

Azot Atomunda İki Foton Soğurma Tesir Kesitlerinin Hesaplanması*

Gültekin ÇELİK¹, Hamdi Şükür KILIÇ, Erhan AKIN

Selçuk. Üniv. Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Kampus Konya

Özet: Bu çalışmada azot atomunda bazı ince yapı seviyeleri arasındaki geçişler için iki foton soğurma tesir kesitleri hesaplanmıştır. İki foton soğurma tesir kesiti ifadesi açısal katsayılara ve radyal geçiş integrallerine bağlı olarak verilir. Açısal katsayıların hesaplanmasında Racah yöntemi, radyal geçiş integrallerinin belirlenmesinde ise en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi kullanılmıştır. Elde edilen sonuçların literatürle uyumlu olduğu görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Azot atomu, iki foton soğurma tesir kesiti, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi

The Calculation of Two-Photon Absorption Cross-Sections in Nitrogen Atom

Abstract : In this study, two-photon absorption cross-sections for transitions between some fine structure levels in nitrogen atom have been calculated. The expression for the two-photon absorption cross-section is given to be depend on the angular coefficients and radial transition integrals. The Racah method was employed in calculation of the angular coefficients and the weakest bound electron potential model theory was used to compute the radial transition integrals. It has been found that the results obtained are in good agreement with the literature.

Key Words: Nitrogen Atom, two-photon absorption cross-section, the weakest bound electron potential model theory

* Bu makale doktora tezinin bir bölümüdür.

¹ E-mail: gcelik@selcuk.edu.tr

Giriş

Laser-atom etkileşmeleriyle ilgili yapılan deneysel çalışmaların hızlı bir şekilde artması tek ve çok foton soğurma süreçleri üzerine olan ilgiyi arttırmaktadır. Buna paralel olarak teorik çalışmalara yoğunluk kazandırılmasına ihtiyaç duyulmaktadır. Bu doğrultuda tek ve çok foton süreçleri için R-Matrix yöntemi, Multikonfigürasyonel Hartree-Fock yöntemi, Cowan Kod'u ve Multikonfigürasyonel Dirac-Fock yöntemi gibi bir çok yöntem geliştirilmiştir [1-4]. Atomik ve moleküler analizlerde çok foton iyonizasyon teknikleri yaygın olarak kullanılmaktadır. Çok foton süreçlerindeki deneysel çalışmalar literatürde oldukça popüler ve yaygın bir şekilde ortaya konmasına rağmen, tesir kesitleriyle ilgili teorik çalışmalar oldukça azdır. Atomik flüoresansların şiddetini tanımlamak için atomik soğurma tesir kesitlerinin hesaplanması gereklidir. Tesir kesiti çok foton deteksiyon tekniklerinde oldukça sık kullanılan fiziksel parametrelerden biridir. İki foton spektroskopisi atomlarda enerji seviye çalışmaları için güçlü bir teknik olarak kullanılmaktadır [5]. Özellikle ince ve aşırı ince yapı yarılmaları, Zeeman ve Stark yarılmaları, saçılma genlikleri ve tesir kesitleri gibi fiziksel özelliklerin belirlenmesinde iki foton spektroskopisi yaygın olarak kullanılmaktadır [6,7]. Tesir kesitlerini hesaplamak için birçok yöntem geliştirilmiştir [8]. En çok kullanılan iki yöntem, ara seviyeler üzerinden sınırlandırılmış toplam yöntemi ve Green's fonksiyonu yöntemidir [9-12].

Materyal ve Metot

Atomla etkileşen radyasyonun enerjisinin atomik Hamiltoniyenle karşılaştırıldığında çok daha küçük olduğu varsayılarak, tesir kesiti ifadelerini türetmek için zamana bağlı perturbasyon teorisi kullanılabilir [11]. Etkileşme potansiyelinin atomik yapı hesaplamalarında en sık kullanılan iki gösteriminden biri elektrik dipol gösterimidir. Bu gösterimde etkileşme potansiyeli, $V(t) = -e \vec{E}(t) \cdot \vec{r}$ olarak verilir. Burada $\vec{E}(t)$ radyasyonun elektrik alan vektörü \vec{r} , geçiş yapan elektronun konum vektörüdür. Etkileşme potansiyelinin ikinci gösterimi ise hız ya da Coulomb

Gauge gösterimi olup, $v(t) = \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p}$ olarak verilir. Burada \vec{A} vektör potansiyelidir ve \vec{p} , geçiş

yapan elektronun momentum vektörüdür. Etkileşme potansiyelinin bu iki gösterimine ek olarak tesir kesitleri elektrik dipol matrisleri için kullanılan uzunluk, hız ve ivme gösterimiyle de ifade edilebilir. Schrödinger denklemi sadece Hidrojen atomu için tam olarak çözülebilmektedir. İki veya daha fazla elektron içeren sistemler için yaklaşık yöntemler kullanmak gereklidir. Bunun için özellikle çok elektronlu sistemlerde yaklaşık dalga fonksiyonları kullanılmaktadır. Eğer hesaplamalarda tam dalga fonksiyonları kullanılırsa bu farklı gösterimler özdeş sonuçlar vermektedir. İstenildiğinde bu farklı gösterimlerdeki tesir kesiti ifadeleri ayrı ayrı hesaplanarak gözönüne alınan yaklaşık dalga fonksiyonlarının doğruluğunu test etmek için de kullanılabilir.

Etkileşme potansiyelinin elektrik dipol gösterimi kullanılarak elde edilen iki foton soğurma tesir kesiti ifadesi,

$$\sigma_0^{(2)} = 8\pi^3 \gamma^2 E^2 \left| \sum_m \frac{\langle f | \sum_i \hat{e} \cdot \vec{r}_i | m \rangle \langle m | \sum_i \hat{e} \cdot \vec{r}_i | i \rangle}{E_i - E_m + E} \right|^2 \quad (1)$$

biçiminde verilir [11]. Burada γ , ince yapı sabiti E_i ilk seviyenin, E_m ara seviyelerin ve $E = \hbar\omega$ foton enerjisidir. Atom numarası küçük olan atomlarda baskın olan çiftlenim şekli LS çiftlenimidir. LS çiftleniminde her hangi bir $|a\rangle$ durumu kuantum sayılarına bağlı olarak,

$$|a\rangle = |(\alpha_1 S_1 L_1 n l) S L J M_J\rangle \quad (2)$$

şeklinde gösterilir. Burada n ve l geçiş yapan elektronun baş kuantum ve yörünge açısız momentum kuantum sayılarını S_1 ve L_1 geçiş yapan elektron haricindeki sisteme ait toplam spin ve toplam yörünge açısız momentum kuantum sayılarını ve α_1 sistemin diğer tüm kuantum

sayılarını göstermektedir. $SLJM_J$, atomun spin, yörünge ve toplam açısal momentum kuantum sayıları olup M_J , J kuantum sayısının yönelimini göstermektedir.

Dipol matrisleri Racah yöntemi kullanılarak hesaplanabilir. Denk. (1)'deki matris elemanlarının hesaplanmasında verilen, $|i\rangle$ temel seviye, $|m\rangle$ ara seviye ve $|f\rangle$ son seviye gösterimi Denk.(2)'ye uygun olarak yazılır. Hesaplamalarda elektrik dipol moment için $\sum_i \vec{e} \cdot \vec{r}_i = P(10)$ gösterimi kullanılır. Bu ifadedeki \vec{r}_i atomik elektronların konum vektörüdür. Eşitliğin sağ tarafındaki $P(10)$ niceliği $\vec{P} = \sum_i \vec{r}_i$ toplamının z bileşenini göstermektedir [13].

Buradaki hesaplamalarda başlangıç seviyesi yalın halde, ara seviyeler çift üst indisli, son seviye tek üst indisli gösterimle ifade edilecektir. Bu gösterime göre Denk.(1) yeniden yazılırsa,

$$\sigma_0^{(2)} = 8\pi^3 \gamma^2 E^2 x \left| \sum_{n''l''L''J''} \frac{T(n''l''L''J''; L_1; SLJSL''J''SL'J')}{E_i - E(n''l''L''J'') + E} \right|^2 \quad (3)$$

ifadesi elde edilir [11]. Bir kabukta özdeş elektronların bulunmadığı bir durum için Denk(3)'deki T niceliği 3-j , 6-j katsayılarına ve radyal integrale bağlı olarak

$$\begin{aligned} & T_{noneq}(n''l''L''J''; L_1; SLJSL''J''SL'J') \\ &= \frac{1}{2J+1} \sum_{M_J M_{J'} M_{J''}} \langle f | \sum_i \vec{e}_i \vec{r}_i | m \rangle \langle m | \sum_i \vec{e}_i \vec{r}_i | i \rangle \\ &= \frac{1}{2J+1} \sum_{M_J M_{J'} M} \langle (\alpha_1 S_1 L_1 n l) SLJM_J | P(10) | (\alpha_1 S_1 L_1 n'' l'') SL''J''M_{J''} \rangle x \\ & \langle (\alpha_1 S_1 L_1 n'' l'') SL''J''M_{J''} | P(10) | (\alpha_1 S_1 L_1 n' l') SL'J'M_{J'} \rangle \\ &= (-)^{l'+l''+2s+L+L'+2J''} [(2L+1)(2L'+1)(2J'+1)^{-1}(2J''+1)]^{\frac{1}{2}} (2L''+1)(2J''+1) x \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{matrix} L_1 & L & l \\ 1 & l'' & L'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & L' & l' \\ 1 & l'' & L'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S & J & L \\ 1 & L'' & J'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S & J' & L' \\ 1 & L'' & J'' \end{matrix} \right\} x \\ & \left[\sum_{M_J} \begin{bmatrix} J & J'' & 1 \\ M_J & -M_J & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J' & J'' & 1 \\ M_J & -M_J & 0 \end{bmatrix} \right] x \langle nl \| P(1) \| n''l'' \rangle \langle n''l'' \| P(1) \| n'l' \rangle \end{aligned}$$

denklemlerle verilir [11,14]. Bu ifadede radyal integral,

$$\langle nl \| P(1) \| n'l' \rangle = \sqrt{l_{>}} \int_0^{\infty} R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^3 dr \quad (5)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $l_{>}$, l ve l' 'nin en büyük değerli olanıdır. R_{nl} ve $R_{n'l'}$ tek elektron radyal dalga fonksiyonlarıdır. Denk.(4)'de geçiş yapan elektron haricinde, atoma ait geriye kalan sistem $\alpha_1 S_1 L_1$ kuantum sayılarıyla gösterilmektedir ve bu seviyenin kuantum sayılarının geçiş boyunca değişmediği gözönüne alınmaktadır. Benzer olarak toplam spin açısal momentum

kuantum sayısı da elektrik dipol geçişlerinde korunmaktadır. Eğer bir kabukta n tane özdeş elektron bulunuyorsa bu durumda Denk.(3)'de ki T niceliği,

$$T_{eq} = \sqrt{n} (l^n \alpha SL \left\{ l^{n-1} (\alpha_1 S_1 L_1) l SL \right\} x T_{noneq}) \quad (6)$$

biçiminde yazılır [11,14,15]. Parantez içersindeki terim özdeş elektronlara sahip olan kabuğun $l^n \alpha SL$ kuantum sayılarını ifade eden fraksiyonel parantez katsayısını göstermektedir. $l^{n-1} (\alpha_1 S_1 L_1) l SL$ niceliği ise n elektronlu teorik bir kabuğun kuantum sayılarını göstermektedir. Burada l , aktif elektronun yörünge açısai momentum kuantum sayısıdır, kabuğun toplam spin kuantum sayısı S ve toplam yörünge açısai momentum kuantum sayısı L dir. Fraksiyonel parantez katsayılarının sayısal değerleri bir çok yerde tablo halinde verilmektedir [4, 15-17].

Denk.(4) düzenlenerek iki foton soğurma tesir kesiti ifadesi açısai katsayılarla ve radyal geçiş integrallerine bağlı olarak,

$$\sigma (SLJ \rightarrow SL'J')^{(2)} = 8\pi^3 \gamma^2 E_f^2 \left| \sum_{n''l''} \frac{C(l''L'') R(nl, n''l'') R(n''l'', n'l')}{E_i - E(n''l''L'') + E_f} \right|^2 \quad (7)$$

$$R(nl, n'l') = \int_0^\infty R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^2 dr \quad (8)$$

şeklinde verilir. $C(l''L'')$ katsayıları 3-j, 6-j ve fraksiyonel parantez katsayılarına bağlı olarak verilen sabitlerdir. Bu katsayılar özdeş olmayan elektron durumu için,

$$C(l''L'') = (-)^{l'+l''+2S+L+L'} \sqrt{l_1 \cdot l_2} \left[(2L+1)(2L'+1)(2J+1)^{-1}(2J'+1) \right]^{\frac{1}{2}} x \quad (9)$$

$$(2L''+1) \begin{Bmatrix} L_1 & L & l \\ 1 & l'' & L'' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & L' & l' \\ 1 & l'' & L'' \end{Bmatrix} \sum_{J'} (-)^{2J'} (2J''+1) \begin{Bmatrix} S & J & L \\ 1 & L'' & J'' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & J' & L' \\ 1 & L'' & J'' \end{Bmatrix} x$$

$$\sum_{M_j} \begin{pmatrix} J & J'' & 1 \\ M_j & -M_j & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & J'' & 1 \\ M_j & -M_j & 0 \end{pmatrix}$$

şeklinde verilir. Burada l_1 , l ve l'' 'nün en büyük değerli olanı, l_2 de l' ve l'' 'nün en büyük değerli olanıdır.

Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada Azot atomunda $2p^3 \ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2 (\ ^3P) 3p \ ^4S_{3/2}$ ve $2p^3 \ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2 (\ ^3P) 3p \ ^4D_{7/2}$ geçişleri arasında iki foton soğurma tesir kesitleri hesaplanmıştır. Azot atomundaki söz konusu elektrik dipol geçişleri tek foton için yasak fakat iki foton için izinli olan geçişlerdir. Başlangıç seviyesi bir kural olarak temel seviye seçilir. Son seviye ise laser frekans aralığına ve seçim kurallarına bağlı olarak belirlenir. Bu geçişler için gerekli laser dalga boyları sırasıyla $\lambda_1 = 2067,15A^0$ ve $\lambda_2 = 2107,86A^0$ dur. İki foton geçişleri için ara seviyeler kullanılmaktadır. Azot atomunda her iki geçiş için izinli ara seviyeler $2p^2 (\ ^3P) n''s \ ^4P$, $2p^2 (\ ^3P) n''d \ ^4P$ olarak seçilmiştir. Burada ara seviyelerin n'' başkuantum sayıları $n'' = 3,4,5, \dots, \infty$ şeklinde değerler almaktadır.

Azot atomundaki geçişler için Fraksiyonel parantez katsayısının değeri, fpk=1 dir [3]. Daha sonra özdeş elektron sayıları da gözönüne alınarak açısai katsayılar $C(l''L'')$, Denk.(9)

kullanılarak, $2p^3 \ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2 \ (^3P)3p \ ^4S_{3/2}$ geçişi için $C(01)=-0,19245$ ve $C(21)=-0,38490$, $2p^3 \ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2 \ (^3P)3p \ ^4D_{7/2}$ geçişi için $C(01)=0,170329$ ve $C(21)=0,034065$ olarak hesaplanmıştır. Belirlenen açısız katsayılar Denk.(7)'de kullanılarak $2p^3 \ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2 \ (^3P)3p \ ^4S_{3/2}$ geçişi için iki foton soğurma tesir kesiti $\sigma_0^{(2)}=6,57310^{-36} \text{ cm}^4$ ve $2p^3 \ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2 \ (^3P)3p \ ^4D_{7/2}$ geçişi için $\sigma_0^{(2)}=0,83210^{-36} \text{ cm}^4$ ve toplam tesir kesiti $\sigma_T^{(2)}=7,40510^{-36} \text{ cm}^4$ olarak elde edilmiştir.

Denk.(8)'deki radyal integraller birçok yöntemle hesaplanabilir. Bu tür çalışmalarda önemli olan hesaplamalara dahil edilmesi gereken çok sayıda izinli ara seviyeyi doğru tanımlayacak dalga fonksiyonlarının seçimidir. Literatürde bilinen birçok yöntemin hesaplama süreci karmaşık olup hesaplamalar çok zaman almaktadır. Ayrıca uyarılmış seviyeleri tanımlayan dalga fonksiyonlarını oluşturmak için çok sayıda konfigürasyon kullanmak gerekir. Çok sayıda konfigürasyonu göz önüne almak pratik ve kolay bir yol değildir. Literatürdeki birçok farklı hesaplama yöntemi ancak 5s, 5d gibi uyarılmış seviyelere kadar ardışık dalga fonksiyonlarını oluşturabilmektedir. Bu çalışmada radyal integrallerin hesaplanmasında on altı ara seviyenin hesaplamalara dahil edildiği en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi (WBEPMT) kullanılmıştır [18,19]. Bu yöntemin hesaplama süreci basittir ve hesaplamalar çok zaman almamaktadır. Ayrıca bu yöntemle 8s ve 8d seviyelerine kadar izinli ara seviyelere ait dalga fonksiyonları oluşturulabilmektedir. WBEPMT teorisi kullanılarak radyal geçiş integrallerinin hesaplanması için Z^* , n^* ve l^* parametrelerinin belirlenmesinde gerekli olan enerji değerleri literatürden alınmıştır [20]. Beklenen değerlerin hesaplanmasında temel seviyeler için HF 96 paket programı [21], uyarılmış seviyeler için Sayısal Coulomb Yaklaşımı (NCA) kullanılmıştır [22]. Bu parametreler kullanılarak, radyal geçiş integralleri hesaplanmıştır. Geçiş integrallerinin sayısal değerleri Çizelge (1.1)'de verilmiştir.

Racah yöntemiyle belirlenen açısız katsayılar ve WBEPMT teorisi ile elde edilen radyal geçiş integralleri Denk.(7.66)'da kullanılarak Azot atomunda 2p-3p seviyelerinin bazı seçilmiş ince yapı geçişleri arasındaki iki foton soğurma tesir kesitleri hesaplanmıştır. Hesaplamalarda kullanılan her bir ara seviyenin toplam tesir kesitine katkıları ve toplam tesir kesitleri Çizelge (1.2) ve Çizelge (1.3)'de verilmektedir. Azot atomunda $2p^3 \ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2 \ (^3P)3p \ ^4S_{3/2}$ ve $2p^3 \ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2 \ (^3P)3p \ ^4D_{7/2}$ seviyeleri arasında hesaplanan iki foton soğurma tesir kesitleri Omidvar'ın sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. İki foton soğurma tesir kesiti hesaplamalarında sürekliliğe yakın çok sayıda ara seviyenin hesaplamalara dahil edilmesi ve her seviyeyi tanımlayacak uygun dalga fonksiyonlarının seçilmesi gerektiğinden teorik hesaplamalar kolay değildir. Uyarılmış seviyelere karşı gelen uygun dalga fonksiyonlarının tanımlanması için hesaplamalarda çok sayıda konfigürasyonla çalışılması gerektiğinden, uyarılmış seviyeleri doğru tanımlayacak dalga fonksiyonlarını oluşturmak zordur. Omidvar kendi çalışmasında yukarıda bahsedilen zorluklardan dolayı seviyeleri düşük uyarılmış, yüksek uyarılmış olarak ayrı ayrı tanımlayarak her bir kısma ait dalga fonksiyonlarını farklı yöntemlerle oluşturmuştur. Düşük uyarılmış seviyeler için Single Konfigürasyonel Hartree-Fock (SCHF) yönteminden elde edilen dalga fonksiyonları, yüksek uyarılmış seviyeler için kuantum kusur teorisinden elde edilen hidrojenik dalga fonksiyonlarını kullanarak Azot atomunun bazı ince yapı geçişlerine ait iki foton soğurma tesir kesitlerini hesaplamıştır. Bu hesaplamada dört s seviyesi ve dört d seviyesi olmak üzere toplam sekiz ara seviye hesaplamalara dahil edilmiştir. Ayrıca iki foton soğurma tesir kesitlerini hesaplamak için osilatör şiddeti yöntemini de kullanmıştır. Osilatör şiddeti yönteminde en büyük katkıyı yapan sadece bir ara seviye hesaplamalarda kullanılmaktadır. Bunun için osilatör şiddeti yöntemi kullanılarak elde edilen iki foton soğurma tesir kesiti sonuçlarının çok hassas olması beklenmemektedir.

Azot atomundaki iki foton soğurma tesir kesiti hesaplamalarında en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi kullanılarak elde edilen ardışık sekiz ara seviyenin hesaplamalara dahil edilmesi iyonlaşma düzeyi olan sürekli bölgeye çok yaklaştığı anlamındadır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi ile hem düşük uyarılmış hem de yüksek uyarılmış seviyelerle çalışmak, çok uzun zaman alan ve karmaşık hesaplama süreci olan diğer yöntemler kadar zor değildir. Bu yöntemle ardışık sekiz tane s seviyesi ve sekiz tane d seviyesi olmak üzere toplam on altı ara seviyeye ait radyal geçiş integralleri, seviyelerin deneysel enerji değerleri ve

seviyelere ait yarıçapların beklenen değer verileri kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçların Omidvar'ın sonuçlarıyla uyumlu olduğu görülmüştür. Bu yöntemle elde edilen radyal geçiş integrallerinin belirlenmesindeki hassasiyet beklenen değer hesaplamalarına bağlıdır. Bu nedenle radyal beklenen değer ifadeleri ne kadar hassas hesaplanırsa radyal geçiş integralleri ve buna bağlı olarak tesir kesitlerinin de o kadar hassas elde edilmesi beklenmektedir.

Çizelge 1.1: Azot atomunda $2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$ ve $2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$ seviyeleri arasında geçişler için en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi kullanılarak elde edilen radyal geçiş integralleri (a.b.)

Geçiş	$R(nl, n'l')$	Geçiş	$R(n'l', n'l')$
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)3s\ ^4P$	0,912934	$2p^2(^3P)3s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	-5,026757
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)3d\ ^4P$	0,347366	$2p^2(^3P)3d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	-7,437335
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)4s\ ^4P$	0,319744	$2p^2(^3P)4s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	5,084352
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)4d\ ^4P$	0,168205	$2p^2(^3P)4d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	-0,986748
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)5s\ ^4P$	0,225689	$2p^2(^3P)5s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	1,211953
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)5d\ ^4P$	0,102172	$2p^2(^3P)5d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	-0,516168
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)6s\ ^4P$	0,189104	$2p^2(^3P)6s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	0,752938
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)6d\ ^4P$	0,068115	$2p^2(^3P)6d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	-0,437007
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)7s\ ^4P$	0,176883	$2p^2(^3P)7s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	0,557178
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)7d\ ^4P$	0,048923	$2p^2(^3P)7d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	-0,409704
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)8s\ ^4P$	0,178982	$2p^2(^3P)8s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	0,493389
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)8d\ ^4P$	0,023395	$2p^2(^3P)8d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	-0,495618
Geçiş	$R(nl, n'l')$	Geçiş	$R(n'l', n'l')$
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)3s\ ^4P$	0,912934	$2p^2(^3P)3s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	-5,163543
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)3d\ ^4P$	0,347366	$2p^2(^3P)3d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	-7,491172
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)4s\ ^4P$	0,319744	$2p^2(^3P)4s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	3,841351
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)4d\ ^4P$	0,168205	$2p^2(^3P)4d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	-0,95553
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)5s\ ^4P$	0,225689	$2p^2(^3P)5s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	1,082366
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)5d\ ^4P$	0,102172	$2p^2(^3P)5d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	-0,497359
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)6s\ ^4P$	0,189104	$2p^2(^3P)6s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	0,699732
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)6d\ ^4P$	0,068115	$2p^2(^3P)6d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	-0,447856
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)7s\ ^4P$	0,176883	$2p^2(^3P)7s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	0,567085
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)7d\ ^4P$	0,048923	$2p^2(^3P)7d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	-0,432048
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)8s\ ^4P$	0,178982	$2p^2(^3P)8s\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	0,526193
$2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)8d\ ^4P$	0,023395	$2p^2(^3P)8d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	-0,495618

Çizelge 1.2: Azot atomunda $2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$ ve $2p^3\ ^4S_{3/2} \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$ seviyeleri arasındaki tesir kesiti hesaplamalarında kullanılan her bir ara seviyenin toplam tesir kesitine katkıları ($\times 10^{-35}\text{ cm}^4$)

Azot	l''	n''	3	4	5	6	7	8
$^4S_{3/2}$	0	σ_0	$1,09 \times 10^{-1}$	$1,025 \times 10^{-3}$	$2,679 \times 10^{-4}$	$6,995 \times 10^{-5}$	$3,295 \times 10^{-5}$	$2,613 \times 10^{-5}$
	2	σ_0	$1,02 \times 10^{-1}$	$3,92 \times 10^{-4}$	$2,072 \times 10^{-5}$	$1,192 \times 10^{-5}$	$5,396 \times 10^{-6}$	$1,794 \times 10^{-6}$
$^4D_{7/2}$	0	σ_0	$8,783 \times 10^{-2}$	$4,475 \times 10^{-3}$	$2,814 \times 10^{-5}$	$4,630 \times 10^{-5}$	$2,612 \times 10^{-5}$	$2,277 \times 10^{-5}$
	2	σ_0	$7,909 \times 10^{-4}$	$2,812 \times 10^{-6}$	$2,72 \times 10^{-7}$	$9,6 \times 10^{-8}$	$4,5 \times 10^{-5}$	$1,3 \times 10^{-8}$

Çizelge 1.3: Azot atomunda hesaplanan iki foton soğurma tesir kesitinin karşılaştırılması

Bu Çalışma WBEPMT $\sigma_T^{(2)}$	Omidvar (1984) SCHF + DEFECT $\sigma_T^{(2)}$	Omidvar (1981) Os. Şiddet. Yönt $\sigma_T^{(2)}$
$7,405 \times 10^{-36}$	$6,6710 \times 10^{-36}$	$12,1 \times 10^{-36}$

Kaynaklar

- Berrington, K.A., Burke, P.G., Dourneuf, M. Le., Robb, W. D., Taylor, K. T. and Lan, Vo Ky *New version of the general program to calculate atomic continuum processes using the R-matrix method* Comput. Phys. Commun. Vol.14, 5-6, 367-412 (1979)
- Berrington, K.A., Burke, P.G., Butler, K., Seaton, M.J., Storey, P.J., Taylor, K.T. and Yan, Y. *Atomic data for opacity calculations II. computational methods* J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Physics 20 23 6379-6397 (1987)
- Cowan, R.D. *The theory of atomic structure and spectra* University of California Press Berkeley (1981)
- Indelicato, P., Gorveix, O. and Desclaux, J.P. *Multiconfigurational Dirac- Fock studies of two-electron ions II. radiative corrections and comparison with experiment* J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Physics 20 4 651-663 (1987)
- Biredikhin, V.I., Galanin, M.D. and Genkin, V.N. *Two-photon absorption and spectroscopy* Sov. Phys. Usp. Vol. 16 No. 3 299-321 (1973)
- Biraben, F., Cagnac, B. and Grynberg, G. *Experimental evidence of two-photon transition without doppler broadening* Phys. Rev. Lett. 32,643. (1974)
- Bokor, J. *Multiphoton ultraviolet spectroscopy of some 6p levels in Krypton* Phys. Rev. A 21, 1453–1459 (1979)
- Lambropoulos, P. *Topics on multiphoton processes in atoms advances in atomic and molecular physics* Vol. 12 Acedemic Press New York (1976)
- Chang, T.N. and Poe, R.T. Bull. Am. Phys. Soc. 19,1202. (1974)
- Pinzola, M.S. *Two-photon excitation of atomic Oxygen* Phys. Rev. A 17, 1021 (1978)

11. Omidvar, K. *Two-photon excitation cross section in light and intermediate atoms in frozen-core Ls-coupling approximation* Phys. Rev. A 22 4 1576 (1980)
12. Omidvar, K. Errata: *Two-photon excitation cross section in light and intermediate atoms in frozen-core ls-coupling approximation* Phys. Rev. A 22 4 1576 (1984)
13. Condon, E.U. and Shortley, G.H. *The theory of atomic spectra* Cambridge University press Cambridge (1959)
14. Racah, G. *Theory of complex spectra I* Physical Review 62 438 (1942)
15. Racah, G. *Theory of complex spectra II* Physical Review 63 367 (1943)
16. Rohrlich, F. *Sum rules for multiplet strengths* Astrophysical Journal 129 449 (1959)
17. Kuhn, H.G. *Atomic spectra* Academic Press New York (1969)
18. Wen, G.W., Wang, L.Y. and Wang, R.D. *Calculation of matrix elements in the model potential theory of atomic structure* Chinese Science Bulletin 36 547-550 (1991)
19. Zheng, N.W., Sun, Y.J., Wang, T., Ma, D.X., Zhang, Y. and Su, W. *Transition probability of lithium atom and lithiumlike ions with weakest bound electron wave functions and coupled equations* International Journal of Quantum Chemistry 76 51-61 (2000)
20. Ralchenko, Yu., Jou, F.C., Kelleher, D.E., Kramida, A.E., Musgrove, A., Reader, J., Wiese, W.L., and Olsen, K. *NIST Atomic spectra database (version 3.0.1)*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2005)
21. Gaigalas, G. and Fischer, C.F. *Extension of The HF Program to partially filled F-subshells* Comput. Phys. Commun. Volume 98, 1-2, 255-264 (1996).
22. Lindgard, A. and Nielsen, S.E. *Numerical approach to transition probabilities in the coulomb approximation: Be II and Mg II Rydberg series* J. Phys. B 8 1183-1199 (1975)