

Ne II Spektrumu için E1 Geçiş Olasılıkları

Gültekin ÇELİK

Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Konya

e-mail: gultekin@selcuk.edu.tr

Öz: Bu çalışmada bir kez iyonlaşmış Neon (Ne II)'un 3s-3p seviyeleri arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları, en zayıf bağlı elektron potansiyel model (WBEPM) teori kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen geçiş olasılıkları literatürde verilen teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

Anahtar kelimeler: Bir kez iyonlaşmış Neon, Elektrik dipol geçiş olasılığı, WBEPM teori

E1 Transition Probabilities for Ne II Spectrum

Abstract: In this study, the electric dipole transition probabilities between 3s-3p levels of singly ionized neon have been calculated using the weakest bound electron potential model (WBEPM) theory. The obtained transition probabilities have been compared to theoretical and experimental results in given literature.

Keywords: Singly ionized Neon, Electric dipole transition probability, WBEPM theory

1. Giriş

Elektron sayısı dört ile on arasında olan hafif elementler fiziğin birçok dalında önemli uygulama alanı bulmaktadır. Atomların ve iyonların uyarılma süreçleri, geçiş olasılıkları, osilatör şiddetleri ve uyarılmış seviyelerin yaşam süreleri gibi hassas spektroskopik parametrelerin bilinmesini gerektirir. Neon elementi evrende hidrojen, helyum, oksijen ve karbondan sonra en fazla bulunan elementtir. Nadir gaz iyonlarında geçiş olasılıkları ve uyarılmış seviyelerin yaşam sürelerinin bilinmesi teşhis, nadir gaz plazmaları, kozmik plazmalar, laboratuvar plazmaları, laser ortamları ve teorik

hesaplamalar gibi birçok uygulama için önemlidir (Trimble, 1991). İnterkombinasyon ve spin yasaklı geçişler için kendiliğinden emisyon oranlarının mevcut geçiş olasılığı değerleri arasındaki büyük tutarsızlıklar, Ne II spektrumu çalışmaları üzerindeki ilgiyi arttırmaktadır. Elde edilen spektral özellikler bir galaksinin hangi özelliklere sahip olduğu noktasında ipucu verir. Örneğin, üç kez iyonlaşmış Oksijen (O IV) veya dört kez iyonlaşmış Neon (Ne V) gibi çizgiler, merkezi bir kara deliğin varlığını gösterir. Bu çizgilerin yokluğunda yıldız yayan galaksiler için tipik olan çizgilerin varlığı, örneğin tekli iyonize Neon (Ne II), bir galaksinin ana güç kaynağı

olarak büyük yıldız oluşumunu gösterir (Santos ve ark., 2011).

2. Materyal ve Metot

Çok elektronlu atomik ya da iyonik sistemlerde elektronik hareketi tanımlamak için Zheng, yeni bir potansiyel model önerdi (Zheng ve ark., 2000; 2002; 2004). Bu yeni yaklaşımda radyal dalga fonksiyonları deneysel enerji değerlerinden ya da iyonlaşma enerjilerinden belirlenen bazı parametrelerle Laguerre polinomlarına bağlı olarak ifade edilebilmektedir;

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

Burada C normalizasyon katsayısıdır ve

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

olarak verilir. İfadedeki n^* , l ve ϵ ,

$$l = l + d, \quad n^* = n + d, \quad \epsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (3)$$

şeklinde tanımlanmaktadır (Zheng ve ark., 2004). Belirli kuantum sayılarıyla tanımlı bir seviyeden farklı kuantum sayılarıyla tanımlı ikinci bir seviyeye bir elektron geçişi için geçişi tanımlayan radyal geçiş integrali,

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

olarak verilir (Zheng ve ark., 2000; 2002; 2004).

Burada

$S = \min\{n_f^* - l_f^* - 1 - m_1, n_i^* - l_i^* - 1 - m_2\}$ dir ve

$k > -l_f^* - l_i^* - 3$ şartını sağlamaktadır.

İki ince yapı seviyesi arasındaki elektrik dipol geçişe karşılık gelen geçiş olasılığı (Cowan, 1981),

$$A_{JJ'} = \frac{2,0261 \cdot 10^{-6} (E_J - E_{J'})^3}{(2J'+1)} S \quad (5)$$

şeklinde yazılır. Burada $(E_j - E_i)$ geçiş enerjisidir ve birimi Kayser (cm^{-1})'dir. S ise geçişin söz konusu olduğu seviyeler arasındaki çizgi şiddetidir. Çizgi şiddeti geçişe iştirak eden elektron sayısına, göz önüne alınan konfigürasyonların geçerli olduğu çiftlenim şekline ve geçiş tipine göre belirlenir (Cowan 1981; Çelik ve ark., 2015; Ateş ve ark., 2014).

3. Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada bir kez iyonlaşmış Neon iyonunda 3s ve 3p seviyelerinin bazı konfigürasyonlarının ince yapı seviyeleri arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori kullanılarak hesaplanmıştır. Bu teori bir çok atom ve iyonunda hem izinli hem de yasak geçişlerde geçiş olasılıkları ve osilatör şiddetleri gibi spektroskopik nicelikler için literatürle oldukça uyumlu sonuçlar verebilmektedir (Çelik ve Ateş, 2016; Çelik ve ark., 2016; Ateş ve ark., 2012; Çelik ve ark., 2011; Ateş ve Çelik, 2009; Ateş ve ark., 2009; Çelik ve Ateş, 2007; 2008).

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride hesaplamalarda kullanılacak parametrelerin belirlenmesinde seviyelere ait enerji değerleri ve seviyelerin yarıçaplarının beklenen değerleri kullanılmaktadır. Bu çalışmada seviyelere ait enerji değerleri literatürdeki deneysel verilerden (Ralchenko ve ark., 2015), seviyelerin yarıçaplarının beklenen değerleri

ise sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA) (Lindgard ve Nielsen, 1975) ve sayısal Hartree-Fock (HF) (Gaigalas ve Fischer, 1996) yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Gerekli parametreler belirlendikten sonra bir kez iyonlaşmış Neon iyonunda elektrik dipol geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Bu çalışmadan elde edilen geçiş olasılığı sonuçları Çizelge 1 de verilmiştir. Çizelge 1 de bu çalışma sütununda NRHF dalga fonksiyonlarından elde edilen parametreler kullanılarak yapılan hesaplama sonuçları yıldızlı olarak gösterilmiştir. Diğer sonuçlar ise NCA dalga fonksiyonlarından elde edilen parametreler kullanılarak yapılan hesaplama sonuçlarını göstermektedir. Tablo 1 de bu çalışmadan elde edilen geçiş olasılığı sonuçları, Garstang (1954) tarafından verilen yarı-deneysel sonuçlarla, Hodges ve ark. (1970) tarafından verilen yarı-deneysel sonuçlarla, Blackford ve Hibbert (1994) tarafından verilen CIV3 kodlu konfigürasyon etkileşmesi sonuçlarıyla, Fischer ve He (1999) tarafından verilen MCHF+BP sonuçlarıyla, Fischer and Tachiev (2004) tarafından verilen relativistik etkileri içeren MCHF sonuçlarıyla, Santos ve ark. (2011) tarafından verilen MCDF sonuçlarıyla ve literatürde verilen deneysel sonuçların ortalaması alınarak elde edilen verilerle karşılaştırılmıştır (Kramida ve ark., 2015). Tablodan görüldüğü gibi elde edilen sonuçlar literatürden elde edilebilen birçok

teorik sonuçla ve birçok deneysel çalışmanın ortalaması alınarak verilen sonuçla uyumludur. Bir kez iyonlaşmış Neon $1s^2$ çekirdek elektronlarının dışında uyarılmış seviyelerde önemli etkileşmelere sebebiyet verecek yedi tane değerlik elektrona sahiptir. Böyle bir sistemde hassas hesaplamalar yapabilmek için çok sayıda konfigürasyonun göz önüne alınıp bu tür etkileşmeleri hesaplamalara dahil eden konfigürasyon etkileşmesi yöntemleri kullanılmalıdır. Literatürdeki sonuçların birbirinden farklı olması bu konfigürasyonların hesaplamalardaki önemine bir kez daha

dikkat çekmektedir. Çok sayıda konfigürasyonların göz önüne alınması hesaplamaları çoğu kez karmaşık hale getirebilmektedir.

En zayıf bağlı elektron potansiyel model teoride geçiş olasılıklarının hesaplanmasında elektronun geçişe iştirak ettiği iki seviyeye ait dalga fonksiyonları belirlenerek karmaşık hesaplamalara girilmeden sonuca ulaşılabilmektedir. Ayrıca bu yöntemle yüksek uyarılmış seviyeleri çalışmak, karmaşık yöntemler kadar zor değildir

Çizelge 1. Bir kez iyonlaşmış Neon için 3s-3p seviyeleri arasındaki elektrik dipol geçiş olasılıkları ($\times 10^8 \text{Hz}$)

İlk Seviye	Son seviye	Terimler	J_i	J_s	Bu Çalışma	Santos ve ark. (2011)	Garstang (1954)	Hodges ve ark. (1970)	Blackford ve Hibbert (1994)	Fischer ve Tachiev (2004)	Deneysel Sonuçlar
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4S4	1.5	1.5	8.76E-01*	9.10E-01	7.60E-01	9.20E-01	9.00E-01	8.40E-01	0.75 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4S4	2.5	1.5	1.38E+00*	1.16E+00	1.40E+00	1.25E+00	1.13E+00	1.12E+00	0.96 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4S4	0.5	1.5	4.26E-01*	5.20E-01	3.20E-01	5.10E-01	5.50E-01	4.50E-01	0.43 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4P4	2.5	2.5	9.90E-01*	1.01E+00	1.02E+00	1.08E+00	1.11E+00	9.00E-01	0.90 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4P4	2.5	1.5	6.52E-01*	8.10E-01	4.50E-01	7.50E-01	8.00E-01	7.10E-01	0.62 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4P4	1.5	2.5	3.68E-01	3.10E-01	2.90E-01	3.10E-01	3.10E-01	3.00E-01	0.27 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4P4	1.5	1.5	1.83E-01*	2.30E-01	2.00E-01	2.00E-01	1.90E-01	1.90E-01	0.16 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4P4	0.5	1.5	5.10E-01	4.70E-01	4.70E-01	4.40E-01	8.60E-01	4.20E-01	0.35 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4P4	0.5	0.5	2.08E-01	2.00E-01	1.80E-01	1.90E-01	1.90E-01	1.80E-01	0.17 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4P4	1.5	0.5	1.16E+00*	1.09E+00	1.10E+00	1.20E+00	1.23E+00	1.14E+00	1.04 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4D4	1.5	2.5	1.33E+00*	1.47E+00	1.35E+00	1.43E+00	1.47E+00	1.34E+00	1.27 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4D4	1.5	1.5	9.59E-01	9.40E-01	8.90E-01	9.70E-01	1.00E+00	9.10E-01	0.90 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4D4	1.5	0.5	3.04E-01	2.30E-01		2.70E-01	2.80E-01	3.00E-01	0.27 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4D4	0.5	1.5	7.85E-01*	9.10E-01	8.40E-01	8.70E-01	8.80E-01	7.30E-01	0.84 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4D4	0.5	0.5	1.59E+00*	1.61E+00	1.54E+00	1.64E+00	1.67E+00	1.53E+00	1.41 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4D4	2.5	3.5	1.93E+00*	1.88E+00	1.81E+00	1.92E+00	1.95E+00	1.77E+00	1.77 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4D4	2.5	2.5	5.98E-01*	4.20E-01	4.20E-01	4.60E-01	4.60E-01	5.50E-01	0.42 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P4D4	2.5	1.5	1.02E-01*	5.00E-02		6.00E-02	6.00E-02	6.00E-02	0.05 E+00

Tablo 1 : Devam

İlk Seviye	Son seviye	Terimler	J _i	J _s	Bu Çalışma	Santos ve ark. (2011)	Garstang (1954)	Hodges ve ark. (1970)	Blackford ve Hibbert (1994)	Fischer ve Tachiev (2004)	Deneysel Sonuçlar
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P2S2	1.5	0.5	1.24E+00*	1.53E+00	7.70E-01	1.44E+00	1.19E+00	1.39E+00	1.45 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P2S2	0.5	0.5	5.36E-01	2.90E-01	7.50E-01	2.20E-01	4.40E-01	2.20E-01	0.22 E-00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P2P2	1.5	1.5	1.62E+00	1.63E+00	1.35E+00	1.42E+00	1.42E+00	1.38E+00	1.40 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P2P2	1.5	0.5	6.57E-01	5.00E-01	9.40E-01	2.20E-01	5.10E-01	2.60E-01	0.24 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P2P2	0.5	1.5	3.09E-01	4.40E-01	4.00E-01	3.90E-01	3.20E-01	3.90E-01	0.38 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P2P2	0.5	0.5	1.25E+00	1.54E+00	8.50E-01	1.52E+00	1.19E+00	1.48E+00	1.49 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P2D2	1.5	2.5	1.40E+00	1.30E+00	1.29E+00	1.38E+00	1.41E+00	1.37E+00	1.14E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P2D2	1.5	1.5	2.70E-01*	3.40E-01	3.30E-01	3.30E-01	3.30E-01	3.30E-01	0.36 E+00
2s(2)2p(4)(P3)3s(1)	2s(2)2p(4)(P3)3p(1)	P2D2	0.5	1.5	1.16E+00	1.18E+00	9.80E-01	1.07E+00	1.10E+00	1.06E+00	0.93 E+00
2s(2)2p(4)(D1)3s(1)	2s(2)2p(4)(D1)3p(1)	D2P2	2.5	1.5	1.83E+00*	1.79E+00	1.50E+00	1.53E+00	1.75E+00	1.47E+00	1.33 E+00
2s(2)2p(4)(D1)3s(1)	2s(2)2p(4)(D1)3p(1)	D2P2	1.5	1.5	2.52E-01	2.30E-01	1.70E-01	2.50E-01	5.00E-02	2.30E-01	0.18 E+00
2s(2)2p(4)(D1)3s(1)	2s(2)2p(4)(D1)3p(1)	D2F2	2.5	2.5	1.08E-01*	1.30E-01	9.00E-02	1.10E-01	1.10E-01	1.10E-01	0.10 E+00
2s(2)2p(4)(D1)3s(1)	2s(2)2p(4)(D1)3p(1)	D2F2	2.5	3.5	1.62E+00*	1.68E+00	1.30E+00	1.57E+00	1.63E+00	1.51E+00	1.29 E+00
2s(2)2p(4)(D1)3s(1)	2s(2)2p(4)(D1)3p(1)	D2F2	1.5	2.5	1.51E+00*	1.49E+00	1.30E+00	1.44E+00	1.51E+00	1.40E+00	1.23 E+00

Kaynaklar

- Ateş Ş, Çelik G (2009). Oscillator Strengths for Allowed Transitions in Li II. *Acta Phys. Pol. A* 116: 169-175.
- Ateş Ş, Çelik G, Tekeli G, Taşer M (2012). Oscillator strengths of allowed transitions for O III. *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 98: 1–18.
- Ateş Ş, Gökçe Y, Çelik G, Yıldız M (2014). Oscillator strengths and transition probabilities for singly ionized terbium. *Can. J. Phys.* 92: 1043-1046.
- Ateş Ş, Tekeli G, Çelik G, Akın E, Taşer M (2009). Oscillator strengths for singly ionized oxygen. *Eur. J. Phys. D* 54: 21-24.
- Blackford HMS, Hibbert A (1994). Transitions in fluorine-like ions *At. Data Nucl. Data Tables* 58: 101-164.
- Cowan RD (1981). The theory of atomic structure and spectra. *University of California Press.*
- Çelik G, Ateş Ş (2007). The calculation of transition probabilities for atomic oxygen. *Eur. J. Phys. D* 44: 433-437.
- Çelik G, Ateş Ş (2008). The theoretical calculations of transition probabilities for individual and multiplet lines between some excited levels of atomic potassium. *Can. J. Phys.* 86: 487-494.
- Çelik G, Ateş Ş (2016). E1 and E2 transitions for Fe XVI, Co XVII and Ni XVIII. *Astrophys Space Sci.* 361: 1-9.
- Çelik G, Ateş Ş, Erol E (2015). Oscillator strengths and lifetimes for Cu I. *Can. J. Phys.* 93: 1015-1023.
- Çelik G, Ateş Ş, Özarıslan S, Taşer M (2011). Transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes for singly ionized magnesium. *J. Quant. Spectr. Rad. Trans.* 112: 2330-2334.
- Çelik G, Ateş Ş, Tekeli, G (2016). Electric dipole transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes for Co16+. *Can. J. Phys.* 94: 23-25.

- Fischer CF, He X (1999). Transition energies and transition rates for the $2p(4)(P-3)3p-2p(4)(P-3)3d$ transitions in Ne II. *Can. J. Phys.* 77: 177-195.
- Fischer CF, Tachiev G (2004). Breit-Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences *At. Data Nucl. Data Tables* 87: 1-184.
- Gaigalas G, Froese Fischer C (1996). Extension of the HF program to partially filled f-subshells. *Comput. Phys. Commun.* 98: 255-264.
- Garstang RH (1954). Intermediate coupling line strengths. *Mon. Not.R. Astron. Soc.* 114: 118-133.
- Hodges D, Marantz H, Tang CL (1970). Line strengths and radiative lifetimes for Ne II. *J.Opt.Soc. Am. A* 60: 192-199.
- Kramida A, Ralchenko Y, Reader J, NIST ASD Team (2015). NIST Atomic Spectra Database (version 5.3) [online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD
- Lindgard A, Nielsen SE (1975). Numerical approach to transition probabilities in the coulomb approximation: Be N I and Mg II Rydberg series. *J. Phys. B* 8: 1183-1199.
- Ralchenko Y, Kramida AE, Reader J, NIST ASD Team (2015). NIST Atomic Spectra Database (version 4.0.1) [online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD
- Santos JP, Costa AM, Madruga C, Parente F, Indelicato P (2011). Relativistic transition wavelenghts and probabilities for spectral lines of Ne II. *Eur. Phys. J. D* 63: 89-96.
- Trimble V (1991). The origin and abundances of the chemical elements revisited *Astron. Astrophs. Rev.* 3: 1-46.
- Zheng NW, Wang T, Yang RY, Wu YG (2000). Theoretical calculation of transition probability for N atom and ions. *J. Chem. Phys.* 112: 7042-7056.

Zheng NW, Wang T, Zhou T, Ma DX (2002). Theoretical study of transition probability for oxygen atom and ions. *J. Phys. Soc. of Japan* 71: 1672-1675.

Zheng NW, Wang T, Ma DX, Zhou T, Fan J (2004). Weakest bound electron potential model theory. *Int. J. Quant. Chem.* 98: 281-290.