

# Karbon Benzeri Elementlerin Bazı Uyarılmış Seviyeleri İçin İyonlaşma Potansiyellerinin Teorik Olarak Hesaplanması

Gültekin ÇELİK<sup>1</sup>, Murat YILDIZ, Hamdi Şükür KILIÇ

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

**Özet:** Bu çalışmada çekirdek yükü 6–10 arasındaki Karbon benzeri elementlerin bazı uyarılmış seviyeleri için iyonlaşma potansiyelleri teorik olarak hesaplanmıştır. Uyarılmış seviyelere ait iyonlaşma potansiyellerinin hesaplanmasında en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, iso-elektronik seri ve iso-spektrum seviye serileri kullanılmıştır. Bu çalışmada elde edilen iyonlaşma potansiyeli sonuçlarının deneysel sonuçlarla iyi uyumlu olduğu görülmüştür.

**Anahtar Kelimeler:** İyonlaşma potansiyeli, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, iso-spektrum seviye serisi

## The Theoretical Calculation of Ionization Potential for Some Excited Levels in Carbon-Like Elements

**Abstract:** In this study, the ionization potentials have been calculated theoretically for some excited levels of Carbon-like elements with nuclear charge from  $Z=6$  to  $Z=10$ . The weakest bound electron potential model theory, iso-electronic series and iso-spectrum-level series have been employed for the calculation of ionization potentials belong to excited levels. The results of ionization potential obtained from this study have observed good agreement with experimental values.

**Key Words:** Ionization potential, weakest bound electron potential model theory, iso-spectrum level series

### Giriş

Dünya ve yıldızlarda bulunan elementlerin spektroskopik özellikleri deneysel ve teorik çalışmacılar tarafından yoğun olarak çalışılmaktadır. Karbon benzeri elementlere ait doğru verilerin elde edilmesi birçok temel kimyasal ve fiziksel sürecin anlaşılması için önemlidir. İyonlaşma potansiyelleri deneysel ve teorik çalışmaların önemli konuları arasında yer

---

<sup>1</sup> E-mail: gcelik@selcuk.edu.tr

almaktadır. Birçok atom ve iyon için iyonlaşma potansiyeli deneysel yöntemlerle elde edilebilmesine rağmen teorik olarak iyonlaşma potansiyellerinin hesaplanması kolay değildir [1]. Literatürdeki deneysel ve teorik çalışmalar genellikle düşük uyarılmış durumlarla ilgilidir. Yüksek uyarılmış seviyelere doğru gidildikçe konfigürasyonlar artmakta ve hesaplamalar oldukça zorlaşmaktadır. Söz konusu sistemler için doğru verilerin elde edilmesinde R-matrix yöntemi [2], Multi-konfigürasyonel Hartree-Fock (MCHF) yöntemi [3], rölativistik konfigürasyon etkileşmesi (C I) yöntemi [4], rölativistik çok parçacıklı pertürbasyon teorisi (MBPT) [5] ve Multi-konfigürasyonel Dirac-Fock (MCDF) yöntemleri [6,7] gibi duyarlı teorik çalışmalar yapılmaktadır. Bu teorik yaklaşımların çoğunda düşük uyarılmış seviyelerle ya da birkaç defa iyonlaşmış sistemlerle ilgilenilmektedir. Yüksek uyarılmış seviyeleri ya da yüksek iyonlaşmış seviyeleri içeren sistemler için teorik çalışmalar hesaplamalar çok fazla karmaşıklıktan dolayı oldukça azdır. Ayrıca bu tür çalışmaların çoğunda iyonlaşma potansiyellerinden daha çok uyarılmış enerjilere ait veriler yer almaktadır.

Bu çalışmada Karbon benzeri elementlere ait bazı uyarılmış seviyelerin iyonlaşma potansiyelleri sistematik olarak çalışılmıştır. İso-elektronik seri ve iso-spektrum seviye serileri tanımlarından faydalanılarak Karbon benzeri diziyeye ait bazı uyarılmış seviyelerin iyonlaşma potansiyelleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPMT) kullanılarak hesaplanmıştır.

### Materyal ve Metot

Uyarılmış seviyelerin iyonlaşma potansiyelleri iso-spektrum seviye serisi tanımları kullanılarak çalışılabilir. Uyarılmış seviyelere ait rölativistik olmayan iyonlaşma potansiyelleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak elde edilebilir.

İso-elektronik seri, atom ya da iyonun tüm üyelerinin aynı elektron konfigürasyonuna sahip olduğu seri olarak tanımlanmaktadır [8,9].  $C, N^+, O^{++}, F^{+++}$  ..... gibi verilen atomik ve iyonik sistemlerin hepsi Karbon atomunun temel seviye konfigürasyonuna sahiptir. Bunun için iso-elektronik seriler sadece bir elektron konfigürasyonu ile ilgili bilgiler içermektedir. Atomların multiyet teorisine göre bir elektron konfigürasyonu genellikle çeşitli terimlere ve bu terimler de çeşitli seviyelere yarılar. Örnek olarak  $1s^2 2s^2 2p^2$  şeklinde verilen Karbon atomunun temel seviyesine ait elektron konfigürasyonu  $^3P, ^1D$  ve  $^1S$  terimlerine yarılar. Bu terimler de  $^3P_2, ^3P_1, ^3P_0, ^1D_2$  ve  $^1S_0$  gibi seviyelere yarılmaktadır. Elektron konfigürasyonu ya da iso-elektronik seriler enerji seviyeleri ve terimleriyle ilgili bilgileri içermemesine rağmen temel seviye iyonlaşma potansiyelinin düzenliliğinin araştırılmasında kullanılmaktadır. Verilen bir iso-elektronik seri boyunca temel seviye iyonlaşma potansiyeli çalışmalarında serinin tüm üyeleri en düşük enerji seviyelerinde bulunur. İso-elektronik seri tanımları kullanılarak uyarılmış seviyelere ait iyonlaşma potansiyellerinin düzenliliklerinin araştırılması, iso-elektronik serilerin sadece bir elektron konfigürasyonu ile ilgili bilgiler içermesinden ve bir elektron konfigürasyonunda çeşitli seviyeler bulunduğu için kolay değildir. Bu durumda iso-elektronik seri oldukça kaba bir yaklaşımdır. Bu amaç doğrultusunda problemi daha uygun bir şekilde tanımlayan iso-spektrum seviye serilerini kullanmak daha uygundur [1,8-10]. İso-spektrum seviye serisi verilen bir iso-elektronik seri de aynı seviye sembolüne sahip seviyelerin bir serisi olarak tanımlanır. Örnek olarak  $C (1s^2 2s^2 2p 3s \ ^3P_2), N^+ (1s^2 2s^2 2p 3s \ ^3P_2), O^{++} (1s^2 2s^2 2p 3s \ ^3P_2)$  ve  $F^{+++} (1s^2 2s^2 2p 3s \ ^3P_2)$  konfigürasyonları verilebilir. İso-spektrum seviye serisinin tanımından anlaşılmaktadır ki verilen bir iso-spektrum seviye serisinde elektron konfigürasyonu, spektrum terimi ve spektrum enerji seviyeleri aynı olup tek değişken çekirdek yükü  $Z$  dir. Bu nedenle bir iso-spektrum seviye serisinde uyarılmış seviye iyonlaşma potansiyeli çekirdek yükünün bir fonksiyonu olarak ifade edilebilir. Bu tanımlama uyarılmış seviye iyonlaşma potansiyellerinin düzenliliklerinin araştırılmasını önemli ölçüde basitleştirmektedir.

Temel seviyeye ait iyonlaşma enerjilerinin düzenliliklerinin araştırılması atom ya da iyonun tüm elektronları başlangıç seviyesinde olduğundan ve bir iso-elektronik seride temel seviye için sadece bir enerji seviyesi bulunduğu için kolaydır. Uyarılmış seviyelerle çalışmak çok daha karmaşıktır. Atomik ya da iyonik sistemlere ait iyonlaşma potansiyelleri birçok yöntemle hesaplanabilmektedir. Bu çalışmada iyonlaşma potansiyellerini hesaplamak için en

zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılmıştır. İyonlaşma potansiyelinin tanımından anlaşılacağı gibi verilen bir atomik ya da iyonik sistemde en zayıf bağlı elektron, iyonlaşma sürecine ilk katılacak olan elektrondur. Bu elektronu iyonlaştırmak en kolaydır. Bu nedenle sistemdeki en zayıf bağlı elektron diğer elektronlardan ayrı olarak incelenebilmektedir. Uyarma, iyonlaşma ve geçişler gibi birçok atomik ya da iyonik fiziksel özellik sistemdeki en zayıf bağlı elektronla ilgilidir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teori, verilen bir atomik ya da iyonik sistemdeki tüm elektronları en zayıf bağlı elektron ve en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar olmak üzere iki kısma ayırma temeline dayanır.

Bu modele göre en zayıf bağlı elektronun Schrodinger denklemi hidrojen atomuna benzer bir şekilde,

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

olarak verilir [11]. Schrodinger denkleminde ilk terim en zayıf bağlı elektronun kinetik enerjisini, ikinci terim Coulomb potansiyelini ve üçüncü terim ise kutuplanma etkisinden kaynaklanan elektrik dipol potansiyelini göstermektedir. İfadedeki  $r_i$ , en zayıf bağlı elektron ile çekirdek arasındaki uzaklık,  $l$  yörünge açısız momentum kuantum sayısı ve  $d$  bilinmeyen parametredir. Buradaki  $d$ , tamsayı olmayan  $n^*$  ve  $l^*$  kuantum sayılarıyla tam sayı olan  $n$  ve  $l$  kuantum sayılarından yararlanılarak belirlenmektedir. Bu yöntemde sisteme en zayıf bağlı elektronun dışındaki diğer elektronların perdelemesi en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisinden dolayı tam değildir. Bunun için en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisinde potansiyel fonksiyonunun Coulomb teriminde bir etkin çekirdek yükü,  $Z'$  kullanılır [8].

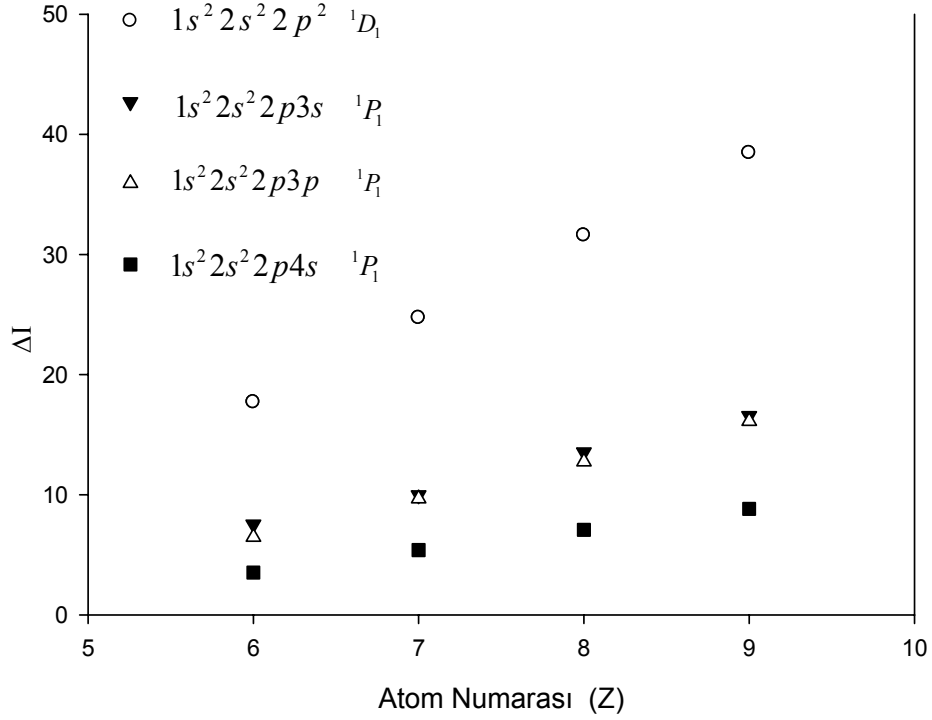
$$Z' = \sqrt{(Z - \sigma)^2 + g(Z - Z_0)} \quad (2)$$

Bu denklemdeki parametreler iso-spektrum seviye seri tanımına uygun olarak belirlenecektir. Buna göre Denk.(2) deki  $Z_0$  bir iso-spektrum seviye serisinin ilk üyesinin çekirdek yükü,  $\sigma$  ilk üyenin perdeleme sabiti ve  $g$  bağıl artma faktörünü göstermektedir.

Bir atomun ya da iyonun rölativistik olmayan iyonlaşma potansiyeli,

$$I = \frac{Z'}{2n'^2} \quad I = \frac{(Z - \sigma)^2 + g(Z - Z_0)}{2n'^2} \quad (3)$$

olarak verilir [8-10]. Daha öncede bahsedildiği gibi bir iso-spektrum seviye serisinde iyonlaşma potansiyeli çekirdek yüküne bağlıdır. Denk. (3)' deki  $n'$  parametresini belirlemek için uyarılmış seviyelerin iyonlaşma potansiyellerinin ilk farkları gözönüne alınır. Eğer bir iso-spektrum seviye serisi boyunca çekirdek yükü  $Z$  ile deneysel iyonlaşma enerjilerinin ilk farklarının  $\Delta I = I(Z+1) - I(Z)$  grafiği çizilecek olursa iki nicelik arasında doğrusal bir ilişkinin olduğu görülür.



**Şekil 1.** Birinci derece iyonlaşma potansiyeli farklarının çekirdek yüküne göre değişimi.

Karbon benzeri sistemlerin bazı uyarılmış seviyelerine ait ilgili grafik Şekil 1' de görülmektedir. Bu grafikten etkin başkuantum sayısı  $n'$  'nün bir iso-spektrum seviye serisi boyunca yaklaşık olarak sabit olduğu ve grafiğin eğiminden elde edilebileceği açıkça görülmektedir. Bu grafikten faydalanarak ilk uyarılmış seviyelere ait parametreler belirlenerek Tablo 1' de verilmektedir.

### Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada çekirdek yükü  $Z=6-10$  arasında olan Karbon benzeri elementlerin bir iso-spektrum seviye serisi boyunca bazı uyarılmış seviyelere ait iyonlaşma potansiyelleri sistematik olarak çalışıldı. Uyarılmış seviye iyonlaşma potansiyellerinin hesaplanmasında gerekli olan parametreler  $\Delta I \propto Z$  grafiğinden faydalanarak belirlendikten sonra elde edilen iyonlaşma potansiyeli sonuçları deneysel değerlerle karşılaştırmalı olarak Tablo 2' de verilmiştir. Hesaplamaların bulunduğu tabloda bu çalışmada elde edilen sonuçlarla deneysel yöntemlerle elde edilen sonuçların farkı mevcut sonucun hassasiyetini göstermek amacıyla belirtilmiştir. İyonlaşma potansiyellerinin bilinen yöntemlerle yapılan teorik hesaplamaların çoğu düşük uyarılmış ya da düşük iyonize olmuş durumlara ait sonuçlar içermektedir. Bu çalışmalarda en doğru sonuçların ancak  $n=4$  durumuna kadar olan seviyeler için olduğu literatürden görülebilir [12,13]. Bu nedenle Tablo 2' de verilen sonuçlar sadece deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır. Tablo 2' den bu çalışmada elde edilen sonuçların deneysel değerlerle iyi uyumlu olduğu görülmektedir. Sonuç olarak iso-spektrum seviye serilerinin tanımlanmasıyla, uyarılmış seviye iyonlaşma potansiyellerinin verilen bir iso-spektrum seviye serisi boyunca çekirdek yükünün bir fonksiyonu olduğu görülmektedir. Rölativistik olmayan iyonlaşma potansiyelleri en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak elde edilen Denk.(3) kullanılarak hesaplanmıştır. Bu çalışmada söz konusu yöntem kullanılarak özellikle yüksek uyarılmış ve iyonize olmuş durumların iyonlaşma potansiyelleri karmaşık ve uzun hesaplamalara girilmeden elde edilebilmektedir.

**Tablo 1:** İyonlaşma potansiyellerinin hesaplanmasında kullanılan parametreler

	$1s^2 2s^2 2p^2 \ ^1D_1$	$1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3S_1 P_1$	$1s^2 2s^2 2p^2 \ 3p \ ^1P_1$	$1s^2 2s^2 2p^2 \ 4s \ ^1P_1$
$\sigma$	4,296640	4,644415	4,633637	4,665278
$\rho$	0,732200	0,893993	0,701188	0,378770
$\lambda'$	1,986918	2,995027	3,053373	3,957266

**Tablo 2:** Çekirdek yükü 6–10 olan Karbon benzeri elementlerin bazı uyarılmış seviye İyonlaşma potansiyelleri (eV)

Z	$1s^2 2s^2 2p^2 \ ^1D_1$			$1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3S_1 P_1$			$1s^2 2s^2 2p^2 \ 3p \ ^1P_1$			$1s^2 2s^2 2p^2 \ 4s \ ^1P_1$		
	$I_{\text{teorik}}$	$I_{\text{deneysel}}$	$\Delta I$	$I_{\text{teorik}}$	$I_{\text{deneysel}}$	$\Delta I$	$I_{\text{teorik}}$	$I_{\text{deneysel}}$	$\Delta I$	$I_{\text{teorik}}$	$I_{\text{deneysel}}$	$\Delta I$
6	9,994300	9,995290	0,000990	3,575073	3,575072	0,000001	2,722598	2,722600	0,000002	1,547142	1,547141	0,000001
7	27,697100	27,698770	0,001670	9,847168	11,102918	1,255750	9,190976	9,190977	0,000010	5,062841	5,062841	0
8	52,289600	52,415210	0,125614	21,663028	21,075028	0,588000	18,576839	18,858850	0,282018	10,315453	10,464880	0,149430
9	83,772000	83,999900	0,227903	35,255405	34,614875	0,640530	30,880193	31,603230	0,723045	17,304980	17,548450	0,243476
10	122,144000	122,444450	0,299843	51,880046	51,170271	0,709775	46,101030	47,430270	1,329241	26,181891	26,370040	0,188149

### Kaynaklar

1. Zheng, N. W., Wang, T. **Systematical study on the ionization potential of excited states in carbon –like sequence** Chem. Phys. Lett. 376, 557-565 (2003).
2. Fernley, J.A., Hibbert, A. Kingston, A.E., Seaton, M.J. **Atomic data for opacity calculations: XXIV. The boron-like sequence** J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 32, 5507 (1999).
3. Tachiev, G., Fischer, C.F. **Breit-Pauli energy levels, lifetimes and transition data: boron-like spectra** J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 33, 2419 (2000).
4. Chen, M.H., Cheng, K.T., Johnson, W. **Relativistic configuration-interaction calculations of  $n=2$  triplet states of helium-like ions** Phys. Rev. A. 47, 3692 (1993).
5. Dzuba, V.A., Johnson, W.R. **Calculation of the energy levels of barium using  $B$ -splines and a combined configuration-interaction and many-body-perturbation-theory method** Phys. Rev. A. 57, 2459 (1998).
6. Parpia, F.A. Fischer, C.F., Grant, I.P. **GRASP92: A package for large-scale relativistic atomic structure calculations** Comput. Phys. Commun. 94, 249, (1996).
7. Ynnerman, A., Fischer, C.F. **Multiconfigurational-Dirac-Fock calculation of the  $2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_1$  spin-forbidden transition for the Be-like iso-electronic sequence** Phys. Rev. A. 51, 2020 (1995).
8. Zheng, N.W. et al. **Ground-state atomic ionization energies for  $Z=2-18$  and up to 18 electrons** Phys. Rev. A. 65, 052510 (2002).
9. Zheng, N. W., Wang, T. **Calculation of excited-state ionization potential for Boron-like sequence** Int. J. Quant. Chem. 98, 495-501 (2004).
10. Zheng, N. W., Wang, T. **Ionization potential of excited states of Be-Like sequence in the Concept of Iso-Spectrum- Level Series** Int. J. Quant. Chem. 93, 344-350 (2003).
11. Zheng, N. W., Wang, T., Ma, D. X., Zhou, T., Fan, J. **Weakest bound electron potential model theory** Int. J. Quant. Chem. 98, 281-290 (2004).
12. Aggarwal, K.M., Keenan, F.P., Msezane, A.Z. **Oscillator strengths for transitions in C-like ions between FIV and Ar XIII** Astrophys. J. Suppl. Ser. 136, 763 (2001).
13. Bell, K.L., Hibbert, A., Stafford, R. P. **Transition-probabilities for some spectral-lines of singly ionized nitrogen** Phys. Scr. 52, 240 (1995).