

Azot Atomunda Geçiş Olasılıklarının Hesaplanması*

Gültekin ÇELİK¹, Erhan AKIN¹, Hamdi Şükür KILIÇ¹

Özet: Bu çalışmada azot atomunun bazı seviyeleri arasındaki geçişler için geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi kullanılarak hesaplandı. Bu teoriden elde edilen parametreler kullanılarak matris elemanı hesaplandı ve geçiş olasılıkları belirlendi. Bu çalışmada elde edilen sonuçlar literatürden elde edilen teorik ve deneysel çalışmalarla karşılaştırıldı.

Anahtar Kelimeler: Azot atomu, geçiş olasılıkları, en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi

The Calculation of Transition Probabilities in Nitrogen Atom

Abstract : In this study, transition probabilities for transitions between some levels in nitrogen atom have been calculated employing the weakest bound electron potential model (WBEPM) theory. Using parameters obtained from this theory, matrix elements have evaluated and the transition probabilities have been determined. Accuracy of present results has been tested by comparison with the results obtained at theoretical and experimental studies presently available in the literature.

Key Words: Nitrogen Atom, transition probabilities, the weakest bound electron potential model theory

Giriş

Atomların temel veya uyarılmış seviyedeki enerji seviyesinin enerji değeri bilinirse atomların kimyasal ve fiziksel açıdan bir çok özelliği belirlenebilir. Astrofizik, plazma fiziği, termonükleer fisyon araştırmaları, laserlerle izotop ayırma ve laser sistemlerinin geliştirilmesi gibi bir çok alanda atomların uyarılmış seviyedeki kalma sürelerinin ve geçiş olasılıklarının belirlenmesi oldukça önemlidir. Ayrıca bu özelliklerin belirlenmesi uygun teorik prosedürün geçerliliğini gösteren oldukça duyarlı hesaplamalardır. Azot atmosferde en çok bulunan elementlerden bir tanesidir. Osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam sürelerinin doğru verileri yıldızların spektrumunda, yıldızlar arası soğurma özelliklerini araştırma çalışmalarında, yıldızlar arasındaki azot miktarının belirlenmesinde ve bir çok fiziksel plazma yorumlamalarında geniş bir şekilde kullanılmaktadır. Sıcak yıldızlarda azot miktarının belirlenmesi atomik geçiş olasılıklarına bağlıdır [1]. Bunun için nötral azot'un optiksel özelliklerinin belirlenmesi hem atmosferik hem de astrofiziksel uygulamalar için çok önemlidir. Son yıllarda bir çok teorik ve deneysel yöntem kullanılarak azot atomunun osilatör şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yaşam süreleri çalışılmaktadır [2-6]. Bu parametrelerin deneysel yöntemler kullanılarak elde edilmesinde bir çok zorluk söz konusudur. Ayrıca deneysel çalışmalar genellikle düşük uyarılmış seviyelerle ve multiplerler arasındaki geçişlerle sınırlı kalmaktadır. Bununla birlikte, literatürdeki farklı deneysel yöntemlerin aynı geçişler için oldukça farklı sonuçlar verebildiği literatürden görülmektedir. Aynı zamanda teorik olarak nötral azotun

* Bu makale doktora tezinin bir bölümüdür.

¹ Selçuk Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümü Kampus KONYA, E-mail: gcelik@selcuk.edu.tr

atomik geçiş olasılıkları bir çok atomik yapı yöntemiyle hesaplanabilmekte ve geniş bir araştırma grubu tarafından çalışılmaktadır [7-12].

Bu çalışmada azot atomunun bazı düşük uyarılmış seviyelerine ait geçiş olasılıkları Zheng tarafından verilen en zayıf bağlı elektron potansiyel model teori (WBEPM) ile hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar literatürdeki çalışmalarla karşılaştırılarak uyum sağlandığı görülmüştür.

Materyal ve Metot

En zayıf bağlı elektron kabulü serbest bir parçacığın iyonlaşma potansiyelinin tanımlanmasıyla başlamaktadır [13]. Atomlar ya da moleküller gibi serbest parçacıklar için iyonlaşma potansiyeli atomun ya da molekülün temel seviyesinde bulunan en zayıf bağlı elektronun sistemden tamamen koparılması için dışarıdan verilmesi gerekli olan minimum enerji olarak tanımlanmaktadır. Bu durum teori olarak ilk defa Zheng tarafından ortaya atıldı [14, 15]. Atomik ya da moleküler yapıların uyarılma ve iyonlaşma enerjileriyle ilgili hesaplamalar bu yapılara ait bir çok fiziksel özellik hakkında doğru bilgiler vermektedir. Hem uyarılma hem de iyonlaşma sürecinde sistemde en aktif elektron, sisteme en zayıf bağlı olan elektrondur ve bu süreç içerisinde önemli bir rol oynamaktadır. Sisteme en zayıf bağlı elektronu koparmak ve iyonlaştırmak en kolaydır. Bu nedenle Zheng kendi teorisinde, çok elektronlu bir atomda bulunan elektronları sisteme en zayıf bağlı elektron ve sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronlar olmak üzere iki kısma ayırıp seçilen sistemde en zayıf bağlı elektronun durumunu tek elektron problemine benzetmektedir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisinde verilen bir sistemdeki en zayıf bağlı elektronun, çekirdek ve sisteme en zayıf bağlı olmayan diğer elektronlar tarafından oluşturulan bir potansiyel alanda hareket ettiği kabul edilir. Bu potansiyel alan iki kısma ayrılabilir. İlk potansiyel alan Coulomb potansiyelidir. Sisteme en zayıf bağlı elektron dışındaki diğer elektronların perdelemesi en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisinden dolayı tam değildir. Bunun için bu yöntemde potansiyel fonksiyonun Coulomb teriminde bir etkin çekirdek yükü, Z^* kullanılır. Potansiyel alanın ikinci kısmı elektrik-dipol potansiyelidir. En zayıf bağlı elektron atomik çekirdeği kutupladığından dolayı bir elektrik-dipol moment oluşur. Oluşan bu elektrik-dipol moment en zayıf bağlı elektronun davranışını etkiler ve elektrik-dipol moment tarafından oluşturulan potansiyel fonksiyonu,

$$-\frac{\beta}{r_i^2} \quad (1)$$

şeklinde tanımlanabilir. Bu durumda sistem için toplam potansiyel fonksiyonu,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} - \frac{\beta}{r_i^2} \quad (2)$$

şeklinde olacaktır. Bu toplam potansiyel en zayıf bağlı elektronun Schrodinger denkleminde kullanılarak,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r_i) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (3)$$

ve bazı dönüşümler yapılmak suretiyle radyal denklem çözülerek β parametresi,

$$\beta = \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2} \quad (4)$$

olarak türetilir. Bu durumda potansiyel,

$$V(r_i) = -\frac{Z^*}{r_i} + \frac{[d(d+1) + 2dl]}{2r_i^2} \quad (5)$$

olarak verilir. Bu potansiyel Denk.(3) de kullanılarak Schrodinger denklemi,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{-Z^*}{r_i} + \frac{d(d+1) + 2dl}{2r_i^2} \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (6)$$

olarak yazılabilir. Burada ilk terim en zayıf bağlı elektronun kinetik enerjisini, ikinci terim Coulomb potansiyelini gösterir. Üçüncü terim ise kutuplanma etkisinden kaynaklanan dipol potansiyelini göstermektedir. İfadedeki r_i , en zayıf bağlı elektron ile çekirdek arasındaki uzaklık; l , orbital açısal momentum kuantum sayısı; Z^* ve d bilinmeyen parametrelerdir. Buradaki d , tamsayı olmayan n^* ve l^* kuantum sayılarıyla tam sayı olan n ve l kuantum sayılarından yararlanılarak belirlenecektir. En zayıf bağlı elektronun dalga fonksiyonu genel olarak,

$$\psi_i(r_i, \theta_i, \phi_i) = R_{n^*, l^*}(r_i) Y_{l, m}(\theta_i, \phi_i) \quad (7)$$

şeklinde yazılır. Radyal denklemin çözümü sürecinde Denk.(3)' deki ilk operatörden gelen $\frac{l(l+1)}{2r^2}$ merkezci potansiyelinin yerine $\frac{l^*(l^*+1)}{2r^2}$ ifadesi yazılmaktadır. d ye bağlı terim Denk.(5) deki ikinci terimle gösterilmektedir. Hidrojen atomu problemine küçük bir değişiklik yaparak en zayıf bağlı elektron için tek elektron Schrodinger denkleminin çözümü,

$$\psi = C \exp\left(-\frac{Z^* r}{n^*}\right) r^{l^*} L_{n^*-l^*-1}^{2l^*+1}\left(\frac{2Z^* r}{n^*}\right) Y_{l, m}(\theta, \phi) \quad (8)$$

şeklinde verilir. Burada C normalizasyon katsayısı olup,

$$C = \left(\frac{2Z^*}{n^*}\right)^{l^*+3/2} \left[\frac{2n^*}{(n^*-l^*-1)!} \Gamma(n^*-l^*+1) \right]^{-1/2} \quad (9)$$

olarak verilir ve ifadedeki n^* , l^* ve ε ,

$$l^* = l + d \quad (10)$$

$$n^* = n + d \quad (11)$$

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (12)$$

şeklinde tanımlanmaktadır [14,15]. Denk.(12) ile tanımlanan ε , en zayıf bağlı elektronun enerjisi olup buradaki Z^* , sisteme en zayıf bağlı olmayan elektronların perdeleme etkisi ile en zayıf bağlı elektronun nüfuz etkisini hesaba katan etkin çekirdek yüküdür. n^* ise en zayıf bağlı elektronun kutuplanma etkisini hesaba katan etkin baş kuantum sayısını göstermektedir.

En zayıf bağlı elektronun ε enerjisinin negatifi, bu elektronun iyonlaşma enerjisine eşittir.

Yani

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad (13)$$

şeklinde tanımlanır.

Herhangi bir i uyarılmış seviyesi ile herhangi bir f uyarılmış seviyesi arasındaki geçiş olasılığı,

$$A_{fi} = \frac{4}{3} \alpha^3 \Delta E^3 \left| \langle n_i l_i | r | n_f l_f \rangle \right|^2 (2L_f + 1)(2l_i + 1)(2J_i + 1) l_{>} x \quad (14)$$

$$W^2(l_i L_i l_f L_f; L_c 1) W^2(L_i J_i L_f J_f; S1)$$

şeklinde verilir [12]. Burada $l_{>}$ geçişin olduğu iki seviyenin yörünge kuantum sayılarından büyük olanını; α , ince yapı sabitini; L_c , atomik çekirdeğin toplam yörünge açısal momentumunu; $W(abcd;ef)$, Racah katsayısını ve $\langle n_i l_i | r | n_f l_f \rangle$ geçiş matris elemanını göstermektedir. $\langle n_i, l_i | r | n_f, l_f \rangle$ matris elemanını hesaplamak için Z^* , n^* ve l^* parametrelerini belirlemek yeterlidir [16,17]. Bu parametreleri elde etmek için en zayıf bağlı elektronun enerji denklemi ve radyal beklenen değer ifadesini deneysel verilere göre belirleyen,

$$I = -\varepsilon = \frac{Z^{*2}}{2n^{*2}} \quad \langle r \rangle = \frac{3n^{*2} - l^*(l^* + 1)}{2Z^*} \quad (15)$$

denklem çifti kullanılmaktadır. Burada I iyonlaşma enerjisidir. $\langle r \rangle$, en zayıf bağlı elektronun beklenen değeridir ve değeri Sayısal Coulomb yaklaşımı (NCA), Roothann-Hartree-Fock yöntemi (RHF), Multikonfigürasyonel Hartree-Fock yöntemi (MCHF), Hartree-Slater yöntemi (HS), Hartree-Kohn-Sham yöntemi (HKS) ve Zamana bağlı Hartree-Fock (TDHF) yöntemi gibi bir çok teorik yöntemle belirlenebilir [18-23].

Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada azot atomunda bazı ince yapı seviyeleri arasındaki geçiş olasılıkları en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi kullanılarak hesaplanmıştır. Radyal geçiş integralinin çözümünde kullanılan Z^* , n^* ve l^* parametrelerini belirlemek için en zayıf bağlı elektronun enerji değerleri literatürdeki deneysel enerji seviye verilerinden kullanılabilir. Bu çalışmada Ralchenko ve ark.'nın enerji değerleri kullanılmıştır [24]. Beklenen değerler bir çok teorik yöntem kullanılarak hesaplanabilir. Beklenen değerlerin hesaplanmasında sayısal Coulomb yaklaşımı hesap süreci basit olan bir yaklaşımdır ve sonuçları diğer yöntemlerle elde edilen değerlerle uyum içersindedir [18]. Fakat bu yaklaşımda temel seviyeler için hesaplanan beklenen değerler gerçek değerlerden çok fazla sapma göstermektedir. Bu yüzden bu çalışmadaki beklenen değer hesaplamalarında temel seviyeler için Multikonfigürasyonel Hartree-Fock yöntemi [25], uyarılmış seviyeler için Sayısal Coulomb yaklaşımı [18] kullanılmıştır. Bu verilerle elde edilen parametreler Çizelge 1' de verilmiştir. Elde edilen bu parametrelerle radyal geçiş integrali belirlenip daha sonra azot atomuna ait bazı geçiş olasılıkları hesaplanmıştır. Hesaplama sonuçları ile diğer teorik ve deneysel yöntemlerle elde edilen sonuçların karşılaştırılması Çizelge 2 de verilmiştir. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisi ile hesaplanan geçiş olasılıklarının literatürdeki değerlerle uyum içersinde olduğu Çizelge 2'den görülmektedir.

Teorik olarak bakıldığında Nötral azot atomunun elektronik konfigürasyonunda $1s^2$ çekirdek elektronlarının dışında beş tane valans elektronu vardır ve bu elektronlar arasındaki etkileşmeler önemlidir. Bir çok teorik yöntemle bu etkileşmeleri çalışmak hesaplamalarda çok fazla karmaşıklığa neden olduğu için zordur. Özellikle yüksek uyarılmış seviyelerde çok sayıda konfigürasyonun gözönüne alınması gerektiğinden hesaplamalar oldukça zorlaşmaktadır. En zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisinde basit bir hesaplama süreci içersinde elde edilen sonuçlar çok karmaşık yöntemlerle elde edilen sonuçlar kadar doğru sonuçlar verebilmektedir. Ayrıca bu yöntemle yüksek uyarılmış seviyeleri çalışmak karmaşık yöntemler kadar zor değildir. İnce yapı seviyeleri arasındaki geçiş olasılıkları fiziğin bir çok alanında kullanılmaktadır. Bu yüzden en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisiyle çalışmanın anlamlı olduğu kanaatiyle bu çalışma yapılmıştır.

Çizelge 1. Azot Atomunun Geçiş Olasılıklarının Hesaplanmasında Kullanılan Parametreler

Enerji Seviyesi	n	l	d	Z	$\langle r \rangle$	Enerji Değeri (cm^{-1})
$2p^4 S_{3/2}$	2	1	-1.043066	0.989045	1.409631	117225.7
$2p^2 D_{3/2}$	2	1	-1.132983	0.819307	1.44662	97992.52
$2p^2 (^3P)3s^4 P_{1/2}$	3	0	-1.166581	1.019649	4.849677	33941.63
$2p^2 (^3P)3s^4 P_{3/2}$	3	0	-1.165871	1.019536	4.854506	33907.87
$2p^2 (^3P)3s^4 P_{5/2}$	3	0	-1.164886	1.019380	4.861214	33861.08
$2p^2 (^3P)3s^2 P_{1/2}$	3	0	-1.101565	1.010456	5.294779	31088.35
$2p^2 (^3P)3s^2 P_{3/2}$	3	0	-1.099502	1.010199	5.308981	31005.19
$2p^2 (^3P)4s^4 P_{1/2}$	4	0	-1.140992	1.006603	12.100541	13603.19
$3p^2 P_{3/2}$	3	1	-0.882675	0.890704	7.476166	19419.86
$3p^4 D_{1/2}$	3	1	-1.107858	0.855916	6.330540	22454.82
$3p^4 P_{3/2}$	3	1	-1.059100	0.863725	6.574355	21732.01

Çizelge2. Azot atomundaki bazı seviyeler için hesaplanan geçiş olasılıkları ($\times 10^8 sn^{-1}$)

Geçiş	Enerji Farkı (cm^{-1})	Bu Çalışma	Ref. 10-a	Ref. 6	Ref. 11	Ref. 26	Ref. 12
$2p^2 (^3P)3s^4 P_{1/2} \rightarrow 3p^4 D_{1/2}$	11486.81	0.227	0.2211	0.197	0.212	-	-
$2p^2 (^3P)3s^4 P_{1/2} \rightarrow 3p^4 P_{3/2}$	12209.62	0.1348	0.1274	0.122	0.132	-	-
$2p^2 (^3P)3s^4 P_{3/2} \rightarrow 3p^4 P_{3/2}$	12175.86	0.0429	0.0531	0.050	0.041	-	-
$2p^2 (^3P)3s^4 P_{5/2} \rightarrow 3p^4 P_{3/2}$	12129.07	0.1461	0.1341	0.134	0.139	-	-
$2p^3 ^2 D_{3/2} \rightarrow 2p^2 (^3P)3s^2 P_{1/2}$	66904.17	3.545	3.685	-	-	3.72	3.292
$2p^3 ^2 D_{3/2} \rightarrow 2p^2 (^3P)3s^2 P_{3/2}$	66987.33	0.350	0.348	-	-	0.351	0.325
$2p^3 ^4 S_{3/2} \rightarrow 2p^2 (^3P)3s^4 P_{1/2}$	83284.07	3.265	3.835	-	-	3.98	3.319
$2p^3 ^4 S_{3/2} \rightarrow 2p^2 (^3P)3s^4 P_{3/2}$	83317.83	3.255	3.856	-	-	3.99	3.308
$2p^3 ^4 S_{3/2} \rightarrow 2p^2 (^3P)4s^4 P_{1/2}$	103622.5	0.7817	0.735	-	-	-	0.819
$2p^2 (^3P)3s^2 P_{1/2} \rightarrow 3p^2 P_{3/2}$	11668.49	0.0534	0.0511	0.046	-	-	-
$2p^2 (^3P)3s^2 P_{3/2} \rightarrow 3p^2 P_{3/2}$	11585.33	0.2636	0.275	0.252	-	-	-
$2p^2 (^3P)3s^4 P_{1/2} \rightarrow 3p^4 D_{1/2}$	11486.81	0.227	0.2211	0.197	-	0.212	-
$2p^2 (^3P)3s^2 P_{1/2} \rightarrow 3p^2 P_{1/2}$	11632.83	0.198	0.216	0.212	-	-	-

Kaynaklar

- [1] Leckrone, D.S., Johansson, S., Kurucz, R.L. ve Adelman, S.J. *Proceedings of Meeting "Atomic Data and Oscillator Strengths for Astrophysics and Fusion Research"* Amsterdam (1990)
- [2] Copeland, R.A., Jeffries, J.B. Hickman, A.P. *J.Chem. Phys.* 86 4876 (1987)
- [3] Zhu, Q., Bridges, J.M., Hahn, T. ve Wiese, W.L. *Phys. Rev. A* 40 3721 (1989)
- [4] Bengtsson, G.J., Larsson, J., Svanberg, S. *Phys. Rev. A* 45 2712 (1992)
- [5] Goldbach, C., Martin, M., Nollez, G. *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* 161 47 (1986)
- [6] Musielok, J., Wiese, W.L., ve Veres, G. *Phys. Rev. A* 51 3588 (1995)
- [7] Robinson, D.J.R. ve Hibbert, A. *J. Phys. B.* 30 4813 (1997)
- [8] Tong, M., Fischer, C.F. ve Sturesson, L. *J. Phys. B.* 27 4819 (1994)
- [9] Bell, K.L. ve Berrington, K.A. *J.Phys. B.* 24 933 (1991)
- [10] Hibbert, A., Biemont, E., Godefroid, M. ve Vaeck, N. *Astron. Astrop. Suppl. Ser* 88 505 (1991)
- [11] Suskin, M.A. ve Weiss, A.W. *private communication to A. Hibbert* (1989)
- [12] Tayal, S.S. ve Beatty, C.A. *Phys. Rev. A* 59 3622 (1999)
- [13] Zheng, N.W. ve Vang, T. *Chemical Physics* 282 31-36 (2002)
- [14] Thewlis, J. *Encyclopedic Dictionary of Physics* Vol. 2 p. 60 Pergamon Press New York (1961)
- [15] Zheng, N.W. *Chinese Science Bulletin* 22 531 (1977)
- [16] Zheng, N.W. *Chinese Science Bulletin* 31 1316 (1986)
- [17] Wen, G.W., Liya, W., Ruidan, W. *Chinese Science Bulletin* 16 1231 (1989)
- [18] Wen, G.W., Liya, W., Ruidan, W. *Chinese Science Bulletin* 36 547 (1990)
- [19] Lindgard, A. ve Nielsen, S.E. *At. Data Nucl. Data Tables* 19 533 (1977)
- [20] Kundu, B. ve Mukherjee, P.K. *Theor. Chim. Acta* 66 173 (1984)
- [21] Theodosiou, C.E. *Phys. Rev. A* 30 2881 (1984)
- [22] Viswanath, M.B. ve Sen, K.D. *Theor. Chim. Acta* 76 373 (1989)
- [23] King, F.W. *Phys. Rev. A* 44 3350 (1991)
- [24] Desclaux, J.P. *Comput. Phys. Commun.* 1 216 (1969)
- [25] Ralchenko, Yu., Jou, F.-C., Kelleher, D.E., Kramida, A.E., Musgrove, A., Reader, J., Wiese, W.L., and Olsen, K. *NIST Atomic Spectra Database (version 3.0.1)*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2005)
- [26] Gaigalas, G. ve Fischer, C.F. *Computer Physics Commun.* 98 255-264 (1996)
- [27] Fuhr, J.R., Wiese, W.L. *NIST Atomic Transition Probability Tables* CRC Hand Book of Chemistry and Physics CRC Press Boca Raton FL 10-88 (1999)