

Karbon Atomunda Geçiş Olasılıklarının ve Osilatör Şiddetlerinin Hesaplanması

Gökhan TEKELİ, Şule ATEŞ, Gültekin ÇELİK*, Mehmet TAŞER

Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 42031, Konya.

Özet: Bu çalışmada, Karbon atomunda bazı multiyet ve ince yapı seviyeleri arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi kullanılarak hesaplandı. Geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin hesaplanması için gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde, iyonlaşma enerjileri literatürdeki deneysel enerji verilerinden alındı ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri Sayısal Coulomb Yaklaşımı (NCA) ve nümerik non-relativistik Hartree-Fock (NRHF) dalga fonksiyonları kullanılarak elde edildi. Bu çalışmada elde edilen osilatör şiddetleri sonuçlarının kabul edilen değerlerle iyi uyumlu olduğu görüldü.

Anahtar Kelimeler: Osilatör şiddeti, Geçiş olasılığı, En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi, Karbon atomu

The Calculation of Transition probabilities and Oscillator Strengths in Carbon Atom

Abstract: In this study, the electric dipole transition probabilities and oscillator strengths have been calculated between some multiplet and individual lines in carbon atom using the weakest bound electron potential model theory. In the determination of parameters needed for calculation of transition probabilities and oscillator strengths, ionization energies have been taken from experimental energy data in the literature and the expectation values of radii belong to levels have been obtained using Numerical Coulomb Approximation (NCA) and numerical non-relativistic Hartree-Fock (NRHF) wave functions. The results of oscillator strengths obtained from this study have been observed good agreement with accepted values.

Key Words: Oscillator Strength, Transition probability, Weakest Bound Electron Potential Model Theory, Carbon Atom

Giriş

Atomların ve moleküllerin temel ya da uyarılmış seviyedeki durumlarını tanımlayan birçok spektroskopik parametre fiziksel ve kimyasal açıdan birçok özelliğin belirlenmesinde önemli bir rol oynamaktadır. Astrofizik, plazma fiziği, termonükleer füzyon araştırmaları, lazerlerle izotop ayırma ve laser sistemlerinin geliştirilmesi gibi birçok alanda atomların uyarılmış seviyedeki kalma süreleri, geçiş olasılıkları ve osilatör şiddeti gibi spektroskopik özellikleri oldukça önemlidir [1]. Geçiş olasılıkları atomik spektroskopide belki de en önemli parametredir. Geçiş olasılığı değerleri, sıcaklık ve atomik konsantrasyon gibi birçok kritik ölçümün doğruluğunu test etmek ve analizini yapmak için kullanılan geçişlerin seçiminde önemli rol oynar. Güneş ışığından bize ulaşan soğurma çizgilerinin ince yapı çizgileri arasındaki geçiş olasılıkları uzak yıldızlarla ilgili çok önemli bilgiler içerir. Ayrıca uzak gezegenlerde bulunan madde miktarı, güçlü

*gcelik@selcuk.edu.tr

olarak geçiş olasılıklarına bağlıdır. Geçiş olasılığı ve osilatör şiddeti atomik yapı hesaplamaları ve spektroskopide hem atomik özelliklerin belirlenmesinde hem de deneysel verilerin yorumlanmasında önemli bir rol oynamaktadır. Karbon, azot ve oksijen gibi hafif elementlerin spektroskopik özellikleri fizikte ve astronomide geniş uygulama alanı bulmaktadır. Bu nedenle Karbon atomunun osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları birçok araştırmacı tarafından yoğun olarak çalışılmaktadır. Bu çalışmada, Karbon atomunun bazı multipler ve ince yapı seviyeleri arasındaki osilatör şiddetleri, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak karmaşık hesaplamalara girmeden kısa bir hesaplama süreci içerisinde belirlenmiştir.

Materyal ve Metot

Atomlar ve moleküller gibi kuantum sistemleri için iyonlaşma potansiyeli sisteme en zayıf bağlı elektronun, bulunduğu temel seviyeden tamamen koparılması için dışarıdan verilmesi gereken minimum enerji olarak tanımlanmaktadır. Bu durum, teori olarak ilk defa Zheng tarafından ortaya atılmıştır [1-6].

Atomik ve moleküler sistemlerde birçok fiziksel ve kimyasal özellik sistemdeki en zayıf bağlı elektronla ilgilidir. Zheng en zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride, çok elektronlu sistemlerde, mevcut elektronları sisteme en zayıf bağlı bir elektron ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar olarak iki kısma ayırıp seçilen sistemde en zayıf bağlı elektronun durumunu tek elektron problemine benzetmektedir [1,6-11]. Böyle bir düşünceye örnek olarak $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$ elektronik konfigürasyonuna sahip Kripton atomu verilebilir. Bu konfigürasyondaki altı adet p elektronu özdeştir ve bunları birbirinden ayırt etmek mümkün değildir. Böyle bir sistemde uyarma ya da iyonlaşma işlemi ilk önce bu p elektronları uyarılacak ya da iyonlaşacaktır. Bu sebepten dolayı ilk uyarılmış ya da iyonize olmuş elektron nötral Kripton atomunun en zayıf bağlı elektronu olacaktır. (Ar) $4s^2 3d^{10} 4p^5 ns$ ($n > 5$) konfigürasyonunda ns elektronu en zayıf bağlı elektron olarak tanımlanırken diğer $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$ ve $4p^5$ elektronları en zayıf bağlı olmayan elektronlar olarak göz önüne alınmaktadır. En zayıf bağlı olmayan elektronlar ve çekirdek bir iyon çekirdeği gibi davranabilir ve en zayıf bağlı elektron, bu iyon çekirdeğin ortalama potansiyelinde hareket eder. Bu yüzden çok valans elektronuna sahip sistemler tek elektronlu sistemler gibi davranabilmektedir [12].

Bu yöntemle göre çok elektronlu bir sistemde sisteme en zayıf bağlı elektron çekirdek ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar tarafından oluşturulan bir potansiyel alanda hareket eder. Bu durumda toplam potansiyel fonksiyonu,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} - \frac{\beta}{r_i^2} \quad (1)$$

olarak verilir. Burada β parametresi,

$$\beta = \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2} \quad (2)$$

olarak verilir. Bu durumda potansiyel,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2r_i^2} \quad (3)$$

biçiminde yeniden yazılabilir [12-14]. Bu potansiyele göre Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \frac{-Z^*}{r_i} + \frac{d(d+1) + 2dl}{2r_i^2} \right] \psi_i = \epsilon_i \psi_i \quad (4)$$

olarak yazılabilir. Burada ilk terim en zayıf bağlı elektronun kinetik enerjisini, ikinci terim Coulomb potansiyelini ve üçüncü terim ise kutuplanma etkisinden kaynaklanan elektrik dipol potansiyelini göstermektedir. İfadedeki r_i , en zayıf bağlı elektron ile çekirdek arasındaki uzaklık; l , yörünge açılal momentum kuantum sayısı, Z^* ve d bilinmeyen parametrelerdir. En zayıf bağlı elektron

etkiyen potansiyel küresel simetrik bir özellik gösterdiğinden dalga fonksiyonu radyal ve açısal değişkenlere bağlı olarak,

$$\Psi_i(r_i, \theta_i, \phi_i) = R_{n_i l_i}(r_i) Y_{l_i m_i}(\theta_i, \phi_i) \quad (5)$$

biçiminde yazılır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoriye göre Schrödinger denkleminin çözümü,

$$\Psi = C \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n^*-l^*-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right) Y_{l^* m^*}(\theta, \phi) \quad (6)$$

şeklinde ifade edilir. Burada C normalizasyon katsayısı olup,

$$C = \left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n^*-l^*-1)!} \Gamma(n^*-l^*+1) \right]^{-1/2} \quad (7)$$

olarak verilir ve ifadedeki n^* , l^* ve ε ,

$$l^* = l + d \quad (8)$$

$$n^* = n + d \quad (9)$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (10)$$

şeklinde tanımlanmaktadır [1,2-6,9,10,13,16-21].

Bir kuantum sisteminde (n_i, l_i) kuantum sayılarıyla tanımlanan bir seviyeden (n_f, l_f) kuantum sayılarıyla tanımlı bir seviyeye geçiş için geçiş integrali,

$$\begin{aligned} \langle n_f, l_f | r^k | n_i, l_i \rangle &= \int_0^\infty r^{k+2} R_{n_f l_f}(r) R_{n_i l_i}(r) dr \\ &= (-1)^{n_f+n_i+l_i+l_i} \left(\frac{2Z_f^*}{n_f^*}\right)^{l_f} \left(\frac{2Z_i^*}{n_i^*}\right)^{l_i} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{-l_f-l_i-k-3} \times \left[\frac{n_f^{*4} \Gamma(n_f^*+l_f^*+1)}{4Z_f^{*3} (n_f^*-l_f^*-1)!} \right]^{-1/2} \times \\ &\quad \left[\frac{n_i^{*4} \Gamma(n_i^*+l_i^*+1)}{4Z_i^{*3} (n_i^*-l_i^*-1)!} \right]^{-1/2} \times \sum_{m_1=0}^{n_f^*-l_f^*-1} \sum_{m_2=0}^{n_i^*-l_i^*-1} \frac{(-1)^{m_2}}{m_1! m_2!} \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} - \frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{m_1+m_2} \times \left(\frac{Z_f^*}{n_f^*} + \frac{Z_i^*}{n_i^*}\right)^{-m_1-m_2} \times \quad (11) \\ &\quad \Gamma(l_f^*+l_i^*+m_1+m_2+k+3) \times \sum_{m_3=0}^S \binom{l_f^*-l_i^*+k+m_2+1}{n_f^*-l_f^*-1-m_1-m_3} \times \binom{l_f^*-l_i^*+k+m_1+1}{n_i^*-l_i^*-1-m_2-m_3} \times \\ &\quad \binom{l_f^*+l_i^*+k+m_1+m_2+m_3+2}{m_3} \end{aligned}$$

olarak verilir [1,6,12,18-21]. Burada $S = \min\{n_f^*-l_f^*-1-m_1, n_i^*-l_i^*-1-m_2\}$ dir ve $k > -l_f^*-l_i^*-3$ şartını sağlamaktadır. Elde edilen bu ifadede $i=f$ ve $k=1$ yazılarak en zayıf bağlı elektronun konumunun beklenen değer ifadesi,

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^*+1)}{2Z^*} \quad (12)$$

olarak bulunur. Denk. (10)'da en zayıf bağlı elektronun ε enerjisinin negatifi, en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisine eşittir. Yani,

$$l = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (13)$$

olarak tanımlanır. Denk. (11) kullanılarak atomik sistemlere ait osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam süreleri gibi fiziksel özellikler hesaplanabilir. Elde edilen matris elemanının hesaplanmasında Z^* , n^* ve l^* parametrelerini belirlemek yeterlidir. Burada I iyonlaşma enerji değerleri birçok deneysel veriden alınabilir. $\langle r \rangle$ beklenen değerleri ise farklı teorik yöntemler kullanılarak belirlenebilir.

Bir atomda herhangi bir $\gamma J'M'$ durumundan γJ seviyesinin tüm M durumlarına geçiş göz önüne alındığında elektrik dipol geçiş olasılığı,

$$A = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^2 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h(2J+1)} S \quad (14)$$

ve osilatör şiddeti,

$$f_{ij} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h(2J+1)} S = \frac{(E_j - E_i)}{3(2J+1)} S \quad (15)$$

biçiminde tanımlanır [6,12]. Denk. (14) ve denk. (15)'de S , çizgi şiddetini, σ ve $(E_j - E_i)$ ilgili iki seviye arasındaki geçiş enerjilerini göstermektedir. Hem geçiş olasılığı hem de osilatör şiddetleri hesaplamalarında önemli olan çizgi şiddeti ifadesinin doğru olarak belirlenmesidir. Çizgi şiddeti, hesaplamalarda göz önüne alınan her bir çiftlenim durumuna göre farklı tanımlanır. Hafif atomlarda baskın olan çiftlenim durumu LS çiftlenimi olduğundan, bu çalışmalarda geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleriyle ilgili hesaplamalar LS çiftleniminin baskınlığı göz önüne alınarak yapılmıştır. Bu çalışmada uyarılmış iki seviye arasındaki geçişleri sembolize eden $l_1^n l_2 \rightarrow l_1^{n-1} l_2$ tipi geçiş ve temel seviyeden uyarılmış seviyelere geçişi sembolize eden $l_1^n \rightarrow l_1^{n-1} l_2$ tipi geçişlere ait geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri hesaplanmıştır. LS çiftleniminde; $l_1^n l_2 \rightarrow l_1^{n-1} l_2$ şeklindeki geçişler için elektrik dipol çizgi şiddeti [6,12],

$$\sqrt{S_{LS}} \equiv \langle [(\dots \alpha_1 L_1, l_2) L (\dots S_1 S_2) S] J \parallel r_N^{(1)} \parallel [(\dots \alpha_1' L_1', l_2') L' (\dots S_1' S_2') S'] J' \rangle \quad (16)$$

$$= (-1)^{S+J+L_1+l_2'} [J, J', L, L']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & l_2' & l_2 \end{Bmatrix} P_{l_2}^{(1)}$$

$l_1^n \rightarrow l_1^{n-1} l_2$ şeklindeki geçişler için elektrik dipol çizgi şiddeti,

$$\sqrt{S_{LS}} \equiv \langle \alpha_1 L_1, S_1, J \parallel r^{(1)} \parallel \alpha_1' L_1', S_1', l_2 \rangle = \delta_{S,S'} (-1)^{L_1+l_2+S_1+J'} (n.[L_1, L', J, J'])^{1/2} \quad (17)$$

$$\times \begin{Bmatrix} L_1 & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & l_1 \\ L' & 1 & l_2 \end{Bmatrix} (l_1^n \alpha_1 L_1 S_1 \{ l_1^{n-1} \alpha_1' L_1' S_1' \} P_{l_2}^{(1)})$$

şeklinde tanımlanır. Denk. (16) ve Denk. (17), 6-j sembollerine ve radyal geçiş integraline bağlı olarak yazılmaktadır. Matris elemanının radyal kısmı olan radyal geçiş integrali tüm çiftlenim durumlarında,

$$P_{n,l,n'l'}^{(1)} \equiv \delta_{l',l\pm 1} (-1)^{l+l'} (l_>)^{1/2} \int_0^\infty P_{nl}(r) r P_{n'l'}(r) dr = (-1)^{l-l'} P_{l'l}^{(1)} = -P_{l'l}^{(1)} \quad (18)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Temel seviyeden uyarılmış seviyeye geçişlerde $n > l$ durumunda çizgi şiddeti, özdeş elektronlar içerdiğinden bu tür geçiş durumunda özdeş elektron sayısı ve fraksiyonel parantez (antisimetrikleşme) katsayısı ile çarpılmaktadır. p , d ve f kabuklarının fraksiyonel parantez katsayıları literatürde verilmektedir [30,31]. Bu çalışmada radyal geçiş integrallerinin hesaplanmasında en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi (WBEPMT) kullanılmıştır. Daha sonra Karbon atomunun bazı seviyeleri arasındaki elektrik dipol osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplanarak sonuçlar Tablo 1 de verilmiştir.

Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada Karbon atomunun bazı yüksek uyarılmış seviyelerinin bireysel çizgileri arasındaki geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplandı. Yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki spektroskopik parametrelerin hem teorik olarak belirlenmesi hem de deneysel olarak gözlenmesi birçok sebepten dolayı zordur ve literatürdeki datalar sınırlıdır. Bu çalışmada gözönüne alınan yüksek uyarılmış geçişlere ait osilatör şiddetleri sonuçları sadece National Institute of Standards and Technology (NIST) [32] deki kabul edilen değerlerle karşılaştırılabilmiştir. Bu çalışmada elde edilen sonuçların kabul edilen değerlerle oldukça iyi uyumlu olduğu Tablo 1 den görülmektedir. Bazı yüksek uyarılmış seviyelere ait literatürde bulunmayan osilatör şiddeti sonuçları da tablonun sonunda verilmiştir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori deneysel enerji değerlerini ve yarıçaplara ait beklenen değerleri kullanarak enerji değerleri, geçiş olasılıkları ve osilatör şiddeti gibi spektroskopik parametreleri diğer yöntemlere göre daha basit bir hesaplama süreci içerisinde belirleyen bir yöntemdir. Bu yöntemde geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin hesaplanması için Z^* , n^* ve l^* parametrelerinin belirlenmesi yeterlidir.

Bu yönteminin hassasiyeti, literatürdeki deneysel enerji değerlerinin birbirine yakın olması sebebiyle yarıçapların beklenen değerleri ile belirlenir. Dolayısıyla yarıçapların beklenen değerlerinin doğru olması, geçiş olasılıklarının ve osilatör şiddetlerinin hesaplanma sürecinin hassasiyeti açısından büyük önem taşır. Ayrıca bu yöntemin, başka yöntemlere göre kullanışlı olması, zaman ve hesaplama sürecinin kısa ve kolay olması sebebiyledir.

Tablo 1. Karbon atomunda en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori ile hesaplanan geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri.

Alt Seviye	Üst Seviye	Terimler		İstatiksel Ağırlık (2j+1)		Bu Çalışma Geç. Ols. (sn ⁻¹)	Bu Çalışma Osilatör Şiddeti	Osilatör Şiddeti (NIST) Ref.[32]
2s ² 2p(² P ^o)3p	2s ² 2p(² P ^o)3d	³ D	³ D ^o	15	15	1.57e+07	7.73e-02	7.06e-02 [B]
				3	3	1.18e+07	4.43e-02	4.39e-02 [B]
				5	5	1.09e+07	5.39e-02	5.42e-02 [B]
				7	7	1.39e+07	6.84e-02	7.48e-02 [B]
				7	5	1.74e+06	1.19e-02	1.57e-02 [B]
				5	3	2.36e+06	1.93e-02	1.58e-02 [B]
				5	7	2.45e+06	5.64e-03	5.13e-04 [D]
				3	5	3.94e+06	1.17e-03	5.36e-04 [D]
2s ² 2p(² P ^o)3p	2s ² 2p(² P ^o)4d	³ D	³ D ^o	15	15	2.46e+05	6.27e-03	7.15e-03 [C]
				3	3	2.16e+05	5.86e-03	6.85e-03 [D+]
				5	5	1.71e+05	2.28e-03	2.98e-03 [D+]
				7	7	1.88e+05	2.51e-03	3.40e-03 [D+]
				7	5	2.72e+04	5.04e-03	5.32e-03 [D+]
				5	3	3.75e+04	8.30e-04	1.87e-03 [D+]
				5	7	3.82e+04	3.63e-04	2.72e-04 [D]
				3	5	6.21e+04	4.98e-04	2.26e-05 [E]
2s ² 2p(² P ^o)3p	2s ² 2p(² P ^o)5d	³ D	³ D ^o	15	15	5.90e+04	1.10e-03	2.02e-03 [D]
				3	3	6.58e+03	2.70e-04	3.14e-04 [D]
				5	5	5.14e+04	9.52e-04	1.79e-03 [D]
				7	7	4.15e+04	9.71e-04	1.41e-03 [D]
				7	5	4.84e+04	8.99e-04	1.52e-03 [D]
				5	3	9.63e+03	4.96e-04	5.04e-04 [D]
				5	7	9.10e+03	2.20e-04	2.26e-04 [D]
				3	5	1.50e+04	2.68e-04	3.05e-04 [D]
2s ² 2p(² P ^o)3p	2s ² 2p(² P ^o)6d	³ D	³ D ^o	15	15	1.27e+04	2.76e-04	-
				3	3	1.36e+04	2.96e-04	-
				5	5	8.28e+03	1.80e-04	-
				7	7	9.96e+03	2.16e-04	-
				7	5	1.31e+03	3.98e-05	-
				5	3	2.71e+03	9.79e-05	-
				5	7	1.76e+03	2.74e-05	-
				3	5	2.98e+03	3.89e-05	-
2s ² 2p(² P ^o)3p	2s ² 2p(² P ^o)7d	³ D	³ D ^o	15	15	3.73e+03	8.87e-05	-
				3	3	8.10e+03	1.92e-04	-
				5	5	1.84e+03	4.39e-05	-
				7	7	2.13e+03	5.06e-05	-
				7	5	2.93e+02	9.74e-06	-
				5	3	1.61e+03	6.38e-05	-
				5	7	3.75e+02	6.39e-06	-
				3	5	6.67e+02	9.55e-06	-

Tablo 1'in devamı

Alt Seviye	Üst Seviye	Terimler	İstatistiksel Ağırlık (2j+1)		Bu Çalışma Geç. Ols. (sn ⁻¹)	Bu Çalışma Osilatör Şiddeti	Osilatör Şiddeti (NIST) Ref.[32]
2s ² 2p(² P ^o)3d	2s ² 2p(² P ^o)4p	³ F ^o D ³	21	15	1.68e+07	1.00e-02	1.16e-02 [B]
			9	7	1.68e+07	1.00e-02	1.07e-02 [B]
			7	5	1.48e+07	1.00e-02	1.08e-02 [B]
			5	3	1.40e+07	1.00e-02	1.20e-02 [B]
			7	7	1.89e+06	4.60e-04	4.50e-04 [B]
			5	5	2.62e+06	1.18e-03	1.06e-03 [B]
			5	7	7.61e+04	2.52e-05	3.64e-06 [B]
2s ² 2p(² P ^o)3d	2s ² 2p(² P ^o)5p	³ F ^o D ³	21	15	6.30e+05	2.68e-03	2.64e-03 [D]
			9	7	6.20e+05	2.40e-03	2.42e-03 [D]
			7	5	5.60e+05	2.30e-03	2.34e-03 [D]
			5	3	5.30e+05	2.69e-03	2.63e-03 [D]
			7	7	7.10e+04	2.17e-04	2.13e-04 [D]
			5	5	9.90e+04	3.01e-04	2.96e-04 [D]
			5	7	2.86e+03	6.28e-06	6.05e-06 [D]
2s ² 2p(² P ^o)3d	2s ² 2p(² P ^o)6p	³ F ^o D ³	21	15	1.93e+05	1.38e-03	1.36e-03 [D]
			9	7	1.89e+05	1.24e-03	1.25e-03 [D]
			7	5	1.74e+05	1.25e-03	1.21e-03 [D]
			5	3	1.67e+05	1.42e-03	1.36e-03 [D]
			7	7	2.12e+04	1.09e-04	1.09e-04 [D]
			5	5	3.08e+04	1.57e-04	1.52e-04 [D]
			5	7	8.57e+02	3.16e-06	3.11e-06 [D]
2s ² 2p(² P ^o)5p	2s ² 2p(² P ^o)5d	D ³ ³ F ^o	15	21	1.43e+06	1.30e-02	-
			7	9	1.32e+06	1.31e-02	-
			5	7	1.27e+06	1.14e-02	-
			3	5	1.43e+06	1.09e-02	-
			7	7	1.10e+07	1.33e-03	-
			5	5	1.57e+07	1.96e-03	-
			7	5	3.14e+05	5.21e-05	-
2s ² 2p(² P ^o)5p	2s ² 2p(² P ^o)6d	D ³ ³ F ^o	15	21	4.15e+06	1.51e-03	-
			7	9	3.61e+06	1.44e-03	-
			5	7	3.80e+06	1.38e-03	-
			3	5	4.37e+06	1.34e-03	-
			7	7	3.27e+05	1.62e-04	-
			5	5	4.77e+05	2.42e-04	-
			7	5	9.38e+03	6.49e-06	-
2s ² 2p(² P ^o)5p	2s ² 2p(² P ^o)6s	D ³ ³ P ^o	15	9	3.88e+07	8.32e-03	-
			7	5	3.89e+07	6.98e-03	-
			5	3	3.00e+07	6.73e-03	-
			3	1	2.13e+07	8.21e-03	-
			5	5	1.00e+07	1.34e-03	-
			3	3	1.61e+07	2.10e-03	-
			3	5	1.12e+06	9.28e-05	-

Tablo 1'in devamı

Alt Seviye	Üst Seviye	Terimler	İstatistiksel Ağırlık (2j+1)		Bu Çalışma Geç. Ols. (sn ⁻¹)	Bu Çalışma Osilatör Şiddeti	Osilatör Şiddeti (NIST) Ref.[32]
2s ² 2p(² P ^o)5p	2s ² 2p(² P ^o)7s	D ³ 3P ^o	15	9	4.74e+06	4.05e-03	-
			7	5	4.78e+06	3.42e-03	-
			5	3	3.47e+06	2.96e-03	-
			3	1	4.64e+06	3.98e-03	-
			5	5	4.95e+06	4.33e-03	-
			3	3	4.71e+06	4.05e-03	-
			3	5	5.03e+06	4.44e-03	-
2s ² 2p(² P ^o)5p	2s ² 2p(² P ^o)8s	D ³ 3P ^o	15	9	2.14e+06	3.09e-03	-
			7	5	2.17e+06	3.13e-03	-
			5	3	2.08e+06	2.99e-03	-
			3	1	2.08e+06	3.02e-03	-
			5	5	2.24e+06	3.29e-03	-
			3	3	2.11e+06	3.06e-03	-
			3	5	2.27e+06	3.36e-03	-

Doğruluk aralıkları: B ≤10%, D≤50%, D+≤ 40%, E >50%

Kaynaklar

- [1] Çelik, G., E. Akın ve H.Ş. Kılıç, "Azot atomunda geçiş olasılıklarının hesaplanması" S. Ü. Fen Ed. Fak. Fen Derg. 25, 113-118 (2005).
- [2] Zheng, N.W. **A New Theoretical Model for Many-Electron Atom and Ion Systems I** Chinese Science Bulletin, 31 1238-1242 (1986)
- [3] Zheng, N.W., Sun, Y.J., Ma, D.X., Yang, R., Zhou, T. and Wang. T. **Theoretical Study on Regularity of Changes in Quantum Defects in Rydberg State Series of Many-Valence Electron Atoms within WBEPM Theory** International Journal of Quantum Chemistry 81 232-237 (2001)
- [4] Zheng N.W., Wang T., Yang R.Y.I., Zhou T., Ma D.X.I.A., Wu, Y.G.A.N.G. and Xu H.T.A.O. **Transition Probabilities For Be I, Be II, Mg I, and Mg II** Atomic Data and Nuclear Data Tables, vol. 79, no. 1, pp. 109-141(33) (2000)
- [5] Zheng N.W., Wang T., Ma D.X.I.A. and Zhou T. **Calculation of Transition Probability for C (I-IV)** J. Opt. Soc. Am. B 18 1395-1409 (2001)
- [6] Çelik, G. **Çok Elektronlu Atomlarda Elektronik Geçişler** Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilimdalı, Konya (2005)
- [7] Zheng, N.W. **A New Outline of Atomic Theory** Jiang Su Education Press Nanjing PR China (1988)
- [8] Zheng, N.W. **A New Theoretical Model for Many-Electron Atom and Ion Systems III** Chinese Science Bulletin, 33 916-920 (1988)
- [9] Zheng, N.W. and Xin, H.W. **Successive Ionization Potentials of 4fⁿ Electrons within WBEPM Theory** Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 24 6 1187-1191 (1991)

- [10] Zheng, N.W. and Li, G.S. **Electronegativity-Average Nuclear-Potential of The Valence Electron** J. Phys Chem-Us 98 (15): 3964-3966 (1994)
- [11] Zheng, N.W. and Wang. T. **Transition Probabilities for Ne II** Spectrochimica Acta Part B 58 1319-1324 (2003)
- [12] Tekeli, G. **Elektrik Dipol Geçişler** Yüksekli Lisans Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilimdalı, Konya (2009)
- [13] Çelik, G., Ateş, Ş. ve Kılıç, H. Ş. **Lityum Atomunda Bazı Yüksek Uyarılmış Seviyelerin Bireysel Çizgileri Arasındaki Geçiş Olasılıklarının Hesaplanması** S. Ü. Fen Ed. Fak. Fen Derg. 27, 67-72 (2006)
- [14] Çelik, G., Akın, E. ve Kılıç, H. Ş. **The Theoretical of Transition Probabilities for Some Excited p-d Transitions in Atomic Nitrogen** Eur. Phys. J. D, 40, 325-330 (2006)
- [15] Çelik, G., Kılıç, H. Ş. ve Akın, E. **The Calculations of Oscillator Strengths and Transition probabilities for Atomic Fluorine** T. J. Phys., 30, 165 (2006)
- [16] Zheng, N.W. **A New Empirical Formule About Calculation of Ionization Potential** Chinese Science Bulletin, 22 531-535 (1977)
- [17] Zheng, N.W. **A New Theoretical Model For Many-Electron Atom and Ion Systems II** Chinese Science Bulletin, 32 1263-1267 (1987)
- [18] Zheng, N.W., Ma, D.X., Yang, R., Zhou, T., Wang. T. and Han, S. **An Efficient Calculation of The Energy Levels of The Carbon Group** Journal of Chemical Physics 113 5 1681-1687 (2000)
- [19] Zheng, N.W., Wang. T. and Yang, R. **Transition Probability of Cu I, Ag I and Au I from Weakest Bound Electron Potential Model Theory** Journal of Chemical Physics 113 15 6169 (2000)
- [20] Zheng, N.W., Zhou, T., Yang, R., Wang. T. and Ma, D.X. **Analysis of Bound Odd-Parity Spectrum of Krypton by Weakest Bound Electron Potential Model Theory** Chemical Physics 258 37-46 (2000)
- [21] Zheng, N.W., Ma, D.X., Yang, R.Y., Zhou, T., Wang T. and Han S **An Efficient Calculation of the Energy Levels of the Carbon Group** Journal of Chemical Physics 113 (5): 1681-1687 (2000)
- [22] Zheng, N.W., Wang. T., Zhou, T., Sun, Y.J., Su, Y. and Zhang, Y. **Study of Transition Probability of Low States of Alkali Metal Atoms with WBEPM Theory** Journal of The Physical Society of Japan 68 3859-3862 (1999)
- [23] Desclaux, J.P. **Hartree-Fock-Slater Self Consistent Field Calculations** Computer Physics Communications, Volume 1 216-222 (1969)
- [24] Lindgard, A. and Nielsen, S.E **Numerical Approach to Transition Probabilities in The Coulomb Approximation: Be II And Mg II Rydberg Series** Journal of Physics B 8 1183-1199 (1975)
- [25] Lindgard, A. and Nielsen, S.E **Transition Probabilities for The Alkali Isoelectronic Sequences Li I, Na I, K I, Rb I, Cs I, Fr I Sequences** Atomic Data and Nuclear Data Tables 19 533-6333 (1977)
- [26] Kundu, B. and Mukherjee, P.K. **Time-Dependent Hartree-Fock Calculations for The Excited "S" States of Lithium Isoelectronic Sequence** Theor. Chim. Acta 66 173-181 (1984)
- [27] Theodosiou, C.E. **Lifetimes of Alkali-Metal-Atom Rydberg States** Physical Review A 30 2881 (1984)
- [28] Viswanath, M.B. and Sen, K.D. **Density Functional Theory Calculations of One Electron Rydberg States in Li Atom** Theor. Chim. Acta 76 373-375 (1989)
- [29] King, F.W. **Radial Electronic Density Functions for Selected Low-Lying Excited 2S States of The Li I Isoelectronic Series** Phys. Rev. A 44 3350-3353 (1991)

- [30] Sobelman, I.I. **Introduction to The Theory of Atomic Spectra** Pergamon Press Braunschweig (1975)
- [31] Cowan, R.D. **The Theory of Atomic Structure and Spectra** University of California Press Berkeley (1981)
- [32] Ralchenko, Y., A. E. Kramida, J. **Reader and NIST ASD Team 2009 NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5), National Institute of Standards and Technology**, Gaithersburg, MD (2009).