \ 8 \ \dots \\ \quad s \ p \ d \ f \ g \ h \ i \ k \ l \ \dots \end{array} \quad (2.26)$$

şeklinde gösterilir. n baş kuantum sayısı

$$n = l + v + 1 \quad (2.27)$$

ile tanımlanır. Burada v orjinde sıfır olmayan radyal fonksiyonun düğüm noktaları sayısıdır. Böylece bir-elektron dalga fonksiyonları,

$$\phi(q) = \frac{1}{r} P(nl; r) Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \chi_{m_s}(\sigma) \quad (2.28)$$

şeklinde dört kuantum sayısı takımıyla tam olarak belirlenir. Böyle fonksiyonlar spin-yörüngemsiler olarak adlandırılır. Bunlar ya $\phi(nlm_l m_s; q)$ ya da $(q|nlm_l m_s\rangle$ veya koordinatlar önemsiz ise $|nlm_l m_s\rangle$ olarak gösterilir. Spin-yörüngemsilerin normleştirilmesi için $P(nl; r)$ fonksiyonu

$$\int_0^{\infty} P^2(nl; r) dr = 1 \quad (2.29)$$

ifadesini sağlamalıdır.

Küçük r için, $P(nl; r)$ radyal fonksiyonu kuvvet serisine açılabilir:

$$P(nl; r) = a_0 r^s + a_1 r^{s+1} + \dots \quad (2.30)$$

Burada, $\phi(q)$ 'nin her yerde sonlu olması gerektiği için, $s \geq 1$ 'dir. Radyal denklemde bu ifade yerine yazılırsa r 'ye göre eşit dereceli terimler toplandığında

$$\frac{1}{r} P(nl; r) \propto r^l \quad (2.31)$$

olduğu görülür (küçük r 'ler için). Elektronun çekirdeğe yakın olma olasılığı, l arttıkça hızlı bir şekilde azalır. Yalnızca, $l = 0$ için elektronun çekirdeğin kenarında olma olasılığı sonludur. $r \rightarrow \infty$ için radyal fonksiyonun üstel olarak azaldığı görülür:

$$P(nl; r) \propto e^{-\sqrt{2|E|}r} \quad (2.32)$$

2.4. Çok-Elektronlu Sistemler

Schrödinger denklemi yalnızca bir-elektronlu sistemler için tam olarak çözülebilir. Çok-elektronlu sistemler için özfonksiyonların gerçek şekilleri bilinmemektedir. Bu nedenle çok-elektronlu atomların veya iyonların incelenmesi için bazı genel yöntemler ile yaklaşık dalga fonksiyonları elde edilir. Hartree-Fock yaklaşıklığı da bu yöntemlerden biridir. Bu yöntem merkezi alan yaklaşıklığına ve değişim yöntemine dayanır.

2.4.1. Merkezi alan yaklaşıklığı

Merkezi alan yaklaşıklığında tam Hamiltonyen, H_0 ayrıştırılabilir Hamiltonyenle yer değiştirir:

$$H \approx H_0 = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + V(r_i) \right) \quad (2.33)$$

Burada, $V(r_i)$ merkezi potansiyeli, elektronlar arası Coulomb itme etkilerini yaklaştırır.

Yaklaşık Hamiltonyen H_0 , tam Hamiltonyen gibi, L^2 , L_z , S^2 ve S_z toplam açısıl momentum işlemcileri ile sıra değiştirir ve daima H_0 'ın özfonksiyonları, bu işlemcilerin özfonksiyonları olarak seçilebilir.

$$H_0 \psi_0(q_1, \dots, q_N) = E_0 \psi_0(q_1, \dots, q_N) \quad (2.34)$$

olduğundan ve H_0 ayrıştırılabildiği için özdeğer ve özfonksiyonlar sırasıyla

$$E_0 = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.35)$$

ve

$$\psi_0(q_1, \dots, q_N) = \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.36)$$

olarak yazılır. Schrödinger denklemi de

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + U(r) \right] \phi(\alpha; q) = E \phi(\alpha; q) \quad (2.37)$$

dur. Burada $U(r)$ potansiyeli

$$U(r) = -\left(\frac{Z}{r} \right) + V(r) \quad (2.38)$$

şeklinde verilir. $\phi(\alpha; q)$ ile temsil edilen bireysel spin-yörüngemeleri, bir-elektron denklemlerinin çözümleridir. $U(r)$ potansiyeli için bir-elektron enerjisi E , Coulomb halinin tersine n ve l 'ye bağlıdır.

H_0 Hamiltonyeni elektron koordinatlarının yer değişiminden bağımsız olduğu için (2.36) çarpım fonksiyonundaki koordinatların yer değişimi ile bir özfonksiyon elde edilir. Yer değiştirmiş çarpım fonksiyonları birleştirilerek antisimetrik bir fonksiyon oluşturulur:

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = A \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.39)$$

Bu fonksiyon

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi(\alpha_1; q_1) & \phi(\alpha_1; q_2) & \dots & \phi(\alpha_1; q_N) \\ \phi(\alpha_2; q_1) & \phi(\alpha_2; q_2) & \dots & \phi(\alpha_2; q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi(\alpha_N; q_1) & \phi(\alpha_N; q_2) & \dots & \phi(\alpha_N; q_N) \end{vmatrix} \quad (2.40)$$

ile verilen bir Slater determinantıdır. Bu gösterimde, toplam dalga fonksiyonu $\Phi(q_1, \dots, q_N)$ 'nin, eğer iki elektronun $\alpha = nlm_l m_s$ dört kuantum sayısı aynı ise, özdeş olarak yok olduğu görülür. Böylece atomun izinli halleri için iki elektron dört kuantum sayısının aynı değerine sahip olmaz. Bu, Pauli tarafından ileri sürülen dışarlama ilkesidir. Determinant $q_i = q_j$ ise, yani aynı spinli iki elektron aynı uzay koordinatlarına sahip ise sıfır olur.

Slater determinantındaki her bir spin-yörüngesinin paritesi $(-1)^l$, Slater determinantının paritesi ise

$$\pi = (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_N} = (-1)^{\sum_i l_i} \quad (2.41)$$

dir. Parite, açısal momentum kuantum sayılarının toplamının tek veya çift oluşuna göre tek veya çifttir.

2.4.2. Elektron konfigürasyonu

H_0 merkezi alan Hamiltonyeninin özfonksiyonu bir Slater determinantı olarak yazılabilir. Karşılık gelen enerji E_0 ise determinanatta gözüken spin-yörüngesilerin enerjilerinin toplamı ile verilir (2.35).

Aynı değerli n ve l kuantum sayılı spin-yörüngesilerin aynı alt tabakaya ait olduğu söylenir ve bunlara 'özdeş spin-yörüngesiler' denir. Bir spin-yörüngesinin enerjisi yalnızca n ve l kuantum sayılarına bağlıdır. Enerji E_0 , tam olarak elektron konfigürasyonu ile belirlenir. Bir genel elektron konfigürasyonu

$$(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots (n_m l_m)^{w_m}, \quad N = \sum_{a=1}^m w_a \quad (2.42)$$

ile verilir. Burada w_1, w_2, \dots farklı alt tabakalardaki spin-yörüngesilerin doluluk sayılarıdır ve karşılık gelen enerji de

$$E_0 = \sum_{a=1}^m w_a E_{n_a l_a} \quad (2.43)$$

olarak yazılır. Burada $E_{n_a l_a}$ bir nl alt tabakasındaki spin-yörüngemsilerin enerjisini gösterir. Elektron konfigürasyonları çoğunlukla spektroskopik sembollerle gösterilir.

Pauli dışarlama ilkesine göre, her bir spin-yörüngemside yalnızca bir elektron olabileceğinden bir nl alt tabakasinda en fazla $2(2l+1)$ elektron olabilir. Tam dolu bir alt tabakanın kapalı, kısmen dolu bir alt tabakanın da açık olduğu söylenir. (2.43)'e göre bir konfigürasyonun enerjisi her bir alt tabakanın doluluk sayıları ile verilir. Bir atom için taban konfigürasyonu, en düşük enerjiden itibaren alt tabakaları doldurmakla elde edilir. Bu, elementlerin periyodik tablosunu açıklamak için Bohr tarafından formüle edilmiştir.

Konfigürasyon kavramı basit bir yoruma sahiptir. Işıyan atomlar için, deneysel enerji seviyeleri çoğunlukla yakın ayrılmış gruplar şeklinde gözükür. Bir merkezi alan hesabı, uygun bir $V(r)$ potansiyeli kullanılarak yapıldığında, bu grupların her birinin ortalama enerjisinin belirli bir konfigürasyonun enerjisine karşılık olduğu bulunur. Konfigürasyonun tayini düzgün bir şekilde yapılırsa, bir gruptaki hallerin sayısı konfigürasyona karşılık gelen determinantların sayısına eşit olur.

2.4.3. Konfigürasyon hal fonksiyonları

Merkezi alan yaklaşığında, yaklaşık enerji seviyeleri ve tamamen relativistik olmayan Hamiltonyenin yaklaşık özfonksiyonları elde edilir. Genelde, Slater determinantları şeklindeki bu yaklaşık özfonksiyonlar, toplam açısai momentum işlemcilerinin gerçek özfonksiyonları değildirler. Aynı elektron konfigürasyonuna ait determinantların lineer birleşimi ile açısai momentum işlemcilerinin özfonksiyonları oluşturulur. Bu şekilde elde edilen fonksiyonlar, Slater determinantlarından daha iyi bir şekilde relativistik olmayan Hamiltonyenin gerçek özfonksiyonlarına yaklaşır. Bu özfonksiyonlar 'konfigürasyon hal fonksiyonları (Configuration State Functions-

CSFs) olarak adlandırılır. Konfigürasyon hal fonksiyonları, $\Phi(\gamma LM_L SM_S)$ veya $|\gamma LM_L SM_S\rangle$ ile gösterilir.

2.4.4. LS terimleri

Merkezi alan yaklaşığında, belirli bir konfigürasyona ait tüm Slater determinantları ve bu determinantlardan oluşturulan CSF'ler de aynı enerji seviyesine karşılık gelir. Elektron etkileşmesinin merkezi olmayan kısmı

$$-\sum_{i=1}^N V(r_i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.44)$$

dikkate alındığında, toplam açısal momentum kuantum sayılarına bağlı olan farklı CSF'ler, farklı enerjilere karşılık gelecektir. Bu enerji seviyelerine 'konfigürasyonun LS terimleri' denir. Farklı CSF'lerin beklenen değerleri

$$E = \langle \Phi(\gamma LM_L SM_S) | H | \Phi(\gamma LM_L SM_S) \rangle \quad (2.45)$$

şeklinde verilir. Beklenen değer, M_L ve M_S 'den bağımsızdır ve her bir LS terimi $(2L+1)(2S+1)$ kat dejeneredir.

LS terimleri M_L ve M_S kuantum sayılarından bağımsız olduğundan dejenerlik çoğunlukla ihmal edilir. M_L ve M_S kuantum sayılarının önemli olmadığı durumlarda CSF'ler kısaca $\Phi(\gamma LS)$ veya $\Phi(\gamma^{2S+1}L)$ olarak gösterilir. Burada L

$$\begin{array}{l} L = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7 \ \dots \\ \quad S \ P \ D \ F \ G \ H \ I \ K \ \dots \end{array} \quad (2.46)$$

şeklinde spektroskopik gösterimle verilir ve $2S+1$ terimin çokluğu olarak adlandırılır. Tek parite halleri için, bir 'o' üst indisi ve çift parite halleri için bir 'e' üst indisi, L 'yi gösteren sembolden sonra eklenir.

2.4.5. Çok konfigürasyonlu açılımlar

Çoğu durumlarda, CSF'ler tam Hamiltonyenin gerçek ψ özfonksiyonlarına sürpriz bir şekilde iyi bir yaklaşıklıkla. Daha iyi yaklaşıklıklar CSF'lerin lineer birleşimi olarak elde edilir:

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i LS) \quad (2.47)$$

Gerçek özfonksiyon genellikle açılımdaki baskın CSF ile aynı şekilde kodlanır. Elde edilen yaklaşık özfonksiyonlar için bu çok konfigürasyon yaklaşıklığındaki zorluk, uygun merkezi alan potansiyeli $U(r)$ 'nin seçiminde yatar. Bu problem büyük ölçüde, spin-yörüngemeleri belirlemek yerine değişim yöntemi uygulandığında ortadan kalkar.

2.5. Değişim Yöntemi

Schrödinger denklemini çözmek için değişim yöntemleri özdeğer problemlerinin yeniden formüle edilmesine bağlıdır. Bağ halleri için Schrödinger denkleminin çözümü ψ fonksiyonlarını bulmaya eş değerdir. Enerji fonksiyoneli

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.48)$$

sınır şartlarında ψ 'deki $\delta\psi$ değişimlerine göre birinci mertebeden kararlıdır. Sınır şartlarına ek olarak, değişimin beklenen değerinin integrallenebilir olması gerekir. İki problemin özdeş olduğunu göstermek için, \mathcal{E} 'nin $\delta\mathcal{E}$ değişiminin hesaplanması

$$\mathcal{E}(\psi + \delta\psi) - \mathcal{E}(\psi) = \delta\mathcal{E} + O((\delta\psi)^2) \quad (2.49)$$

tanımı ile verilir. (2.48) ifadesini kullanılarak ve sadece $\delta\psi$ 'nin birinci mertebeden terimlerinin $\langle \psi | \psi \rangle$ ile çarpımı alındığında

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{E}\langle\psi|\psi\rangle &= \langle\delta\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\psi\rangle + \langle\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\delta\psi\rangle \\ &= 2\langle\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\psi\rangle\end{aligned}\quad (2.50)$$

elde edilir. Burada sonuncu eşitlik, bağ halleri için H 'nin hermityen olması gerçeğini ortaya çıkarır. $\mathcal{E}(\psi)$ kararlı ise $\delta\mathcal{E}$ değişimi sıfır olur ve

$$\langle\delta\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\psi\rangle = 0 \quad (2.51)$$

elde edilir. Bu

$$(H - \mathcal{E}(\psi))|\psi\rangle = 0 \quad (2.52)$$

eşitliğini verir. Tersine, ψ H 'nin bir özfonksiyonu ise, $\delta\mathcal{E} = 0$ ve $\mathcal{E}(\psi)$ normalleşme zorunluluğu altında karardır.

(2.48) enerji fonksiyoneli, normalleşmemiş ψ fonksiyonları cinsinden tanımlanır. Çoğu durumlarda, değişimleri normalleşmiş fonksiyonlar uzayına kısıtlamak uygundur:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi + \delta\psi|\psi + \delta\psi\rangle = 1 \quad (2.53)$$

Bu değişim probleminin çözümü, ψ normalleşme zorunluluğu altında optimizasyon problemi için bir çözüm ise, sınır şartlarını sağlayan ψ 'deki tüm $\delta\psi$ değişimlerine göre birinci mertebeden kararlı olan

$$F(\psi) = \mathcal{E}(\psi) + \lambda\langle\psi|\psi\rangle \quad (2.54)$$

gibi bir fonksiyoneli sağlayacak şekilde bir λ 'Lagrange çarpanı' ortaya çıkar.

2.5.1. Yaklaşık değişim çözümleri

(2.54) değişim probleminin tam olarak çözülemeyeceği açıktır. Onun yerine yaklaşık çözümler elde edilir. Bunu yapmanın bir yolu bir dizi $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ parametrelerine bağlı ψ_v değişim fonksiyonunu seçmektir:

$$\psi_v = \psi_v(\alpha; q_1, \dots, q_N) \quad (2.55)$$

Bu parametreler, parametreler değişimine göre

$$F(\alpha) = \mathcal{E}(\psi_v) + \lambda \langle \psi_v | \psi_v \rangle \quad (2.56)$$

fonksiyonelinin kararlılık şartından belirlenir. Bu şartlar, $\langle \psi_v | \psi_v \rangle = 1$ olacak şekilde, λ ile

$$\frac{\partial F(\alpha)}{\partial \alpha_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.57)$$

olmasına götürür. Bu lineer olmamasına rağmen bilgisayarda çözülebilen sonlu bir problemdir ve ψ_v ve $\mathcal{E}(\psi_v)$ sonucu, değişim fonksiyonu ile elde edilen fonksiyon uzayındaki gerçek özfonksiyon ve özdeğerli en iyi tahminleri gösterir. Değişim fonksiyonu gerçek özfonksiyon gibi aynı pariteye ve açısız simetriye sahip olmalıdır. Ayrıca, değişim fonksiyonu esnek olmalı ve gerçek özfonksiyonun doğru (gerçek) özelliklerini içermelidir.

(2.53) normalleşme şartına ek olarak, değişim parametrelerinin çoğunlukla bir dizi başka kısıtlamaları vardır. Bu kısıtlamalar genellikle

$$C_i(\alpha) = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (2.58)$$

olarak yazılır. Burada C_i kısıtlama fonksiyonları olarak adlandırılır. Bu durumda Lagrange çarpanları, kısıtlamaların her biri hakkında bilgi taşır ve problem, izinli değişimlere göre kararlı

$$F(\alpha) = \mathcal{E}(\psi_v) + \sum_{i=1}^m \lambda_i C_i(\alpha) \quad (2.59)$$

fonksiyoneli ortaya çıkaran parametreleri bulmaktır. Lagrange çarpanları kararlı çözümün tüm kısıtlamalarını sağlayacak şekilde olmalıdır.

2.5.2. Matris özdeğer denklemi

Basit fakat çok önemli değişim fonksiyonu

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i LS) \quad (2.60)$$

açılımı ile verilir. Burada $\Phi(\gamma_i LS)$ konfigürasyon hal fonksiyonlarının bulunduğu kabul edilir ve yalnızca c_i katsayılarının belirlenmesi gerekir. Çoğunlukla, CSF'ler ortonormaldir. Normalleşme şartı kısaca,

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1 \quad (2.61)$$

olur. Bu ifade (2.56)'da yerine yazılırsa ve katsayılardaki değişimlere göre kararlı olacak şekilde fonksiyon aranır

$$Hc = -\lambda c \quad (2.62)$$

denklemleri ortaya çıkar. Burada H

$$H_{ij} = \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \quad (2.63)$$

elemanlı Hamiltonyen matrisidir ve $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_M)^t$ açılım katsayılarının sütun vektörüdür. Yalnızca $-\lambda$, \mathbf{H} 'nin bir özdeğeri olduğunda normalleşmiş bir çözüm ortaya çıkar. Böylece kısıtlanmış değişim problemi bir matris özdeğer problemini verir. Hamiltonyen matrisi hermityen olduğundan, özdeğer denkleminde karşılık gelen

$$-\lambda_1 \leq \dots \leq -\lambda_k \leq \dots \leq -\lambda_M \quad (2.64)$$

gerçek özdeğerle M tane

$$c_k = (c_{1k}, \dots, c_{Mk})^t, \quad c_k^t c_l = \delta_{kl} \quad (2.65)$$

ortonormal çözümlere sahiptir. Bu M çözümlerinin dışında, bir veya birkaç tane gerçek dalga fonksiyonlarına göre iyi yaklaşımlar 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:

$$\mathcal{E}(\Psi) = E \quad (2.66)$$

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

2.5.3. Hartree-Fock problemi

Merkezi alan yaklaşıklığına göre her bir elektron aynı $(-Z/r)+V(r)$ potansiyelinde hareket ettiği için $V(r)$ 'nin seçimi önemlidir. Hartree, her bir elektronun kendi potansiyeline sahip olduğunu ileri sürmüştür. Bir nl elektronu için potansiyel, sistemdeki diğer elektronların küresel olarak ortalama yük dağılımından (veya elektron bulutundan) belirlenir. Bu kabullenimden Hartree, Hartree denklemleri olarak bilinen denklemleri türetti. Bunlar bir elektronun bir diğerine bağlı yük dağılımı şeklinde katlı radyal denklemlerdir. Hartree bu denklemlerin 'öz uyumlu alan' denilen tekrarlamalı bir yöntem ile çözülebileceğini önermiştir. Hartree dalga

denklemini, radyal fonksiyonların çarpımı olan küresel simetrik bir dalga fonksiyonu verir. Fock, bu denklemlerin Pauli dışarlama ilkesini sağlamadığına dikkat çekmiştir. Basit sistemleri ele alarak, bir tek determinant ve değişim prensibini uygulayarak, ‘değiş-tokuş terimleri’ denilen antisimetriklikten ortaya çıkan bazı ek terimler hariç Hartree denklemlerine benzer denklemler türetmiştir.

Atom fiziğinde, çok-elektronlu sistemler için değişim dalga fonksiyonu bir $\Psi = \Phi(\gamma LS)$ konfigürasyon hal fonksiyonu şeklinde seçilir. Buradaki radyal dalga fonksiyonları belli değildir ve değişimlere göre kararlılık şartı Hartree-Fock denklemlerine götürür. Değişim fonksiyonu yerine,

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi_i(\gamma_i LS) \quad (2.67)$$

çok konfigürasyonlu açılım seçilirse, radyal fonksiyonlardaki değişimlere göre kararlılık şartı Hartree-Fock denklemlerine benzer diferansiyel denklemler takımına götürür. Diferansiyel denklemler, karışım (açılım) katsayılarının değişiminden ortaya çıkan matris özdeğer denkleminde eşlenir ve bu iki yöntem eş zamanlı olarak çözülür. Bu değişim fonksiyonunu temel alan yöntem, ‘çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi’ olarak bilinir.

2.5.4. Çok-elektronlu atomlarda korelasyon

Hartree-Fock yöntemi pek çok atomik özelliğin oldukça iyi tahminlerini verir. Fakat, dikkatli analiz yapıldığında, sistematik farklılıklar gözlenebilir. Gözlenen veriler relativistik etkiler, sonlu kütle ve çekirdek hacmi gibi diğer etkileri içerir ve ışyan atomlar için küçüktürler. Böyle sistemler için farklılığın en büyük kaynağı, Hartree-Fock çözümünün Schrödinger denkleminin gerçek çözümüne bir yaklaşıklık olması gerçeğinden ve elektronların hareketindeki 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:

$$E^{Kor} = E^{Tam} - E^{HF} \quad (2.68)$$

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

2.6. Relativistik Etkiler

Relativistik olmayan kuantum mekaniği ışıyan atomlar için iyi yaklaşıklık olmasına rağmen, relativistik etkiler teorik tahminlerin deneyle detaylı bir şekilde uyumlu olması için dikkate alınmalıdır. Ağır atomlar veya yüksekçe iyonlaşmış sistemlere doğru gidildiğinde relativistik etkilerin önemi hızlı bir şekilde artar.

Relativistik etkileri almak için, Dirac denklemini çok-elektronlu bir sistem için çözmek yerine Schrödinger denklemi için en düşük mertebeden relativistik katkıları almak yeterlidir. Bu düzeltmeler α ($\alpha = 1/c$, α ince yapı sabiti ve c ışık hızı) kuvvetlerinde bir açılımla relativistik çok elektronlu denklemlerden türetilir. α^2 mertebesinde düzeltme için ortaya çıkan Hamiltonyen, Breit-Pauli Hamiltonyeni olarak bilinir ve izlenecek yaklaşıklık için bir temeldir. Bu Hamiltonyen relativistik olmayan Hamiltonyen için birinci mertebeye düzeltmedir. Ancak yüksek mertebeye katkı teorisinde yanlış sonuç verebilir.

2.6.1. Breit-Pauli Hamiltonyeni ve dalga fonksiyonu

Breit-Pauli Hamiltonyeni

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \quad (2.69)$$

şeklinde yazılabilir. Burada, H_{NR} relativistik olmayan (Non-Relativistic) çok-elektron Hamiltonyeni, H_{RS} relativistik kayma (Relativistic Shift) ve H_{FS} ince yapı (Fine Structure) işlemcisidir. H_{RS} , L ve S ile sıra değiştirir. H_{MC} kütle düzeltmesi (Mass Correction), H_{D1} ve H_{D2} sırası ile bir- ve iki-cisim Darwin (One- and Two-

Body Darwin) terimleri, H_{OO} yörünge-yörünge (Orbit-Orbit) terimi ve H_{SSC} spin-spin (Spin-Spin Contact) terimi olmak üzere H_{RS} açık olarak,

$$H_{RS} = H_{MC} + H_{D1} + H_{D2} + H_{OO} + H_{SSC} \quad (2.70)$$

şeklinde ifade edilir. Burada,

$$H_{MC} = -\frac{\alpha^2}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2)^\dagger \nabla_i^2 \quad (2.71)$$

$$H_{D1} = -\frac{\alpha^2 Z}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2) \left(\frac{1}{r_i} \right) \quad (2.72)$$

$$H_{D2} = -\frac{\alpha^2}{4} \sum_{i<j}^N (\nabla_i^2) \left(\frac{1}{r_{ij}} \right) \quad (2.73)$$

$$H_{OO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \left[\frac{p_i \cdot p_j}{r_{ij}} + \frac{r_{ij} (r_{ij} \cdot p_i) p_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.74)$$

$$H_{SSC} = -\frac{8\pi\alpha^2}{3} \sum_{i<j}^N (s_i \cdot s_j) \delta(r_i \cdot r_j) \quad (2.75)$$

dir. H_{FS} işlemcisi, spin ve yörünge açısal momentumları arasındaki etkileşimi tanımlar. H_{FS} bir etkileşme terimi olduğu için L ve S ile sıra deęiřtirmezken, $J=L+S$ toplam açısal momentumla sıra deęiřtirir. İnce yapı işlemcinin açık ifadesi ise

$$H_{FS} = H_{SO} + H_{SOO} + H_{SS} \quad (2.76)$$

dir. H_{SO} çekirdek spin-yörünge (Spin-Orbit), H_{SOO} spin-diđer yörünge (Spin-Other Orbit) ve H_{SS} spin-spin etkileşme terimidir:

$$H_{SO} = \frac{\alpha^2 Z}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r_i^3} \right) l_i \cdot s_i \quad (2.77)$$

$$H_{SOO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \frac{r_{ij} \times p_i}{r_{ij}^3} (s_i + 2s_j) \quad (2.78)$$

$$H_{SS} = \alpha^2 \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[s_i \cdot s_j - 3 \frac{(s_i \cdot r_{ij})(s_j \cdot r_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \quad (2.79)$$

Breit-Pauli Hamiltoniyeni toplam açılal momentum işlemcisi \mathbf{J} ile sıra değiştirir ve karşılık gelen dalga fonksiyonu ise \mathbf{J}^2 ve J_z 'nin özfonksiyonları olmalıdır. Breit-Pauli yaklaşıklığında dalga fonksiyonları,

$$\Psi(\gamma JM_J) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i L_i S_i JM_J) \quad (2.80)$$

çok konfigürasyonlu lineer birleşimler olarak verilir. Burada $\Phi(\gamma LSJM_J)$ 'ler LSJ çiftlenimli CSF 'lerdir:

$$\Phi(\gamma LSJM_J) = \sum_{M_L M_S} \langle LM_L SM_S | LSJM_J \rangle \Phi(\gamma LM_L SM_S) \quad (2.81)$$

L ve S , farklı LS 'li konfigürasyon hal fonksiyonlarının iyi kuantum sayıları olmadığı için farklı LS terimlerinin karışımı alınır ve dalga fonksiyonu ara çiftlenime tabi olur.

Relativistik olmayan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yönteminden konfigürasyon hal fonksiyonları ve Breit-Pauli yaklaşıklığından karışım katsayıları elde edilerek

$$\mathbf{Hc} = E \mathbf{c} \quad (2.82)$$

matris özdeğer problemine ulaşılır. Burada H , elemanları

$$H_{ij} = \langle \gamma_i L_i S_i J M_J | H_{BP} | \gamma_j L_j S_j J M_J \rangle \quad (2.83)$$

olan matristir. Böylece Breit-Pauli Hamiltonyeninin özdeğer ve özfonksiyonlarını bulma problemi, LSJ çiftlenimli konfigürasyon hal fonksiyonları arasındaki matris elemanlarının bulunmasına ve her J değeri için matris köşegenleştirmesine indirgenir.

2.6.2. İnce yapı seviyeleri

Relativistik enerji düzeltmelerini ele almak için Breit-Pauli dalga fonksiyonunun bir terim içeren basit hali incelenir. Bu açılım için

$$E = E_{NR} + E_{RS} + E_{FS} \quad (2.84)$$

alınabilir. Burada E_{NR}

$$E_{NR} = \langle \gamma LSJM_J | H_{NR} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.85)$$

şeklinde relativistik olmayan enerjidir, E_{RS} ve E_{FS} sırasıyla, relativistik kaymadan ve ince yapı katkılarından elde edilen relativistik enerji düzeltmeleridir:

$$E_{RS} = \langle \gamma LSJM_J | H_{RS} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.86)$$

$$E_{FS} = \langle \gamma LSJM_J | H_{FS} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.87)$$

İnce yapı enerjisi,

$$E_{FS} = E_{SO} + E_{SOO} + E_{SS} \quad (2.88)$$

olarak yazılır. Burada E_{SO} , E_{SOO} ve E_{SS} sırasıyla spin-yörünge, spin-diğer yörünge ve spin-spin etkileşme işlemcilerine karşılık gelen enerjilerdir.

2.7. Enerji Seviyeleri Arasındaki Geçişler

2.7.1. Geçişler ve geçiş özellikleri

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

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

$$E_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^k(i) C_q^{(k)}(i) \quad (2.89)$$

$$M_q^{(k)} = \alpha \sqrt{k(2k-1)} \left[\frac{1}{k+1} MA_q^{(k)} + \frac{1}{2} g_s MB_q^{(k)} \right] \quad (2.90)$$

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

$$MA_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{k-1}(i) \left[C^{(k-1)}(i) \times I^{(1)}(i) \right]_q^{(k)} \quad (2.91)$$

$$MB_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{k-1}(i) \left[C^{(k-1)}(i) \times s^{(1)}(i) \right]_q^{(k)} \quad (2.92)$$

şeklinde tanımlanır.

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

$$I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma'J'M') = \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma'J'M' \rangle \quad (2.93)$$

ve bileşen şiddeti $s^{\pi k}$

$$s^{\pi k}(\gamma JM, \gamma'J'M') = \sum_q \left| I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma'J'M') \right|^2 \quad (2.94)$$

şeklinde tanımlanır. Çizgi şiddeti ise

$$S^{\pi k}(\gamma J, \gamma'J') = \sum_{M, M', q} \left| \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma'J'M' \rangle \right|^2 \quad (2.95)$$

dir. Çizgi şiddeti indirgenmiş matris elemanlarının karesidir:

$$S^{\pi k}(\gamma'J', \gamma J) = \left| \langle \lambda J | O^{\pi(k)} | \gamma'J' \rangle \right|^2 \quad (2.96)$$

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

$$A^{\pi k}(\gamma'J', \gamma J) = 2C_k \left[\alpha (E_{\gamma'J'} - E_{\gamma J}) \right]^{2k+1} \frac{S^{\pi k}(\gamma'J', \gamma J)}{g_{J'}} \quad (2.97)$$

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

$$g_{J'} = 2J' + 1 \quad (2.98)$$

ve C_k

$$C_k = \frac{(2k+1)(k+1)}{k((2k+1)!!)^2} \quad (2.99)$$

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

$$f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \frac{1}{\alpha} C_k [\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J})]^{2k-1} \frac{S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J')}{g_J} \quad (2.100)$$

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

$$gf^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = g_J f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') \quad (2.101)$$

ile verilir.

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

$$\tau_{\gamma' J'} = \frac{1}{\sum_{\pi k, \gamma J} A^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J)} \quad (2.102)$$

dir.

2.7.2. Kesin ve yaklaşık seçim kuralları

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

$$E^{(k)} : \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^k \quad (2.103)$$

$$M^{(k)} : \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^{k-1} \quad (2.104)$$

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

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1, \dots, \pm k \quad k \leq J + J' \quad (2.105)$$

$J = J' = 0$ ise geçiş izini değıildir.

CSF'lerin açısal momentumları aktif veya pasif olarak sınıflandırılabilirler. Pasif momentumlar, aktifler (2.102)'deki kurala göre oluşurken değıışmeyecektir. Dikkate alınacak ilk kural, uzaysal ve spin uzayını temsil eden farklı işlemcilerin ranklarına bağılıdır. Spin için $E^{(k)}$ işlemcisinin spininden bağımsızdır ve spinler daima elektrik çok-kutuplu geçişler için pasiftir. Seçim kuralı,

$$E^{(k)} : \quad \Delta S = 0 \quad (2.106)$$

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

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

$$E^{(k)} : \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm k \quad k \leq L + L' \quad (2.107)$$

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

$$MA^{(k)} : \quad \Delta S = 0 \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm k \quad k \leq L + L' \quad (2.108)$$

$$MB^{(k)} : \quad \Delta S = 0, \pm 1 \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm(k-1) \quad k-1 \leq L + L' \quad (2.109)$$

şeklindedir.

BÖLÜM 3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmanın amacı, nötral gümüşe ait yayınlanmış verilerin az olduğu bazı atomik hesaplamalara ait yeni verileri (özellikle yüksekçe uyarılmış haller için) sunmaktır. Ag I için konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden biri olan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yaklaşıklığına göre Breit-Pauli Hamiltonyeni kullanılarak bazı seviye enerjileri, ağırlıklı osilatör şiddetleri, dalga boyları, geçiş enerjileri ve geçiş olasılıkları MCHF atomik yapı paketi[28] ile hesaplandı. Bu bilgisayar program paketi C.F.Fischer tarafından geliştirilmiştir ve CPC-Program Kütüphanesi'nden (Computer Physics Communication Program Library, Belfast, North Ireland) elde edilmiştir.

MCHF yöntemini kullanarak, seçilen konfigürasyonlar için elde edilen dalga fonksiyonların baskınlığını belirleyen karışım katsayıları ve relativistik olmayan enerjiler hesaplandı. Elde edilen bu dalga fonksiyonları Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri dikkate almak için Breit-Pauli Hamiltonyeni ile köşegenleştirilerek karışım katsayıları yeniden belirlendi. Bu relativistik katkılarla beraber geçişlere ait dalga boyları, geçiş enerjileri, ağırlıklı osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve seviye enerjileri hesaplandı. Sonuçlar tablolarda karşılaştırmalı olarak verildi.

MCHF yönteminin seçilen konfigürasyonlara bağlılığını incelemek için, gümüş atomu için $[Kr]4d^{10}$ özü dışında (valans korelasyonu) dört farklı konfigürasyon takımı ile hesaplama yapıldı. Birinci hesaplamada; çift parite için ns ($n = 5, 6, 7$), nd ($n = 5, 6$) ve $5g$, tek parite için $5p$, $6p$, $4f$ ve $5f$, ikinci hesaplamada; çift parite için $5s$, $5d$ ve $5g$, tek parite için $5p$, $4f$ ve $5f$, üçüncü hesaplamada; çift parite için ns ($n = 5, 6, 7$), $5d$ ve $6d$, tek parite için $5p$ ve $6p$, ve dördüncü hesaplamada; çift parite için $5s$, $6s$ ve $7s$, tek parite için $5p$ ve $6p$ konfigürasyonları kullanıldı. Yapılan hesaplamalarda, konfigürasyon seçimine bağlı olarak hesap sonuçlarında iyileştirme

olduğu görüldü. Tablo 3.1 ve Tablo 3.2’de çift ve tek pariteli haller için seviye enerjileri verildi. Tablolarda birinci sütunda tek pariteli haller ‘o’ üst indisi ile belirtildi. Ag I için yapılan; ‘1Ag’ üst indisi ile birinci hesaplama, ‘2Ag’ üst indisi ile ikinci hesaplama, ‘3Ag’ üst indisi ile üçüncü hesaplama ve ‘4Ag’ üst indisi ile dördüncü hesaplama sonuçları ikinci sütunda verildi. Enerji seviyelerine ait değerler $5s^2S_{1/2}$ (1Ag için -5305,82015127 a.b., 2Ag için -5305,81970978 a.b., 3Ag için -5305,82015127 a.b., 4Ag için -5305,82193448 a.b.) haline göredir ve cm^{-1} birimindedirler. Üçüncü sütunda karşılaştırma değerleri bulunmaktadır. Bazı karşılaştırma verileri uyumun sağlanması amacı ile cm^{-1} birimine çevrildi. Tabloların altında bu karşılaştırma kaynaklarının referans numaraları ve çevirileri olan değerlerin asıl birimleri belirtildi. Ayrıca, sonuçların sunumunda kısalık açısından ns veya np konfigürasyonu sadece başkuantum sayısını gösteren n ile temsil edildi.

Mümkün elektrik dipol (E1) geçişlerine ait geçiş enerjileri, dalga boyları, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıklarına ait sonuçlar Tablo 3.3’de verildi. Ag I için yapılan dört farklı hesap sonuçları seviye enerjisi tablosundaki gibi indislendi. Bu tabloda karşılaştırma değerleri, hesap sonuçlarının hemen altında indislenerek verildi. Tabloda birinci sütunda cm^{-1} biriminde geçiş enerjileri, ikinci sütunda Å biriminde dalga boyları, üçüncü sütunda ağırlıklı osilatör şiddetleri ve son sütunda da sn^{-1} biriminde geçiş olasılıklarına ait hesap sonuçları verildi. Bu tablodaki karşılaştırma değerlerinin bazıları osilatör şiddeti (f) ve yarı ömre (τ) aittir. Bunlar ağırlıklı osilatör şiddetine ve geçiş olasılıklarına çevrildi. Bu şekilde olan veriler tablo altında ilgili referans numaralarıyla verildi. Tabloda ‘a’ üst indisliyle indislenen gf değerleri $\log(gf)$ değerlerinden çevrildi. ‘c1’, ‘c2’, ‘d1’, ‘d2’, ‘e1’, ‘e2’, ‘f1’, ‘f2’, ‘h’, ‘j’, ‘m’, ‘n’, ‘o’, ‘p’, ‘q’, ‘t’, ‘v’, ‘y’ ve ‘w’ üst indisli ağırlıklı osilatör şiddeti (gf) değerleri, osilatör şiddeti (f) değerlerinden ve ‘h’, ‘j’, ‘r’, ‘v’ ve ‘z’ üst indisli geçiş olasılıkları değerleri yarı ömürden çevrildi. Tablolarda parantez içlerinde verilen değerler ise 10’un kuvvetlerini göstermektedir.

Elde edilen tüm veriler mevcut bazı deney ve teorik sonuçlarla karşılaştırıldığında, MCHF yaklaşığının Ag I’deki yüksekçe uyarılmış hallerine ne ölçüde

uygulanabilirliđi tablolarda açıkça görölmektedir. Ayrıca, karşılaşılan bazı az sayıda da olsa uyumsuz deđerlerin, MCHF yaklaşıklığının *LS* çiftlenim modeline göre olmasından kaynaklandığı düşünölmektedir. Fakat özellikle daha önceden gümüş ile ilgili çalışma sonuçlarının (hesap ve deney) az olması ve düşük seviyeler arasındaki geçişler ile ilgili olması nedeniyle, bu çalışmada elde edilen geniş sayıdaki hesap sonuçlarının özellikle astrofiziksel çalışmalara yardımcı veriler olacağı belirtilmelidir.

Tablo 3.1 Ag I'in ns ($n=5,6,7$), nd ($n=5,6$) ve $5g$ çift pariteli halleri için seviye enerjileri (cm^{-1})

Konfigürasyon	Enerjiler	
	$E_{bu\ çalışma}$	$E_{diğer\ çalışmalar}$
$5^2 S_{1/2}$	0,00 ^{1Ag} , 0,00 ^{2Ag} 0,00 ^{3Ag} , 0,00 ^{4Ag}	0,000 ^a , 0,000 ^b , 0,00 ⁱ¹ , 0,00 ^{j2} , 0,00 ^u , 0,00 ^l , 0,00 ^f
$5^2 G_{7/2}$	46890,30 ^{1Ag} 46793,41 ^{2Ag}	45987 ⁱ¹ , 53975 ^{j2} , 56711,1 ^l , 56711 ^u
$5^2 G_{9/2}$	46890,31 ^{1Ag} 46793,41 ^{2Ag}	56711 ^u , 45987 ⁱ¹ 53977 ^{j2} , 56711,1 ^l
$5^2 D_{3/2}$	46948,69 ^{1Ag} 46853,42 ^{2Ag} 46948,69 ^{3Ag}	48744,000 ^a , 48743,969 ^b 48744 ^u , 38394 ⁱ , 46082 ^{j2} 48744 ^l , 48717,432 ^f
$5^2 D_{5/2}$	46953,51 ^{1Ag} 46858,52 ^{2Ag} 46953,51 ^{3Ag}	48764,220 ^a , 48764,219 ^b , 48764 ^u , 38409 ⁱ¹ , 46104 ^{j2} , 48764,22 ^l , 48717,432 ^f
$6^2 D_{3/2}$	48269,86 ^{1Ag} 48269,86 ^{3Ag}	54203,130 ^a , 54203,119 ^b , 54203,13 ^l , 54121,518 ^f
$6^2 D_{5/2}$	48273,22 ^{1Ag} 48273,22 ^{3Ag}	54213,600 ^a , 54213,570 ^b , 54213,6 ^l , 54121,518 ^f
$7^2 S_{1/2}$	48710,38 ^{1Ag} 48710,38 ^{3Ag} 277264762,5 ^{4Ag}	51886,980 ^a , 51886,971 ^b , 51886,98 ^l , 51943,752 ^f
$6^2 S_{1/2}$	51676,53 ^{1Ag} 51676,53 ^{3Ag} 76111,31 ^{4Ag}	42556,150 ^a , 42556,152 ^b , 42556,15 ^l

^a Atomic Spectral Line database from R.L.Kurucz's CD-ROM 23 [34, cm^{-1}]

^b NIST Atomic Spectra Database [35, cm^{-1}]

^{j1} Safronova ve çalışma arkadaşları [13, cm^{-1}]

^{j2} Safronova ve çalışma arkadaşları [13, cm^{-1}]

^l Shenstone [16, cm^{-1}]

^u Moore [29, cm^{-1}]

^f Plekhotkina [25, eV]

Tablo 3.2 Ag I'in np ($n=5,6$) ve nf ($n=4,5$) tek pariteli halleri için seviye enerjileri (cm^{-1})

Konfigürasyon	Enerjiler	
	$E_{bu\ çalışma}$	$E_{diğer\ çalışmalar}$
$5^2 P_{1/2}^o$	24052,11 ^{1Ag} 23954,93 ^{2Ag} 24052,11 ^{3Ag} 83213,92 ^{4Ag}	29552,050 ^a , 29552,061 ^b , 29552 ^u , 23646 ^{l1} , 28073 ^{j2} , 29552,05 ^l , 29520,828 ^r
$5^2 P_{3/2}^o$	24551,77 ^{1Ag} 24454,55 ^{2Ag} 24551,77 ^{3Ag} 90393,35 ^{4Ag}	30472,710 ^a , 30472,703 ^b , 28946 ^{j2} , 30472 ^u , 24228 ^{j1} , 30472,71 ^l , 30488,724 ^r
$4^2 F_{5/2}^o$	43972,70 ^{1Ag} 43875,45 ^{2Ag}	54204,73 ^b , 54205 ^u , 43516 ^{j1} , 51475 ^{j2} , 54204,6 ^l
$4^2 F_{7/2}^o$	43972,70 ^{1Ag} 43875,46 ^{2Ag}	54204,73 ^b , 54205 ^u , 43516 ^{j1} , 51479 ^{j2} , 54204,6 ^l
$5^2 F_{5/2}^o$	46442,05 ^{1Ag} 46344,80 ^{2Ag}	56691 ^u , 45985 ^{j1} , 53955 ^{j2} , 56709,4 ^l
$5^2 F_{7/2}^o$	46442,06 ^{1Ag} 46344,81 ^{2Ag}	56691 ^u , 45985 ^{j1} , 53957 ^{j2} , 56709,4 ^l
$6^2 P_{1/2}^o$	49021,15 ^{1Ag} 49183,19 ^{3Ag} 34230,08 ^{4Ag}	48297,380 ^a , 48297,402 ^b , 48297,19 ^l
$6^2 P_{3/2}^o$	49022,44 ^{1Ag} 49184,09 ^{3Ag} 34766,66 ^{4Ag}	48500,770 ^a , 48500,805 ^b , 48500,6 ^l

^a Atomic Spectral Line database from R.L.Kurucz's CD-ROM 23 [34, cm^{-1}]

^b NIST Atomic Spectra Database [35, cm^{-1}]

^{j1} Safronova ve çalışma arkadaşları [13, cm^{-1}]

^{j2} Safronova ve çalışma arkadaşları [13, cm^{-1}]

^l Shenstone [16, cm^{-1}]

^u Moore [29, cm^{-1}]

^r Plekhotkina [25, eV]

Tablo 3.3 Ag I'in tek ve çift pariteli seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1) geçişleri için ΔE geçiş enerjileri (cm^{-1}), λ dalga boyları (\AA), gf ağırlıklı osilatör şiddetleri ve A_{ki} geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Konfigürasyon	ΔE	λ	gf	A_{ki}		
$5^2S_{1/2} - 5^2P_{3/2}^o$	24551,61 ^{1Ag}	4073,05 ^{1Ag}	1,48816 ^{1Ag}	1,49586(8) ^{1Ag}		
	24454,39 ^{2Ag}	4089,25 ^{2Ag}	1,49786 ^{2Ag}	1,49370(8) ^{2Ag}		
	24551,61 ^{3Ag}	4073,05 ^{3Ag}	1,48815 ^{3Ag}	1,49585(8) ^{3Ag}		
	90392,76 ^{4Ag}	1106,28 ^{4Ag}	8,76041(-1) ^{4Ag}	1,19364(9) ^{4Ag}		
	30472,710 ^a , 30472,703 ^b	3280,679 ^a , 3280,680 ^b , 4025 ^h , 3282 ⁱ , 3455 ^j , 3280,66 ^k , 3280,680 ^l , 3280,68 ^m , 3280,68 ⁿ , 3280,68 ^o , 3281 ^p , 3280,7 ^q , 3281,627 ^t , 3282 ^v , 3281 ^w	0,95122 ^a , 3,288 ^{e1} , 2,688 ^{c1} , 1,784 ^{c2} , 3,288 ^{d1} , 1,652 ^{d2} , 1,776 ^{e2} , 1,848 ^{f2} , 1,78 ^{f1} , 2,664 ^h , 2,0536 ^l , 2,054 ^m , 1,8 ⁿ , 1,836 ^o , 2,0 ^p , 1,76 ^q , 1,808 ^t , 1,58 ^t , 1,92 ^v , 1,56 ^w	1,380(8) ^a , 1,42(8) ^b , 1,36986(8) ^h , 1,3123(8) ^j , 1,424(8) ^o , 1,53(8) ^p , 1,37(8) ^q , 1,49253(8) ^z , 1,48809(8) ^v		
	$5^2S_{1/2} - 5^2P_{3/2}^o$	24051,95 ^{1Ag}	4157,67 ^{1Ag}	7,27691(-1) ^{1Ag}	1,40397(8) ^{1Ag}	
		23954,78 ^{2Ag}	4174,53 ^{2Ag}	7,33627(-1) ^{2Ag}	1,40401(8) ^{2Ag}	
		24051,95 ^{3Ag}	4157,67 ^{3Ag}	7,27691(-1) ^{3Ag}	1,40397(8) ^{3Ag}	
		83213,38 ^{4Ag}	1201,73 ^{4Ag}	3,28635(-1) ^{4Ag}	7,58946(8) ^{4Ag}	
		29552,050 ^a , 29552,061 ^b	3382,889 ^a , 3382,887 ^b , 4126 ^h , 3384 ⁱ , 3562 ^j , 3382,86 ^k , 3382,893 ^l , 3382,89 ^m , 3382,89 ⁿ , 3383,89 ^o , 3283,836 ^t , 3384 ^v , 3383 ^w	6,8591(-1) ^a , 6,58(-1) ^{c1} , 4,30(-1) ^{c2} , 8,06(-1) ^{d1} , 3,96(-1) ^{d2} , 4,26(-1) ^{e2} , 8,06 ^{e1} , 4,46(-1) ^{f2} , 4,28(-1) ^{f1} , 6,58(-1) ^h , 4,994(-1) ^j , 4,94(-1) ^m , 4,3(-1) ⁿ , 3,92(-1) ^o , 2,40(-1) ^t , 4,60(-1) ^v , 4,4(-1) ^w	1,223(8) ^a , 1,35(8) ^b , 1,28205(8) ^h , 1,4347(8) ^j , 1,143(8) ^o , 1,333(8) ^z , 1,3495(8) ^v	
		$5^2P_{1/2}^o - 5^2D_{3/2}$	22896,44 ^{1Ag}	4367,49 ^{1Ag}	7,88306(-2) ^{1Ag}	6,89145(6) ^{1Ag}
			22898,34 ^{2Ag}	4367,13 ^{2Ag}	8,27765(-2) ^{2Ag}	7,23762(6) ^{2Ag}
			22896,44 ^{3Ag}	4367,49 ^{3Ag}	7,88278(-2) ^{3Ag}	6,89122(6) ^{3Ag}
			19191,95 ^a , 19191,908 ^b	5209,068 ^a , 5209,078 ^b , 6741 ^h , 5211 ⁱ , 5209,04 ^k , 5209,078 ^l , 5209,07 ^f	1,04917 ^a , 2,408 ^{c1} , 2,232 ^{c2} , 3,528 ^{d1} , 2,248 ^{d2} , 2,2 ^{e2} , 3,528 ^{e1} , 2,332 ^{f2} , 2,256 ^{f1} , 2,844 ^h , 2,3092 ^j , 2,52 ^y	6,860(7) ^a , 0,75(8) ^b , 0,775(8) ^r

Tablo 3.3'ün devamı

Konfigürasyon	ΔE	λ	gf	A_{ki}
$5^2 P_{3/2}^o - 5^2 D_{5/2}$	22401,60 ^{1Ag}	4463,97 ^{1Ag}	1,38252(-1) ^{1Ag}	7,71291(6) ^{1Ag}
	22403,83 ^{2Ag}	4463,52 ^{2Ag}	1,45780(-1) ^{2Ag}	8,13451(6) ^{2Ag}
	22401,59 ^{3Ag}	4463,97 ^{3Ag}	1,38250(-1) ^{3Ag}	7,71281(6) ^{3Ag}
	18291,51 ^a , 18291,516 ^b	5465,498 ^a , 5465,497 ^b , 6998 ^h , 5467 ⁱ , 5465,47 ^k , 5465,503 ^l , 5465,49 ^f	1,385 ^a , 3,18 ^{c2} , 3,414 ^{c1} , 4,92 ^{d1} , 3,192 ^{d2} , 3,144 ^{e2} , 3,33 ^{f2} , 3,252 ^{f1} , 4,014 ^h , 3,294 ^j , 3,0 ^y , 4,92 ^{e1}	7,879(7) ^a , 0,86(8) ^b , 0,746(8) ^f
$5^2 P_{3/2}^o - 5^2 D_{3/2}$	22396,78 ^{1Ag}	4464,93 ^{1Ag}	1,54256(-2) ^{1Ag}	1,29031(6) ^{1Ag}
	22398,72 ^{2Ag}	4464,54 ^{2Ag}	1,61941(-2) ^{2Ag}	1,35483(6) ^{2Ag}
	22396,78 ^{3Ag}	4464,93 ^{3Ag}	1,54254(-2) ^{3Ag}	1,29029(6) ^{3Ag}
	18301,29 ^a	5471,547 ^a , 5471,52 ^k , 5471,547 ^l	5,3472(-2) ^a , 0,254 ^{c1} , 0,2368 ^{c2} , 0,364 ^{d1} , 0,24 ^{d2} , 0,2344 ^{e2} , 0,366 ^{e1} , 0,224 ^{f2} , 0,244 ^{f1} , 0,2452 ^j , 0,244 ^y	1,317(7) ^a
$5^2 P_{1/2}^o - 6^2 D_{3/2}$	24217,59 ^{1Ag}	4129,23 ^{1Ag}	4,29447(-2) ^{1Ag}	4,20002(6) ^{1Ag}
	24217,59 ^{3Ag}	4129,23 ^{3Ag}	4,29540(-2) ^{3Ag}	4,20094(6) ^{3Ag}
	24651,08 ^a	4055,472 ^a , 4055,27 ^k , 4055,476 ^l , 4055,46 ^f	5,26238(-2) ^a , 5,32(-1) ^{c1} , 4,56(-2) ^{c2} , 4,48(-1) ^{e2} , 6,2(-1) ^{e1}	2,311(7) ^a , 3,31(7) ^f
$5^2 P_{3/2}^o - 6^2 D_{5/2}$	23721,30 ^{1Ag}	4215,62 ^{1Ag}	7,64047(-2) ^{1Ag}	4,77954(6) ^{1Ag}
	23721,30 ^{3Ag}	4215,62 ^{3Ag}	7,64099(-2) ^{3Ag}	4,77987(6) ^{3Ag}
	23740,89 ^a	4210,956 ^a , 4210,94 ^k , 4210,960 ^l , 4210,94 ^f	6,83177(-2) ^a , 7,14(-1) ^{c1} , 6,24(-1) ^{c2} , 6,06(-1) ^{e2} , 8,22(-1) ^{e1}	2,606(7) ^a , 3,22(7) ^f
$5^2 P_{3/2}^o - 6^2 D_{3/2}$	23717,94 ^{1Ag}	4216,22 ^{1Ag}	8,41668(-3) ^{1Ag}	7,89542(5) ^{1Ag}
	23717,93 ^{3Ag}	4216,22 ^{3Ag}	8,41725(-3) ^{3Ag}	7,89595(5) ^{3Ag}
	23730,42 ^a	4212,814 ^a , 4212,68 ^k , 4212,817 ^l , 4212,68 ^f	0,26368 ^a , 5,32(-2) ^{c1} , 4,64(-2) ^{c2} , 4,48(-2) ^{e2} , 6,08(-2) ^{e1}	4,362(6) ^a

Tablo 3.3'ün devamı

Konfigürasyon	ΔE	λ	gf	A_{ki}
$5^2 S_{1/2} - 6^2 P_{3/2}^o$	49022,13 ^{1Ag}	2039,90 ^{1Ag}	3,03804 ^{1Ag}	1,21747(9) ^{1Ag}
	49183,78 ^{3Ag}	2033,19 ^{3Ag}	3,05594 ^{3Ag}	1,23273(9) ^{3Ag}
	34766,44 ^{4Ag}	2876,34 ^{4Ag}	2,22210 ^{4Ag}	4,47882(8) ^{4Ag}
	48500,770 ^a	2061,164 ^a , 2061,21 ^k , 2061,830 ^l , 2061,827 ^t	0,12625 ^a , 1,156(-1) ^{e1} , 1,08(-2) ^{e2} , 1,58(0) ^t	3,528(6) ^a
$5^2 S_{1/2} - 6^2 P_{1/2}^o$	49021,25 ^{1Ag}	2039,93 ^{1Ag}	1,52153 ^{1Ag}	1,21944(9) ^{1Ag}
	49182,90 ^{3Ag}	2033,23 ^{3Ag}	1,53048 ^{3Ag}	1,23471(9) ^{3Ag}
	34229,86 ^{4Ag}	2921,43 ^{4Ag}	1,12459 ^{4Ag}	4,39454(8) ^{4Ag}
	48297,380 ^a	2069,845 ^a , 2069,81 ^k , 2070,514 ^l , 2070,511 ^t	7,008(-2) ^a , 7,86(-4) ^{e2} , 2,2(-2) ^{e1} , 1,928 ^t	1,710(6) ^a
$5^2 P_{3/2}^o - 6^2 S_{1/2}$	27124,58 ^{1Ag}	3686,69 ^{1Ag}	2,10727(-2) ^{1Ag}	5,17080(6) ^{1Ag}
	27124,57 ^{3Ag}	3686,69 ^{3Ag}	2,11151(-2) ^{3Ag}	5,18119(6) ^{3Ag}
	14281,95 ^{4Ag}			
	-	8273,515 ^a , 8273,509 ^b , 8273,73 ^k , 8273,519 ^l	0,83694 ^a , 3,08(-1) ^{c1} , 0,332 ^{c2} , 3,32(-1) ^{e2} , 4,48(-1) ^{e1} , 3,40(-1) ^{f2} , 3,40(-1) ^{f1} , 3,0(-2) ^y	3,232(7) ^a
$5^2 P_{1/2}^o - 6^2 S_{1/2}$	27624,23 ^{1Ag}	3620,01 ^{1Ag}	1,52664(-2) ^{1Ag}	3,88532(6) ^{1Ag}
	27624,23 ^{3Ag}	3620,01 ^{3Ag}	1,52667(-2) ^{3Ag}	3,88540(6) ^{3Ag}
	-	7687,766 ^a , 7687,772 ^b , 7688,12 ^k , 7687,779 ^l	6,0471(-2) ^a , 2,90(-1) ^{c1} , 3,14(-1) ^{c2} , 3,14(-1) ^{e2} , 4,32(-1) ^{e1} , 3,22(-1) ^{f2} , 3,22(-1) ^{f1} , 2,80(-1) ^y	1,771(7) ^a
$5^2 P_{1/2}^o - 7^2 S_{1/2}$	311,19 ^{1Ag}	4055,46 ^{1Ag}	8,86831(-3) ^{1Ag}	1,79833(6) ^{1Ag}
	472,84 ^{3Ag}	4055,46 ^{3Ag}	8,86799(-3) ^{3Ag}	1,79827(6) ^{3Ag}
	----- ^{4Ag}	0,36 ^{4Ag}	2,24090(2) ^{4Ag}	5,74189(18) ^{4Ag}
	22334,93 ^a	4476,036 ^a , 4476,06 ^k , 4476,042 ^l	2,2313(-2) ^a , 3,0(-2) ^{c1} , 3,16(-2) ^{c2} , 3,32(-2) ^{e2} , 3,36(-2) ^{e1}	5,261(6) ^a

Tablo 3.3'ün devamı

Konfigürasyon	ΔE	λ	gf	A_{ki}
$5^2 P_{3/2}^o - 7^2 S_{1/2}$	24158,45 ^{1Ag}	4139,34 ^{1Ag}	1,80836(-2) ^{1Ag}	3,51993(6) ^{1Ag}
	24158,45 ^{3Ag}	4139,34 ^{3Ag}	1,80797(-2) ^{3Ag}	3,51917(6) ^{3Ag}
	----- ^{4Ag}	0,36 ^{4Ag}	4,57848(2) ^{4Ag}	1,17309(19) ^{4Ag}
	21414,27 ^a	4668,476 ^a , 4668,50 ^k , 4668,478 ^l , 4668,48 ^f	0,29730 ^a , 2,92(-2) ^{c1} , 3,06(-2) ^{c2} , 3,16(-2) ^{e2} , 3,18(-2) ^{e1}	9,365(6) ^a , 0,240(8) ^f
$6^2 P_{1/2}^o - 6^2 S_{1/2}$	2654,94 ^{1Ag}	37665,65 ^{1Ag}	5,35350(1) ^{1Ag}	1,25851(8) ^{1Ag}
	2493,29 ^{3Ag}	40107,69 ^{3Ag}	5,03765(1) ^{3Ag}	1,04444(8) ^{3Ag}
	41880,96 ^{4Ag}	2387,72 ^{4Ag}	3,59998(-1) ^{4Ag}	2,10593(8) ^{4Ag}
	-	17416,7 ^l	-	-
$6^2 P_{3/2}^o - 6^2 S_{1/2}$	2654,06 ^{1Ag}	37678,14 ^{1Ag}	1,07035(2) ^{1Ag}	2,51454(8) ^{1Ag}
	2492,41 ^{3Ag}	40121,81 ^{3Ag}	1,00718(2) ^{3Ag}	2,08669(8) ^{3Ag}
	41344,37 ^{4Ag}	2418,71 ^{4Ag}	3,32966(-1) ^{4Ag}	1,89821(8) ^{4Ag}
	-	16819,5 ^l	-	-
$5^2 D_{3/2} - 6^2 P_{1/2}^o$	2072,86 ^{1Ag}	48242,58 ^{1Ag}	1,29752(-4) ^{1Ag}	1,85936(2) ^{1Ag}
	2234,51 ^{3Ag}	44752,57 ^{3Ag}	1,70263(-4) ^{3Ag}	2,83527(2) ^{3Ag}
	-	-	-	-
$5^2 D_{3/2} - 6^2 P_{3/2}^o$	2073,74 ^{1Ag}	48222,11 ^{1Ag}	2,56367(-5) ^{1Ag}	1,83844(1) ^{1Ag}
	2235,39 ^{3Ag}	44734,99 ^{3Ag}	3,36819(-5) ^{3Ag}	2,80661(1) ^{3Ag}
	-	-	-	-
$4^2 F_{7/2}^o - 5^2 G_{9/2}$	2917,58 ^{1Ag}	34274,95 ^{1Ag}	1,23511(1) ^{1Ag}	7,01280(6) ^{1Ag}
	2917,94 ^{2Ag}	34270,80 ^{2Ag}	1,23526(1) ^{2Ag}	7,01539(6) ^{2Ag}
	-	40450 ^h , 39900 ⁱ	1,308(1) ^h , 1,3405(1) ^j	-
$4^2 F_{7/2}^o - 5^2 G_{7/2}$	2917,58 ^{1Ag}	34274,97 ^{1Ag}	3,52887(-1) ^{1Ag}	2,50457(5) ^{1Ag}
	2917,93 ^{2Ag}	34270,82 ^{2Ag}	3,52932(-1) ^{2Ag}	2,50549(5) ^{2Ag}
	-	-	3,064(-1) ^j	-
$4^2 F_{5/2}^o - 5^2 G_{7/2}$	2917,59 ^{1Ag}	34274,90 ^{1Ag}	9,52793 ^{1Ag}	6,76234(6) ^{1Ag}
	2917,94 ^{2Ag}	34270,72 ^{2Ag}	9,52915 ^{2Ag}	6,76485(6) ^{2Ag}
	-	40450 ^h , 39900 ⁱ	10,768 ^h , 11,04 ^j	-

Tablo 3.3'ün devamı

Konfigurasyon	ΔE	λ	gf	A_{ki}
$4^2 F_{7/2}^o - 5^2 D_{5/2}$	2980,78 ^{1Ag} 2983,05 ^{2Ag}	33548,21 ^{1Ag} 33522,77 ^{2Ag}	8,16964(-2) ^{1Ag} 8,40720(-2) ^{2Ag}	8,06963(4) ^{1Ag} 8,31689(4) ^{2Ag}
-	-	19570 ^h	6,09 ^h , 5,8068 ^j	-
$4^2 F_{5/2}^o - 6^2 D_{3/2}$	4297,13 ^{1Ag}	23271,33 ^{1Ag}	1,22411(-2) ^{1Ag}	3,76927(4) ^{1Ag}
-	-	-	-	-
$4^2 F_{7/2}^o - 6^2 D_{5/2}$	4300,49 ^{1Ag}	23253,16 ^{1Ag}	1,77787(-2) ^{1Ag}	3,65531(4) ^{1Ag}
-	-	-	-	-
$5^2 F_{5/2}^o - 6^2 D_{3/2}$	1827,79 ^{1Ag}	54710,78 ^{1Ag}	8,77627(-2) ^{1Ag}	4,88928(4) ^{1Ag}
-	-	-	-	-
$4^2 F_{5/2}^o - 5^2 D_{3/2}$	2975,98 ^{1Ag} 2977,95 ^{2Ag}	33602,42 ^{1Ag} 33580,13 ^{2Ag}	5,72257(-2) ^{1Ag} 5,87456(-2) ^{2Ag}	8,45143(4) ^{1Ag} 8,68742(4) ^{2Ag}
-	-	19320 ^h	4,292 ^h , 4,0472 ^j	-
$5^2 F_{5/2}^o - 5^2 D_{3/2}$	506,64 ^{1Ag} 508,61 ^{2Ag}	197379,92 ^{1Ag} 196613,37 ^{2Ag}	3,35300 ^{1Ag} 3,34193 ^{2Ag}	1,43519(5) ^{1Ag} 1,44162(5) ^{2Ag}
-	-	-	-	-
$5^2 D_{5/2} - 6^2 P_{3/2}^o$	2068,92 ^{1Ag} 2230,57 ^{3Ag}	48334,34 ^{1Ag} 44831,57 ^{3Ag}	2,27589(-4) ^{1Ag} 3,00152(-4) ^{3Ag}	1,62450(2) ^{1Ag} 2,49032(2) ^{3Ag}
-	-	-	-	-
$4^2 F_{5/2}^o - 5^2 D_{5/2}$	511,45 ^{1Ag} 513,72 ^{2Ag}	33548,14 ^{1Ag} 33522,67 ^{2Ag}	4,08453(-3) ^{1Ag} 4,20331(-3) ^{2Ag}	4,03454(3) ^{1Ag} 4,15818(3) ^{2Ag}
-	-	-	2,904(-1) ^j	-
$4^2 F_{5/2}^o - 6^2 D_{5/2}$	4300,50 ^{1Ag}	23253,13 ^{1Ag}	8,88949(-4) ^{1Ag}	1,82769(3) ^{1Ag}
-	-	-	-	-
$5^2 F_{7/2}^o - 5^2 G_{9/2}$	448,25 ^{1Ag} 448,60 ^{2Ag}	223091,68 ^{1Ag} 222914,86 ^{2Ag}	3,06595 ^{1Ag} 3,06834 ^{2Ag}	4,10903(4) ^{1Ag} 4,11875(4) ^{2Ag}
-	-	4(7) ^h	0,002(1) ^h	-

Tablo 3.3'ün devamı

Konfigurasyon	ΔE	λ	gf	A_{ki}
$5^2 F_{7/2}^o - 5^2 G_{7/2}$	448,24 ^{1Ag} 448,60 ^{2Ag}	223092,77 ^{1Ag} 222915,95 ^{2Ag}	8,75982(-2) ^{1Ag} 8,76664(-2) ^{2Ag}	1,46749(3) ^{1Ag} 1,47096(3) ^{2Ag}
-	-	-	-	-
$5^2 F_{5/2}^o - 5^2 G_{7/2}$	448,25 ^{1Ag} 448,60 ^{2Ag}	223090,59 ^{1Ag} 222913,77 ^{2Ag}	2,36518 ^{1Ag} 2,36702 ^{2Ag}	3,96235(4) ^{1Ag} 3,97173(4) ^{2Ag}
-	-	4(7) ^h	0,024 ^h	-
$5^2 F_{7/2}^o - 5^2 D_{5/2}$	511,45 ^{1Ag} 513,71 ^{2Ag}	195523,29 ^{1Ag} 194661,23 ^{2Ag}	4,83795 ^{1Ag} 4,82206 ^{2Ag}	1,40687(5) ^{1Ag} 1,41469(5) ^{2Ag}
-	-	-	-	-
$5^2 F_{5/2}^o - 5^2 D_{5/2}$	511,45 ^{1Ag} 513,72 ^{2Ag}	195521,61 ^{1Ag} 194659,56 ^{2Ag}	2,41900(-1) ^{1Ag} 2,41105(-1) ^{2Ag}	7,03453(3) ^{1Ag} 7,07366(3) ^{2Ag}
-	-	-	-	-
$5^2 F_{7/2}^o - 6^2 D_{5/2}$	1831,15 ^{1Ag}	54610,39 ^{1Ag}	1,16779(-1) ^{1Ag}	4,35316(4) ^{1Ag}
-	-	-	-	-
$5^2 F_{5/2}^o - 6^2 D_{5/2}$	1831,16 ^{1Ag}	54610,26 ^{1Ag}	5,83897(-3) ^{1Ag}	2,17659(3) ^{1Ag}
-	-	-	-	-
$6^2 D_{3/2} - 6^2 P_{3/2}^o$	752,58 ^{1Ag} 914,23 ^{3Ag}	132875,99 ^{1Ag} 109381,63 ^{3Ag}	3,22279(-5) ^{1Ag} 2,20655(-5) ^{3Ag}	3,04382 ^{1Ag} 3,07543 ^{3Ag}
-	-	-	-	-
$6^2 D_{3/2} - 6^2 P_{1/2}^o$	751,70 ^{1Ag} 913,35 ^{3Ag}	133031,56 ^{1Ag} 109486,77 ^{3Ag}	1,61736(-4) ^{1Ag} 1,10934(-4) ^{3Ag}	3,04795(1) ^{1Ag} 3,08639(1) ^{3Ag}
-	-	-	-	-
$6^2 D_{5/2} - 6^2 P_{3/2}^o$	749,22 ^{1Ag} 910,87 ^{3Ag}	133472,70 ^{1Ag} 109785,66 ^{3Ag}	2,89698(-4) ^{1Ag} 1,98811(-4) ^{3Ag}	2,71170(1) ^{1Ag} 2,75061(1) ^{3Ag}
-	-	-	-	-
$6^2 S_{1/2} - 5^2 P_{3/2}^o$	14281,95 ^{4Ag}	7001,85 ^{4Ag}	1,73620(1) ^{4Ag}	5,90548(8) ^{4Ag}
-	-	-	-	-
$6^2 P_{3/2}^o - 7^2 S_{1/2}$	----- ^{4Ag}	0,36 ^{4Ag}	3,19117(1) ^{4Ag}	8,17966(17) ^{4Ag}
-	-	-	-	-

Tablo 3.3'ün devamı

Konfigurasyon	ΔE	λ	gf	A_{ki}
$6^2P_{1/2}^o - 7^2S_{1/2}$	----- ^{4Ag}	0,36 ^{4Ag}	2,07969(1) ^{4Ag}	5,33072(17) ^{4Ag}
	-	-	-	-
$6^2S_{1/2} - 5^2P_{1/2}^o$	7102,57 ^{4Ag}	14079,41 ^{4Ag}	4,28471 ^{4Ag}	7,20880(7) ^{4Ag}
	13004,1 ^a	-	-	-
	13004,091 ^b	-	-	-
$7^2S_{1/2} - 6^2P_{3/2}^o$	312,07 ^{1Ag}	320443,74 ^{1Ag}	1,26974(-1) ^{1Ag}	2,06202(3) ^{1Ag}
	473,72 ^{3Ag}	211096,89 ^{3Ag}	1,93350(-1) ^{3Ag}	7,23535(3) ^{3Ag}
	-	-	-	-
$7^2S_{1/2} - 6^2P_{1/2}^o$	311,19 ^{1Ag}	321350,01 ^{1Ag}	6,33127(-2) ^{1Ag}	2,04477(3) ^{1Ag}
	472,84 ^{3Ag}	211488,82 ^{3Ag}	9,65025(-2) ^{3Ag}	7,19572(3) ^{3Ag}
	-	-	-	-

^a Atomic Spectral Line database from R.L.Kurucz's CD-ROM 23 [34, log(gf)]

^b NIST Atomic Spectra Database [35]

^{c1} Migdalek [1, f]

^{c2} Migdalek [1, f]

^{d1} Migdalek ve Baylis [2, f]

^{d2} Migdalek ve Baylis [2, f]

^{e1} Migdalek ve Baylis [4, f]

^{e2} Migdalek ve Baylis [4, f]

^{f1} Migdalek ve Garmulewicz [10, f]

^{f2} Migdalek ve Garmulewicz [10, f]

^h Cheng ve Kim [11, f, τ (ns)]

ⁱ Moore [30]

^j Safronova ve çalışma arkadaşları [13, f, τ (ns)]

^k Blair [14]

^l Shenstone [16]

^m Penkin ve Slavenas [19, f]

ⁿ Lawrence ve çalışma arkadaşları [20, f]

^o Moise [21, f]

^p Klose [23, f]

^q Selter ve Kunze [24, f]

^r Plekhotkina [25, τ (ns)]

^t Verner ve çalışma arkadaşları [26, f]

^v Carlsson ve çalışma arkadaşları [31, f, τ (ns)]

^y Zhankui ve çalışma arkadaşları [32, f]

^z Cunningham ve Link [33, τ (ns)]

^w Hinnov ve Kohn [18, f]

KAYNAKLAR

- [1] MIGDALEK J., “Relativistic oscillator strengths for some transitions in Cu(I), Ag(I) and Au(I)”, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Vol. 20, pp. 81-87, 1978.
- [2] MIGDALEK J., BAYLIS W.E., “Influence of atomic core polarization on oscillator strengths for ${}^2S_{1/2} - {}^2P_{1/2,3/2}$ and ${}^2P_{1/2,3/2} - {}^2D_{3/2,5/2}$ transitions in Cu I, Ag I and Au I spectra” J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., Vol. 11, pp. L497-L501, 1978.
- [3] MIGDALEK J., BAYLIS W.E., “Relativistic Hartree-Fock oscillator strengths for the lowest $s \rightarrow p$ and $p \rightarrow d$ transitions in the first few members of the Ag(I) and Au(I) isoelectronic sequences, with allowance for core polarization”, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Vol. 22, pp. 113-125, 1979.
- [4] MIGDALEK J., BAYLIS W.E., “Relativistic Hartree-Fock and model-potential ionization energies and oscillator strengths for transitions in the principal, sharp, and diffuse series of neutral rubidium and silver with allowance for core polarization”, Can. J. Phys., Vol. 57, pp. 1708-1718, 1979.
- [5] MIGDALEK J., BAYLIS W.E., “Local approximations for the exchange interaction between valence and core electrons”, Physical Review A, Vol. 22, pp. 22-27, 1980.
- [6] MIGDALEK J., BAYLIS W.E., “Nonadjustable local model potentials for the exchange interaction between valence and core electrons”, Physical Review A, Vol. 24, pp. 649-655, 1981.
- [7] MIGDALEK J., BAYLIS W.E., “Adjustable local approximations for the exchange interaction between valence and core electrons in model-potential calculations”, Physical Review A, Vol. 24, pp. 2228-2231, 1981.
- [8] MIGDALEK J., BANASIŃSKA E., “Implicit and explicit treatment of valence-core electron exchange and core polarization in model potentials”, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Vol. 39, pp. 409-414, 1988.

- [9] MIGDALEK J., BANASIŃSKA E., “Single-and multiparameter model potentials in calculations of energies and oscillator strengths for Pb I and Ag I” , J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Vol. 48, pp. 341-347, 1992.
- [10] MIGDALEK J., GARMULEWICZ M., “The relativistic *ab initio* model potential versus Dirac-Fock oscillator strengths for silver and gold isoelectronic sequences”, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. .Phys., Vol. 33, pp. 1735-1743, 2000.
- [11] CHENG K.-T., KIM Y.-Ki, “Excitation energies and oscillator strengths in the silver isoelectronic sequence”, J. Opt. Soc. Am., Vol. 69, pp. 125 -131, 1979.
- [12] CHOU H.-S., JOHNSON W.R., “Relativistic many-body perturbation-theory calculations of transition rates for copperlike, silverlike and goldlike ions”, Physical Review A, Vol. 56, pp. 2424-2427, 1997.
- [13] SAFRONOVA U.I., SAVUKOV I.M., SAFRONOVA M.S., JOHNSON W.R., “Third-order relativistic many-body calculations of energies and lifetimes of levels along the silver isoelectronic sequence”, Physical Review A, Vol. 68, pp. 062505-062514, 2003.
- [14] BLAIR H.A., “Correction and extension of the series of the silver arc spectrum, Ag I”, Physical Review, Vol. 36, pp. 1531-1534, 1930.
- [15] PAUL F.W., “Absorption spectra of manganese and silver in the Schumann region” Physical Review, Vol. 52, pp. 923-929, 1937.
- [16] SHENSTONE A.G., “The arc spectrum of silver”, Physical Review, Vol. 57, pp. 894-898, 1940.
- [17] RASMUSSEN E., “New energy levels in the silver atom”, Physical Review, Vol. 57, 243-243, 1940.
- [18] HINNOV E., KOHN H. , “Optical cross sections from intensity-density measurements”, J. Opt. Soc. Am., Vol. 47, pp. 156-162, 1957.
- [19] PENKIN N.P., SLAVENAS I.-Yu.Yu., “Absolute oscillator strengths of the resonance doublets of Ag I and Au I”, Opt. Spectrosc., Vol. 15, pp. 3-5, 1963.
- [20] LAWRENCE G.M., LINK J.K., KING R.B., “The absolute oscillator strengths of lines in the spectra of ten elements”, Astrophys. J., Vol. 141, pp. 293-307, 1965.
- [21] MOISE N.L., “Absolute transition rates of atomic transitions of copper, silver and gold”, Astrophys. J., Vol. 144, pp. 774-781, 1966.

- [22] ANDERSEN T., JESSEN K.A., SØRENSEN G., “Atomic lifetime measurements in elements ($Z > 10$) belonging to the first, second and third group of the periodic system”, Nuclear Instruments and Methods, Vol. 90, pp. 35-39, 1970.
- [23] KLOSE J.Z., “Mean life of the $5p^2P_{3/2}$ resonance level in Ag I”, Astrophys. J., Vol. 198, pp. 229-233, 1975.
- [24] SELTER K.P., KUNZE H.-J., “Radiative lifetimes of resonance levels of Al I and Ag I by dye laser excitation”, Astrophysical J., Vol. 221, pp. 713-716, 1978.
- [25] PLEKHOTKINA G.L., “Radiative lifetimes of Ag I and Ag II”, Opt. Spectrosc. Vol. 51, pp. 106-107, 1981.
- [26] VERNER D.A., BARTHEL P.D., TYTLER D., “Atomic data for absorption lines from the ground level at wavelengths greater than 228 Å”, Astronomy & Astrophysics Supplement Series, Vol. 108, pp. 287-340, 1994.
- [27] FISCHER C.F., BRAGE T., JOHNSON P., “Computational atomic structure-an MCHF approach”, Bristol and Philadelphia, Institute of Physics Publishing, 1997.
- [28] FISCHER C.F., “The MCHF atomic-structure package” Computer Physics Communications, Vol. 64, pp. 369-398, 1991.
- [29] MOORE C.E., “Atomic energy levels”, NSRDS-NBS 35, U.S. Government Printing Office, Washington, D.C. , Vol. III, 1971.
- [30] MOORE C.E., “Atomic energy levels”, Circular of the National Bureau of Standards, Vol III, pp. 497, 1958.
- [31] CARLSSON J., JONSSON P., STURESSON L., “ Accurate time-resolved laser spectroscopy on silver atoms”, Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters, Vol. 16, pp. 87-90, 1990.
- [32] ZHANKUI J., JONSSON P., LARSSON J., SVANBERG S., “ Studies on radiative lifetimes in the $4d^{10}ns^2S$ and $4d^{10}nd^2D$ sequences of neutral silver”, Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters, Vol. 17, pp. 1-4, 1990.
- [33] CUNNINGHAM P.T., LINK J.K., “Measurement of lifetimes of excited states of Na, Tl, In, Ga, Cu, Ag, Pb and Bi by the phase-shift method”, J. Opt. Soc. Am., Vol. 57, pp. 1000-1007, 1967.
- [34] <http://www.pmp.uni-hannover.de/cgi-bin/ssi/test/kurucz/sekur.html>, Peter L., Smith, Claas Heise, Jim R.Esmond, Robert L.Kurucz, 1995.

- [35] <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.html>, Martin W.C., Sugar J. Fuhr J.R, 2005.

ÖZGEÇMİŞ

1982 yılında Trabzon'da doğdu. İlk ve orta öğrenimini Şanlıurfa'da, lise öğrenimini Sakarya'da tamamladı. 2000'de Sakarya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünü kazandı. 2001'de Çift Anadal olarak Sakarya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümünde öğrenim görmeye başladı. 2003-2004 öğretim yılında Sakarya Üniversitesi Lisans Birincisi olarak Fizik ve Matematik bölümlerinden mezun oldu ve 2004'de Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalında Yüksek Lisansa başladı. 2005 yılında Sakarya Üniversitesinde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başladı. Halen aynı üniversitede Yüksek Lisans eğitime ve görevine devam etmektedir.