



**İSTANBUL
ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**LANTAN ELEMENTİNİN İNCE VE AŞIRI İNCE
YAPISININ İNCELENMESİ**

Alev ER

**Fizik Anabilim Dalı
Atom ve Molekül Fiziği Programı**

**Danışman
Prof. Dr. Gönül BAŞAR**

Haziran, 2006

İSTANBUL



**İSTANBUL
ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**LANTAN ELEMENTİNİN İNCE VE AŞIRI İNCE
YAPISININ İNCELENMESİ**

Alev ER

**Fizik Anabilim Dalı
Atom ve Molekül Fiziği Programı**

**Danışman
Prof. Dr. Gönül BAŞAR**

Haziran, 2006

İSTANBUL

Bu çalışma 14/07/2006 tarihinde ařağıdaki jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı Atom ve Molekül Fiziğı programında Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi

Prof.Dr.Gönül BAŞAR (Danışman)
AKYÜZ
İstanbul Üniversitesi

Prof.Dr.Sevim
İstanbul Üniversitesi

Prof.Dr.Galip TEPEHAN
ARIKAN
Kadir Has Üniversitesi

Prof.Dr.Çetin
İstanbul Üniversitesi

Y.Doç.Dr.Elif AKALIN
İstanbul Üniversitesi

Bu çalışma İstanbul Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Yürütücü Sekreterliğinin T-762/27122005 numaralı projesi ile desteklenmiştir.

ÖNSÖZ

Yüksek lisans öğrenimim süresince bilgisi, ilgisi ve güler yüzüyle gerek teorik gerek Berlin Teknik Üniversitesi'nde gerçekleştirdiğimiz deneysel çalışmalarda hiçbir desteğini esirgemeyen danışman hocam Prof. Dr. Gönül Başar'a bana vermiş olduğu her türlü bilgi ve emek için çok teşekkür ederim.

Berlin Teknik Üniversitesi'nde gerçekleştirdiğimiz laboratuvar çalışmaları süresince her konuda bilgisini ve tecrübesini esirgemeyen İ.T.Ü. öğretim üyelerinden hocam Doç. Dr. Günay Başar'a en içten dileklerle teşekkür ederim. Yüksek lisans çalışmalarına başladığımdan beri benden bilgisini, tecrübesini ve desteğini esirgemeyen saygıdeğer hocam Prof.Dr.Sevim Akyüz'e teşekkürü bir borç bilirim. Çalışmamda yol gösteren, hiçbir zaman yardımını esirgemeyen hocam Araş. Gör. Dr. İpek Kanat Öztürk'e; teorik çalışmalardaki desteklerinden dolayı Berlin Teknik Üniversitesi öğretim üyelerinden Prof. Dr. Sophie Kröger'e ve İ.T.Ü. öğretim üyelerinden Yard.Doç.Dr. F.Gülay Acar'a teşekkür ederim. Lisans ve yüksek lisans öğrenimim boyunca gösterdiği her türlü destek için hocam Araş. Gör. Dr. Kubilay Balcı'ya çok teşekkür ederim. Bu çalışmanın teorik kısmını destekleyen İstanbul Üniversitesi'ne ve deneysel kısmını destekleyen Berlin Teknik Üniversitesi'ne teşekkürü borç bilirim.

Yaşamım boyunca benden ilgi ve desteğini esirgemeyen, hep yanımda hissettiğim aileme verdikleri emek için çok teşekkür ederim.

Haziran, 2006

Alev ER

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	i
İÇİNDEKİLER	ii
ŞEKİL LİSTESİ	iv
TABLO LİSTESİ	vii
SEMBOL LİSTESİ	viii
ÖZET	ix
SUMMARY.....	x
1. GİRİŞ	1
2. GENEL KISIMLAR.....	3
3. MALZEME VE YÖNTEM	13
3.1. ATOMLARIN GENEL ÖZELLİKLERİ	13
3.1.1. Manyetik Momentler	14
3.2. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLER	17
3.2.1. Merkezi Alan Yaklaşıklığı.....	17
3.2.2. Hartree-Fock Yöntemi	19
3.3. İNCE YAPI(FINE STRUCTURE(FS))	23
3.3.1. İnce Yapı Yarılımları.....	23
3.3.2.İnce Yapı Parametreleri.....	26
3.3.3. İnce Yapı Programı	27
3.4. AŞIRI İNCE YAPI(HYPERFINE STRUCTURE(HFS))	32
3.4.1. Atomik Çekirdek ve Yörünge Elektronları Arasındaki Etkileşim	32
3.4.1.1. Manyetik Etkileşim.....	32
3.4.1.2. Elektrostatik Etkileşim.....	38
3.4.2. Aşırı İnce Yapı Yarılımları	40
3.4.3. Aşırı İnce Yapı Parametreleri	45
3.5. DENEYSEL METOD	49
3.5.1. Deney Düzenegi.....	49
3.5.2. Silindir Katod.....	51

3.5.3. Optogalvanik Spektroskopi	53
3.5.4. Deney Datalarının Analizi	55
4. BULGULAR	61
4.1. LANTAN (^{139}La) ELEMENTİNİN GENEL ÖZELLİKLERİ	61
4.2. DENEYSEL BULGULAR.....	62
4.2.1. ^{139}La I Ölçümleri	62
4.3. TEORİK BULGULAR.....	88
4.3.1. İnce Yapı Analizi	88
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	102
KAYNAKLAR	105
ÖZGEÇMİŞ	109

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 3.1	: ($s = 1$) ve ($\ell = 1$) kuantum sayılarına sahip 3P terimli bir enerji seviyesinin ince yapı yarılımları.....	25
Şekil 3.2	: Cowan ince yapı programının çalışma sırası.....	31
Şekil 3.3	: Elektronların yörünge ve spin hareketi nedeniyle üretilen $H(o)$ manyetik alanının yönü.....	33
Şekil 3.4	: $\vec{F}$ atoma ait toplam açısal momentum vektörü.....	35
Şekil 3.5	: İnce yapı, aşırı ince yapı ve hiç etkileşim olmadığı durumlar için enerji seviyeleri.....	41
Şekil 3.6	: $I = 3/2$, $J = 1$ kuantum sayılarına sahip bir seviyenin mümkün hfs geçişleri.....	43
Şekil 3.7	: Optogalvanik Spektroskopi deney düzeneği.....	49
Şekil 3.8	: FPI'nın $\Delta\lambda$ FSR aralığı ile $\delta\lambda$ spektral yarı genişliği.....	50
Şekil 3.9	: Silindir katot lambası.....	52
Şekil 3.10	: $\lambda = 796.483$ nm dalgaboyuna karşılık gelen spektral geçişin, ilk alınmış ve lineerize edilmiş deneysel spektrumları.....	58
Şekil 4.1	: La I elementine ait ölçülen spektral geçişler.....	64
Şekil 4.2	: La I elementinin, $\lambda=574.441$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	69
Şekil 4.3	: La I elementinin, $\lambda=577.000$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	70
Şekil 4.4	: La I elementinin, $\lambda=584.838$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	71
Şekil 4.5	: La I elementinin, $\lambda=586.997$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	72
Şekil 4.6	: La I elementinin, $\lambda=709.240$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	73
Şekil 4.7	: La I elementinin, $\lambda=714.978$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı	

	sabiti B	74
Şekil 4.8	: La I elementinin, $\lambda=715.805$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	75
Şekil 4.9	: La I elementinin, $\lambda=716.125$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	76
Şekil 4.10	: La I elementinin, $\lambda=732.091$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	77
Şekil 4.11	: La I elementinin, $\lambda=733.417$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	78
Şekil 4.12	: La I elementinin, $\lambda=734.442$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	79
Şekil 4.13	: La I elementinin, $\lambda=753.359$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	80
Şekil 4.14	: La I elementinin, $\lambda=753.923$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	81
Şekil 4.15	: La I elementinin, $\lambda=784.180$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	82
Şekil 4.16	: La I elementinin, $\lambda=796.483$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	83
Şekil 4.17	: La I elementinin, $\lambda=805.139$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik	

	dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	84
Şekil 4.18	: La I elementinin, $\lambda=808.605$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	85
Şekil 4.19	: La I elementinin, $\lambda=823.790$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	86
Şekil 4.20	: La I elementinin, $\lambda=824.744$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B	87

TABLO LİSTESİ

Tablo 2.1	: ^{139}La I elementinin çift pariteli konfigürasyona sahip enerji seviyelerine ait daha önce yapılmış çalışmalardan elde edilen literatürde yer alan A ve B aşırı ince yapı sabitleri.....	7
Tablo 2.2	: ^{139}La I elementinin tek pariteli konfigürasyona sahip enerji seviyelerine ait daha önce yapılmış çalışmalardan elde edilen literatürde yer alan A ve B aşırı ince yapı sabitleri.....	10
Tablo 4.1	: Lantan (^{139}La) elementinin fiziksel ve kimyasal özellikleri.....	62
Tablo 4.2	: La I elementine ait 19 farklı geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, bu geçişlere ait dalga boyları ve şiddetleri ile bu seviyelerin enerjileri, terimleri ve konfigürasyonları.....	66
Tablo 4.3	: İncelediğimiz 19 spektral geçişe karşılık gelen çift pariteli enerji seviyelerinin literatürden bilinen A ve B değerleri.....	67
Tablo 4.4	: La I elementinin tek pariteli konfigürasyonlarına ait Optogalvanik Spektroskopi yöntemi kullanılarak elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri A 'lar ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri B 'ler.....	68
Tablo 4.5	: La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait Nist'te verilen deneysel enerji aralıkları ve j değerlerine göre sahip oldukları enerji seviyelerinin sayısı.....	88
Tablo 4.6	: La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait ince yapı parametreleri.....	89
Tablo 4.7	: La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait hesaplanan ince yapı parametreleri, kuplaj durumları $^{(1)}$, $^{(2)}$, $^{(3)}$, $^{(4)}$, $^{(5)}$, $^{(6)}$	91
Tablo 4.8	: La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait hesaplanan konfigürasyonlar arası etkileşme parametreleri, bu parametrelerin kuplaj durumları $^{(7)}$, $^{(8)}$	92
Tablo 4.9	: La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait deneysel enerji ve g değerleri, teorik enerji ve g değerleri, öz vektör bileşenleri ve konfigürasyonlara göre yüzde olarak dağılımları.....	94

SEMBOL LİSTESİ

c : Işık hızı

λ : Dalgaboyu

ν : Frekans

μ : Manyetik moment

g : Landé çarpanı

ψ : Dalga fonksiyonu

ÖZET

LANTAN ELEMENTİNİN İNCE VE AŞIRI İNCE YAPISININ İNCELENMESİ

Bu çalışmada nötr Lantan elementinin (La I) ince ve aşırı ince yapısının incelenmesi amaçlandı.

Lantan elementinin aşırı ince yapısı deneysel olarak incelendi. La I elementinin 570 nm – 590 nm ve 700 nm – 825 nm dalgaboyu aralığındaki 19 farklı spektral geçişin spektrumları silindir katod boşalım ortamında boya laser ve Titan – Safir laser kullanılarak optogalvanik spektroskopi yöntemi ile ölçüldü.

La I elementinin tek pariteli 16 enerji seviyesine ait A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti belirlendi. Altı A manyetik dipol ve 11 B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti ilk defa bu çalışmada elde edildi.

Lantan elementinin ince yapısı ise teorik olarak incelendi. La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$, $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait ince yapı parametreleri belirlendi. 97 deneysel enerji seviyesinin 94'ü çok konfigürasyonlu fit metodu kullanılarak teorik enerji değerleri ile fit edildi.

SUMMARY

INVESTIGATION OF FINE AND HYPERFINE STRUCTURES OF LANTHANUM ELEMENT

Investigation of fine and hyperfine structures of neutral Lanthanum (La I) element was aimed in this study.

Hyperfine structures of neutral Lanthanum were investigated experimentally in the wavelenghts range of 570 nm – 590 nm and 700 nm – 825 nm. 19 spectral transition were measured with Optogalvanic Spectroscopy method using dye laser and Titan-Saphire laser in a hollow cathode discharge.

16 Magnetic dipol hyperfine structure constants A and electric quadropol hyperfine structure constants B were determined for the odd parity energy levels. Six magnetic dipole A and 11 electric quadropole B hyperfine structure constants were obtained for the first time in this study.

Fine structure of Lanthanum was investigated theoretically. Fine structure parameters of odd parity configurations; $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$, $4f5d6s$ of La I were determined. 94 energy levels of 97 experimentally known energy levels were fitted with theoretical energy values by using multi-configurational fit method.

1.GİRİŞ

Maddenin yapısına inildiğinde molekül ve atomlarla karşılaşılır. Molekül ve atomların yapısının incelenmesi maddeyi anlamamızı sağlar. Atom ve molekül yapıları ancak spektroskopik yöntemlerle anlaşılabilir. Bu yapıların saldığı ya da soğurduğu ışınım, soğurma ve emisyon spektrumları ile açıklanır. Bu spektrumlar incelenerek spektral çizgilerin şiddetinden farklı seviyeler arasındaki geçiş olasılıkları anlaşılır. Geçiş olasılıkları ise enerji seviyelerinin dalga fonksiyonları hakkında bilgi verir. Böylece sistemin enerjisi hakkında bilgi edinilmiş olur [1].

Merkezi alan yaklaşıklığını temel alan Hartree-Fock yöntemi atomsal dalga fonksiyonları ve enerjilerinin bulunmasında bir ilk adım olarak göz önüne alınabilir [2]. Bu çalışmada dalga fonksiyonları Hartree-Fock yaklaşıklık metodu kullanılarak hesaplandı. Böylece incelenen konfigürasyonların enerjileri belirlendi.

Merkezi alan yaklaşıklığında hidrojen atomu için kinetik ve potansiyel enerjileri içeren atomik Hamiltonyen çözüldüğünde dalga fonksiyonları ve enerji ifadeleri bulunur. Bu çözüm pertürbe olmamış Hamiltonyenin tam çözümüdür. Ancak Hamiltonyen sadece kinetik enerji ve potansiyel enerji terimlerinden ibaret değildir. Hamiltonyene enerji sıralamasına göre spin-yörünge etkileşme (ince yapı), elektronların kendi aralarındaki etkileşmeler, çekirdek-elektron etkileşme (aşırı ince yapı) terimleri eklenerek çok elektronlu sistemler için Hamiltonyen çözüldüğünde enerji ifadesine daha doğru bir şekilde ulaşılır [1].

İnce yapı yarılmaları yörünge manyetik momentiyile spin manyetik momenti arasındaki manyetik etkileşmeden kaynaklanır [3]. Elektronik enerji düzeyleri üzerinde ince yapı etkisinden çok daha küçük etkiler olduğu bilinir. Bunlar aşırı ince yapı etkileridir. Aşırı ince yapı etkileri ince yapı ile karşılaştırıldığında 10^3 ile 10^4 kere daha küçüktür [4]. Bu etkiler elektronların çekirdekte oluşturdukları elektromanyetik alanla çekirdeğin

elektromanyetik çok kutup momentlerinin etkileşmesi gerçeğinden doğar. Çekirdeğin elektromanyetik çok kutup momentlerinin en önemlisi çekirdek spinine eşlik eden manyetik dipol momenti ve çekirdekdeki küresel yük dağılımından ayrılma sonucu ortaya çıkan elektrik kuadropol momentidir [2].

Atom fiziği açısından bakıldığında konfigürasyonlar arası etkileşmeler ve relativistik etki aşırı ince yapının tek elektron parametrelerinin belirlenmesi ile anlaşılabilir. Spektral çizgilerin sınıflandırılmasında aşırı ince yapının görmezden gelinmesi yanlış sonuçlar doğurur. Aşırı ince yapı astrofizikte yıldızların bolluk analizinde ve yıldız atmosferlerinin fiziksel parametrelerinin belirlenmesinde kullanılır [5-6-7].

Bu çalışmada nötr Lantan (La I) elementinin ince ve aşırı ince yapısının incelenmesi amaçlandı. La atomik yapı teorikçileri ve spektroskopi ile uğraşanlar için dikkat çekici bir elementtir. La I' in spektrumu oldukça zengindir. Bugüne kadar birçok araştırmacı tarafından farklı spektroskopik metodlarla incelenmiş olmasına rağmen literatürde hala boşluklar mevcuttur. Bu çalışma deneysel ve teorik kısım olmak üzere iki kısımdan oluşur. Çalışmanın teorik kısmında La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait bilinen 97 deneysel enerji seviyesinin 94'ü Cowan [8] ince yapı programı ile hesaplanan ince yapı parametreleri kullanılarak, teorik enerji değerleri ile fit edildi. Deneysel enerji değerleri bilinmeyen 14 enerji seviyesinin de teorik enerji değerleri ve teorik g değerleri hesaplandı. Çalışmanın deneysel kısmı Berlin Teknik Üniversitesi'nde gerçekleştirildi. Öncelikle literatür araştırılarak La I elementinin günümüze kadar incelenen spektral geçişlerine ait *A* manyetik dipol ve *B* elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri verildi. Bu veriler göz önünde bulundurularak çalışmanın özgünlüğü açısından özellikle daha önce incelenmemiş spektral geçişler dikkate alınıp aşırı ince yapı analizi gerçekleştirildi. La I elementinin 570 nm–590 nm ve 700 nm–825 nm dalgaboyu aralığındaki 19 farklı spektral geçişin spektrumları boya laser ve Titan–Safir laser kullanılarak Optogalvanik Spektroskopi yöntemi ile ölçüldü. Bu deneysel spektrumlar Fitter [9] bilgisayar programı kullanılarak hesaplanan teorik spektrumlarla fit edildi. Fit işlemi sonucunda deneysel olarak *A* manyetik dipol ve *B* elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri bulundu. Çalışmanın özgünlüğü, bu çalışmada hesaplanan ve bulunan değerler günümüze kadar yapılmış çalışmalar göz önünde bulundurularak ifade edildi.

2. GENEL KISIMLAR

Nadir toprak elementlerinden olan Lantan (La I) elementi periyodik cetvelde lantanitlerin başında yer alır. La I elementinin biri tek kütle numarasına, diğeri çift kütle numarasına sahip olmak üzere iki izotopu vardır. Bunlar, doğal karışımda %0.089 yoğunlukta olan ^{138}La ve %99.911 yoğunluğundaki ^{139}La 'dır. $(5d+6s)^3$ kombinasyonlarındaki farklı elektron yerleşimleri için güçlü konfigürasyon etkileşimleri söz konusudur. Bu durum hem spektroskopistlerin hem de atomik yapı teorikçilerinin dikkatini çekmiştir. La I elementi çok zengin bir spektruma sahiptir ve atomik spektroskopi teknikleri ile belirlenmiş binlerce çizgisi mevcuttur. Atomik yapısının belirlenmesine ek olarak ^{139}La izotopuna ait çekirdek manyetik dipol moment μ_I ve elektrik kuadropol moment Q da araştırılmıştır [10-11]. Atomik geçişlerin aşırı ince yapı (hfs) araştırmaları, atomun elektronlarının ürettiği elektrik ve manyetik alanla çekirdek momentleri arasındaki etkileşimi açıklamak için gerekli olan bilgiyi sağlar. Deneyler sonucunda elde edilen bilgiler elektronların dalga fonksiyonlarının özellikleri hakkında bilgi verir. Atomik spektrumunun karışıklığı ve deneysel zorluklar nedeniyle nadir toprak elementlerinin hfs bilgileri henüz tamamlanamamıştır [12]. La I elementinin ^{139}La izotopuna ait tek ve çift pariteli konfigürasyonlu enerji seviyelerinin hfs yarılmaları günümüze kadar birçok araştırmacı tarafından değişik yöntemlerle incelenmiştir. Bunun yanında izotop kayma çalışmaları da yapılmıştır. Literatüre bakıldığında La I elementinin ^{139}La izotopu ile ilgili çalışmalarda daha çok çift pariteli konfigürasyonlara sahip enerji seviyelerinin aşırı ince yapısının incelendiği görüldü. 710 nm–830 nm Titan-Safir laser bölgesinde $^{139}\text{La I}$ ya ait spektral çizgilerin aşırı ince yapısı günümüze kadar incelenmemiştir. La I elementinin ^{139}La izotopu bugüne kadar birçok araştırmacı tarafından farklı spektroskopik metodlarla incelenmiş olmasına rağmen literatürde hala boşluklar mevcuttur.

1955 yılında G. Lührs La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$ konfigürasyonuna ait $^2P_{3/2}$ terimi ile belirtilen seviyenin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitini bulmuştur [13].

1971 yılında M. Wilson Lantan elementine ait çift pariteye sahip $5d^26s$, $5d6s^2$ ve $5d^3$ konfigürasyonlarının Hartree-Fock hesaplamalarını yaparak, radyal dalga fonksiyonlarının L-S terimine bağlılığını incelemiştir [14]. Aynı yıl W. J. Childs ve L. S. Goodman Atomik Işın Demeti Manyetik Rezonansı tekniğini kullanarak ^{139}La için dalga sayısı 9000 cm^{-1} in altında olan ve daha önce aşırı ince yapı hesapları yapılmamış çift pariteli $5d^26s$ konfigürasyonuna ait $^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$, $^2F_{5/2,7/2}$, $^4P_{1/2,3/2,5/2}$, $^2D_{3/2,5/2}$ terimleri ile belirtilen seviyelerin A manyetik dipol, B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerini bularak çekirdek elektrik kuadropol momenti Q değerini hesaplamışlardır [10]. 1971 yılında W. Fischer, H. Hühnermann ve diğ. klasik Optiksel Girişim Spektroskopisi metodunu kullanarak tek pariteli $5d6s6p$ konfigürasyonuna ait $z\ ^4F_{5/2,7/2,9/2}$, $y\ ^2F_{5/2,7/2}$, $z\ ^2F_{5/2,7/2}$, $z\ ^4D_{5/2,7/2}$, $y\ ^2D_{3/2,5/2}$, $z\ ^2D_{5/2}$, $z\ ^4P_{5/2}$ ve tek pariteli $5d^26p$ konfigürasyonuna ait $z\ ^4G_{11/2}$, $z\ ^2H_{11/2}$ terimleriyle belirtilen seviyelerin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitlerini ölçmüşlerdir [15]. 1974 yılında Z. Ben Ahmed, C. Bauche-Arnoult ve diğ. Fourier Transform Spektroskopisi yöntemini kullanarak dalga sayısı 3500 ve 14500 cm^{-1} aralığındaki yakın IR bölgede La I elementinin $(5d+6s)^3$ çift pariteli konfigürasyonlarına ait enerji seviyelerini ve aşırı ince yapılarını incelemiştir. 37 enerji seviyesinden 35'inin enerji sınıflandırılması bu çalışmada yapılmıştır. Çift pariteli $5d^26s$ konfigürasyonuna ait $^2S_{1/2}$, $^2P_{1/2,3/2}$, $^2G_{7/2,9/2}$ ve çift pariteli $5d^3$ konfigürasyonuna ait $^2P_{1/2,3/2}$, $^4P_{1/2,3/2}$, $^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$, $a\ ^2D_{3/2,5/2}$, $^2H_{11/2}$ terimleriyle belirtilen seviyelerin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri bulunmuştur [16]. 1977 yılında W. J. Childs ve L.S. Goodman Laser-Atomik Işın Demeti Spektroskopisi yöntemi ile boya laser kullanılarak 593.06 nm bölgesinde yakın iki çizgiyi ayırtmışlar ve tek pariteli $5d6s6p$ konfigürasyonuna ait $y\ ^2F_{5/2,7/2}$ terimleri ile verilen üst enerji seviyeleri için A ve B hfs dipol ve kuadropol sabitlerini elde etmişlerdir [11]. 1978 yılında W. J. Childs ve L. S. Goodman Laser-Atomik Işın Demeti Floresansı yöntemini kullanarak ^{139}La elementinin tek pariteli $5d6s6p$ ve $5d^26p$ konfigürasyonlarına ait $y\ ^2F_{5/2,7/2}$, $y\ ^2P_{3/2}$ ve $z\ ^4G_{5/2,7/2}$, $y\ ^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$, $x\ ^2F_{5/2,7/2}$ terimli seviyelerin A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerini belirlemişlerdir. 1979 yılında ise Laser-RF Çift Rezonans yöntemini kullanarak La I elementinin iki farklı izopu ^{138}La ve ^{139}La için çekirdek elektrik kuadropol momenti oranlarını hesaplamışlardır [17-18]. 1983 yılında O. H. Behrens ve G. H. Gutherlein tek pariteli $5d^26p$ konfigürasyonuna ait $^4P_{5/2}$, $^2G_{7/2}$ terimleri ile verilen seviyelerin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitlerini bulmuşlardır [19]. 1988 yılında W. J. Childs ve

U. Nielsen Atomik Işın Laser-Rf Çift Rezonans tekniğini kullanarak ^{139}La I'in çift pariteli $5d^26s$ konfigürasyonuna ait 11 seviyenin ve $5d^3$ konfigürasyonuna ait dört seviyenin aşırı ince yapısını incelemişlerdir. Tek pariteli $5d6s6p$ konfigürasyonuna ait $^2P_{1/2,3/2}$ terimli, $5d^26p$ konfigürasyonuna ait $^4D_{5/2}$, $^4P_{1/2,5/2}$, $^4S_{3/2}$, $^2G_{7/2}$ terimli ve $4f5s6s$ konfigürasyonuna ait $^4D_{1/2,5/2,7/2}$, $^4F_{3/2,5/2}$ terimli seviyelerin A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerini belirlemişlerdir [20]. 1989 yılında J.Govindarajan ve T.Pramila Laser Optogalvanik Spektroskopisi yöntemini kullanarak ^{139}La elementine ait 21 enerji seviyesinin manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A değerlerini belirlemişlerdir. Tek pariteli $5d^26p$ ve $5d6s6p$ konfigürasyonlu y $^4F_{3/2,7/2,9/2}$, x $^4D_{3/2,7/2}$, x $^2D_{5/2}$, y $^2G_{7/2}$, z $^4S_{3/2}$, u $^2F_{5/2}$ ile y $^2F_{3/2,7/2}$ terimli seviyelere ait; çift pariteli $5d6s^2$ ve $5d^26s$ konfigürasyonlu a $^2D_{3/2,5/2}$ ile a $^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$, a $^4P_{3/2}$, a $^2F_{7/2}$, a $^2G_{7/2}$ terimli seviyelere ait A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitlerini bulmuşlardır. x $^4D_{3/2,7/2}$, z $^4S_{3/2}$, u $^2F_{5/2}$ terimli seviyelere ait A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerlerini ilk defa bu çalışmada elde etmişlerdir [12]. 1990 yılında R.W.Shaw , J.P. Young ve diğ. İyonizasyon Kütle Spektroskopisi ve Diyet Laser Rezonansı yöntemlerini kullanarak $^2D_{3/2}$ - $^4F_{3/2}$ ve $^2D_{5/2}$ - $^4F_{3/2}$ spektral geçişlerini incelemiş; $^4F_{3/2}$ terimli 13260cm^{-1} seviyesine ait A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerini belirlemişlerdir [21]. Aynı yıl T.Pramila Laser Optogalvanik Spektroskopisi yöntemini kullanarak ^{139}La I elementine ait 10 spektral geçişin aşırı ince yapı yarılmasını incelemiş ve 18 seviyenin manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A değerlerini bulmuşlardır. Tek pariteli $5d6s6p$ $^4F_{3/2}$ - $^2P_{1/2}$, $4f5d6s$ $^4F_{7/2}$, ile çift pariteli $5d6s7s$ $^4D_{5/2}$ konfigürasyon ve terimli enerji seviyelerine ait A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri ilk defa bu çalışmada belirlenmiştir. Çift pariteli $5d6s^2$ a $^2D_{5/2}$, $5d^26s$ a $^4F_{3/2,5/2,7/2}$, a $^2F_{5/2,7/2}$, a $^4P_{5/2}$, $5d6s7s$ e $^4F_{5/2}$; tek pariteli $5d6s6p$ y $^2P_{1/2,3/2}$, z $^4F_{3/2}$, $5d^26p$ z $^4G_{5/2,7/2}$, z $^4S_{3/2}$, y $^4F_{5/2}$, x $^2F_{5/2}$, v $^2F_{5/2,7/2}$ konfigürasyonları ve terimleri ile verilen enerji seviyelerinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitlerini bulmuştur [22]. 1990 yılında Luo Caiyan , Qu Jianan ve diğ. silindir katod boşalım tüpü kullanarak Doppler-İndirgenmiş Intermodule Floresans, Laserle Uyarılmış Floresans ve Optogalvanik Spektroskopi metodları ile $5d6s6p$ $^2P_{1/2}$, $5d^26p$ $^2F_{7/2}$ konfigürasyon ve terimleri ile verilmiş enerji seviyeleri için A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti değerlerini; $5d^26p$ $^2D_{5/2}$, $5d6s6p$ $^4P_{5/2}$, $4f5d6s$ $^2D_{3/2}$, $^2G_{7/2}$ ile tanımlanmış enerji seviyeleri için de sadece A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerleri belirlenmiştir [23]. 1992 yılında Liejuan Jia , Chunyang Jing ve

diğ. Laser Optogalvanik Spektroskopisi yöntemi kullanarak ^{139}La I'e ait tek pariteli konfigürasyonlardan sekizini incelemiş ve bu konfigürasyonlara ait aşırı ince yapı sabitlerini elde etmişlerdir. Çift pariteli $5d^26p$ konfigürasyonlu $^2D_{3/2,5/2}$, $^4D_{7/2}$, $^4P_{3/2,5/2}$, $^2F_{5/2}$, $^2P_{3/2}$ ve tek pariteli $4f5d6s$ konfigürasyonlu $^4G_{7/2}$ ile verilen enerji seviyelerinin manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A değerlerini belirlemişlerdir. Bulunan A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değerlerinden beşi ilk defa bu çalışmada elde edilmiştir [24]. 1994 yılında D. M. Benton , J. L. Cooke ve diğ., Yüksek Çözünürlüklü Laser Spektroskopisi yöntemi kullanarak La I elementinin $^{138,139}\text{La}$ I izotoplarına ait seviyelerin izotop kaymalarını ve aşırı ince yapılarını incelemişlerdir. ^{139}La I izotopuna ait dokuz farklı spektral geçiş için $5d^26p$ $^4G_{5/2,7/2}$, $^2D_{3/2,5/2}$, $^4P_{5/2}$, seviyelerine ait A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerini belirlemişlerdir [25]. 1997 yılında Yu.P.Gangrsky D.V.Karaivanov ve diğ. Laserle Uyarılmış Rezonans Floresans metodunu kullanarak $5d6s6p$ $^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$, $^2P_{1/2,3/2}$, $5d^26p$ $^4S_{3/2}$, tek pariteli multipletlerine ait yedi spektral geçişin ve çift pariteli $5d^26s$ $^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$ enerji seviyelerinin aşırı ince yapı yarılımlarını incelemiş, A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerini bulmuşlardır [26]. 2001 yılında Wei-Guo Jin, Toshiaki Endo ve diğ. Atomik Işın Diyot Laser Spektroskopisi yöntemi kullanarak $^{138,139}\text{La}$ elementine ait iki farklı izotop için $5d6s^2$ konfigürasyonunun $^2D_{3/2}$ terimi ile tanımlanan seviyesi ile $5d6s6p$ konfigürasyonlu $^4F_{5/2}$ terimli seviye arasındaki 675.304 nm dalgaboylu spektral geçişe ait A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerini Lantan elementinin iki farklı izotopu ^{138}La ve ^{139}La için bulmuşlardır [27].

Tablo 2.1'de şu ana kadar literatürde yer alan La I elementinin ^{139}La izotopuna ait çift pariteli konfigürasyona sahip enerji seviyelerinin, Tablo 2.2'de ise tek pariteli konfigürasyona sahip enerji seviyelerinin A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri hataları ile birlikte verilmiştir.

Tablo 2.1: ^{139}La I elementinin çift pariteli konfigürasyona sahip enerji seviyelerine ait daha önce yapılmış çalışmalardan elde edilen literatürde yer alan A ve B aşırı ince yapı sabitleri.

Enerji (cm^{-1})	Konfigürasyon	$A(\text{MHz})$	$B(\text{MHz})$	Ref.no:
0.000	$5d6s^2$ $^2D_{3/2}$	141	44.8	[10]
		141.1959	44.781	[20]
		147(6)		[12]
		141.60(42)	44.04(85)	[27]
1053.164	$5d6s^2$ $^2D_{5/2}$	182	54.2	[10]
		182.1706	54.213	[20]
		210(5)		[12]
		183(5)		[22]
		182.1		[16]
2668.188	$5d^26s$ $^4F_{3/2}$	- 480.312(2)	15.082(17)	[10]
		- 480	14.2(0.2)	[10]
		- 480.6(0.5)	14.1(4)	[20]
		- 480.292	15.188	[20]
		- 480(6)		[12]
		- 480.321(2)		[12]
		- 479(6)		[22]
		- 480.66(28)	16.7(2.1)	[26]
		- 480.3		[16]
3010.002	$5d^26s$ $^4F_{5/2}$	300.563(1)	10.873(25)	[10]
		301	14.0(0.3)	[10]
		300.563	10.873	[20]
		300(5)		[12]
		300.58(18)	11.3(2.8)	[26]
		301.2		[16]
3494.526	$5d^26s$ $^4F_{7/2}$	462.868(1)	17.925(24)	[10]
		463	19.3(0.2)	[10]
		459(8)		[12]
		459(4)		[22]
		463.25(32)	23.3(5.9)	[26]
		463.2		[16]
4121.572	$5d^26s$ $^4F_{9/2}$	489.534(1)	32.180(34)	[10]
		490	31.9(0.2)	[10]
		495(4)		[12]
		489.71(22)	32.6(6.1)	[26]
		490.2		[16]

Tablo 2.1'in devamı

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon		A(MHz)	B(MHz)	Ref.no:
7011.909	5d ² 6s	² F _{5/2}	304.372(2)	28.091(30)	[10]
			304	27.8(0.1)	[10]
			303(5)		[22]
			304.2		[16]
7231.407	5d ² 6s	⁴ P _{1/2}	2460.119(3)		[10]
			2460	0	[10]
			2460.161	0	[20]
			2476.8		[16]
7490.521	5d ² 6s	⁴ P _{3/2}	930.0(0.2)	42.1(2.3)	[10]
			930	37.2(2.5)	[10]
			931.0(0.5)	37.6(4)	[20]
			929.618	37.221	[20]
			936(6)		[12]
			930.6		[16]
7679.939	5d ² 6s	⁴ P _{5/2}	802.8(0.5)	- 23.9(8.0)	[10]
			802	- 40(8)	[10]
			802.0(0.5)	- 36.9(4)	[20]
			802.172	- 34.186	[20]
			810(5)		[22]
			802.5		[16]
8052.162	5d ² 6s	² F _{7/2}	- 197.066(6)	40.677(123)	[10]
			- 197	41.4(0.2)	[10]
			- 197.3(0.5)	39.4(4)	[20]
			- 197.064	40.754	[20]
			- 197(4)		[12]
			- 197.1		[16]
8446.044	5d ² 6s	² D _{3/2}	- 424.7(1.4)	- 11.3(3.6)	[10]
			- 425	- 13(4)	[10]
			- 422.5(0.5)	- 7.2(4)	[20]
			- 422.399	- 6.753	[20]
			- 425.4		[16]
9044.214	5d ² 6s	² P _{1/2}	226.8(0.5)	0	[20]
			226.892	0	[20]
			237		[16]
9183.797	5d ² 6s	² D _{5/2}	881.0(5.8)	22(36)	[10]
			876.6(0.5)	- 0.6(4)	[20]
			876.319	- 2.772	[20]

Tablo 2.1'in devamı

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon		A(MHz)	B(MHz)	Ref.no:
9183.797	5d ² 6s	² D _{5/2}	881.7		[16]
9719.439	5d ² 6s	² P _{3/2}	- 655.3(0.5)	- 32.6(4)	[20]
			- 655.138	- 33.249	[20]
			- 654		[16]
9919.821	5d ² 6s	² G _{9/2}	560.3(0.5)	196.6(4)	[20]
			559.812	202.638	[20]
			567		[16]
9960.904	5d ² 6s	² G _{7/2}	- 292.4(0.5)	66.2	[20]
			- 292.267	67.537	[20]
			- 292.269		[20]
			- 300(4)		[12]
			- 289.113(23)		[12]
			- 294		[16]
12430.609	5d ³	⁴ F _{3/2}	445.5(0.5)	- 17.1(4)	[20]
			445.086	- 16.068	[20]
			438		[16]
12787.404	5d ³	⁴ F _{5/2}	98.4(0.5)	- 29.8(4)	[20]
			97.510	- 16.521	[20]
			96		[16]
13238.323	5d ³	⁴ F _{7/2}	- 19.3(0.5)	- 15.9(4)	[20]
			- 19.103	- 20.898	[20]
			- 27		[16]
13747.276	5d ³	⁴ F _{9/2}	- 63.8(0.5)	- 26.2(4)	[20]
			- 63.829	- 27.385	[20]
			- 69		[16]
16617.30	5d ³	⁴ P _{1/2}	- 609		[16]
16735.14	5d ³	⁴ P _{3/2}	- 231		[16]
16994.42	5d ² 6s	² S _{1/2}	4116		[16]
18037.64	5d ³	² D _{3/2}	228		[16]
18310.92	5d ³	² H _{11/2}	60		[16]
18776.62	5d ³	² D _{5/2}	9		[16]
20392.60	5d ³	² P _{1/2}	258		[16]
21037.30	5d ³	² P _{3/2}	- 90		[16]
30354.32	5d6s 7s	⁴ F _{5/2}	- 942(5)		[16]

Tablo 2.2: ^{139}La I elementinin tek pariteli konfigürasyona sahip enerji seviyelerine ait daha önce yapılmış çalışmalardan elde edilen literatürde yer alan A ve B aşırı ince yapı sabitleri.

Enerji (cm^{-1})	Konfigürasyon		A(MHz)	B(MHz)	Ref.no:
13260.38	5d6s6p	$^4\text{F}^{\circ}_{3/2}$	-471(6)		[22]
			-352(6)	48(15)	[21]
			-350(4)	54(12)	[21]
			-347(2)	60(8)	[21]
13631.04	5d6s6p	$^4\text{F}^{\circ}_{5/2}^?$	959(30)		[15]
14804.08	5d6s6p	$^4\text{F}^{\circ}_{5/2}$	333(3)		[15]
			335.01(74)	23.64(95)	[27]
15019.51	5d6s6p	$^4\text{F}^{\circ}_{7/2}$	672(21)		[15]
15196.83	4f6s ²	$^2\text{F}^{\circ}_{5/2}$	411(0)		[15]
15503.64	5d6s6p	$^4\text{D}^{\circ}_{5/2}$	585(15)		[15]
16099.29	5d6s6p	$^4\text{D}^{\circ}_{7/2}$	591(0)		[15]
16243.17	5d6s6p	$^4\text{F}^{\circ}_{9/2}$	611.57(15)		[15]
16538.39	4f6s ²	$^2\text{F}^{\circ}_{7/2}$	144(15)		[15]
16856.80	5d ² 6p	$^4\text{G}^{\circ}_{5/2}^?$	268(6)		[12]
			262.5(0.3)	64(6)	[11],[17]
			261(18)		[15]
			262.0(4)	71(6)	[25]
17910.17	5d ² 6p	$^4\text{G}^{\circ}_{7/2}^?$	280(4)		[12]
			279.4(0.3)	86(6)	[11],[17]
			279(9)		[15]
			279.7(2)	84(4)	[25]
17947.13	5d ² 6p	$^4\text{G}^{\circ}_{5/2}$	539.9(0.8)	43(10)	[17]
			540(5)		[22]
			540.6(2)	44(3)	[25]
			540.0(1)	49(5)	[25]
18156.97	5d6s6p	$^4\text{P}^{\circ}_{5/2}$	661.4(6)		[23]
			630(21)		[15]
			633.0(4)	43(6)	[25]
			632.4(2)	74(25)	[25]
18172.35	5d ² 6p	$^2\text{D}^{\circ}_{3/2}$	141(21)		[15]
			142.8(1)	2(3)	[25]
			142.6(4)	0(6)	[25]
18603.92	5d ² 6p	$^4\text{G}^{\circ}_{7/2}$	218.8(0.5)	72(10)	[17]
			223(4)		[22]

Tablo 2.2'nin devamı

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon		A(MHz)	B(MHz)	Ref.no:
19379.40	5d ² 6p	² D ^o _{5/2}	-58.7(3)		[23]
			-63(0)		[15]
			-63.3(3)	16(8)	[25]
20018.99	5d6s6p	² P ^o _{3/2} [?]	-48(6)		[22]
			-41.81(15)	1.8(1.2)	[26]
			-41.0(0.3)	3(3)	[17]
			-41.1(0.5)	1.8(4)	[20]
			47.1(6)		[13]
20082.98	5d ² 6p	⁴ F ^o _{3/2}	88.67(10)	-4.0(1.8)	[26]
			87.0(0.5)	-2(4)	[17]
			91(6)		[12]
20117.38	5d ² 6p	⁴ G ^o _{11/2}	60(9)		[15]
20197.34	5d6s6p	² P ^o _{1/2} [?]	131.5(3)	0	[23]
			145(7)		[22]
			126.88(56)		[26]
20338.25	5d ² 6p	⁴ F ^o _{5/2}	258.76(26)	6.9(4.1)	[26]
			265(5)		[22]
			259.2(0.4)	-10(6)	[17]
20763.21	5d ² 6p	⁴ F ^o _{7/2}	195.59(8)	1.8(3.1)	[26]
			196.2(0.3)	-4(3)	[17]
			193(8)		[12]
			192.2(0.3)		[17]
20972.17	5d ² 6p	² F ^o _{5/2} [?]	-66.4(0.3)	35(3)	[17]
			-68(5)		[22]
21384.00	5d ² 6p	⁴ F ^o _{9/2}	93.4(0.3)	-13(6)	[17]
			96(4)		[12]
			92.38(4)	-10.1(3.2)	[26]
21447.86	5d ² 6p	² F ^o _{7/2} [?]	121.5(2)	-35.7(13)	[23]
21662.51	5d ² 6p	² G ^o _{7/2}	283.5(0.3)	55(5)	[17]
23704.81	5d ² 6p	⁴ D ^o _{3/2}	156(6)		[12]
24046.10	5d ² 6p	⁴ D ^o _{5/2}	327.8(0.5)	-36.3(4)	[20]
24173.83	4f5d6s	⁴ F ^o _{3/2}	-228.2(0.5)	0.5(4)	[20]
24409.68	4f5d6s	² G ^o _{7/2} [?]	182.8(2)		[23]
24507.89	4f5d6s	⁴ F ^o _{5/2}	184(5)		[22]

Tablo 2.2'nin devamı

Enerji (cm ⁻¹)	Konfigürasyon		A(MHz)	B(MHz)	Ref.no:
24507.89	4f5d6s	⁴ F ^o _{5/2}	187.3(0.5)	6.2(4)	[20]
24639.26	5d ² 6p	⁴ S ^o _{3/2}	-199.77(8)	2.75(64)	[26]
			-235(6)		[22]
			-232(6)		[12]
24762.60	5d ² 6p?	² D ^o _{3/2}	524(28)		[24]
24910.38	4f5d6s?	² D ^o _{3/2} [?]	-338.6(3)		[23]
24984.29	5d ² 6p	² D ^o _{5/2} [?]	294(10)		[24]
25083.36	5d ² 6p	⁴ D ^o _{7/2}	65(2)		[24]
			77(4)		[12]
25218.27	5d ² 6p	⁴ P ^o _{5/2} [?]	100(5)		[12]
			100.7(0.5)	24.9(4)	[20]
			96.624(9)		[19]
25380.27	4f5d6s	⁴ F ^o _{7/2}	-647(4)		[22]
25453.95	5d6s6p	² P ^o _{1/2} [?]	-385.1(0.5)	0(4)	[20]
25616.95	5d ² 6p	⁴ P ^o _{1/2}	-296.8(0.5)	0(4)	[20]
25643.00	5d ² 6p	⁴ P ^o _{3/2}	146(34)		[24]
25874.52	5d ² 6p	² H ^o _{11/2} [?]	27		[15]
25950.32	5d ² 6p	⁴ S ^o _{3/2}	479.2(0.5)	10.1(4)	[20]
26338.93	5d ² 6p	⁴ P ^o _{5/2}	111(6)		[24]
			100.7(0.5)	-5.6(4)	[20]
27132.44	5d ² 6p	² G ^o _{7/2}	88(4)		[12]
			75.8(0.5)	45.0(4)	[20]
			73.935(76)		[19]
27225.26	5d ² 6p	² P ^o _{3/2}	-11(17)		[24]
27393.04	5d ² 6p	² F ^o _{5/2} [?]	144(4)		[24]
			-153(5)		[12]
27225.26	5d ² 6p	² P ^o _{3/2}	-11(17)		[24]
27455.31	4f5d6s	⁴ G ^o _{7/2}	367(5)		[24]
			364(4)		[24]
			369(5)		[24]
28893.51	4f5d6s	⁴ D ^o _{1/2}	-455.9(0.5)	0(4)	[20]
29502.18	4f5d6s	⁴ D ^o _{5/2} [?]	50.2(0.5)	-8.4(4)	[20]
29775.58	4f5d6s	⁴ D ^o _{5/2} [?]	470.2(0.5)	-3.0(4)	[20]
29894.91	4f5d6s	⁴ D ^o _{7/2} [?]	468.5(0.5)	-0.5(4)	[20]

[?]: Nist [28] tablolarında kesin olarak bilinmeyen terimler.

^o: Tek pariteli konfigürasyonlara ait terimler.

3. MALZEME VE YÖNTEM

3.1. ATOMLARIN GENEL ÖZELLİKLERİ

Atomlarla ilgili ilk spektral çalışma hidrojen atomu ile ilgili olarak 1885 yılında Balmer tarafından yapılmıştır. Atomik spektroskopi çalışmaları hidrojen atomu ile sınırlı kalmamış, çok elektronlu atomlara da geçilerek bu alanda yeni terim ve kavramlar oluşmuştur.

Çok elektronlu atomların spektrumlarını anlayabilmek için bu tür atomlarda elektron sıralanmasının kurallarını bilmek gerekir. Elektronlar özdeş parçacıklardır. Ancak uzaysal konumu ($\psi_{n\ell m}$ dalga fonksiyonu) ile yada sadece ($n \ell m$) kuantum sayıları ile diğerlerinden ayırt edilebilir [1].

($n = 1, 2, 3, \dots$) : Baş kuantum sayısı,

($\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$) : Yörünge açısal momentum kuantum sayısı,

($m_\ell = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$) : Yörünge manyetik kuantum sayısı,

($s = 1/2$) : Spin açısal momentum kuantum sayısı,

($m_s = -1/2, 1/2$) : Spin manyetik kuantum sayısıdır.

Atomlarda n ve ℓ kuantum sayılarının değerlerine göre bir kabuk modelinden söz edilir. Baş kuantum sayısı aynı olan elektronlar bir kabuk oluşturur. Baş kuantum sayısı n ile birlikte yörünge kuantum sayısı ℓ si de aynı olan elektronlar ise bir alt kabuk oluşturur. Bir alt kabuğa yerleşecek elektron sayısı m_ℓ ve m_s kuantum sayılarının belirlediği durum sayıları ile bulunur [2].

3.1.1. Manyetik Momentler

Her açısal momentuma bir dipol moment eşlik eder ve her açısal momentumun bir kuantum sayısı olur. Atomlarda yörünge dipol moment, spin dipol moment, çekirdek dipol moment ve toplam dipol momentinden söz etmek mümkündür. Atoma bağlı bir elektronun yörünge ve spin dipol momentleri etkileşerek elektronun bileşke dipol momentini oluşturur [29].

Elektronun yörünge dipol moment μ_L ,

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \quad (3.1)$$

ile verilir.

$$\left(\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \right) : \text{Bohr Manyetonu,}$$

$\vec{L}$: Yörünge açısal momentum vektörüdür.

Elektronun spin dipol moment μ_s ,

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{S} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad (3.2)$$

ile tanımlanır.

$\vec{S}$: Spin açısal momentum vektörüdür.

Elektronun toplam dipol moment μ_J ,

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_s \quad \vec{\mu}_J = \frac{g_J \mu_B}{\hbar} \vec{J} \quad (3.3)$$

şeklinde gösterilir.

$\vec{J}$: Elektronun toplam açısal momentum vektörü,

g_J : Elektronun Toplam Landé Çarpanıdır.

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (3.4)$$

ile verilir.

Çekirdek spin dipol momenti μ_I ,

$$\vec{\mu}_I = \frac{g_I \mu_N}{\hbar} \vec{I} \quad (3.5)$$

ile verilir.

$$\left(\mu_N = \mu_B \frac{m_e}{m_p} \right) : \text{Çekirdek Manyetonu,}$$

$\vec{I}$: Çekirdek spin açısal momentum vektörüdür.

Çekirdek Landé Çarpanı g_I ,

$$g_I = \frac{\mu_I}{\mu_N \cdot I} \quad (3.6)$$

ile verilir.

Atomun toplam dipol momenti μ_F ,

$$\vec{\mu}_F = \vec{\mu}_J + \vec{\mu}_I \quad \vec{\mu}_F = \frac{g_F \mu_B}{\hbar} \vec{F} \quad (3.7)$$

ile tanımlanır.

Atomun Toplam Landé Çarpanı g_F ,

$$g_F = g_J \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} - g_I \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \quad (3.8)$$

$$g_I = \frac{m_e}{m_p} g_I \quad (3.9)$$

ile gösterilir. Denklemin ikinci kısmı çok küçük olduğundan ihmal edilir [30]. Yaklaşık olarak atomun toplam Landé Çarpanı,

$$g_F \approx g_J \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \quad (3.10)$$

ile verilir.

Atomlarda elektronların yörünge hareketinden kaynaklanan bir iç manyetik alan oluşur. Dış manyetik alanın yokluğunda bu iç manyetik alandan dolayı enerji düzeylerinde ve dolayısıyla spektrumlarında küçük yarılmalar olur. Bu yarılmalara ince yapı yarılmaları denir [31]. İnce yapı yarılmaları yörünge manyetik momentiyile spin manyetik momenti arasındaki manyetik etkileşmeden kaynaklanır [3].

Atom çekirdeklerinin yarıçapları 10^{-4}Å mertebesinde ve çekirdekler elektronlardan 10^3 defa daha ağırdır. Bu sebeple çekirdeğin sonsuz kütleli nokta yük olduğu varsayılır. Bu görüş sonucunda elektronik enerji düzeyleri üzerinde ince yapı etkisinden çok daha küçük etkiler olduğu bilinir. Bunlar aşırı ince yapı etkileridir. Bu etkiler elektronların çekirdekte oluşturdukları elektromanyetik alanla çekirdeğin elektromanyetik çok kutup momentlerinin etkileşmesi gerçeğinden doğar.

Çekirdeğin elektromanyetik çok kutup momentlerinin en önemlisi çekirdek spinine eşlik eden manyetik dipol momenti ve çekirdekteki küresel yük dağılımından ayrılma sonucu ortaya çıkan elektrik kuadropol momentidir [2].

3.2. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLER

3.2.1. Merkezi Alan Yaklaşıklığı

Tek elektronlu sistemlerde çekirdeğin etrafında dönen elektronun Schrödinger denklemi, tam olarak çözülebilir. İki veya daha fazla elektron söz konusu olduğunda tam çözüm mümkün değildir ve yaklaşık hesaplamalar yapılır. Çok elektronlu atomlar için tüm teorilerin başlangıç noktası bağımsız parçacık yaklaşıklığıdır.

Bu yaklaşıklıkta N elektrona sahip bir sistemde her elektronu bağımsız kabul edip; bir elektronun, çekirdek ve durgun sayılan diğer $(N-1)$ elektronun ortalama kuvveti etkisi altında hareket ettiği varsayılır. Bu elektronun içinde bulunduğu ortalama $U(\vec{r})$ potansiyel enerjisine bağımsız parçacık potansiyel enerjisi denir. Bu potansiyel enerji bulunarak, $U(\vec{r})$ ile Schrödinger denklemi çözülüp her elektronun enerji ve dalga fonksiyonu bulunabilir [31].

Bağımsız parçacık yaklaşıklığının en önemli özelliği, her elektronun çekirdek ile diğer $(N-1)$ elektronun ortalama alanında diğer elektronlardan bağımsız hareket ediyor kabulüdür. Diğer yandan $(N-1)$ elektronun çekirdek etrafında küresel simetrik bir dağılım oluşturduğu varsayılır. Bu iyi bir yaklaşıklıktır ve bu iki varsayım birlikte ele alındığında merkezi alan yaklaşıklığı adını alır [32].

N elektron için Hamiltonyen,

$$H = \left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r_i} \right) + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r_{ij}} \right] \quad (3.11)$$

şeklinde verilir.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) : \text{Elektronun kinetik enerjisi,}$$

$$\left(-\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_o)r_i} \right) : \text{Elektronla çekirdek arasındaki Coulomb etkileşmesi,}$$

$$\left(\frac{e^2}{(4\pi\epsilon_o)r_{ij}} \right) : \text{Elektronlar arası Coulomb etkileşmesidir.}$$

N elektronlu atom için dalga fonksiyonu $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N)$ ile verilir. Schrödinger denklemi, N elektronlu sistem için aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned} H\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) &= \left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_o)r_i} \right) + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_o)r_{ij}} \right] \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) \\ &= E \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) \end{aligned} \quad (3.12)$$

q_i : Radyal ve açısal kısmı birlikte ifade eder.

Bu denklem $1/r_{ij}$ terimi nedeniyle değişkenlerine ayıramaz [2]. Bu terim elektronları birarada ifade eder. Oysa $U(r_i)$ potansiyeli N tane bir elektron denklemine ayrılabilir. Bu denklemler birbirinden bağımsız değildir. Çünkü i. elektronun $U(r_i)$ potansiyel enerjisi geriye kalan $(N-1)$ elektronun ve çekirdeğin yarattığı ortalama alana bağlıdır. Bu denklemi tek elektron için çözerken diğer elektronların durumlarını da bilmemiz gerekir. Bu Hartree-Fock iterasyonu ile çözümlenir [32]. Bu durum bölüm (3.2.2)'de anlatılmıştır.

Elektronun gördüğü yük dağılımı küresel simetrik olup $U(\vec{r})$ potansiyel enerjisi θ ve ϕ açılarından bağımsızdır [31]. Potansiyelin bu özelliği merkezi bir alan oluşturur. Potansiyel enerji küresel simetrik olduğunda Schrödinger denklemi değişkenlerine ayırma yöntemi ile çözülebilir. Bu ayırma açılara bağlı kısım ve radyal kısım olarak

düşünülür [1]. Schrödinger denklemi çözülerek elektronların kuantum sayıları ile tanımlanmış dalga fonksiyonları ve enerji öz değerleri elde edilir. Böylece atomik yapı hakkında bilgi edinilmiş olur.

3.2.2. Hartree-Fock Yöntemi

1928’de Hartree tarafından formüle edilen bu yöntemin başlangıç noktası zamandan bağımsız parçacık modelidir. Bu modele göre her elektron çekirdeğin çekici alanı ve diğer elektronlardan ötürü itme etkileşmelerinin ortalama etkisini hesaba katan bir etkin potansiyelde hareket eder. Çok elektronlu sistemlerde her elektron kendi dalga fonksiyonu ile tanımlanır.

Hartree bireysel elektron dalga fonksiyonlarının denklemlerini yazarak bu denklemleri çözmek için öz uyum gerekliliğini temel alan bir tekrarlama süreci önerdi. Hartree yöntemi sadece tekrarlı olarak Schrödinger denkleminin çözülmesinden ibarettir. Hartree metodunun dezavantajı Pauli prensibine uymayan deneme dalga fonksiyonları Ψ ’lerin kullanılmasıdır. Bu sorunu çözmek için Pauli prensibine uyan determinant deneme dalga fonksiyonları kullanılmalıdır. Pauli’nin dışarlama ilkesi ile getirilen anti-simetri gereğini dikkate alan Hartree yönteminin geliştirilmesi 1930’da Fock ve Slater tarafından yapıldı. Hartree-Fock yöntemi olarak bilinen bu metod Hartree kuramının genellemesidir.

Hartree-Fock yaklaşımında bağımsız parçacık yaklaşıklığı ve Pauli’nin dışarlama ilkesine uygun olarak N elektronlu dalga fonksiyonunun bir ϕ Slater determinantı olduğu varsayılır. Hartree-Fock yöntemi atomsal dalga fonksiyonları ve enerjilerinin bulunmasında bir ilk adım olarak göz önüne alınabilir [2].

Tek elektron için Hamiltonyen,

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m_o} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o r_i} \quad (3.13)$$

Elektronlar arası etkileşimin olmaması durumunda Hamiltonyen tek elektron Hamiltonyenlerinin toplamıdır.

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \quad (3.14)$$

Elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesinin dikkate alındığı durum için, i ve k elektron çifti arasındaki Coulomb etkileşme enerjisi $e^2/4\pi\epsilon_0 r_{ik}$ ile verildiğinde Hamiltonyen,

$$H = \sum_{i=1}^N H_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}} \quad (3.15)$$

olur. Schrödinger denklemi bu Hamiltonyen için çözülmelidir.

$$H\Psi = E_{\text{top}} \Psi \quad (3.16)$$

Ferdi elektronların dalga fonksiyonları bilinmektedir.

$$\Psi_Q(\mathbf{R}_i) \quad Q = (n, l, m_l, m_s) \equiv (q, m_s) \quad (3.17)$$

$\vec{R}_i$: Konumu ve spini birlikte ifade eder.

Q: Kuantum sayılarıdır.

Bu dalga fonksiyonuyla ilişkili bir $\rho(\vec{r}_i)$ yük dağılımı bulunmaktadır:

$$\rho(\vec{r}_i) = e \left| \Psi_Q(\vec{R}_i) \right|^2 \quad (3.18)$$

r konumundaki bir yük ile bu yük dağılımı arasında bir etkileşme enerjisi vardır. Bu enerji yükü elektrostatik potansiyelin çarpımı olarak verilir. Coulomb etkileşme enerjisi,

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \int_{\text{Bütün Hacim}} \frac{e\rho(\vec{r}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} d\tau_i = \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \int_{\text{Bütün Hacim}} \frac{e^2 |\Psi_Q(\vec{R}_i)|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} d\tau \quad (3.19)$$

dur ve burada $d\tau_i$ hacim elemanıdır.

Hartree-Fock yönteminin temel noktası çok elektron problemini tek elektron problemine indirmektedir. Bir elektron sadece atom çekirdeğinin alanında hareket etmekte kalmayıp aynı zamanda diğer bütün elektronların tümünün alanında hareket etmektedir. Diğer bütün elektronların, elektron yük dağılımının tek elektron dalga fonksiyonlarıyla verilebileceğini ifade eder.

Seçilen bir k elektronu için Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_o} \nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o r_k} + U_k^{(o)}(\vec{r}_k) \right] \Psi_k^{(1)}(\vec{R}_k) = E \Psi_k^{(1)}(\vec{R}_k) \quad (3.20)$$

şeklindedir.

$U_k(\vec{r})$ bütün elektronları içeren potansiyel enerji olmak üzere,

$$U_k(\vec{r}) = \sum_{i \neq k}^N \int_{\text{Bütün Hacim}} \frac{e^2 |\Psi_{Qi}(\vec{R}_i)|^2}{4\pi\epsilon_o |\vec{r} - \vec{r}_i|} d\tau_i \quad (3.21)$$

şeklinde verilir.

Ψ_{Q_i} yerine $\Psi_{Q_i}^{(o)}$ deneme dalga fonksiyonu (3.21) denkleminde yerine yazılınca $U_k^{(o)}(\vec{r}_k)$ potansiyeli elde edilir. Bu potansiyel Schrödinger denkleminde yerine yazıldığında $\Psi_k^{(1)}(\vec{R}_k)$ dalga fonksiyonu bulunur. Bu işlem $\Psi_k^{(i)}(\vec{R}_k)$ dalga fonksiyonunda önemli bir değişim olmayana kadar devam eder.

$$\Psi^{(o)} \rightarrow U^{(o)} \rightarrow \Psi^{(1)} \rightarrow U^{(1)} \rightarrow \Psi^{(2)} \rightarrow U^{(2)} \dots \Psi^{(i)} \rightarrow \Psi \quad (3.22)$$

Schrödinger denklemi,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_o} \nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o r_k} + U_k(\vec{r}_k) \right] \Psi_{Q_k}(\vec{R}_k) = E \Psi_{Q_k}(\vec{R}_k) \quad (3.23)$$

şeklinde verilir.

Öncelikle bağımsız elektron dalga fonksiyonu için bir tahmin yapılır, yaklaşık bir dalga fonksiyonu seçilir ve bu herbir elektronu tanımlar. Bu dalga fonksiyonları yük dağılımlarında kullanılarak, atomlardaki ortalama yük dağılımı bu fonksiyonlar için hesaplanır ve ortalama merkezi alan potansiyelini bulmak için kullanılır. Bu potansiyel enerji kullanılarak Schrödinger denklemi çözüldüğünde elektronun daha gerçekçi dalga fonksiyonları bulunur [3].

Bu yeni dalga fonksiyonları ile yeniden $U(\vec{r})$ potansiyeli hesaplanır. Dalga fonksiyonları ile potansiyel uyumlu olana kadar bu işlem devam eder. Bu nedenle bu öz uyumlu alan metodu olarak da bilinir [32]. Bu iterasyon tekniğine Hartree-Fock yöntemi denir. Atomik yük dağılımlarının bilinen özelliklerini kullanarak ortalama $U(\vec{r})$ potansiyel enerjisi yaklaşık olarak tahmin edilebilir. Bu potansiyel enerji kullanılarak elektron dalga fonksiyonları ve atomik yapı oldukça doğru bir şekilde açıklanabilir [31].

3.3. İNCE YAPI (FINE STRUCTURE (FS))

3.3.1. İnce Yapı Yarılımları

Atomların manyetik özelliklerinin incelenmesi, kabuk yapılarının anlaşılmasında önemli rol oynar [3]. Birçok atomda yüklerin yörünge hareketinden kaynaklanan bir iç manyetik alan oluşur. Dış manyetik alan yokluğunda bu iç manyetik alandan dolayı enerji düzeylerinde ve dolayısıyla spektrumlarında küçük bir yarıma olur. Bu yarılmaya ince yapı denir [31].

İnce yapı yarılımları yörünge manyetik momentiyile spin manyetik momentini arasındaki manyetik etkileşmeden kaynaklanır.

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S \quad (3.24)$$

Elektronun L yörünge açısal momentumuyla birlikte açığa çıkan bir μ_L yörünge manyetik momentini ve S spin açısal momentumuyla birlikte açığa çıkan bir μ_S spin manyetik momentini vardır. Manyetik momentler etkileşerek elektronun toplam manyetik momentini μ_J 'yi oluşturur. Bu manyetik momentler birbirlerine paralel yada anti-paralel olabilirler. Herbir manyetik moment kendi açısal momentumuyla anti-paraleldir [26].

Elektronun toplam açısal momentumu,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (3.25)$$

ile verilir. Toplam açısal momentum,

$$|L - S| \leq J \leq L + S \quad (3.26)$$

aralığında değerler alır.

Bir elektronun etkileşmesinde manyetik momentler hesaba katıldığında hamiltonyen yeni terimler kazanır. Spin-yörünge etkileşmesi denilen bu ek enerji V_{L-S} , iki manyetik momentin etkileşmesi,

$$V_{L-S} = \xi(r) \vec{\mu}_L \cdot \vec{\mu}_S = \xi(r) \left(-\frac{\mu_B}{\hbar} \right) \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (3.27)$$

şeklinde verilir [33].

$\xi(r)$: Sadece radyal koordinata bağlı spin-dipol ve yörüngesel-dipol momentlerinin etkileşme sabitidir.

Çok elektronlu sistem için ince yapı etkisini de içeren Hamiltonyen,

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{\ell}_i \quad (3.28)$$

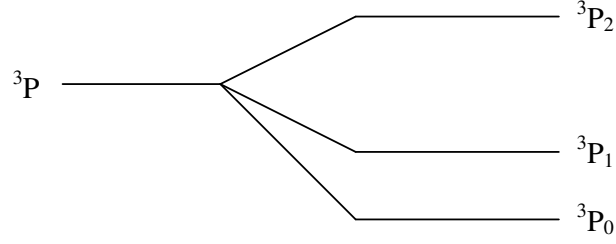
şeklinde verilir.

$\sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{\ell}_i$: Spin-yörünge etkileşme terimidir.

Spin-yörünge etkileşmelerinde valans elektronları arasındaki etkileşmeler göz önüne alınır. Kapalı kabuklar için spin-yörünge etkileşme terimi sıfırdır.

Merkezi alan yaklaşıklığında atomun dalga fonksiyonu, tek elektron dalga fonksiyonlarının lineer kombinasyonu olarak verilir. Bu dalga fonksiyonları radyal, açısall ve spin ile ifade edilen üç kısımdan oluşur. Farklı konfigürasyonların herbiri $(n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, \dots)$ kuantum sayıları ile belirtilen farklı enerjilere sahiptir. Ama manyetik kuantum sayıları m_{ℓ} ve m_s için dejenerelik söz konusudur. Başka bir deyişle $(n_1 \ell_1 m_{\ell_1} m_{s_1}, n_2 \ell_2 m_{\ell_2} m_{s_2}, \dots)$ ile verilen birçok durum aynı $(E_{n_1 \ell_1, n_2 \ell_2})$ enerjisine sahiptir. Bu durum enerjideki ince yapı yarılımları olarak ifade edilir. Şekil 3.1’de

($s = 1$) ve ($\ell = 1$) kuantum sayılarına sahip 3P terimli bir enerji seviyesinin ince yapı yarılımları verilmiştir. Denklem (3.26) kullanılarak elektronun toplam açısal momentum kuantum sayısının $J = 2, 1, 0$ değerlerini alacağı görülür.



Şekil 3.1: ($s = 1$) ve ($\ell = 1$) kuantum sayılarına sahip 3P terimli bir enerji seviyesinin ince yapı yarılımları.

İnce yapı yarılımlarında optik geçişler için,

$$\Delta L = \pm 1 \quad (3.29)$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (3.30)$$

kuralı geçerlidir.

$$J = 0 \rightarrow J = 0 \quad (3.31)$$

geçişleri yasak geçiştir [34].

3.3.2. İnce Yapı Parametreleri

İnce yapı hesaplamalarında, ince yapı programı ile herbir enerji seviyesi için ince yapı parametreleriyle tanımlanan aşağıdaki denklem kullanılarak, bir enerji matrisi oluşturulur.

$$E = 1 E_{av} + g G^k + f F^k + z \zeta + a \alpha + r R^k \quad (3.32)$$

E_{av} : Konfigürasyonun ortalama enerjisi,

G^k : Radyal indirekt Coulomb etkileşme parametresi,

F^k : Radyal direkt Coulomb etkileşme parametresi,

ζ : Spin-yörünge etkileşme parametresi,

α : Efektif Coulomb etkileşme parametresi,

R^k : Konfigürasyonlar arası etkileşme parametresidir.

İki parçacık etkileşmesi direkt ve indirekt radyal Coulomb integralleri ile belirlenir. Bu etkileşmeler, terimlere yarılmaları verirken tek parçacık etkileşmesi olan spin-yörünge etkileşme integrali ise enerji seviyelerinin J değerlerine yarılmasını verir.

Denklem (3.32)'de verilen g, f, z, a, r katsayıları dalga fonksiyonunun açısal kısmından teorik olarak hesaplanır. Verilen ince yapı parametreleri dışında hesaplarda ikinci derece Coulomb etkileşme parametreleri β, T, T^1 ve T^2 de kullanılır.

F^k radyal direkt Coulomb etkileşme parametresi,

$$F^0 > F^1 > F^2 > \dots > 0 \quad (3.33)$$

olmalıdır.

G^k radyal indirekt Coulomb etkileşme parametresi,

$$\frac{G^k}{[k]} > \frac{G^{k+1}}{[k+1]} > 0 \quad (3.34)$$

şartını sağlamalıdır.

F^k ve G^k Coulomb etkileşme parametreleri daima pozitiftir. R^k konfigürasyonlar arası etkileşme parametresi ise negatif değer alabilir. ζ spin-yörünge etkileşmesi tek parçacık etkileşmesidir ve $\ell \neq 0$ koşulunu sağlamalıdır.

Radyal direkt Coulomb etkileşme parametresi F^k , radyal indirekt Coulomb etkileşme parametresi G^k ve konfigürasyonlar arası etkileşme parametresi R^k için,

$$F^k(\ell_1, \ell_2) \neq 0 \text{ olmak üzere } k \text{ çift ve } 0 \leq k \leq \min(2\ell_1, 2\ell_2) \quad (3.35)$$

$$G^k(\ell_1, \ell_2) \neq 0 \text{ olmak üzere } (k + \ell_1 + \ell_2) \text{ çift ve } |\ell_1 - \ell_2| \leq k \leq \ell_1 + \ell_2 \quad (3.36)$$

$i = 1, 2$ olmak üzere,

$$R^k(\ell_1 \ell_2, \ell'_1 \ell'_2) \text{ olmak üzere } (k + \ell_i + \ell'_i) \text{ çift ve } |\ell_i - \ell'_i| \leq k \leq \ell_i + \ell'_i \quad (3.37)$$

yukarıda verilen şartlar sağlanmalıdır [8].

3.3.3. İnce Yapı Programı

İnce yapı hesapları için Cowan [8] bilgisayar programı kullanıldı. Bu programla yarı deneysel olarak atomların incelenen konfigürasyonlarına ait enerji değerleri ve bu enerji değerlerinin bulunmasında kullanılan, bölüm (3.3.2)'de bahsedilen ince yapı parametre değerleri elde edilir. Bu elde edilen parametreler kullanılarak henüz deneysel değeri bulunmamış teorik enerji değerleri yarı amprik olarak bulunmuş olur. İnce yapı

hesabının çıkış dosyaları aşırı ince yapı hesaplamalarında kullanılır. Cowan programı içerisinde dört program yer alır. Bu alt programların çalışma sırası, giriş ve çıkış dosyaları Şekil 3.2’de gösterilmiştir.

Programda in36 oluşturulan ilk dosyadır. Bu dosyaya ince yapı hesaplarının yapılması amaçlanan elemente ait atom numarası ve o elementin incelenmesi istenen konfigürasyonları yazılır. Bu hesaplamalar bir elementin tek konfigürasyonu için yapılabildiği gibi, birden çok konfigürasyonu için de yapılabilir. Ardından sırasıyla RCN36k ve RCN2k çalıştırılır.

RCN36k : Belirli elektron konfigürasyonları için tek elektron radyal dalga fonksiyonlarını (bağlı yada serbest) Hartree-Fock yaklaşıklık metodunu (bölüm 3.2.2) kullanarak hesaplar. Konfigürasyonun enerji seviyelerinin hesaplanmasında her bir konfigürasyon için, gerekli olan konfigürasyonun merkezi gravitasyon enerjisi E_{av} , radyal Coulomb integralleri F^k ve G^k ile spin-yörünge etkileşme integralleri ζ ’lar elde edilir.

RCN2k : RCN36k’da hesaplanan dalga fonksiyonlarını kullanarak, etkileşen konfigürasyon çiftleri arasındaki konfigürasyon etkileşme Coulomb integralleri (R^k) ile elektrik dipol (E1) ve/veya elektrik kuadropol (E2) radyal integrallerini hesaplar.

RCN2k’nın çalıştırılması ile ing11 dosyası oluşur. Bu dosyadaki her parametrenin sırası rceinp ile aynıdır. İncelenen her konfigürasyona ait ince yapı parametrelerinin ilk değerlerini verir. Hesaplamalar sonucunda bulunan ince yapı parametre değerleri ve kuplaj yapılan parametreler arasındaki oranların ing11’deki değerlerle aynı mertebede olması beklenir. Bu nedenle ing11 dosyasının ilk hali çalışma süresince saklı tutulur. Bu dosyaya hesaplamalarda kullanılacak deneysel enerji değerlerinin ortalaması girilir ve RCG11k çalıştırılır.

RCG11k : Bu programın temel amacı atomik yapı ve spektrum teorisindeki çeşitli matris elemanlarının açısal katsayılarının hesaplanmasıdır. Bu açısal katsayılar deneysel enerji seviyelerinin en küçük kareler yöntemi ile fit edilmesinde RCE20k programının giriş datası olarak kullanılır. Mümkün olan her toplam açısal momentum J değeri için

enerji matrislerini oluşturur. Özdeğer ve özvektörleri elde edebilmek için her matrisi köşegenleştirir ve M1(manyetik dipol), E1 ve/veya E2 ışıma spektrumunu hesaplar.

Programın çıkış dosyalarından outg11, RCE20k programının çıkış dosyalarından levels1 ile birlikte aşırı ince yapı hesabında kullanılır. Bu dosya mümkün J değerleri için enerji matrisini, özdeğerlerini, g değerlerini, LS ve JJ gösteriminde özvektörleri ve özvektör saflığını verir. Diğer bir çıkış dosyası outgine'de rceinp dosyasında yapılacak değişikliklerin program tarafından kabul edilmesi için gerekli düzeltme yapılarak RCE20k çalıştırılır.

RCE20k : Bu program teorik parametre değerlerinin düzeltilmesini sağlar. Bilinen deneysel enerji seviyeleri ile mümkün olan en iyi hesaplanmış atomik enerji iyi bir uyum içinde oluncaya kadar parametre değerlerini değiştirir. Enerjileri deneysel olarak bilinmeyen seviyeler göz önüne alınmayabilir. Parametrelerden herhangi biri belirlenmiş değerlerde sabit tutulabilir veya parametreler gruplar halinde değişmeye zorlanabilir (grup içindeki değerlerin oranları değişmeden kalır). Fit işlemi parametre değerleri bir sonraki adımda değişmeyene kadar yapılır.

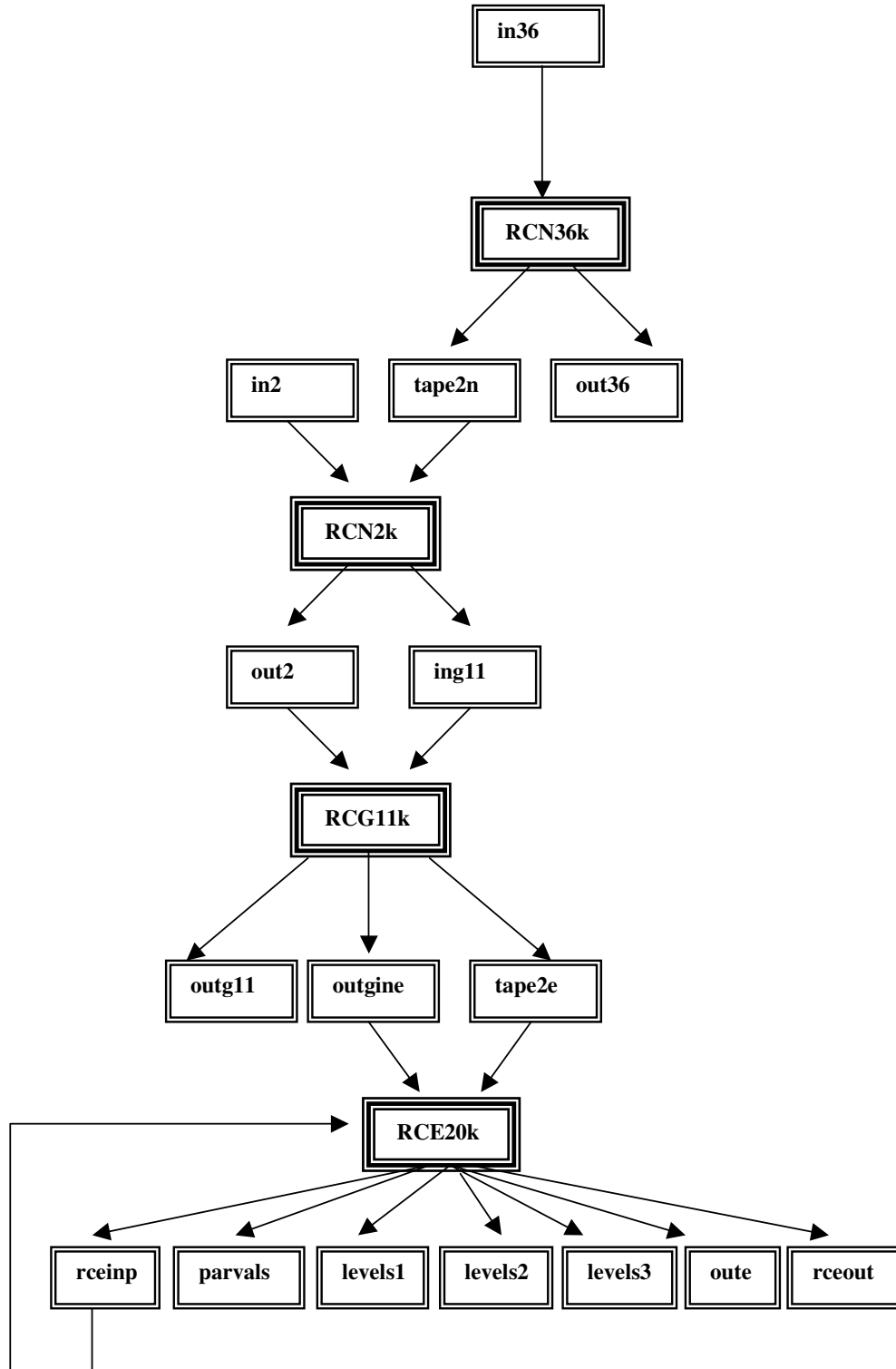
RCE20k'nın çalıştırılması ile oluşan rceinp dosyasına deneysel enerji değerleri konfigürasyon ve terimi dikkate alınarak yazılır. İstenilen parametreler sabit tutulabilir yada kuplaj yapılabilir. Yapılan değişikliğin ardından RCE20k çalıştırılarak rceinp ile rceout karşılaştırılır. Bu iki dosya aynı oluncaya kadar işleme devam edilir. Böylece ince yapı parametreleri ve teorik enerji değerleri belirlenmiş olur.

RCE20k'nın diğer çıkış dosyaları ise aşağıda verilmiştir :

oute : Herbir döngüye ait standart sapma, ortalama sapma ve her parametrenin hataları ile birlikte verildiği değerlerini verir.

levels 1, 2, 3 : Her seviye için üç özvektör bileşeninin yüzdelerini, teorik g değerlerini, deneysel ve teorik enerjileri ve farklarını verir.

parvals : Her döngüye ait parametre değerlerini verir. Bunlardan son döngüye ait olanlar bir sonraki hesapta kullanılması açısından önemlidir [35].



Şekil 3.2: Cowan ince yapı programının çalışma sırası.

3.4. AŞIRI İNCE YAPI (HYPERFINE STRUCTURE (HFS))

Spektrumlarda aşırı ince yapı ilk olarak A.Michelson , C.Fabry ve A.Perot tarafından incelenmiştir. Bu etki nükleer manyetik etki ve elektrik momentlerinin elektronik kabukla etkileşimi olarak anlatılır [36]. Elektronun spin ve yörünge hareketinden dolayı çekirdek üzerinde meydana getirdiği manyetik alan ile çekirdek manyetik dipol momenti, elektrik alan ile de çekirdeğin elektrik kuadropol momenti etkileşir. Çekirdek spininin atomik spektroskopide enerjide yeni yarılmalara sebep olması beklenir. Çekirdek spininin sebep olduğu yarılmalar aşırı ince yapı yarılmaları olarak adlandırılır. Bu etkileşimler enerji seviyelerinde ekstra yarılmalar verir.

3.4.1. Atomik Çekirdek ve Yörünge Elektronları Arasındaki Etkileşim

Çekirdekte yük dağılımı homojen değildir. Çekirdeğin kendi etrafında dönmesi sonucunda çekirdek spini oluşur ve çekirdek dipol momenti meydana gelir. Yük döndüğü için de elektrik kuadropol momenti oluşur. Elektronun spin ve yörünge hareketinden dolayı çekirdek üzerinde meydana getirdiği manyetik alan ile çekirdek manyetik dipol momenti, elektrik alan ile de çekirdeğin elektrik kuadropol momenti etkileşir. Bu etkileşimler aşırı ince yapı yarılmalarını oluşturur.

3.4.1.1. Manyetik Etkileşim

Çekirdek ve yörünge elektronları arasındaki manyetik etkileşim enerjisi,

$$V_{\text{magn}} = -\vec{\mu}_I \cdot \vec{H}(o) = -\mu_I \cdot H(o) \cdot \cos(\vec{\mu}_I, \vec{H}(o)) \quad (3.38)$$

ile verilir.

$H(o)$: Elektronların çekirdek üzerinde meydana getirdikleri manyetik alandır.

Çekirdek spin açısal momentumu I gibi μ_I çekirdek manyetik momenti de çekirdekteki nükleonlardan kaynaklanır.

Pertürbasyon teorisine göre V_{magn} etkileşim enerjisinden ΔW_{magn} ek enerjisine geçmek için pertürbe edilmemiş enerji seviyeleri üzerinden zamana göre ortalama alınmalıdır.

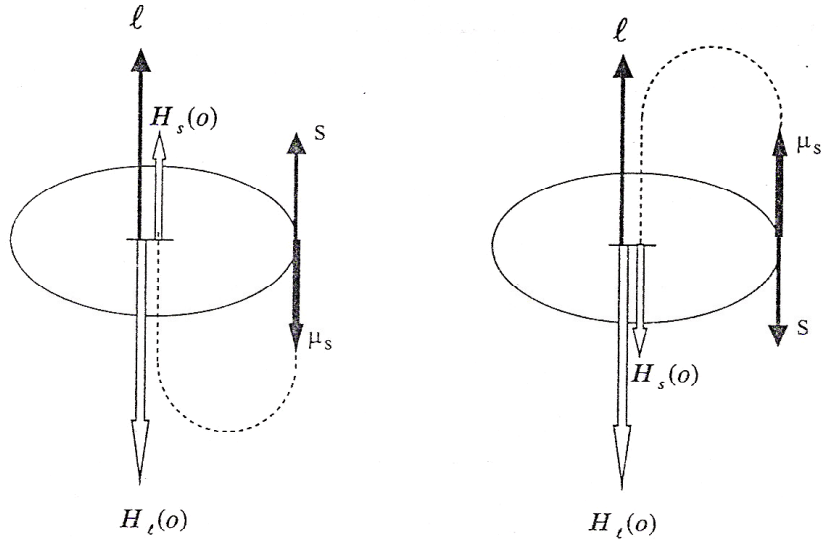
Ek manyetik enerji seviyeleri,

$$\Delta W_{\text{magn}} = -\mu_I \cdot \overline{H(o)} \cdot \cos(\vec{\mu}_I, \vec{H(o)}) \quad (3.39)$$

ile verilir.

$\overline{H(o)}$: $H(o)$ 'ın ortalamasıdır.

Şekil 3.3'de elektronun çekirdek üzerinde meydana getirdiği $H(o)$ manyetik alanının yönü gösterilmiştir.



Şekil 3.3: Elektronların yörünge ve spin hareketi nedeniyle üretilen manyetik alanının yönü.

Tek elektron yada kapalı kabuklar dışındaki tek elektron için $H(o)$ ve J (elektronun toplam açısal momentumu) anti-paraleldir. Elektronun yörünge hareketi, ℓ açısal momentumunu oluşturur. Elektronun yükü nedeniyle çekirdekte üretilen $H_\ell(o)$ manyetik alanı ile ℓ açısal momentumunun yönleri zıttır. Elektronun spin hareketinden kaynaklanan μ_s (elektronun spin dipol momenti) çekirdekte üretilen manyetik alanı, ℓ ile paralel yada anti-paralel olma durumlarında artırır yada azaltır.

μ_1 çekirdek manyetik momenti ve I çekirdek spin açısal momentumu çoğunlukla çekirdekdeki protonlardan, başka bir deyişle pozitif yüklerden kaynaklanıyorsa birbirine paraleldir. Çekirdekte hiçbir negatif yük bulunmamasına rağmen μ_1 çekirdek manyetik momenti ve I çekirdek spin açısal momentumunun anti-paralel olduğu durumlar söz konusudur. Bu durum negatif nötron momentlerinin etkisinden kaynaklanır.

Çoğunlukla μ_1 çekirdek manyetik momenti ve I çekirdek spin açısal momentumu aynı yöndedir. Şekil 3.3'de gösterilen elektronun yörünge hareketi oluşan manyetik alana spin hareketinden daha fazla katkı sağlar. Bu neden göz önünde bulundurularak J elektronun toplam açısal momentumunun $H(o)$ manyetik alanı ile anti-paralel olduğu görülür. μ_1 çekirdek manyetik momenti için en kararlı durum $H(o)$ manyetik alanıyla paralel durumda olmasıdır. Çekirdekte negatif yük olmadığından μ_1 ile $H(o)$ paraleldir. Bütün bu açıklamalar I çekirdek spin açısal momentumunun J elektronun toplam açısal momentumuyla zıt yönlü oluşuna işaret eder. Bu nedenle $\cos(I, J) = -1$ değerine sahiptir ve denklem (3.39) yeniden yazılırsa,

$$\Delta W_{\text{magn}} = -\mu_1 \cdot \overline{H(o)} \cdot \cos(\mu_1, H(o)) = \Delta W_{I,J} = A I J \cos(I, J) \quad (3.40)$$

olur.

Denklem (3.40)'ta belirtilen A , manyetik dipol aşırı ince yapı sabitidir. $\vec{I}$ çekirdek spin açısal momentum ve $\vec{J}$ elektronun toplam açısal momentum vektörleri manyetik etkileşim nedeniyle birlikte düşünülür. Sonuç olarak atoma ait toplam açısal momentum vektörü $\vec{F}$ 'i meydana getirirler.

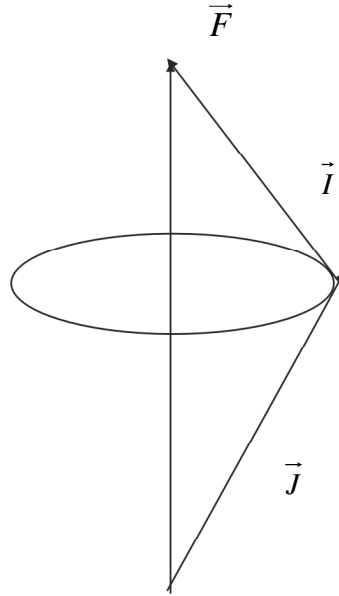
$\vec{F}$ atoma ait toplam açısal momentum vektörü,

$$\vec{F} = \vec{I} + \vec{J} \quad (3.41)$$

ile verilir ve

$$F = I + J, I + J - 1, \dots, |I - J| \quad (3.42)$$

aralığında değerler alır.



Şekil 3.4: $\vec{F}$ atoma ait toplam açısal momentum vektörü.

$\cos(I, J)$ ifadesi vektör diyagramından elde edilebilir.

$$\cos(I, J) = \frac{F^2 - I^2 - J^2}{2 I J} \quad (3.43)$$

olarak bulunur.

Çekirdek ve yörünge elektronları arasındaki manyetik etkileşim kuantum mekaniksel görüşle açıklanmıştır. Bu görüşe göre belirtilmesi gereken durumlar söz konusudur.

1) $\vec{I}$ çekirdek spin açısal momentum vektörü z eksenine paralel olduğunda μ_I çekirdek manyetik momentinin de z bileşeni dikkate alınır.

2) $\vec{J}$ elektronun toplam açısal momentum vektörü z eksenine paralelse yörünge elektronları tarafından çekirdekte üretilen $\overline{H(o)}$ manyetik alanının da z bileşeni göz önünde tutulur.

$$3) F^2 \rightarrow F(F+1)$$

$$I^2 \rightarrow I(I+1)$$

$$J^2 \rightarrow J(J+1)$$

şeklinde yer değiştirir.

Bu durumda $\cos(I, J)$ ifadesi,

$$\cos(I, J) = \frac{F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)}{2IJ} \quad (3.44)$$

olarak ifade edilir.

Denklem (3.44) denklem (3.40)'ta yerine yazılırsa ek manyetik seviyeler için enerji farkı,

$$\Delta W_{I,J} = A I J \cos(I, J) \quad (3.45)$$

$$= A I J \frac{F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)}{2 I J} \quad (3.46)$$

$$= \frac{A}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \quad (3.47)$$

ile tanımlanır.

$$C = [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \quad (3.48)$$

olmak üzere,

$$\Delta W_{I,J} = A \frac{C}{2} \quad (3.49)$$

olur.

Ek manyetik seviyeler için enerji farkı A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitine bağlı olarak bulunur. Aynı zamanda denklem (3.40)'tan A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitinin,

$$A = \frac{\mu_I \overline{H(o)}}{I J} \quad (3.50)$$

olduğu görülür.

Denklem (3.50) A değerinin bir çoklu seviyeden diğer bir çoklu seviyeye göre değiştiğini ifade eder. Elektronların çekirdekte meydana getirdiği manyetik alan arttıkça A değeri de artar. Kapalı bir elektronik kabuğun akım yoğunluğu sıfırdır ve çekirdek üzerinde hiçbir manyetik alan üretmez. Bu durum tüm kapalı alt kabuklar, örneğin s^2 için de geçerlidir.

En büyük manyetik alan ve aynı şekilde en büyük hfs ayrışması çekirdeğe çok yakın çiftlenmemiş elektronlar tarafından üretilir. Bu nedenle elektron konfigürasyonunda

çiftlenmemiş s elektronu içeren çoklu seviyelerin; A faktörlerinin en büyük olması beklenir.

3.4.1.2 Elektrostatik Etkileşim

Elektronun spin ve yörünge hareketinden dolayı çekirdek üzerinde meydana getirdiği elektrik alan ile çekirdek kuadropol momenti etkileşir.

Elektrik etkileşim enerjisi,

$$\Delta W_{el} = \frac{e Q' \overline{\phi_{zz}(o)}}{4} \quad (3.51)$$

şeklinde verilir.

Q' : Q tensörünün z bileşeni,

Q: Kuadropol moment tensörü,

$\overline{\phi_{zz}(o)}$: z ekseninde silindirik simetriye sahip olan yörünge elektronlarının oluşturduğu elektrik alanın vektör gradyentidir.

Çekirdeğin yük dağılımının küresel simetrik olabilmesi için,

$$Q' = Q \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right) \quad (3.52)$$

olmalıdır.

Biz serbest atomdaki kuadropol etkileşimini inceliyoruz. Bu durumda $\vec{I}$ çekirdek spin açısal momentum vektörü ile $\vec{J}$ elektronun toplam açısal momentum vektörü arasındaki

açı sabittir ve θ ile verilir. Denklem (3.52), denklem (3.53)'te yerine yazılırsa elektrik kuadropol etkileşim enerjisi ,

$$\Delta W_Q = \frac{B}{4} \left[\frac{3}{2} \cos^2(I, J) - \frac{1}{2} \right] \quad (3.53)$$

ile tanımlanır.

Denklem (3.53)'te tanımlanan B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitidir .

$$B = e Q \overline{\varphi_{JJ}(o)} \quad (3.54)$$

ile verilir.

$\overline{\varphi_{JJ}(o)}$: J ekseninde silindirik simetriye sahip olan yörünge elektronlarının çekirdekte meydana getirdiği elektrik alanın vektör gradyentidir.

I, J, F 'lerin küçük değerleri için Casimir tarafından verilen ek enerji ifadesi,

$$\Delta W_Q = \frac{B}{4} \frac{\frac{3}{2} [C(C+1) - 2I(I+1)J(J+1)]}{I(2I-1)J(2J-1)} \quad (3.55)$$

şeklinde belirtilir.

Elektron ve çekirdeğin elektrostatik etkileşimi nedeniyle de manyetik etkileşimde olduğu gibi enerji seviyelerinde yarılmalar söz konusudur. Başka bir deyişle meydana gelen ek seviyelerin enerji farkına elektrostatik etkileşimin de katkısı vardır. Bu katkı manyetik dipol etkileşmesine göre daha azdır. Bu nedenle yapılan aşırı ince yapı hesaplamalarında öncelikle A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitinin bulunması amaçlanmaktadır.

Kuadropol etkileşmesi elektronik açısal momentumla ilişkili olan çekirdek spininin yönelimine bağlıdır. Bu nedenle her aşırı ince yapı seviyesi için kuadropol etkileşmesi farklı değerler alır. Bu yaklaşıma göre çok elektronlu atomlarda küresel simetrik yük dağılımı, denklem (3.55)'te belirtilen ifadeye katkıda bulunmaz. Tüm kapalı kabuklar ve tüm alt kabuklar dikkate alınır. Çekirdekteki alan gradyenti, $j \geq 1$ ile verilen elektronlar nedeniyle artar.

Çekirdek spininin $I=0$ ve $I=1/2$ durumlarında yük dağılımı küresel simetriktir. ΔW_Q elektrostatik etkileşme ek enerjisinin sıfırdan farklı olabilmesi için çekirdek spininin $1/2$ 'den büyük olması gerekmektedir.

3.4.2. Aşırı İnce Yapı Yarılmaları

F kuantum sayısına sahip bir hfs seviyesinin toplam enerjisini saptamak için W_J enerjisine iki ek enerjiyi daha eklemek gerekir.

$$W_F = W_J + \Delta W_{\text{magn}} + \Delta W_{\text{el}} \quad (3.56)$$

Bu eşitlikte daha önce bulduğumuz manyetik etkileşim ve elektrostatik etkileşim ek enerjilerini denklem (3.56)'da yerine yazarsak,

$$W_F = W_J + A \frac{C}{2} + B \frac{\frac{3}{4} C(C+1) - I(I+1) J(J+1)}{2I(2I-1) J(2J-1)} \quad (3.57)$$

denklem (3.57) elde edilir.

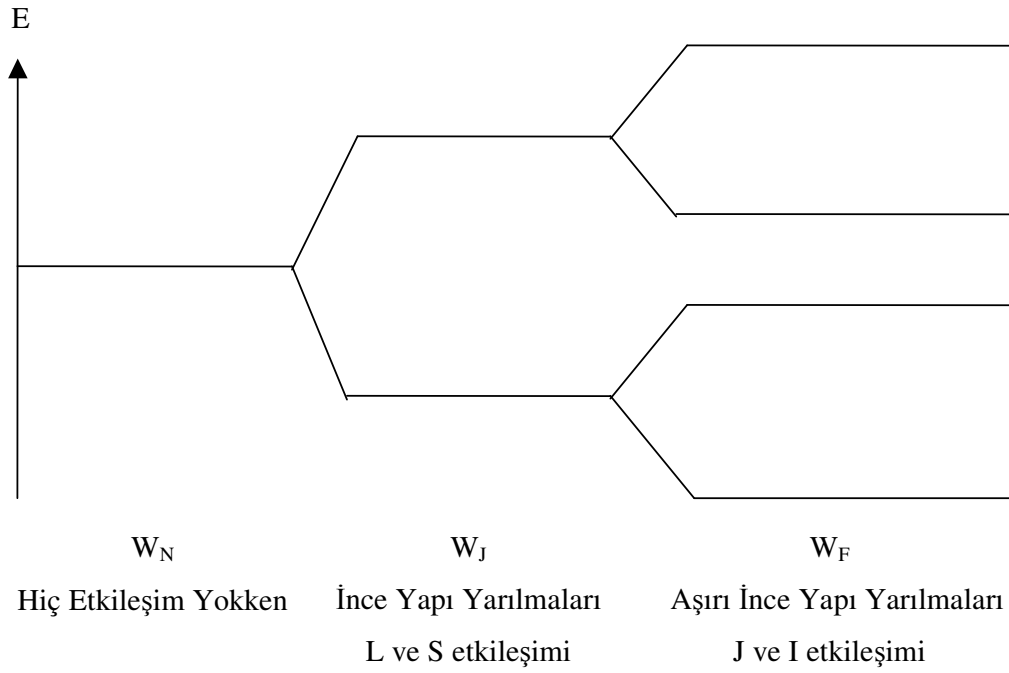
F kuantum sayısı J ve I kuantum sayılarına bağlı olarak,

$$J \geq I \Rightarrow F \quad , \quad 2I+1 \quad (3.58)$$

$$I \geq J \Rightarrow F \quad , \quad 2J+1 \quad (3.59)$$

değer alır.

Çekirdek ile çekirdeğin yörünge elektronları arasındaki manyetik etkileşim ve elektrik etkileşim, J kuantum sayısına sahip bir ince yapı (fs) seviyesini aşırı ince yapı (hfs) seviyelerine böler. Şekil 3.5'te hiç etkileşim yok iken enerji seviyeleri, ℓ ve s etkileşimi var iken yarılmış FS seviyeleri ve aşırı ince yapı yarıлма seviyeleri gösterilmiştir.



Şekil 3.5: Hiç etkileşim yokken, ince yapı ve aşırı ince yapı yarılmaları durumları için enerji seviyeleri. Enerji seviyeleri ölçeklendirilmeden verilmiştir.

Çekirdek spininin sıfır olduğu durumlarda aşırı ince yapı ayrışması yoktur. Elektronun toplam açısal momentum kuantum sayısı ve çekirdek spinin $1/2$ olduğu durumlarda elektrik etkileşimi yoktur. Bu durumda toplam yarıлма enerjisini gösteren denklem

(3.57)'de elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B ortadan kalkar. Toplam (ince ve aşırı ince yapı) yarılma enerjisi,

$$W_F \approx W_J + \frac{A}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \quad (3.60)$$

olur.

Manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti olarak tanımladığımız A aynı zamanda aralık faktörü adını alır. Bunun nedeni manyetik etkileşme sebebiyle enerjide meydana gelen yarılmalarla oluşan seviyeler arasındaki enerji aralığının bu değere bağlı olmasıdır. Elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A 'dan daha küçüktür. Bunun nedeni çekirdek elektrik kuadropol momentinin çok küçük olmasıdır.

Örnek-1: $I = 3/2$, $J = 1$ kuantum sayılarına bağlı olarak bulunan F kuantum sayıları ve mümkün olan hfs geçişlerini A ve B faktörü cinsinden belirtelim.

$I = 3/2$, $J = 1$ kuantum sayılarına bağlı olarak bulunan F kuantum sayıları,

$$F = I + J, I + J - 1, \dots, |I - J| = 5/2, 3/2, 1/2 \text{ değerlerini alır.}$$

Bu üç kuantum sayısı denklem (3.48)'de yerine yazılınca,

$F = 5/2, 3/2, 1/2$ için,

$$C = [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] = 3, -2, -5 \text{ değerlerini alır.}$$

Manyetik etkileşim enerjisi A 'ya bağlı olarak,

$$\Delta W_{I,J} = A \frac{C}{2} = \frac{3A}{2}, -A, -\frac{5A}{2} \text{ değerlerini alır.}$$

Elektrik etkileşme enerjisi B 'ye bağlı olarak,

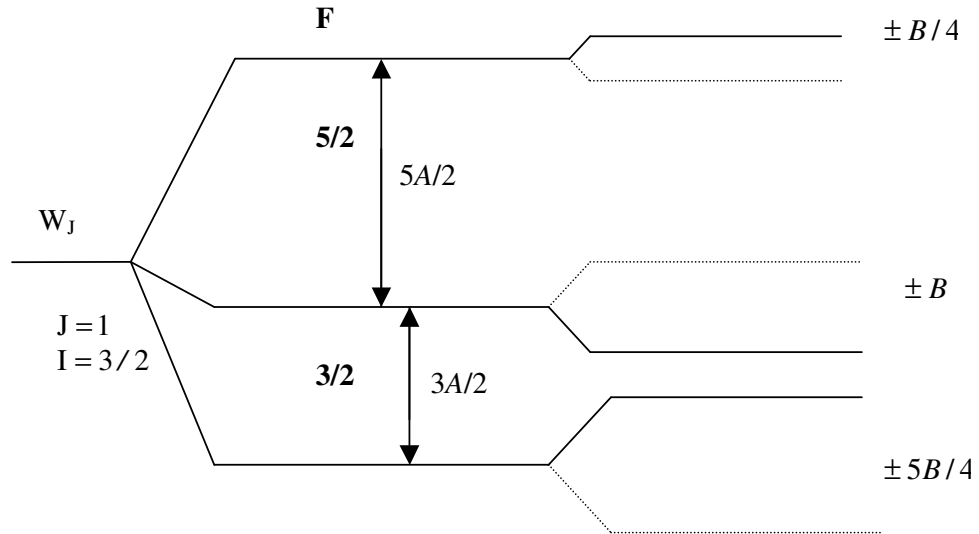
$$\Delta W_Q = B \frac{\frac{3}{4} C(C+1) - I(I+1) J(J+1)}{2I(2I-1) J(2J-1)} = \frac{B}{4}, -B, \frac{5B}{4} \text{ değerlerini alır.}$$

F ve $(F-1)$ kuantum sayılarına sahip iki terim arasındaki aralık F değerinin büyüklüğü ile orantılıdır. Hfs sonucu oluşan multiplerin aralıkları,

$$(I+J) : (I+J-1) : (I+J-2) \dots \dots \dots (3.61)$$

şeklinde belirlenir. Bu durum “aralık kuralı” adını alır ve A , “aralık faktörü” dür.

Bu değerlerle belirtilen hfs geçişleri Şekil 3.6’da verilmiştir.



Şekil 3.6: $I = 3/2$, $J = 1$ kuantum sayılarına sahip bir seviyenin mümkün hfs geçişleri.

Aşırı ince yapı yarılmalarının incelendiği deneylerde hfs seviyeleri arası geçişler ölçülmektedir. $\Delta F = 0, \pm 1$ ve $\Delta J = 0, \pm 1$ geçişleri izinlidir. Bu geçişler dışındaki geçişler yasak geçiş olarak adlandırılır. $F = 0 \rightarrow F = 0$ ve $J = 0 \rightarrow J = 0$ geçişleri de yasak geçişlerdir. Geçişlerde parite farklı olmalıdır. Başka bir deyişle,

Tek pariteli seviye $\rightarrow$ Çift pariteli seviye

Çift pariteli seviye $\rightarrow$ Tek pariteli seviye

geçişleri izinlidir.

Deneylerde ölçülen her bir aşırı ince yapı geçişinin şiddeti denklem (3.62) kullanılarak hesaplanır.

$$H_{(F_o \rightarrow F_u)} \cong (2F_o + 1)(2F_u + 1) \left\{ \begin{matrix} I & F_o & J_o \\ 1 & J_u & F_u \end{matrix} \right\}^2 \quad (3.62)$$

$H_{(F_o \rightarrow F_u)}$: Herhangi bir geçiş için şiddet,

F_o : Üst seviyenin F kuantum sayısı,

F_u : Alt seviyenin F kuantum sayısı,

J_o : Üst seviyenin J kuantum sayısı,

J_u : Alt seviyenin J kuantum sayısı,

I : Çekirdek spinidir.

Denklemdaki $\begin{Bmatrix} I & F_o & J_o \\ 1 & J_u & F_u \end{Bmatrix}$ ifadesi $\Delta J = \pm 1$, $\Delta F = 0$, $\Delta F = \pm 1$, $\Delta J = 0$ durumları için bu durumlara karşılık gelen dört denklemle hesaplanır. Bunlar sırasıyla (3.63)-(3.66) aralığındaki denklemlerle belirtilmiştir [30].

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c-1 & b-1 \end{Bmatrix} = (-1)^s \left[\frac{s(s+1)(s-2a-1)(s-2a)}{(2b-1)2b(2b+1)(2c-1)2c(2c+1)} \right]^{1/2} \quad (3.63)$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c-1 & b \end{Bmatrix} = (-1)^s \left[\frac{s(s+1)(s-2a)(s-2b)(s-2c+1)}{2b(2b+1)(2b+2)(2c-1)2c(2c+1)} \right]^{1/2} \quad (3.64)$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c-1 & b+1 \end{Bmatrix} = (-1)^s \left[\frac{(s-2b-1)(s-2b)(s-2c+1)(s-2c+2)}{(2b+1)(2b+2)(2b+3)(2c-1)2c(2c+1)} \right]^{1/2} \quad (3.65)$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c & b \end{Bmatrix} = (-1)^{s+1} \left[\frac{2[b(b+1)+c(c+1)-a(a+1)]}{[2b(2b+1)(2b+2)2c(2c+1)(2c+2)]^{1/2}} \right] \quad (3.66)$$

$$s = a + b + c$$

a : Çekirdek spini I ,

b : Üst seviyenin F kuantum sayısı F_o ,

c : Üst seviyenin J kuantum sayısı J_o dır.

3.4.3. Aşırı İnce Yapı Parametreleri

Aşırı ince yapı etkileşmelerinin özellikle ağır atomlarda tam olarak doğru tanımlanabilmesi relativistik etkinin göz önüne alınması ile mümkündür. Bu

tanımlamada aşırı ince yapı operatörlerinin matris elemanları relativistik dalga fonksiyonu ile oluşturulur. Sanders ve Beck, efektif operatörleri de bu hesabın içine katmışlardır. Bu operatörler relativistik olmayan LS seviyelerinde, relativistik seviyelerde olduğu gibi aynı beklenen değeri sağlayacak şekilde oluşturulmuştur. Efektif operatörler μ_B Bohr Manyetonu cinsinden denklem (3.67) ve denklem (3.68)'de tanımlanmıştır.

$$H_{\text{hfs}}^{\text{eff}}(M1) = 2\mu_B \frac{\mu_I}{I} \sum_{nl} \left[\langle r^{-3} \rangle_{nl}^{01} \ell - \sqrt{10} \langle r^{-3} \rangle_{nl}^{12} [s \times C^{(2)}]^{(1)} + \frac{2}{3} \langle r^{-3} \rangle_{nl}^{10} s \right] \quad (3.67)$$

$$H_{\text{hfs}}^{\text{eff}}(E2) = e \sum_{nl} \left[-C^{(2)} \langle r^{-3} \rangle_{nl}^{02} + (s \times \ell)^{(2)} \langle r^{-3} \rangle_{nl}^{11} + [s \times (C^{(4)} \times \ell)^{(3)}]^{(2)} \langle r^{-3} \rangle_{nl}^{13} \right] \quad (3.68)$$

$\langle r^{-3} \rangle_{nl}^{k_s k_l}$: Relativistik tek elektron radyal integrallerinin lineer kombinasyonu,

ℓ : Yörüngesel dönme momenti,

s : Spin operatörü,

$C^{(k)}$: k. mertebenin modife olmuş küresel harmoniğidir.

Tek elektron radyal integrallerinin $\langle r^{-3} \rangle_{nl}^{k_s k_l}$ fiziksel anlamı aşağıdaki gibidir:

$\langle r^{-3} \rangle_{nl}^{10}$: Fermi kontak etkileşmesi,

$\langle r^{-3} \rangle_{nl}^{01}$: Elektronun yörüngesel dönme momentinin çekirdek üzerinde meydana getirdiği manyetik alanla çekirdeğin manyetik dipol etkileşmesi,

$\langle r^{-3} \rangle_{nl}^{12}$: Çekirdeğin elektron spininin manyetik momenti ile manyetik dipol etkileşimi,

$\langle r^{-3} \rangle^{02}$: Elektrik kuadropol etkileşim radyal integralidir.

$\langle r^{-3} \rangle^{11}$: Relativistik bir terim ve karşılığı yoktur.

$\langle r^{-3} \rangle^{13}$: Relativistik bir terim ve karşılığı yoktur.

Radyal integraller, çekirdek momenti etkileşimlerini içine alan tek elektron ayrışma parametreleri ile tanımlanır.

$$a_{n1}^{10} = \frac{4}{3} \mu_B \frac{\mu_1}{I} \langle r^{-3} \rangle^{10}, \quad (3.69)$$

$$a_{nl}^{k_s k_l} = 2 \mu_B \frac{\mu_1}{I} \langle r^{-3} \rangle^{k_s k_l} \quad k_s k_l : 01, 12 \quad (3.70)$$

$$b_{nl}^{k_s k_l} = e^2 Q \langle r^{-3} \rangle^{k_s k_l} \quad k_s k_l : 02, 13, 11 \quad (3.71)$$

$a_{nl}^{k_s k_l}$, $b_{nl}^{k_s k_l}$: Tek elektron ayrışma parametreleridir.

Relativistik olmayan yaklaşımda her bir açık kabuk için tek elektron ayrışma parametreleri bir tanedir. Relativistik durumda ise her bir açık kabuk için üç parametre vardır.

Radyal integralin teorik olarak hesabı zordur. Deneysel olarak elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B kullanılarak radyal integralin çözümü yarı amprik olarak elde edilebilir. Deneysel olarak elde edilen A ve B aşırı ince yapı sabitleri teorik olarak ince yapı hesaplarından elde edilen açısal katsayılar ve tek elektron parametrelerinin oluşturduğu lineer denklem sistemi aşağıdaki şekilde ifade edilir [37]:

$$A = \sum_{n1} \alpha_{n1}^{10} a_{n1}^{10} + \alpha_{n1}^{12} a_{n1}^{12} + \alpha_{n1}^{01} a_{n1}^{01} \quad (3.72)$$

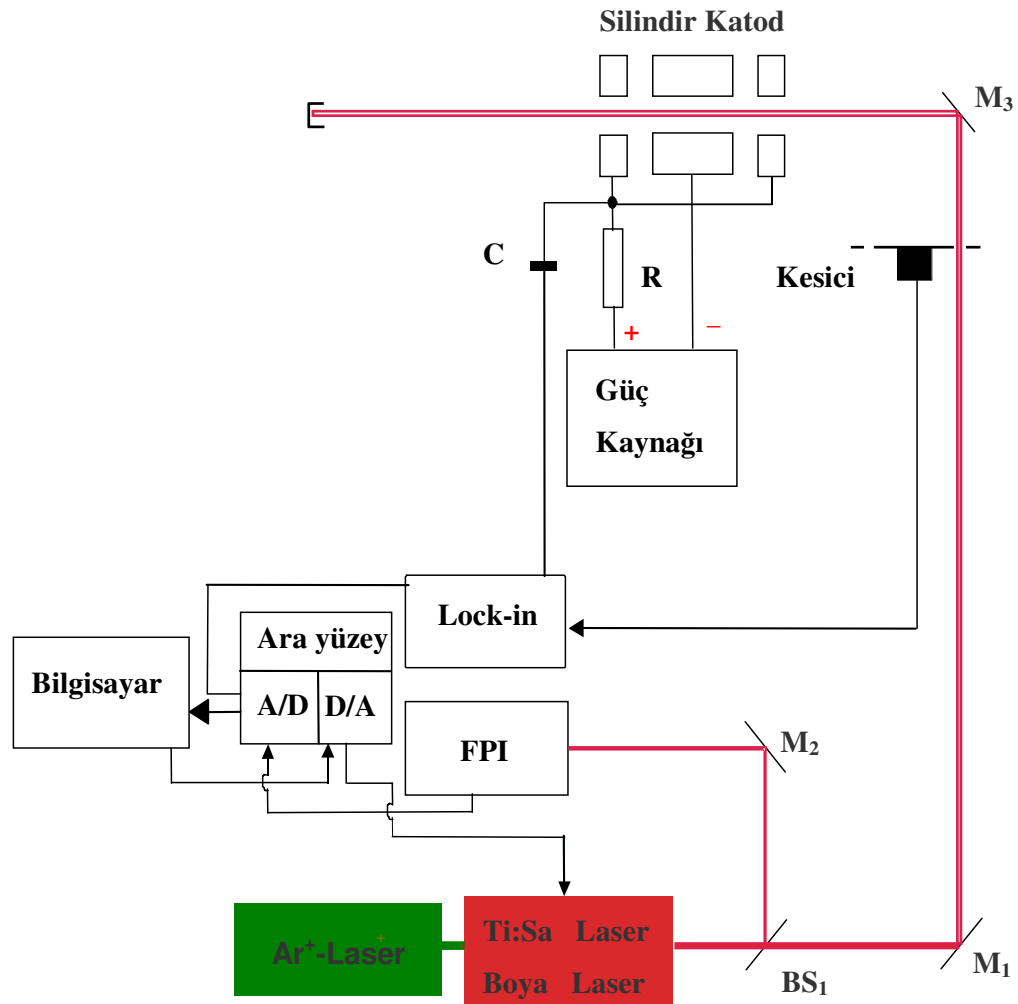
$$B = \sum_{n1} \beta_{n1}^{02} b_{n1}^{02} + \beta_{n1}^{13} b_{n1}^{13} + \beta_{n1}^{11} b_{n1}^{11} \quad (3.73)$$

$\alpha_{n1}^{k_s k_l}, \beta_{n1}^{k_s k_l}$: İnce yapı hesabından elde edilen sonuçlarla bulunan aşırı ince yapı açısai katsayılarıdır.

Bu yarı empirik denklem sisteminin çözülmesi ile tek elektron parametreleri $a_{nl}^{k_s k_l}$, $b_{nl}^{k_s k_l}$ 'ler elde edilir ve bu parametreler kullanılarak henüz deneysel olarak bilinmeyen A ve B aşırı ince yapı sabitleri teorik olarak tahmin edilebilir [38].

Atomik Lantan'ın spektrumlarındaki aşırı ince yapı yarılımları Optogalvanik Spektroskopi (OGS) metodu ile silindir katod boşalımı içinde incelendi.

3.5.1. Deney Düzenegi

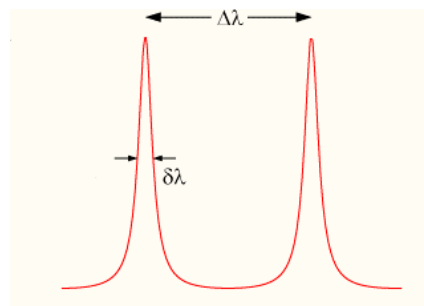


Şekil 3.7: Optogalvanik Spektroskopi deney düzeneği

Farklı spektral bölgeler için çeşitli spektroskopik teknikler geliştirilmiştir. Bu tekniklerde boya laserler oldukça etkin olarak yer alır. Boya laserlerin aktif ortamı sıvı içinde çözülmüş organik boya molekülleridir. Elde edilen spektrum boyaya bağlı olarak 300 nm ile 1200 nm arasında değişir. Deneysel olarak boya laserlerin en önemli özelliği yüksek çözünürlüklü spektroskopide kullanılmasıdır. İlk CW boya laser Peterson tarafından 1970 yılında Rhodamine 6G boyasının seviyeleri arası geçişle pompa laseri olarak Ar iyon laser kullanılarak elde edilmiştir. Genelde pompalama ışığı olarak Argon veya Kripton laser kullanılır.

Deneyde La I elementine ait 570 nm-590 nm ve 700 nm-825 nm dalgaboyu aralığındaki 19 farklı spektral çizginin spektrumları Laser Optogalvanik Spektroskopi (OGS) yöntemi ile ölçüldü. 570 nm-590 nm dalgaboyu aralığındaki spektral geçişler için Rhodamin 6G boyası içeren koherent 699 ring-boya laser kullanıldı. 700 nm-850 nm dalgaboyu aralığındaki geçişler için de Titan-Safir laser kullanılarak ölçümler alındı. Bu çalışmada kullanılan OGS deney düzeneği Şekil 3.11’de verildi. Şekilde M_1 , M_2 , M_3 aynaları ve BS_1 ışın bölücüyü göstermektedir.

Deneyde Ar-iyon laser pompalı ring-boya laser ve Titan-Safir laser, incelemek istenilen spektral geçişlere karşılık gelen dalgaboyuna ayarlandı. Kullanılan Argon-iyon pompa laserin gücü 10.6 W, boya laserin ortalama çıkış gücü ise 600 W’tır ve Titan-Safir laserin ise 1W’tır. Cw-boya laserden çıkan ışın, ışın bölücü ve aynalar yardımıyla silindir katota ve Fabry-Perot İnterferometresi’ne yönlendirildi. Işın bölücü 1300 Hz’de çalıştırıldı. Relatif frekans referansı olarak Fabry-Perot İnterferometresi (FPI) kullanıldı. FPI’nın çıkışındaki maksimumlar serbest spektral bölge denilen $\Delta\lambda$ (FSR-Free Spectral Range) aralıklarıyla oluşur. Maksimumların yarı genişlikleri $\delta\lambda$ ile verilir. Bu durum Şekil 3.12’de gösterilmiştir.



Şekil 3.8: FPI’nın $\Delta\lambda$ FSR aralığı ile $\delta\lambda$ spektral yarı genişliği

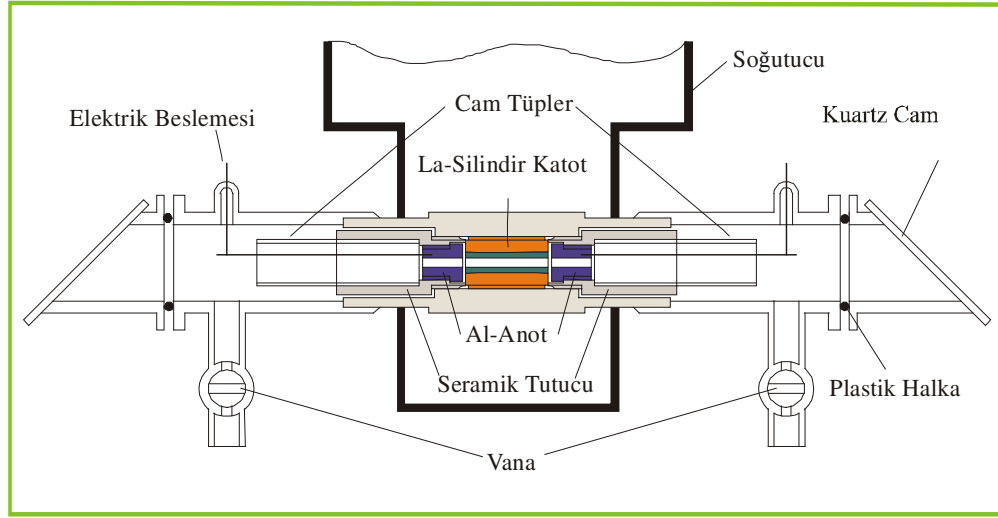
FPI'nın serbest spektral bölgesi her bir laser için ayrı FPI kullanıldığından ring boya laser için frekans cinsinden 300.248 MHz, Titan-Safir laser için 300.5381 MHz'dir. Referans FPI'dan çıkan ışının şiddetindeki her değişim laserin frekansındaki değişime karşılık gelir. Bu eş zamanlı olarak bilgisayar ile kontrol edilip laserin istenilen frekansları taraması sağlanır. Böylece taranabilir ring-boya laserin istenilen frekanstan başlayarak adım adım her frekansta hiçbir frekansı atlamadan taranması sağlanmış oldu. FPI'daki dalgaboyu değişimi lineer değildir. Bu nedenle deney datalarının FPI'dan gelen ayar maksimumları ile lineerize edilmesi gereklidir. Deney datalarının lineerize edilmesi bölüm (3.5.4)'de açıklandı.

Optogalvanik sinyal, $C = 1.54 \mu F$ 'lık bir kondansatör üzerinden lock-in'e gönderilir. Lock-in güçlendirici gürültü içerisinde saklanmış tekrarlanan AC sinyallerinin fazını ve genliğini ölçmek için kullanılır. İnce bir filtre gibi davranarak ölçülen sinyalden istenmeyen gürültüleri çıkarır. Cw-boya laseri ile her geçiş için dalga boyu taranarak aşırı ince yapı geçişlerini veren spektrumlar elde edildi.

Laser ışığı içi boş silindir katotun içine yönlendirilir. Atomlar ve iyonlardan meydana gelen metal buharı optogalvanik spektroskopi ile araştırılabilir.

3.5.2. Silindir Katod

Lantan elementinin buharlaştırılması için içi laser ışını geçebilecek şekilde oyuk olan silindir katot lambası kullanıldı. Katot lambası 20 mm uzunluğunda ve 3 mm çapında olup bakırdan yapılmıştır. 0.25 mm kalınlığında plaka halinde bulunan Lantan elementi ince bir rulo haline getirilip bu oyuğun içine yerleştirildi. Deney süresince ölçümlerdeki aşırı ince yapı bileşenlerinin çizgi genişlemesini azaltmak için silindir katot lambası sıvı azot eklenerek soğutuldu. Silindir katot lambası Şekil 3.13'de gösterilmiştir.



Şekil 3.9: Silindir katot lambası

Silindir katot lambası 20 mA-50 mA akımda çalıştırıldı. Akım yükseldikçe gürültüsüz bir optogalvanik sinyal almak zorlaşır. Silindir katottaki optogalvanik sinyal gözlenerek, Lantan silindir katodu, 300V'luk gerilim altında 25 mA akımla çalıştırıldığında, genelde temiz optogalvanik sinyaller alındı.

Silindir katot içerisinde temel enerji düzeyinde bulunan atomlar kadar, yüksek enerji düzeylerine uyarılmış atomlar da bulunur. Özellikle yarı kararlı seviyeleri incelemek için silindir katot boşalımı kullanışlı bir ışık kaynağıdır. İncelenen elementlerin buharları katot boşalım ortamında saçılma ile üretilir. Katodun silindirik olmasından dolayı, katodun bir yüzeyinden gelen elektronlar katodun karşı yüzeyinden yansıyarak daha etkin bir şekilde iyonizasyona ve ortamda bulunan atomların uyarılmasına sebep olurlar.

Tüm sistemin havası deney öncesinde boşaltılıp taşıyıcı gaz Argon ile dolduruldu. Taşıyıcı gaz olarak asal gazlar kullanılır. Bunun nedeni incelenen elementle etkileşmeyi önlemektir [37].

3.5.3. Optogalvanik Spektroskopi

Optogalvanik spektroskopi, gaz boşalımlarında laser spektroskopi uygulamalarının basit ve mükemmel bir tekniğidir. Laser ışığı içi boş silindir katotun içine yönlendirilir. Katot içinde UV yada görünür bölgede çok sayıda çizgi dağılımına sahip bir element içerir. Katot maddesi içeren içi boş silindir katodun içinde çarpışmalar sonucu oluşan pozitif gaz iyonları boşalım içindeki mevcut alanda katod yüzeyine doğru hızlanarak çarpmaları sonucunda yüzeyden ikincil elektronlarla birlikte metal atomlarını da koparırlar [37]. Atomlar ve iyonlardan meydana gelen metal buharı ile Optogalvanik Spektroskopi için iyi bir ortam sağlanmış olur. Optogalvanik etki ilk defa 1928 yılında Penning tarafından incelenmiştir. Optogalvanik sinyal lock-in güçlendiricisi ile dedekte edilir. Optogalvanik sinyalin ölçülebilmesi için boşalım ortamının son derece kararlı olması gerekmektedir. Ancak bu durumu sağlayan akım ve basınçta istenilen seviyelere uyarma işlemi gerçekleştirilebilir. Laser ışını atomu iyonizasyon olasılığı küçük olan bir enerji seviyesinden iyonizasyon olasılığı büyük olan bir seviyeye uyarırsa, boşalım akımı yükselir ve voltaj düşer. Optogalvanik Spektroskopi deney düzeneği Şekil 3.11’de gösterilmiştir.

Laser ışığının boşalım ortamının içinden geçmesi optik elemanlarla sağlanır. Laser frekansı boşalım ortamındaki atomların ya da iyonların, iki enerji seviyesi $E_i \rightarrow E_k$ arasındaki geçişe ayarlandığı zaman $n_i(E_i)$ ve $n_k(E_k)$ nüfus yoğunlukları optik pompalamayla değişir. Yüksek seviyelerle alçak seviyeler karşılaştırıldığında bunların iyonizasyon olasılıkları farklıdır. Boşalım ortamındaki atomların spektral geçişlerine karşılık gelen bir ışık kaynağı kullanıldığında seviyelerin doluluk oranlarının değişimi ile ortamın elektriksel özelliklerinde değişimler olur. İki seviyedeki farklı iyonizasyon olasılıkları nedeniyle nüfus değişimi boşalım akımı ΔI ’yı değiştirir. Bu değişim $\Delta U = R \Delta I$ ile verilen voltaj değişimiyle dedekte edilir. Laser ışını, ışın bölücü ve aynalar kullanılarak bölünür ve lock-in güçlendirici ile doğrudan beslenen AC voltajı elde edilir. Birkaç miliwattlık laser gücü, birkaç miliamperlik gaz boşalımlarında ($\mu V - mV$) büyük sinyaller verir. Akım değişimiyle absorbe edilmiş laser fotonları dedekte edilir. Bu teknik optogalvanik spektroskopi metodu olarak bilinir. E_i ve E_k seviyelerine bağlı olarak $E_i \rightarrow E_k$ geçişinde hem pozitif hem de negatif sinyaller gözlenir. Eğer E_i seviyesindeki atomun toplam iyonizasyon olasılığı $IP(E_i)$ ise, Δn_i

ve Δn_k nüfus değişimleri boşalım akımının artıp azalmasına sebep olur. Laserin neden olduğu $\Delta n_i = n_{i_o} - n_{i_l}$ nüfus değişimi voltaj değişimi ΔU 'yu meydana getirir [39].

$$\Delta U = R \Delta I = a [\Delta_{ni} IP(E_i) - \Delta_{nk} IP(E_k)] \quad (3.74)$$

a :Bir sabit

Optogalvanik etkinin oluşumunda değişik iyonizasyon reaksiyonları rol oynar.

Elektron çarpmalarının meydana getirdiği iyonizasyon,



Temel seviyedeki atomlarla yüksek enerji seviyelerindeki uyarılmış atomların çarpışarak oluşturduğu iyonizasyon [40],



Boşalım ortamında değişik türde atom varsa,



Yarı kararlı seviyelerdeki atomlar arası çarpışmalar,



A : Temel seviyedeki atom

A* : Yarı kararlı seviyedeki atom

A⁺ : İyonize olmuş atom

A₂⁺ : Moleküler iyon

ΔE : Geçiş enerjisi

3.5.4. Deney Datalarının Analizi

Spektrum frekans ya dalga boyu ya da dalga sayısı cinsinden şiddet dağılımıdır ve spektral çizgilerin şiddetinden farklı seviyeler arasındaki geçiş olasılıkları anlaşılır. Geçiş olasılıkları ise seviyelerin dalga fonksiyonları hakkında bilgi verir.

Spektral çizgilerin soğurma ve yayınlama spektrumları monokromatik değildir. Herbir spektral geçiş çizgisi çizgi genişliğine sahiptir. Spektral çizgi genişlemeleri, diğer spektral ayrışmayı engeller. Çizgi genişlemelerinin birkaç sebebi vardır. Bunlardan bir tanesi doğal çizgi genişlemesidir.

Yüksek çözünürlüklü sistemlerde absorpsiyon ve emisyon şiddetinin spektral dağılımı merkez frekansın çevresinde yer alır. Bu Δν aralığı nedeniyle E_i → E_k geçişine ait enerji de ΔE aralığındadır. ΔE enerjisindeki belirsizlik çizgi genişlemesine sebep olur. Bu çizgi genişlemesi üst seviyedeki yaşam ömrü ile belirlenir ve doğal çizgi genişlemesi adını alır [39]. Doğal çizgi genişlemesinden uyarılmış durumun yaşam ömrü belirlenebilir. Taban durumu dışındaki tüm seviyeler sonlu bir τ yaşam ömrüne sahiptir. Belirtilen seviyenin yaşam ömrü azaldıkça enerjideki çeşitlilik o kadar artar ve belirsizleşir. Bu süre ne kadar uzun olursa enerji o kadar belirginleşir. Sistemin enerjisi ile τ yaşam ömrü arasındaki ilişki,

$$\Delta E = \hbar / \tau \quad (3.81)$$

ile verilir.

$\Delta\nu$ frekans aralığı yarı genişlik adını alır. Bu durumda doğal çizgi genişlemesi için yarı genişlik,

$$\Delta\nu = 1/2\pi\tau \quad (3.82)$$

ile verilir. Doğal çizgi genişlemesi Lorentz dağılımı gösterir.

Spektral çizgiler atomların hareketli olmalarından dolayı meydana gelen Doppler etkisiyle de genişler. Atomun hareketine bağlı olarak frekansta bir kayma gözlenir. Doppler genişlemesi Gauss dağılımı gösterir. Doğal çizgi genişlemesinden oldukça büyüktür.

Spektral çizgilerde gözlenen Doppler yarı genişliği,

$$\Delta\nu = \frac{2\nu_0}{c} \sqrt{2 \ln 2 \frac{kT}{m}} \quad (3.83)$$

ile verilir [2].

ν_0 Atom tarafından yayınlanan ışığın doğal frekansı,

c : Işık hızı,

k : Boltzmann sabiti,

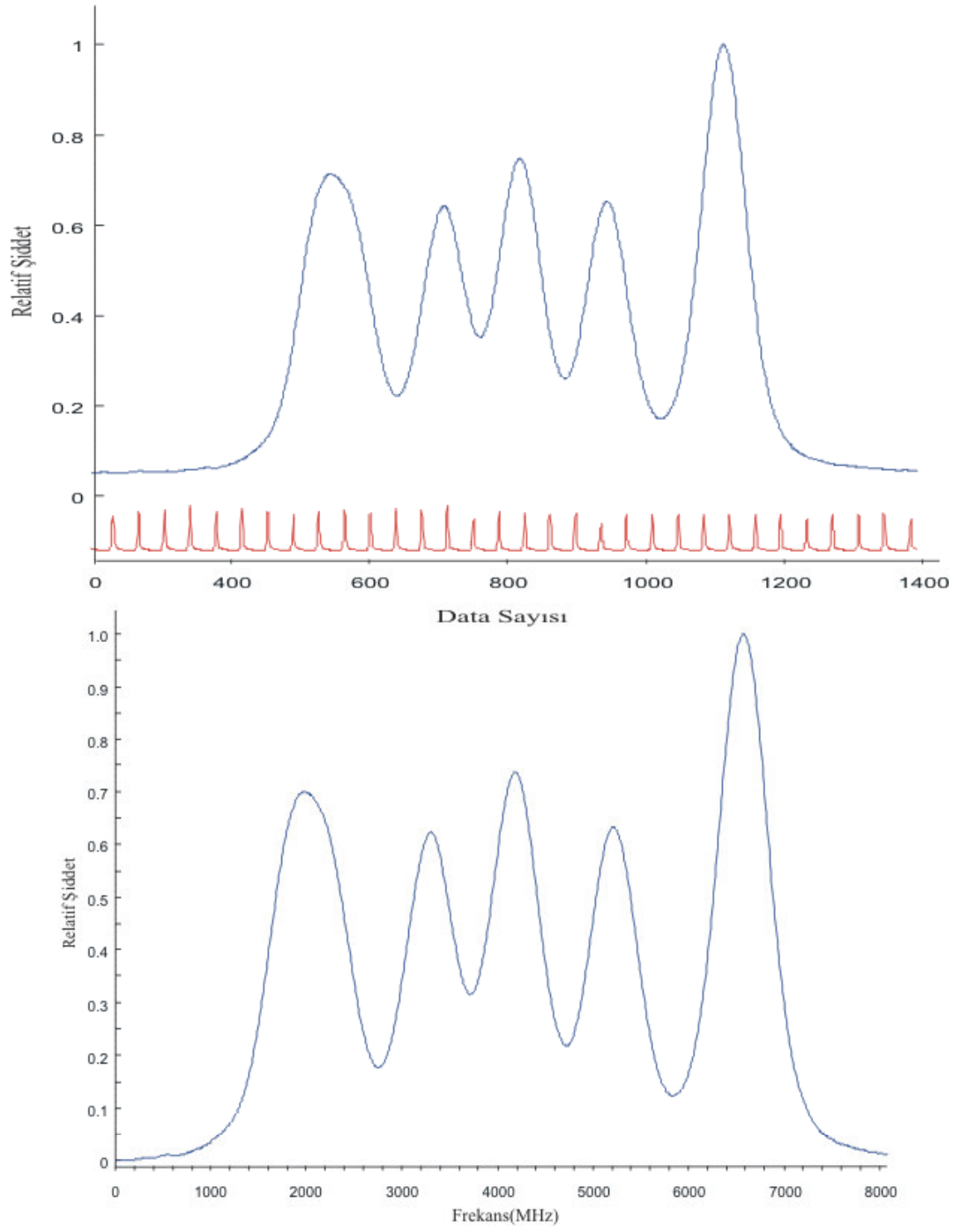
T : Sıcaklık,

m : Atomun kütlesidir.

Doğal çizgi genişlemesi atomların yaşam ömürlerinin aynı olması sebebi ile homojen olmakla birlikte Doppler genişlemesi atomların farklı hızlara sahip olmasından dolayı

homojen olmayan çizgi genişlemesidir. Bir spektrumda hem doğal çizgi genişlemesi hem de Doppler genişlemesi olabilir. Bu iki çizgi genişlemesinin birlikte düşünüldüğü durum Voight profili olarak adlandırılır.

Deney dataları Fitter bilgisayar programı [9] kullanılarak analiz edildi. Her spektral çizgi için alınan on ölçüm tek tek fit edildi. Fitter bilgisayar programının giriş datalarına o spektral geçişe ait bilgiler girilerek deneysel spektrum ile teorik spektrum fit edilir. Fit işleminden önce her spektrum FPI'dan alınan ayar maksimumları ile lineerize edilir. Ölçüm için kullanılan laserin serbest spektral bölgesi ile spektrumun başlangıç ve bitiş değerleri kullanılarak deneysel spektrum lineerize programı ile lineerize edilerek herbir datanın ne kadarlık frekansa karşılık geldiği saptanır ve spektrumun yatay eksenindeki data sayısı frekans değerine dönüştürür. Bu durum Şekil 3.14'te gösterilmiştir. Şekil 3.14'te $\lambda = 796.483$ nm dalgaboyuna karşılık gelen spektral geçişin, lineerize işleminin öncesinde ve sonrasında elde edilen spektrumları sırasıyla verilmiştir.



Şekil 3.10: $\lambda = 796.483$ nm dalgaboyuna karşılık gelen spektral geçişin, ilk alınmış ve lineerize edilmiş deneysel spektrumları.

Fitter bilgisayar programı laser spektroskopik metodlarla alınan spektrumların, şiddet dağılımının analiz edildiği bir programdır. Spektrumlardaki şiddet dağılımı belli bir aralıktaki sürekli frekans değişimine bağlıdır. Şiddet dağılımı verilen herbir deneysel spektrum, teorik spektrum ve bu iki spektrum arasındaki fark frekans cinsinden ayar maksimumlarına bağlı olarak hesaplanır.

Programın çalıştırılabilmesi için giriş datası oluşturulur. Giriş datası deneysel olarak kaydedilen spektrumun, fit yapılabilmesi için gerekli fiziksel parametreleri içerir. Bu parametrelerin bazıları sabittir değiştirilemez. Bunlar :

1. Elementin çekirdek spini I ,
2. Alt ve üst seviyelerin ayrı ayrı J toplam açısal momentumu,
3. Elementin kaç tane izotop içerdiği,
4. Elementin içerdiği izotopların doğal karışımındaki oranlarıdır.

Değişken olan parametreler:

1. Spektrumdaki herbir bileşenin frekans eksenindeki yeri,
2. Spektrumdaki herbir bileşenin şiddeti,
3. İncelenen çizginin alt ve üst enerji seviyelerinin aşırı ince yapı sabitlerinin değerleri,
4. Spektrumdaki bileşenlerin Gauss ve Lorentz katkılarının yarı genişlikleri,
5. Spektrumun başlangıç ve bitişteki gürültü yüksekliğidir.

Bu parametreler değiştirilerek spektrumun analiz işlemi gerçekleştirilmiş olur. Programın tek amacı deneysel spektrum ile teorik spektrum arasındaki farkı minimuma indirgeyerek aşırı ince yapı sabitleri olan A ve B' leri belirlemektir. Değişken

parametreleri azaltmak için deęişken parametrelerin bazıları sabit tutulabilir yada dięer deęişken parametrelerle kuplaj yapılabilir. Örneęin tam olarak ayrışmamış spektrumlarda ayrışmamış bileşenler, ayrışmış bileşenlerle kuplaj yapılmak zorundadır. Çünkü programın spektrumu fit işlemleri sırasında yaptığı şey sadece spektrumu matematiksel fonksiyona uydurmaktır. Bunun sonucunda fiziksel olmayan bir takım sonuçlar çıkabilir. Bu nedenle kuplajlar fiziksel kurallar dahilinde yapılmalıdır. Örneęin şiddetleri veren parametreyi kuplaj yaparken dikkat edilmesi gereken nokta şudur: Aşırı ince yapı geçişlerinin meydana geldięi ΔF farkları aynı olan çizgiler kendi aralarında kuplaj yapılabilir.

4. BULGULAR

4.1. LANTAN (^{139}La) ELEMENTİNİN GENEL ÖZELLİKLERİ

Lantan içeren toprak bileşikler, karbon esaslı aydınlatmada ve özellikle sinema endüstrisinde, stüdyo aydınlatmalarında ve projeksiyonda kullanılır. Lantan, camın alkali direncini artırır ve özel optik camların yapımında kullanılır. Kamera merceklerinde de lantan kullanılır. Çakmalarda kullanılan çakmaktaşı ve pil elektrotları da lantan elementi içerir. Yakın zamanda başlatılan çalışmalarda belirlendiği üzere, lantan içeren hidrojen emici sünger alaşımları, kendi hacimlerinin 400 katı kadar hidrojen tutup verebilmekte ve her hidrojen alışlarında açığa ısı enerjisi çıkarmaktadırlar [41].

La I elementinin ^{138}La ve ^{139}La olmak üzere iki izotopu mevcuttur. Bu izotopların çekirdek spinleri sırasıyla 5 ve 7/2 dir. La I elementinin deneysel olarak 343 enerji seviyesi bulunmuştur. Nist [28] tablosunda belirtilen bu seviyeler $5d6s^2$ konfigürasyonlu $^2D_{3/2}$ terimi ile belirtilen 0.000 cm^{-1} enerji seviyesiyle başlar ve $6s^28p$ konfigürasyonlu $^2P_{1/2}$ terimi ile belirtilen 44978.9 cm^{-1} enerji seviyesiyle sona erer.

La I elementinin yapısı karışık, spektrumu zengindir. Bu elementle ilgili literatürde yer alan ilk çalışmalarda çift pariteli konfigürasyonlarla tanımlanan enerji seviyelerinin A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı değerleri incelenmiştir. Bunun sebebi tek pariteli konfigürasyonların çok karışık olmasıdır. Lantan'ın farklı elektron dizilimleri ile oluşan 16 farklı konfigürasyonu bilinmektedir. Bazı enerji seviyelerinin konfigürasyonları ise henüz saptanamamıştır. Aynı zamanda enerji seviyelerinin birçoğunun konfigürasyonlarında, terimlerinde ve J (elektronun toplam açısal momentum kuantum sayısı) değerlerinde belirsizlik söz konusudur.

Tablo 4.1'de ^{139}La I elementine ait fiziksel ve kimyasal özellikler belirtilmiştir. La I elementinin enerji seviyelerinin konfigürasyonları incelendiğinde birçoğunun tek pariteli olduğu görülür. Bölüm 2.de belirtildiği gibi Lantan'ın aşırı ince yapısı ile ilgili pek çok çalışma yapılmış olmasına rağmen, zengin spektruma sahip olmasından dolayı

hala seviyelerin A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerinin deneysel ve teorik olarak belirlenmesinde eksiklikler vardır. Bu çalışmanın deneysel kısmında ^{139}La I elementine ait tek pariteli konfigürasyonlarla belirtilen enerji seviyelerinin A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerinin belirlenmesi amaçlanmıştır.

Tablo 4.1 : Lantan (^{139}La) elementinin fiziksel ve kimyasal özellikleri

^{139}La I	Özellikleri [41-42]
Atom Numarası	57
Atom Ağırlığı	138.9055
Erime Noktası	920°C
Kaynama Noktası	3457°C
Elektron Konfigürasyonu	5d ¹ 6s ²
Bulunuş Tarihi	Carl Mosander, 1839
Çekirdek Spini	7/2
Çekirdek Manyetik Dipol Momenti	2.7832 μ_N
Çekirdek Elektrik Kuadropol Momenti	0.22 barn

4.2. DENEYSEL BULGULAR

4.2.1. ^{139}La I Ölçümleri

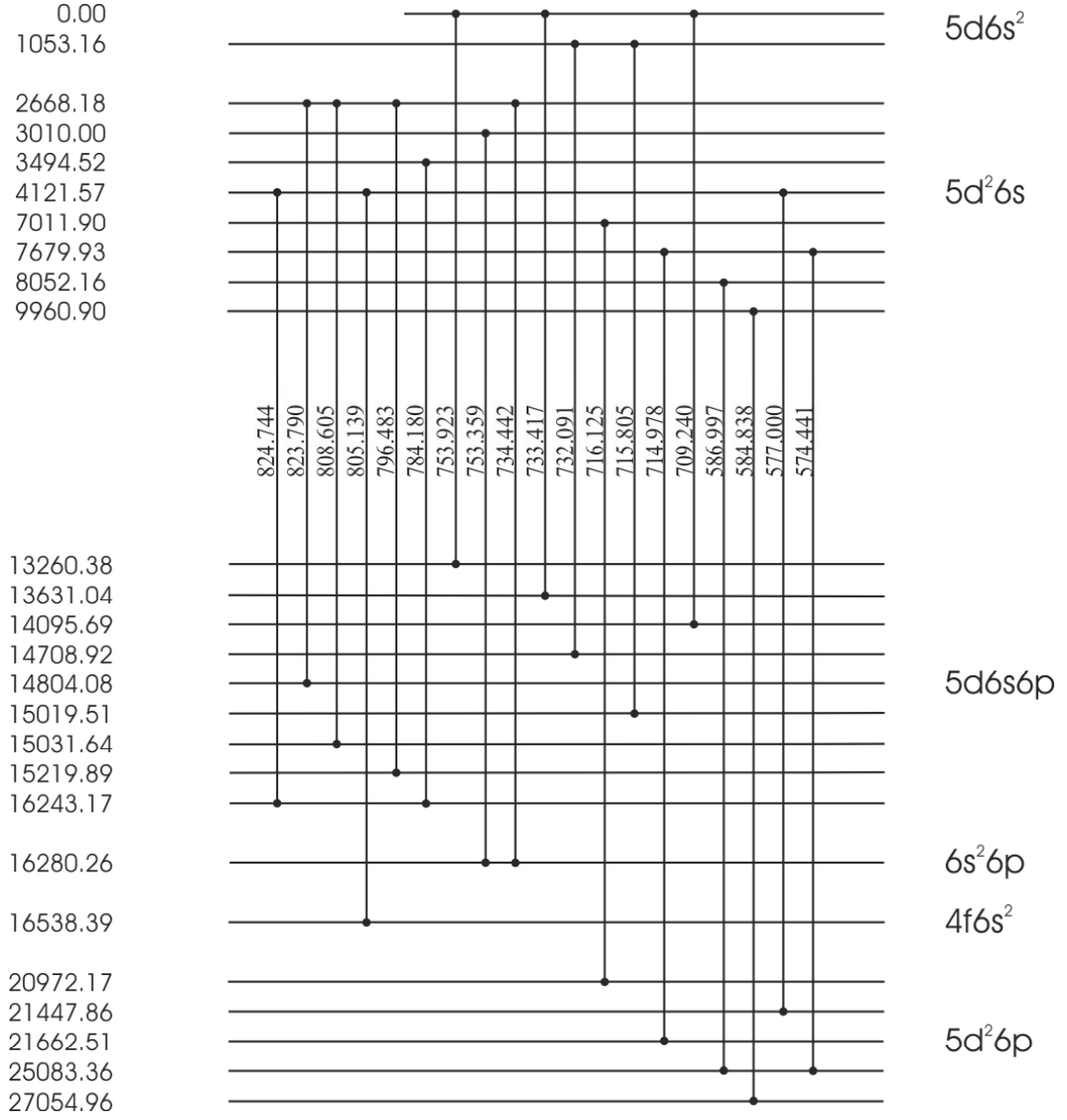
La I elementine ait 570 nm-825 nm dalgaboyu aralığındaki 19 farklı spektral çizginin Laser Optogalvanik Spektroskopi (OGS) yöntemi kullanılarak spektrumları alındı. 570 nm-590 nm dalgaboyu aralığındaki spektral geçişler için Rhodamin 6G boyası içeren koherent 699 ring-boya laser kullanıldı. 700 nm-825 nm dalgaboyu aralığındaki geçişler için de Titan-Safir laser kullanılarak ölçümler alındı.

Şekil 4.1’de La I elementine ait ölçülen spektral geçişler, spektral çizgilerin alt ve üst enerji seviyeleri ve konfigürasyonları ile bu seviyeler arasındaki spektral geçişler dalgaboyları belirtilerek enerji skalası ölçeklendirilmeden çizildi.

Her spektral çizgi için elde edilen spektrumlar Fitter bilgisayar programı kullanılarak lineerize edilip deneysel ve teorik spektrum fit yapıldı. Çizgilerin tümü için en az 10 ölçüm alınarak deneysel hatalar belirlendi. Her çizgiye ait alınmış tüm ölçüler fit yapıldı. Fit sonucu bulunan *A* manyetik dipol aşırı ince yapı ve *B* elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti, ölçümlerin ortalaması alınarak bulundu ve herbir değerin standart sapması verildi. Daha önceki çalışmalardan çok iyi bilinen *A* ve *B* aşırı ince yapı sabitleri fit işlemi sırasında sabit tutuldu.

Fit işlemi yapılırken bazı aşırı ince yapı geçişleri için kuplaj yapıldı. Kuplaj alt ve üst aşırı ince yapı seviyeleri arasındaki toplam açısal momentum kuantum sayısı farkı (ΔF) aynı olan geçişler arasında yapıldı.

La I elementinin bu çalışmada ölçülen 19 spektral geçişine ait laser optogalvanik spektroskopi yöntemi kullanılarak elde edilen aşırı ince yapı spektrumları Şekil 4.2 - Şekil 4.20 aralığında verildi. Şeklin üst kısmında hfs simulasyon programı kullanılarak, hfs seviyeleri arasındaki aralıklar ölçeklendirilerek çizildi. Spektrumlarda; siyah ile optogalvanik spektroskopi ile alınan deneysel spektrum, kırmızı ile Fitter bilgisayar programı kullanılarak hesaplanan teorik spektrum ve yeşil ile bu iki spektrum arasındaki fark iki faktörüyle çarpılarak verildi. Mavi çizgiler ise mümkün olan hfs geçişlerini göstermektedir. Spektrumlarda yatay eksen MHz cinsinden frekans ve düşey eksen relatif şiddet olarak belirtildi. Spektrumların üst kısmında iki enerji seviyesi arasındaki mümkün olan hfs geçişleri, toplam açısal momentum kuantum sayısı *F* değerleri ile birlikte verildi.



Şekil 4.1 : La I elementine ait ölçülen spektral geçişler. Spektral çizgilerin alt ve üst enerji seviyeleri ve konfigürasyonları ile bu seviyeler arasındaki spektral geçişler dalgaboyları belirtilerek verildi. Şekilin üst kısmında çift pariteli, alt kısmında ise tek pariteli enerji seviyeleri birlikte verildi. Enerji skalası ölçeklendirilmemiştir.

Tablo 4.2’de La I elementine ait geişlerin alt ve üst enerji seviyeleri, bu geişlere ait dalgaboyları ve şiddetleri ile bu seviyelerin enerjileri, terimleri ve konfigürasyonları belirtildi.

Fit işlemi sırasında incelenen spektral çizgilerin çift pariteye sahip alt enerji seviyelerine ait aşırı ince yapı sabitleri A ve B ler daha önceki çalışmalardan çok iyi bilindiği için sabit tutuldu. Bu sabit tutulan değerler Tablo 4.3’te verildi.

İncelenen çizgilerin tek pariteli enerji seviyelerinin bu çalışmada elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B hataları ile birlikte Tablo 4.4’te verildi. Bu seviyelere ait eğer varsa daha önceden literatürde bulunan değerler ve hangi tekniklerle belirlendikleri verildi. Bu çalışmada ölçülen çizgilerin, dalgaboyları metod kısmında verildi. Tablo 4.3 ve Tablo 4.4’te her seviyenin enerji değerleri, konfigürasyonları ve terimleri de belirtildi.

Tek pariteli konfigürasyonların enerji seviyelerinin beşine ait manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve onuna ait elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B ilk defa bu çalışmada hesaplandı. Alt ve üst seviyelerden bazıları birden fazla geişte kullanıldığından bu seviyelere ait birden fazla manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B hesaplandı.

Tablo 4.2 : La I elementine ait 19 farklı geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, bu geçişlere ait dalgalıboyları ve şiddetleri ile bu seviyelerin enerjileri, terimleri ve konfigürasyonları. Şiddetler ve dalgalıboyları MIT [43] tablosundan konfigürasyonlar ve terimler Nist [28] tablosundan alındı. k: Daha uzun dalgalıboylarına göre asimetrik. n: Daha kısa dalgalıboylarına göre asimetrik. °: Tek pariteli konfigürasyonlara ait terimler. ? : Kesin olarak bilinmeyen terimler.

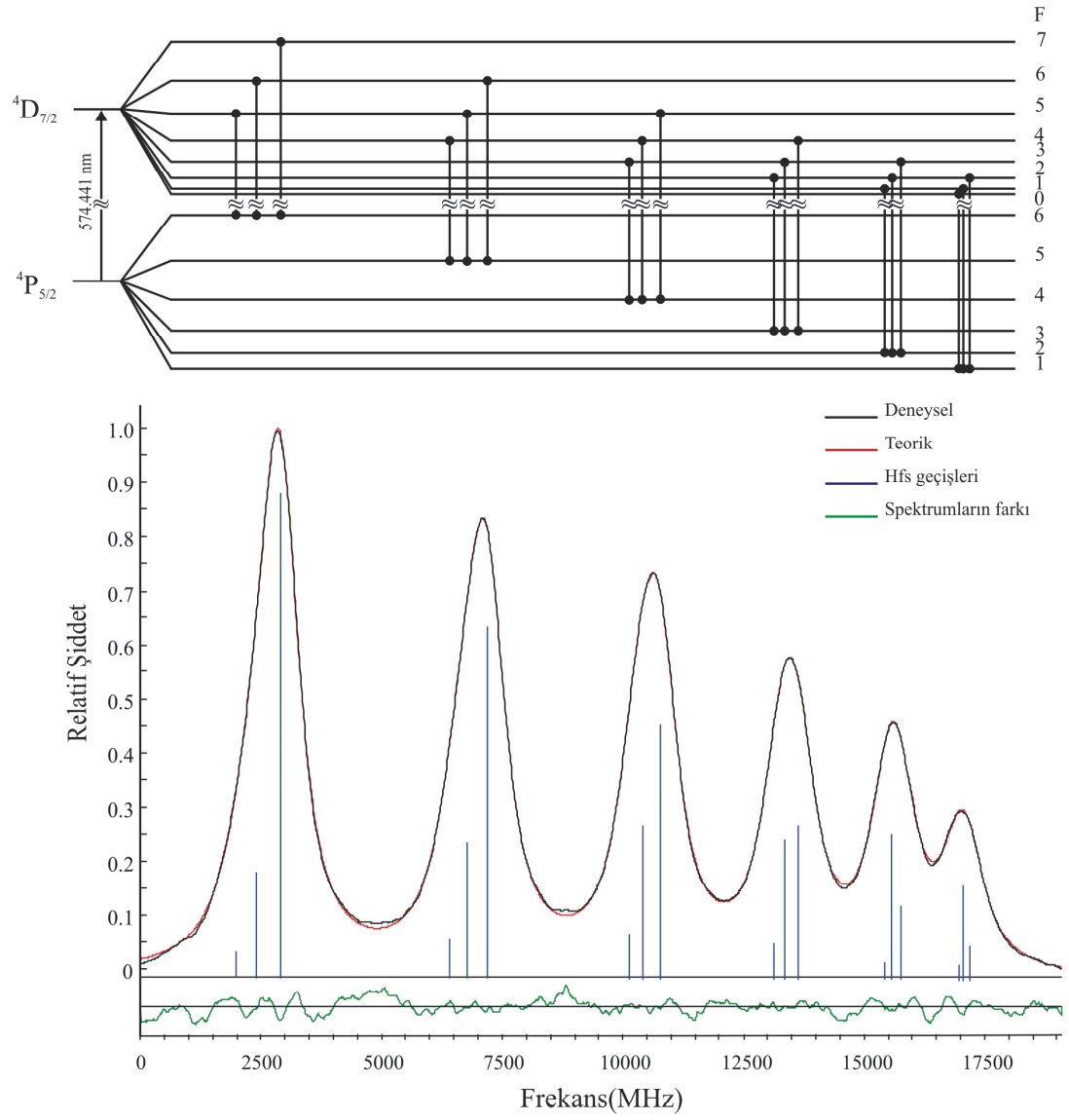
$\lambda_{\text{hava}} / \text{nm}$	Şiddet	Alt seviye			Üst seviye		
		E/cm^{-1}	Konfigürasyon	Terim	E/cm^{-1}	Konfigürasyon	Terim
824.744	1.6	4121.572	5d ² 6s	⁴ F _{9/2}	16243.17	5d6s6p	⁴ F ^o _{9/2}
823.790	0.5k	2668.188	5d ² 6s	⁴ F _{3/2}	14804.08	5d6s6p	⁴ F ^o _{5/2}
808.605	0.8n	2668.188	5d ² 6s	⁴ F _{3/2}	15031.64	5d6s6p	² D ^o _{3/2} ?
805.139	0.6	4121.572	5d ² 6s	⁴ F _{9/2}	16538.39	4f6s ²	² F ^o _{7/2}
796.483	0.5	2668.188	5d ² 6s	⁴ F _{3/2}	15219.89	5d6s6p	⁴ D ^o _{1/2} ?
784.180	1.0	3494.526	5d ² 6s	⁴ F _{7/2}	16243.17	5d6s6p	⁴ F ^o _{9/2}
753.923	1.0	0.000	5d6s ²	² D _{3/2}	13260.38	5d6s6p	⁴ F ^o _{3/2}
753.359	0.3	3010.002	5d ² 6s	⁴ F _{5/2}	16280.26	6s ² 6p	² P ^o _{3/2} ?
734.442	0.3	2668.188	5d ² 6s	⁴ F _{3/2}	16280.26	6s ² 6p	² P ^o _{3/2} ?
733.417	2.0	0.000	5d6s ²	² D _{3/2}	13631.04	5d6s6p	⁴ F ^o _{5/2} ?
732.091	0.3	1053.164	5d6s ²	² D _{5/2}	14708.92	5d6s6p	⁴ D ^o _{3/2}
716.125	2.0	7011.909	5d ² 6s	² F _{5/2}	20972.17	5d ² 6p	² F ^o _{5/2} ?
715.805	2.1	1053.164	5d6s ²	² D _{5/2}	15019.51	5d6s6p	⁴ F ^o _{7/2}
714.978	0.7	7679.939	5d ² 6s	⁴ P _{5/2}	21662.51	5d ² 6p	² G ^o _{7/2}
709.240	0.3	0.000	5d6s ²	² D _{3/2}	14095.69	5d6s6p	⁴ D ^o _{1/2}
586.997	0.5	8052.162	5d ² 6s	² F _{7/2}	25083.36	5d ² 6p	⁴ D ^o _{7/2}
584.838	1.3	9960.904	5d ² 6s	² G _{7/2}	27054.96	5d ² 6p	² H ^o _{9/2}
577.000	1.4	4121.572	5d ² 6s	⁴ F _{9/2}	21447.86	5d ² 6p	² F ^o _{7/2} ?
574.441	1.9	7679.939	5d ² 6s	⁴ P _{5/2}	25083.36	5d ² 6p	⁴ D ^o _{7/2}

Tablo 4.3: İncelediğimiz 19 spektral geçişe karşılık gelen çift pariteli enerji seviyelerinin literatürden bilinen A ve B değerleri. Tek pariteli enerji seviyelerinin değerlerini bulabilmek için literatürden bilinen bu değerler fit işlemi boyunca sabit tutuldu.

$\lambda(\text{nm})$	E/cm^{-1}	Konfig.	Terim	$A(\text{MHz})$	$B(\text{MHz})$	Ref.No
824.744	4121.572	$5d^26s$	$^4F_{9/2}$	489.53	32.18	[19]
823.790	2668.188	$5d^26s$	$^4F_{3/2}$	-480.31	15.08	[11]
808.605	2668.188	$5d^26s$	$^4F_{3/2}$	-480.30	15.08	[11]
805.139	4121.572	$5d^26s$	$^4F_{9/2}$	489.53	32.18	[19]
796.483	2668.188	$5d^26s$	$^4F_{3/2}$	-480.30	15.08	[11]
784.180	3494.526	$5d^26s$	$^4F_{7/2}$	462.87	17.93	[19]
753.923	0.000	$5d6s^2$	$^2D_{3/2}$	141.19	44.78	[44]
753.359	3010.002	$5d^26s$	$^4F_{5/2}$	300.56	10.87	[19]
734.442	2668.188	$5d^26s$	$^4F_{3/2}$	-480.30	15.05	[11]
733.417	0.000	$5d6s^2$	$^2D_{3/2}$	141.20	44.80	[44]
732.091	1053.164	$5d6s^2$	$^2D_{5/2}$	182.17	54.20	[44]
716.125	7011.909	$5d^26s$	$^2F_{5/2}$	304.37	28.09	[11]
715.805	1053.164	$5d6s^2$	$^2D_{5/2}$	182.10	54.20	[44]
714.978	7679.939	$5d^26s$	$^4P_{5/2}$	802.00	-36.90	[19]
709.240	0.000	$5d6s^2$	$^2D_{3/2}$	141.60	44.04	[26]
586.997	8052.162	$5d^26s$	$^2F_{7/2}$	-197.30	39.40	[19]
584.838	9960.904	$5d^26s$	$^2G_{7/2}$	-292.4	66.2	[19]
577.000	4121.572	$5d^26s$	$^4F_{9/2}$	489.71	32.60	[25]
574.441	7679.939	$5d^26s$	$^4P_{5/2}$	802.00	-36.90	[19]

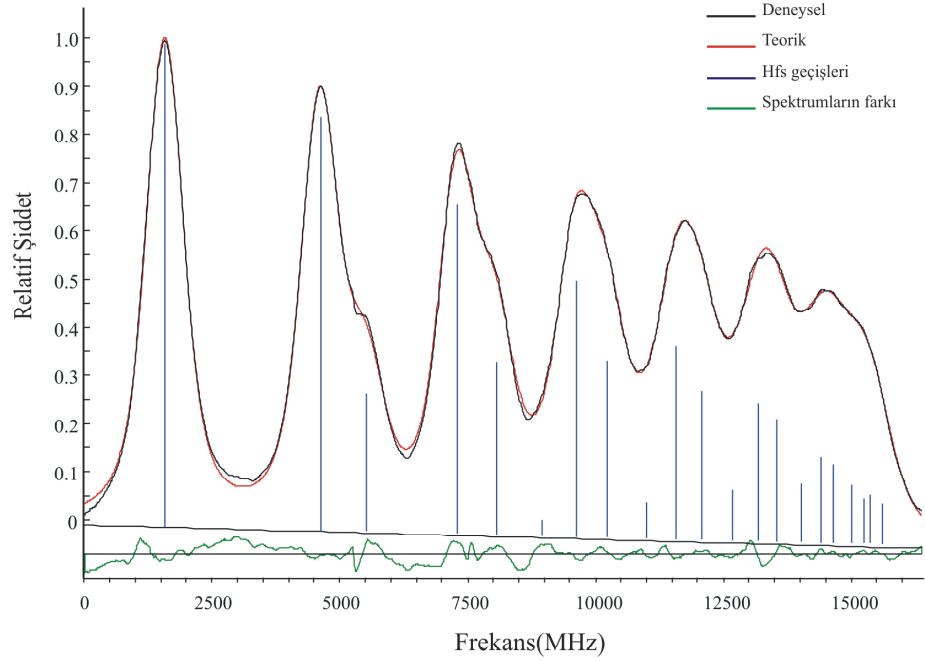
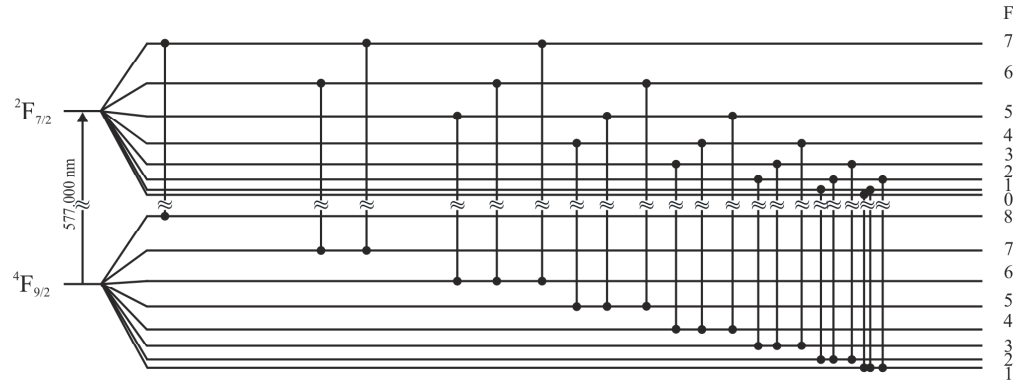
Tablo 4.4 : La I elementinin tek pariteli konfigürasyonlarına ait Optogalvanik Spektroskopi yöntemi kullanılarak elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri A 'lar ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri B 'ler. ogs: doppler indirgenmiş laser optogalvanik spektroskopisi. rims: diyod laser rezonans iyonizasyon kütle spektroskopisi. ois: optiksel girişim spektroskopisi. ab: atomik ışın demeti diyot laser spektroskopisi. dfif: doppler indirgenmiş intermodüle edilmiş floresans.

Konfigürasyon	Terim	Enerji cm ⁻¹	A MHz	B MHz	Metod λ (nm)	Referans
5d6s6p	$^4F^o_{3/2}$	13260.38	-471(6)		ogs	[22]
			-350(4)	54(12)	rims	[21]
5d6s6p	$^4F^o_{5/2}^?$	13631.04	-351.3(3)	75(5)	7539.23	Bu çalışma
			959(30)		ois	[15]
5d6s6p	$^4D^o_{1/2}$	14095.69	958.8(7)	-26(10)	7334.17	Bu çalışma
5d6s6p	$^4D^o_{3/2}$	14708.92	-581.4(1.3)	0	7092.40	Bu çalışma
5d6s6p	$^4F^o_{5/2}$	14804.08	586.1(3)	53(5)	7320.91	Bu çalışma
			333(3)		ois	[15]
			333(1)	20(5)	8237.90	Bu çalışma
5d6s6p	$^4F^o_{7/2}$	15019.51	335.01(74)	23.64(95)	ab	[27]
			672(21)		ois	[15]
5d6s6p	$^2D^o_{3/2}^?$	15031.64	673.6(3)	60(10)	7158.05	Bu çalışma
5d6s6p	$^4D^o_{1/2}^?$	15219.89	-674.2(4)	-22(5)	8086.05	Bu çalışma
5d6s6p	$^4F^o_{9/2}$	16243.17	-257.8(2)	0	7964.83	Bu çalışma
			612(15)		ois	[15]
			613.3(4)	150(15)	7841.80	Bu çalışma
			614.2(2)	164(10)	8247.44	Bu çalışma
6s ² 6p	$^2P^o_{3/2}^?$	16280.26	539.3(8)	50(7)	7533.59	Bu çalışma
4f6s ²	$^2F^o_{7/2}$	16538.39	541.4(6)	50(5)	7344.42	Bu çalışma
			144(15)		ois	[15]
5d ² 6p	$^2F^o_{5/2}^?$	20972.17	146.9(2)	40(5)	8051.39	Bu çalışma
			-66.4(0.3)	35(3)	ab	[17]
			-68(5)		ogs	[22]
5d ² 6p	$^2F^o_{7/2}^?$	21447.86	-69(2)	10(30)	7161.25	Bu çalışma
			121.5(2)	-35.7(13)	dfif	[23]
5d ² 6p	$^2G^o_{7/2}$	21662.51	124.(1)	50(30)	5770.00	Bu çalışma
			283.5(0.3)	55(5)	ab	[17]
5d ² 6p	$^4D^o_{7/2}$	25083.36	283.9(3)	60(25)	7149.78	Bu çalışma
			65(2)		ogs	[24]
			70(2)	13(20)	5869.97	Bu çalışma
			70.8(0.5)	25(15)	5744.41	Bu çalışma
			77(4)		ogs	[12]
5d ² 6p	$^2H^o_{9/2}$	27054.96	180.8(1.3)	217(100)	584.838	Bu çalışma



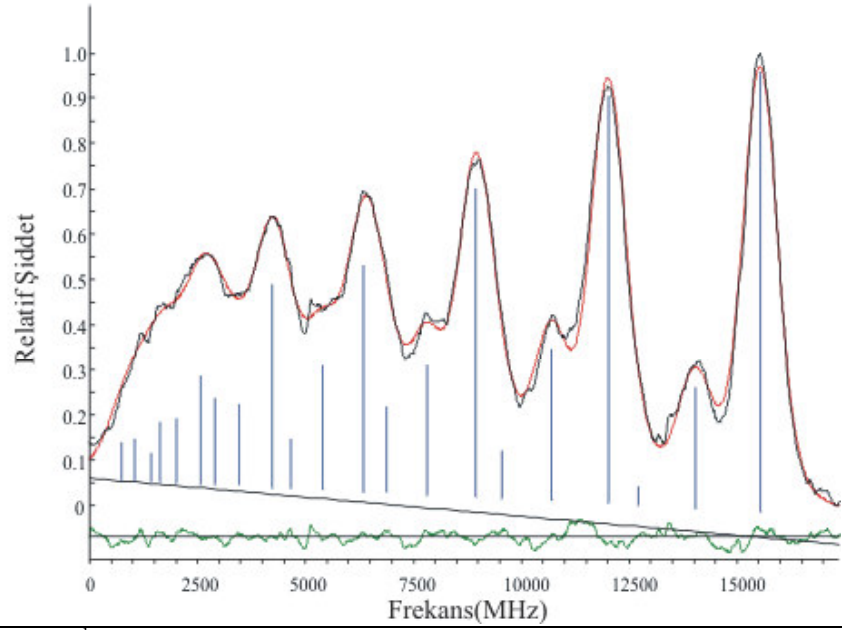
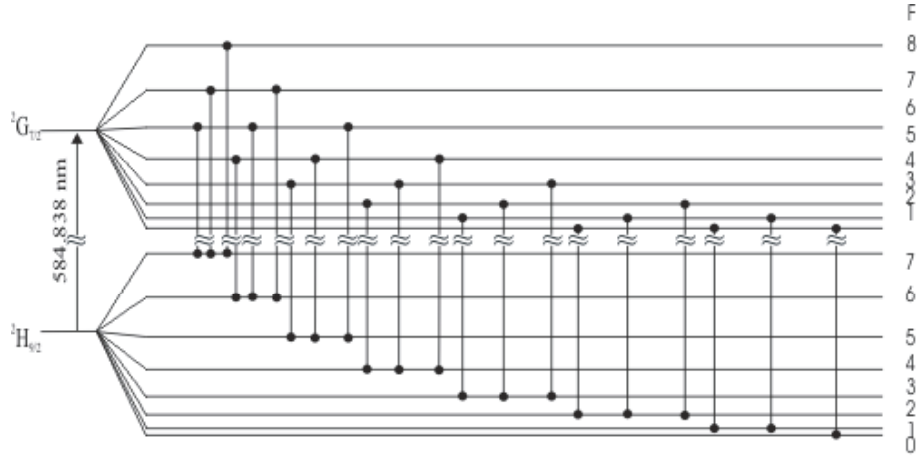
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
7679.939	5d ² 6s	$4P_{5/2}$	802.00*	-36.90*
25083.36	5d ² 6p	$4D^o_{7/2}$	70.8(0.5)	25(15)

Şekil 4.2: La I elementinin, $\lambda=574.441$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



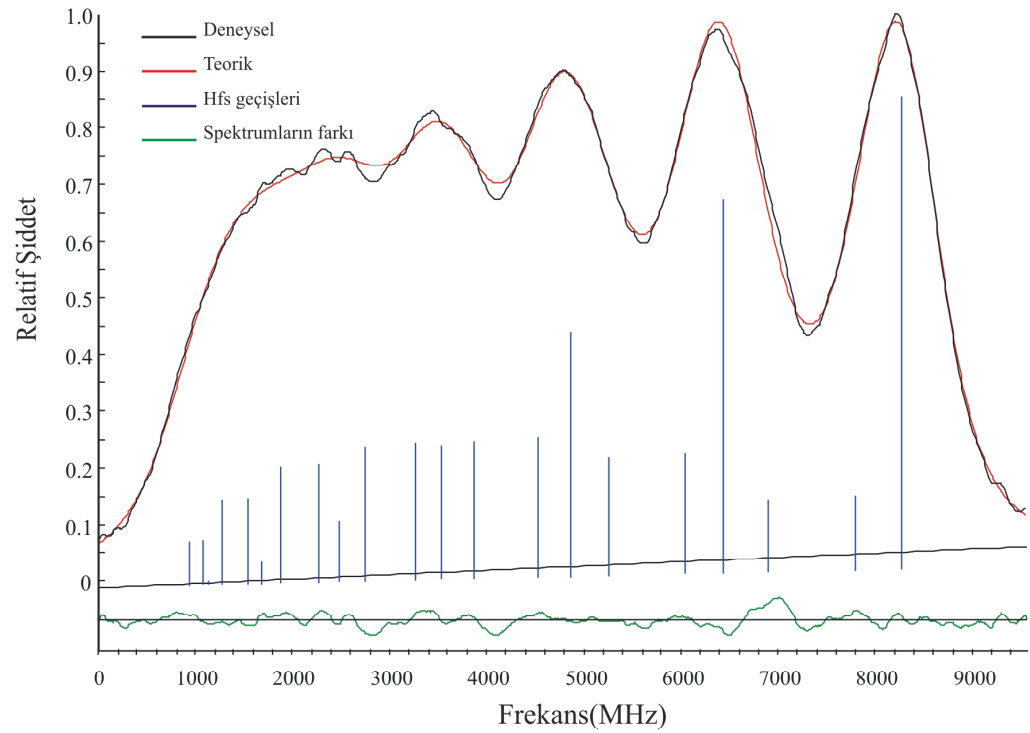
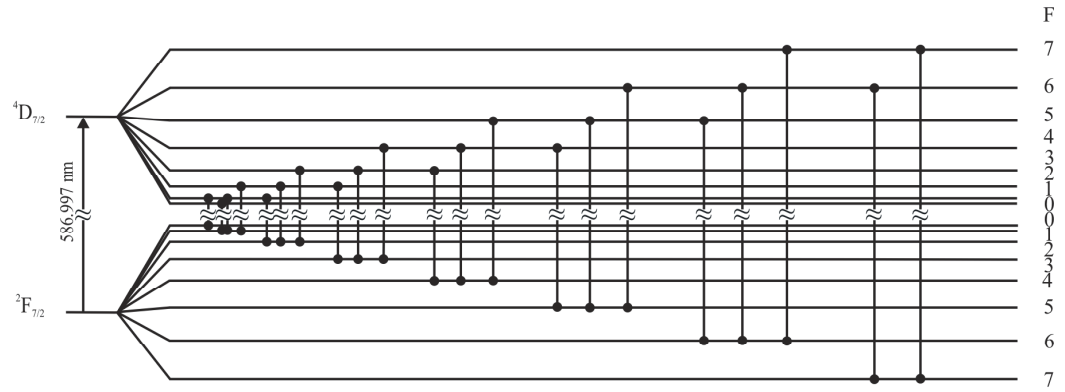
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
4121.572	5d ² 6s	⁴ F _{9/2}	489.71 [*]	32.60 [*]
21447.86	5d ² 6p	² F _{7/2} [?]	124(1)	50(30)

Şekil 4.3: La I elementinin, $\lambda=577.000$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. ^{*}: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu. [?]: Nist tablolarında kesin olarak bilinmeyen terim.



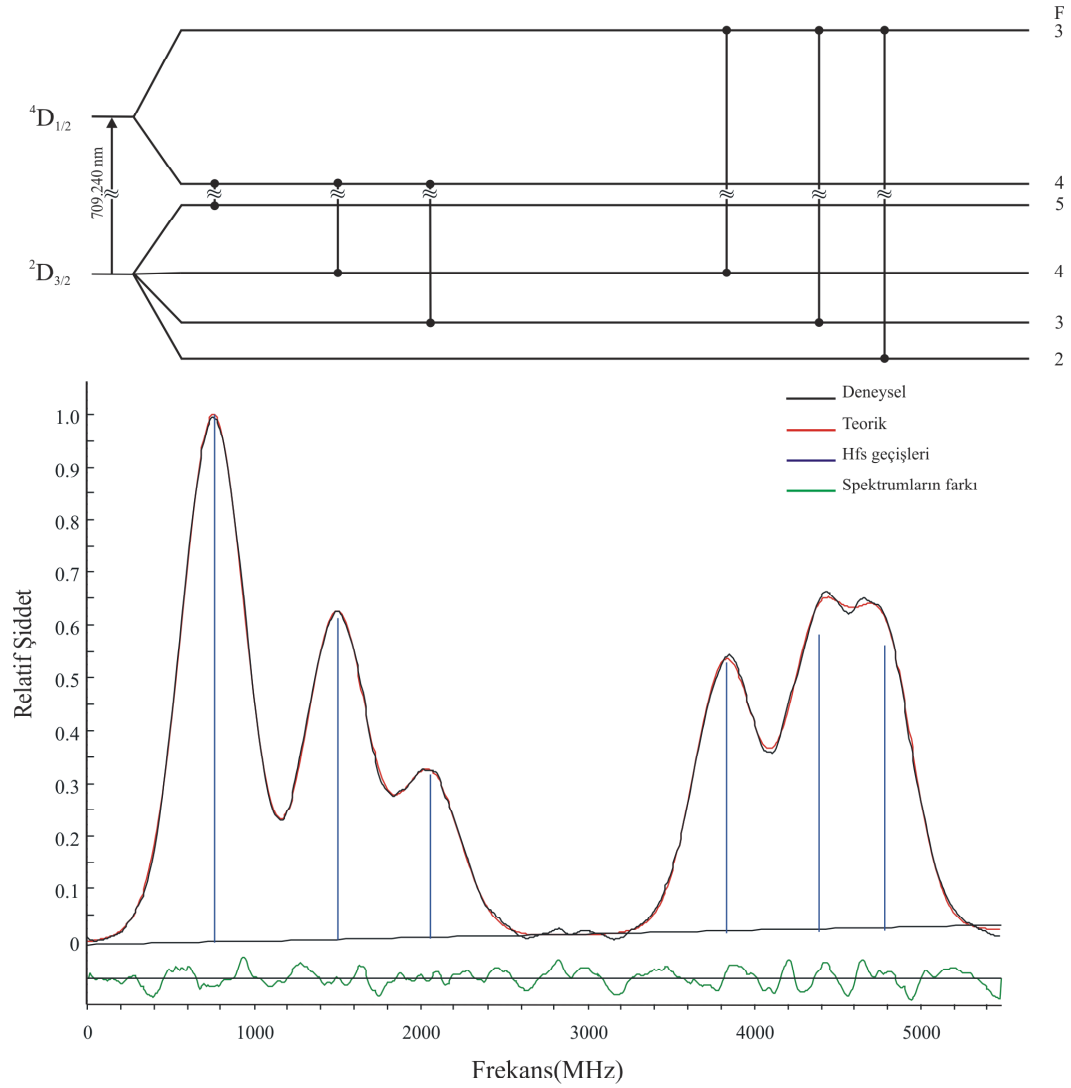
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
9960.904	5d ² 6s	² G _{7/2}	-292.4*	66.2*
27054.96	5d ² 6p	² H ^o _{9/2}	180.8(1.3)	217(100)

Şekil 4.4: La I elementinin, $\lambda=584.838$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



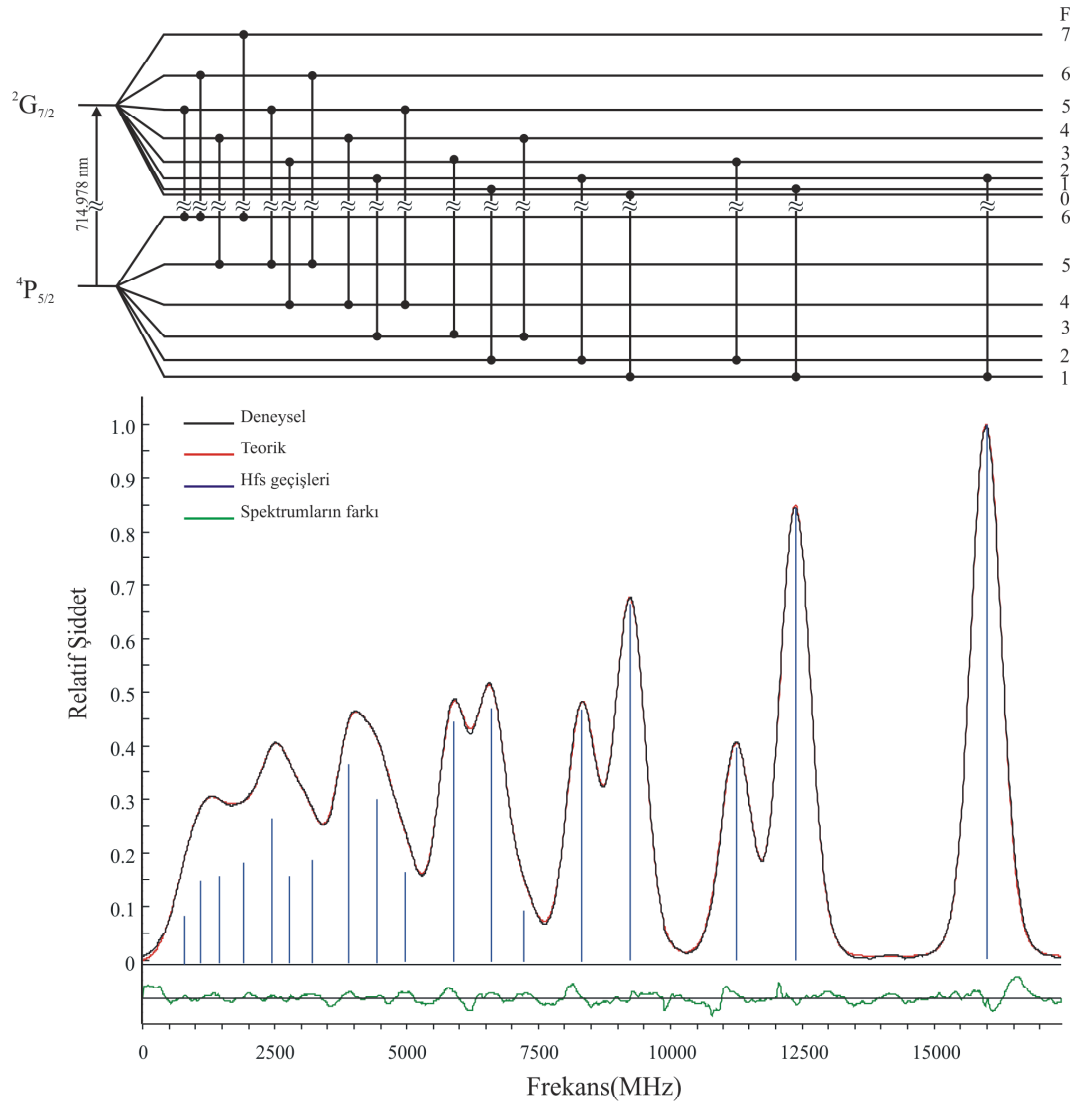
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
8052.162	5d ² 6s	² F _{7/2}	-197.30*	39.40*
25083.36	5d ² 6p	⁴ D ^o _{7/2}	70(2)	13(20)

Şekil 4.5: La I elementinin, $\lambda=586.997$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



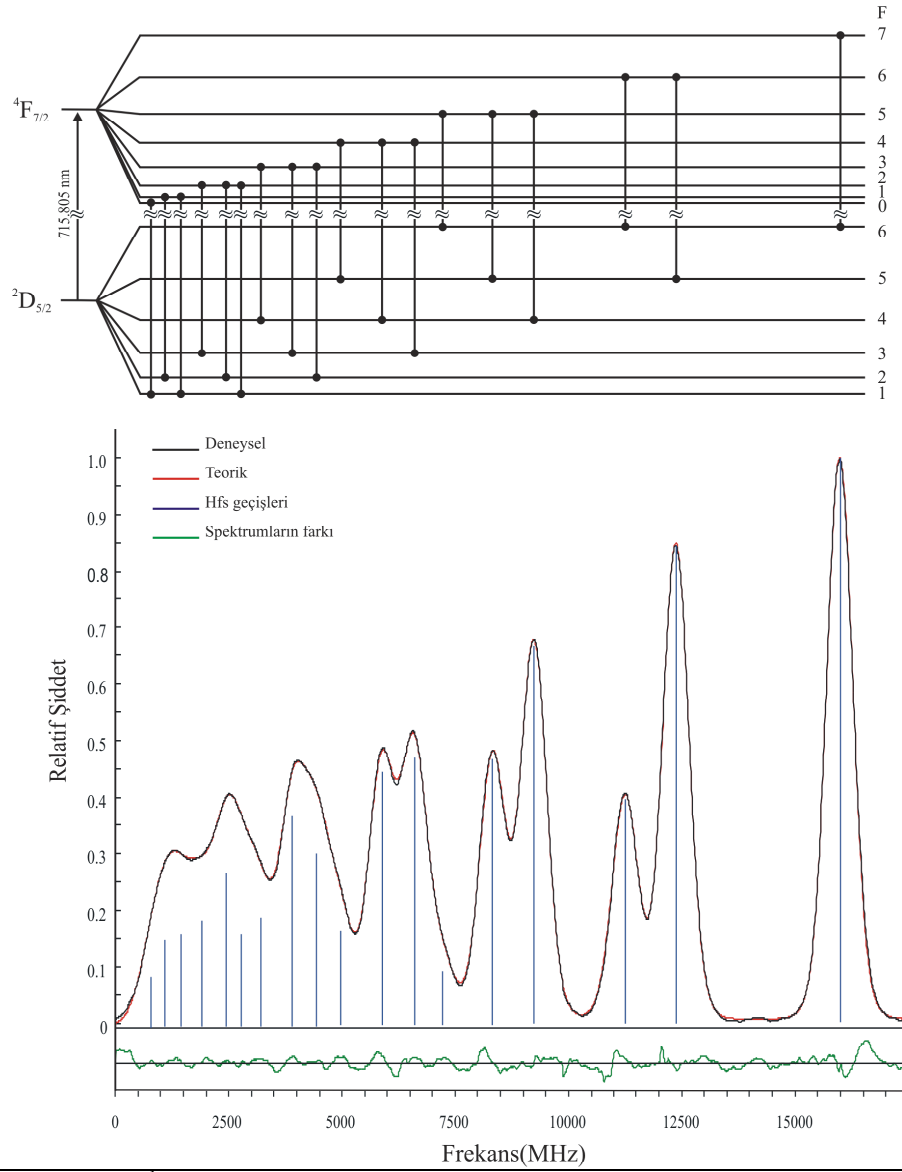
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
0.000	5d6s ²	$2D_{3/2}$	141.60*	44.04*
14095.69	5d6s6p	$4D^o_{1/2}$	-581.4(1.3)	0.00

Şekil 4.6: La I elementinin, $\lambda=709.240$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



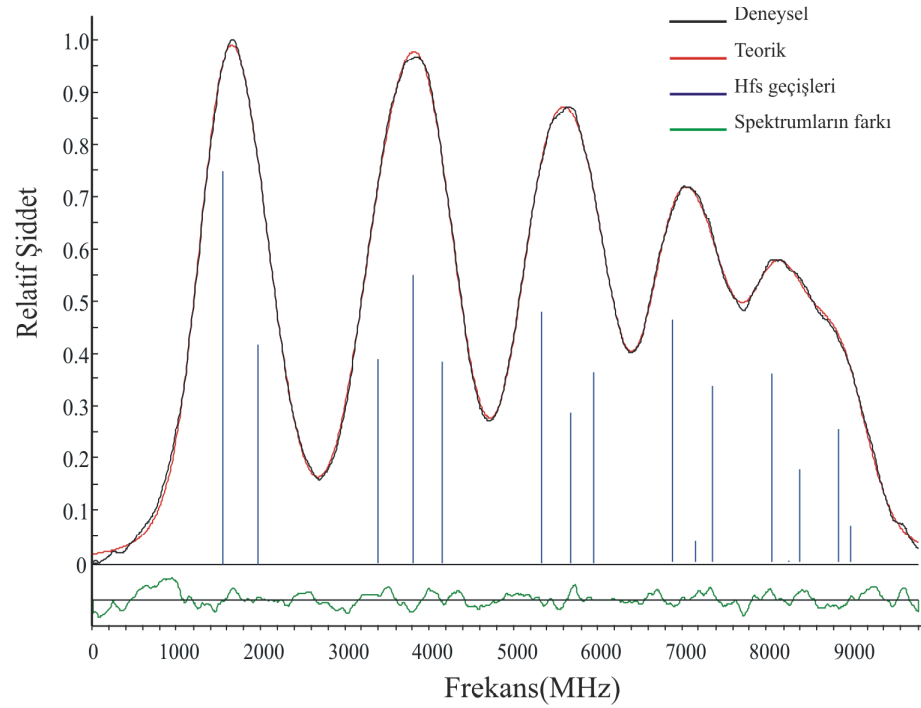
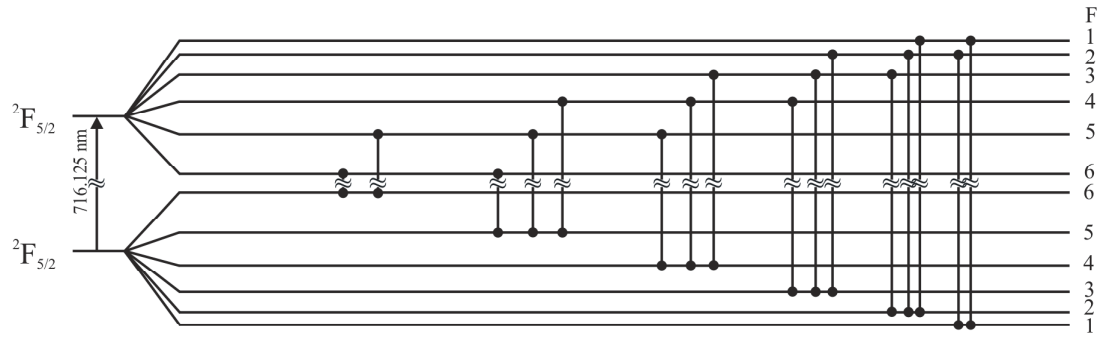
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
7679.939	5d ² 6s	$4P_{5/2}$	802.00*	-36.90*
21662.51	5d ² 6p	$2G^{\circ}_{7/2}$	283.9(3)	60(25)

Şekil 4.7: La I elementinin, $\lambda=714.978$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu, bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



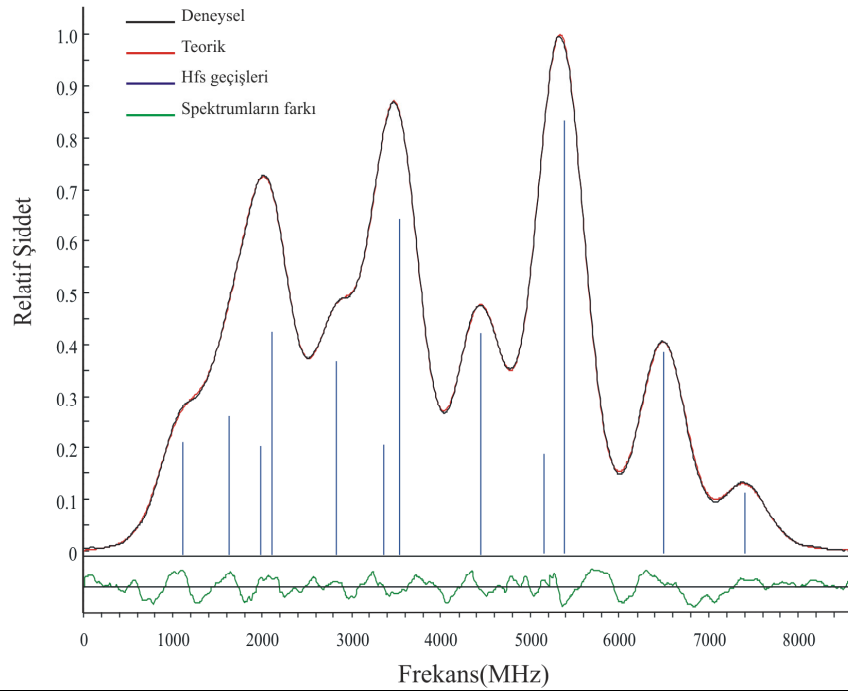
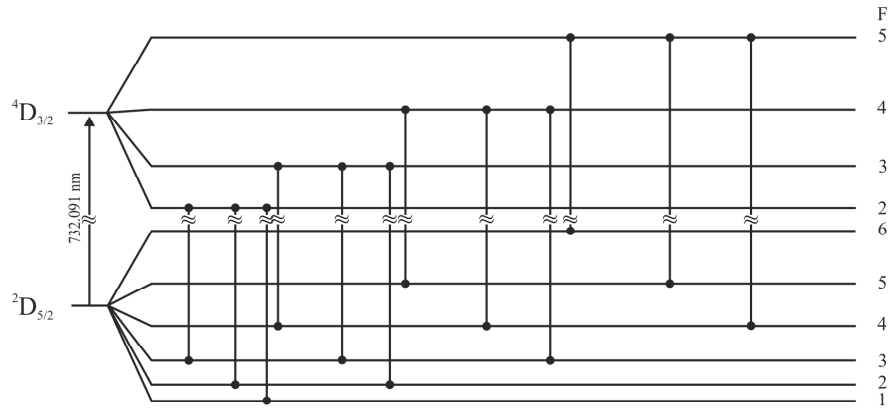
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
1053.164	5d6s ²	$2D_{5/2}$	182.10*	54.20*
15019.51	5d6s6p	$4F^o_{7/2}$	673.6(3)	60(10)

Şekil 4.8: La I elementinin, $\lambda=715.805$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



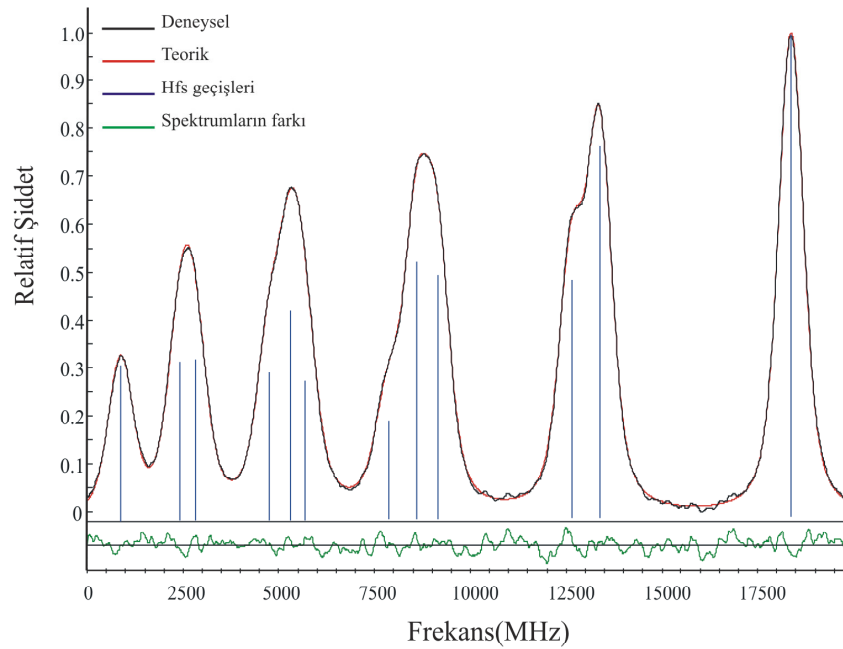
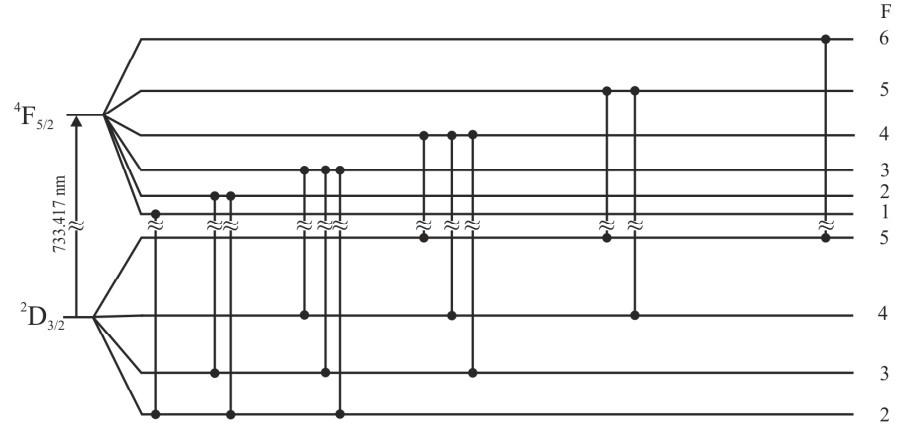
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
7011.909	5d ² 6s	² F _{5/2}	304.37*	28.09*
20972.17	5d ² 6p	² F _{5/2} [?]	-69(2)	10(30)

Şekil 4.9: La I elementinin, $\lambda=716.125$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.?: Nist tablolarında kesin olarak bilinmeyen terim.



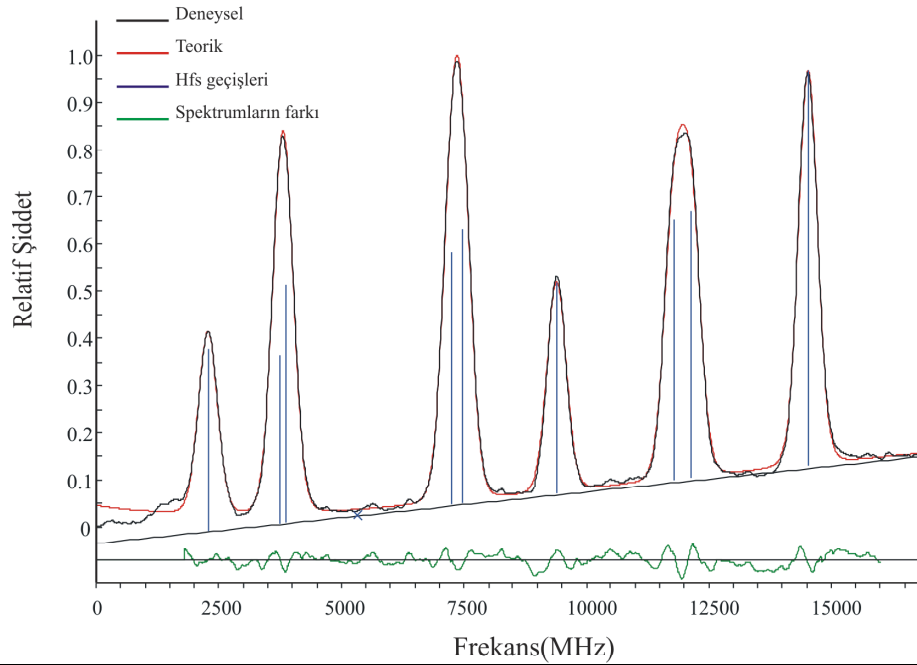
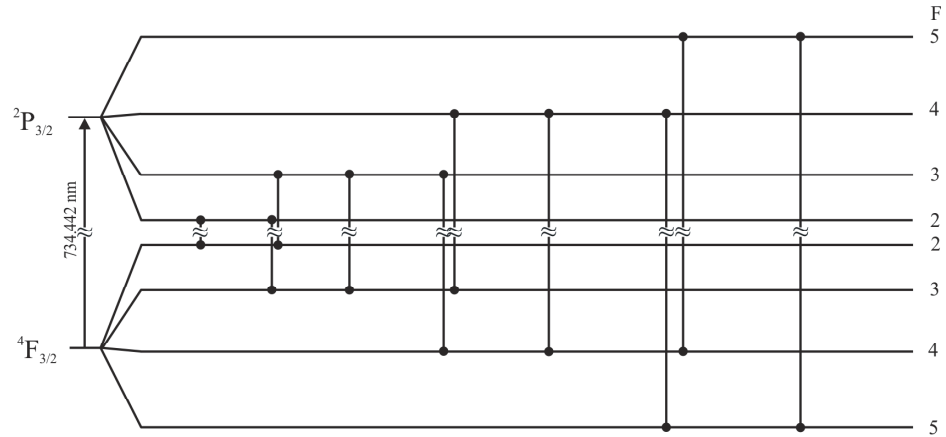
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
1053.164	5d6s ²	² D _{5/2}	182.17*	54.20*
14708.92	5d6s6p	⁴ D ^o _{3/2}	586.1(3)	53(5)

Şekil 4.10: La I elementinin, $\lambda=732.091$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B . *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



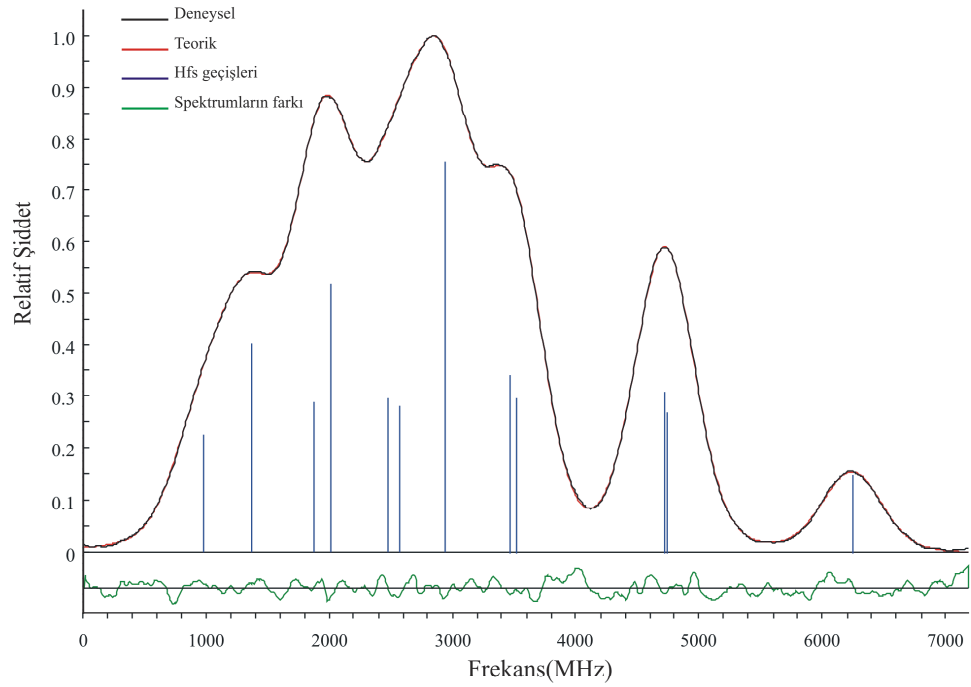
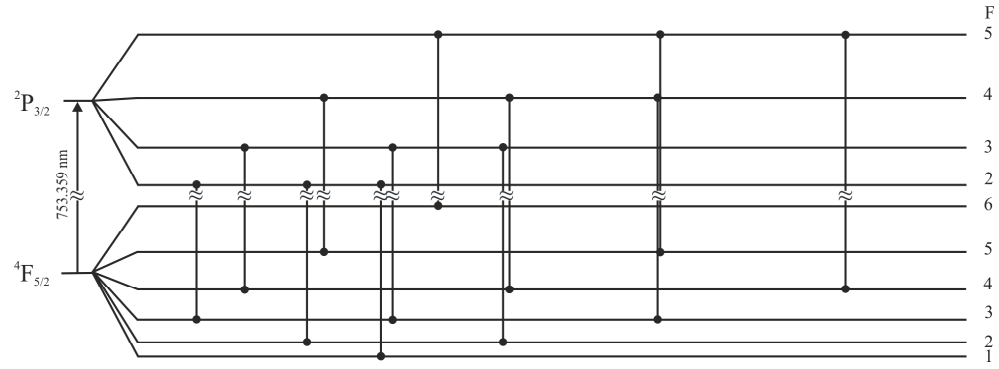
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
0.000	5d6s ²	² D _{3/2}	141.20*	44.80*
13631.04	5d6s6p	⁴ F _{5/2} [?]	958.8(7)	-26(10)

Şekil 4.11: La I elementinin, $\lambda=733.417$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B . *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu. ?: Nist tablolarında kesin olarak bilinmeyen terim.



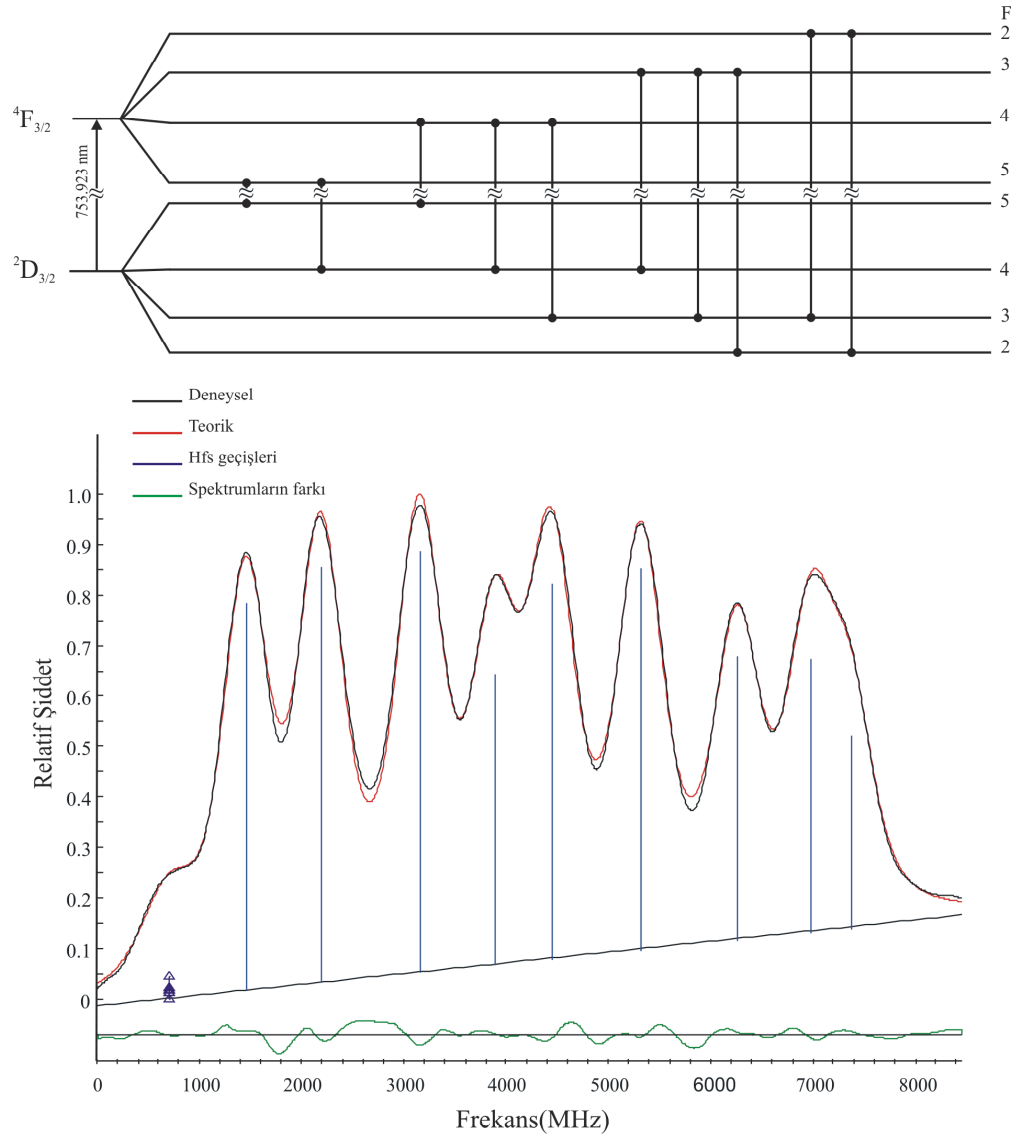
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
2668.188	5d ² 6s	⁴ F _{3/2}	-480.30*	15.05*
16280.26	6s ² 6p	² P ^o _{3/2} ?	541.4(6)	50(5)

Şekil 4.12: La I elementinin, $\lambda=734.442$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



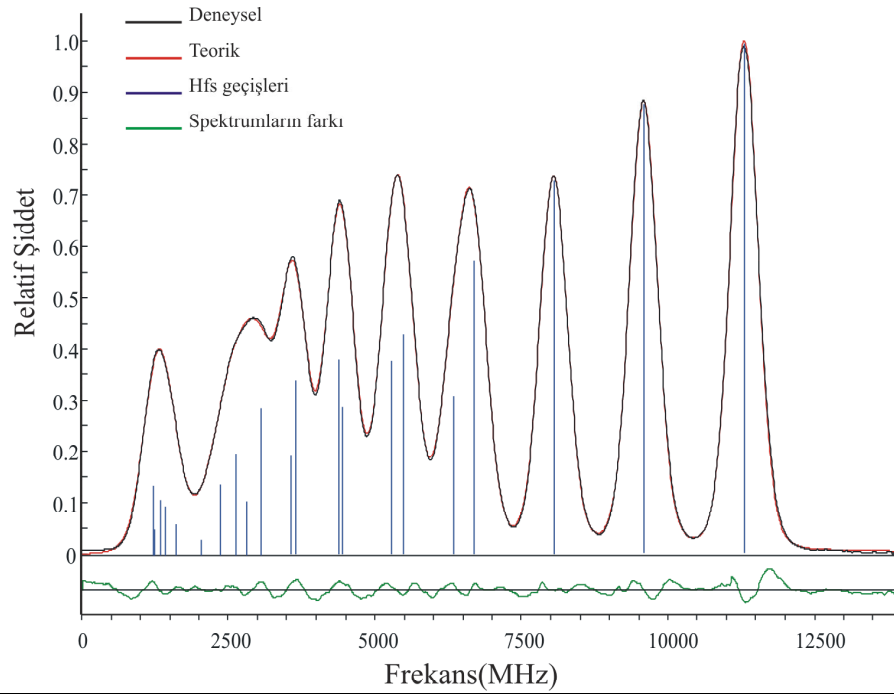
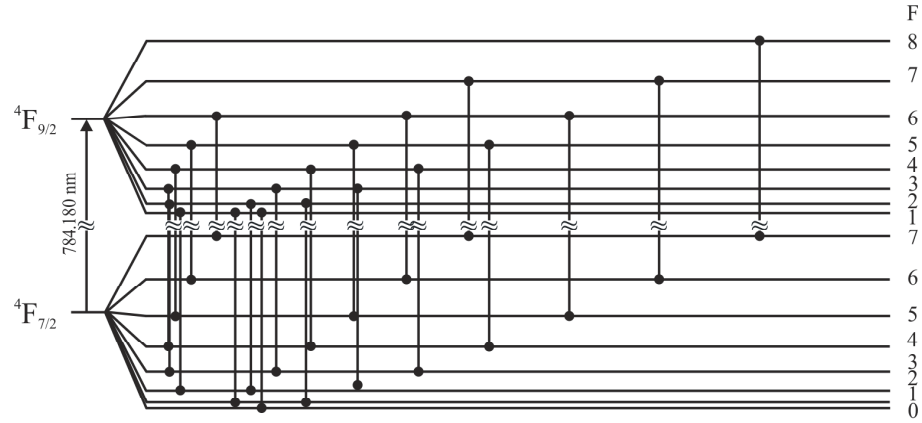
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
3010.002	5d ² 6s	⁴ F _{5/2}	300.56*	10.87*
16280.26	6s ² 6p	² P ^o _{3/2} ?	539.3(8)	50(7)

Şekil 4.13: La I elementinin, $\lambda=753.359$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu. ?: Nist tablolarında kesin olarak bilinmeyen terim.



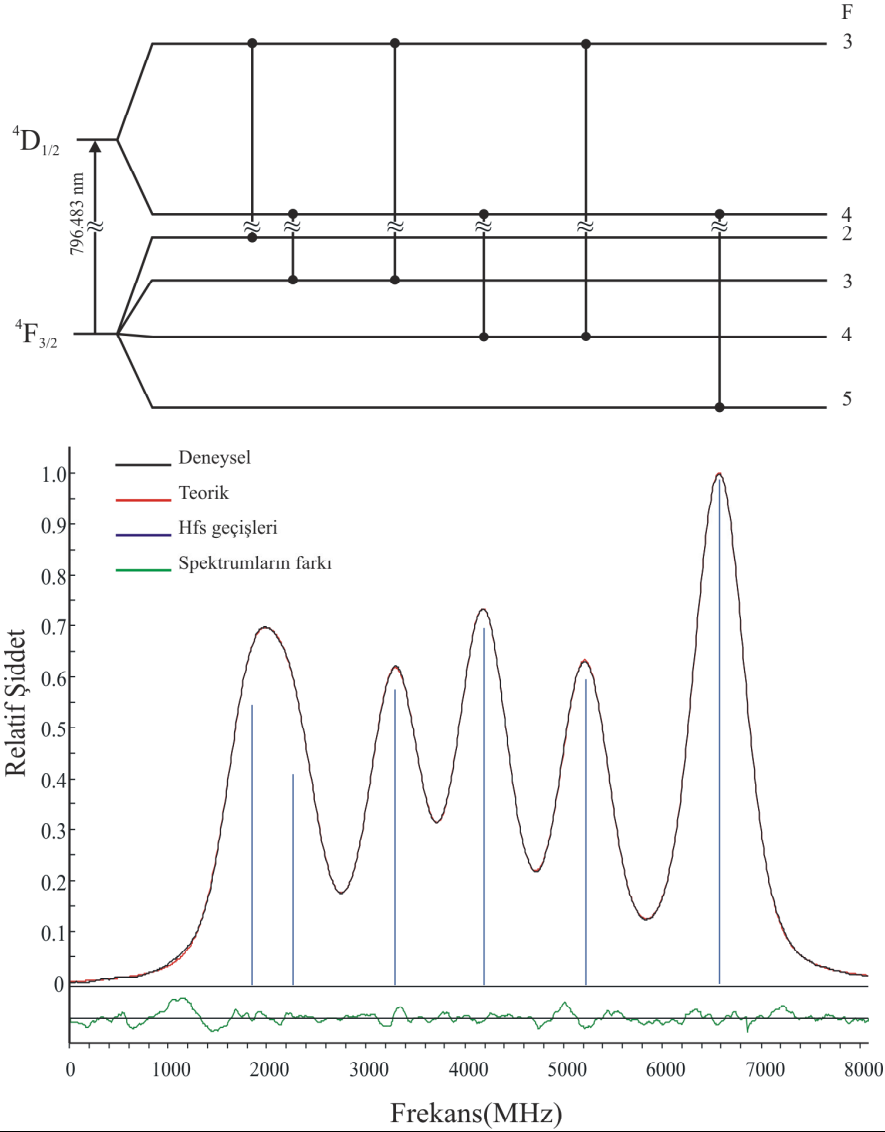
Enerji/ cm^{-1}	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
0.000	$5d6s^2$	$2D_{3/2}$	141.19*	44.78*
13260.38	$5d6s6p$	$4F^o_{3/2}$	-351.3(3)	75(5)

Şekil 4.14: La I elementinin, $\lambda=753.923$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. Δ : Elementin farklı bir spektral geçişi olarak kabul edildi. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



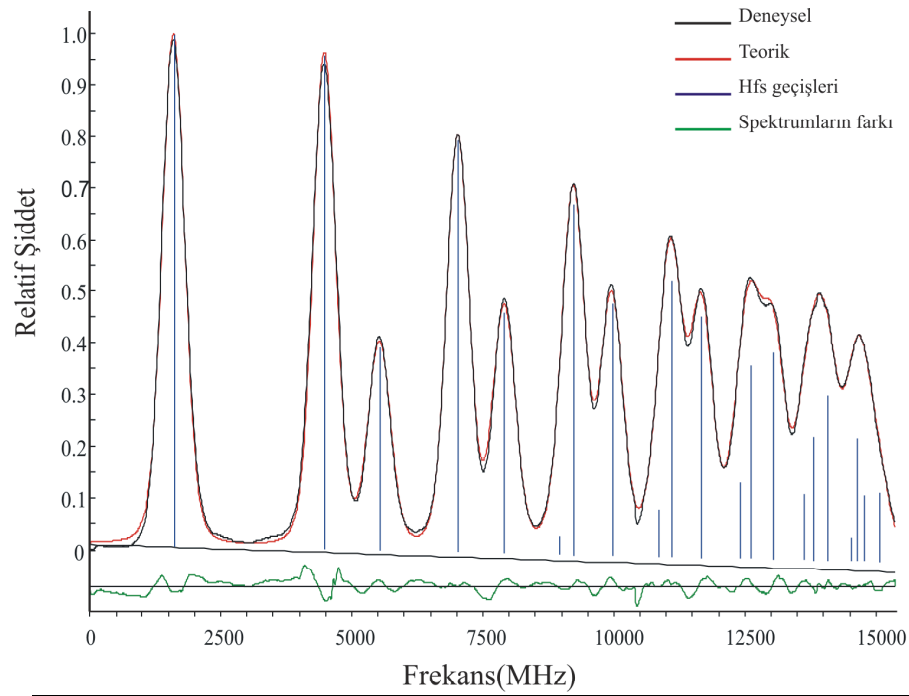
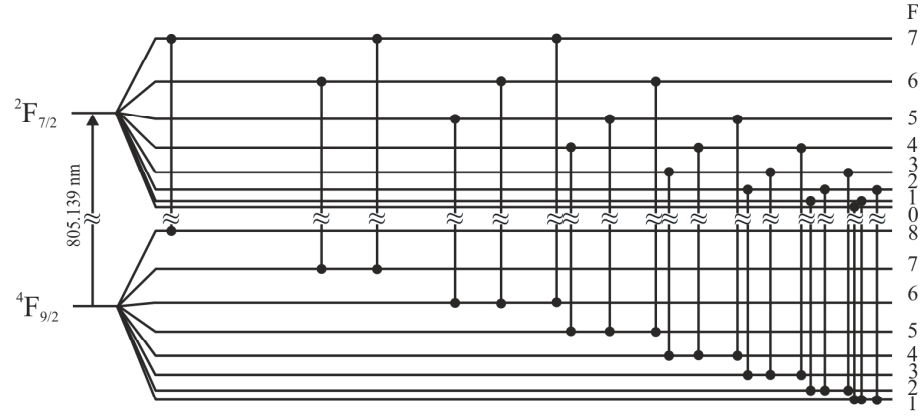
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
3494.526	5d ² 6s	⁴ F _{7/2}	462.87*	17.93*
16243.17	5d6s6p	⁴ F _{9/2}	613.3(4)	150(15)

Şekil 4.15: La I elementinin, $\lambda=784.180$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



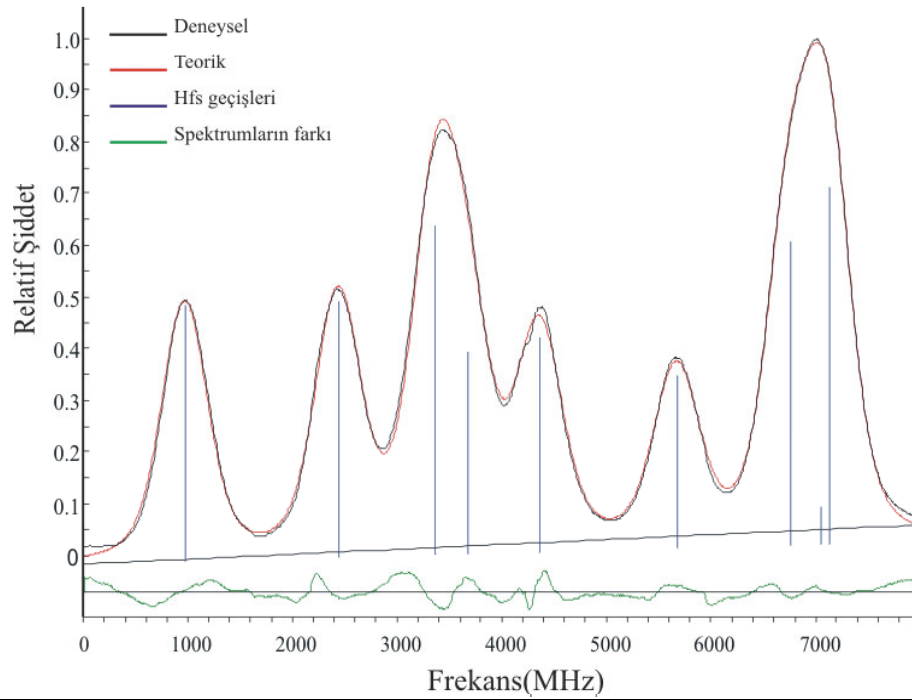
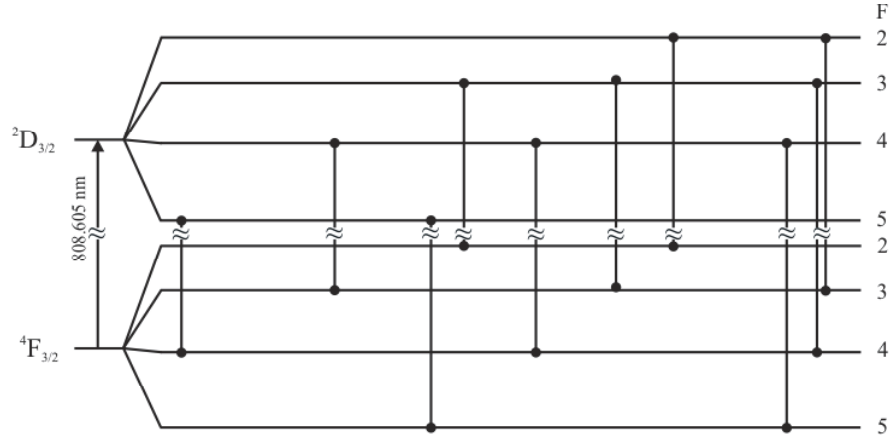
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
2668.188	5d ² 6s	⁴ F _{3/2}	-480.30*	15.08*
15219.89	5d6s6p	⁴ D ^o _{1/2} ?	-257.8(2)	0

Şekil 4.16: La I elementinin, $\lambda=796.483$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu. ?: Nist tablolarında kesin olarak bilinmeyen terim.



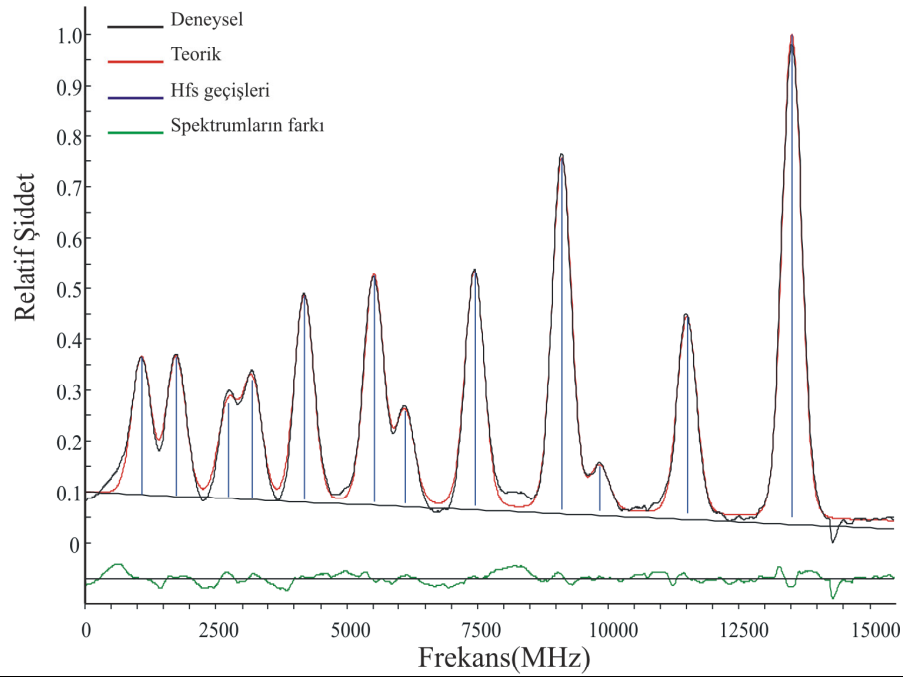
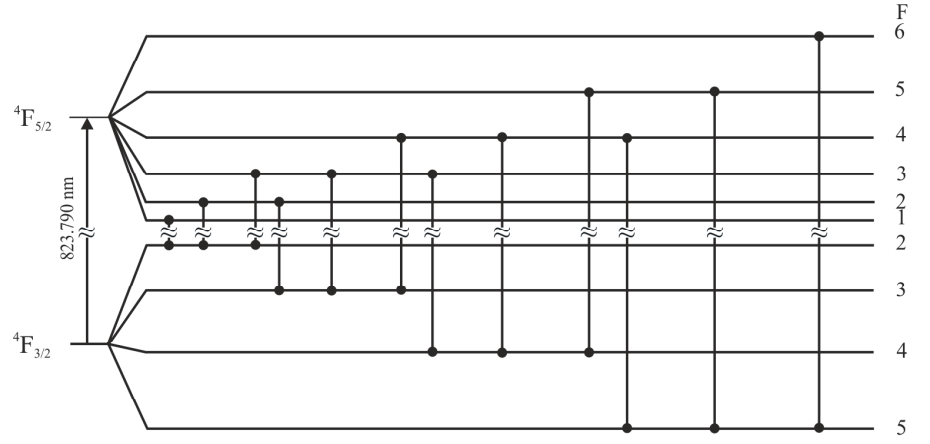
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
4121.572	5d ² 6s	⁴ F _{9/2}	489.53*	32.18*
16538.39	4f6s ²	² F _{7/2} ^o	146.9(2)	40(5)

Şekil 4.17: La I elementinin, $\lambda=805.139$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



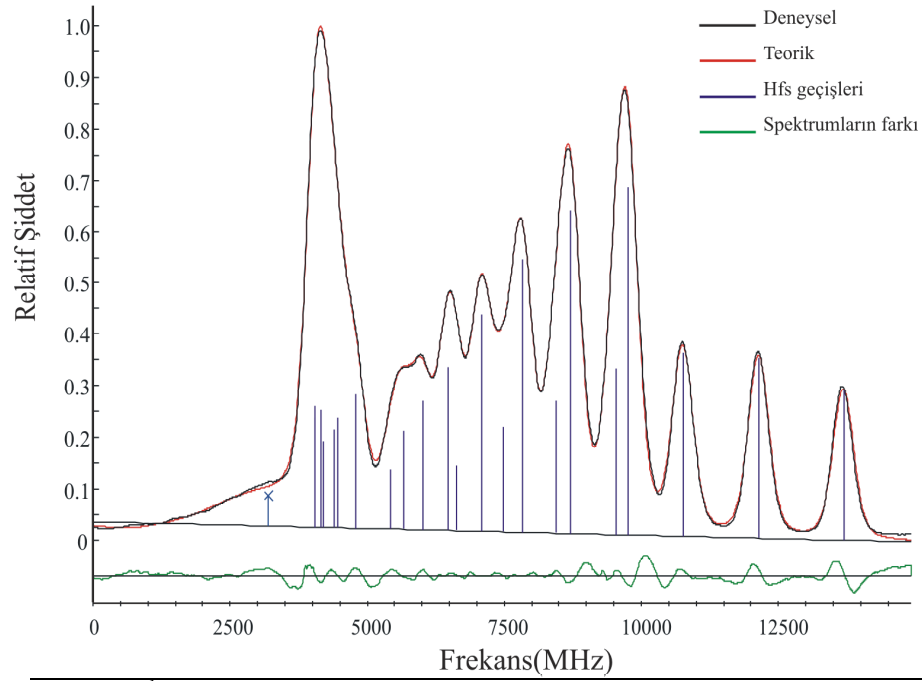
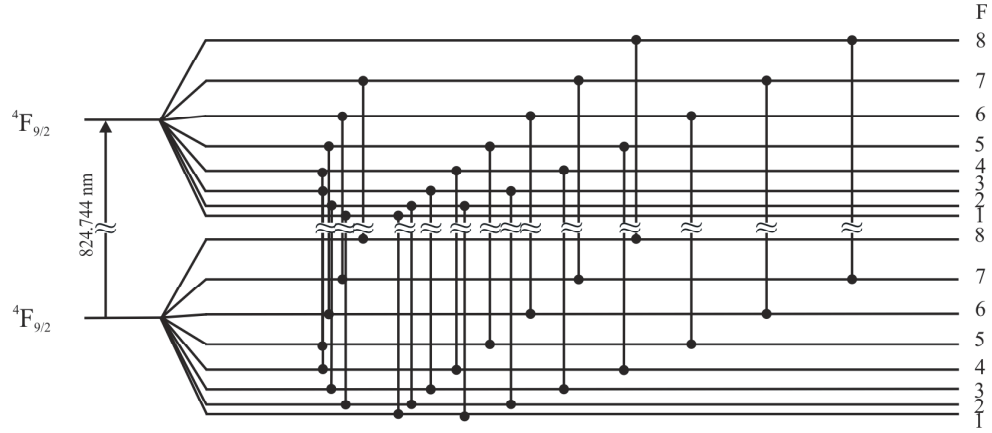
Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
2668.188	5d ² 6s	⁴ F _{3/2}	-480.30*	15.08*
15031.64	5d6s6p	² D ^o _{3/2} ?	-674.2(4)	-22(5)

Şekil 4.18: La I elementinin, $\lambda=808.605$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B . *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
2668.188	5d ² 6s	⁴ F _{3/2}	-480.31*	15.08*
14804.08	5d6s6p	⁴ F _{5/2} ^o	333(1)	20(5)

Şekil 4.19: La I elementinin, $\lambda=823.790$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B . *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.



Enerji/cm ⁻¹	Konfigürasyon	Terim	A/MHz	B/MHz
4121.572	5d ² 6s	⁴ F _{9/2}	489.53*	32.18*
16243.17	5d6s6p	⁴ F _{9/2} ^o	614.2(2)	164(10)

Şekil 4.20: La I elementinin, $\lambda=824.744$ nm dalgaboyundaki geçişinin aşırı ince yapı spektrumu; bu geçişin alt ve üst enerji seviyeleri, konfigürasyonları, terimleri ile bu enerjilere ait elde edilen manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti A ve elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti B. x : Elementin farklı bir spektral geçişi olarak kabul edildi. *: Fit işlemi boyunca sabit tutuldu.

4.3. TEORİK BULGULAR

4.3.1. İnce Yapı Analizi

La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait ince yapı analizi çok konfigürasyonlu fit metodu ile Cowan programı [8] kullanılarak gerçekleştirildi. Enerji seviyelerine ait dalga fonksiyonları SL kuplajı yapılarak elde edildi. Deneysel enerji değerleri kullanılarak belirtilen konfigürasyonlara ait teorik enerji değerleri, teorik g değerleri ve ince yapı parametreleri fit işlemi ile hesaplandı. $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarının enerji aralıkları ve sahip oldukları enerji seviyelerinin sayısı Tablo 4.5’de verildi. La I elementinin $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait Cowan programının hesapladığı 111 teorik enerji değeri mevcuttur. Bunlardan 97 tanesinin deneysel enerji değeri saptanmış olup Nist [28] tablolarında verilmiştir. Bu çalışmada 97 deneysel enerji seviyesinin 94’ü kullanılarak fit işlemi gerçekleştirildi. Bunun sebebi geri kalan üç seviyenin fit işleminde yüksek hatalara sebep olmasıdır.

Tablo 4.5: La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait Nist [28]’te verilen deneysel enerji aralıkları ve J değerlerine göre sahip oldukları enerji seviyelerinin sayısı.

Konfigürasyon	Enerji Aralığı(cm^{-1})	Enerji Seviyelerinin Sayısı					
		J=1/2	J=3/2	J=5/2	J=7/2	J=9/2	J=11/2
$5d6s6p$	13260.38 - 28506.41	5	5	6	4	1	
$4f6s^2$	15196.83 - 16538.39			1	1		
$6s^26p$	16280.26		1				
$5d^26p$	16856.80 - 27748.97	5	9	11	8	5	2
$4f5d6s$	23466.84 - 34245.05	4	7	6	6	6	4

Bölüm (3.3.3)’de anlatıldığı şekilde deneysel enerji değerleri girilerek Cowan programı ile atomik Lantan’ın deneysel enerji seviyeleri teorik enerji seviyeleriyle fit edildi. Enerji seviyeleri programa tanıtılırken bu seviyelerin Nist [28]’te verildiği şekilde doğru terim ve konfigürasyonda kalmasına dikkat edildi. Konfigürasyonların sahip olduğu ince yapı parametreleri Tablo 4.6’da verildi. İnce yapı parametreleri program tarafından oluşturuldu ve başlangıç değerleri hesaplandı. Daha sonra adım adım enerji değerleri

girilerek, enerji seviyelerinin Nist tablosunda verilen g değerlerine ve terimlerine uygun olmasına dikkat edilerek gerekli değişiklikler yapıldı. 94 deneysel enerji değerinin tamamının programa girilmesi ile fit işlemi tamamlandı.

Tablo 4.6: La I elementinin tek pariteli 5d6s6p, 4f6s², 6s²6p, 5d²6p ve 4f5d6s konfigürasyonlarına ait ince yapı parametreleri

5d6s6p	4f6s ²	6s ² 6p	5d ² 6p	4f5d6s
E _{AV}	E _{AV}	E _{AV}	E _{AV}	E _{AV}
ζ_{5d}	ζ_{4f}	ζ_{6p}	F ² (5d, 5d)	ζ_{4f}
ζ_{6p}			F ⁴ (5d, 5d)	ζ_{5d}
F ² (5d, 6p)			α	F ² (4f, 5d)
G ² (5d, 6s)			T(d ²)	F ⁴ (4f, 5d)
G ¹ (5d, 6p)			ζ_{5d}	G ¹ (4f, 5d)
G ³ (5d, 6p)			ζ_{6p}	G ³ (4f, 5d)
G ¹ (6s, 6p)			F ² (5d, 6p)	G ⁵ (4f, 5d)
			G ¹ (5d, 6p)	G ³ (4f, 6s)
			G ³ (5d, 6p)	G ² (5d, 6s)

İnce yapı parametreleri serbest bırakılabilir, belli bir değerde sabit tutulabilir yada kuplaj yapılabilir. Parametreler kuplaj yapılırken aşağıda belirtilen kurallar göz önünde tutulur:

ζ spin-yörünge etkileşme parametreleri aynı konfigürasyon içinde, farklı alt indisli ya da farklı konfigürasyonlarda aynı alt indisli ζ 'lar arasında yapılabilir. F^k radyal direkt Coulomb etkileşme parametreleri ile G^k radyal indirekt Coulomb etkileşme parametreleri parantez içleri ya da k üst indisi aynı olacak şekilde diğer F^k 'larla kuplaj yapılabilir. R^k konfigürasyonlar arası etkileşme parametreleri ortak konfigürasyonlar dikkate alınarak kuplaj yapılır. Tablo 4.7'de fit işlemi sonunda hesaplanan 5d6s6p, 4f6s², 6s²6p, 5d²6p, 4f5d6s konfigürasyonlarına ait ince yapı parametre değerleri ve yapılan kuplajlar her parametrenin sağ üst köşesinde ⁽¹⁾, ⁽²⁾, ⁽³⁾, ⁽⁴⁾, ⁽⁵⁾, ⁽⁶⁾, ile verildi.

İnce yapı parametreleri hesaplanırken ikinci derece Coulomb etkileşme parametreleri de göz önünde alındı. Bu parametrelerden α ve $T(d^2)$ değerleri de hesaplandı. İnce yapı hesaplamalarında fit metodu ile 137cm^{-1} lik ortalama sapmaya ulaşıldı. Başlangıçta parametre sayısı 51 iken ince yapı parametrelerinde yapılan kuplajla birlikte serbest parametre sayısı 35'e indirgenmiştir. Kuplajla birlikte parametreler arası oran sabit tutulmuş ve böylece parametre sayısı azalmış oldu. Hesaplanan ince yapı parametrelerinin değerleri hataları ile birlikte Tablo 4.7'de verildi. Konfigürasyonlar arası direkt ve indirekt etkileşme parametreleri R^1 ve R^2 'ler ve bu parametrelerin hesaplanan değerleri ile kuplaj durumları her parametrenin sağ üst köşesinde ⁽⁷⁾, ⁽⁸⁾ indisleri ile Tablo 4.8'de belirtildi.

Tablo 4.7: La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait hesaplanan ince yapı parametreleri, kuplaj durumları ⁽¹⁾, ⁽²⁾, ⁽³⁾, ⁽⁴⁾, ⁽⁵⁾, ⁽⁶⁾.

Konfigürasyon	İnce Yapı Parametreleri	Hesaplanan Değer
5d6s6p		
	E_{AV}	19950(140)
	ζ_{5d}	650(50) ⁽¹⁾
	ζ_{6p}	800(60) ⁽¹⁾
	$F^2(5d, 6p)$	12700(870)
	$G^2(5d, 6s)$	9400(1000)
	$G^1(5d, 6p)$	7050(550)
	$G^3(5d, 6p)$	5000(1250)
	$G^1(6s, 6p)$	12850(650)
4f6s²		
	E_{AV}	16150(160)
	ζ_{4f}	385(90)
6s²6p		
	E_{AV}	18960(830)
	ζ_{6p}	930(320)

Tablo 4.7'nin devamı.

Konfigürasyon	İnce Yapı Parametreleri	Hesaplanan Değer
5d²6p		
	E_{AV}	24550(150)
	$F^2(5d, 5d)$	20900(1420) ⁽²⁾
	$F^4(5d, 5d)$	13480(920) ⁽²⁾
	α	70(30)
	$T(d^2)$	10(5)
	ζ_{5d}	470(40) ⁽³⁾
	ζ_{6p}	450(40) ⁽³⁾
	$F^2(5d, 6p)$	7490(660)
	$G^1(5d, 6p)$	4980(270)
	$G^3(5d, 6p)$	1860(620)
4f5d6s		
	E_{AV}	27530(110)
	ζ_{4f}	420(40) ⁽⁴⁾
	ζ_{5d}	300(30) ⁽⁴⁾
	$F^2(4f, 5d)$	11340(600) ⁽⁵⁾
	$F^4(4f, 5d)$	5720(300) ⁽⁵⁾
	$G^1(4f, 5d)$	8940(320)
	$G^3(4f, 5d)$	6640(720) ⁽⁶⁾
	$G^5(4f, 5d)$	2090(1050)
	$G^3(4f, 6s)$	1170(130) ⁽⁶⁾
	$G^2(5d, 6s)$	4240(850)

⁽¹⁾: 5d6s6p konfigürasyonunun ζ spin-yörünge etkileşme parametrelerinin kuplajı.

⁽²⁾: 5d²6p konfigürasyonunun F^k radyal direkt Coulomb etkileşme parametrelerinin kuplajı.

⁽³⁾: 5d²6p konfigürasyonunun ζ spin-yörünge etkileşme parametrelerinin kuplajı.

⁽⁴⁾: 4f5d6s konfigürasyonunun ζ spin-yörünge etkileşme parametrelerinin kuplajı.

⁽⁵⁾: 4f5d6s konfigürasyonunun F^k radyal direkt Coulomb etkileşme parametrelerinin kuplajı.

⁽⁶⁾: 5d²6p konfigürasyonunun G^3 radyal indirekt Coulomb etkileşme parametrelerinin kuplajı.

Tablo 4.8: La I elementinin tek pariteli 5d6s6p, 4f6s², 6s²6p, 5d²6p ve 4f5d6s konfigürasyonlarına ait hesaplanan konfigürasyonlar arası etkileşme parametreleri, bu parametrelerin kuplaj durumları ⁽⁷⁾, ⁽⁸⁾.

Konfigürasyonlar Arası Etkileşme Parametreleri	Hesaplanan Değer
$R^1(5d6s6p-4f6s^2)$	-2290(230) ⁽⁷⁾
$R^2(5d6s6p-4f6s^2)$	-890(90) ⁽⁷⁾
$R^1(5d6s6p-6s^26p)$	-8410(830) ⁽⁷⁾
$R^2(5d6s6p-6s^26p)$	-8410(830) ⁽⁷⁾
$R^1(5d6s6p-5d^26p)$	-13060(520)
$R^1(5d6s6p-5d^26p)$	-6740(670)
$R^2(5d6s6p-5d^26p)$	-7060(370)
$R^1(5d6s6p-4f5d6s)$	4860(650) ⁽⁸⁾
$R^1(5d6s6p-4f5d6s)$	760(100) ⁽⁸⁾
$R^2(5d6s6p-4f5d6s)$	440(60) ⁽⁸⁾
$R^2(5d6s6p-4f5d6s)$	2200(300) ⁽⁸⁾
$R^1(4f6s^2-4f5d6s)$	-1270(130) ⁽⁷⁾
$R^2(4f6s^2-4f5d6s)$	-300(30) ⁽⁷⁾
$R^1(6s^26p-5d^26p)$	5230(520) ⁽⁷⁾
$R^1(6s^26p-4f5d6s)$	-1230(120) ⁽⁷⁾
$R^2(6s^26p-4f5d6s)$	-1220(120) ⁽⁷⁾
$R^1(5d^26p-4f5d6s)$	-5800(440)
$R^2(5d^26p-4f5d6s)$	-3330(390)
Serbest parametre sayısı	35
Fit edilen seviye sayısı	97
Standart Sapma	137

⁽⁷⁾: 5d6s6p-4f6s², 5d6s6p-6s²6p, 4f6s²-4f5d6s, 6s²6p-5d²6p, 6s²6p-4f5d6s konfigürasyonlarının konfigürasyonlar arası etkileşme parametrelerinin kuplajı.

⁽⁸⁾: 5d6s6p-4f5d6s konfigürasyonlarının konfigürasyonlar arası etkileşme parametrelerinin kuplajı.

İncelenen konfigürasyonların deneysel ve teorik enerjileri ile deneysel g ve hesaplanan g değerleri aralarındaki farklar da belirtilerek Tablo 4.9'da verildi. Ayrıca bu tabloda seviyelerin öz vektör bileşenleri ve konfigürasyonlar üzerinde yüzde olarak dağılımları belirtildi.

Tablo 4.9: La I elementinin tek pariteli 5d6s6p, 4f6s², 6s²6p, 5d²6p ve 4f5d6s konfigürasyonlarına ait deneysel enerji ve g değerleri, teorik enerji ve g değerleri, öz vektör bileşenleri ve konfigürasyonlara göre yüzde olarak dağılımları. Enerji değerleri (cm⁻¹) biriminde verildi.

J	E _{deneysel}	E _{teorik}	ΔE	g _{deneysel}	g _{teorik}	Δg	Bileşenler		Konfigürasyonlar üzerinde % olarak dağılımları					
							Konfig.	Terim %	5d6s6p	4f6s ²	6s ² 6p	5d ² 6p	4f5d6s	
1/2	14095.69	14240	-145	0.357	0.138	0.219	5d6s6p	³ D ⁴ D 76.72	82.71	0.00	12.42	3.85	1.03	
1/2	15219.89	15224	-4	0.313	0.546	-0.233	6s ² 6p	² P 63.14	32.45	0.00	63.14	4.09	0.32	
1/2	17567.49	17378	190	2.630	2.636	-0.006	5d6s6p	³ D ⁴ P 94.40	94.90	0.00	0.87	2.05	2.18	
1/2	20197.34	20190	7	0.630	0.645	-0.015	5d ² 6p	¹ D ² P 45.26	46.95	0.00	0.44	51.24	1.37	
1/2	22246.64	22178	68	0.040	0.047	-0.007	5d ² 6p	³ F ⁴ D 86.96	7.70	0.00	0.19	91.54	0.57	
1/2	23260.92	23015	246	1.891	1.942	-0.051	5d ² 6p	³ P ² S 89.68	0.61	0.00	0.22	98.56	0.62	
1/2	23528.45	23625	-97	0.153	0.066	0.087	5d ² 6p	³ P ⁴ D 82.94	0.12	0.00	0.13	89.36	10.39	
1/2	25616.95	25222	395	2.274	1.749	0.525	5d ² 6p	³ P ⁴ P 40.63	22.12	0.00	8.15	54.37	15.36	
1/2	25453.95	25377	77	0.984	1.554	-0.570	5d ² 6p	³ P ⁴ P 40.83	24.99	0.00	8.34	53.82	12.85	
1/2	27748.97	27572	177	0.682	0.673	0.009	5d ² 6p	³ P ² P 32.65	16.55	0.00	0.46	66.64	16.36	
1/2	28893.51	28930	-36	0.018	0.016	0.002	4f5d6s	³ D ⁴ D 84.55	2.24	0.00	0.13	11.53	86.09	
1/2	29564.70	29658	-93	0.780	0.817	-0.037	4f5d6s	³ P ² P 54.27	10.17	0.00	1.55	23.70	64.57	
1/2	29985.46	29953	33	2.534	2.486	0.048	4f5d6s	³ P ⁴ P 72.32	4.51	0.00	0.03	14.52	80.94	
1/2	32290.16	32289	1	0.670	0.684	-0.014	4f5d6s	¹ P ² P 47.71	11.13	0.00	2.33	35.99	50.55	
1/2		36197			0.666		5d6s6p	³ D ² P 26.33	39.75	0.00	1.44	36.34	22.47	
1/2		36549			0.669		5d ² 6p	¹ S ² P 50.88	3.10	0.00	0.14	62.42	34.34	

Tablo 4.9'un devamı.

J	E _{deneysel}	E _{teorik}	ΔE	g _{deneysel}	g _{teorik}	Δg	Bileşenler			Konfigürasyonlar üzerinde % olarak dağılımları				
							Konfig.	Terim	%	5d6s6p	4f6s ²	6s ² 6p	5d ² 6p	4f5d6s
3/2	13260.38	13369	-109	0.520	0.534	-0.014	5d6s6p	³ D ⁴ F	65.57	93.67	0.00	0.00	5.29	1.03
3/2	14708.92	14487	222	1.010	0.958	0.052	5d6s6p	³ D ⁴ D	50.51	92.05	0.00	0.81	6.01	1.13
3/2	15031.64	15114	-82	0.920	0.933	-0.013	5d6s6p	³ D ⁴ D	35.28	86.84	0.00	2.66	9.42	1.07
3/2	16280.26	16238	43	1.326	1.344	-0.018	6s ² 6p	² P	64.33	31.65	0.00	64.33	3.60	0.42
3/2	17797.29	17694	104	1.690	1.689	0.001	5d6s6p	³ D ⁴ P	86.71	88.69	0.00	6.64	2.57	2.10
3/2	18172.35	18226	-54	0.799	0.809	-0.010	5d ² 6p	³ F ² D	59.38	31.69	0.00	0.31	67.11	0.89
3/2	20082.98	19921	162	0.724	0.418	0.306	5d ² 6p	³ F ⁴ F	87.90	2.01	0.00	0.00	89.62	8.37
3/2	20018.99	20135	-116	1.010	1.324	-0.314	5d6s6p	¹ D ² P	47.34	52.54	0.00	0.32	44.94	2.20
3/2	22439.36	22386	54	1.192	1.200	-0.008	5d ² 6p	³ F ⁴ D	90.86	5.89	0.00	0.01	93.39	0.71
3/2	23704.81	23847	-142	1.133	1.180	-0.047	5d ² 6p	³ P ⁴ D	82.66	0.55	0.00	0.00	86.23	13.21
3/2	24173.83	24255	-81	0.717	0.603	0.114	4f5d6s	³ F ⁴ F	48.26	4.95	0.00	0.05	25.34	69.65
3/2	24762.60	24594	169	0.854	0.744	0.110	5d ² 6p	³ P ² D	45.94	21.77	0.00	0.31	56.08	21.83
3/2	24639.26	25088	-449	1.781	0.970	0.811	4f5d6s	¹ D ² D	20.40	10.37	0.00	3.96	39.28	46.39
3/2	24910.38	25334	-423	0.724	1.661	-0.937	5d ² 6p	³ P ⁴ P	47.33	10.04	0.00	3.61	71.09	15.26
3/2	25643.00	25659	-17	1.590	1.619	-0.029	5d ² 6p	³ P ⁴ S	38.21	6.05	0.00	1.10	72.93	19.92
3/2	25950.32	26005	-55	1.433	1.477	-0.044	5d ² 6p	³ P ⁴ S	42.69	15.67	0.00	7.05	63.36	13.92

Tablo 4.9'un devamı.

J	E _{deneysel}	E _{teorik}	ΔE	g _{deneysel}	g _{teorik}	Δg	Bileşenler			Konfigürasyonlar üzerinde % olarak dağılımları				
							Konfig.	Terim	%	5d6s6p	4f6s ²	6s ² 6p	5d ² 6p	4f5d6s
3/2	27225.26	27330	-105	1.310	1.338	-0.028	5d ² 6p	¹ D ² P	34.06	19.48	0.00	0.63	73.37	6.51
3/2	27968.54	27753	215	0.836	0.819	0.017	4f5d6s	³ D ² D	49.04	24.08	0.00	0.18	23.96	51.77
3/2	28971.84	29111	-139	0.884	1.120	-0.236	4f5d6s	³ D ⁴ D	69.03	3.15	0.00	0.01	18.52	78.32
3/2		29594			0.951		4f5d6s	¹ D ² D	27.33	10.01	0.00	0.21	33.24	56.54
3/2		30014			1.532		4f5d6s	³ P ⁴ P	46.49	8.57	0.00	2.04	16.91	72.48
3/2		30487			1.441		4f5d6s	³ P ² P	41.28	10.16	0.00	2.13	16.10	71.61
3/2		32590			1.339		4f5d6s	¹ P ² P	53.35	9.77	0.00	1.57	28.77	59.89
3/2		34345			0.838		5d ² 6p	³ D ² D	31.30	16.58	0.00	0.12	49.82	33.48
3/2		36333			1.305		5d ² 6p	¹ S ² P	43.66	6.80	0.00	1.00	67.31	24.90
3/2		37546			1.331		5d6s6p	³ D ² P	28.61	36.95	0.00	0.94	35.74	26.38
5/2	13631.04	13699	-68	1.096	1.136	-0.040	5d6s6p	³ D ⁴ F	33.47	88.68	0.22	0.00	10.03	1.06
5/2	14804.08	14654	150	1.090	1.120	-0.030	5d6s6p	³ D ⁴ F	60.79	93.58	0.00	0.00	5.34	1.08
5/2	15196.83	15199	-3	0.906	0.860	0.046	4f6s ²	² F	94.54	3.32	94.54	0.00	2.02	0.11
5/2	15503.64	15525	-21	1.360	1.337	0.023	5d6s6p	³ D ⁴ D	78.44	92.41	0.32	0.00	6.04	1.23
5/2	16856.80	16756	101	0.810	0.836	-0.026	5d ² 6p	¹ D ² F	27.54	32.71	3.48	0.00	62.37	1.44
5/2	18156.97	18221	-64	1.175	1.287	-0.112	5d6s6p	³ D ⁴ P	43.96	48.56	0.06	0.00	48.31	3.08

Tablo 4.9'un devamı.

J	E _{deneysel}	E _{teorik}	ΔE	g _{deneysel}	g _{teorik}	Δg	Bileşenler			Konfigürasyonlar üzerinde yüzde olarak dağılımları				
							Konfig.	Terim	%	5d6s6p	4f6s ²	6s ² 6p	5d ² 6p	4f5d6s
5/2	17947.13	18327	-380	1.061	0.915	0.146	5d6s6p	³ D ⁴ P	47.19	54.46	0.13	0.00	42.55	2.87
5/2	19379.40	19373	6	1.186	1.196	-0.010	5d ² 6p	³ F ² D	56.93	32.73	0.07	0.00	65.82	1.39
5/2	20338.25	20219	119	1.006	1.008	-0.002	5d ² 6p	³ F ⁴ F	76.45	4.46	0.04	0.00	85.17	10.33
5/2	20972.17	21027	-55	0.890	0.886	0.004	5d ² 6p	³ F ² F	37.12	30.63	0.38	0.00	55.38	13.62
5/2	22804.25	22775	29	1.362	1.364	-0.002	5d ² 6p	³ F ⁴ D	91.86	4.53	0.00	0.00	94.29	1.18
5/2	23874.95	23850	25	0.962	0.902	0.060	5d6s6p	³ D ² F	42.41	42.61	0.37	0.00	26.56	30.46
5/2	24046.10	24198	-152	1.271	1.340	-0.069	5d ² 6p	³ P ⁴ D	73.59	1.55	0.00	0.00	80.46	17.98
5/2	24507.87	24544	-36	1.158	1.123	0.035	4f5d6s	³ F ⁴ F	25.18	11.17	0.06	0.00	34.63	54.14
5/2	24984.29	24985	-1	1.063	1.101	-0.038	4f5d6s	³ F ⁴ F	48.69	10.57	0.00	0.00	35.04	54.39
5/2	25218.27	25228	-10	1.244	1.331	-0.087	5d ² 6p	³ P ⁴ P	30.48	6.74	0.00	0.00	61.98	31.28
5/2	26338.93	26220	119	1.524	1.439	0.085	5d ² 6p	³ P ⁴ P	53.31	5.84	0.00	0.00	71.48	22.68
5/2	27022.62	26900	123	0.580	0.598	-0.018	4f5d6s	³ G ⁴ G	87.45	1.72	0.00	0.00	5.46	92.82
5/2	27393.04	27427	-34	0.888	0.868	0.020	4f5d6s	³ F ² F	38.99	25.74	0.14	0.00	30.19	43.93
5/2	27669.37	27691	-22	0.880	0.878	0.002	5d ² 6p	¹ D ² F	31.03	18.32	0.04	0.00	41.16	40.48
5/2	28506.41	28700	-194	1.200	1.185	0.015	4f5d6s	³ D ² D	36.49	22.88	0.00	0.00	34.76	42.36
5/2	29502.18	29380	122	1.263	1.290	-0.027	4f5d6s	³ D ⁴ D	55.36	3.17	0.00	0.00	20.70	76.14

Tablo 4.9'un devamı.

J	E _{deneysel}	E _{teorik}	ΔE	g _{deneysel}	g _{teorik}	Δg	Bileşenler			Konfigürasyonlar üzerinde yüzde olarak dağılımları				
							Konfig.	Terim	%	5d6s6p	4f6s ²	6s ² 6p	5d ² 6p	4f5d6s
5/2	29775.58	29975	-200	1.253	1.297	-0.044	4f5d6s	¹ D ² D	22.34	6.14	0.00	0.00	29.05	64.81
5/2		30436			0.907		4f5d6s	¹ F ² F	55.96	3.87	0.00	0.00	29.92	66.21
5/2	30896.84	30934	-37	1.424	1.518	-0.094	4f5d6s	³ P ⁴ P	65.85	5.00	0.00	0.00	18.50	76.50
5/2		33135			0.870		5d ² 6p	¹ G ² F	50.98	27.85	0.14	0.00	59.69	12.31
5/2		35012			1.189		5d ² 6p	³ D ² D	34.76	20.76	0.00	0.00	43.10	36.14
7/2	15019.51	15075	-56	1.237	1.236	0.033	5d6s6p	³ D ⁴ F	94.57	96.35	0.09	0.00	2.44	1.12
7/2	16099.29	16074	25	1.370	1.423	-0.033	5d6s6p	³ D ⁴ D	92.46	93.57	0.71	0.00	4.40	1.32
7/2	16538.39	16543	-5	1.179	1.146	0.038	4f6s ²	² F	93.93	3.58	93.93	0.00	2.37	0.13
7/2	17910.17	17783	127	1.086	1.119	-0.004	5d ² 6p	¹ D ² F	31.17	33.43	3.43	0.00	61.06	2.09
7/2	18603.92	18768	-164	1.051	1.013	0.014	5d ² 6p	³ F ⁴ G	78.77	9.09	0.20	0.00	86.73	3.98
7/2	20763.21	20674	89	1.178	1.182	-0.010	5d ² 6p	³ F ⁴ F	61.99	4.31	0.14	0.00	84.51	11.04
7/2	21447.86	21372	76	1.103	1.089	-0.003	5d ² 6p	³ F ⁴ F	27.50	9.40	0.27	0.00	72.67	17.66
7/2	21662.51	21632	31	0.995	1.005	0.116	5d ² 6p	³ F ² G	36.56	19.92	0.39	0.00	65.03	14.67
7/2	23221.10	23285	-64	1.078	1.081	-0.186	5d ² 6p	³ F ⁴ D	58.54	2.24	0.00	0.00	62.20	35.56
7/2	23303.26	23314	-10	1.178	1.062	0.001	4f5d6s	³ H ⁴ H	49.60	2.05	0.01	0.00	37.24	60.69
7/2	24088.54	24164	-76	0.720	0.906	-0.053	4f5d6s	¹ G ² G	43.96	11.83	0.14	0.00	17.34	70.70

Tablo 4.9'un devamı.

J	E _{deneysel}	E _{teorik}	ΔE	g _{deneysel}	g _{teorik}	Δg	Bileşenler			Konfigürasyonlar üzerinde yüzde olarak dağılımları				
							Konfig.	Terim	%	5d6s6p	4f6s ²	6s ² 6p	5d ² 6p	4f5d6s
7/2	24409.68	24454	-44	1.161	1.123	0.038	5d ² 6p	³ D ² F	25.33	25.62	0.30	0.00	38.22	35.87
7/2	25083.36	24874	209	1.381	1.387	-0.006	5d ² 6p	³ P ⁴ D	75.18	5.96	0.05	0.00	80.12	13.87
7/2	25380.27	25394	-14	1.228	1.225	0.003	4f5d6s	³ F ⁴ F	84.63	2.89	0.01	0.00	10.35	86.75
7/2	27132.44	27198	-66	0.940	0.915	0.025	5d ² 6p	¹ G ² G	54.95	1.59	0.02	0.00	58.31	40.08
7/2	27455.31	27406	50	0.976	0.982	-0.006	4f5d6s	³ G ⁴ G	84.07	0.60	0.00	0.00	12.13	87.26
7/2	28039.45	27991	49	1.140	1.143	-0.003	5d ² 6p	¹ D ² F	34.87	35.19	0.04	0.00	37.24	27.52
7/2	28543.08	28554	-11	1.120	1.131	-0.011	4f5d6s	³ F ² F	52.01	1.83	0.07	0.00	34.89	63.21
7/2	29894.91	29642	253	1.352	1.253	0.099	4f5d6s	³ D ⁴ D	42.34	2.45	0.00	0.00	23.43	74.11
7/2		30371			1.171		4f5d6s	³ D ⁴ D	37.03	1.63	0.00	0.00	23.04	75.34
7/2		31063			1.033		4f5d6s	³ G ² G	33.33	1.64	0.00	0.00	35.68	62.68
7/2		33572			1.145		5d ² 6p	¹ G ² F	40.30	34.83	0.20	0.00	50.61	14.36
9/2	16243.17	16195	48		1.334		5d6s6p	³ D ⁴ F	96.93	96.93	0.00	0.00	1.88	1.18
9/2	19129.31	19290	-161	1.173	1.172	0.001	5d ² 6p	³ F ⁴ G	95.06	0.00	0.00	0.00	95.32	4.68
9/2	21384.00	21421	-37	1.278	1.300	-0.022	5d ² 6p	³ F ⁴ F	76.17	0.96	0.00	.00	90.80	8.24
9/2	22285.77	22253	33	1.130	1.134	-0.004	5d ² 6p	³ F ² G	51.36	0.02	0.00	0.00	64.89	35.09
9/2	23466.84	23695	-228	1.110	1.014	0.096	4f5d6s	³ H ⁴ H	54.66	0.05	0.00	0.00	15.65	84.31

Tablo 4.9'un devamı.

J	E _{deneyssel}	E _{teorik}	ΔE	g _{deneyssel}	g _{teorik}	Δg	Bileşenler			Konfigürasyonlar üzerinde yüzde olarak dağılımları				
							Konfig.	Terim	%	5d6s6p	4f6s ²	6s ² 6p	5d ² 6p	4f5d6s
9/2	24249.00	24250	-1	0.960	1.071	-0.111	4f5d6s	¹ G ² G	44.79	0.13	0.00	0.00	23.90	75.97
9/2	25089.35	25012	77	0.940	0.922	0.018	4f5d6s	³ H ² H	53.70	0.00	0.00	0.00	25.21	74.79
9/2	25997.17	26063	-66	1.319	1.320	-0.001	4f5d6s	³ F ⁴ F	85.25	1.87	0.00	0.00	11.07	87.06
9/2	27054.96	27059	-4	0.910	0.913	-0.003	5d ² 6p	¹ G ² H	58.82	0.00	0.00	0.00	60.13	39.87
9/2	27619.54	27708	-89	1.120	1.117	0.003	5d ² 6p	¹ G ² G	62.95	0.05	0.00	0.00	68.17	31.78
9/2	28089.17	28042	47	1.140	1.171	-0.031	4f5d6s	³ G ⁴ G	93.49	0.00	0.00	0.00	4.68	95.32
9/2		31553			1.109		4f5d6s	³ G ² G	70.95	0.00	0.00	0.00	26.72	73.28
9/2	34239.61	34248	-8	0.900	0.912	-0.012	4f5d6s	¹ H ² H	86.91	0.00	0.00	0.00	11.57	88.43
11/2	20117.38	20120	-3	1.290	1.272	0.018	5d ² 6p	³ F ⁴ G	94.84	0.00	0.00	0.00	95.32	4.69
11/2	24841.42	24548	293	1.150	1.127	0.023	5d ² 6p	³ H ⁴ H	84.33	0.00	0.00	0.00	3.69	96.31
11/2	25874.52	25836	38	1.082	1.098	-0.016	5d ² 6p	¹ G ² H	42.09	0.00	0.00	0.00	42.42	57.57
11/2	28179.07	27968	211	1.098	1.092	0.006	5d ² 6p	³ H ² H	53.31	0.00	0.00	0.00	41.70	58.30
11/2	28743.24	28733	10	1.270	1.272	-0.002	5d ² 6p	³ G ⁴ G	94.84	0.00	0.00	0.00	4.66	95.34
11/2	34245.05	34311	-66	1.060	1.092	-0.032	5d ² 6p	¹ H ² H	86.93	0.00	0.00	0.00	12.21	87.79
13/2		25620			1.231		5d ² 6p	³ H ⁴ H	100.0	0.00	0.00	0.00	0.00	100.00

Nist tablolarından alınan deneysel enerji deęerleri 97'dir. Teorik olarak hesaplanan enerji seviyeleri ve g deęerlerinin sayısı ise 111'dir. Deneysel olarak bilinen enerji seviyelerinin fit edilmesi dıřında, deneysel olarak bilinmeyen 14 enerji seviyesinin de teorik enerji ve teorik g deęerleri hesaplandı.

Nist tablolarından alınan, incelenen konfigürasyonlar ile belirtilen deneysel enerji deęerlerinin 34'üne ait konfigürasyon ya da spektral terimi tam olarak belli deęildir. Deneysel enerji deęerlerinin konfigürasyon yüzdeleri birbirine çok yakın olan seviyeler için Nist tablolarında kabul edilen sınıflandırmalar göz önünde tutulmuřtur. Bu nedenle programın giriş dosyası oluřturulurken bu seviyelerdeki belirsizlik, deneysel ve teorik deęerler fit edilirken deneysel g deęerlerinin de dikkate alınmasına yol açtı. ΔE ve Δg farkları incelendięinde, deneysel enerji deęerlerinde ve spektral terimlerinde belirsizlik olan seviyelerde, bu farkların dięerlerinden daha fazla olduęu görülür.

Deneysel olarak belirlenmiř 4f5d6s konfigürasyonlu üç enerji seviyesi fit iřleminde kullanılmadı. Bu seviyelerin terim ve konfigürasyonlarındaki belirsizlik nedeniyle ařaęıda verilen teorik enerji deęerleri fit iřlemi boyunca kapalı tutuldu.

$$J = 3/2 \quad \text{için} \quad 29.694\text{cm}^{-1}, \quad 29.980\text{cm}^{-1}, \quad 30.674\text{cm}^{-1}$$

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmanın teorik kısmında La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait ince yapı analizi Cowan programı [8] ile SL kuplajı yapılarak gerçekleştirildi. La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarının enerji seviyelerinin aralıkları iç içe geçtiğinden bu enerji seviyelerinin fit edilebilmesi için çok konfigürasyonlu fit metodu kullanıldı. Cowan programı ile 111 adet teorik enerji değeri hesaplandı. Bunlardan 97 tanesinin deneysel enerji değeri Nist [28] tablolarından bilinmektedir ve bu seviyelerden 94'ü kullanılarak fit işlemi gerçekleştirildi. La I elementinin tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarına ait 33 ince yapı parametresi hesaplandı. Bu parametreler kullanılarak teorik enerji değerleri ve teorik g değerleri elde edildi. İnce yapı hesaplamalarında 137cm^{-1} lik ortalama sapmaya ulaşıldı. Parametre sayısı başlangıçta 51 olmakla birlikte kuplaj yapılarak bu parametrelerin sayısı 35'e indirildi.

İnce yapı hesabı sonunda birçok konfigürasyon için deneysel ve teorik enerji değerleri arasında iyi uyum olduğu gözlemlendi. Ancak bazı durumlarda teorik ve deneysel enerji değerleri arasındaki farkın çok olduğu ama deneysel g değerleri ile teorik g değerleri arasında iyi uyum olduğu gözlemlendi. Enerji düzeylerinden birçoğunun güçlü konfigürasyon karışımı gösterdiği belirlendi. Nist [28] tablolarından alınan deneysel enerji değerlerinin hangi konfigürasyon ve terime sahip olduğu tam olarak belirlenmediğinden deneysel enerji değerleri de konfigürasyon karışımı göstermektedir. Bu belirsizlik deneysel ve teorik enerji değerleri fit edilirken ΔE ve Δg farklarının da yüksek olmasına neden olmuştur. Bu nedenle La I elementinin incelediğimiz tek pariteli $5d6s6p$, $4f6s^2$, $6s^26p$, $5d^26p$ ve $4f5d6s$ konfigürasyonlarının sahip olduğu Nist [28] tablolarında yer almayan enerji değerlerinin deneysel olarak tanımlanması gereklidir.

Bu çalışmanın deneysel kısmında La I elementinin tek pariteli 16 enerji seviyesine ait A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri belirlendi. Altı A

manyetik dipol ve 11 B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti ilk defa bu çalışmada saptandı. Diğer seviyelerin A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri literatürde yer alan seviyelerle karşılaştırılmalı olarak Tablo 4.4'te verildi. Birçok A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti değerinin diğer çalışmalarla bulunan değerlerle hata sınırları içinde kaldığı görüldü.

İncelenen seviyeler literatürdeki değerlerle karşılaştırıldığında bazı farklılıklar göze çarpmaktadır. 13260.38cm^{-1} ($J = 3/2$) seviyesine ait ölçülen A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri Shaw [21] da verilen değerlerle uyumlu iken Pramila [22] da verilen değerler ile büyük bir sapma gösterdi. Bu iki makale de aynı yılda yayınlanmış ve bu farklılık o zaman için göze çarpmamıştır. Shaw [21] A manyetik dipol ve B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitlerini iki kırmızı altı çizgiden belirlemiştir ve bulduğu değer bu çalışmada ölçülen değerler ile uyumludur. Bu çalışmada ölçülen 584.83 nm 'deki spektral geçiş Pramila [22]'da verilen spektrumla karşılaştırıldığında aynı metod kullanılmasına rağmen (Laser Optogalvanik Spektroskopi, tek fark silindir katotun içindeki gaz bu çalışmada Ar, [22]'de Ne'dur) farklı spektrumlarla karşılaşılır. Bilinen tüm enerji seviyeleri için 584.838 nm dalgaboyunda, elektrik dipol geçişi için iki farklı sınıflandırma mevcuttur. Bunlar:

$$9960.904\text{cm}^{-1} (J = 7/2) \rightarrow 27054.96\text{cm}^{-1} (J = 9/2) \text{ ile } \sigma = 17094.06\text{cm}^{-1}$$

yada

$$13260.38\text{cm}^{-1} (J = 3/2) \rightarrow 30354.28\text{cm}^{-1} (J = 5/2) \text{ ile } \sigma = 17093.90\text{cm}^{-1}$$

Bu ölçüm için yapılan fit 17094.06cm^{-1} enerjisindeki ilk verilen sınıflandırmaya uyar. Pramila spektrumu fit ederken diğer sınıflandırmayı kullanmıştır. Sadece 13260.38cm^{-1} alt seviyesinin A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti değil aynı zamanda 30354.28cm^{-1} üst seviyesinin de A manyetik dipol aşırı ince yapı sabiti de Pramila'da [22] yanlış verilmiştir.

21447.86 cm^{-1} ($J = 7/2$) enerjili seviyeye ait aşırı ince yapı sabitleri Caiyan [23] ile uyuşmamaktadır. Ölçülen A manyetik dipol aşırı ince yapı sabitleri benzerlik taşır ama

hata sınırları içinde değildir. B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri ise zıt işaretlidir. Caiyan [23] bu spektral geçişi doppler indirgenmiş intermodüle floresans spektroskopisini kullanarak incelemiştir fakat bu seviyenin içerdiği spektral çizginin dalgaboyu verilmemiştir. Ancak [23]'de ölçülmüş spektral çizgilerin 570 nm ile 585 nm dalgaboyu bölgesinde ölçüldüğü belirtilmiştir. Bu çalışmada yukarıda verilen 21447.86 cm^{-1} ($J = 7/2$) seviyesine ait aşırı ince yapı sabitleri 577.000 nm dalgaboyundaki çizgi ile belirlenmiştir. Bu çizgi tamamen ayrılmış değildir (sadece bir bileşeni tamamen ayrılmıştır). B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabitleri fit süresince hfs bileşenlerinin şiddetlerinin kuplajına çok duyarlıdır. Çeşitli fit versiyonları için de B elektrik kuadropol aşırı ince yapı sabiti pozitif değer alır. Bu farka bir diğer sebep şu olabilir: [23]'de kullanılan metod yüksek çözünürlüklü olmasına rağmen FPI'nın serbest spektral bölgesi 2GHz alınmıştır. Oysa bu değer bu çalışmada 300 MHz dir. Belki bu durum Caiyan [23]'de verilen hfs sabitlerinin belirlenmesini etkilemiştir.

KAYNAKLAR

- [1]. AYGÜN, E., ZENGİN, D.M., 1998, Atom ve Molekül Fiziği, Bilim Yayınları, Ankara, 975-95625-0-2.
- [2]. BRANSDEN, B.H., JOACHAIN, C.J., 1999, Atom ve Molekül Fiziği, Bilim Yayınları, Ankara, 975-7636-03-7.
- [3]. HAKEN, H., WOLF, H.C., 2000, The Physics of Atoms and Quanta, Springer-Verlag Berlin, 3-540-67274-5.
- [4]. BÜTTGEENBACH, S., 1982, Hyperfine Structure in 4d- and 5d-Shell Atoms, Springer-Verlag Berlin, 3-540-11740-7.
- [5]. BOOTH, A.J., BLACKWELL, D.E., 1983, The effect of Hyperfine Structure on Stellar Abundance Analysis, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 204, 777.
- [6]. LIVINGSTON, W., WALLACE, L., 1991, An Atlas of the Solar Spectrum in the Infrared (1.1 to 5.4 μ m), National Solar Obs. Tech. Rep. 91-001, Tucson, AZ.
- [7]. BRODZINSKI, T., KRONFELDT, H.D., KROPP, J.R., WINKLER, R., 1987, Hyperfine Structure Investigation in the Mangan I 3d⁵4s4p and 4s5s^{*}, Z. Phys. D 7, 161.
- [8]. COWAN, R.D., 1981, The Theory of Atomic Structure and Spectra, Berkeley, Los Angeles, London: University of California Press, 0-520-03821-5.
<ftp://plasma-gate.weizmann.ac.il/pub/software/dos/cowan>.
- [9]. TÖPPER, O., 1997, Fitter, Universität der Bundeswehr Hamburg.
- [10]. CHILDS, W.J., GOODMAN, L.S., 1971, Hyperfine and Zeeman Studies of Low-Lying Atomic Levels of La¹³⁹ and the Nuclear Electric-Quadrupole Moment, Physical Review A, Volume 3, Number 1, 25-45.
- [11]. CHILDS, W.J., GOODMAN, L.S., 1977, Complete Resolution of Hyperfine Structure in the Close Doublet λ : 5930.6 of ¹³⁹La by Laser-Atomic-Beam Spectroscopy, J. Opt. Soc. Am., Vol. 67, No. 9, 1230-1234.
- [12]. GOVINDARAJAN, J., PRAMILA, T., 1989, Laser Optogalvanic Spectroscopy for Hyperfine Structure Studies of La I, J. Opt. Soc. Am. B, Vol. 6, No. 7, 1275-1277.
- [13]. LUHRS, G., 1955, Das Kernquadrupolmoment des ¹³⁹La, Z. Phys. 141, 486.
- [14]. WILSON, M., 1971, LS-Term Dependence of Hyperfine-Interaction Parameters in d²s Configurations, Physical Review A, Volume 3, Number 1, 45-50.

- [15]. FISCHER, W., HÜHNERMANN, H., MANDREK, K., 1971, Optische Untersuchung der Hyperfeinstruktur einiger La I-Linien und Interpretation der Gemessenen A-Faktoren, Z. Physik 248, 53-60.
- [16]. AHMED, Z. B., BAUCHE-ARNOULT, C., WYART, J. -F., 1974, Energy Levels and Hyperfine Structures in the $(5d + 6s)^3$ Configurations of La I, Physica 77, 148-158.
- [17]. CHILDS, W.J., GOODMAN, L.S., 1978, Hyperfine Structure of Excited, Odd-parity Levels in ^{139}La by Laser-Atomic-Beam Fluorescence, J. Opt. Soc. Am., Vol. 68, No. 10, 1348-1350.
- [18]. CHILDS, W.J., GOODMAN, L.S., 1979, $^{138,139}\text{La}$ Nuclear Electric-Quadrupole-Moment Ratio by Laser-Rf Double Resonance, Physical Review A, Volume 20, Number 5, 1922-1926.
- [19]. BEHRENS, H. O., GUTHERLEIN, G. H., 1983, J. Phys. (Paris) 44, C 7, 149-168.
- [20]. CHILDS, W.J., NIELSEN, U., 1988, Hyperfine Structure of the $(5d + 6s)^3$ Configuration of ^{139}La I: New Measurements and *ab initio* Multiconfigurational Dirac-Fock Calculations, Physical Review A, Volume 37, Number 1, 6-15.
- [21]. SHAW, R. W., YOUNG, J. P., SMITH, D. H., BONANNO, A. S., DALE, J. M., 1990, Hyperfine Structure of Lanthanum at Sub-Doppler Resolution by Diode Laser-Initiated Resonance-Ionization Mass Spectroscopy, Physical Review A, Volume 41, Number 5, 2566-2573.
- [22]. PRAMILA, T., 1990, Hyperfine Structure Studies of Some La I Transitions by Laser Optogalvanic Spectroscopy, Physica Scripta, Vol. 42, 556-558.
- [23]. CAIYAN, L., JIANAN, Q., LIZHOU, Z., FUCHENG, L., 1990, Studies on the Hyperfine Structure of La I in a Hollow-Cathode Discharge Tube, Phys. D: Appl. Phys. 23, 1327-1328.
- [24]. JIA, L., JING, C., LIN, F., 1992, Hyperfine Structure of Odd-Parity Levels in ^{139}La I by Laser Optogalvanic Spectroscopy, Optics Communications 94, 331-334.
- [25]. BENTON, D. M., COOKE, J. L., GRIFFITH, J. A. R., 1994, High Resolution Laser spectroscopy Measurements of the Hyperfine Structure of ^{138}La , J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27, 4365-4372.
- [26]. GANGRSKY, Y. P., KARAIVANOV, D. V., MARINOVA, K. P., MARKOV, B. N., ZEMLYANOV, S. G., 1997, Hyperfine Splitting of the Odd $^4\text{F}_J$, $^2\text{P}_J$ and $^4\text{S}_J$ La I Multiplets, Z. Phys. D 41, 251-252.
- [27]. JIN, W. -G., ENDO, T., UEMATSU, H., MINOWA, T., KATSURAGAWA, H., 2001, Diode-Laser Hyperfine-Structure Spectroscopy of $^{138,139}\text{La}$, Physical Review A, Volume 63, 064501(1,2,3).

[28]. Nist Atomic Spectra Database: <http://www.nist.gov>

[Ziyaret Tarihi: 18 Kasım 2005]

[29]. AYGÜN, E., ZENGİN, D.M., 2000, Kuantum Fiziği, Bilim Yayınları, Ankara, 975-556-005-X.

[30]. KOPFERMANN, H., SCHNEIDER, E. E., 1958, Nuclear Moments, Academic Press Inc, Catalog Card Number 56-6607.

[31]. TAYLOR, J. R., ZAFARITOS, C., 1996, Fizik ve Mühendislikte Modern Fizik, Güven Yayınları, İstanbul.

[32]. THORNE, A., LITZEN, U., JOHANSSON, S., 1999, Spectrophysics, Springer-Verlag Berlin, 3-540-65117-9.

[33]. KARAOĞLU, B., 1997, Kuantum Mekaniğine Giriş, Bilgitek Yayıncılık, İstanbul.

[34]. WOODGATE, G. K., 1970, Elementary Atomic Structure, McGraw-Hill Publishing Company Limited, England, 07 094137 8.

[35]. COWAN R. D., 1993, ProgramsRCN/RCN2/RCG/RCE, <ftp://plasma-gate.weizmann.ac.il/pub/software/dos/cowan>.

[36]. SVANBERG, S., 1991, Atomic and Molecular Spectroscopy, Springer-Verlag Berlin, 3-540-52594-7.

[37]. BAŞAR, G., 1994, Lazer Spektroskopisi ve İnterferens Spektroskopisi ile Rhenium ve Platin Elementlerinin İzotopik kaymalarının ve Hiper İnce Yapı Ayrılmalarının İncelenmesi, Doktora Tezi, İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.

[38]. ÖZTÜRK, K., İ., Manganez I ve Skandiyum I Elementlerinin İnce ve Aşırı İnce Yapısının İncelenmesi, Doktora Tezi, İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.

[39]. DEMTRÖDER, W., 1998, Laser Spectroscopy Basic Concepts and Instrumentation, Springer, Germany, 3-540-57171-X.

[40]. BARBIERI, B., BEVERINI, N., SASSO, A., 1990, Optogalvanic spectroscopy, Reviews of Modern Physics, Vol. 62, No. 3, 603.

[41]. TÜBİTAK: <http://www.biltek.tubitak.gov.tr>

[Ziyaret Tarihi: 21 Kasım 2005]

[42]. KURUCZ, R. L., 1993, Physica Scripta, T 47, 110.

[43]. PHELPS III, F. M., 1982, M.I.T. Wavelengths Tables Volume 2 : Wavelengths by Element, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, London, England, 0-262-16087-0 (v.2)

ÖZGEÇMİŞ

30.03.1982 İstanbul doğumluyum. İlk öğrenimimi Mustafa Necati İlköğretim Okulu'nda (1988-1993 Bakırköy, İstanbul), orta öğrenimimi 50.Yıl Ahmet Hamdi Tanpınar İlköğretim Okulu'nda (1993-1996 Bakırköy, İstanbul), lise öğrenimimi Hasan Polatkan Anadolu Lisesi'nde (1996-2000 Ataköy, İstanbul) ve üniversite öğrenimimi İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi, Fizik Bölümü'nde (2000-2004 Vezneciler, İstanbul) tamamladım. 2004 yılında İstanbul Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Atom ve Molekül Fiziği Programı'nda yüksek lisans öğrenimime başladım.

3-6 Ağustos 2005 tarihinde İrlanda'da yapılan EGAS'a (37th Conference of the European Group for Atomic Spectroscopy) "Experimental Hyperfine Structure Investigation in Cobalt I" (Günay Başar, Gönül Başar, F.Gülay (Fırat) Acar, İpek K. Öztürk, **Alev Er**, Sophie Kröger) adlı poster bildirisi ve 7-10 Haziran 2006 tarihinde İtalya'da yapılan EGAS'a (38th Conference of the European Group for Atomic Spectroscopy) "Experimental Investigation of the Hyperfine Structure of Atomic La" (Günay Başar, Gönül Başar, **Alev Er**, Sophie Kröger) adlı poster bildirisi ile katıldım. Bu çalışmanın deneysel kısmında elde edilen bulgular "Experimental Hyperfine Structure of Atomic La" (Günay Başar, Gönül Başar, **Alev Er**, Sophie Kröger) adlı yayın olarak 2006 yılında Physica Scripta tarafından kabul edildi.