

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

ÇİZELGELER

- İki elektronlu atomların L değerleri ve terimleri.

<u>Elektronlar</u>	<u>L</u>	<u>Terimler</u>
ss	0	S
sp	1	P
pp	0, 1, 2	S, P, D
pd	1, 2, 3	P, D, F
dd	0, 1, 2, 3, 4	S, P, D, F, G
df	1, 2, 3, 4, 5	P, D, F, G, H
ff	0, 1, 2, 3, 4, 5, 6	S, P, D, F, G, H, I

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Eşdeğer elektronlardan ortaya çıkan terimler.

Elektronlar

Terimler

s^2

1S

p^2

$^1S, ^1D, ^3P$

p^3

$^2P, ^2D, ^4S$

d^2

$^1S, ^1D, ^1G, ^3P, ^3F$

f^2

$^1S, ^1D, ^1G, ^1I, ^3P, ^3F, ^3H$

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Eşdeğer olmayan elektronlardan ortaya çıkan terimler.

Elektronlar

Terimler

ss

$^1S, ^3P$

sp

$^1P, ^3P$

sd

$^1D, ^3D$

pp

$^1S, ^1P, ^1D, ^3S, ^3P, ^3D$

pd

$^1P, ^1D, ^1F, ^3P, ^3D, ^3F$

dd

$^1S, ^1P, ^1D, ^1F, ^1G, ^3S, ^3P, ^3D, ^3F, ^3G$

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Toplam S değeri ve çokluluk.

<u>Elektron Sayısı</u>	<u>S</u>	<u>Çokluluk</u>
1	1/2	ikili
2	0,1	tekli, üçlü
3	1/2, 3/2	ikili, dörtlüler
4	0,1,2	tekli, üçlü, beşli
5	1/2, 3/2, 5/2	ikili, dörtlü, altılı
6	0, 1, 2, 3	tekli, üçlü, beşli, yedili

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

Terim	J Değerleri					
	Tekli	İkili	Üçlü	Dörtlü	Beşli	Altılı
S	0	1/2	1	3/2	2	5/2
P	1	1/2, 3/2	0,1,2	1/2, 3/2, 5/2	1, 2, 3	3/2, 5/2, 7/2
D	2	3/2, 5/2	1,2,3	1/2, 3/2, 5/2, 7/2	0,1,2,3,4	1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2
F	3	5/2, 7/2	2,3,4			
G	4	7/2, 9/2	3,4,5			

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

➤ Atomik Terimlerin Soyu:

- Eğer bir optik tayfa 2'den fazla elektron katılıyorsa, terimlerin sayılarına dikkat edilmelidir. İyonize olmuş bir kükürt atomunu dikkate alalım. Temel konfigürasyon olan $3s^23p^3$ ün terimleri;
- $^4S(L=0, S=3/2)$, $^2D(L=2, S=1/2)$, $^2P(L=1, S=1/2)$ dir.
- Bir 4p elektronu daha ekliyelim ($l=1, s=1/2$) ve S I'in $3s^23p^34p$ sinin terimlerini hesaplayalım. Özgün terimlerin L ve S değerlerine, 4p elektronunun l ve s vektörlerini ekleyiniz. Sonuç olarak;

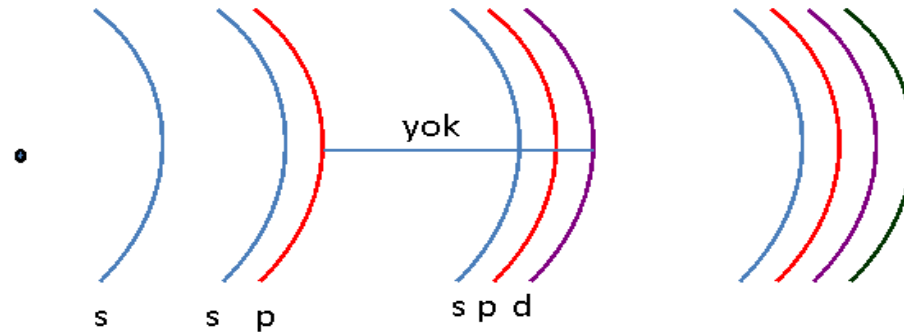
S II	3P	4S	2D	2P
	+p			
S I	$3p^34p$	$5p3p$	$^3P, ^3D, ^3F, ^1P, ^1D, ^1F$	$^3S, ^3P, ^3D, ^1S, ^1P, ^1D$

- Soylar, $(^4S)^5P$, $(^2D)^3F$...v.b olarak gösteririz. Farklı erkelere karşılık gelen ve farklı soylara dayanan 3 ayrı 3P teriminin, 2 farklı 3D teriminin ve bir de 1D teriminin varlığına dikkat ediniz.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- **8) Işınım İçin Seçim Kuralları:**
- Her ne kadar bütün tayf çizgileri belirli düzey arasındaki geçişleri gösteriyorsa da, düzeylerin bütün olası kombinasyonları, gözlenen çizgileri vermezler. Belirli seçim kuralları sağlamalıdır. Dipol ışınımı için bu kuralların en önemlileri “Laporte Parite Kuralı” ve J üzerindeki sınırlamalardır. Tüm geçiş olasılıkları tüm geçişlerin çizgilerini vermemektedir. Çizgi sayısı, terimler arasındaki geçiş olasılıklarından daha azdır.
- 1) **Laporte Parite Kuralı:** Parite, her zaman değişmelidir. Parite değişiminden çizgi (geçiş) olur. $\Delta L = \pm 1$ gibi farklı konfigürasyonlar arasında geçişler olur ($\Delta L = \pm 1$ kuralı). Buna göre $2p^3$ 'e giren düzeyler, $2p^3d$ ya da $2p^3s$ deki düzeylerle bir araya gelebilir (yani $2p^3$ düzeyinden $2p^3d$ ve $2p^3s$ düzeylerine geçiş sözkonusudur), fakat $2p^3f$ ya da $2p^3p$ deki düzeylerle bir araya gelemezler ($2p^3 \rightarrow 2p^3f, 2p^3p$ geçişleri yok), çünkü bunlarda $\Delta L = \pm 1$ kuralı sağlanmamaktadır. (Bkz Şekil 52)

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)



Şekil 52. Laporte parite kuralına göre yasak geçişe bir örnek

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- 2) J deki deęişim ± 1 ya da 0 olabilir, fakat $J=0$ 'dan $J=0$ 'a hiç bir zaman geçiş olamaz.
 - Tüm atomlar (elementler) için bu iki kural genel olarak vardır. Bundan sonraki kurallar ise LS kuplajı gösteren (hafif elementler için) atomlar içindir.
 - Sıkı, LS kuplajı koşulları altında ise;
- 3) L'deki deęişim $L\pm 1$ 'e deęişebilir ya da deęişmez.
- 4) S deęişmemelidir, deęişmez. Yani çoklular deęişmez.

Tekli-Tekli
İkili-İkili

} gecisleri vardır

Üçlüden tekliye gibi geçiş yoktur.

- 3 ve 4 seçim kuralları, oksijen gibi hafif atomların alçak düzeyleri için oldukça geçerlidir; fakat bunlar demir ve titanyum gibi ağır atomlarda geçerli değildir. Çünkü bunlarda L ve S artık "iyi" birer kuantum sayısı değildir. **1 ve 2 seçim kuralları çiğnendiğinde, ışınımın "yasaklanmış" olduğu söylenir.**

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

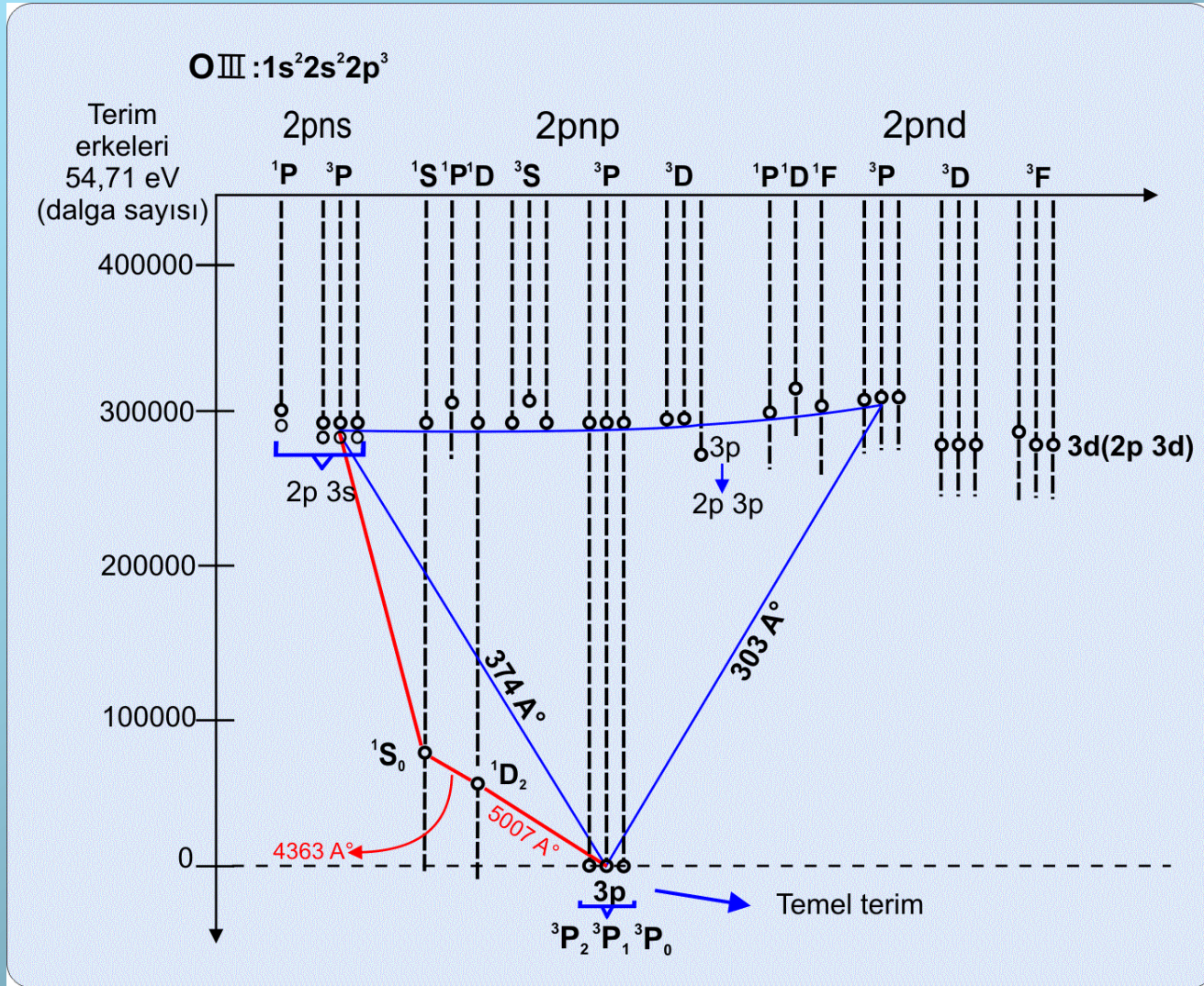
➤ 9) Tayf Çizgilerinin Belirlenmesi, terim Diyagramları:

- Enerji düzeylerinin saptanarak bir tayfın çözümlenmesi çoğu kez zordur. Bunun için değişik ipuçları kullanılır: **Alçak (düşük)** sıcaklıklarda yalnızca alçak düzeylere karşılık gelen çizgiler kuvvetli olduklarından sıcaklıkla tayfın görünümünün değişmesi yararlı olabilir ya da **Zeeman** şekilleri ilgilenilen terimlerin L, S ve J değerlerine bağlı olduğundan, tayf çizgilerinin bir manyetik alandaki yarılmaları (**Zeeman olayı**) belirlenecek terimin cinsini verebilir. Farklı S değerli terimler arasındaki geçişlerden çıkan “interkombinasyon” çizgileri de üçlü ve teklilerin yerini belirlemeye yardımcı olur.
- Her ne kadar bazı metal iyonlarının yüksek düzey çizgileri tayin edilmişse de, bütün önemli elementlerin nötr ve bir kez iyonlaşmış olanların tayfları çözümlenmiştir. S den daha ağır elementlerin bir kaç izinli çizgisi ve ikinci iyonizasyon durumundan daha yüksek iyonizasyon durumlarına ilişkin soğurma çizgileri yıldız tayflarında gözlenmiştir.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Enerji diyagramları çoğu kez yıldız ve bulutsulardaki uyarılma mekanizmalarını canlandırabilmemize yardım eder. Böylesi bir diyagram yapabilmek için terim tabloları kullanılır.
- **Oksijen (O III) İçin Terim Diyagramı:**
- O III : $1s^2 2s^2 2p^2$
- Şekil 53 : O III için böylesi bir diyagramın bir parçasını vermektedir. En üstteki yatay çizgi 54,71 eV luk iyonizasyon potansiyelini göstermektedir. $^1S, ^1D$ düzeyleri Metastable düzeylerdir.
- ($^1S, ^1D, ^3P$ $^1S \rightarrow ^1D, ^1D \rightarrow ^3P$).

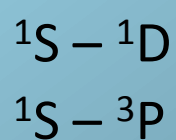
4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)



Şekil 53. O III için terim diyagramı

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- 3d'den 3p'ye ve 3s'den 3p'ye geçişler, O yıldızlarında (O tayf türünden yıldızlarda) gözlenen çizgileri temsil ederler. Bu yıldızlarda sıcaklık O IV çizgilerini uyaracak kadar yüksektir.
- 3P temel terimi herhangi bir yolla $2p3s$ veya $2p3d$ düzeyine uyarılırsa, temel düzeye düşme, önce 1S_0 düzeyine olur ve burada uzun süre kalır, ardından 1D_2 düzeyine ve sonunda 3P_1 temel düzeye gelir. Ancak bu geçişlerden oluşan çizgiler laboratuvar ortamında elde edilememektedir. Dolayısıyla bu geçişler yasaklanmıştır (laboratuvardaki basınç şartlarından dolayı geçiş olmaz). Ne var ki bu çizgiler, bulutsularda görülmektedir. Bulutsularda gaz çok seyrek, basınç az olduğundan düzeyde kalma uzun sürelidir (ömür uzun) 'bulutsularda yoğunluk az' dolayısıyla yasak geçişler bulutsularda mümkün olmaktadır.



Yasak geçişler (Laboratuvar ortamında mümkün olmuyor)

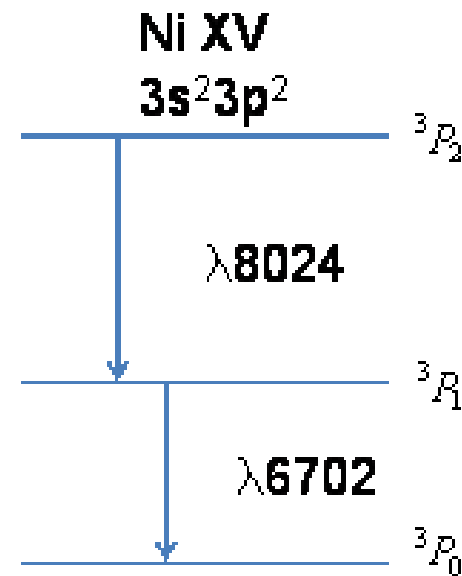
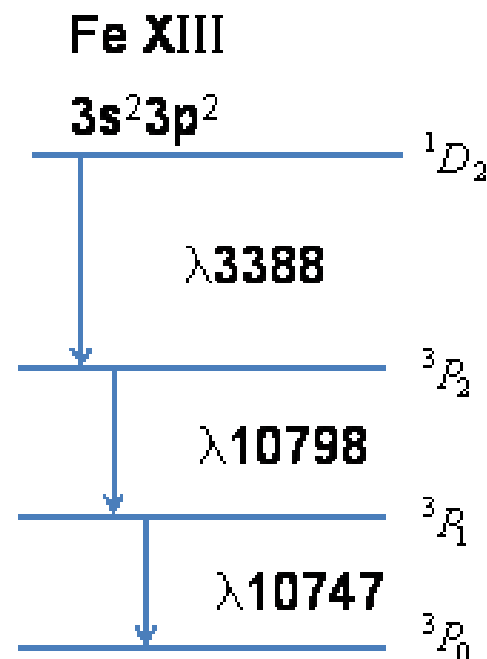
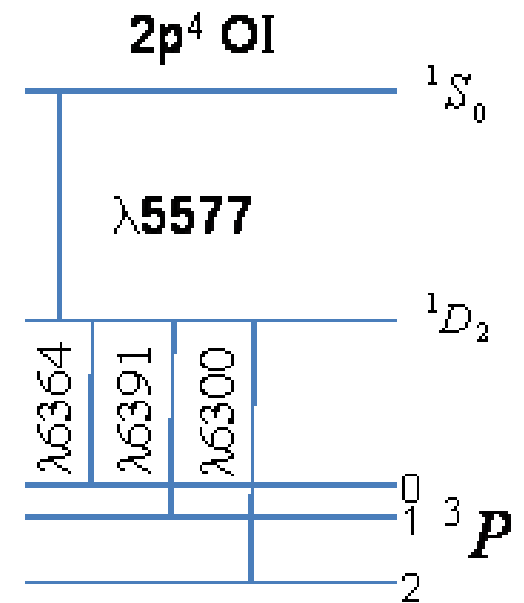
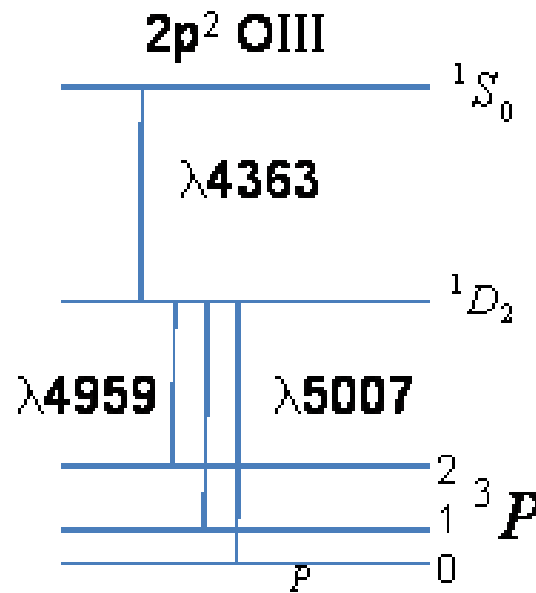
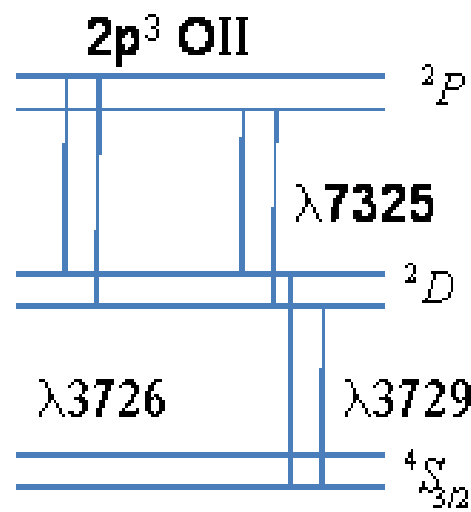
- $^1S - ^1D$ Yasak geçişi [5007 O III] ile gösterilir.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

➤ 10) Yasaklanmış Geçişler:

- $2p^2$ temel konfigürasyonu 3P , 1D ve 1S terimlerini kapsar ve $3p3s$ ya da $2p3p$ lik uyartılmış düzeylerin çok altında yer alır. 1S den 1D ye ya da 1D den 3P ye geçişlerde ($2p^2$ konfigürasyonunda) Laporte kuralı ihlal edilir ($l=\pm 1$) ve bunlara “yasaklanmış çizgiler” denir. OIII deki 1D ve 1S düzeyleri (2,48 ve 5,3 voltluk) kararsız düzeyler olarak adlandırılırlar. $2p3s$ 3P gibi olağan bir yüksek düzeyde bulunan bir atom, 10^{-8} sn gibi kısa bir sürede kademeli olarak aşağıya inecektir. Eğer bu atom alçak düzeyli kararsız düzeylerden birinde kendini bulursa, salma yaparak daha düşük bir düzeye geçmeden önce orada bir saniye kadar kalabilir.
- Şekil 54 : Yasaklanmış çizgiler için geçiş şeması.
- **Menzel**, Payne ve Boyce, yasaklanmış çizgiler için aşağıdaki gösterimleri önermişlerdir:
- p^2, p^4 için
 - $^1S - ^1D$ geçişi : Auroral Geçiş
 - $^1D - ^3P$ geçişi : Nebular Geçiş
 - $^1S - ^3P$ geçişi : Transauroral Geçiş

Yasaklanmış çizgiler için geçiş şeması



4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Bir p^2 ya da p^4 konfigürasyonunda 1S ve 1D arasındaki geçişler “auroral geçişler” olarak adlandırılırlar. Çünkü geceleri kutup ışımada görülen $\lambda 5577$ çizgisi bu türdür. Oksijenin uyartılması ve eski duruma geçişleri sonucu oluşan yeşilimtrak ışınımıdır. $^1S - ^1D$ geçişi kutuplarda, **belli açılarda yeryüzüne gelen evren ışınımıdır.**
- Gaz bulutsularındaki en kuvvetli çizgiler $^1D - ^3P$ geçişlerinden ortaya çıkar; bu nedenle bunlara “nebular geçişler” denir. Nebular geçişler özellikle bulutsulardaki yeşil rengi veren geçişlerdir.
- $^1S - ^3P$ geçişi gözlenmemiştir. En zayıf, olasılığı en düşük olan geçiştir. “Transauroral çizgi” $^1S - ^3P$ geçişini belirler ve genellikle zayıftır.
- $2p^3$ OII için;
 - $^2P - ^2D$ geçişi \rightarrow Auroral Geçiş
 - $^2D - ^4S$ geçişi \rightarrow Nebular Geçiş
 - $^2P - ^4S$ geçişi \rightarrow Transauroral Geçiş'tir.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Edlen tarafından Güneş'in renk küresinde belirlenen çizgiler, genellikle temel terimli düzeyler arasındaki geçişleri temsil ederler. [] işareti yasaklanmış çizgileri göstermek için kullanılır. Yasaklanmış çizgilerden çok az bir kısmı deneylerle elde edilebilir.
- Genellikle bunlar, tayfın çözümlenmesinden sonra tahmin edilebilirler. Eğer çözümlenme kararsız düzeylerin yerlerini belirleyebilecek kadar **tamam** değilse, bir eş-elektronik dizisindeki erke düzeylerinin ekstrapolasyonu kullanılabilir.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

❖ Tayf Çizgilerini Genişleten Etkiler:

1. Atomun ince yapısından dolayı genişleme
2. Zeeman olayından dolayı genişleme: H manyetik alandan dolayı tayf çizgisinin yeniden başka çizgilere ayrılmasıdır. Bu da çizginin genişlemesine etken olur.
3. Elektriksel alandan ileri gelen çizgi genişlemesi (**Paschen-Back olayı**) olmaktadır.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Burada x-ışınları tayfı ve ince yapı konularını incelemeyeceğiz.
- **Zeeman** ve **Paschen-Back** etkileri tayfların incelenmesinde önemlidir. Bir çizginin bileşenlerinin sayısı ve konumları, alt ve üst düzeylerin L, S ve J değerlerine bağlıdır. Bundan başka bu bileşenler belirgin **uçlaşma** ve yeğinlik bağıntısı gösterirler. Zeeman etkisinin astrofiziksel uygulamaları güneş lekelerinin tayflarının ve A-Pec yıldızlarının açıklamalarında yatmaktadır.
- Tayf çizgileri **manyetik alanlarla** olduğu gibi **elektriksel alanlarla** da genişlemeye, hatta yarılmaya uğrayabilirler. Yıldız atmosferlerinde büyük elektriksel alanlar yoktur, fakat yüklü parçacıkların hızla hareketi bir ışınım yapan atomun yanında kuvvetli mikroskopik elektriksel alanlar yaratabilir. Bu alanlarla hidrojen ve helyum çizgileri genişlerler.