

Lityum Atomunda Bazı Yüksek Uyarılmış Seviyelerin Bireysel Çizgileri Arasındaki Geçiş Olasılıklarının Hesaplanması

Gültekin ÇELİK¹, Şule ATEŞ, Hamdi Şükür KILIÇ

Selçuk Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kampus, Konya

Özet: Bu çalışmada, lityum atomunda bazı yüksek uyarılmış seviyelerin bireysel çizgileri arasındaki geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi kullanılarak hesaplandı. Geçiş olasılıklarının hesaplanması için gerekli olan parametrelerin belirlenmesinde iyonlaşma enerjileri literatürdeki deneysel enerji verilerinden ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri Sayısal Coulomb Yaklaşımı (NCA) kullanılarak elde edildi. Bu çalışmada elde edilen geçiş olasılığı sonuçlarının kabul edilen değerlerle iyi uyumlu olduğu görüldü.

Anahtar Kelimeler: Geçiş olasılığı, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi, lityum atomu

The Calculation of Transition Probabilities between Individual Lines of Some Highly Excited Levels on Lithium Atom

Abstract: In this study, the transition probabilities have been calculated between individual lines of some highly excited levels in lithium atom using the weakest bound electron potential model theory. In the determination of parameters needed for calculation of transition probabilities, ionization energies taken from experimental energy data in the literature and Numerical Coulomb Approximation (NCA) have been employed for expectation values of radii belong to levels. The results of transition probabilities obtained from this study have observed good agreement with accepted values.

Key Words: Transition probability, weakest bound electron potential model theory, lithium atom

Giriş

İki ve daha fazla aktif elektron içeren çok elektronlu atomik ya da iyonik sistemlerde elektron-elektron etkileşmesi önemli bir rol oynadığından Schrodinger denkleminin çözümü için bazı yaklaşımlar yapılması zorunludur. Literatürde birçok yöntem, farklı yaklaşımlar yaparak çok

¹ E-mail: gcelik@selcuk.edu.tr

elektronlu sistemlerde Schrodinger denkleminin çözümünden enerji özdeğerlerinin ve dalga fonksiyonlarının elde edilebilmesine olanak sağlamaktadır. Lityum atomu kapalı kabuk dışında tek bir elektrona sahip çok elektronlu basit bir sistem olarak bilinir. Bu yüzden çok elektronlu sistemlerde gözönüne alınan yaklaşım yöntemlerini test etmek için atomik yapı hesaplamalarında sıkça kullanılan bir atomdur. Atomik sistemler için geçiş olasılıklarının hesaplanması başlangıç ve son seviyelere ait en az iki dalga fonksiyonu hesaplaması gerektirdiğinden enerji hesaplamalarından her zaman daha zor olmuştur. Literatürde lityum atomunun geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi fiziksel özelliklerin belirlenmesinde birçok teorik yöntem kullanılmaktadır. Fulton ve Johnson lityum atomunda geçiş matris elemanlarını ve osilatör şiddetlerini [1] Liaw ise elektrik dipol osilatör şiddetlerini Dirac-Fock yaklaşımı kullanarak hesapladılar [2]. Yan ve Drake lityum atomunun $2^2S \rightarrow 2^2P$ ve $2^2P \rightarrow 3^2D$ geçişleri için osilatör şiddetlerini Hylleraas koordinatlarında varyasyonel dalga fonksiyonları kullanarak hesapladılar [3]. Weiss, lityum atomunun temel seviyesi ile ilk uyarılmış seviyeleri için ve bir kez iyonlaşmış Berilyum atomu için konfigürasyon etkileşmesi hesaplamaları yaptı [4]. Brandus lityum atomunun $3d^2D$ seviyesine ait geçiş olasılığı ve yaşam süreleri hesaplamalarını Rohrllich-Griem-Slater, Roothaan-Hartree-Fock ve perdelenmiş hidrojenik dalga fonksiyonlarını kullanarak hesapladı [5]. Schweizer ve Fabinder Lityumdan Sezyum atomuna kadar alkali metal atomlar için ve Lityum iso-elektronik dizisi için model potansiyel parametreleri oluşturdu ve çeşitli geçişler için bağlanma enerjilerini, etkin başkuantum sayılarını ve osilatör şiddetlerini hesapladılar [6]. Barnett ve ark. Lityum atomunun $2^2S \rightarrow 2^2P$ geçişleri için Monte Carlo yöntemini kullanarak osilatör şiddetlerini hesapladılar [7]. Bunge, lityum atomunda elektrik dipol geçiş olasılıklarını nonrelativistik konfigürasyon etkileşmesi dalga fonksiyonlarını kullanarak hesapladı [8]. Tüm bu hesaplamalarda kullanılan teorik yaklaşımlar bir kaç elektron için kolayca uygulanabilirken uyarılmış seviyelere gidildikçe ve elektron sayısı arttıkça hesaplamalar oldukça zor ve karmaşık bir hale gelmektedir. Bu çalışmada Lityum atomunun bazı yüksek uyarılmış seviyelerin bireysel çizgileri arasındaki geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak karmaşık hesaplamalara girmeden kısa bir hesaplama süreci içerisinde belirlenmiştir.

Teori ve Hesaplama Yöntemi

Çok elektronlu atomik ya da iyonik sistemlerde özellikle yüksek uyarılmış seviyelerde enerji seviyeleriyle ilgili teorik hesaplamalar elektronların ayırt edilemezliğinden ve uyarılmış seviyeleri doğru tanımlayabilmek için oldukça çok sayıda konfigürasyon ve orbital baz set fonksiyonu kullanmak gerektiğinden her zaman zor olmuştur. Bu zorluğun üstesinden gelebilmek için yeni yöntemlerin geliştirilmesi birçok araştırmacı tarafından yoğun bir şekilde çalışılmaktadır. Son olarak en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi çok elektronlu atomik ve iyonik sistemlerde çeşitli fiziksel parametrelerin hesaplanmasında başarıyla kullanılmaktadır [9-11].

γJM kuantum sayılarıyla tanımlı bir enerji seviyesi ile $\gamma' J' M'$ kuantum sayılarıyla tanımlı farklı bir seviye arasındaki elektrik dipol geçiş olasılığı,

$$A(\gamma JM \rightarrow \gamma' J' M') = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 (E_j - E_j')^3}{3h} S \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 \quad (1)$$

olarak verilir [12]. γJM durumundan $\gamma' J'$ seviyesinin tüm M' durumlarına geçiş gözönüne alındığında elektrik dipol geçiş olasılığı,

$$A = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 (E_j - E_j')^3}{3h(2J' + 1)} S \quad (2)$$

şeklinde verilmektedir. Burada $(E_j - E_j)$ ilgili seviyeler arasındaki enerji farkı ve S elektrik dipol çizgi şiddetidir. Çizgi şiddeti gözönüne alınan atomik sistemdeki geçerli çiftlenme şekline ve geçiş tipine bağlı olarak ifade edilir. Elektron sayısı az olan yani hafif atomlarda baskın çiftlenme şekli LS çiftlenimidir. Bu çiftlenimde iki uyarılmış seviye arasındaki tek bir elektron geçişi için elektrik dipol çizgi şiddeti,

$$\sqrt{S_{LS}} \equiv \langle [(\dots\alpha_1 L_1, l_2) L(\dots S_1 s_2) S] J \parallel r_N^{(1)} \parallel [(\dots\alpha'_1 L'_1, l'_2) L(\dots S'_1 s'_2) S'] J' \rangle \quad (3)$$

$$= \delta_{\alpha_1 L_1 S_1, \alpha'_1 L'_1 S'_1} \delta_{s s'} (-1)^{S+J'+L_1+l'_2} [J, J', L, L']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & l_2 & L \\ 1 & l' & l'_2 \end{matrix} \right\} P_{l_2 l'_2}^{(1)}$$

$$P_{l_1 l'_2}^{(1)} = \langle n_i, l_i | r^k | n_f, l_f \rangle = \int_0^\infty r^{k+2} R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) dr \quad (4)$$

$$\left\{ \begin{matrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{matrix} \right\} = W(abcd;ef) \quad (5)$$

şeklinde verilir [12]. Burada $W(abcd;ef)$ Racah katsayısı ya da Wigner'in 6-j sembolü olarak tanımlanır ve iki ya da daha fazla açısal momentumun çiftleniminde kullanılır. $P_{ll}^{(1)}$ niceliği ise

radial geçiş integrali ya da geçiş matris elemanı olarak bilinir. Radyal geçiş integralinin tüm çiftlenme şekillerinde çözümü aynıdır. Kabul edilen yaklaşıma uygun olarak Schrodinger denkleminin çözümünden elde edilen radyal fonksiyonlar kullanılarak belirlenir. $W(abcd;ef)$ katsayıları ise dalga fonksiyonunun açısal kısımlarını oluşturmaktadır. Bu çalışma da Denk. (6)' da verilen $\langle n_i, l_i | r^k | n_f, l_f \rangle$ matris elemanı en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak belirlenmiştir.

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) Çinli kimyacı Zheng tarafından ortaya atılmıştır [9]. Zheng çok elektronlu atomik ya da iyonik sistemde elektronik hareketi tanımlamak için yeni bir potansiyel model önerdi. Bu yeni potansiyel modele göre gözönüne alınan sistemdeki tüm elektronlar sisteme en zayıf bağlı bir elektron ve sisteme zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar olarak iki kısma ayrılmıştır. Çok elektronlu sistemlerde en zayıf bağlı elektron sistemdeki diğer elektronlara göre en kolay koparılabilecek ya da uyarılabilecek olan elektrondur. Birçok fiziksel ve kimyasal özellik sistemdeki en zayıf bağlı elektronun davranışı içersinde ele alınabilmektedir ve geçişler, uyarılma ve iyonlaşma gibi bazı atomik ya da iyonik özellikler en zayıf bağlı elektronun davranışına göre belirlenebilmektedir. Bu yeni yöntemde göre verilen bir sistemde tüm elektronları sisteme en zayıf bağlı bir elektron ve sisteme zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar olarak ikiye ayırarak karmaşık çok elektron problemi tek elektron problemine indirgenebilmekte ve kolayca çözülebilmektedir. Bu teoride elektronik radyal dalga fonksiyonları deneysel iyonlaşma verileri ve seviyelere ait yarıçapların beklenen değerleri kullanılarak belirlenen bazı parametrelere bağlı olarak Laguerre polinomlarının fonksiyonu şeklinde verilmektedir. Daha sonra enerji seviyeleri, geçiş olasılıkları osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi fiziksel parametreler Zheng tarafından verilen bu dalga fonksiyonları kullanılarak hesaplanabilmektedir [13-15]. Bu teoriye göre en zayıf bağlı elektronun Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen radyal dalga fonksiyonu,

$$R = \left(\frac{2Z^*}{n^*} \right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n^* - l^* - 1)!} \Gamma(n^* - l^* + 1) \right]^{-1/2} \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*} \right) r^{l^*} L_{n^*-l^*-1}^{2l^*+1} \left(\frac{2Z^* r}{n^*} \right) \quad (6)$$

olarak ifade edilir [9,11,13]. Burada n^* ve l^* parametreleri,

$$n^* = n + d, \quad l^* = l + d \quad (7)$$

şeklinde verilir ve n^* etkin başkuantum sayısını, l^* etkin yörünge kuantum sayısını, Denk.(6)' da verilen Z^* niceliği ise etkin çekirdek yükünü göstermektedir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisinde radyal geçiş integrallerinin hesaplanması için Z^* , n^* ve l^* parametrelerinin bilinmesi gereklidir. Bu parametreler, Denk.(8) ve Denk. (9)' un birlikte çözümünden elde edilmektedir [9-11].

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (8)$$

$$\langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^* + 1)}{2Z^*} \quad (9)$$

Burada ε ya da I en zayıf bağlı elektronun iyonlaşma enerjisi ve $\langle r \rangle$ niceliği ise en zayıf bağlı elektronun yarıçapının beklenen değerini göstermektedir. Bu teoriye göre Denk.(8) ve Denk. (9)' un çözümünde iyonlaşma enerjileri literatürdeki deneysel verilerden [16], yarıçapların beklenen değerleri ise sayısal Coulomb yaklaşımı yönteminden belirlenmiştir [17]. Z^* , n^* ve l^* parametreleri belirlendikten sonra radyal geçiş integralleri kullanılarak Lityum atomunda bazı yüksek uyarılmış seviyelerin bireysel çizgileri arasındaki geçiş olasılıkları hesaplanmış ve elde edilen sonuçlar Tablo 1 de verilmiştir.

Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada lityum atomunun bazı yüksek uyarılmış seviyelerinin bireysel çizgileri arasındaki geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplandı. Yüksek uyarılmış seviyeler arasındaki geçiş olasılıkları için teorik ve deneysel sonuçlar oldukça sınırlıdır ve henüz duyarlı olarak test edilememektedir. Bu nedenle bu çalışmada gözönüne alınan yüksek uyarılmış geçişlere ait geçiş olasılığı sonuçları sadece *National Institute of Standards and Technology (NIST)*'den alınan kabul edilen değerlerle karşılaştırılabilmiştir. Bu çalışmada elde edilen sonuçların kabul edilen değerlerle oldukça iyi uyumlu olduğu Tablo 1' den görülmektedir.

Çok elektronlu atomik ya da iyonik sistemlerde özellikle yüksek uyarılmış geçişleri bilinen teorik yöntemlerle çalışmak hesaplamaları çok fazla karmaşık hale getirdiğinden kolay ve kullanışlı değildir. Bu yöntemlerin bazıları relativistik etkileri ve korelasyon etkilerini gözönüne alan güçlü yöntemlerdir. Fakat bu yöntemlerde uyarılmış seviyelere doğru gidildikçe seviyeleri doğru tanımlayabilmek için çok sayıda konfigürasyon ya da çok sayıda orbital basis-set fonksiyonu kullanılmalıdır. Bu nedenle söz konusu teorik yöntemler yüksek uyarılmış seviyelerden daha çok düşük uyarılmış seviyelere ait sonuçları içermektedir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori deneysel enerji değerlerini ve yarıçaplara ait beklenen değerleri kullanan basit hesaplama süreci bir yöntemdir. Bu yöntemde geçiş olasılıklarının hesaplanması için Z^* , n^* ve l^* parametrelerinin belirlenmesi yeterlidir. Bu yöntem kullanılarak karmaşık hesaplamalara girilmeden düşük ve yüksek uyarılmış seviyeler için geçiş olasılıkları diğer yöntemlerden daha kısa bir sürede hesaplanabilmektedir.

Tablo 1. Lityum atomunun bazı yüksek uyarılmış seviyelerinin bireysel çizgileri arasındaki geçiş olasılıkları ($\times 10^8 \text{ sn}^{-1}$)

İlk seviye (i)	Son Seviye (s)	TERİMLER		Dalga boyu Å	İstatiksel Ağırlık (2j+1)		Bu Çalışma	NIST Değerleri (Ref.16)
		i	s		i	s		
$1s^2 5s$	$1s^2 5p$	2S	2P	139615	2	4	0.00247	0.00233
				139615	2	2	0.00247	0.00233
$1s^2 5s$	$1s^2 6p$	2S	2P	47803.2	2	4	2.78e-05	1.72e-05
				47803.2	2	2	2.78e-05	1.72e-05
$1s^2 5p$	$1s^2 5d$	2P	2D	1259417	4	6	4.87e-06	4.78e-06
				1259577	2	4	4.05e-06	3.98e-06
				1259577	4	4	8.11e-07	7.97e-07
$1s^2 5p$	$1s^2 6s$	2P	2S	102844	4	2	0.00571	0.00565
				102844	2	2	0.00285	0.00283
$1s^2 5p$	$1s^2 6d$	2P	2D	70316	4	6	0.00509	0.00398
				70317	2	4	0.00424	0.00332
				70317	4	4	8.48e-04	6.63e-04
$1s^2 5d$	$1s^2 5f$	2D	2F	10457149	6	8	6.87e-09	6.96e-09
				10437155	4	6	6.43e-09	6.50e-09
				10457149	6	6	4.58e-10	4.64e-10
$1s^2 5d$	$1s^2 6p$	2D	2P	77145	6	4	1.26e-03	1.28e-03
				77145	4	2	1.40e-03	1.42e-03
				77145	4	4	1.40e-04	1.42e-04
$1s^2 5f$	$1s^2 6d$	2F	2D	75009	8	6	3.95e-04	3.99e-04
				75009	6	4	4.15e-04	4.19e-04
				75009	6	6	1.97e-05	2.00e-05

Literatürdeki deneysel enerji değerleri birbirine çok yakın olduğundan bu yöntemin hassasiyeti sadece seviyelerin yarıçaplarının beklenen değerlerine bağlıdır. Yarıçapların beklenen değerleri ne kadar doğru hesaplanırsa geçiş olasılığı sonuçları da o kadar hassas hesaplanacaktır. Bu yöntem özellikle yüksek uyarılmış seviyeler için diğer yöntemlere göre hesaplama süreci ve zaman bakımından daha kullanışlıdır.

Kaynaklar

1. Fulton, T., Johnson, W.R. **Numerical test of the equality of the “length” and “velocity” forms of oscillator strengths for Li in the Dirac-Fock approximation** Phys. Rev. A **34**, 1686 (1986).
2. Liaw, S.S. **Energy levels and transition amplitudes for alkali-metal atoms in the Brueckner approximation** Phys. Rev. A **48**, 3555-3560 (1993).
3. Yan, Z. C., Drake, G.W.F. **Theoretical lithium $2^2S \rightarrow 2^2P$ and $2^2P \rightarrow 3^2D$ oscillator strengths** Phys. Rev. A **52**, R4316-4319 (1995).
4. Weiss, A.W. **The calculation of atomic oscillator strengths the lithium atom revisited** Can. J. Chem. **70**, 456-463 (1992).
5. Brandus, L. **On the calculation of transition probabilities and lifetimes for lithium atom** Rev. Roum. Phys. Tome **28**, 595-600 (1983).
6. Schweizer, W., Fabinder, P., Gonza, R. **Model potentials for alkali-metal atoms and Li-like ions** At.Data Nucl.Data Tabl. **72**, 33-55 (1999).
7. Barnett, R.N., Johnson, E. M., Lester, W. A. **Quantum Monte Carlo determination of the lithium $2^2S \rightarrow 2^2P$ oscillator strength: higher precision** Phys. Rev. A **51**, 2049-2052 (1995).
8. Bunge, C.F. **Accurate calculations for the even-parity core-excited 2P states of neutral Li** Phys. Rev. A **19**, 936-942 (1979).
9. Zheng, N. W. **A new outline of atomic theory** jiang su education press nanjing PR China: (1988).
10. Zheng, N. W., Wang, T., Yang, R. **Transition probability of Cu I, Ag I and Au I from weakest bound electron potential model theory** J. Chem. Phys. **113**, 15 6169-6173 (2000).
11. Fan, J, Zheng, N W **Oscillator strengths and transition probabilities for Mg-like ions** Chem. Phys. Lett. **400**, 273-278 (2004).
12. Cowan, R. D. **The theory of atomic structure and spectra** university of California press: (1981).
13. Zheng, N. W., Wang, T., Ma, D. X., Zhou, T., Fan, J. **Weakest bound electron potential model theory** Int. J. Quant. Chem. **98**, 281-290 (2004).
14. Wen, G. W., Wang, L. Y., Wang, R. D. **Calculation of matrix elements in the model potential theory of atomic structure** Chin. Sci. Bull. **36**, 547-550 (1991).
15. Zheng N. W., Wang, T., Yang, R.Y. I, Zhou, T., Ma, D. X., Wu, Y. G., Xu, H. T. **Transition probabilities for Be I, Be II, Mg I, and Mg II** At.Data Nucl.Data Tabl. **79**, 109-141 (2001).
16. NIST Atomic Spectroscopic Database URL:<http://physics.nist.gov> “Physical Reference Data” (2006).
17. Lindgard, A., Nielsen, S. E. **Numerical approach to transition probabilities in the coulomb approximation: Be N I and Mg II Rydberg series** J. Phys. B **8**, 1183-1199 (1975).