

İN II İÇİN UYARILMIŞ BAZI SEVİYELERİN KONFIGÜRASYON ETKİLEŞMESİ MODELİNE GÖRE ENERJİ HESABI

Gönül BOYA, Leyla ÖZDEMİR

Özet - Bu çalışmada, bazı uyarılmış seviyeler için MCHF atomik yapı paketini kullanarak tekli iyonlaşmış İndiyumdaki enerji hesapları, çok konfigürasyonlu Hartree-Fock ve relativistik düzeltmeler için Breit-Pauli yaklaşıklığı çerçevesinde elde edilmektedir. Benzer hesaplamalar ve deneyle karşılaştırmalar da verilmektedir.

Anahtar Kelimeler - MCHF metodu, relativistik olmayan enerji, Breit-Pauli Hamiltonyeni, relativistik enerji

Abstract - In this work, for some excited levels, the energy calculations in singly ionized Indium have been obtained within the framework MCHF method and Breit-Pauli approximation for relativistic corrections using MCHF atomic structure package. Comparisons with similar calculations and experiment are also presented.

Keywords - MCHF method, non-relativistic energy, Breit-Pauli Hamiltonian, relativistic energy.

I. GİRİŞ

In ¹¹³ ve In ¹¹⁵ izotoplarının yıldızlarda üretilme süreçleri incelenmiştir ve bununla ilgili bazı astrofiziksel çalışmalar yapılmıştır [1,2,3]. Ayrıca İndiyum iyonuna ait çeşitli enerji seviyeleri hesaplanmıştır ve derlenmiştir [4,5,6].

In II'deki yüksek uyarılmış haller ($n \leq 8$) için, yeni çalışmalar konfigürasyon etkileşmesi ve relativistik Hartree-Fock yaklaşıklığı [7] ve çok konfigürasyonlu Dirac-Hartree-Fock (MCDHF-multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock) metoduna göre yapılmıştır [8]. Ayrıca çok konfigürasyonlu Hartree-Fock(MCHF-multiconfiguration Hartree-Fock) ve Breit-Pauli yaklaşıklığı ile In II deki geçiş olasılıkları incelenmiştir [9].

Bu çalışmada In II'deki birkaç $n \leq 8$ uyarılmış halleri için MCHF yaklaşıklığına göre Breit-Pauli Hamiltonyeni kullanılarak [10] seviyelerin enerjileri hesaplanmıştır. Korelasyon etkilerini dikkate almak için, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10}$ özü dışında öz-valans korelasyonuna göre çift parite için $5s^2, 5s6s, 5s7s, 5s8s, 5s5d, 5p^2, 5d^2, 5p5f, 5f^2, 5p4f, 4f^2$, tek parite için $5s5p, 5s6p, 5s7p, 5s8p, 5p5d$ konfigürasyonları alınmıştır. Böylece relativistik etkilerle beraber LSJ çiftlenim modeline göre elde edilen sonuçlar diğer deney ve teorik sonuçlarla karşılaştırıldı.

II. ÇOK KONFIGÜRASYONLU H-F (MCHF-multiconfiguration Hartree-Fock) YAKLAŞIKLIĞI

Çok konfigürasyonlu H-F (MCHF) metodunda, dalga fonksiyonu relativistik olmayan hamiltonyene göre ortonormal konfigürasyon hal fonksiyonlarının bir lineer kombinasyonuna aşağıdaki şekilde genişletilebilir:

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i LS) \quad , \quad \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1 \quad (1)$$

şeklindedir. Burada $\Phi(\gamma_i LS)$, LS çiftleniminde konfigürasyon hal fonksiyonunu (CSF-configuration state function) gösterir. Böylece çok-elektronlu bir atomun enerji ifadesi MCHF metodunda

$$\begin{aligned} \epsilon(\gamma LS) &= \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \\ &= \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j H_{ij} = \sum_{i=1}^M c_i^2 H_{ii} + 2 \sum_{i>j}^M c_i c_j H_{ij} \end{aligned} \quad (2)$$

olur. Burada,

$$H_{ij} = \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \quad (3)$$

dir. $H_{ij} = H_{ji}$ olduğundan, i ve j üzerinden toplam köşegenlere ve etkileşme matrisi olarak adlandırılan

$H = (H_{ij})$ matrisin alt kısmına sınırlandırılabilir.

$c = (c_1, c_2, \dots, c_M)^t$, karışım katsayıları olarak da adlandırılan açılım katsayılarının bir sütun vektörü olmak üzere sistemin enerjisi,

$$E = c^t H c \quad (4)$$

olur.

MCHF denklemlerinin türetilmesinde, enerji daha da indirgenmiş olur ve radyal fonksiyonlar c cinsinden ifade edilir. Hamiltonyenin matris elemanlarının oluşumu açısal momentumlar teorisinden ortaya çıkar:

$$H_{ij} = \sum_{ab} \omega_{ab}^{ij} I(a, b) + \sum_{abcd; k} v_{abcd; k}^{ij} R^k(ab, cd) \quad (5)$$

Burada, ab ve $abcd$ üzerinden toplam, her bir konfigürasyon halinde bulunan dolu orbitaller üzerindedir. Enerji ifadesi (2)'de yerine yazıldığında ve toplamların sırası değiştirildiğinde

$$\varepsilon(\gamma LS) = \sum_{ab} \omega_{ab} I(a, b) + \sum_{abcd; k} v_{abcd; k} R^k(ab; cd) \quad (6)$$

elde edilir.

Bu yazılımda enerji, integrallerin bir listesi şeklinde ve karışım katsayılarına bağlı olarak ifade edilir.

İntegraller üzerinden toplamı minimumlaştırmak için, $I(a, b)$ ve $R^k(ab, cd)$ integrallerinin simetri özellikleri avantajını kullanmak faydalıdır. MCHF metodu, $I(a, b)$ integralleri için $a \leq b$ kabul eder. Benzer şekilde, $R^k(ab, cd)$ için, $a \leq b$, $a \leq c$ ve $b \leq d$ kabul eder.

MCHF probleminin bir çözümü determinant denklemin ve varyasyonel radyal denklemin aynı anda bir çözümünü gerektirir. Varyasyonel radyal denklemlerin verildiği kabul edildiğinde, yalnızca seküler denklemin (4) çözülmesi gerekir ve problem bir konfigürasyon etkileşme (CI) problemi olarak adlandırılır. Her radyal fonksiyon optimize edilirse, hesap çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) hesabı olarak adlandırılır. Bunun çözümü için iteratif işlem kısaca şöyle tasarlanır:

- i) Başlangıç radyal fonksiyonlarını belirleme
- ii) İstenen öz uyum için seküler denklemin çözümü
- iii) Uygunluk sağlanana kadar,
 - a) Radyal fonksiyonları iyileştirme
 - b) İstenen öz çözüm için seküler denklemin çözümü.

III. RELATİVİSTİK ETKİLER

Ağır atomlar veya yüksekçe iyonlaşmış sistemlere doğru gidildiğinde relativistik etkilerin önemi artar. Genel bir hesaplama metodu için, hesaba relativistik etkileri de katmak bu nedenle önemlidir.

III.1 Breit-Pauli Hamiltonyeni

Breit-Pauli Hamiltonyeni

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \quad (7)$$

şeklinde yazılabilir. Burada H_{NR} relativistik olmayan (non-relativistic) çok-elektron Hamiltonyenidir. H_{RS} , relativistik kayma (relativistik shift) operatörüdür ve L ve S ile sıra değiştirir. Bu operatör

$$H_{RS} = H_{MC} + H_{D1} + H_{D2} + H_{OO} + H_{SSC} \quad (8)$$

şeklinde katkıları içerir. Burada H_{MC} kütle düzeltmesi (mass correction) terimi,

$$H_{MC} = -\frac{\alpha^2}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2)^+ \nabla_i^2, \quad (9)$$

H_{D1} ve H_{D2} bir ve iki-cisim Darwin terimleri,

$$H_{D1} = -\frac{\alpha^2 Z}{8} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \left(\frac{1}{r_i} \right), \quad (10)$$

$$H_{D2} = \frac{\alpha^2}{4} \sum_{i < j}^N \nabla_i^2 \left(\frac{1}{r_{ij}} \right), \quad (11)$$

H_{SSC} spin-spin etkileşme (spin-spin contact) terimi,

$$H_{SSC} = -\frac{8\pi\alpha^2}{3} \sum_{i < j}^N (s_i \cdot s_j) \delta(r_i \cdot r_j), \quad (12)$$

ve son olarak H_{OO} yörünge-yörünge (orbit-orbit) terimi,

$$H_{OO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i < j}^N \left[\frac{p_i \cdot p_j}{r_{ij}} + \frac{r_{ij} (r_{ij} \cdot p_i) p_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (13)$$

dir. İnce yapı (fine-structure) operatörü H_{FS} , elektronların spin ve yörünge açısal momentumları arasındaki etkileşimleri tanımlar; L ve S ile sıra değiştirmez yalnızca $J = L + S$ toplam açısal momentumla sıra değiştirir. Bu operatör

$$H_{FS} = H_{SO} + H_{SOO} + H_{SS} \quad (14)$$

şeklinde üç terim içerir. Burada H_{SO} çekirdek spin-yörünge (spin-orbit) terimi

$$H_{SO} = \frac{\alpha^2 Z}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i^3} \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i, \quad (15)$$

H_{SOO} spin-diğer yörünge (spin other orbit) terimi

$$H_{SOO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i < j}^N \frac{\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_i}{r_{ij}^3} (\mathbf{s}_i + 2\mathbf{s}_j) \quad (16)$$

ve H_{SS} spin-spin terimi

$$H_{SS} = \alpha^2 \sum_{i < j}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3 \frac{(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \quad (17)$$

şeklindedir.

III.2 Breit-Pauli Dalga Fonksiyonları

Breit-Pauli Hamiltonyeni toplam açısal momentum operatörü J ile yer değiştirir ve karşılık gelen dalga fonksiyonları J^2 ve J_z 'nin öz fonksiyonlarıdır. Böylece Breit-Pauli dalga fonksiyonları

$$\Psi(\gamma JM_J) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i L_i S_i JM_J) \quad (18)$$

şeklinde fonksiyonların lineer kombinasyonları olarak elde edilir. Burada $\Phi(\gamma LSJM_J)$ 'ler LSJ çiftlenimli CSF'lerdir. Yani,

$$\begin{aligned} & \Phi(\gamma LSJM_J) \\ &= \sum_{M_L, M_S} \langle LM_L SM_S | LSJM_J \rangle \Phi(\gamma LM_L SM_S) \end{aligned} \quad (19)$$

dir. L ve S farklı LS 'li CSF'lerin iyi kuantum sayıları olmadıklarından, bu farklı LS terimlerinin bir karışımı alınır ve dalga fonksiyonu ara çiftlenim (LJS) denilen çiftlenim modelinde verilir.

Artık CSF'ler relativistik olmayan MCHF metodundan elde edilir. Yalnızca Breit-Pauli yaklaşıklığı çerçevesinde, açılım katsayıları elde edilir. Böylece matrisin öz değer problemi

$$Hc = Ec \quad (20)$$

olur. Burada H

$$H_{ij} = \langle \gamma_i L_i S_i JM_J | H_{BP} | \gamma_j L_j S_j JM_J \rangle \quad (21)$$

şeklinde Hamiltonyen matris elemanıdır. Breit-Pauli Hamiltonyeni, relativistik olmayan Hamiltonyene α^2 mertebesinde düzeltmedir.

IV. SONUÇLAR

Bu çalışmada MCHF atomik yapı paketindeki bazı programlar [11] kullanılarak In II'nin relativistik olmayan ve relativistik enerjileri hesaplanarak bu yaklaşıklığın diğer sonuçlarla ne kadar uyduğu incelenmiştir. In II'nin $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10}$ özü dışında kalan çift parite için $5s^2, 5s6s, 5s7s, 5s8s, 5p^2, 4f^2, 5p4f, 5d^2, 5s5d, 5f^2, 5p5f$ ve tek parite için $5s5p, 5s6p, 5s7p, 5s8p, 5p5d$ konfigürasyonları alınmıştır. $5s^2$ için bir HF çalışması sonucu elde edilen dalga fonksiyonu başlangıç dalga fonksiyonu olarak kabul edilmiştir. Daha sonra diğer konfigürasyonlar eklenerek LSJ çiftlenimleri elde edildikten sonra Slater integralleri hesaplanmıştır. Her bir konfigürasyon ve mümkün terimleri için relativistik olmayan enerji, dalga fonksiyonu ve karışım katsayıları elde edilir. Elde edilen relativistik olmayan enerji çift pariteli seviyeler için Tablo 1'de ve tek pariteli seviyeler için Tablo 2'deki üçüncü sütunda verilmektedir. Daha sonra relativistik katkılar (Breit-Pauli yaklaşıklığı ile) ve konfigürasyon etkileşim metodu kullanılarak relativistik enerji değerleri hesaplanır. Bu enerjiler Tablo 1 ve 2'nin beşinci sütununda yer almaktadır. Her iki tabloda hesaplanan enerji değerleri $5s^2$ enerji değeri referans alınarak cm^{-1} birimlerinde verilmektedir. Elde edilen sonuçları karşılaştırmak için, her iki tablonun altıncı ve yedinci sütunlarında sırasıyla deney ve diğer teorik sonuçlar verilmektedir [6,7]. Sonuçlar karşılaştırıldığında, MCHF ve MCHF+BP yaklaşıklığı ile elde edilen enerji değerleri bazı yüksek n değerleri hariç uyumlu olduğu gözlenmektedir. Fakat bir yaklaşıklık olarak elde edilen sonuçlar bu metotla enerji ve diğer atomik yapı hesaplarını incelemek mürakündür. Ayrıca konfigürasyon sayısını artırarak (bilgisayar kapasitesine bağlı olarak) daha uyumlu sonuçlar elde edilebilir.

Tablo 1. In II deki tekli pariteli hallere ait enerji değerlerinin (cm^{-1}) karşılaştırılması

Seviyeler	Terim	E(MCHF)	J	E(MCHF+BP)	$E_{\text{deney}}[6]$	$E_{\text{diag.hesap}}[7]$
5s ²	¹ S	0	0	0	0	1
5s6s	¹ S	121524.70	0	121590.63	97025	97025
	³ S	101792.89	1	101799.79	93919	93919
5s7s	¹ S	150189.00	0	150195.89	123368	123436
	³ S	150165.36	1	150172.25	121438	121473
5s8s	¹ S	132637.88	0	132651.97	133549	133549
	³ S	132490.66	1	132497.55	133068	133068
5p ²	¹ S	130573.66	0	131045.08	121285	121284
			1	104219.67	103244	103265
			2	108551.95	105560	105549
	¹ D	106333.06	2	104776.35	97624	97624
5d ²	³ F	317793.44	2	316738.72	-	-
			3	317571.69	-	-
			4	318584.88	-	-
	³ P	320691.78	0	320013.97	-	-
			1	320406.72	-	-
			2	320989.94	-	-
	¹ D	336672.47	2	336783.81	-	-
¹ S	339792.81	0	339901.69	-	-	
5s5d	¹ D	173011.22	2	173014.91	113880	113881
			1	157669.33	102084	102118
			2	158189.17	102170	102176
			3	159042.69	102303	102263
4f ²	³ F	488154.56	2	488151.84	-	-
			3	488159.38	-	-
			4	488168.50	-	-

Tablo 1'in devamı

4f ²	¹ D	497629.31	2	497636.22	-	-
	³ P	498806.72	0	498806.03	-	-
			1	498811.00	-	-
5p4f	¹ S	522481.12	2	498817.03	-	-
			0	522488.66	-	-
	³ F	291917.41	2	291082.31	-	-
			3	291372.91	-	-
4			292366.59	-	-	
¹ F	292574.97	3	292678.41	-	-	
		2	304579.66	-	-	
		1	305038.72	-	-	
5f ²	³ F	299856.59	2	299858.28	-	-
			3	299861.72	-	-
			4	299866.50	-	-
	¹ D	301227.72	2	301235.38	-	-
	³ P	301781.25	0	301781.28	-	-
			1	301785.09	-	-
2			301790.28	-	-	
5p5f	¹ S	305327.75	0	305333.41	-	-
5p5d	¹ F	186506.41	3	186959.62	-	-
	³ F	186731.20	2	185261.95	-	-
			3	184725.19	-	-
			4	187086.86	-	-
³ D	188545.30	1	189912.59	-	-	
		2	189453.80	-	-	
		3	189101.33	-	-	
¹ D	191285.33	2	191895.44	-	-	

KAYNAKLAR

Tablo 2. In II deki tekli pariteli hallere ait enerji değerlerinin (cm^{-1}) karşılaştırılması

Seviyeler	Terim	E (MCHF)	J	E (MCHF+BP)	$E_{\text{dancy [6]}$	$E_{\text{dig,hcsp.[7]}$
5s5p	3P	41041.82	0	39286.02	42275	42289
			1	40163.92	43349	43330
			2	41700.25	45827	45832
	1P	63208.8	1	63208.8	63034	63034
5s6p	3P	119174.92	0	118999.56	107658	107653
			1	119029.19	107837	107844
			2	119089.33	108426	108425
	1P	125539.70	1	125506.77	109775	109775
5s8p	3P	142461.22	0	142439.27	-	135826
			1	142285.64	135857	135854
			2	142439.27	135995	135991
	1P	142522.67	1	142658.75	136092	136103
5s7p	3P	185895.32	0	180847.41	126928	126926
			1	181944.77	126990	126992
			2	188748.52	127249	127249
	1P	191821.15	1	193576.95	127569	127569
5p5d	1D	163728.35	2	163728.35	-	-
	3P	173824.21	0	173385.25	-	-
			1	173385.25	-	-
			2	173604.72	-	-
	3D	175053.26	1	174702.11	-	-
			2	175141.05	-	-
			3	175580.00	-	-
1P	199053.82	1	199283.30	-	-	

- [1]. Jaschek C. and Jaschek M. The Behavior of Chemical Elements in Stars, Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995.
- [2]. Cowley CL., Hartoog MR. and Cowley AP. Element Identification in Five Ap. Stars, Astrophys J., p: 194-343, 1974.
- [3]. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Handbook/Tables/indium table 7,htm>
- [4]. Paschen F., Campbell JS. Basic Atomic Spectroscopic Data for Indium, Ann Phy (Leipzig), p: 31-29, 1938.
- [5]. Hibbert A., Transitions in cadmium sequence, Nucl Instrum Methods 202, p:323-327,1982.
- [6]. Moore CE., Atomic Energy Levels, Vol 3, Washington, DC: Circular 467, National Bureau of Standards, 1958.
- [7]. Biemont E. and Zeippen CJ., Lifetimes and Transition Probabilities, Atomic Data and Nuclear Data Tables 72, p: 101-125, 1999.
- [8]. Curtis LJ., Matulioniene R., Ellis DG, Fischer CF., Predictive Data-Based Exposition of 5s5p $^1,^3P$, Life Times in The Cd Isoelectronic Sequence, Phys Rev A, 62, p: 52513-52519,2000.
- [9]. Özdemir L., Boya G., Relativistic Energies and Transition Probabilities for Some Higly Excited Levels in Singly Ionized Indium, J Quant Spectros Radiat Transfer, sunuldu .
- [10]. Fischer CF., Brage, T. and Jönsson, Per., Computational Atomic Structure-An MCHF Approach, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1997.
- [11]. Fischer CF., The MCHF Atomic-Structure Package, Comp Phys Commun, 64 p: 369-398, 19